

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020년 3월 26일 (26.03.2020)



(10) 국제공개번호
WO 2020/060286 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 409/14 (2006.01) C07D 513/04 (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 498/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/012236

(22) 국제출원일: 2019년 9월 20일 (20.09.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0114411 2018년 9월 21일 (21.09.2018) KR
10-2019-0115650 2019년 9월 19일 (19.09.2019) KR

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

(72) 발명자: 한수진 (HAN, Su Jin); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 장분재 (JANG, Boon Jae); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 홍완표 (HONG, Wanpyo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이정하 (LEE, Jung-ha); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 박슬찬 (PARK, Seulchan); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 황성현 (HWANG, Sunghyun); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

(74) 대리인: 유미특허법인 (YOU ME PATENT AND LAW FIRM); 06134 서울시 강남구 테헤란로 115, Seoul (KR).

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

SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))



WO 2020/060286 A1

(54) Title: NOVEL HETEROCYCLIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE USING SAME

(54) 발명의 명칭: 신규한 헤테로 고리 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자

【도 1】

4
3
2
1

(57) Abstract: The present invention provides a novel heterocyclic compound and an organic light emitting device using same.

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 헤테로 고리 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자를 제공한다.

【발명의 명칭】

신규한 헥테로 고리 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자

【기술분야】

5 **관련 출원들과의 상호 인용**

본 출원은 2018년 9월 21일자 한국 특허 출원 제10-2018-0114411호 및 2019년 9월 19일자 한국 특허 출원 제10-2019-0115650호에 기초한 우선권의 이익을 주장하며, 해당 한국 특허 출원의 문헌에 개시된 모든 내용은 본 명세서의 일부로서 포함된다.

10 본 발명은 신규한 헥테로 고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

【배경기술】

15 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 넓은 시야각, 우수한 콘트라스트, 빠른 응답 시간을 가지며, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 특성이 우수하여 많은 연구가 진행되고 있다.

20 유기 발광 소자는 일반적으로 양극과 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 유기물 층을 포함하는 구조를 가진다. 상기 유기물 층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두
25 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.

 상기와 같은 유기 발광 소자에 사용되는 유기물에 대하여 새로운 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

【선행기술문헌】

【특허문헌】

(특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2013-073537호

5 【발명의 상세한 설명】

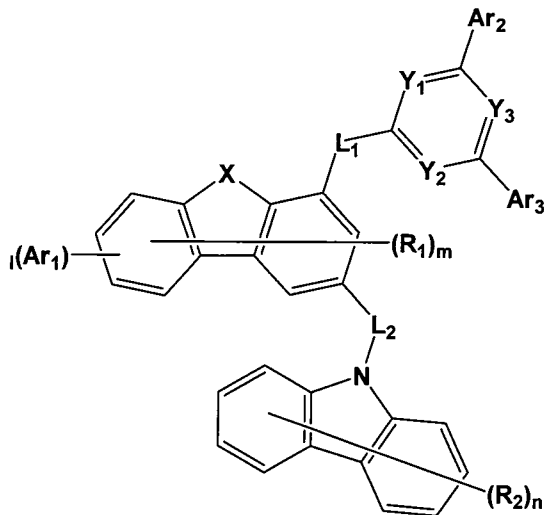
【기술적 과제】

본 발명은 신규한 헤테로고리 화합물 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

10 【기술적 해결방법】

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

15 X는 O 또는 S이고,

Y₁, Y₂ 및 Y₃는 각각 독립적으로, CH; 또는 N이고, 단, Y₁, Y₂ 및 Y₃ 중 하나 이상이 N이고,

L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로, 직접결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는 C₅₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,

Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

Ar₂ 및 Ar₃은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N,

O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는 C₅₋₆₀ 헤테로아릴이고,

단, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 모두 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 중 어느 하나는 중수소로 4 이상 치환되고,

5 R₁은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 또는 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬이고,

R₂는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알콕시; 치환 또는 비치환된 C₃₋₆₀시클로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 할로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 할로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀아릴아민; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬아민; C₁₋₆₀ 트리플루오로알킬; C₁₋₆₀ 트리플루오로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 C₅₋₆₀ 헤테로아릴이며, 이들은 카바졸의 탄소원자와 결합하여 축합고리를 형성할 수 있고,

15 m은 0 내지 3의 정수이고,
n은 0 내지 6의 정수이고
l은 1 또는 2이다.

또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

【발명의 효과】

25 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물 층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입 및 수송, 발광, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다.

30

【도면의 간단한 설명】

도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

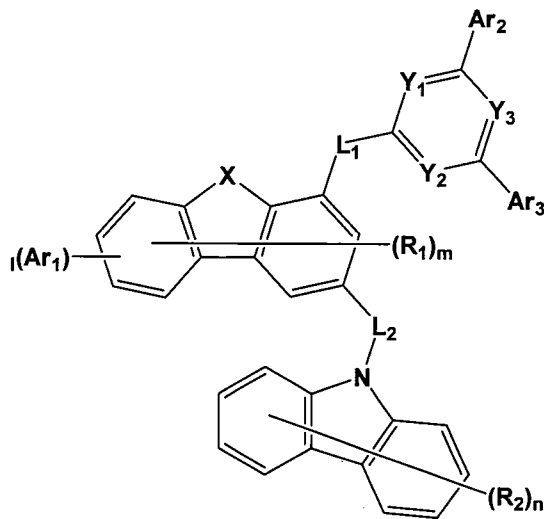
도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

【발명의 실시를 위한 형태】

이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

10 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

15 Y₁, Y₂ 및 Y₃는 각각 독립적으로, CH; 또는 N이고, 단, Y₁, Y₂ 및 Y₃ 중 하나 이상이 N이고,

L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로, 직접결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는 C₅₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,

20 Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

Ar₂ 및 Ar₃은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는

C₅₋₆₀ 헤테로아릴이고,

단, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 모두 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 중 어느 하나는 중수소로 4 이상 치환되고, 여기서, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 모두 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우는, 이들이 동일하거나 상이한 5 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우를 의미한다.

R₁은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 또는 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬이고,


R₂는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알콕시; 치환 또는 비치환된 C₃₋₆₀시클로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 할로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 할로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀아릴아민; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬아민; C₁₋₆₀ 트리플루오로알킬; C₁₋₆₀ 트리플루오로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 C₅₋₆₀ 헤테로아릴이며, 이들은 카바졸의 탄소원자와 결합하여 15 축합고리를 형성할 수 있고,

m은 0 내지 3의 정수이고,

n은 0 내지 6의 정수이고

l은 1 또는 2이다.

20 상기에서, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우는 Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 동시에, 동일하거나 상이한 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우를 의미한다.

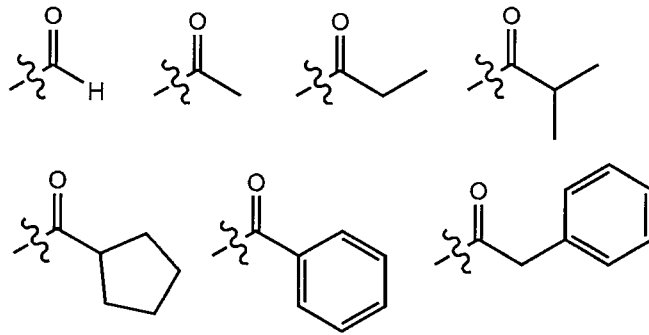
본 명세서에서, 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

25

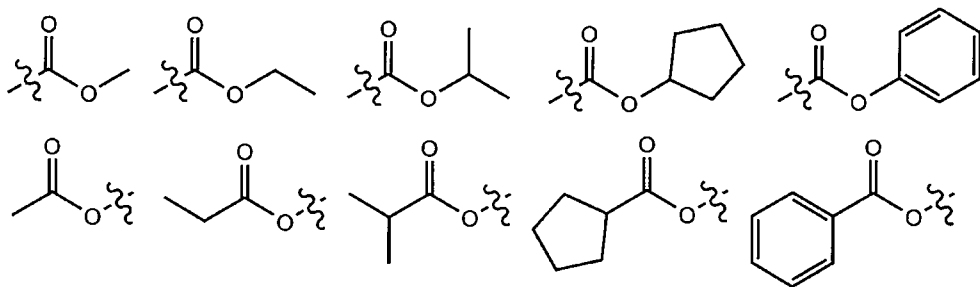
본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 30 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기;

아랄킬아민기; 헤테로아랄아민기; 아랄아민기; 아랄포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기는 아랄기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

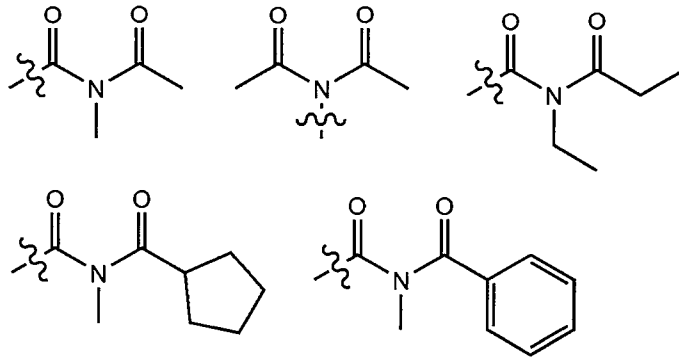
본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아랄기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 5 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

10

본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 15 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, 20 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, 사이클로헵틸메틸,사이클로헥틸메틸, 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 25 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

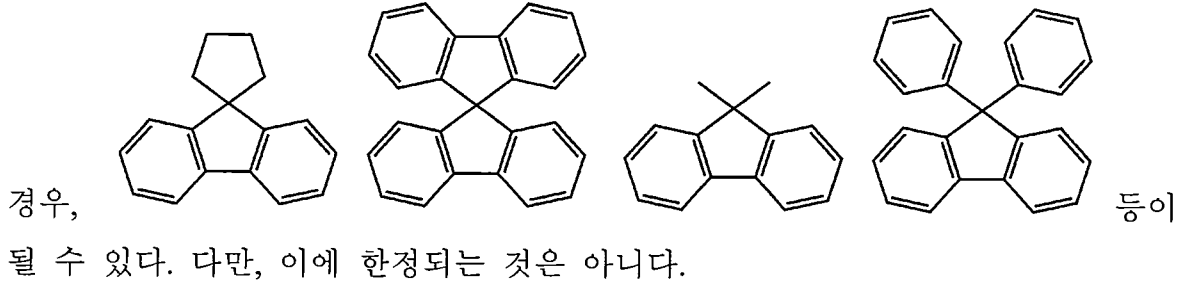
본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

30

본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가

서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다. 상기 플루오레닐기가 치환되는



- 5 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조푸라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 피노티아지닐기 및 디벤조푸라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- 10
- 15

본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가지가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서,

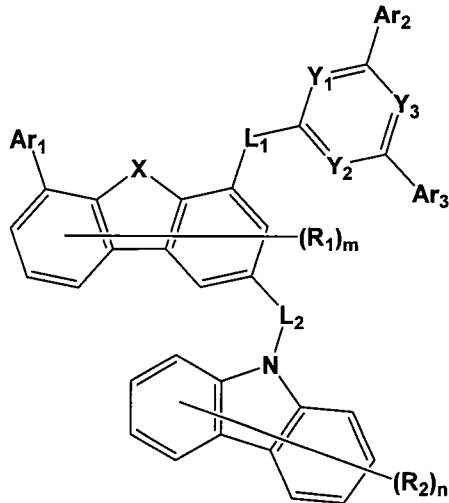
20

25

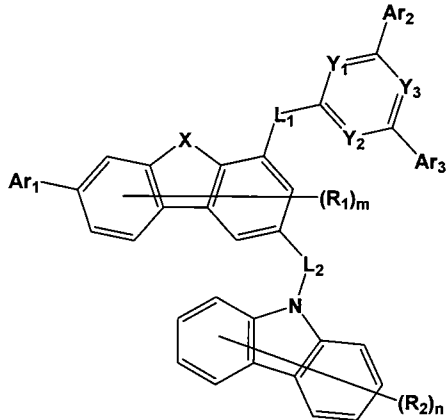
헤테로고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

바람직하게는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 5 8로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다:

[화학식 2]

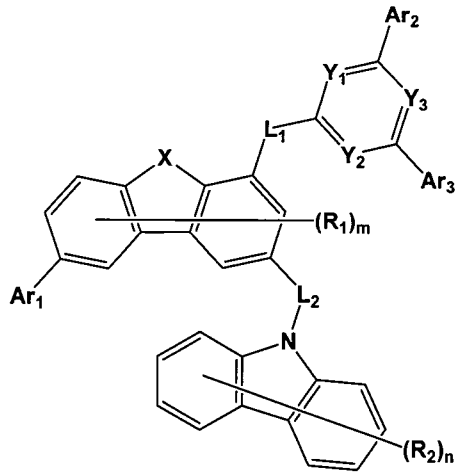


[화학식 3]

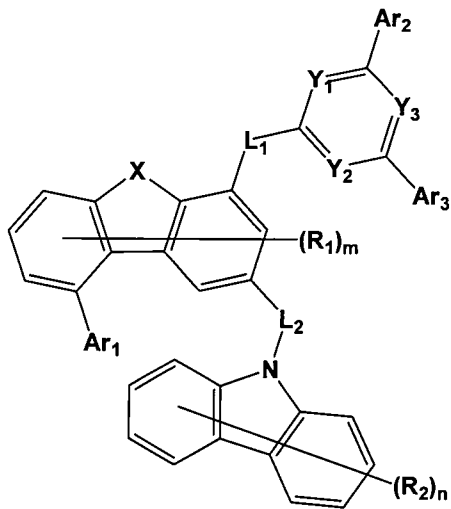


10

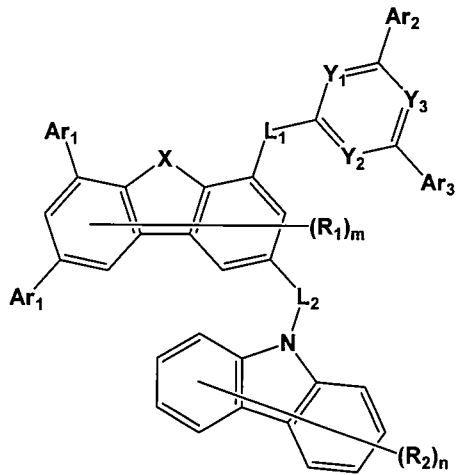
[화학식 4]



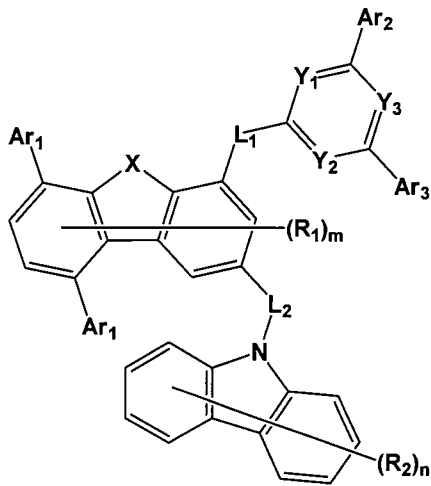
[화학식 5]



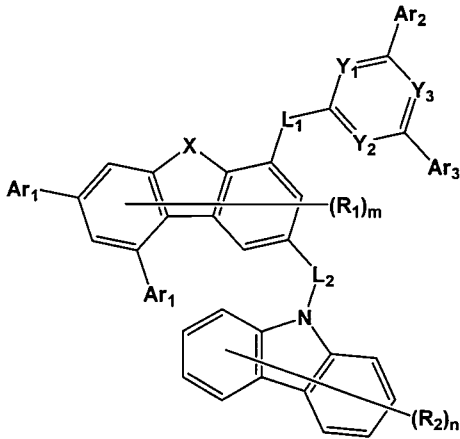
[화학식 6]



[화학식 7]



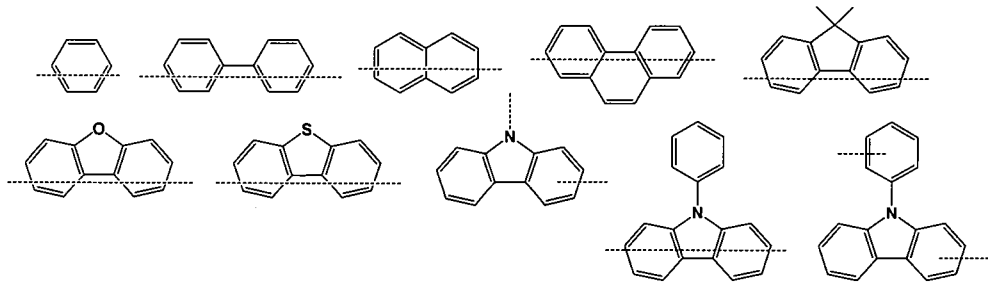
[화학식 8]



상기 화학식 2 내지 8에서,

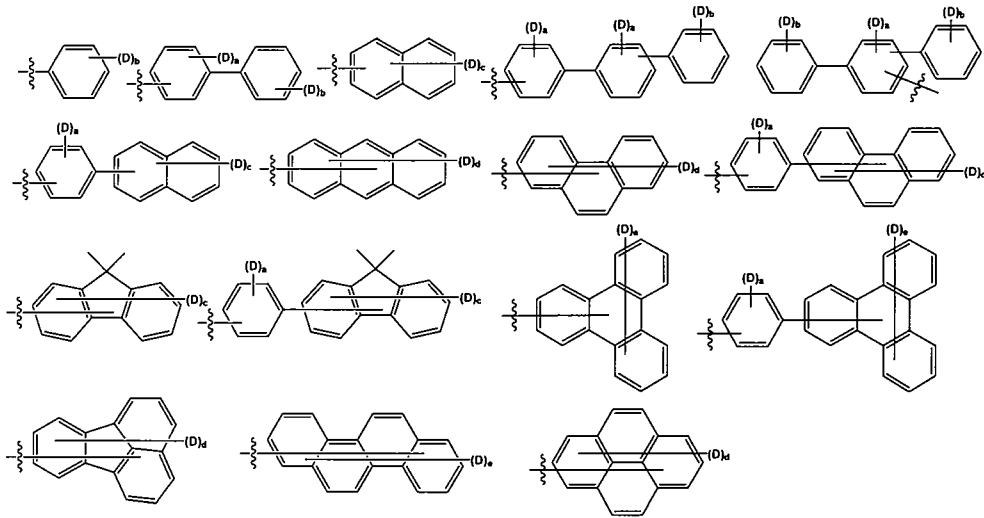
5 X, Y₁, Y₂, Y₃, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, Ar₃, R₁, R₂, m 및 n은 앞서 정의한 바와 같다.

바람직하게는, L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로, 직접결합 또는 하기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다:



10

바람직하게는, Ar₁은 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:

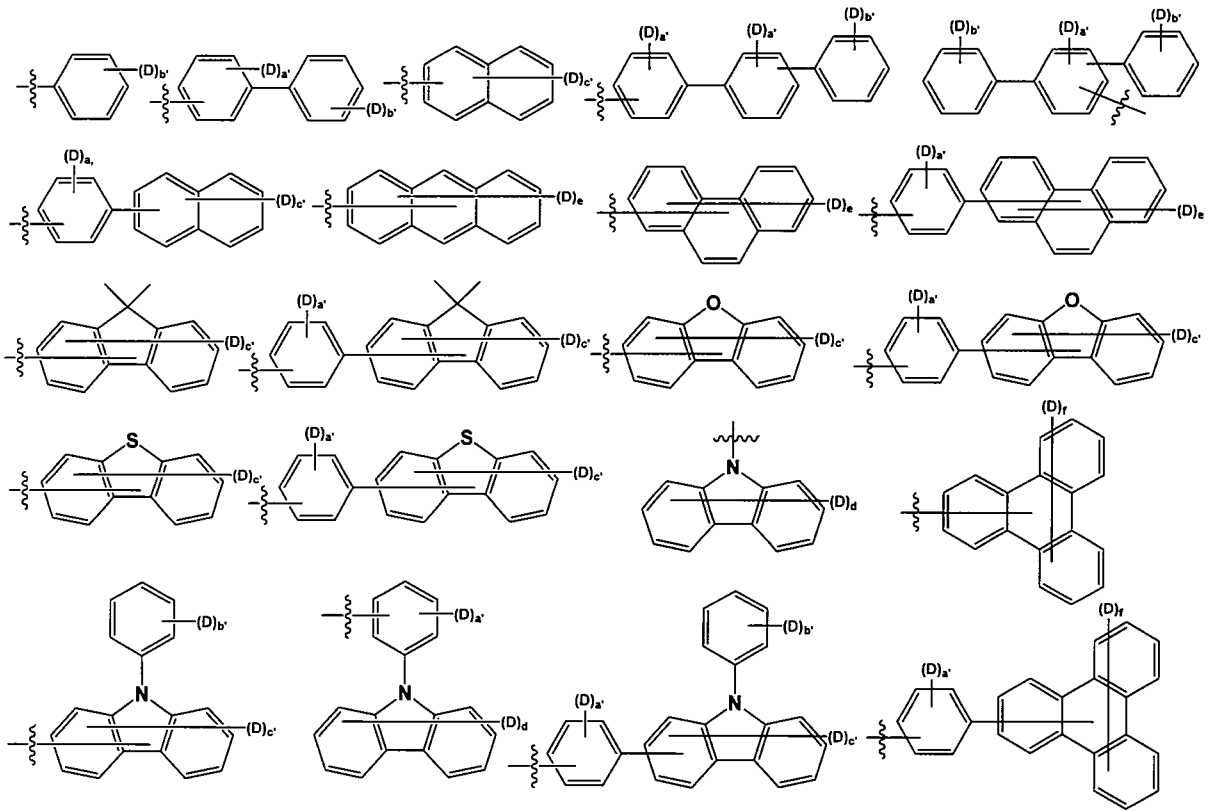


상기 식 중에서,
 a는 0 내지 4의 정수이고,
 b는 0 내지 5의 정수이고,
 5 c는 0 내지 7의 정수이고,
 d는 0 내지 9의 정수이고,
 e는 0 내지 11개의 정수이다.

바람직하게는, Ar₁은 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 페난트레닐 또는 트리페닐레닐이고, 이들은 중수소로 치환 또는 비치환된다.

10

바람직하게는, Ar₂ 및 Ar₃은 각각 독립적으로, 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:



상기 식 중에서,
 a' 는 0 내지 4의 정수이고,
 b' 는 0 내지 5의 정수이고,
 c' 는 0 내지 7의 정수이고,
 d' 는 0 내지 8의 정수이고,
 e' 는 0 내지 9의 정수이고,
 f' 는 0 내지 11의 정수이다.

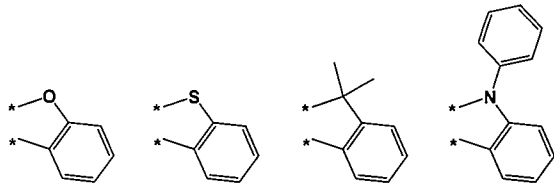
5

10

바람직하게는, R_1 은 각각 독립적으로, 수소 또는 중수소, 더욱 바람직하게는 수소일 수 있다.

15

바람직하게는, R_2 는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; 메톡시; 트리플루오로메틸; 트리플루오로메톡시; 페닐; 피리디닐; 이소퀴놀리닐; 또는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나이며,



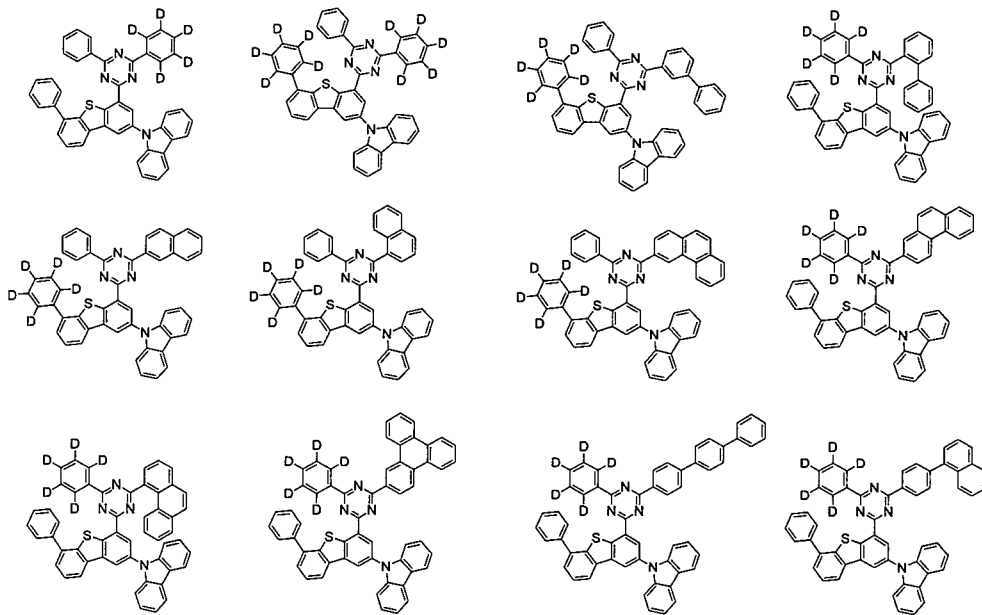
상기 식 중에서, 2개의 *은 화학식 1의 카바졸의 인접 탄소와 각각 연결되고,

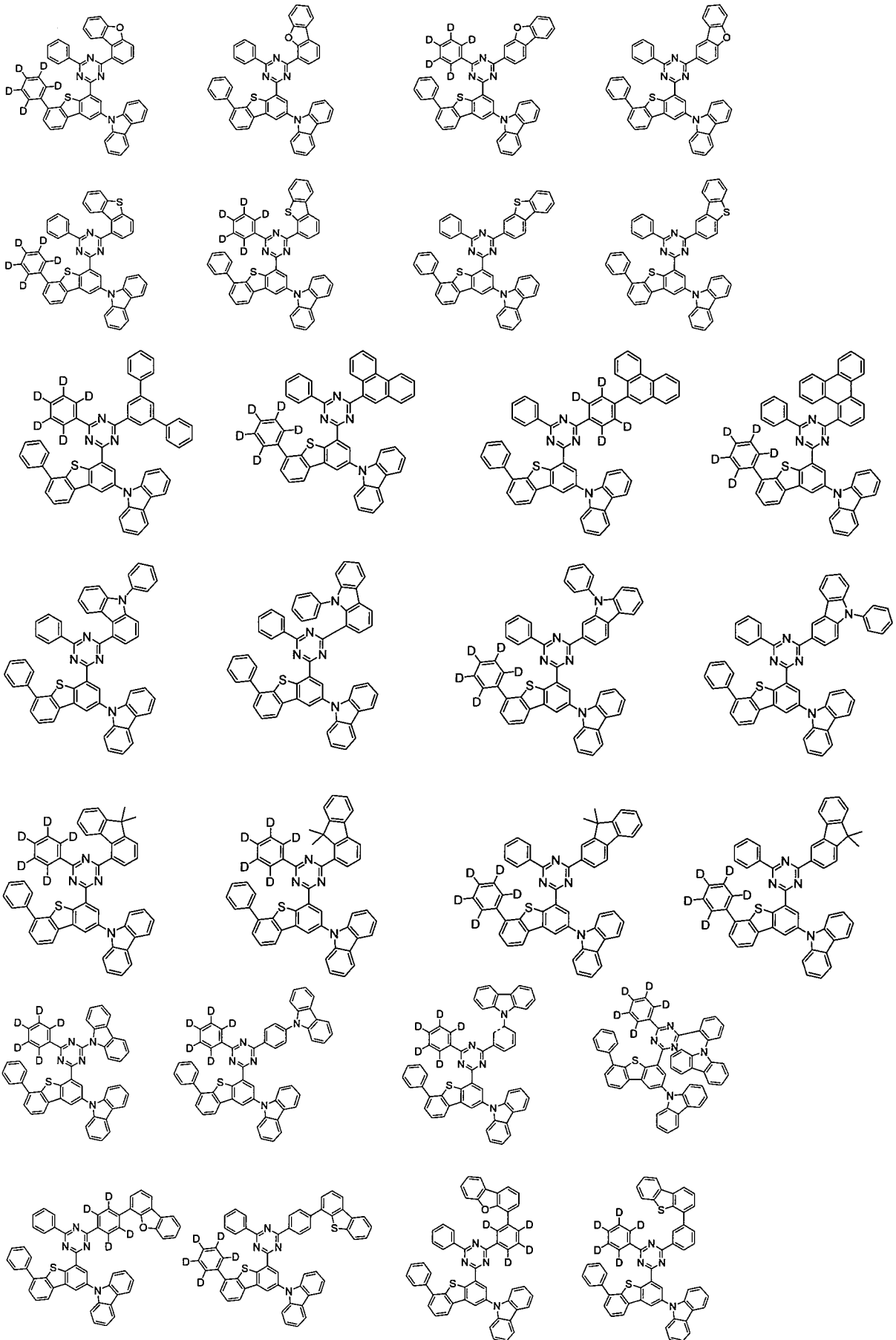
상기 페닐은 할로젠, 시아노, 메톡시, 트리플루오로메틸 및 5-트리플루오로메톡시로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 치환될 수 있다.

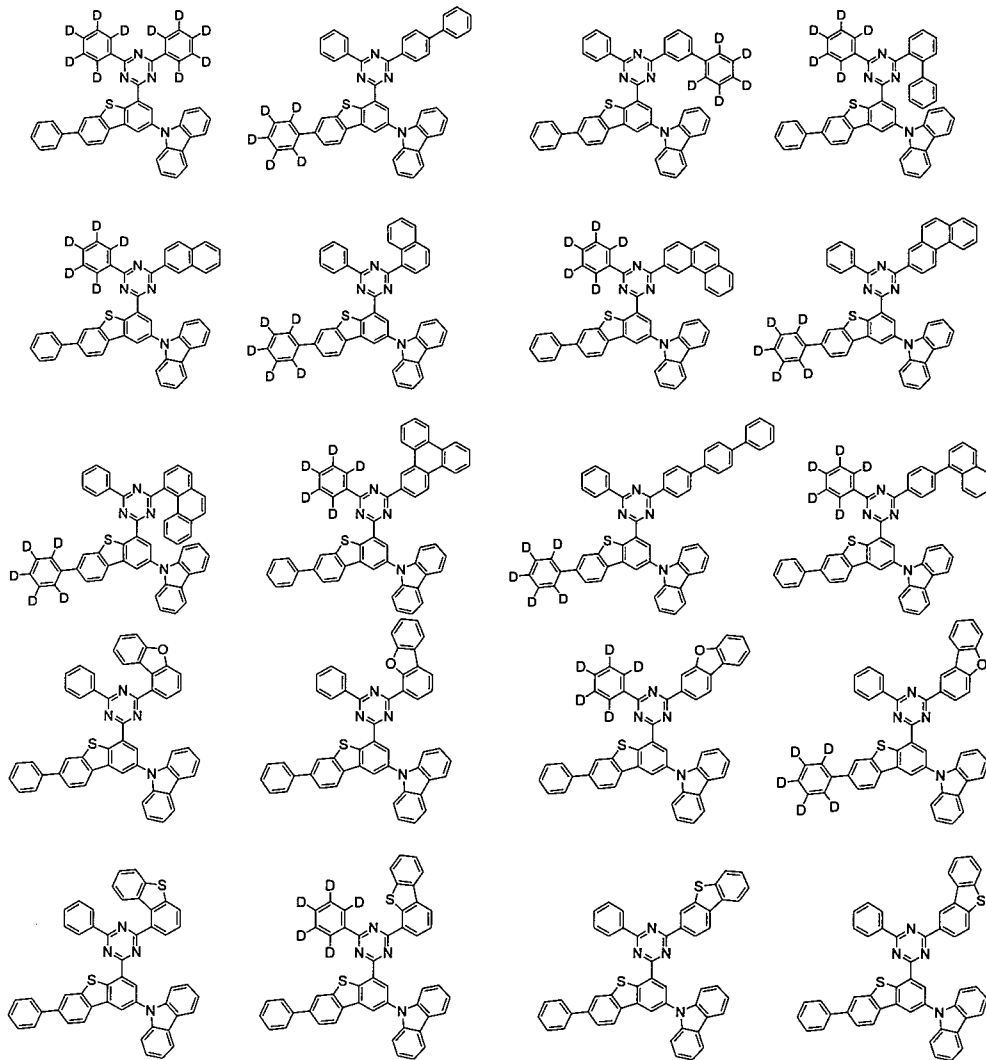
바람직하게는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합에서, L₁, Ar₂ 및 Ar₃ 중 하나 이상은, N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함할 수 있다.

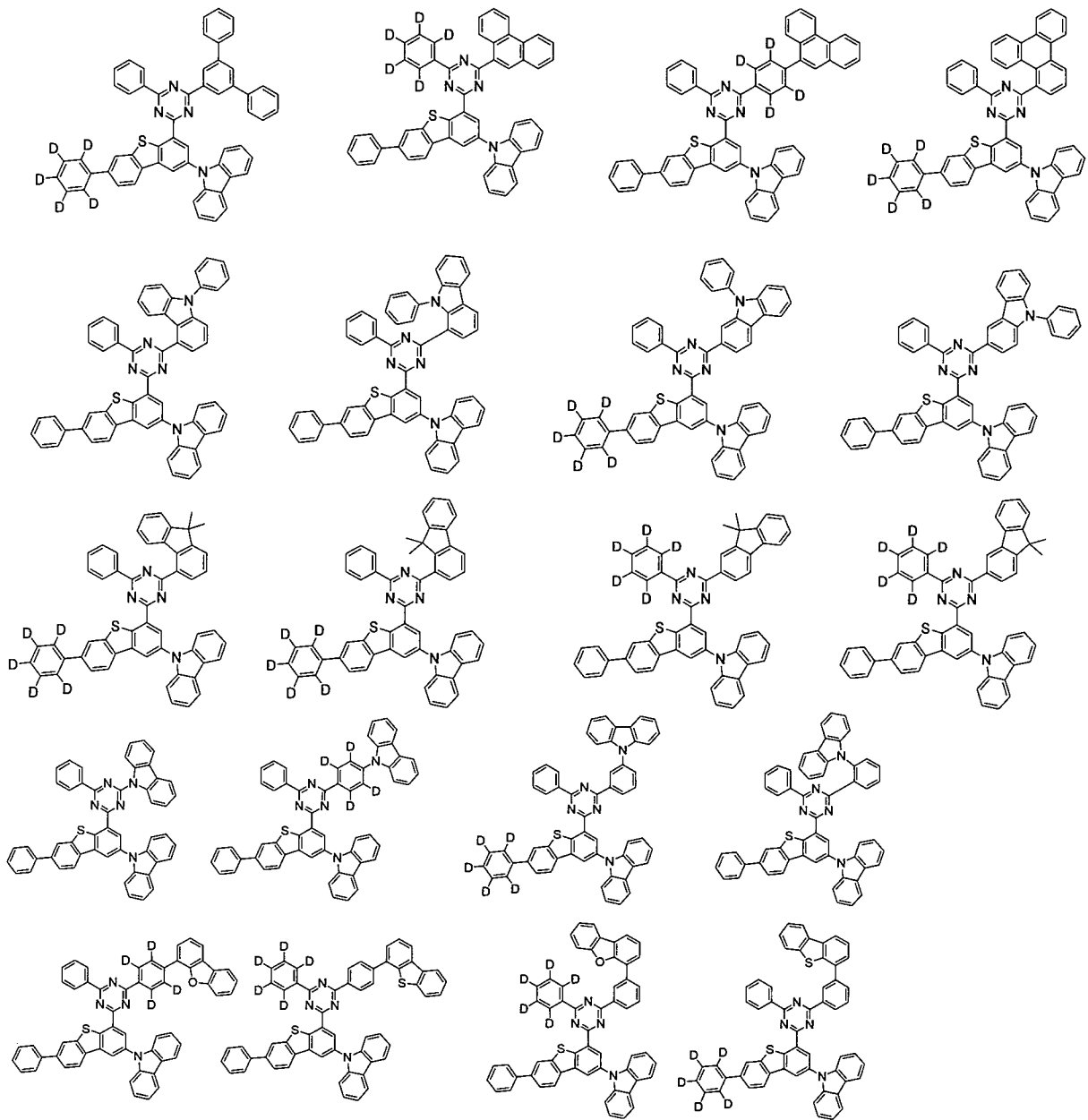
10

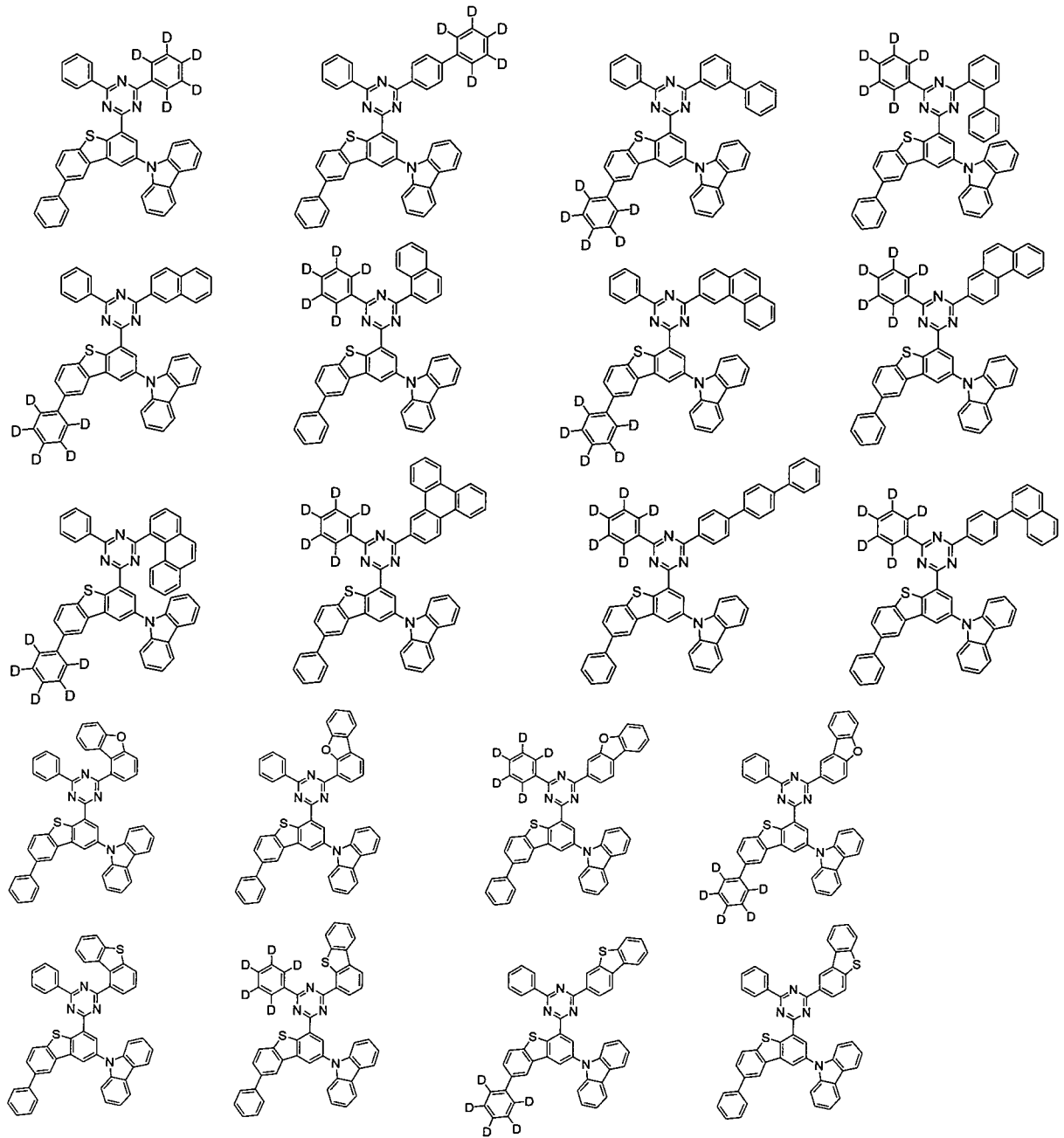
바람직하게는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:

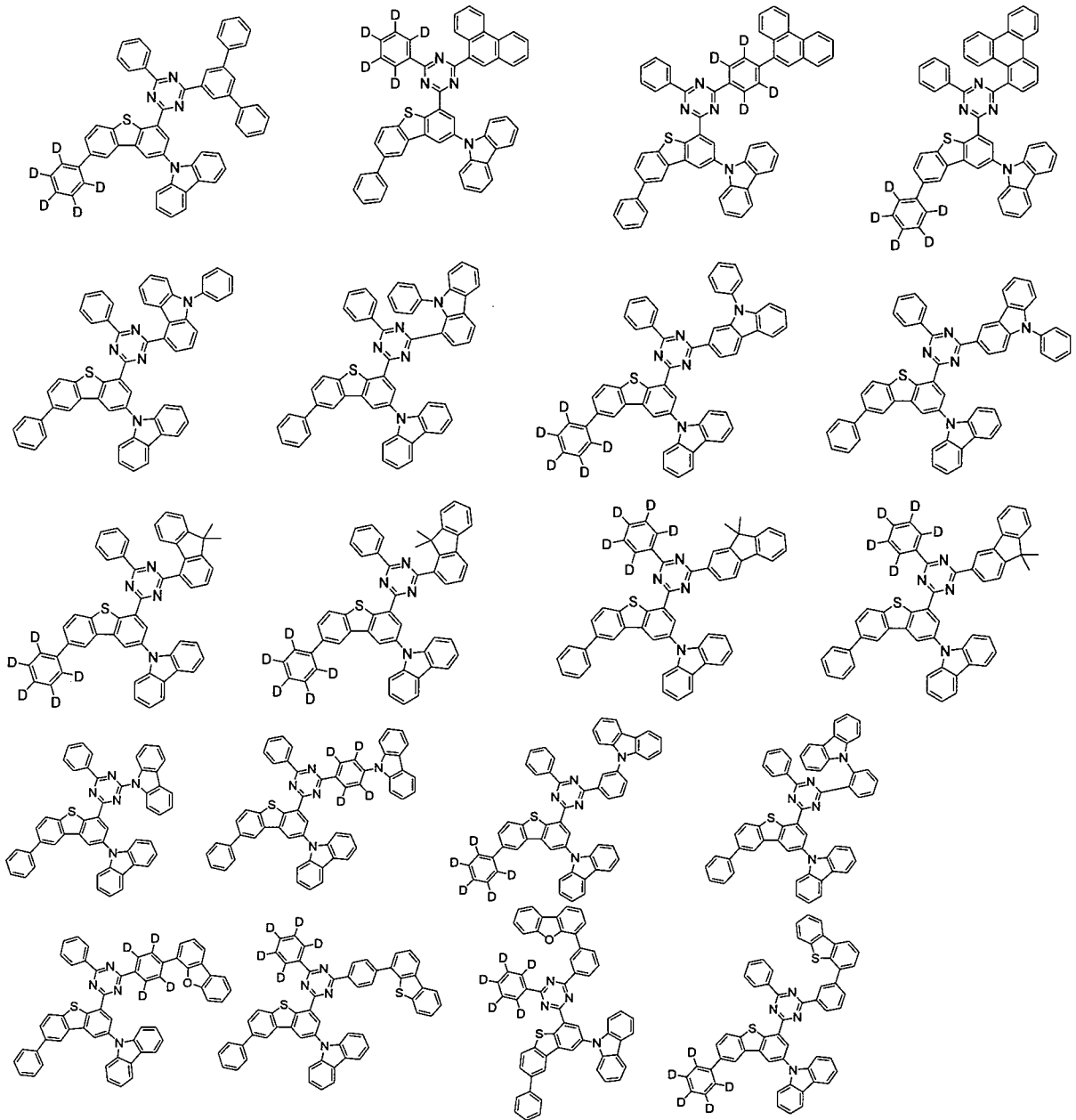


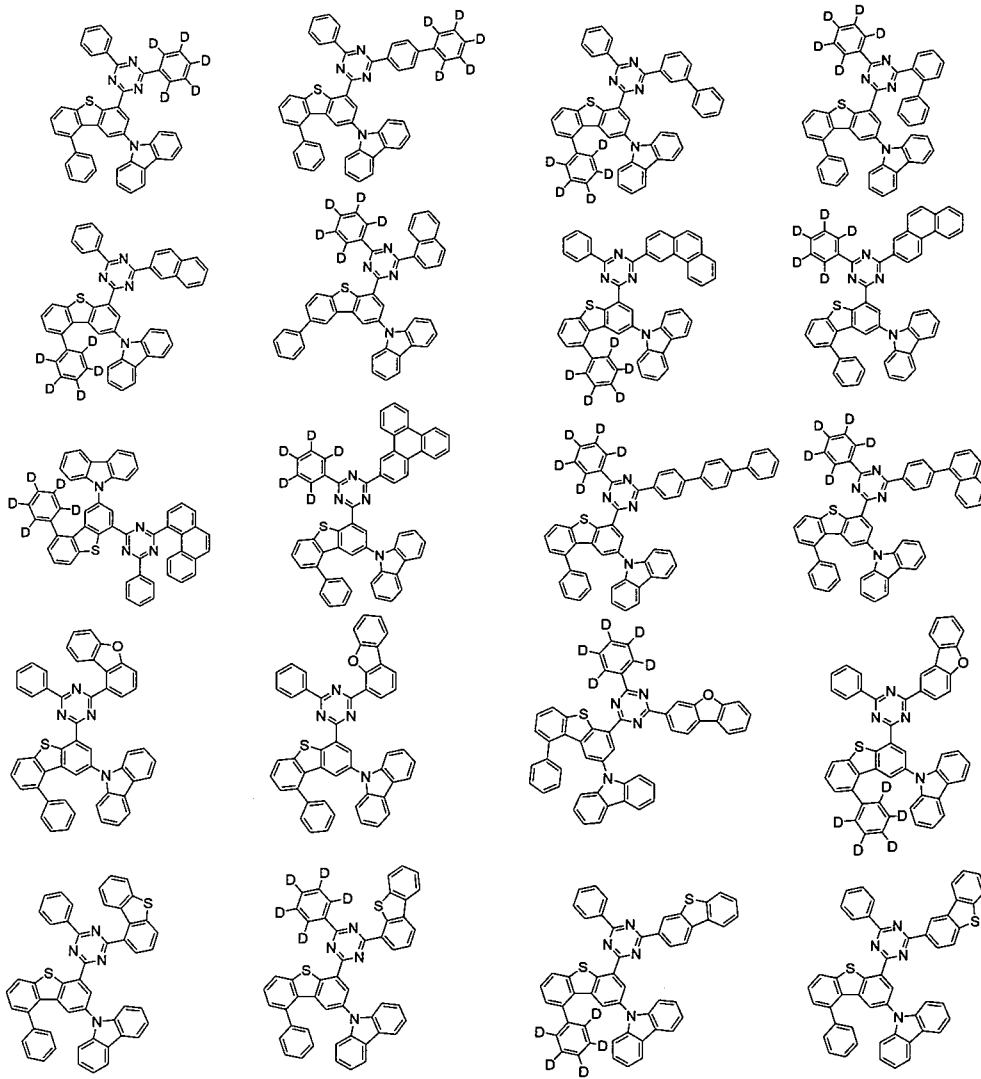


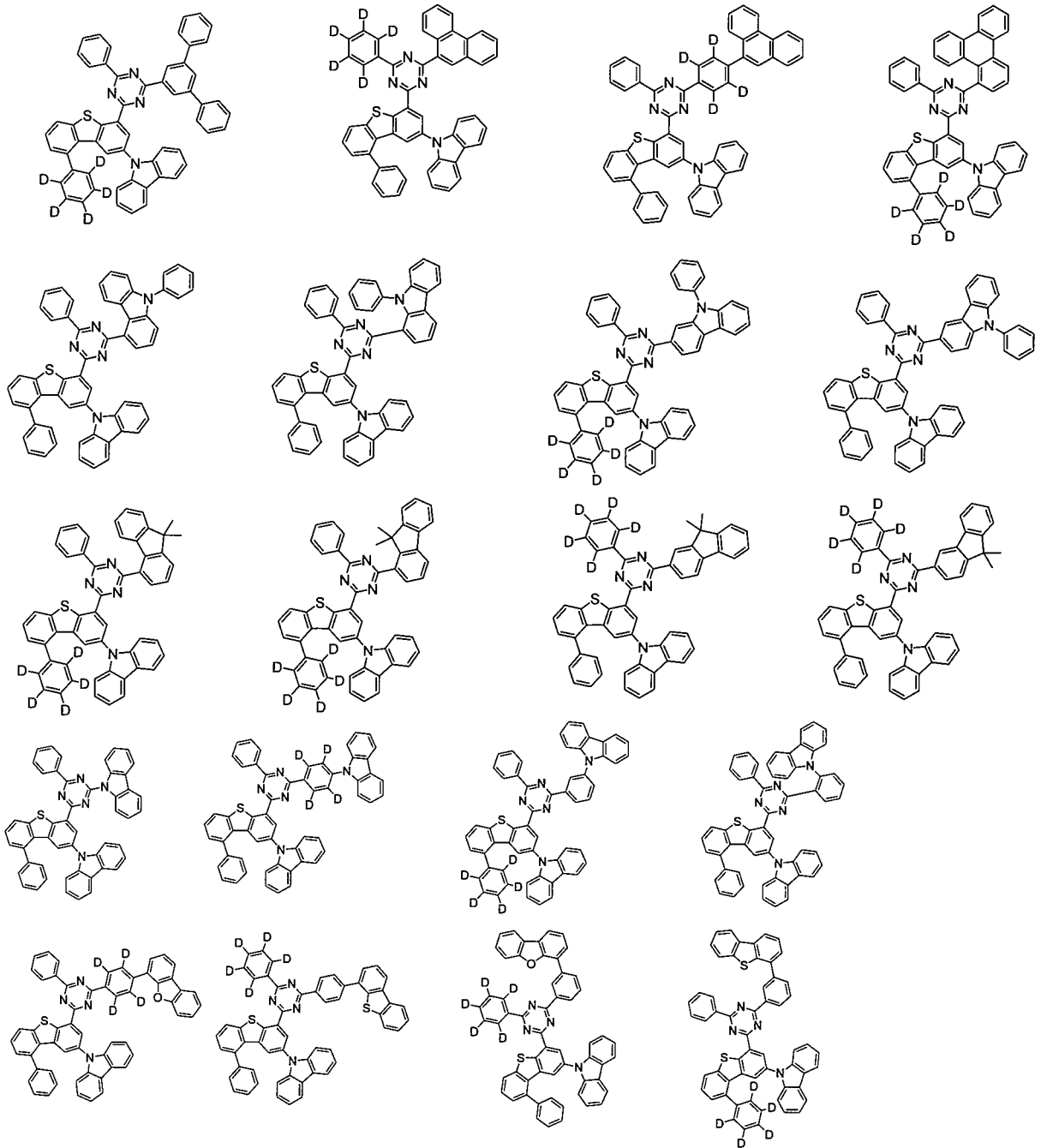


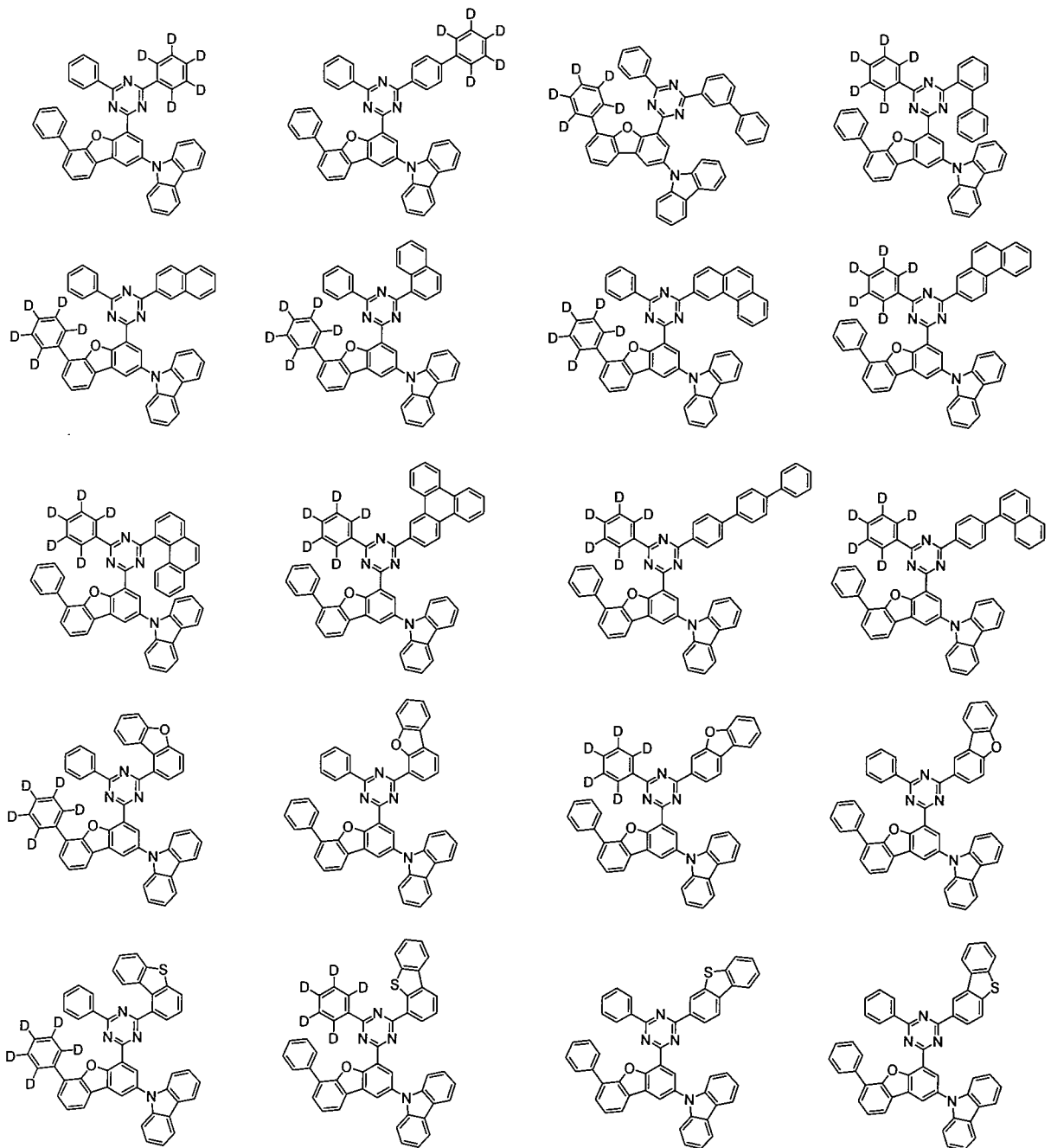


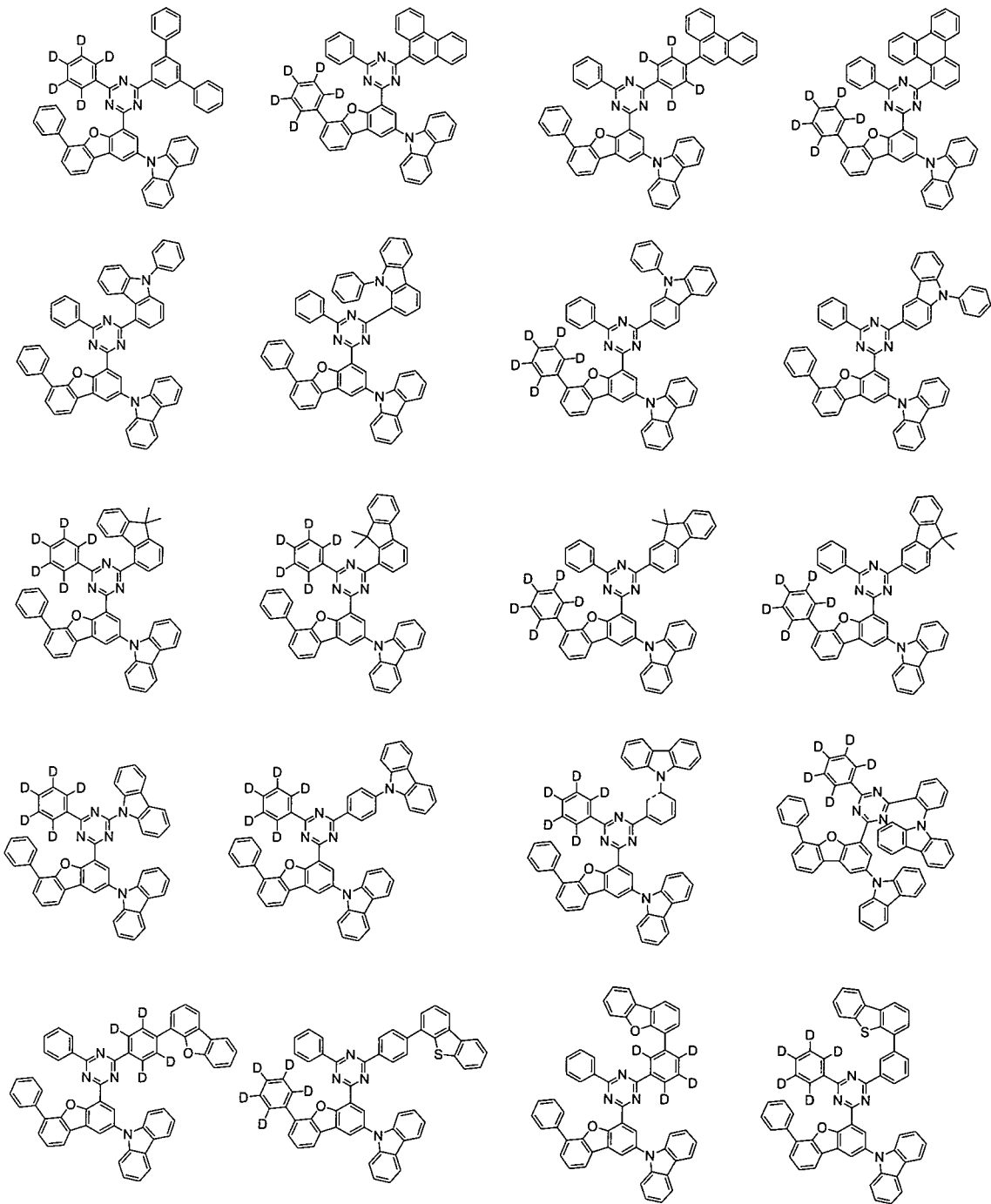


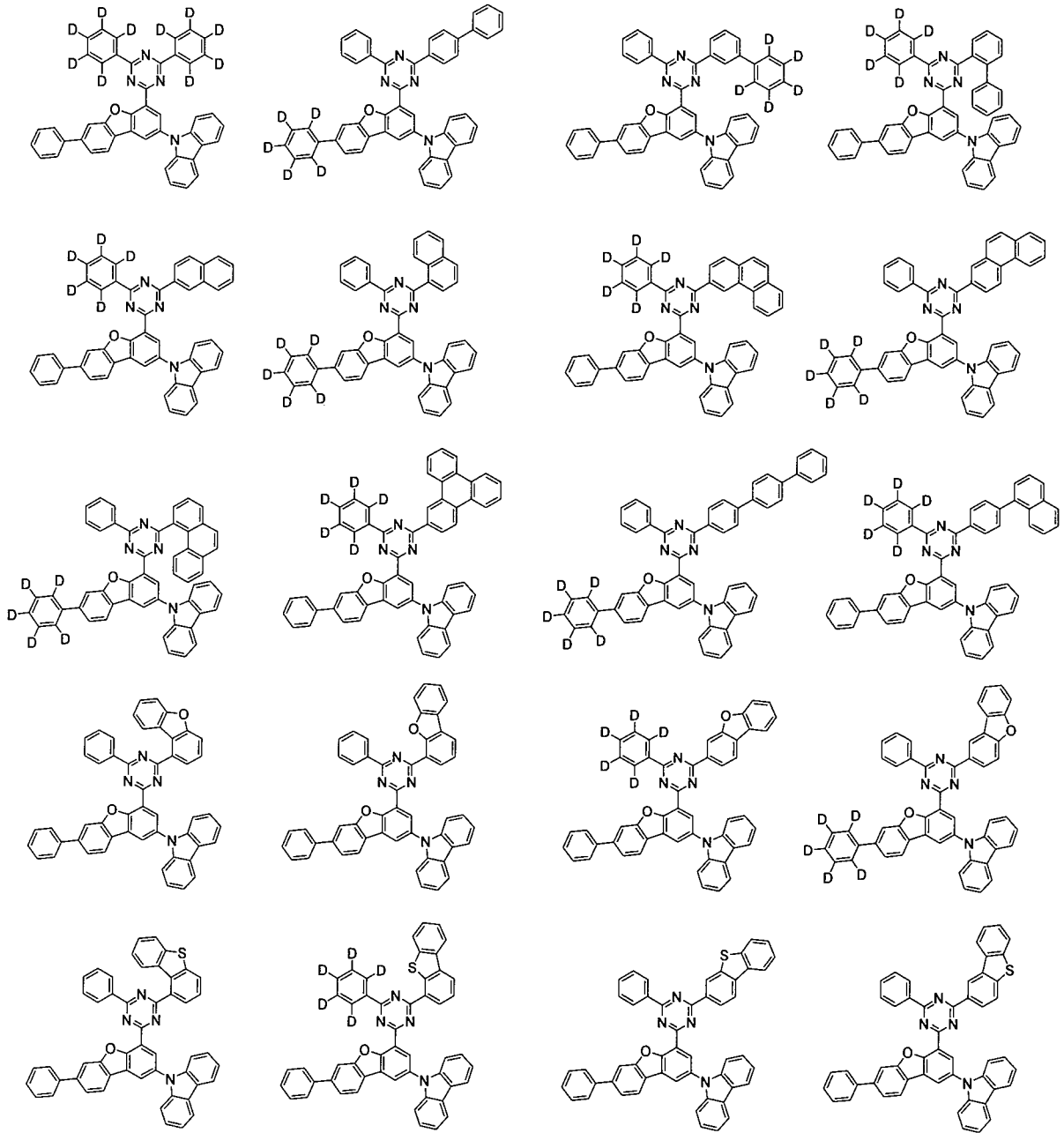


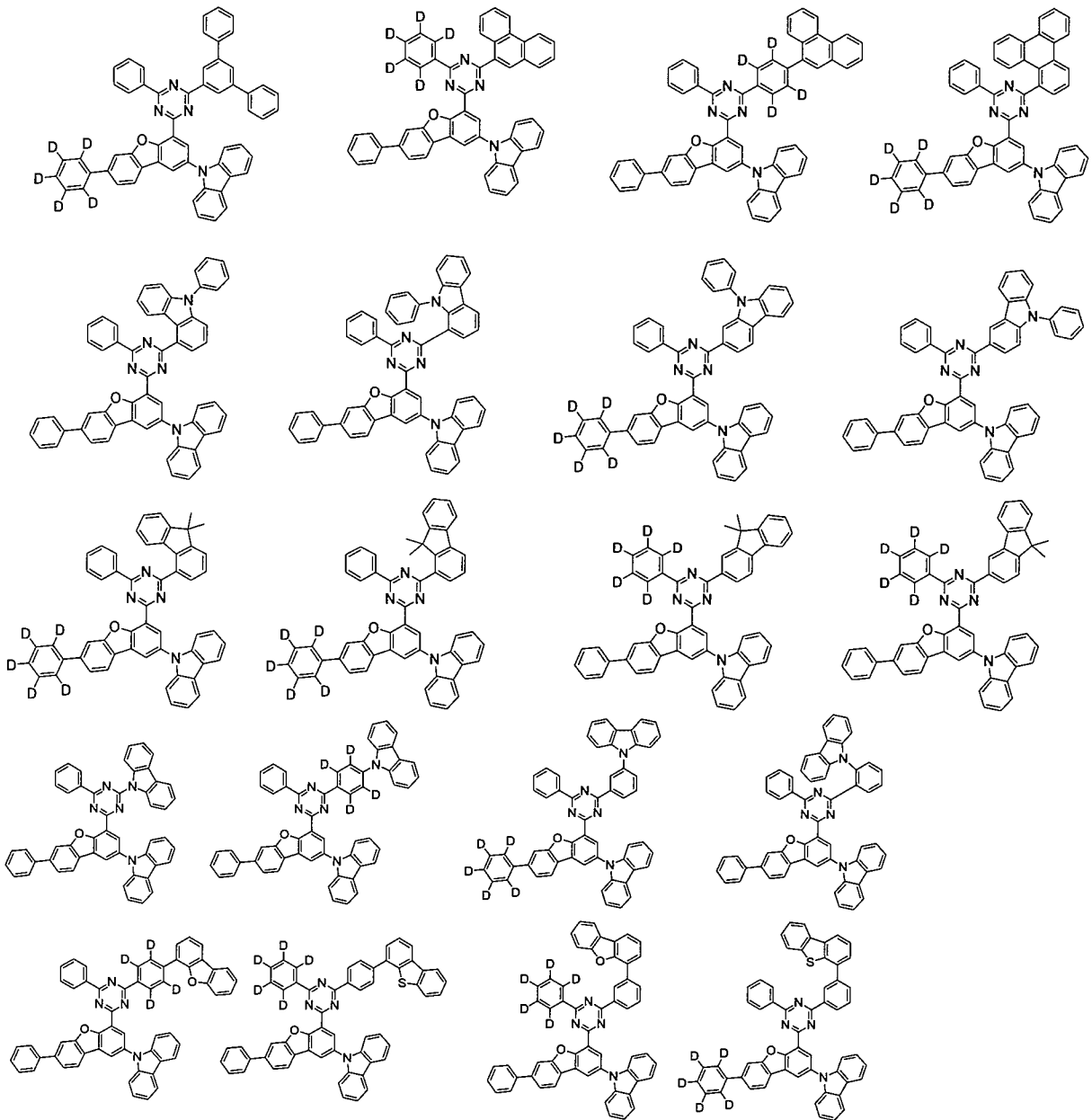


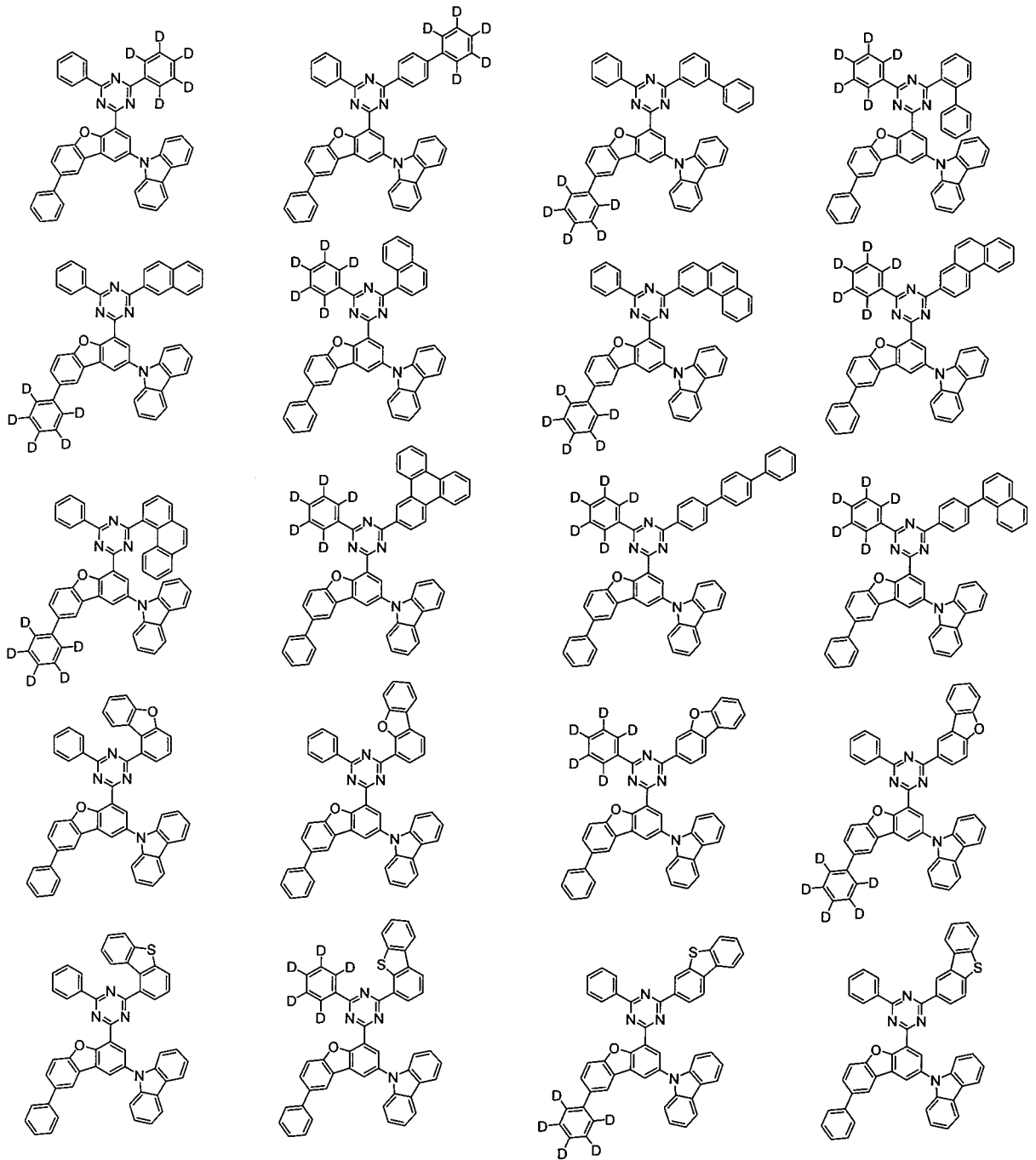


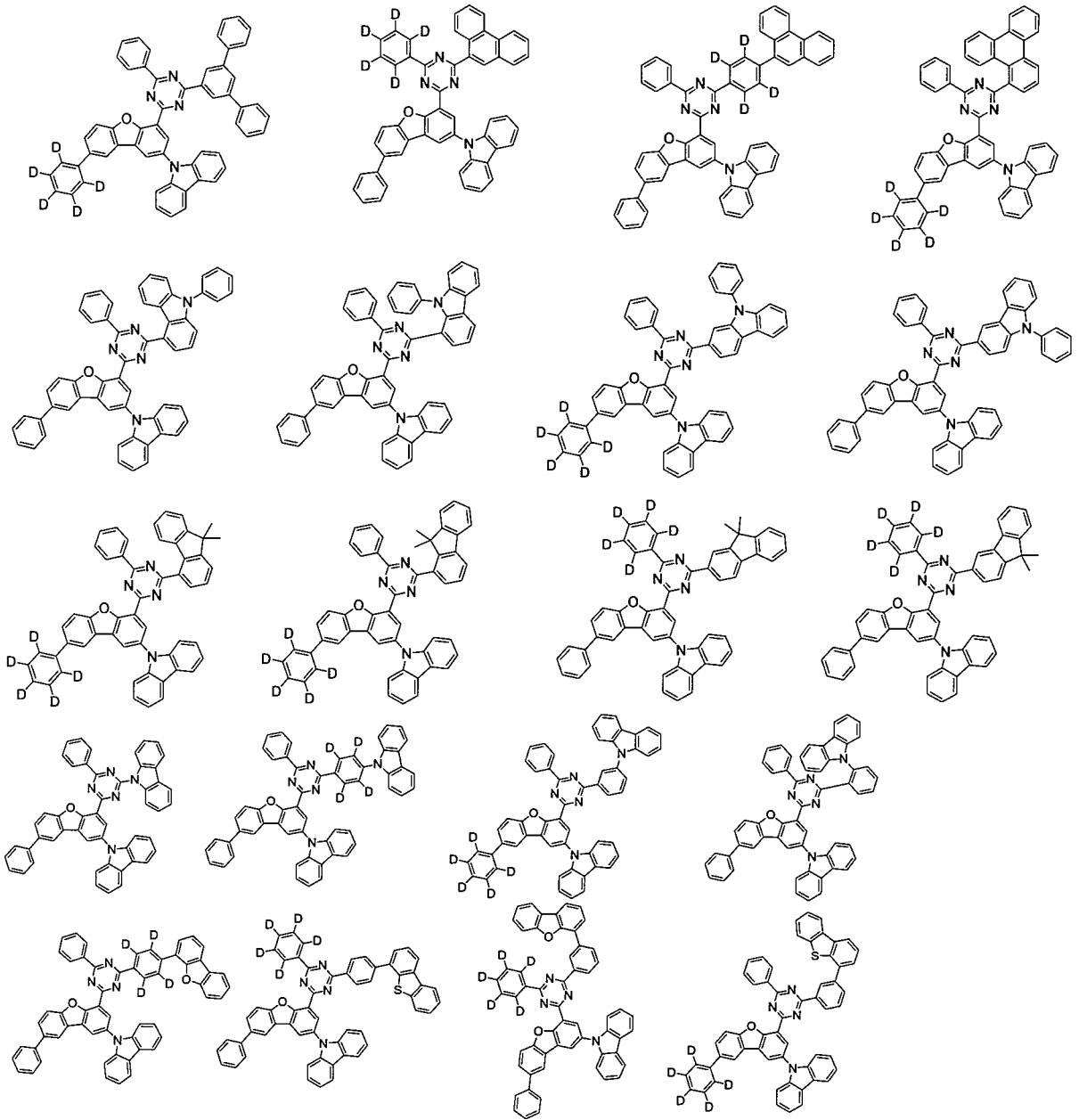


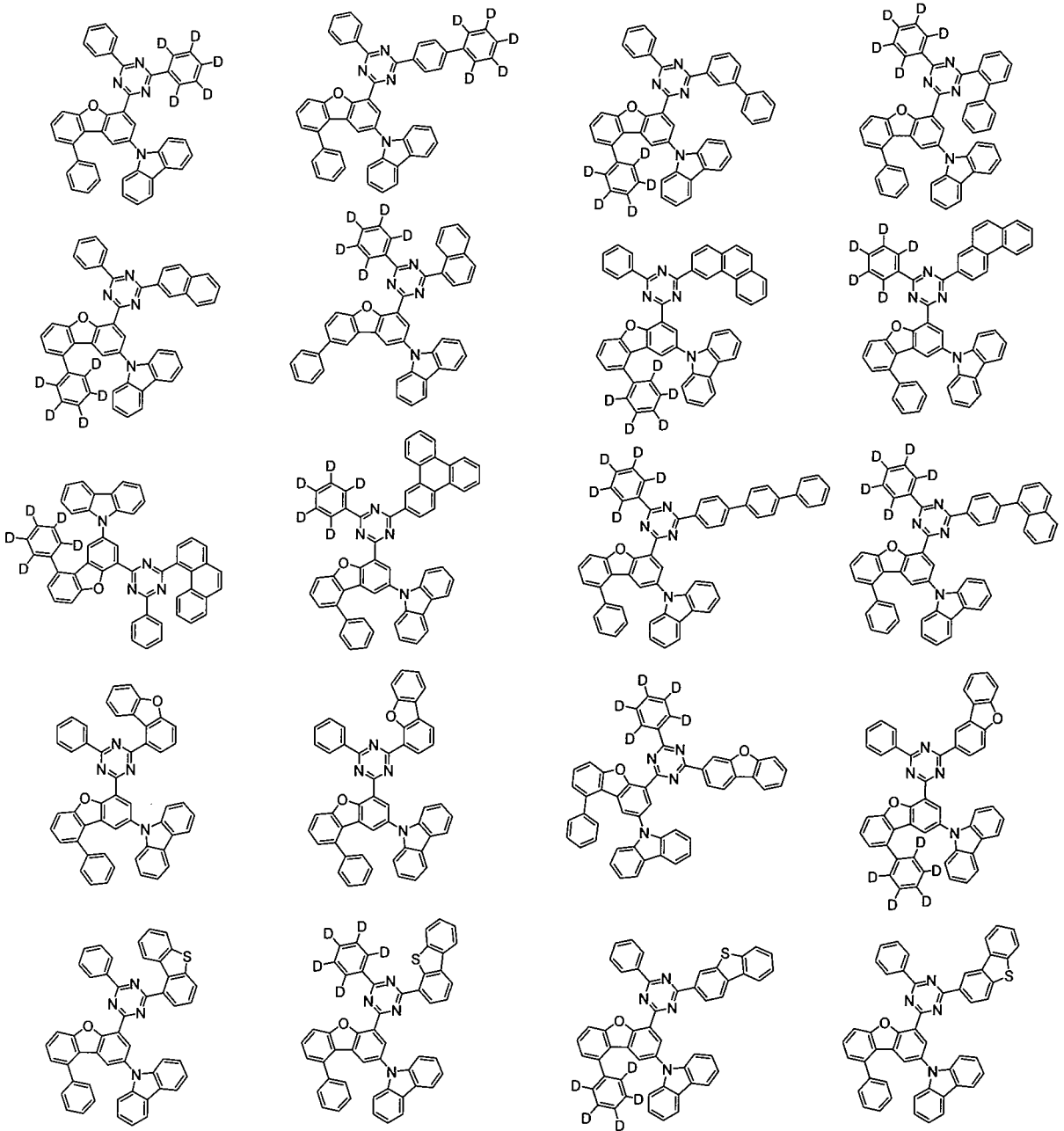


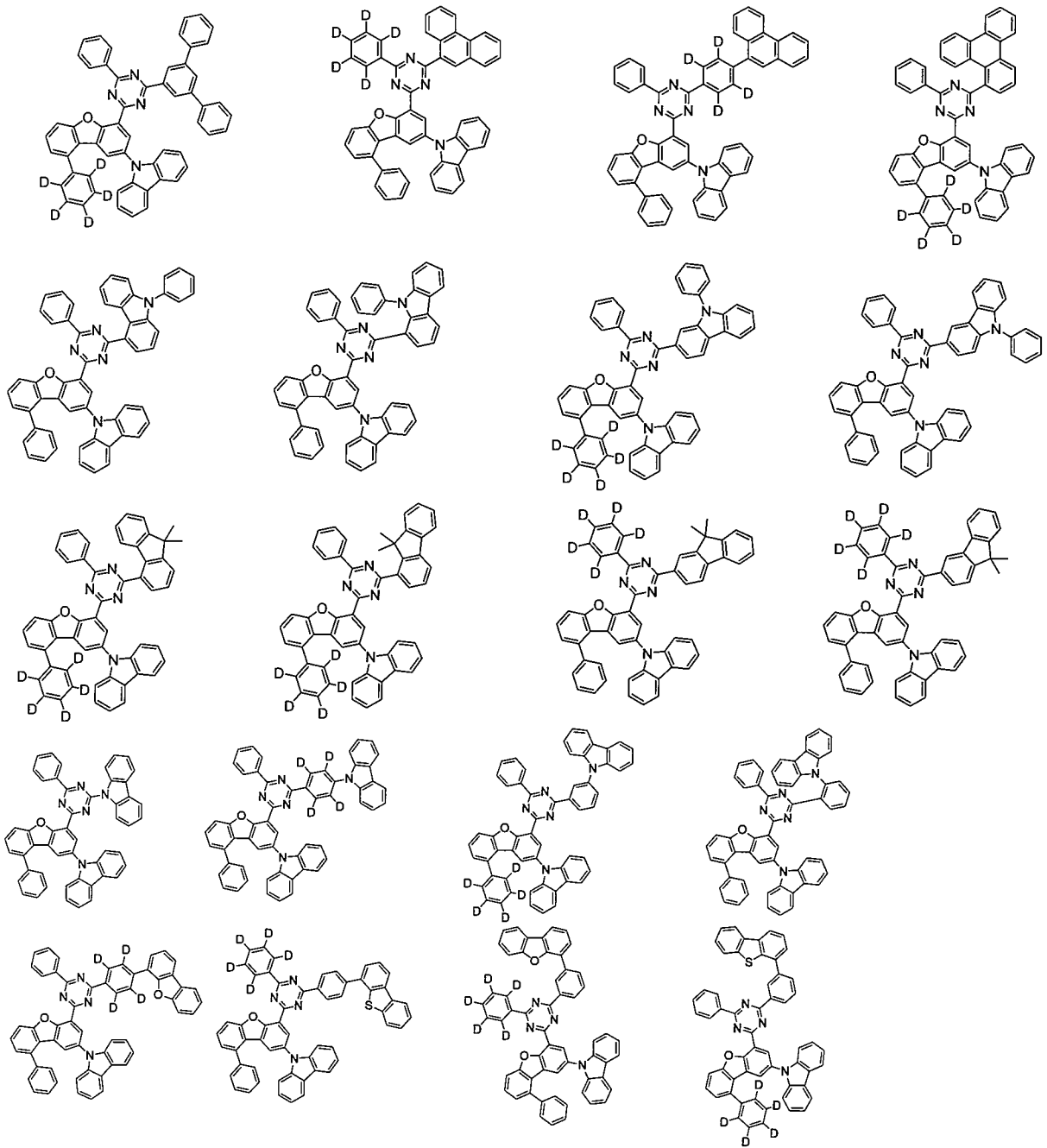


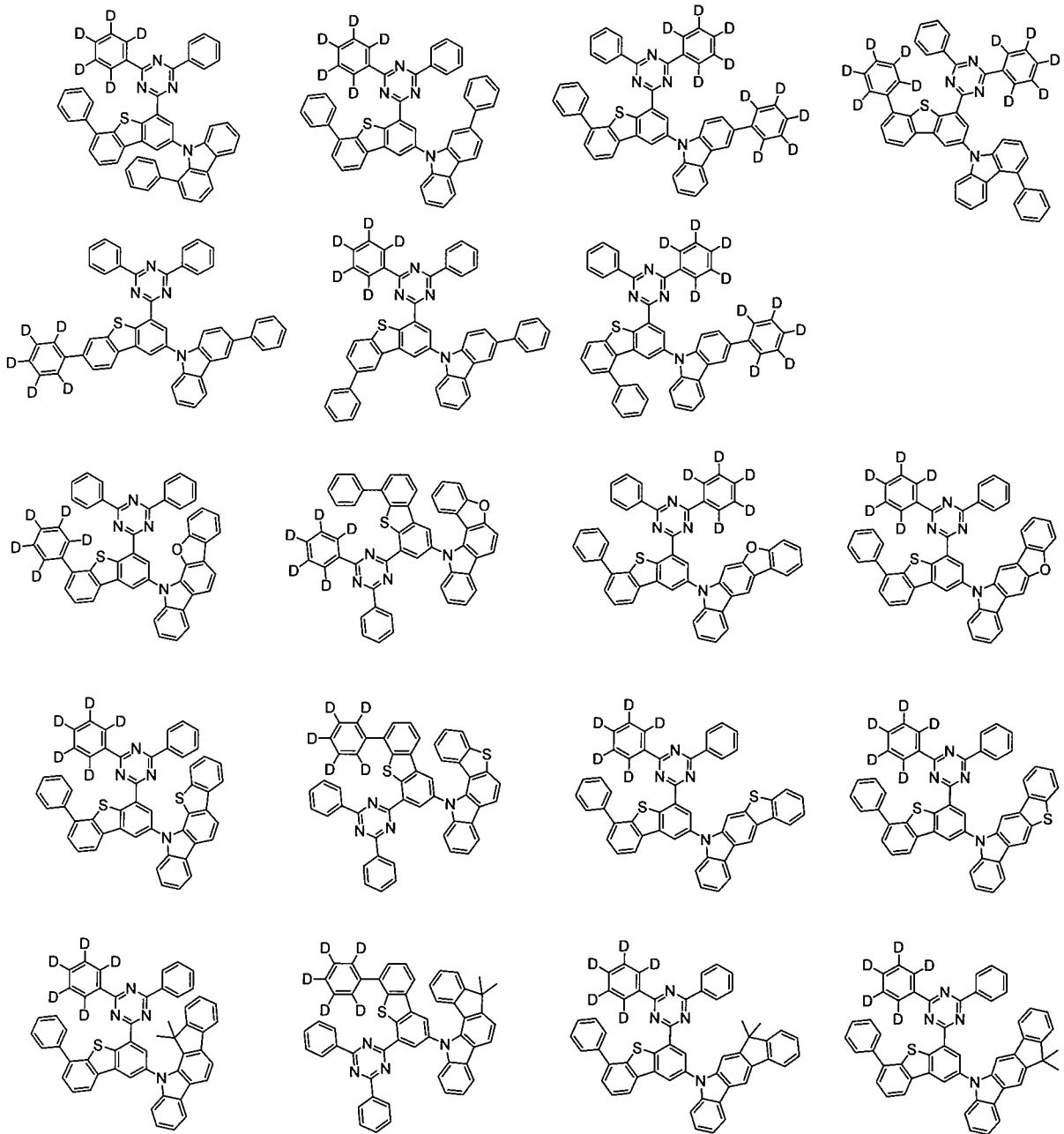


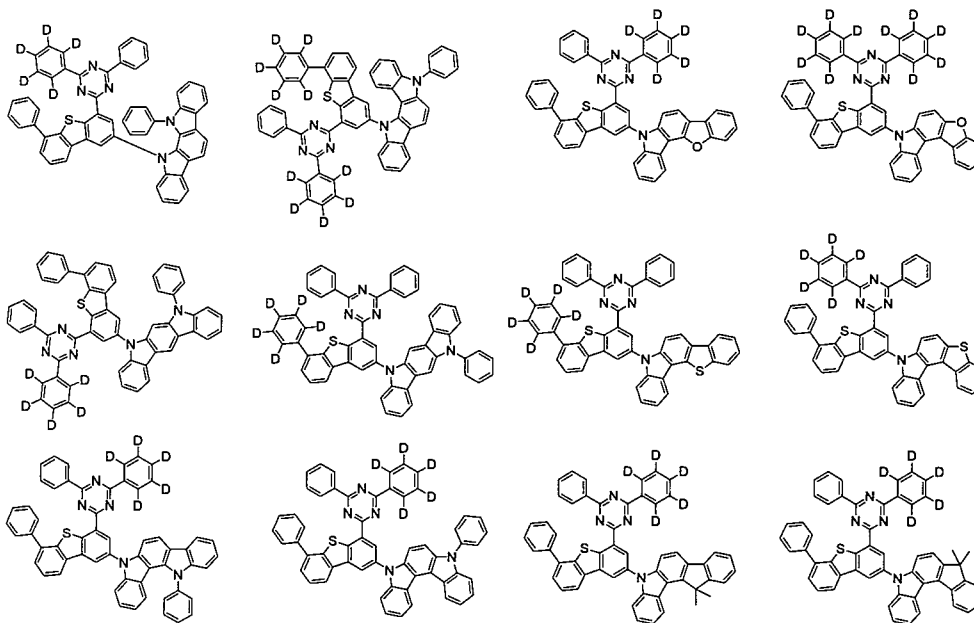


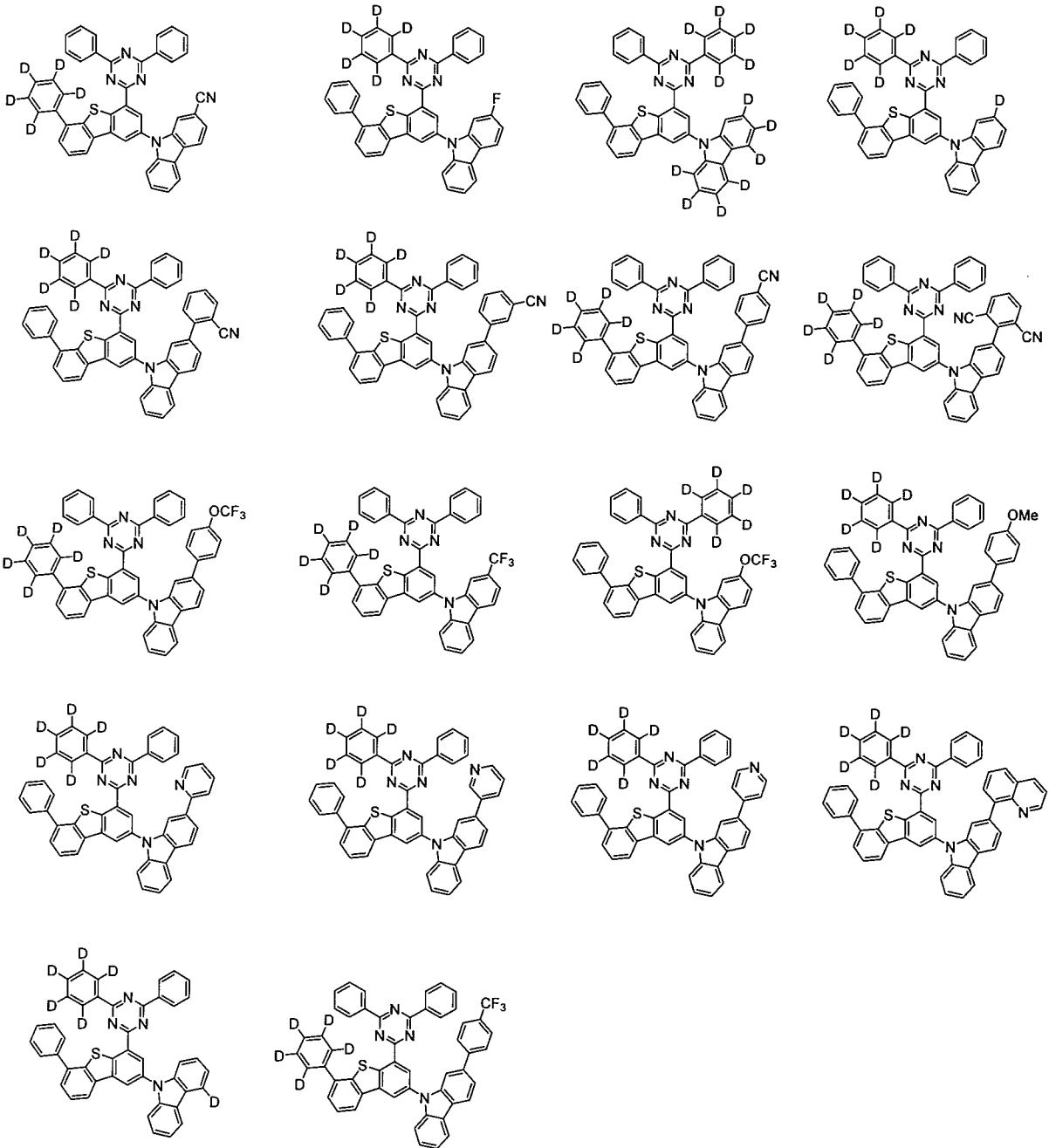


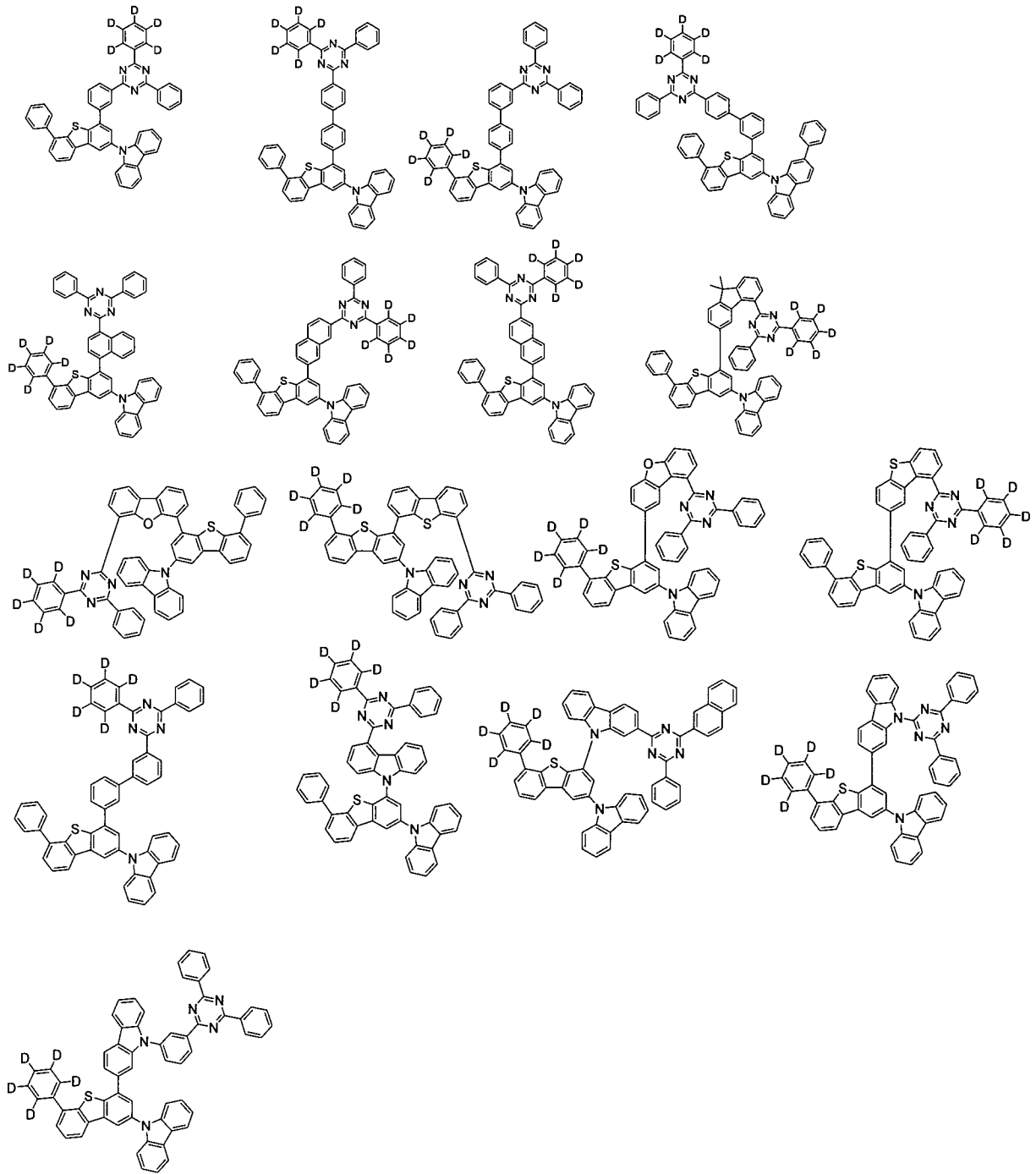


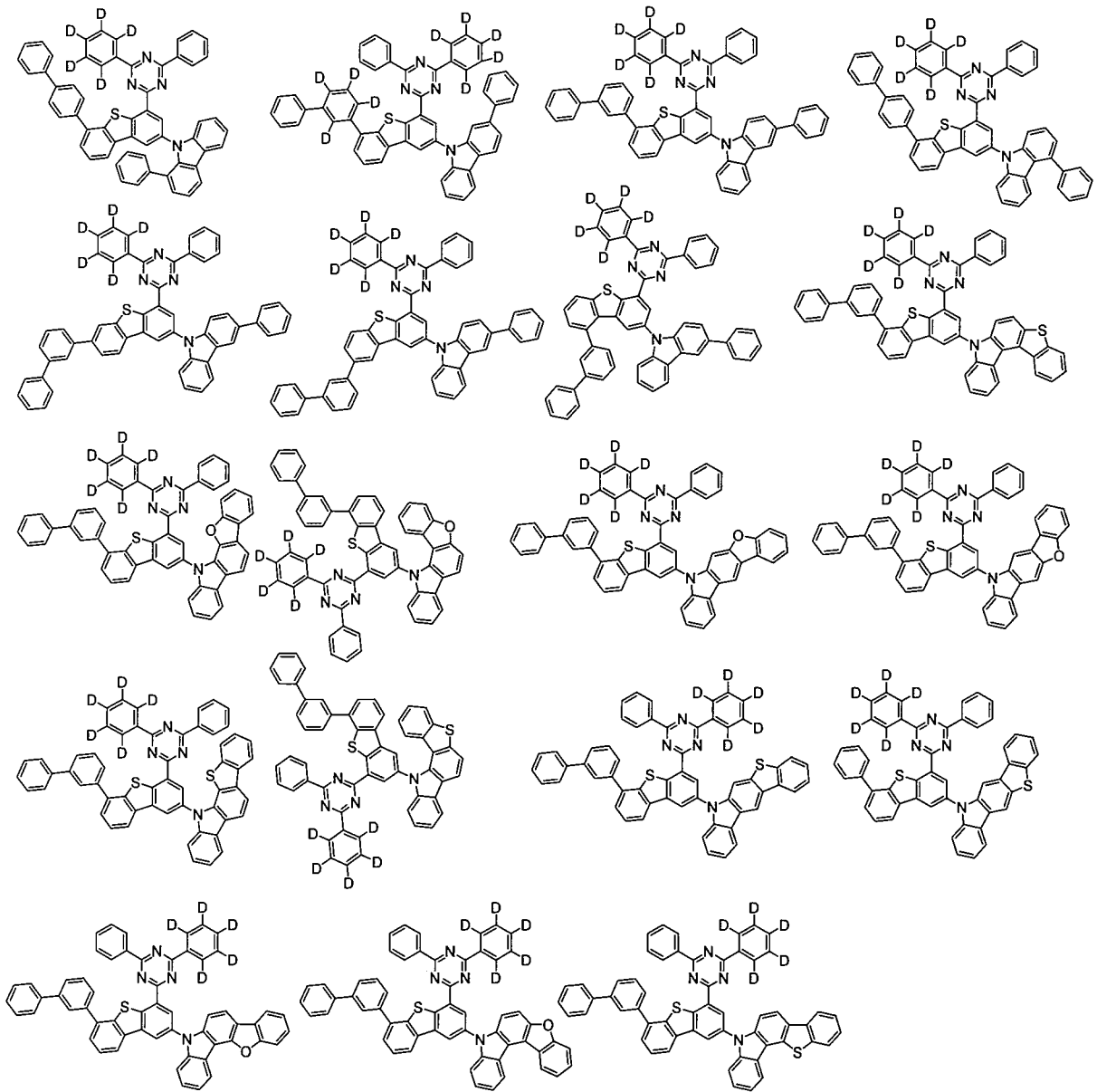


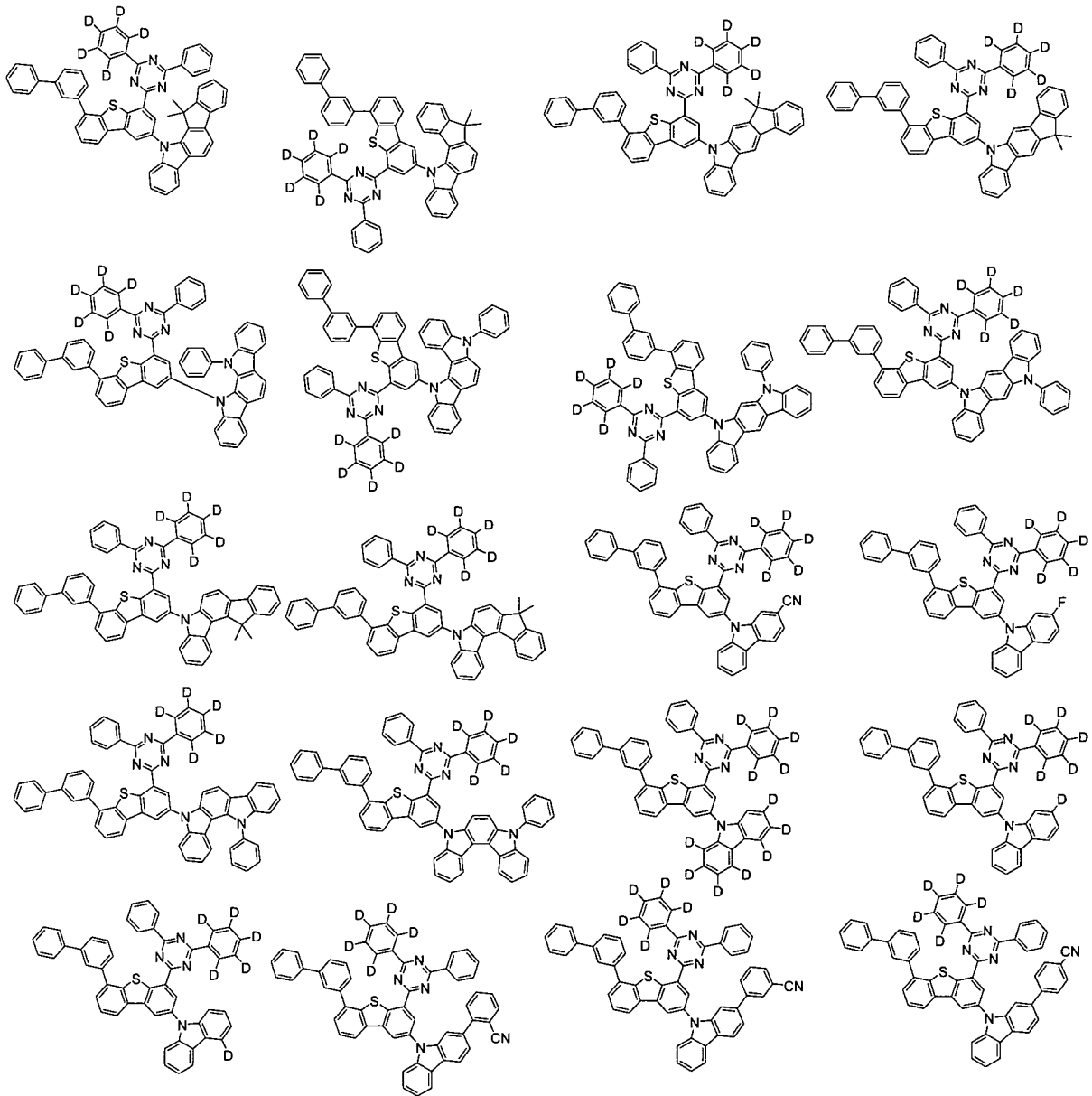


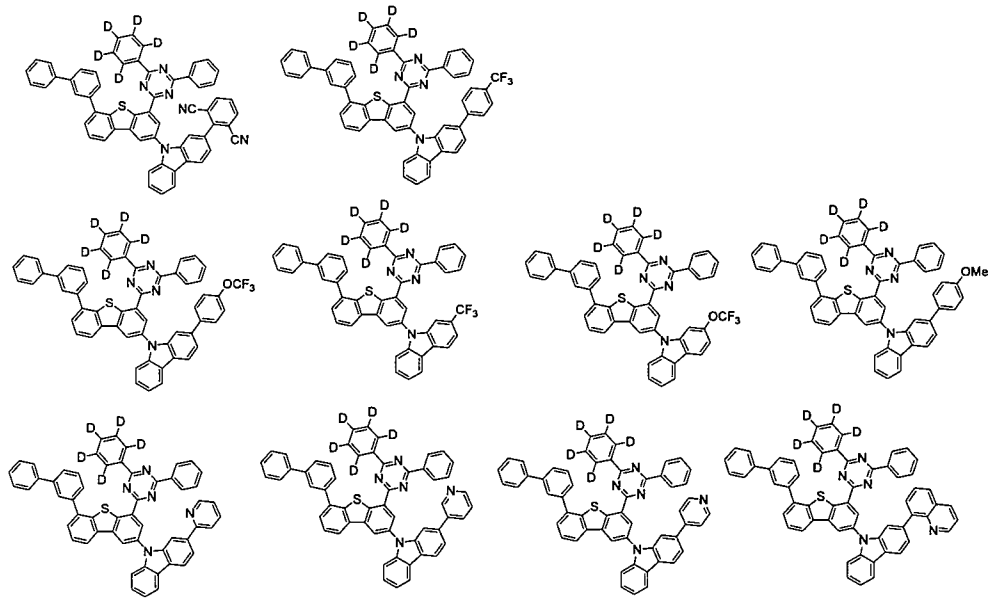


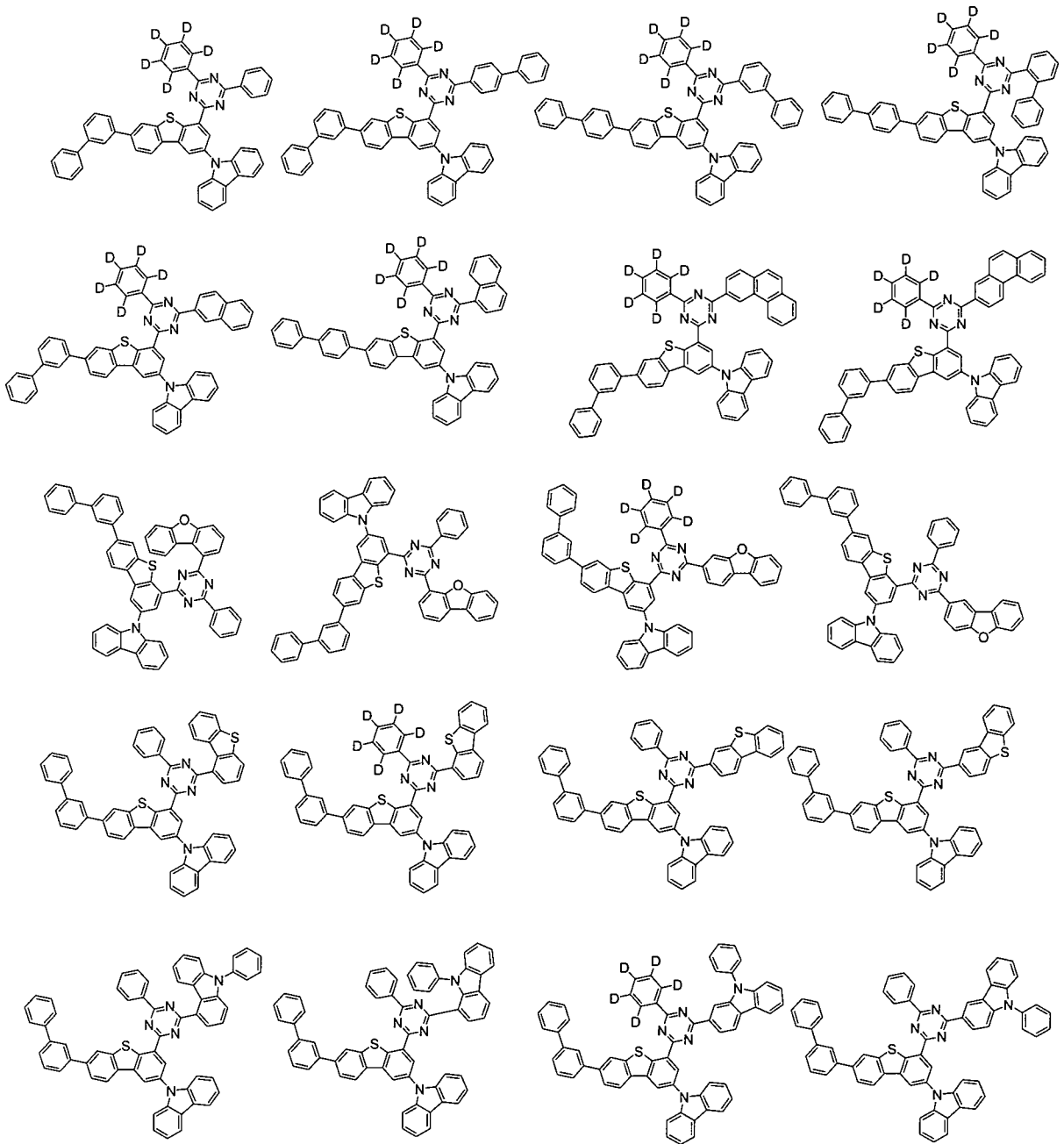


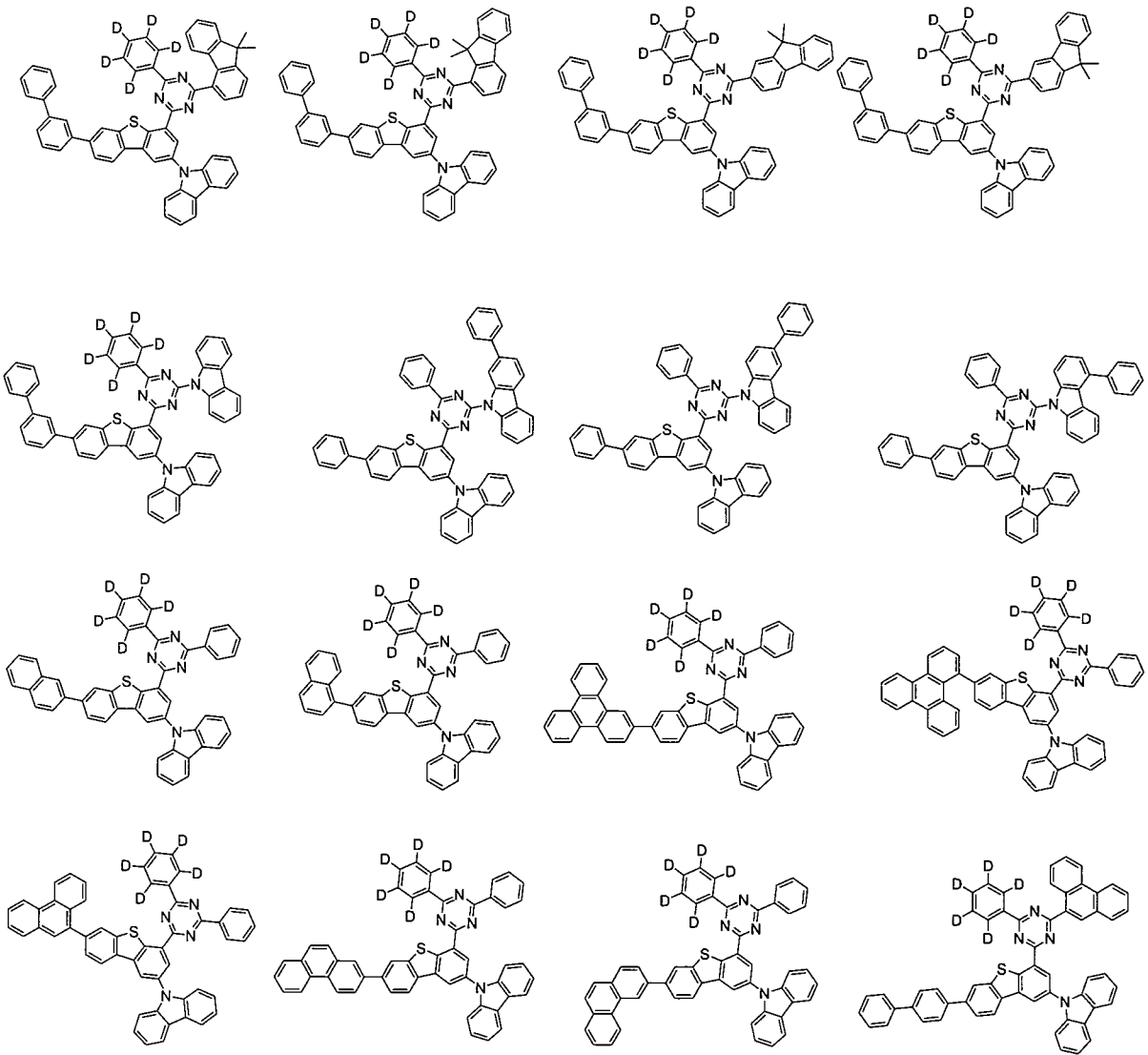


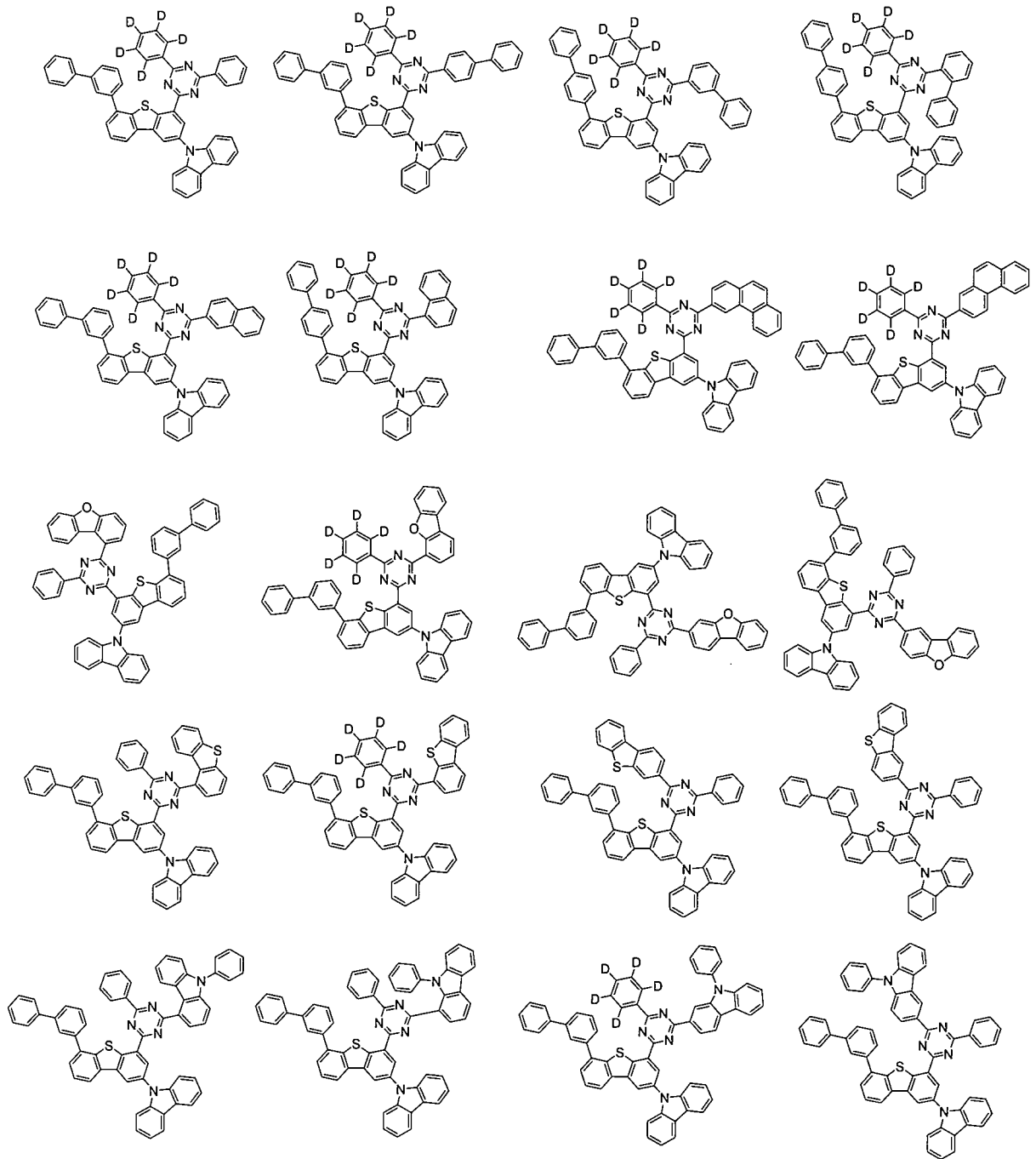


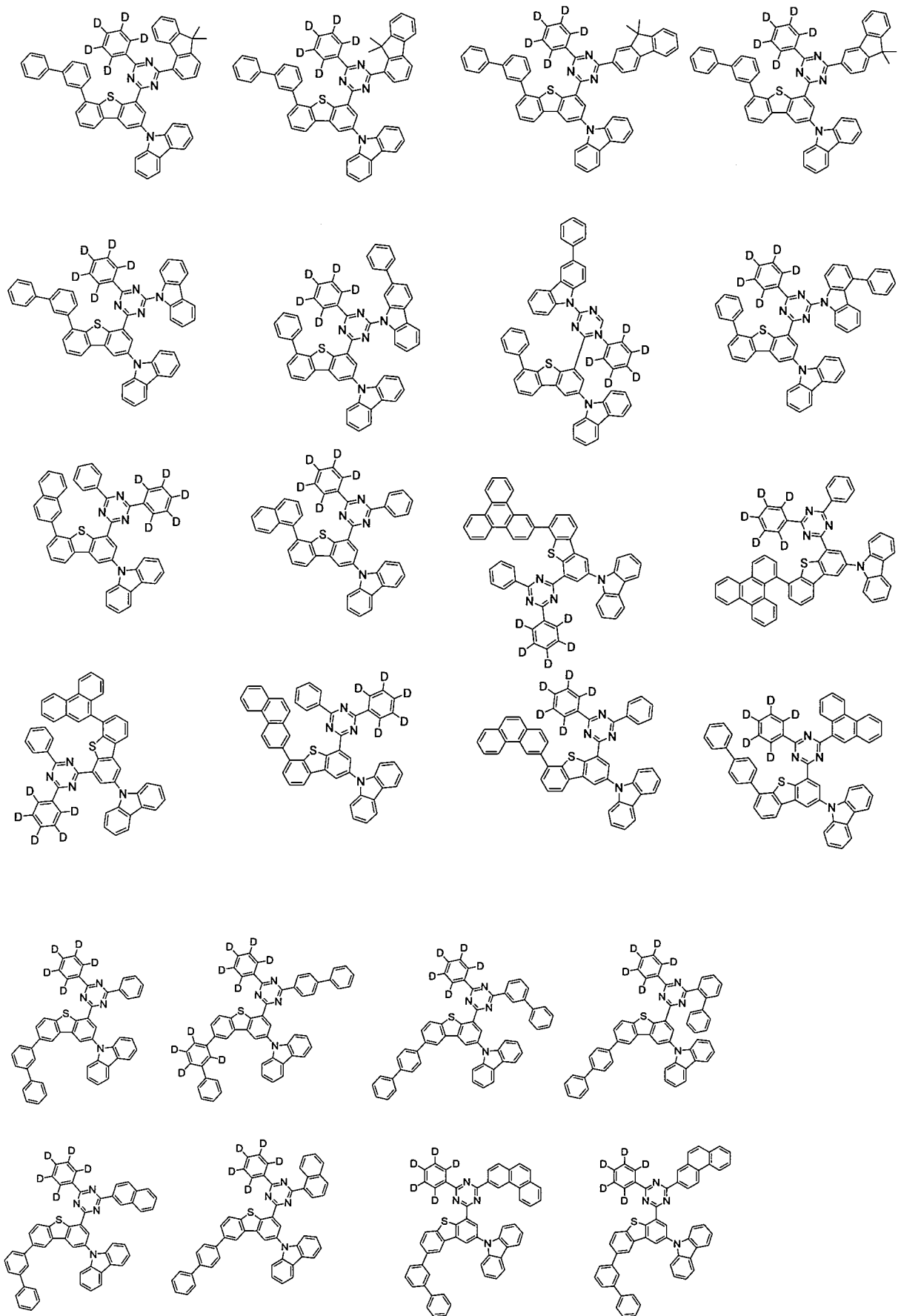


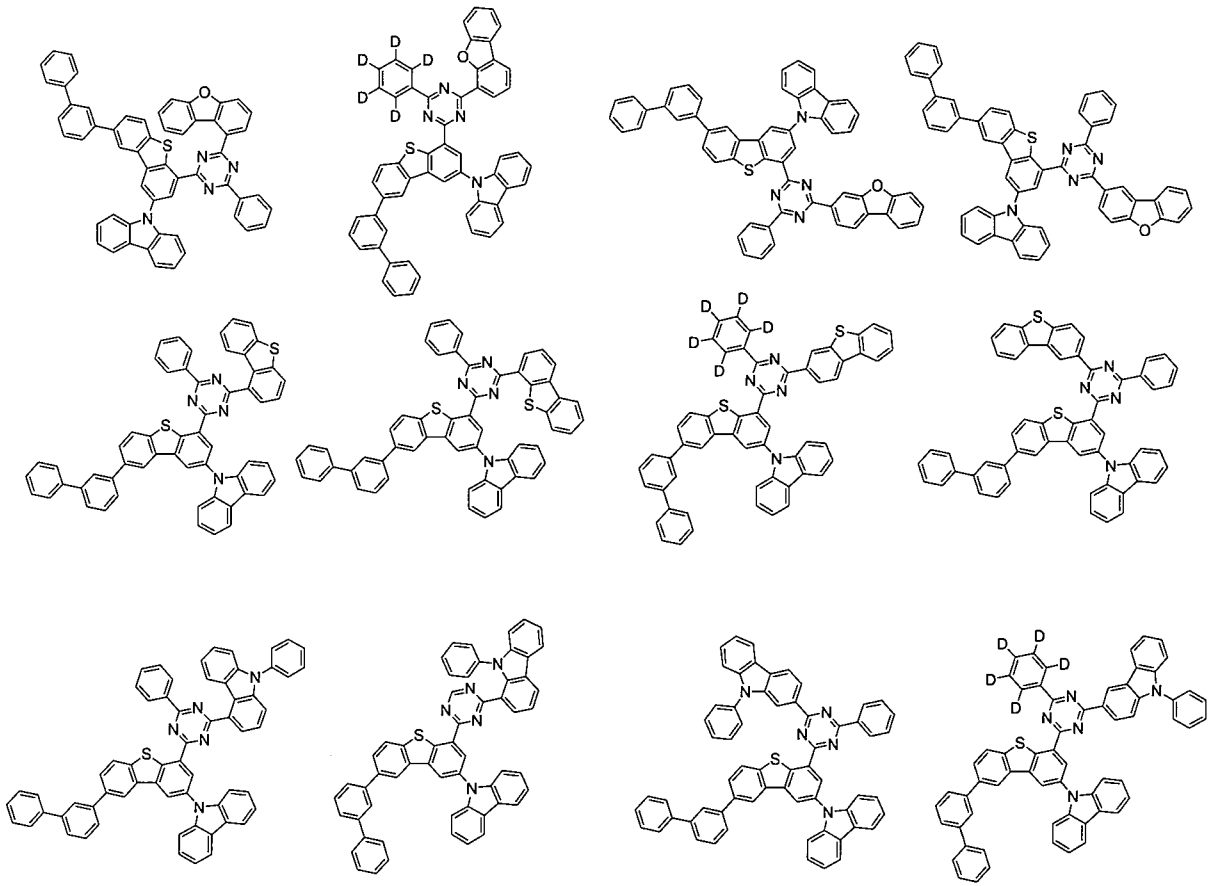


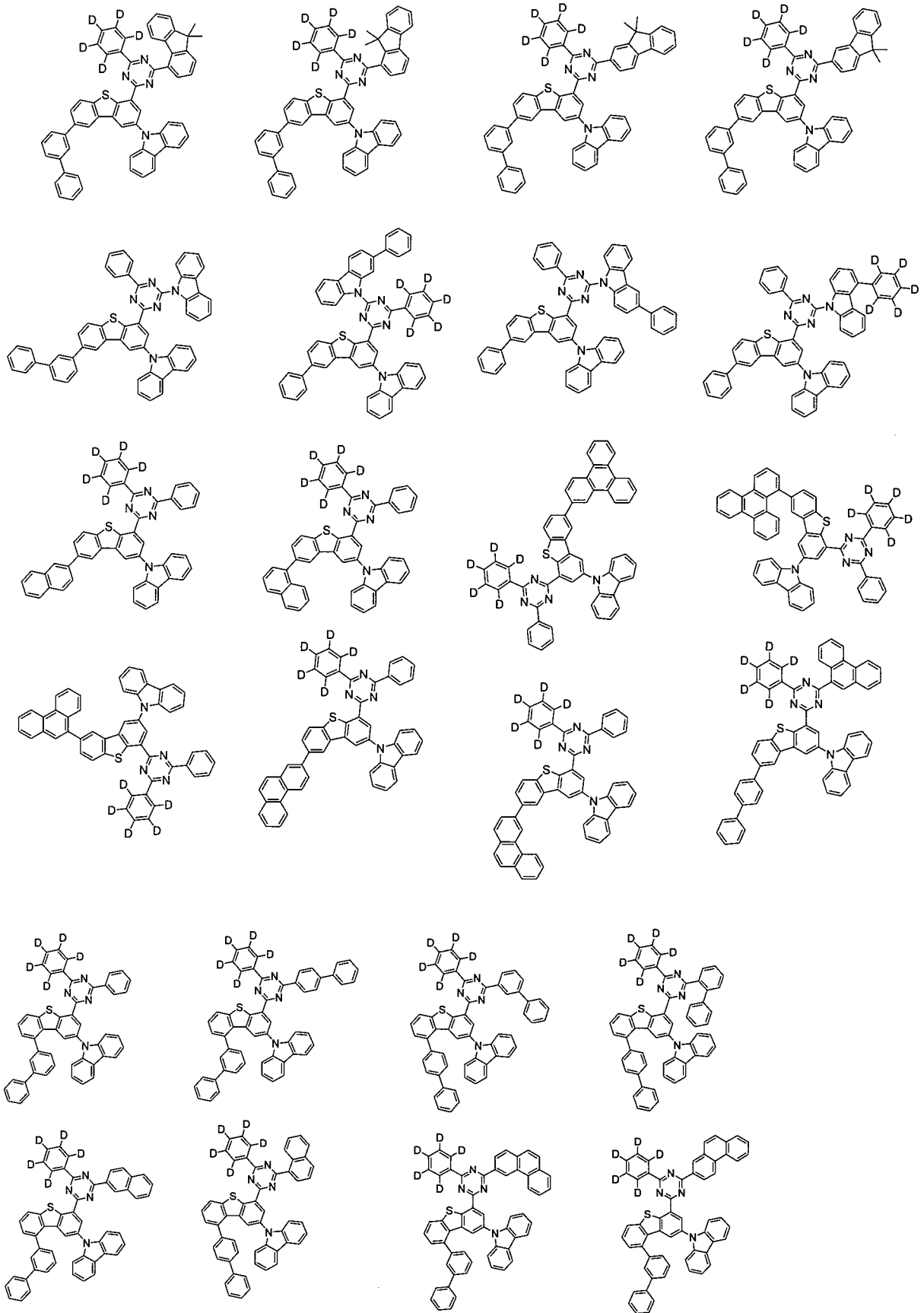


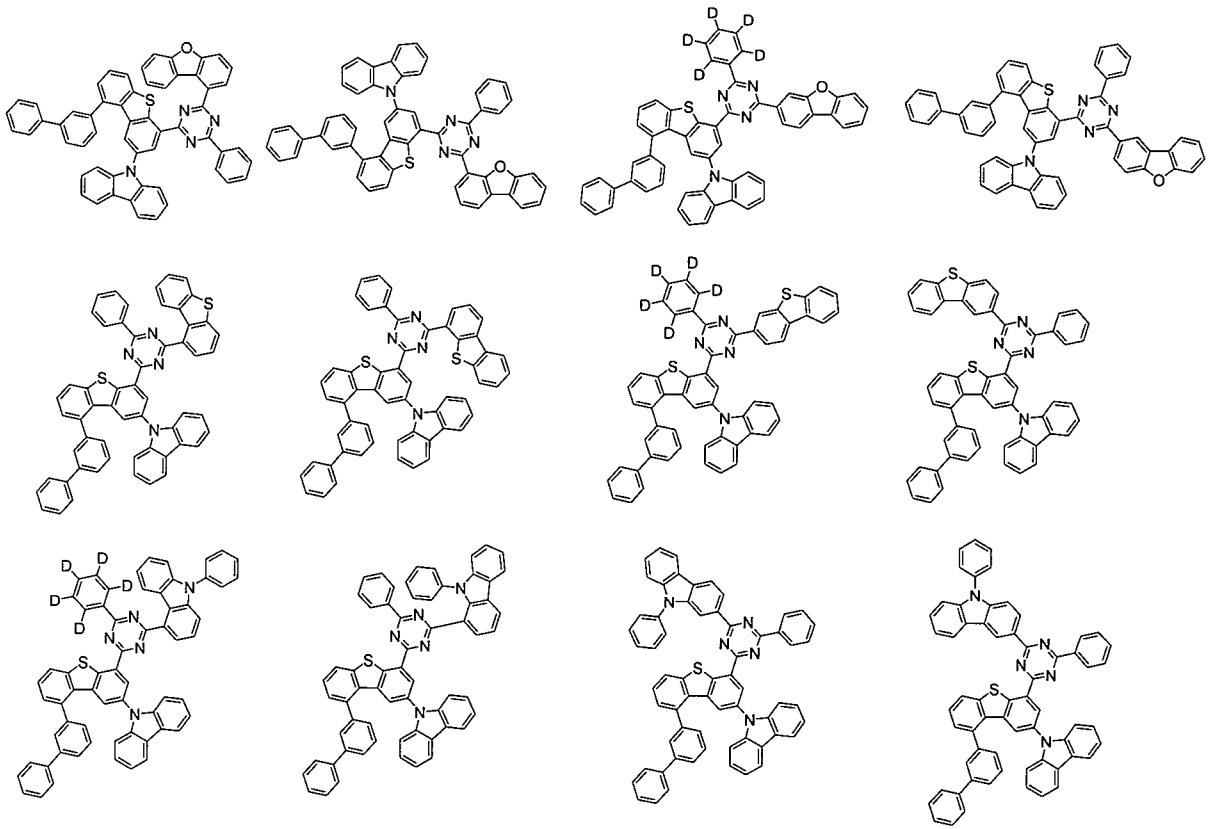


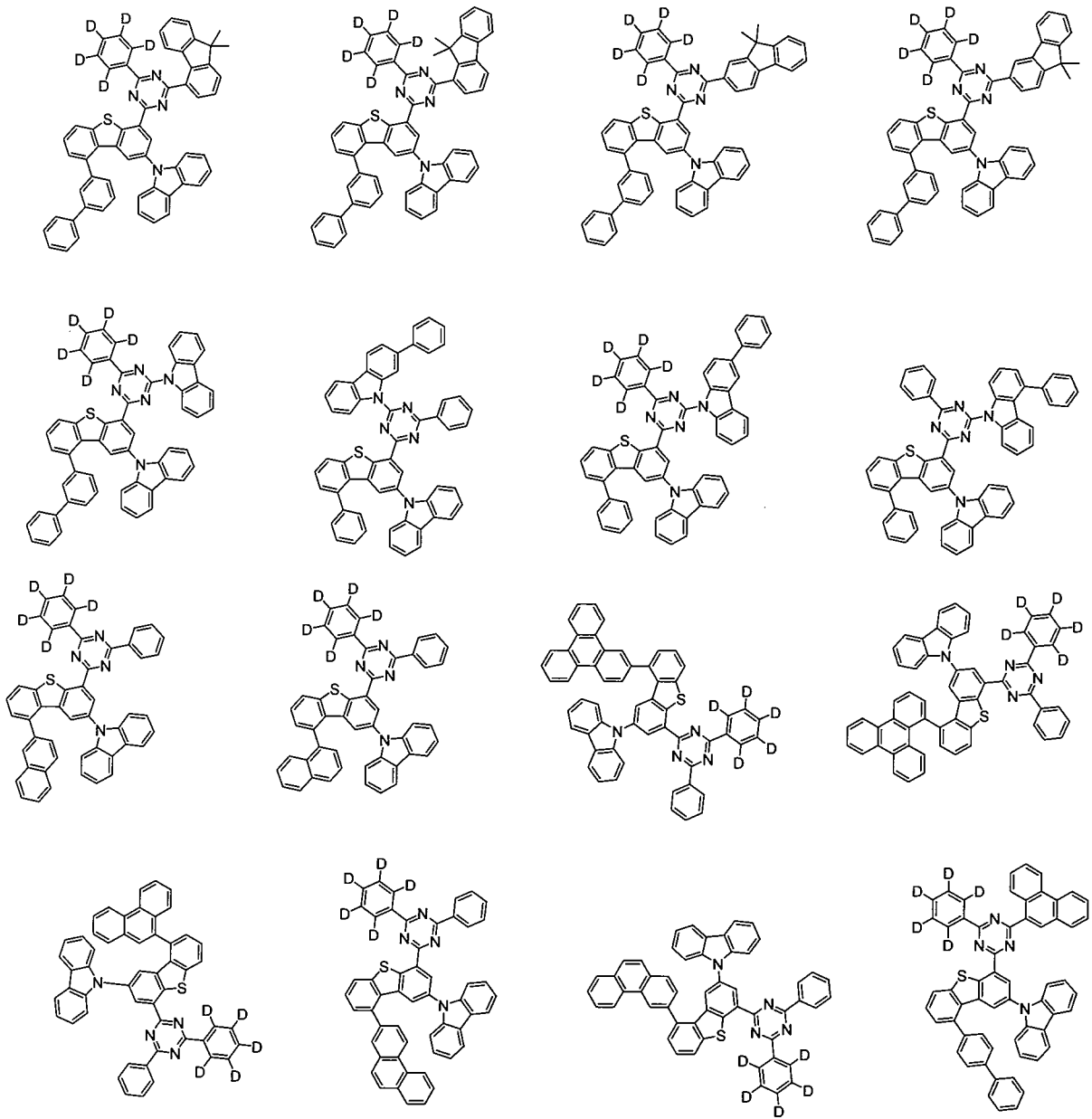


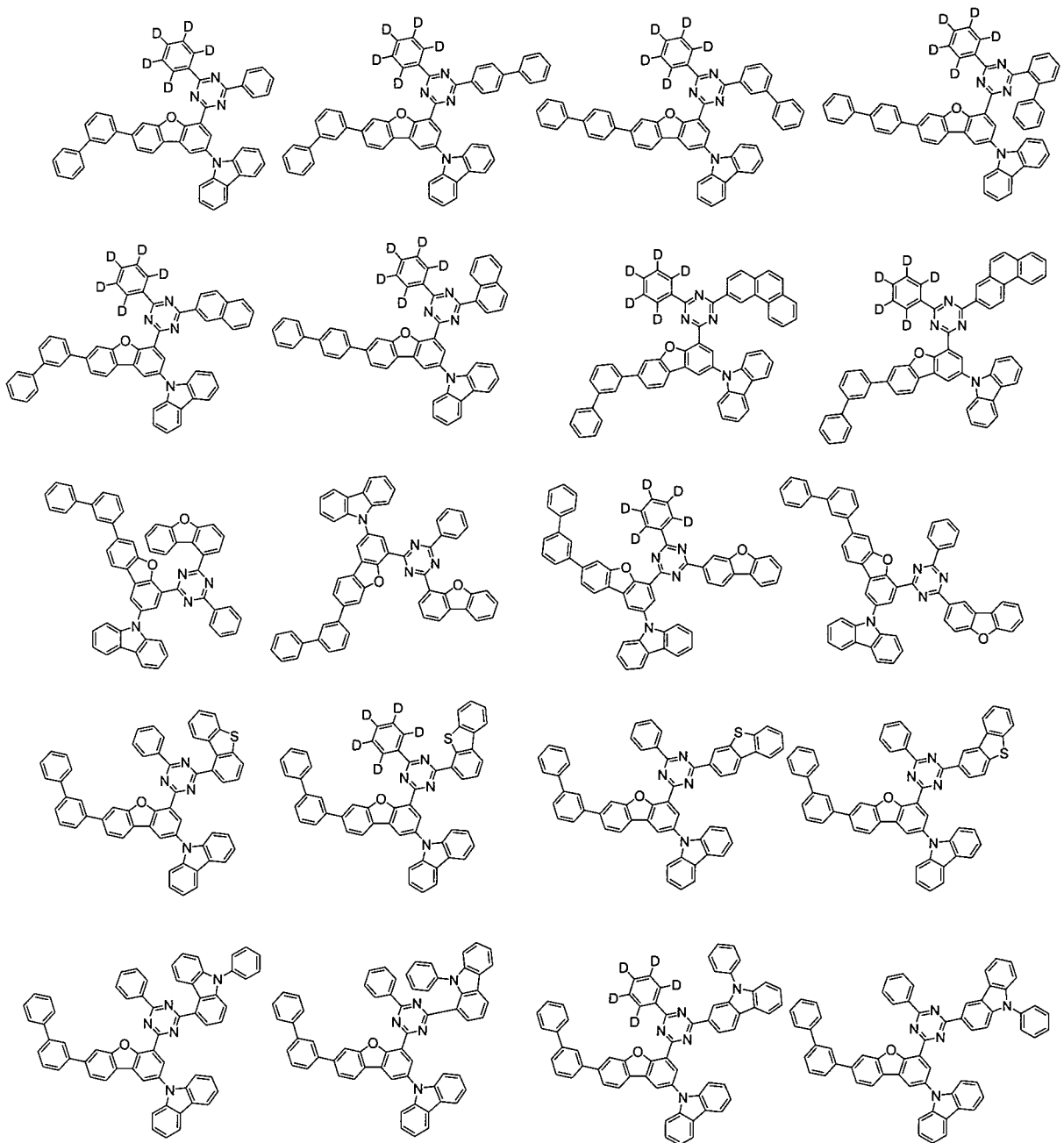


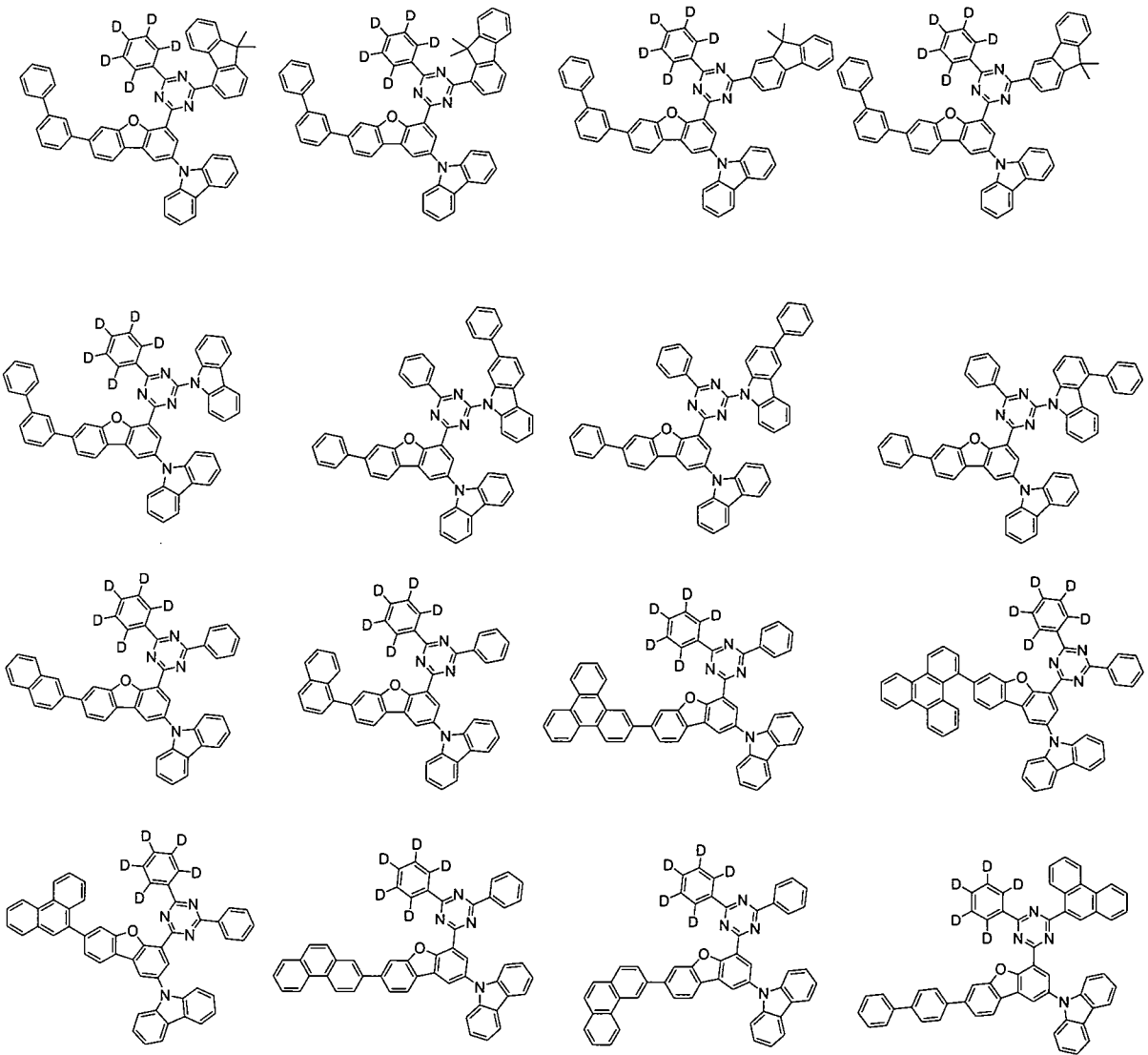


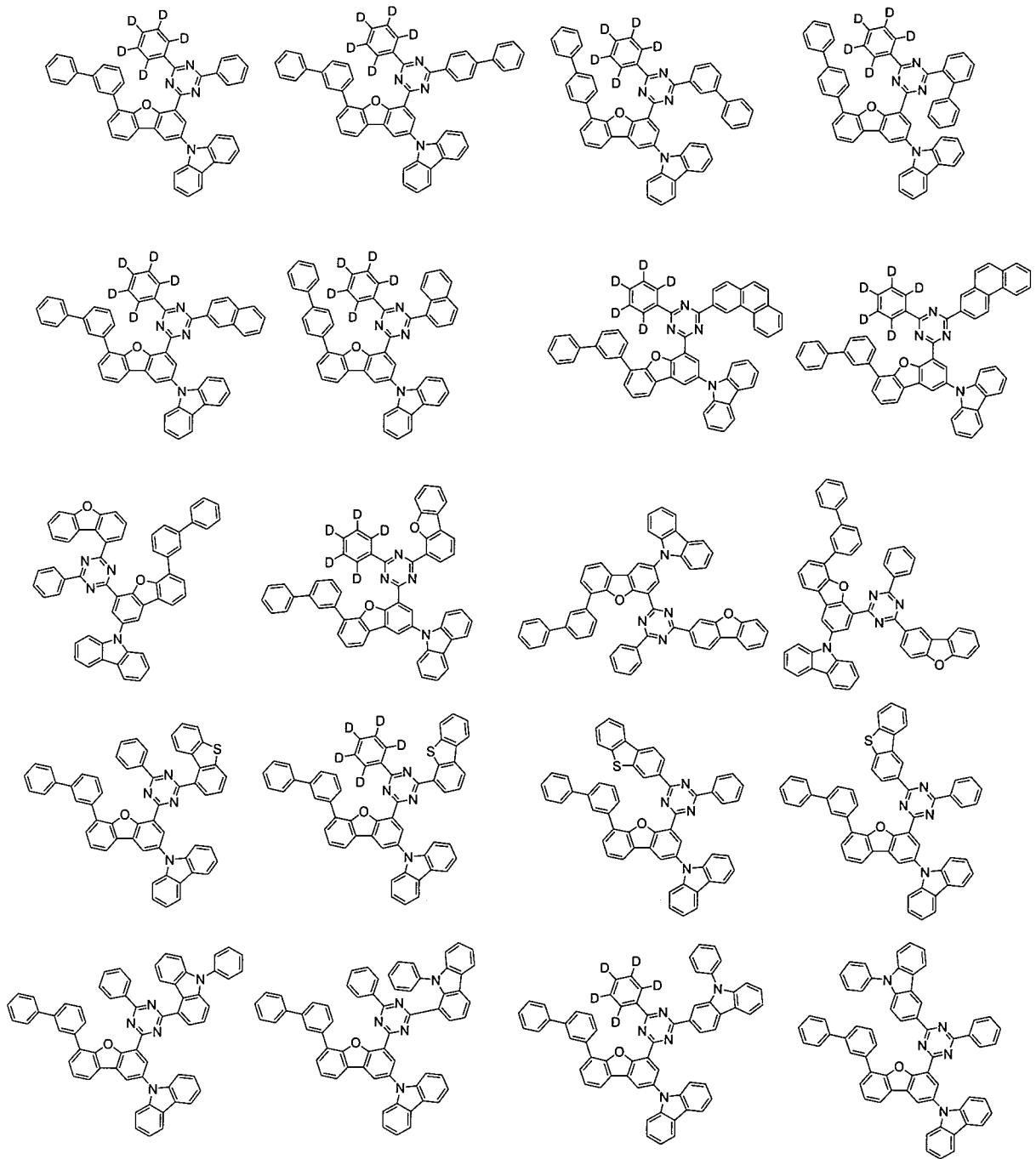


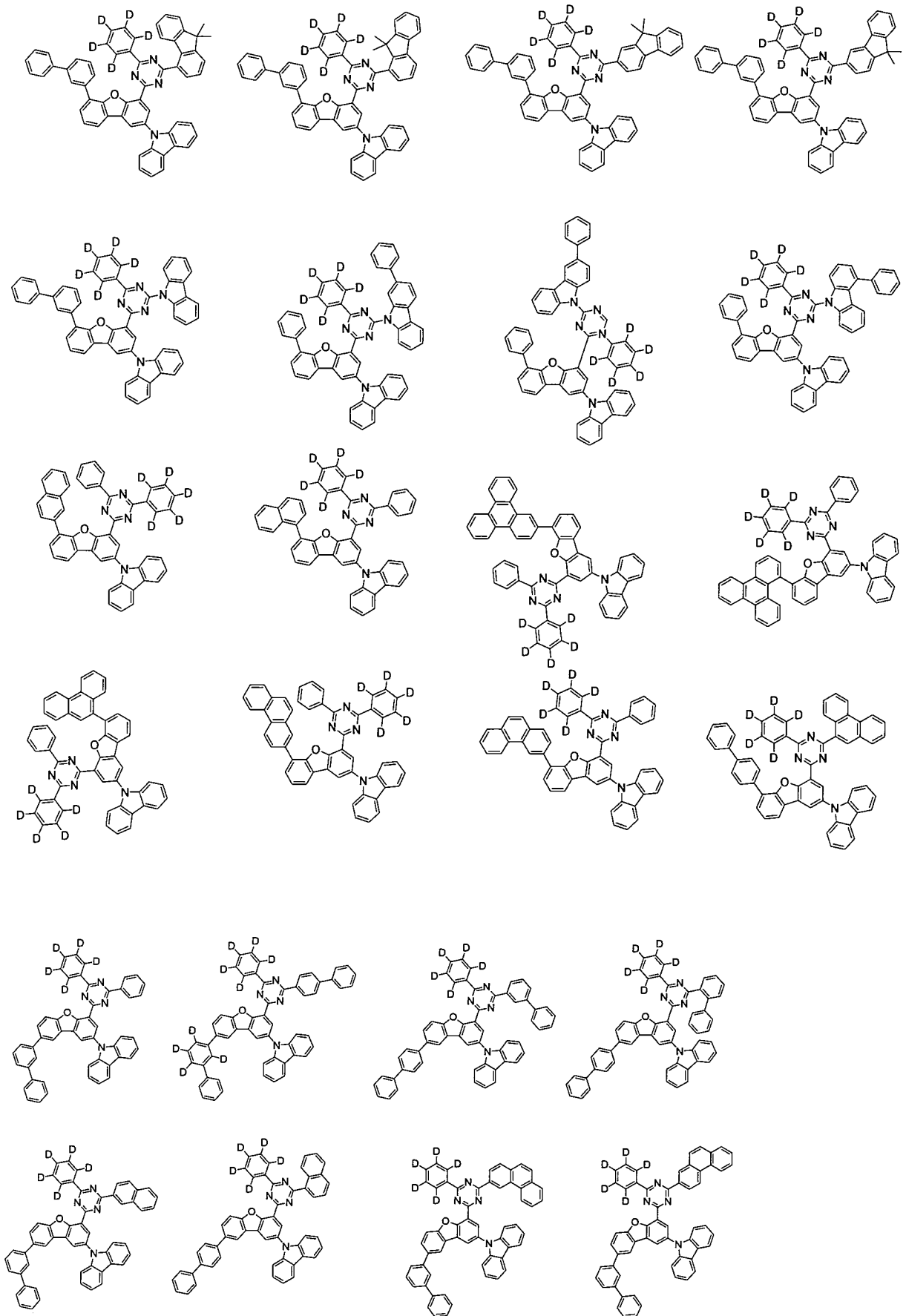


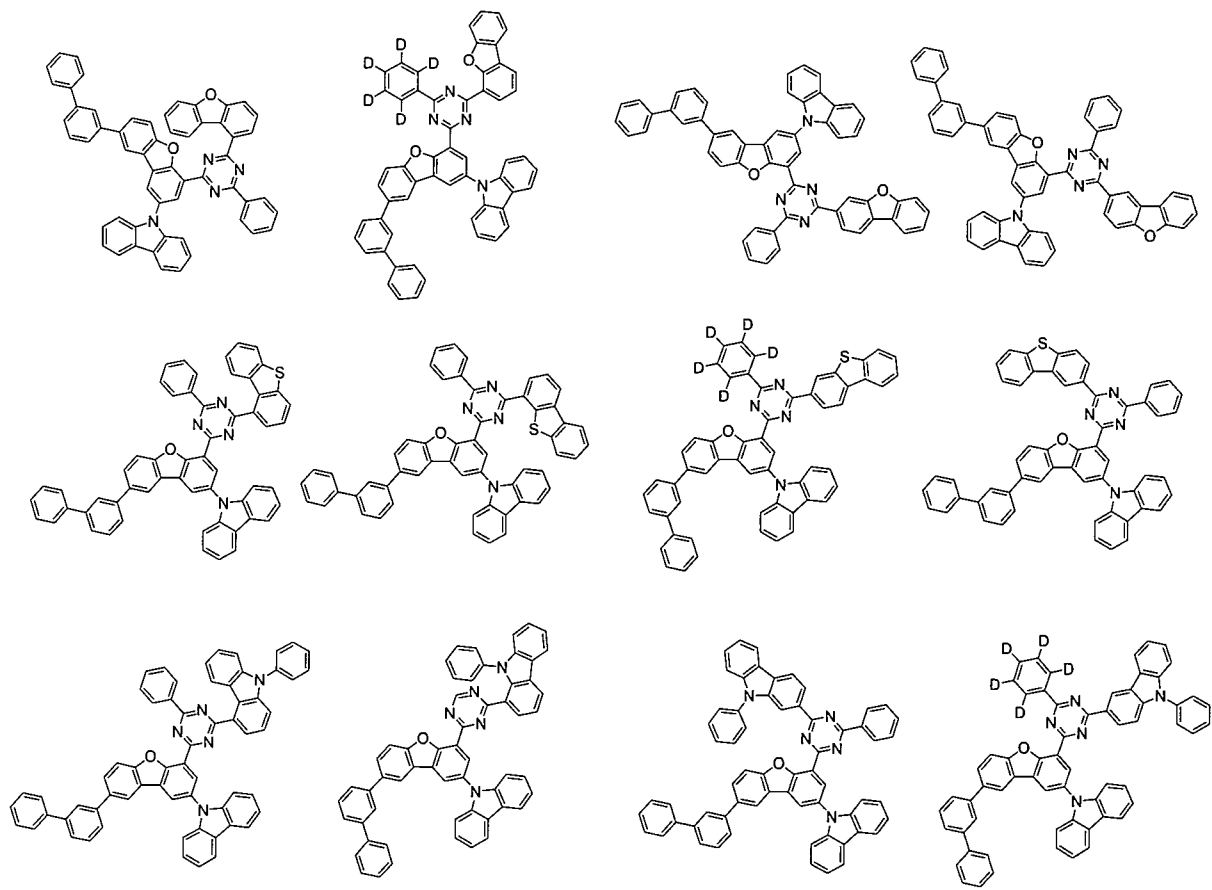


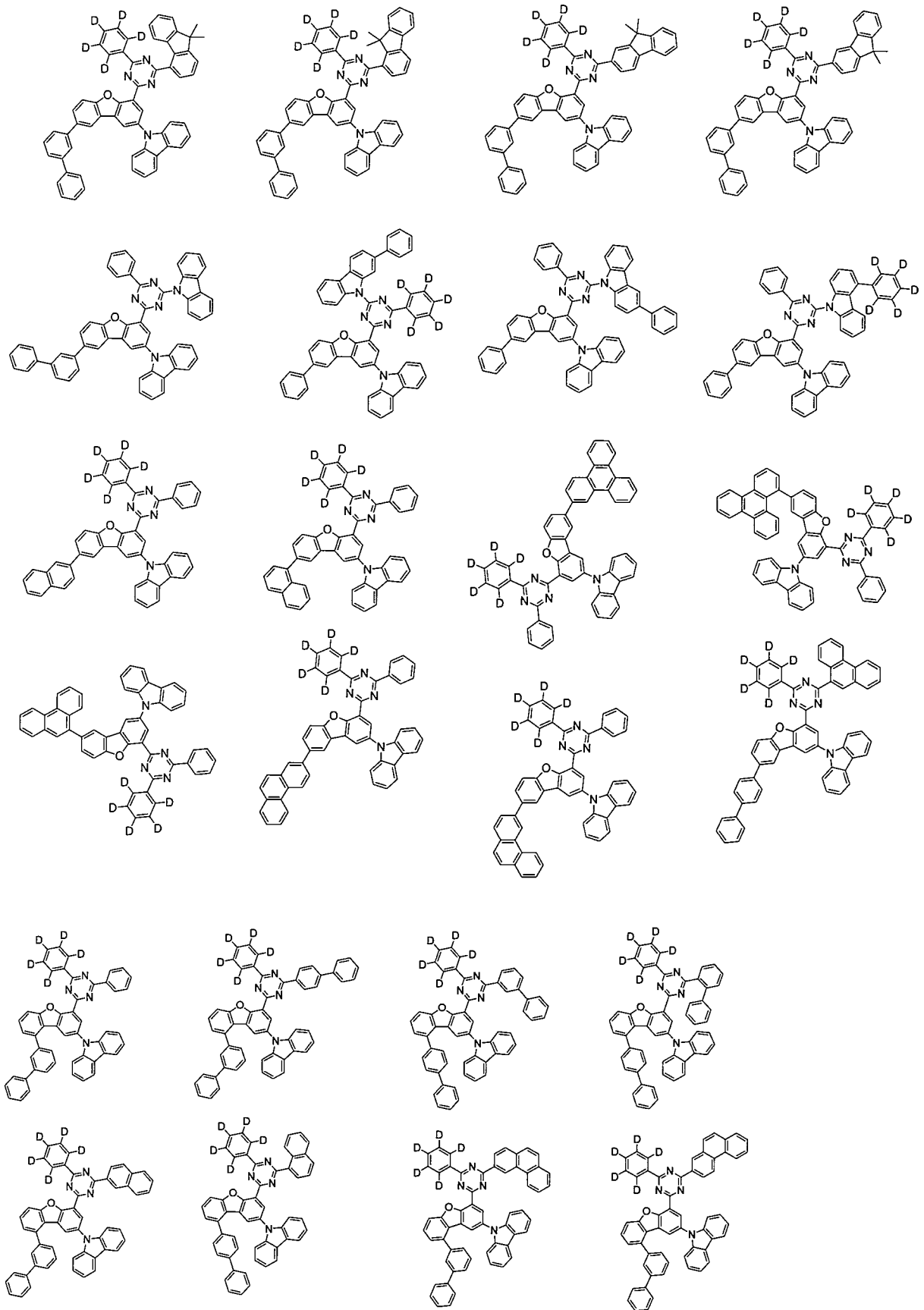


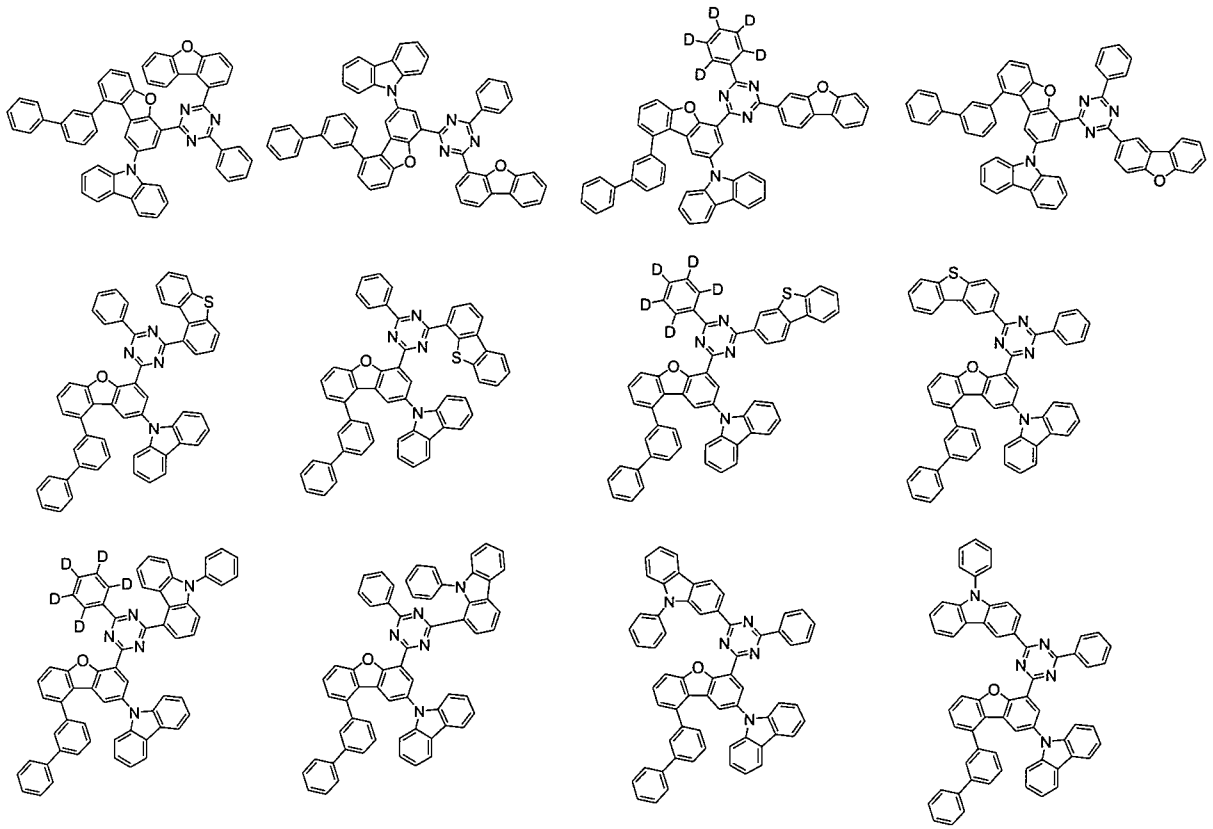


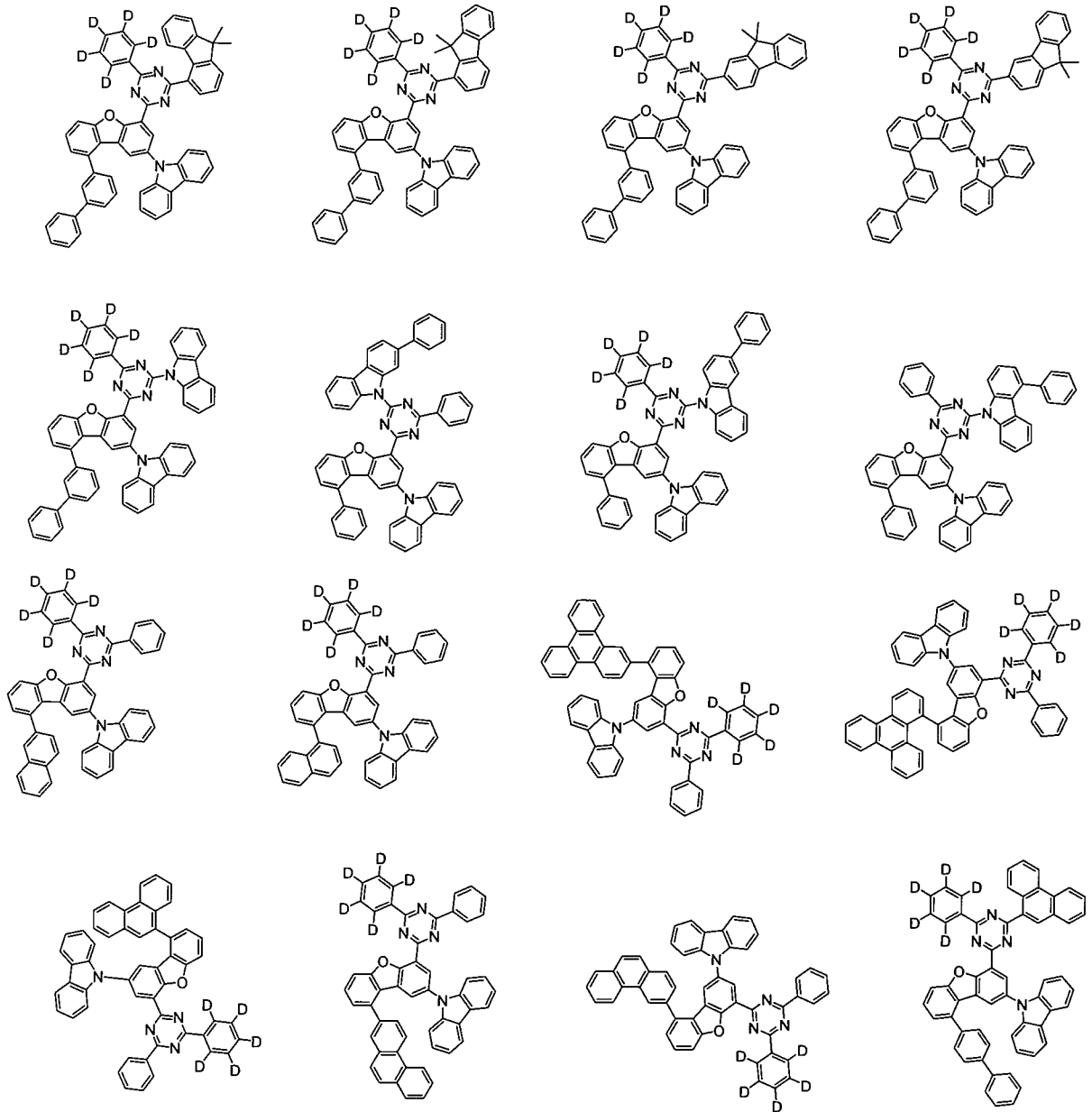












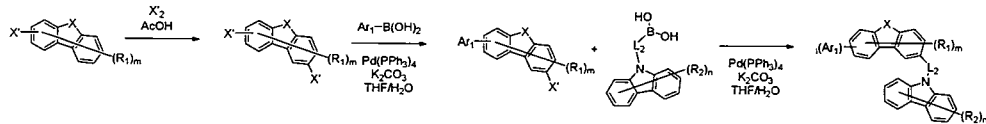
본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 5 디벤조퓨란(디벤조사이오펜)의 코어 구조의 한쪽 벤젠 고리에 카바졸계 치환기 및 트리아진(피리미딘)계 치환기를 동시에 포함하고, 다른 한쪽 벤젠 고리에 아릴 치환기를 포함하는 구조적 특성으로 열 안정성이 개선되며, 동시에 고효율, 저 구동 전압, 고휘도 및 장수명 등을 가질 수 있다. 특히, 본원발명에서 Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 동시에, 동일하거나 상이한 치환 또는 비치환된 10 C₆₋₆₀ 아릴인 경우에, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 중 어느 하나는 중수소로 4 이상 치환되는데, 이로부터 LUMO가 안정화 되므로 중수소가 치환되지 않고, 말단 Ar₁, Ar₂

및 Ar₃ 모두 아릴인 구조의 화합물을 채용한 유기 발광 소자에 비하여, 개선된 장수명 특성을 가질 수 있다. 또한, 전자 특성이 강한 트리아진에 헤테로아릴기를 치환함으로써 정공과 전자 밸런스가 잘 맞춰져 소자의 효율 및 수명 측면에서 장점을 가질 수 있다.

5

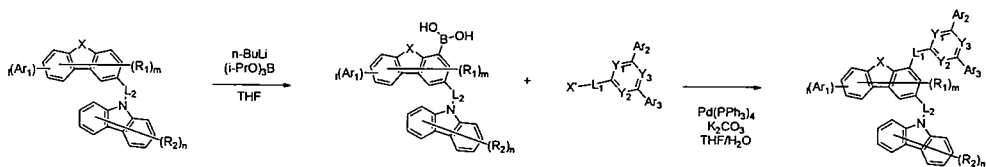
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1-1 및 반응식 1-2을 거쳐 제조할 수 있다.

[반응식 1-1]



10

[반응식 1-2]



상기 반응식 1-1 및 1-2서, X'는 할로젠이고, 바람직하게는, 브로모 또는 클로로이고, 나머지 치환기에 대한 설명은 앞서 정의한 바와 같다.

상기 반응은 Suzuki coupling 반응으로 팔라듐 촉매와 염기 존재 하에
 15 수행하는 것이 바람직하며, 상기 반응을 위한 반응물 및 촉매 등은 당업계에 알려진 바에 따라 변경이 가능하다. 상기 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다. 아울러, 치환기를 복수개 도입하는 경우, 해당 단계를 반복하여 수행하여 구현될 수 있다(예를 들면, 복수개의 Ar₁의 도입은 반응식 1-1에서 첫 번째 단계를 여러 번 수행하여 구현될 수 있다. 이 경우, 목적하는
 20 구조를 도입하기 위해 당 분야에서 알려진 보호기 및 탈보호기 반응도 함께 수행될 수 있다.)

또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 일례로, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물 층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

본 발명의 유기 발광 소자의 유기물 층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물 층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

또한, 상기 유기물 층은 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함할 수 있고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

또한, 상기 유기물 층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

또한, 상기 유기물 층은 전자수송층, 또는 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층, 또는 전자주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

또한, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자 주입 및 전자 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 특히, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 6.0 eV 이상의 깊은 HOMO 준위, 높은 삼중항 에너지(ET), 및 정공 안정성을 가지고 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 전자 주입 및 전자 수송을 동시에 할 수 있는 유기물 층에 사용할 경우, 당업계에서 사용하는 n-형 도펀트를 혼합하여 사용할 수 있다.

또한, 상기 유기물 층은 발광층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 기판 상에 양극, 1층 이상의

유기물 층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물 층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는

5 도 1 및 2에 예시되어 있다.

도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다.

10

도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.

15

본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 유기물 층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른

20 물질로 형성될 수 있다.

예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은

25 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물 층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을

30 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물 층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

10

일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.

상기 양극 물질로는 통상 유기물 층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SNO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 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.

상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성

5 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물 층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.

10 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로 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.

15

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 예로 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

25

상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란

30

화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 5 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 사이클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 10 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

상기 전자수송층은 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 15 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 캐소드 물질의 예는 낮은 일함수를 가지고 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 20 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.

상기 전자 주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 25 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이에탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 30 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

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

10

본 발명에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

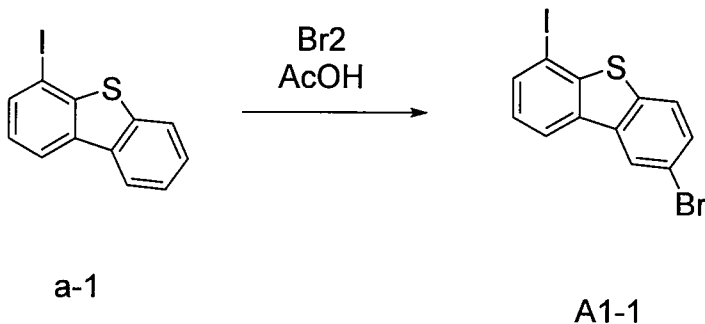
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조를 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

20

<제조예>

제조예 1-1: 중간체 화합물 B의 제조



25

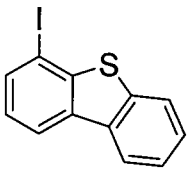
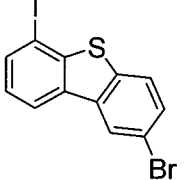
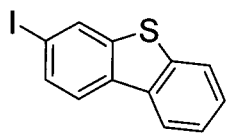
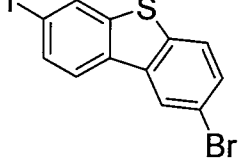
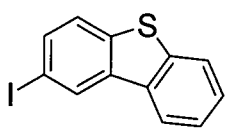
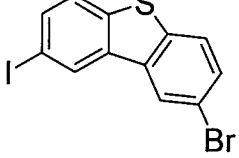
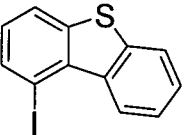
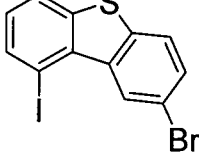
질소 분위기에서 건조된 둥근 플라스크에 화합물 a-1(4-

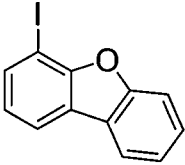
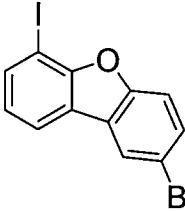
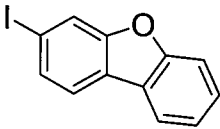
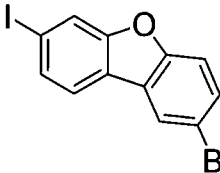
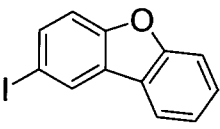
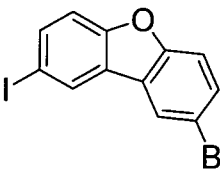
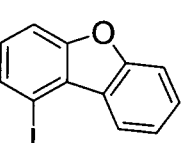
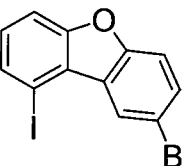
아이오도다이벤조사이오펜)(20g, 96.73mmol)를 넣고 클로로포름 500ml를 넣었다. 그 후 브로민(12.4ml, 24.1mmol) 2.5eq를 적가한 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 디클로로메탄과 티오황산나트륨 수용액으로 추출한 뒤, 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과된 유기층을 5 감압 농축 한 후 에틸아세테이트와 헥산으로 결정하여 흰색 화합물 A1-1 (28g, 75%, MS:[M+H]⁺=388)를 얻었다.

제조예 1-2 내지 1-8: 중간체 화합물 B의 제조

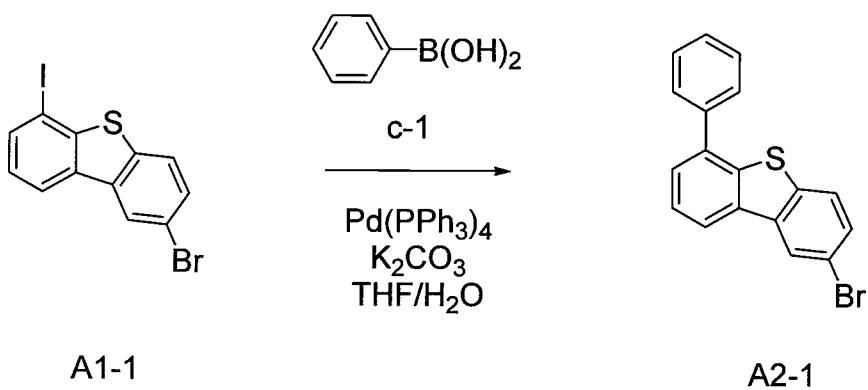
상기 제조예 1-1에서 반응물로 화합물 a-1(4-아이오도다이벤조사이오펜) 대신 하기 표 1의 반응물 A를 사용한 것을 제외하고 화합물 A1-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 중간체 화합물 B를 제조하였다.

【표 1】

구분	반응물 A	중간체 화합물 B	색	수율(%)	MS:[M+H] ⁺
제조예 1-1	 a-1	 A1-1	흰색	75%	388
제조예 1-2	 a-2	 A1-2	흰색	82%	388
제조예 1-3	 a-3	 A1-3	흰색	69%	388
제조예 1-4	 a-4	 A1-4	흰색	71%	388

	a-4	A1-4			
제조예 1-5	 b-1	 B1-1	흰색	55%	388
제조예 1-6	 b-2	 B1-2	흰색	60%	388
제조예 1-7	 b-3	 B1-3	흰색	62%	388
제조예 1-8	 b-4	 B1-4	흰색	59%	388

제조예 2-1: 중간체 화합물 D의 제조

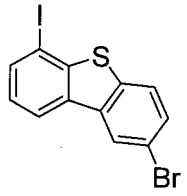
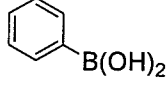
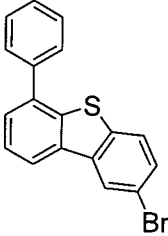
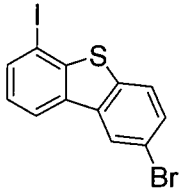
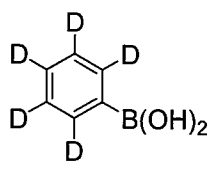
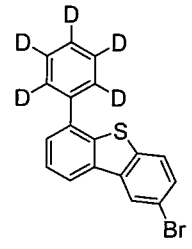
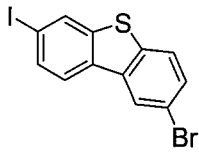
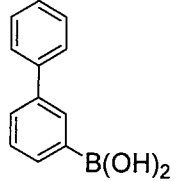
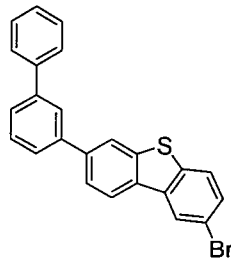


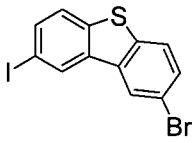
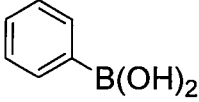
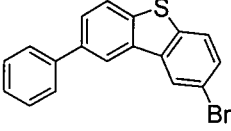
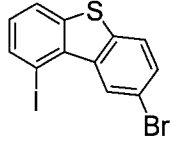
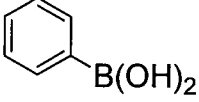
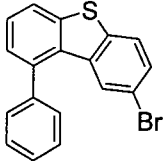
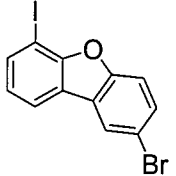
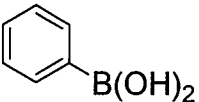
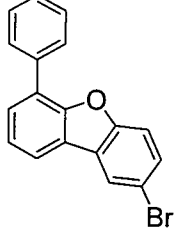
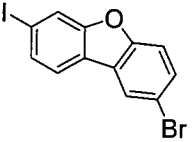
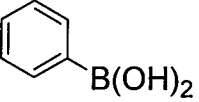
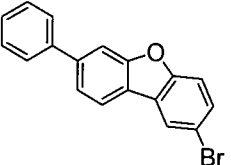
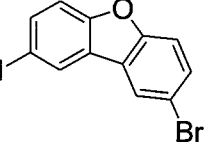
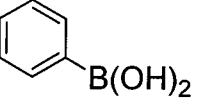
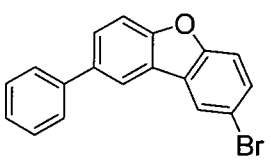
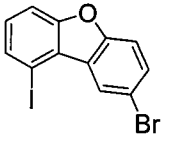
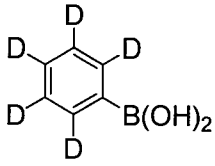
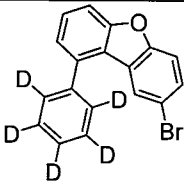
질소 분위기에서 화합물 A1-1(20 g, 51.41 mmol)와 화합물 c-1(페닐보론산)(6.27 g, 51.41 mmol)을 테트라하이드로퓨란(150 mL)에 녹인 후 탄산칼륨(21.3 g, 154.2mmol)을 물(50 mL)에 녹여 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.8 g, 1.54 mmol)을 넣은 후 9시간 동안 5 60°C에서 가열 및 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 필터하여 물과 에탄올로 씻어준 뒤 건조하여 화합물 A2-1을 제조하였다(15.2 g, 수율 87%, MS:[M+H]⁺= 338).

제조예 2-2 내지 2-9: 중간체 화합물 D의 제조

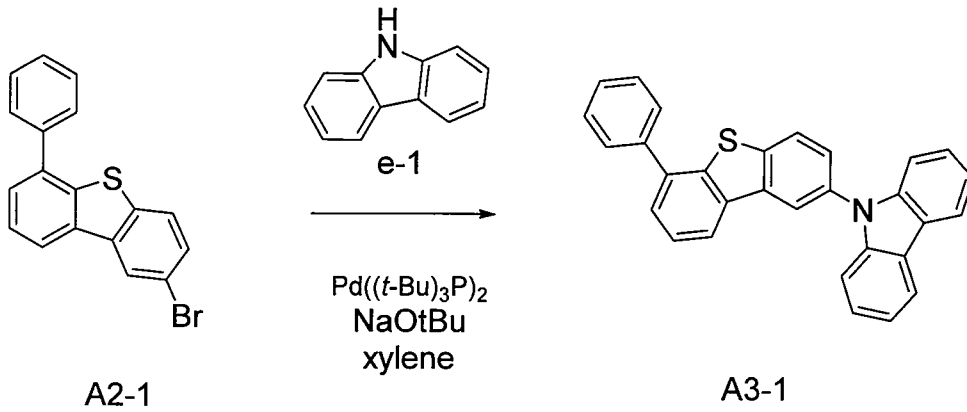
10 상기 제조예 2-1에서 화합물 A1-1 및 화합물 c-1(페닐보론산) 대신 하기 표 2의 중간체 화합물 B 및 중간체 화합물 C를 사용한 것을 제외하고 제조예 2-1과 동일한 방법으로 중간체 화합물 D를 제조하였다.

【표 2】

구분	중간체 화합물B	중간체 화합물 C	중간체 화합물D	색	수율	MS :[M+H] ⁺
제조예 2-1	 A1-1	 c-1	 A2-1	흰색	87%	338
제조예 2-2	 A1-1	 c-2	 A2-2	흰색	77%	344
제조예 2-3	 A1-2	 c-3	 A2-3	흰색	89%	415

			A2-3			
제조예 2-4	 A1-3	 c-1	 A2-4	흰색	94%	338
제조예 2-5	 A1-4	 c-1	 A2-5	흰색	81%	338
제조예 2-6	 B1-1	 c-1	 B2-1	흰색	87%	323
제조예 2-7	 B1-2	 c-1	 B2-2	흰색	92%	323
제조예 2-8	 B1-3	 c-1	 B2-3	흰색	90%	323
제조예 2-9	 B1-4	 c-2	 B2-4	흰색	89%	328

제조예 3-1: 중간체 화합물 F의 제조

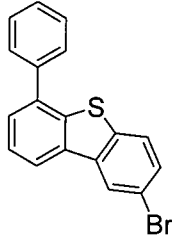
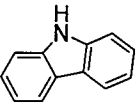
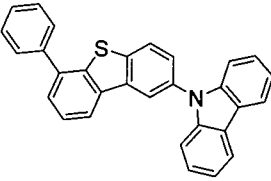


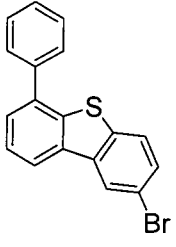
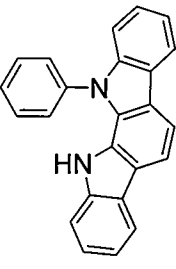
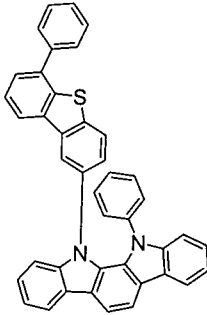
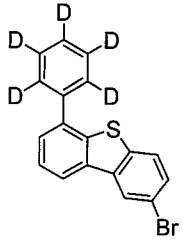
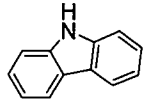
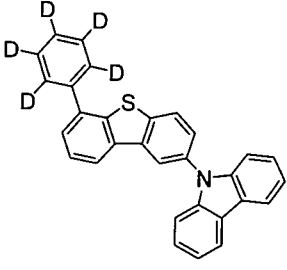
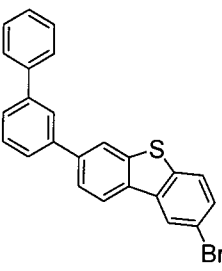
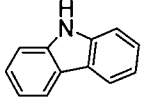
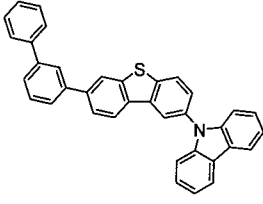
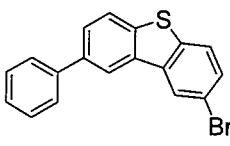
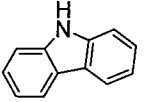
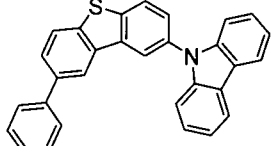
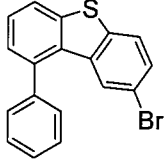
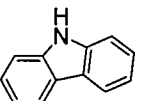
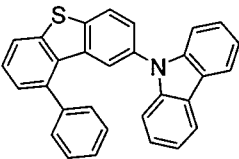
질소 분위기에서 화합물 A2-1(15 g, 44.22 mmol)와 화합물 e-1(9H-카바졸)(7.39 g, 44.22 mmol)을 자일렌(150 mL)에 녹인 후 NaOtBu (6.4 g, 66.32 mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.7 g, 1.33 mmol)을 넣은 후 12시간 동안 가열 및 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 필터하여 물과 에탄올로 씻어준 뒤 건조하여 화합물 A1-1을 제조하였다(13.9 g, 수율 74%, MS:[M+H]⁺= 426).

제조예 3-2 내지 3-10: 중간체 화합물 F의 제조

10 상기 제조예 3-1에서 화합물 A2-1 및 화합물 e-1(페닐보론산) 대신 하기 표 3의 중간체 화합물 D 및 중간체 화합물 E를 사용한 것을 제외하고 제조예 3-1과 동일한 방법으로 중간체 화합물 F를 제조하였다.

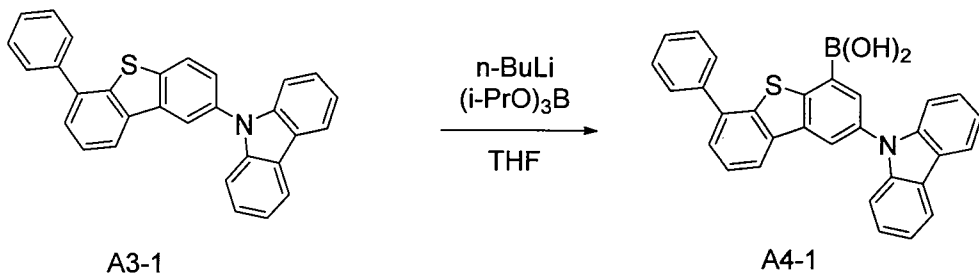
【표 3】

구분	중간체 화합물 D	중간체 화합물 E	중간체 화합물 F	색	수율	MS :[M+H] +
제조예 3-1	 A2-1	 e-1	 A3-1	노랑	74%	426

<p>제조 예 3-2</p>	 A2-1	 e -2	 A3-2	<p>노 랑</p>	<p>75%</p>	<p>591</p>
<p>제조 예 3-3</p>	 A2-2	 e-1	 A3-3	<p>노 랑</p>	<p>72%</p>	<p>431</p>
<p>제조 예 3-4</p>	 A2-3	 e-1	 A3-4	<p>노 랑</p>	<p>65%</p>	<p>502</p>
<p>제조 예 3-5</p>	 A2-4	 e-1	 A3-5	<p>노 랑</p>	<p>88%</p>	<p>426</p>
<p>제조 예 3-6</p>	 A2-5	 e-1	 A3-6	<p>노 랑</p>	<p>72%</p>	<p>338</p>

제조 예 3-7	 B2-1	 e-1	 B3-1	노 랑	86%	410
제조 예 3-8	 B2-2	 e-1	 B3-2	노 랑	81%	410
제조 예 3-9	 B2-3	 e-1	 B3-3	노 랑	79%	410
제조 예 3- 10	 B2-4	 e-1	 B3-4	노 랑	77%	415

제조예 4-1: 화합물 A1-4의 제조



질소 분위기에서 건조된 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A3-1(14 g, 32.90 mmol)을 THF 150mL에 녹인 후 -78℃에서 1.6M n-BuLi (26.73mL, 42.77 mmol)을 천천히 적가한 후 실온에서 1시간 교반하였다. -78℃에서 반응 혼합물에

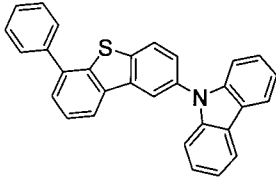
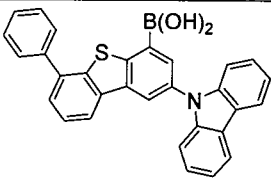
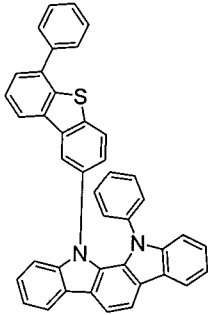
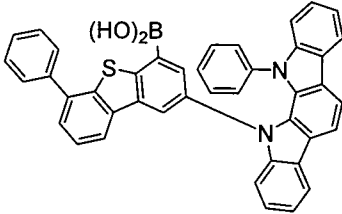
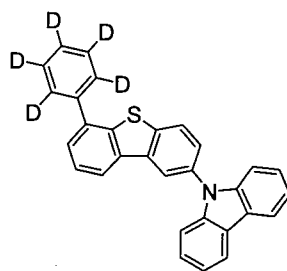
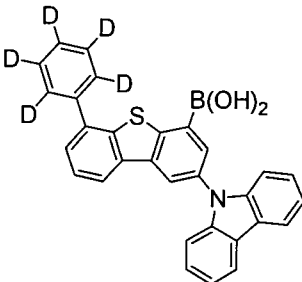
아이소프로필보레이트 (i-PrO)3B (26.5mL, 115.1mmol)을 적가한 후 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 완결 후 실온에서 염화암모늄수용액으로 추출한 후 유기층은 MgSO4로 건조하고 농축 한 뒤 에틸아세테이트로 재결정하여 화합물 A4-1를 얻었다. (10 g, 수율 65%, MS:[M+H]⁺= 470)

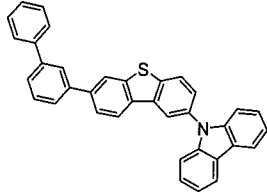
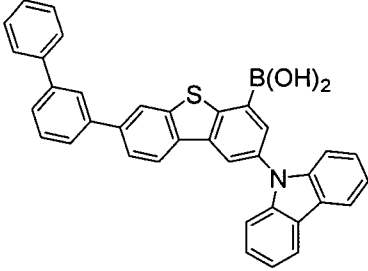
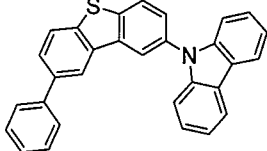
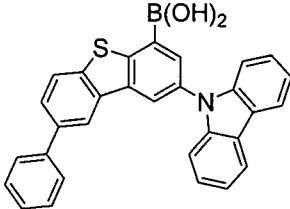
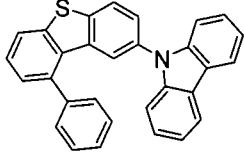
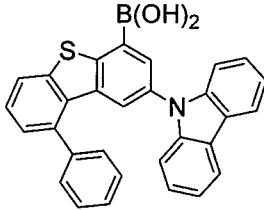
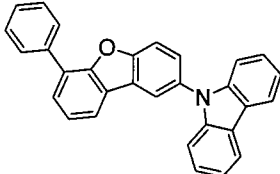
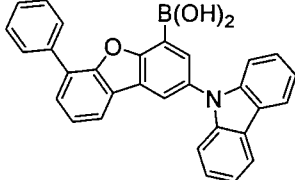
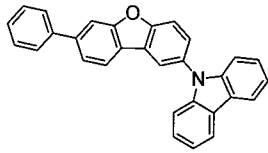
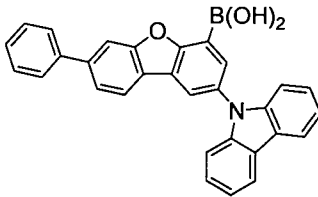
5

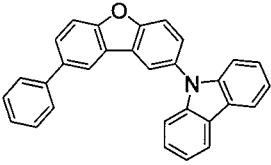
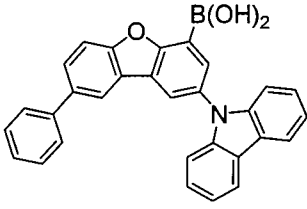
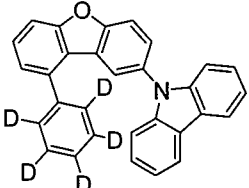
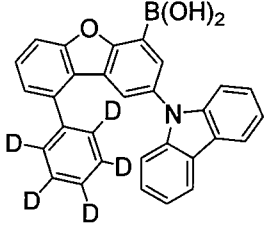
제조예 4-2 내지 3-10: 중간체 화합물 G의 제조

상기 제조예 4-1에서 화합물 A3-1 및 화합물 대신 하기 표 3의 중간체 화합물 F를 사용한 것을 제외하고 제조예 4-1과 동일한 방법으로 중간체 화합물 G를 제조하였다.

10 **【표 4】**

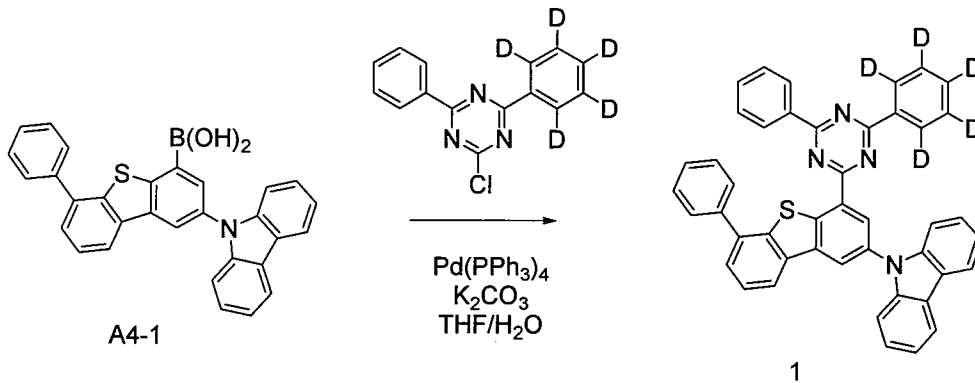
구분	중간체 화합물 F	중간체 화합물 G	색	수율	MS :[M+H] ⁺
제조예 4-1	 A3-1	 A4-1	흰색	65%	470
제조예 4-2	 A3-2	 A4-2	흰색	62%	635
제조예 4-3	 A3-3	 A4-3	흰색	69%	475

<p>제조예 4-4</p>	 <p>A3-4</p>	 <p>A4-4</p>	<p>흰색</p>	<p>70%</p>	<p>546</p>
<p>제조예 4-5</p>	 <p>A3-5</p>	 <p>A4-5</p>	<p>흰색</p>	<p>67%</p>	<p>470</p>
<p>제조예 4-6</p>	 <p>A3-6</p>	 <p>A4-6</p>	<p>흰색</p>	<p>63%</p>	<p>470</p>
<p>제조예 4-1</p>	 <p>B3-1</p>	 <p>B4-1</p>	<p>흰색</p>	<p>71%</p>	<p>454</p>
<p>제조예 4-8</p>	 <p>B3-2</p>	 <p>B4-2</p>	<p>흰색</p>	<p>76%</p>	<p>454</p>

<p>제조예 4-9</p>	 <p>B3-3</p>	 <p>B4-3</p>	<p>흰색</p>	<p>59%</p>	<p>454</p>
<p>제조예 4-10</p>	 <p>B3-4</p>	 <p>B4-4</p>	<p>흰색</p>	<p>77%</p>	<p>459</p>

<실시예>

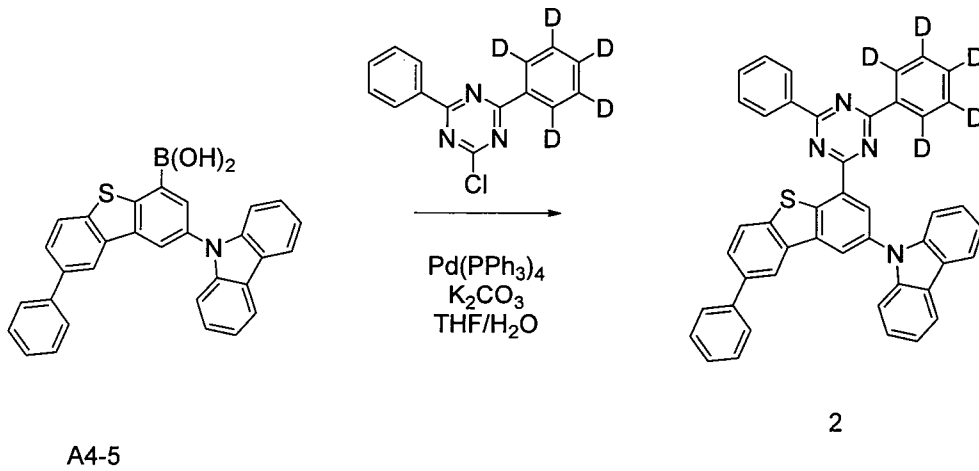
실시예 1: 화합물 1의 제조



5 화합물 A4-1(15 g, 31.96 mmol)과 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d₅)-1,3,5-triazine (8.71 g, 31.96mmol)을 THF (150 mL)에 녹인 후 Potassium carbonate(13.3 g, 211.10 mmol)을 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (1.1 g, 0.96 mmol)을 넣은 후 8시간 동안 가열 및 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물 층을 분리하여 제거한다. 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하여 감압농축

10 시키고 에틸아세테이트를 이용하여 재결정화한 뒤 여과하여 건조한 후 화합물 1을 제조하였다(15.7g, 수율 74%, MS:[M+H]⁺= 662).

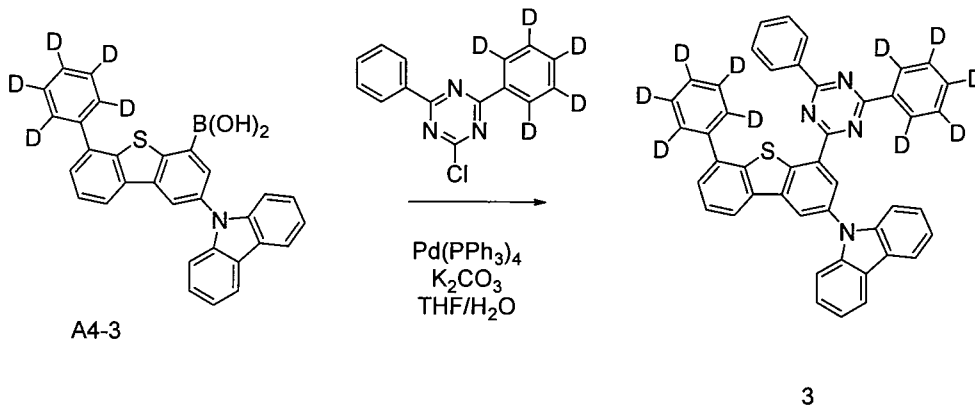
실시예 2: 화합물 2의 제조



화합물 A4-1 대신 화합물 A4-5를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 2를 제조하였다. (15.0 g, 수율 71%; MS:[M+H]⁺=662)

5

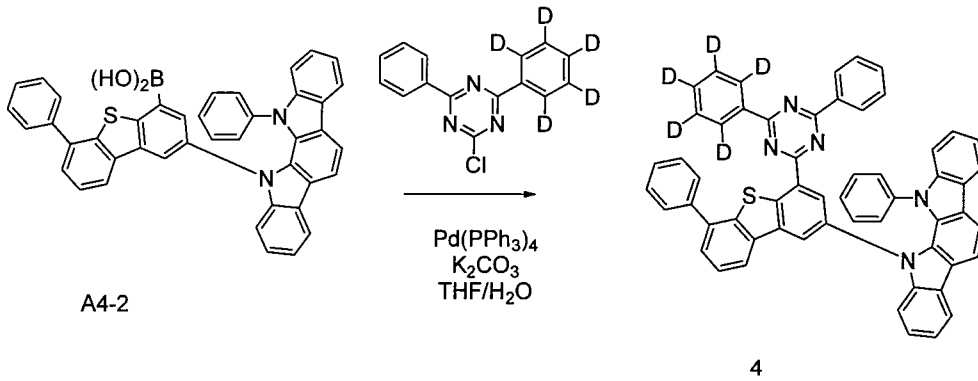
실시예 3: 화합물 3의 제조



화합물 A4-1 대신 화합물 A4-3를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 3를 제조하였다. (15.0 g, 수율 71%; MS:[M+H]⁺=667)

10

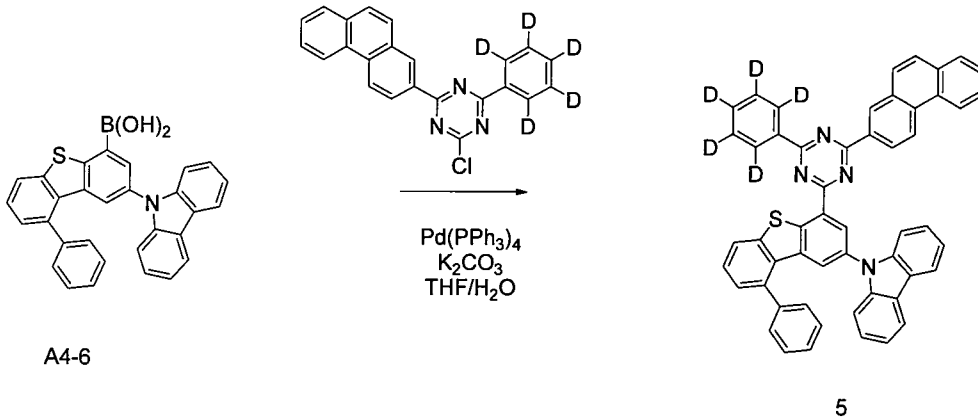
실시예 4: 화합물 4의 제조



화합물 A4-1 대신 화합물 A4-2를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 4를 제조하였다. (16.0 g, 수율 82%; MS:[M+H]⁺=827)

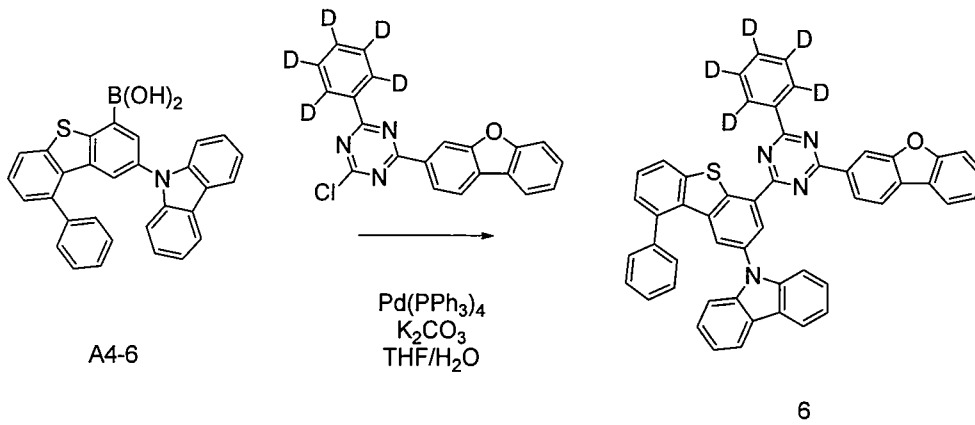
5

실시예 5: 화합물 5의 제조



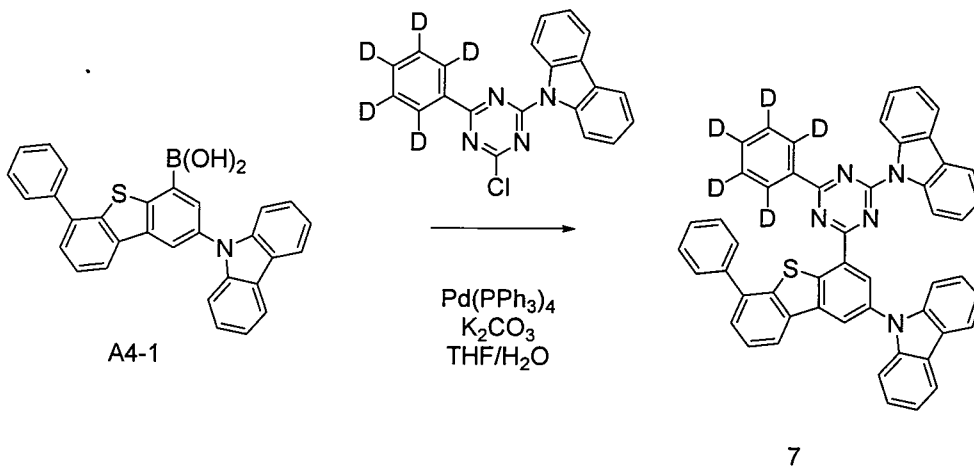
10 화합물 A4-2 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 A4-6 및 2-chloro-4-(phenanthren-2-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 5를 제조하였다. (16.0 g, 수율 82%; MS:[M+H]⁺=827)

실시예 6: 화합물 6의 제조



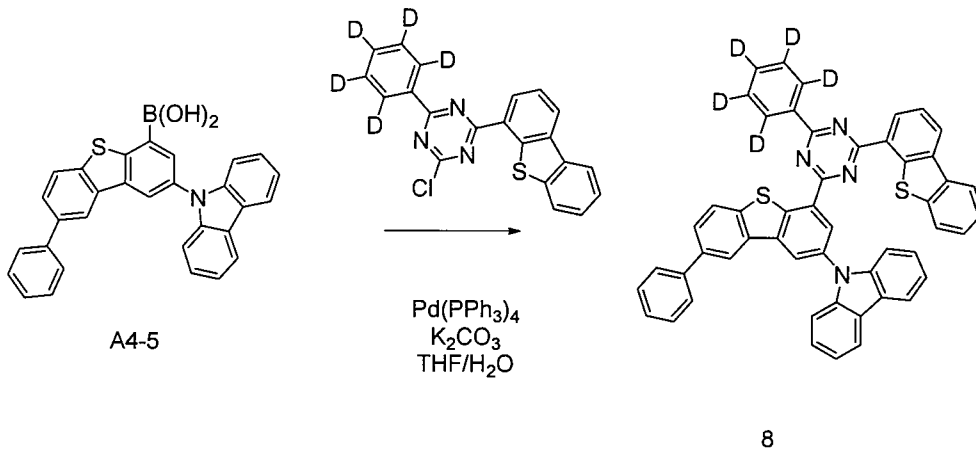
5 화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 A4-6 및 2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-3-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 6를 제조하였다. (17.8 g, 수율 74%; MS:[M+H]⁺=752)

실시예 7: 화합물 7의 제조



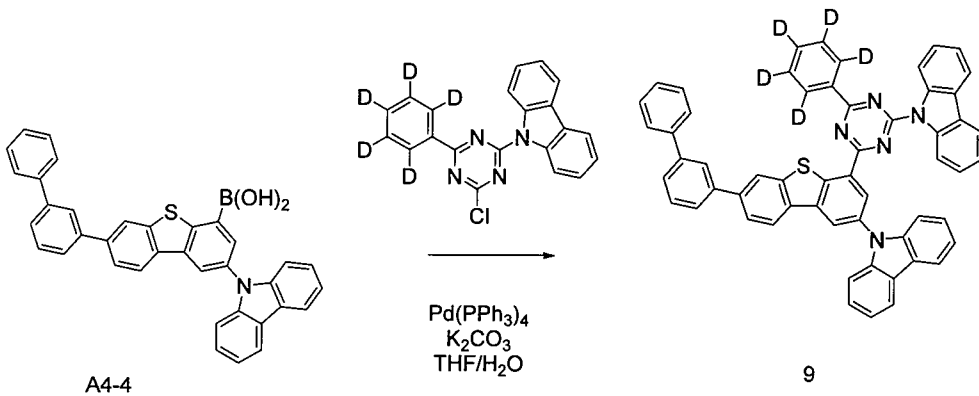
10 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 9-(4-chloro-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 7를 제조하였다. (16.5 g, 수율 69%; MS:[M+H]⁺=751)

실시예 8: 화합물 8의 제조



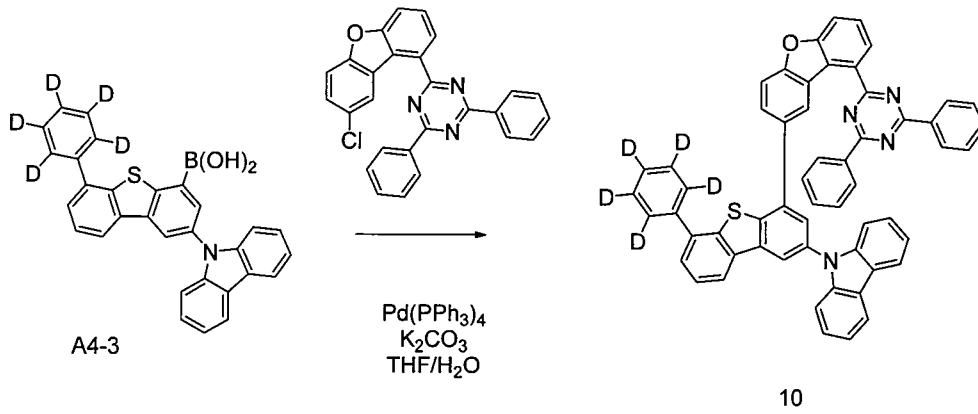
화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 A4-5 및 2-chloro-4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 8를 5 제조하였다. (18.9 g, 수율 77%; MS:[M+H]⁺=768)

실시예 9 : 화합물 9의 제조



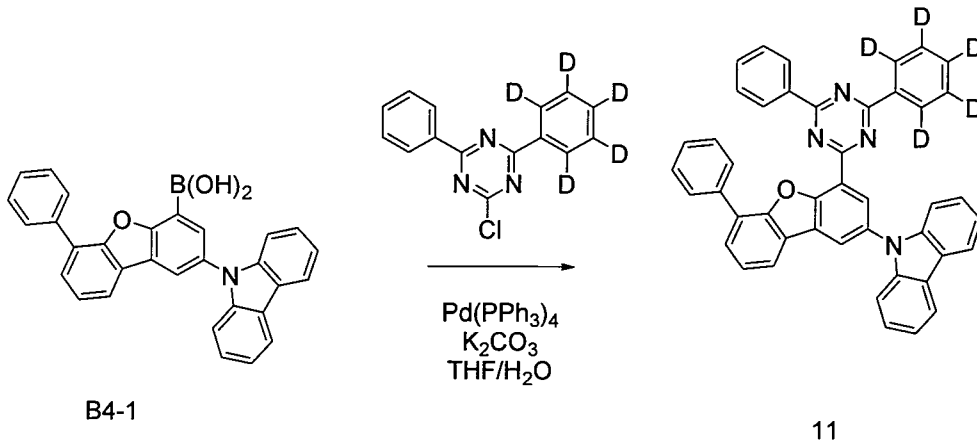
10 화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 A4-4 및 9-(4-chloro-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 9를 제조하였다. (14.8 g, 수율 65%; MS:[M+H]⁺=827)

실시예 10 : 화합물 10의 제조



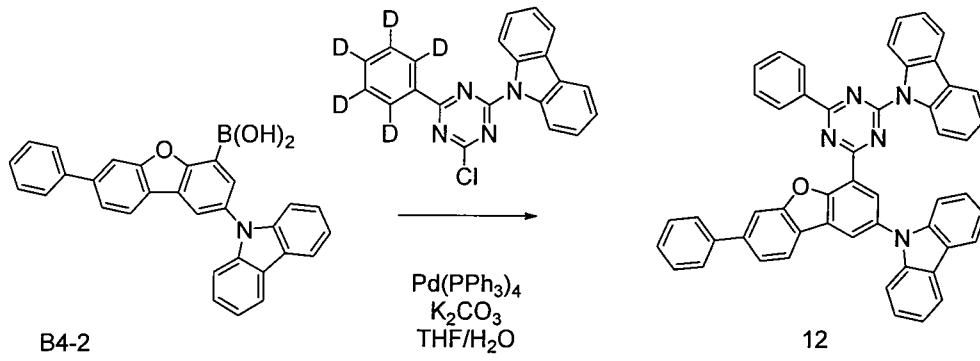
화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 A4-3 및 2-(8-chlorodibenzo[b,d]furan-1-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 10를 5 제조하였다. (18.3 g, 수율 70%; MS:[M+H]⁺=828)

실시예 11 : 화합물11의 제조



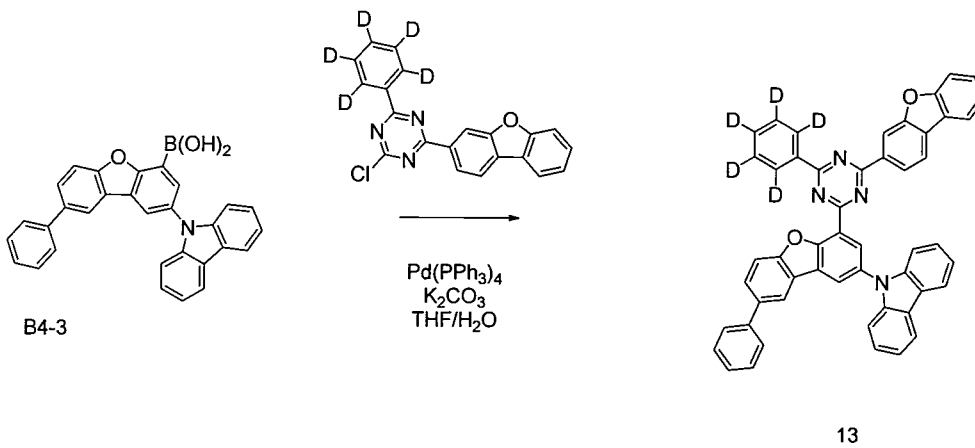
화합물 A4-1 대신 화합물 B4-1 를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 10 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 11를 제조하였다. (16.2 g, 수율 76%; MS:[M+H]⁺=646)

실시예 12 : 화합물 12의 제조



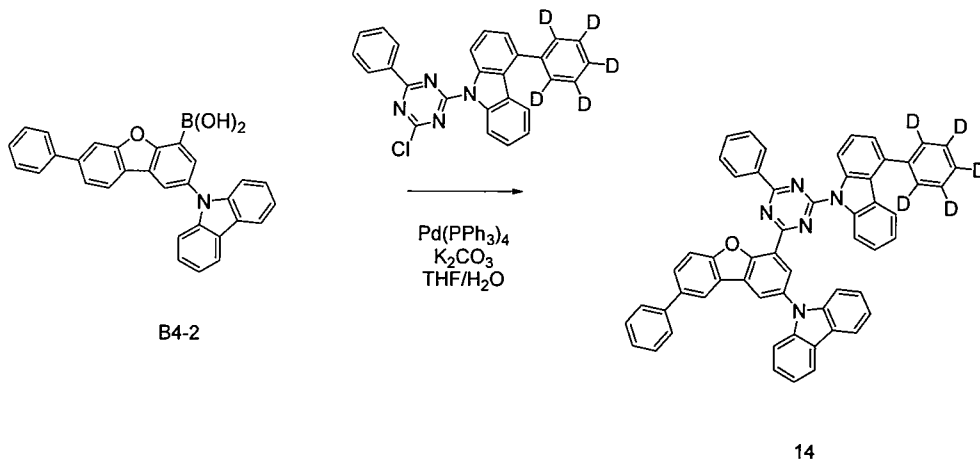
5 화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 B4-2 및 9-(4-chloro-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 12를 제조하였다. (19.3 g, 수율 80%; MS:[M+H]⁺=730)

실시예 13: 화합물 13의 제조



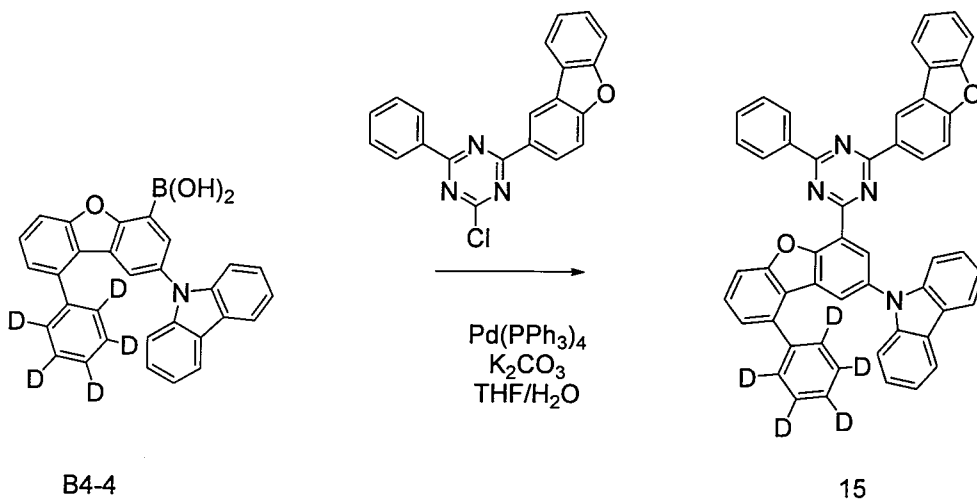
10 화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 B4-3 및 2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-3-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 13를 제조하였다. (16.6 g, 수율 68%; MS:[M+H]⁺=736)

실시예 14: 화합물 14의 제조



5 화합물 A4-1 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 B4-2 및 9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-4-(phenyl-d5)-9H-carbazole를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 14를 제조하였다. (19.3 g, 수율 72%; MS:[M+H]⁺=811)

실시예 15 : 화합물15의 제조



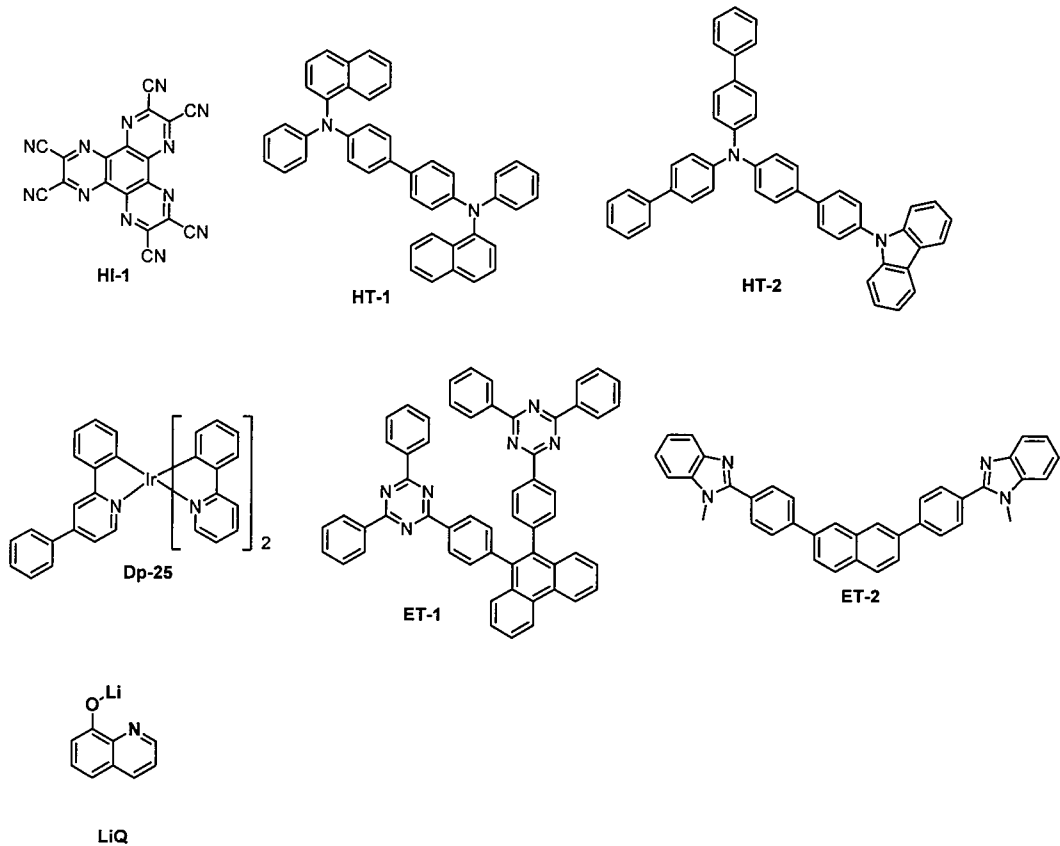
10 화합물 A4-4 및 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine 대신 화합물 B4-4 및 2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-3-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine를 사용한 것을 제외하고 화합물 1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물15를 제조하였다. (18.8 g, 수율 78%; MS:[M+H]⁺=736)

[실험예]

실험예 1

ITO(indium tin oxide)가 130nm의 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.

상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-1 화합물을 5nm의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 상기 정공 주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 25nm의 두께로 열 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하고, HT-1 증착막 위에 하기 HT-2 화합물을 5nm의 두께로 진공 증착하여 전자 차단층을 형성하였다. 이어서, 상기 HT-2 증착막 위에 앞서 제조한 화합물 1과 하기 Dp-25 화합물을 88:12의 중량비로 공증착하여 40nm 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 위에 하기 ET-1 화합물을 25nm의 두께로 진공 증착하여 전자 수송층을 형성하고, 그 위에 하기 ET-2 화합물과 LiQ를 98:2의 중량비로 진공 증착(두께 10nm)하여 전자 주입층을 형성하였다. 상기 전자 주입층 위에 100nm 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.



상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.04nm/sec 내지 0.07nm/sec를 유지하였고, 알루미늄은 0.2nm/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 1×10^{-7} torr 내지 5×10^{-8} torr를 유지하였다.

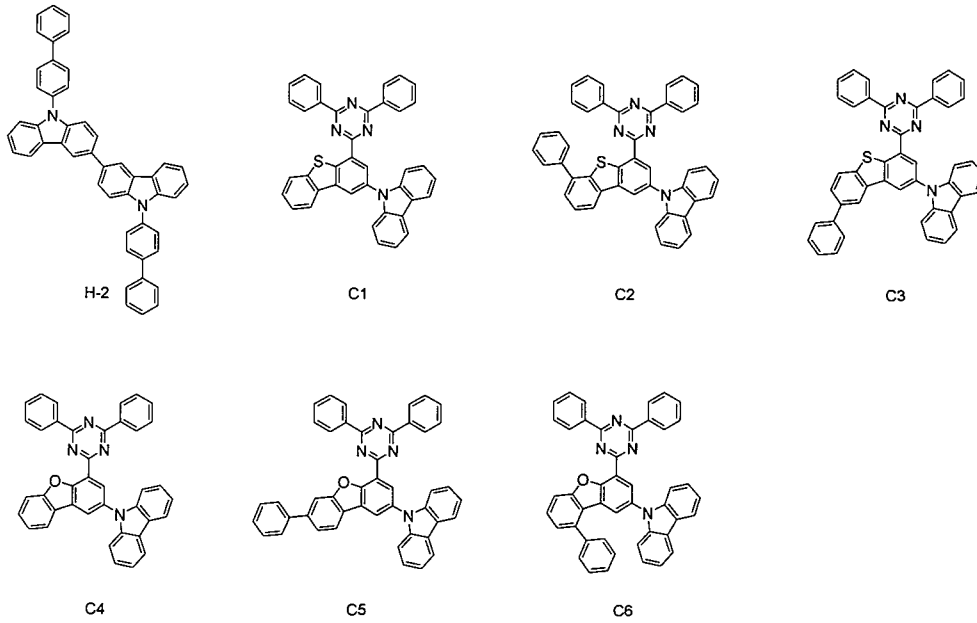
5

실험예 2 내지 21 및 비교 실험예 1-9

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

10

참고로, 실험예 16 내지 21 및 비교 실험예 7 내지 9에서는 화합물 1 대신 하기 표 5에 기재된 화합물을 1:1의 중량비로 사용하여 유기 발광 소자를 제작하였다. 실시예 16을 예로 들자면, 실시예 1에서 화합물 1 대신 화합물 1 및 화합물 H-2를 1:1의 중량비로 사용한 것이다.



5 상기 실험예 및 비교 실험예의 유기 발광 소자에 10 mA/cm² 전류 밀도를 인가할 때의 전압, 효율, 발광색 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, T₉₅은 전류 밀도 20 mA/cm²에서의 초기 휘도를 100%로 하였을 때 휘도가 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

【표 5】

구분	발광층 화합물	전압(V) (@10mA/cm ²)	효율(cd/A) (@10mA/cm ²)	발광색	T ₉₅ (@20mA/cm ²)
실험예 1	화합물 1	3.01	65.9	녹 색	75
실험예 2	화합물 2	3.00	65.8	녹 색	79
실험예 3	화합물 3	3.06	66.6	녹 색	69
실험예 4	화합물 4	2.97	66.1	녹 색	67
실험예 5	화합물 5	2.89	64.0	녹 색	66
실험예 6	화합물 6	2.84	66.1	녹 색	79
실험예 7	화합물 7	3.11	67.2	녹 색	68
실험예 8	화합물 8	2.98	67.9	녹 색	63

실험예 9	화합물 9	2.92	66.9	녹색	65
실험예 10	화합물 10	3.05	68.0	녹색	58
실험예 11	화합물 11	3.03	65.9	녹색	63
실험예 12	화합물 12	3.04	63.5	녹색	62
실험예 13	화합물 13	2.98	64.9	녹색	62
실험예 14	화합물 14	2.94	63.1	녹색	66
실험예 15	화합물 15	3.01	66.2	녹색	59
비교 실험예 1	화합물 C1	3.01	60.0	녹색	50
비교 실험예 2	화합물 C2	3.07	62.5	녹색	60
비교 실험예 3	화합물 C3	3.11	59.5	녹색	62
비교 실험예 4	화합물 C4	3.06	59.2	녹색	51
비교 실험예 5	화합물 C5	3.12	61.2	녹색	53
비교 실험예 6	화합물 C6	3.09	60.9	녹색	55
실험예 16	화합물 1, 화합물 H-2	3.29	72.1	녹색	160
실험예 17	화합물 2, 화합물 H-2	3.20	74.8	녹색	169
실험예 18	화합물 6, 화합물 H-2	3.28	74.0	녹색	161
실험예 19	화합물 10, 화합물 H-2	3.32	74.7	녹색	165
실험예 20	화합물 11, 화합물 H-2	3.48	74.9	녹색	169
실험예 21	화합물 15,	3.26	74.1	녹색	171

	화합물 H-2				
실험예 7	화합물 C1, 화합물 H-2	3.14	58.9	녹색	138
비교 실험예 8	화합물 C2, 화합물 H-2	3.50	65.0	녹색	154
비교 실험예 9	화합물 C5, 화합물 H-2	3.48	65.9	녹색	141

실험예 1 내지 15와 비교 실험예 1 내지 6는 발광층에 단독 호스트를 사용한 소자예이다. 비교 실험예 1 내지 3에서 사용한 화합물 C1 내지 C3은 디벤조티오펜의 Ar₁이 수소가거나 Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 모두 비치환 아릴기로만 치환된 화합물이다. 표 5로부터 실험예 1 내지 3의 소자예는 Ar₁, Ar₂ 및 Ar 모두 아릴기이나, 중수소가 치환된 화합물이며, 비교 실험예 1 내지 3에 비하여 수명 특성이 약 21% 내지 40% 정도 우수한 것을 확인할 수 있다.

비교 실험예 4 내지 6에서 사용한 화합물 C4 내지 C6은 디벤조퓨란의 Ar₁이 수소가거나 Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 모두 비치환 아릴기로만 치환된 화합물이다. 표 5로부터 실험예 11의 소자예는 Ar₁, Ar₂ 및 Ar 모두 아릴기이나, 중수소가 치환된 화합물이다. 비교 실험예 1 내지 3에 비하여 수명 특성이 약 11% 내지 21% 정도 우수한 것을 확인할 수 있다.

실험예 6 내지 9 및 실험예 12-15에서 사용한 화합물은 Ar₁ 및 Ar₂가 중수소 또는 헤테로아릴기로 치환된 화합물이다. Ar₁ 및 Ar₂가 아릴기로만 치환된 비교 실험예 1 내지 6에 비하여 수명 특성이 약 11% 내지 26% 정도 우수한 것을 확인할 수 있다.

실험예 16 내지 21는 발광층에 2종의 호스트를 사용한 소자예이다. 발광층에 2종의 호스트를 사용하는 경우에도, 본 발명의 화합물을 사용한 실험예 16 내지 21의 소자가 비교 실험예 7 내지 9의 소자에 비하여 전류 효율 및 수명 특성이 우수함을 확인할 수 있다.

【부호의 설명】

1: 기관

2: 양극

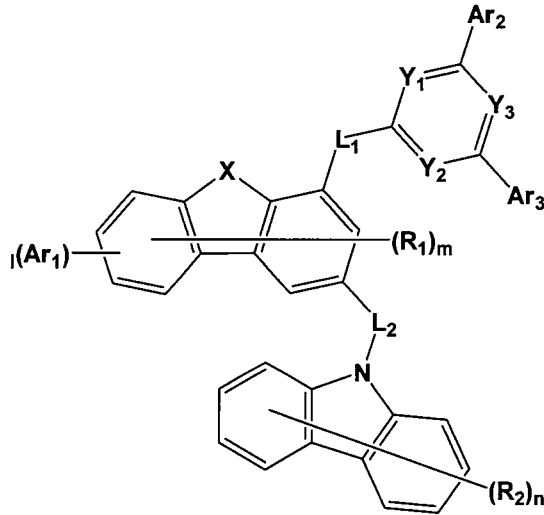
- | | |
|----------|----------|
| 3: 발광층 | 4: 음극 |
| 5: 정공주입층 | 6: 정공수송층 |
| 7: 발광층 | 8: 전자수송층 |

【청구의 범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



5

상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

Y₁, Y₂ 및 Y₃는 각각 독립적으로, CH; 또는 N이고, 단, Y₁, Y₂ 및 Y₃ 중 하나 이상이 N이고,

10 L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로, 직접결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는 C₅₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,

Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

15 Ar₂ 및 Ar₃은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 포함하는 C₅₋₆₀ 헤테로아릴이고,

단, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃이 모두 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴인 경우, Ar₁, Ar₂ 및 Ar₃ 중 어느 하나는 중수소로 4 이상 치환되고,

20 R₁은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 또는 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬이고,

R₂는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알콕시; 치환 또는 비치환된 C₃₋₆₀시클로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 할로알킬; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀

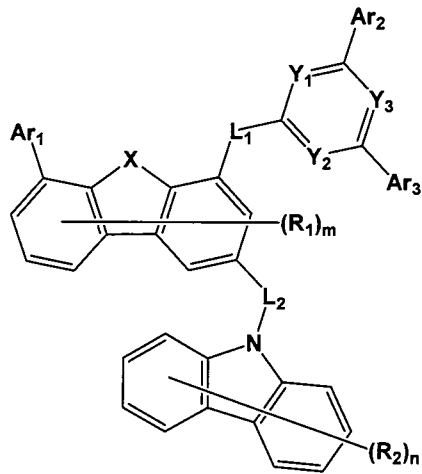
할로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀아릴아민; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀알킬아민; C₁₋₆₀ 트리플루오로알킬; C₁₋₆₀ 트리플루오로알콕시; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 C₅₋₆₀ 헤테로아릴이며, 이들은 카바졸의 탄소원자와 결합하여

- 5 축합고리를 형성할 수 있고,
 m 은 0 내지 3의 정수이고,
 n 은 0 내지 6의 정수이고
 $|$ 은 1 또는 2임.

10 【청구항 2】

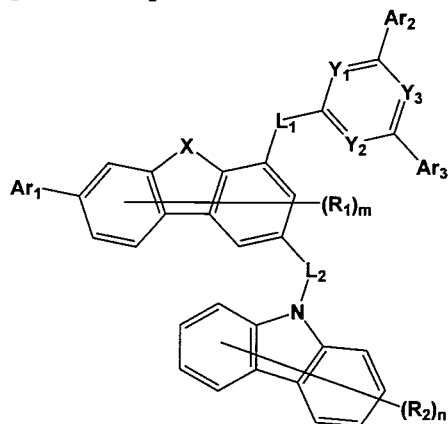
제 1항에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 8로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인, 화합물:

[화학식 2]

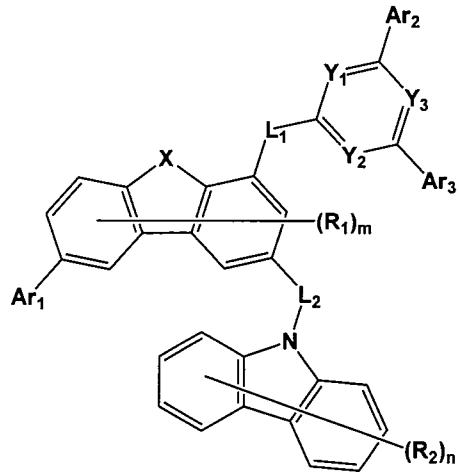


15

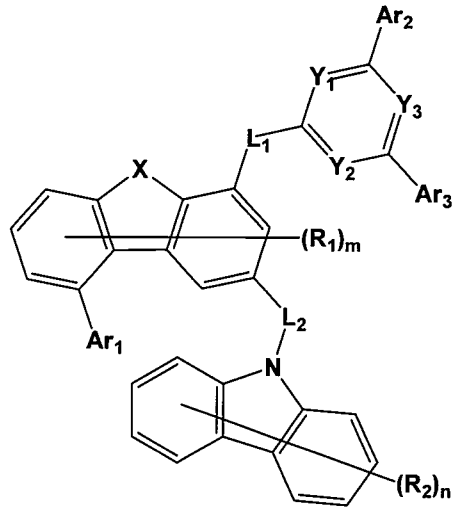
[화학식 3]



[화학식 4]

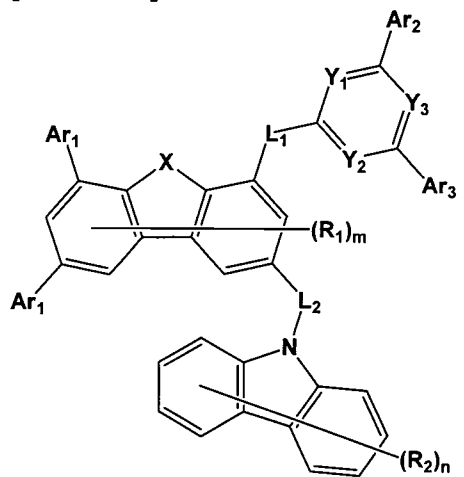


[화학식 5]

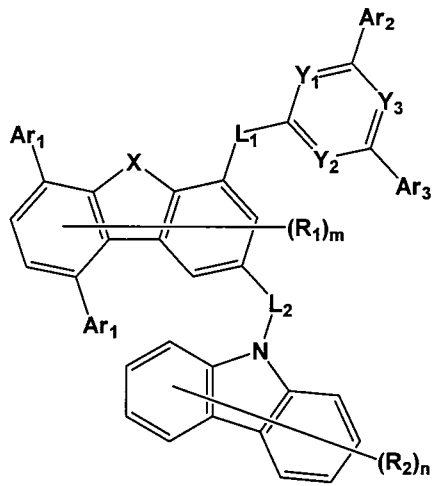


5

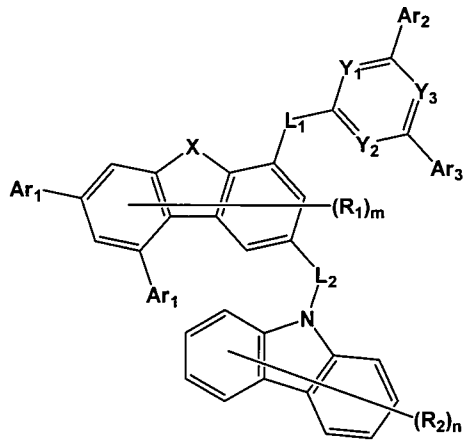
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



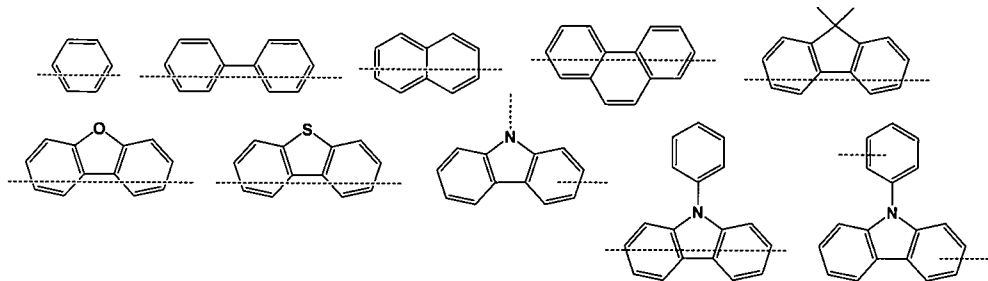
상기 화학식 2 내지 8에서,

- 5 X, Y₁, Y₂, Y₃, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, Ar₃, R₁, R₂, m 및 n은 청구항 1에서 정의한 바와 같음.

【청구항 3】

제 1항에 있어서,

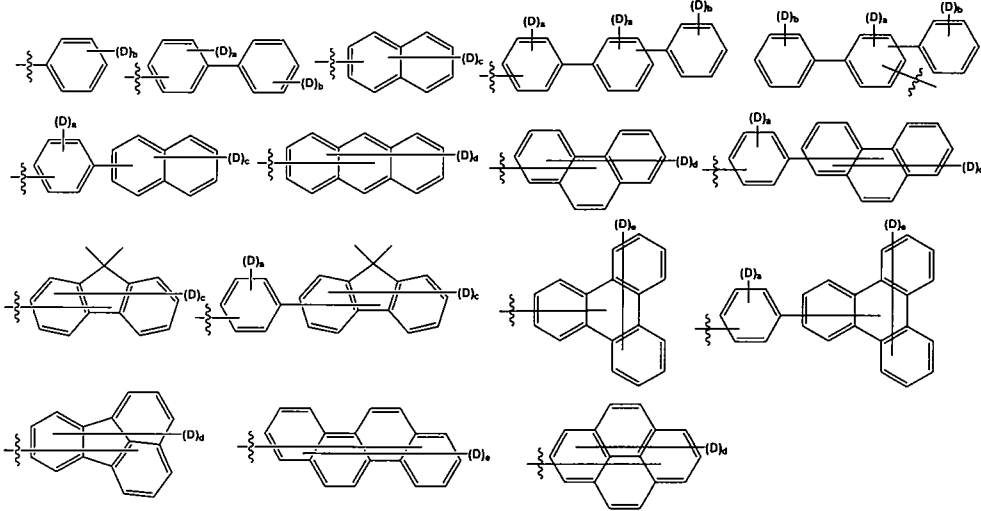
- 10 L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로, 직접결합 또는 하기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인, 화합물:



【청구항 4】

제 1항에 있어서,

Ar₁은 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나인, 화합물:

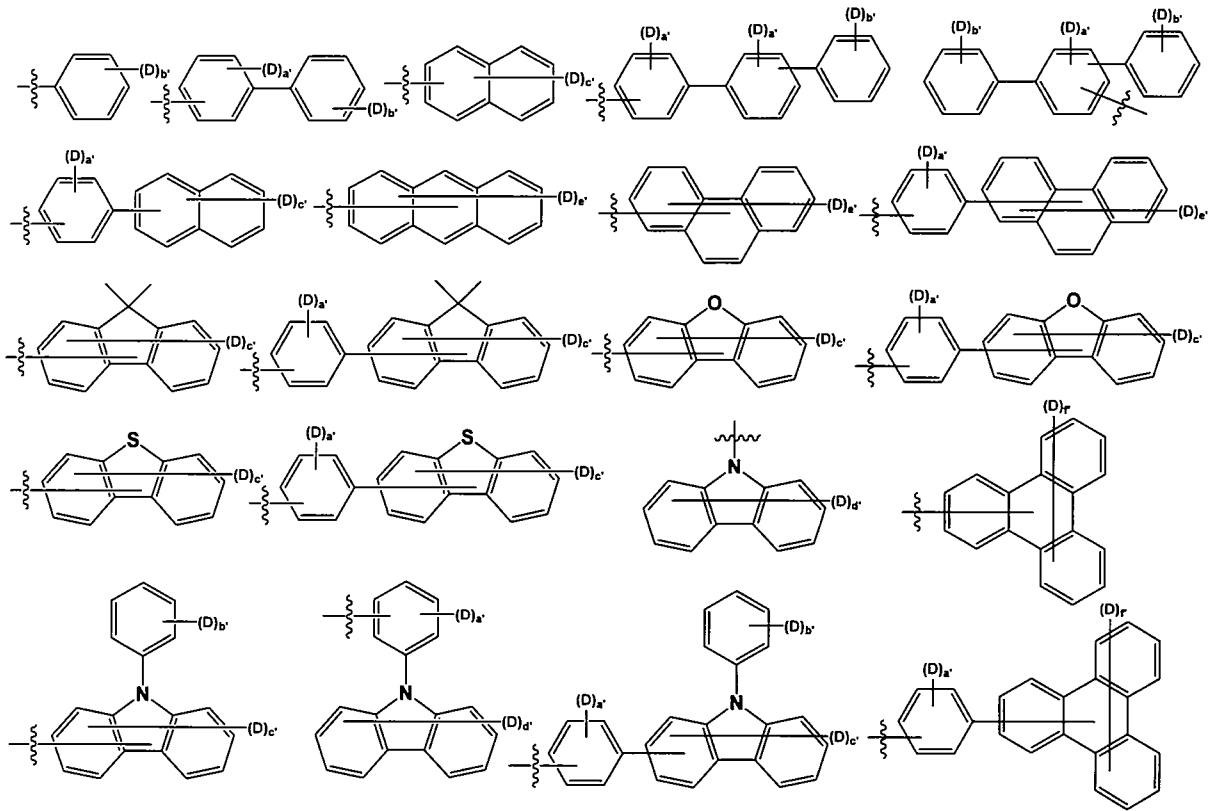


- 5 상기 식 중에서,
 a는 0 내지 4의 정수이고,
 b는 0 내지 5의 정수이고,
 c는 0 내지 7의 정수이고,
 d는 0 내지 9의 정수이고,
 10 e는 0 내지 11개의 정수임.

【청구항 5】

제 1항에 있어서,

- 15 Ar₂ 및 Ar₃은 각각 독립적으로, 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는
 어느 하나인, 화합물:



상기 식 중에서,
 a'는 0 내지 4의 정수이고,
 5 b'는 0 내지 5의 정수이고,
 c'는 0 내지 7의 정수이고,
 d'는 0 내지 8의 정수이고,
 e'는 0 내지 9의 정수이고,
 f'는 0 내지 11의 정수임.

10

【청구항 6】

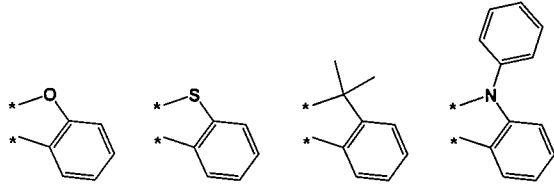
제 1항에 있어서,
 R₁은 각각 독립적으로, 수소 또는 중수소인, 화합물.

15

【청구항 7】

제 1항에 있어서,
 R₂는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; 메톡시;
 트리플루오로메틸; 트리플루오로메톡시; 페닐; 피리디닐; 이소퀴놀리닐; 또는

하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나이며,

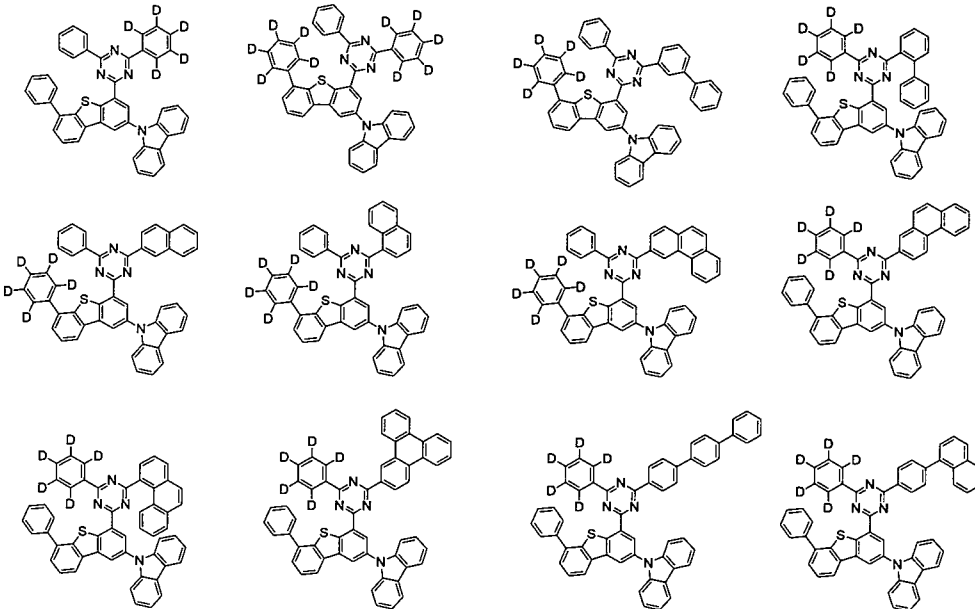


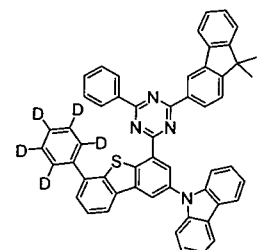
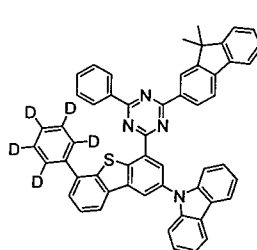
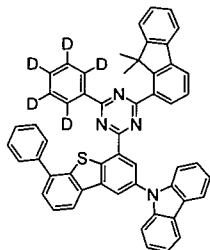
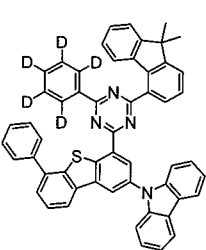
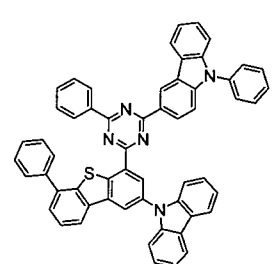
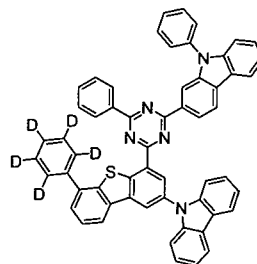
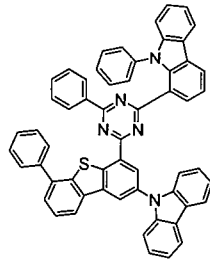
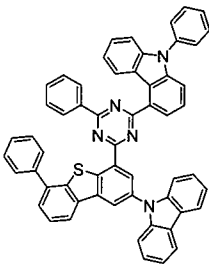
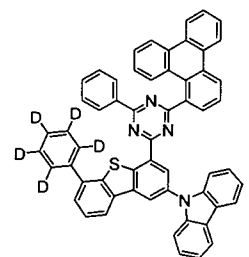
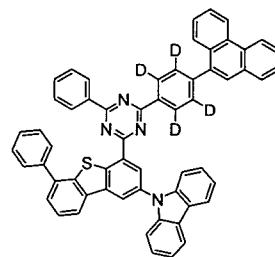
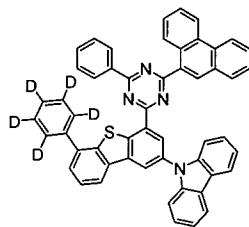
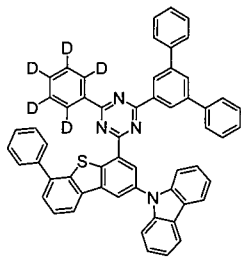
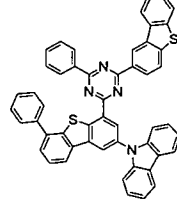
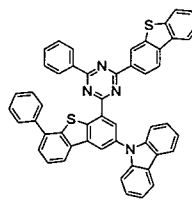
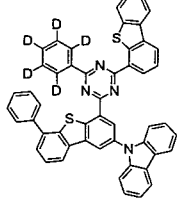
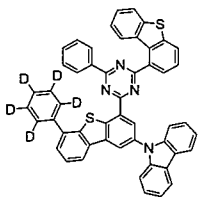
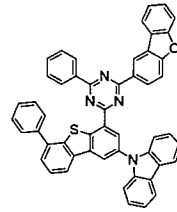
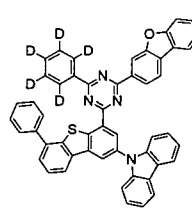
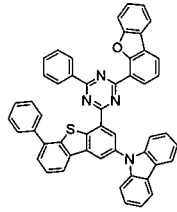
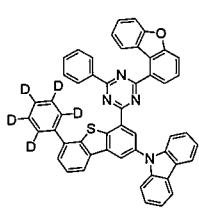
상기 식 중에서, 2개의 *은 화학식 1의 카바졸의 인접 탄소와 각각 연결되고,

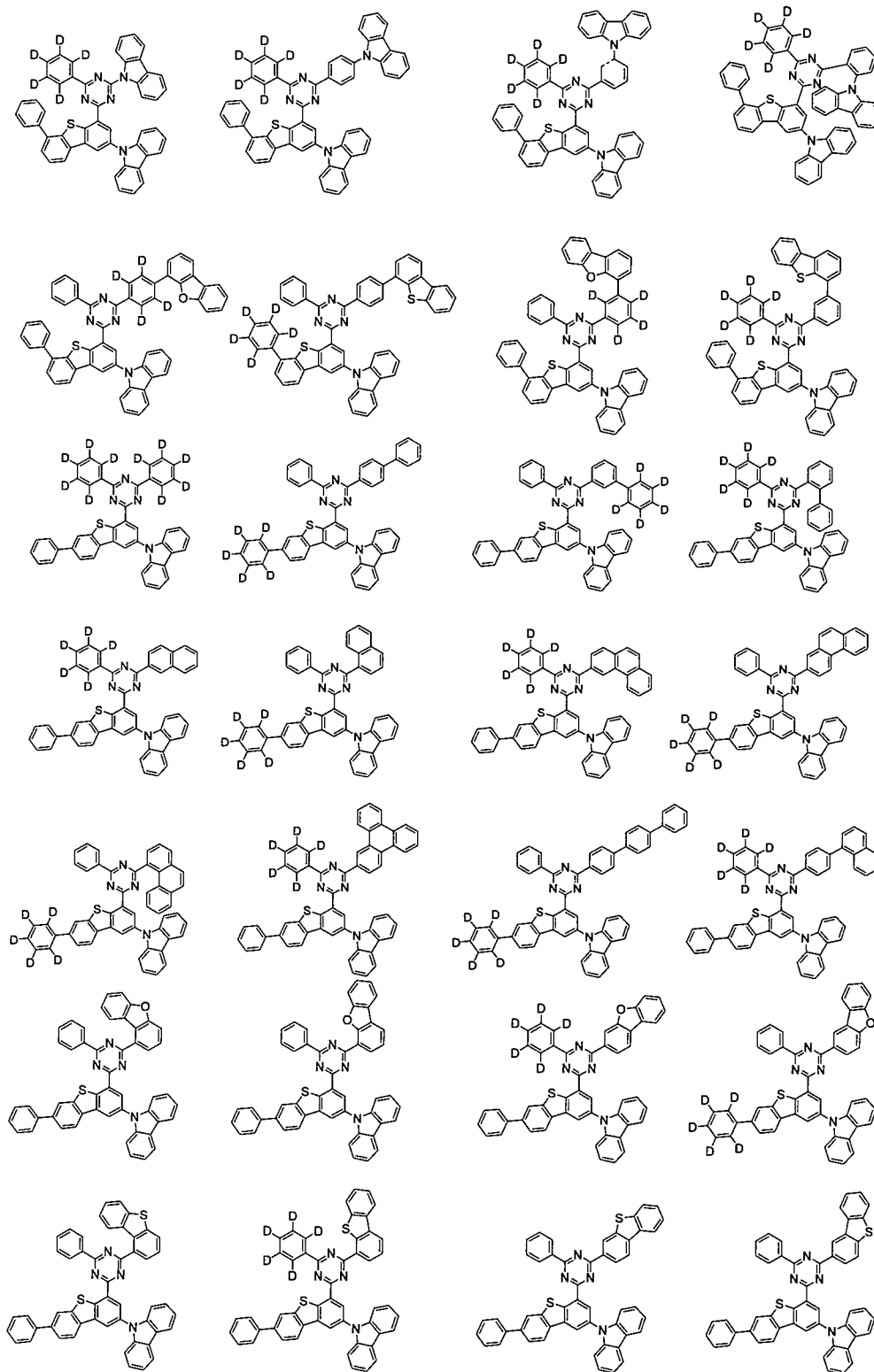
- 5 상기 페닐은 할로젠, 시아노, 메톡시, 트리플루오로메틸 및 트리플루오로메톡시로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 치환될 수 있는, 화합물.

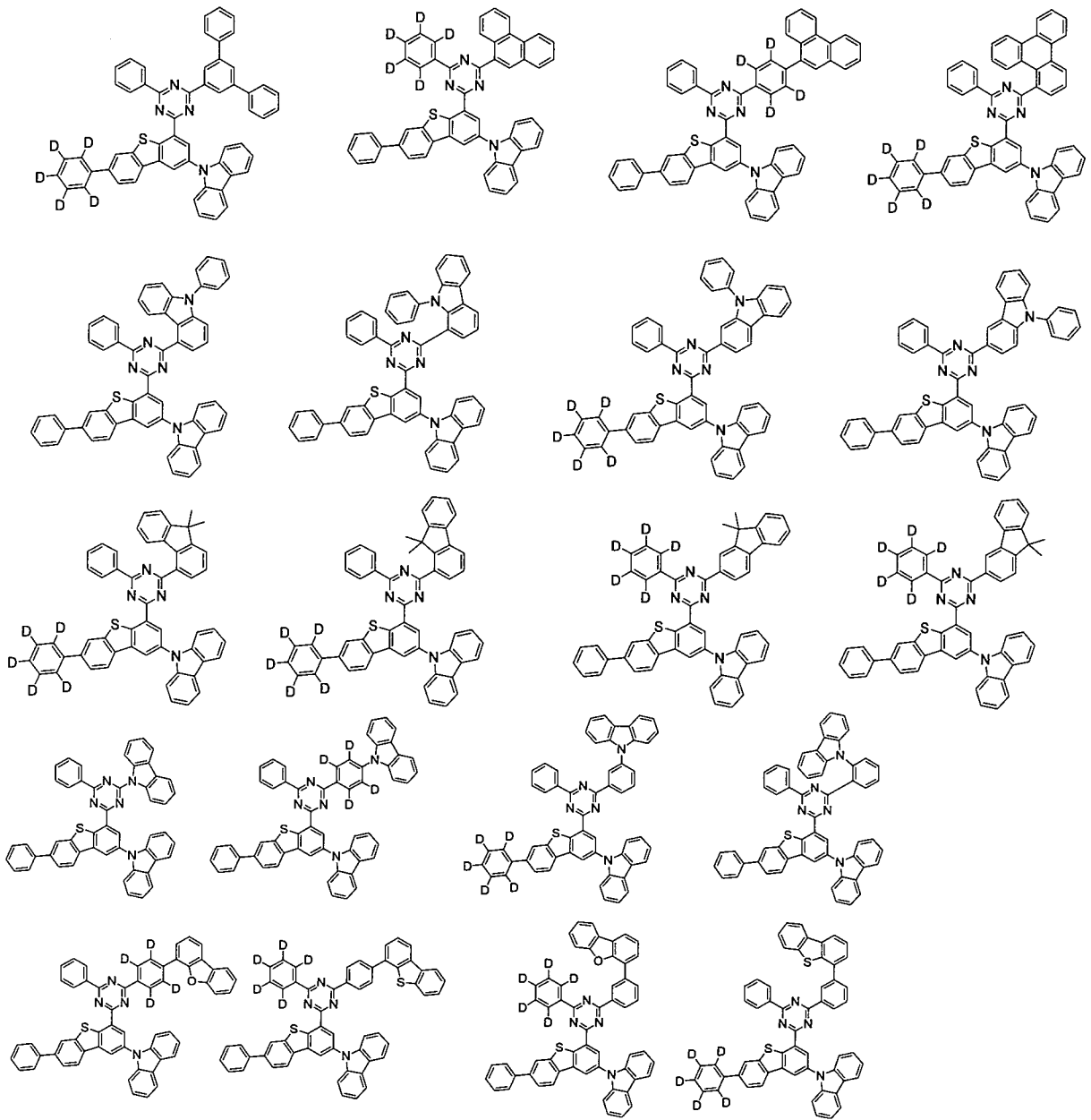
【청구항 8】

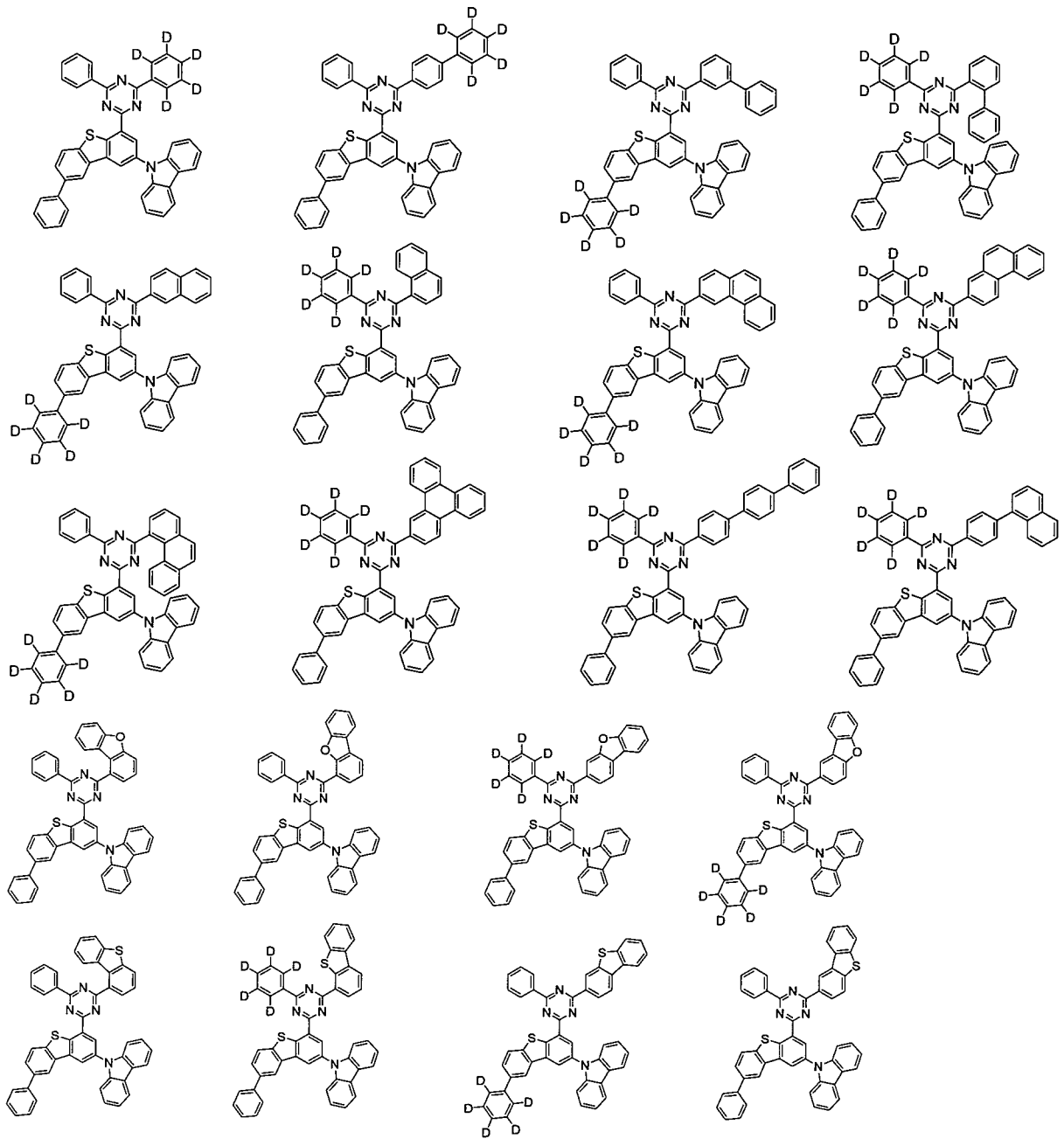
- 10 제 1항에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인, 화합물:

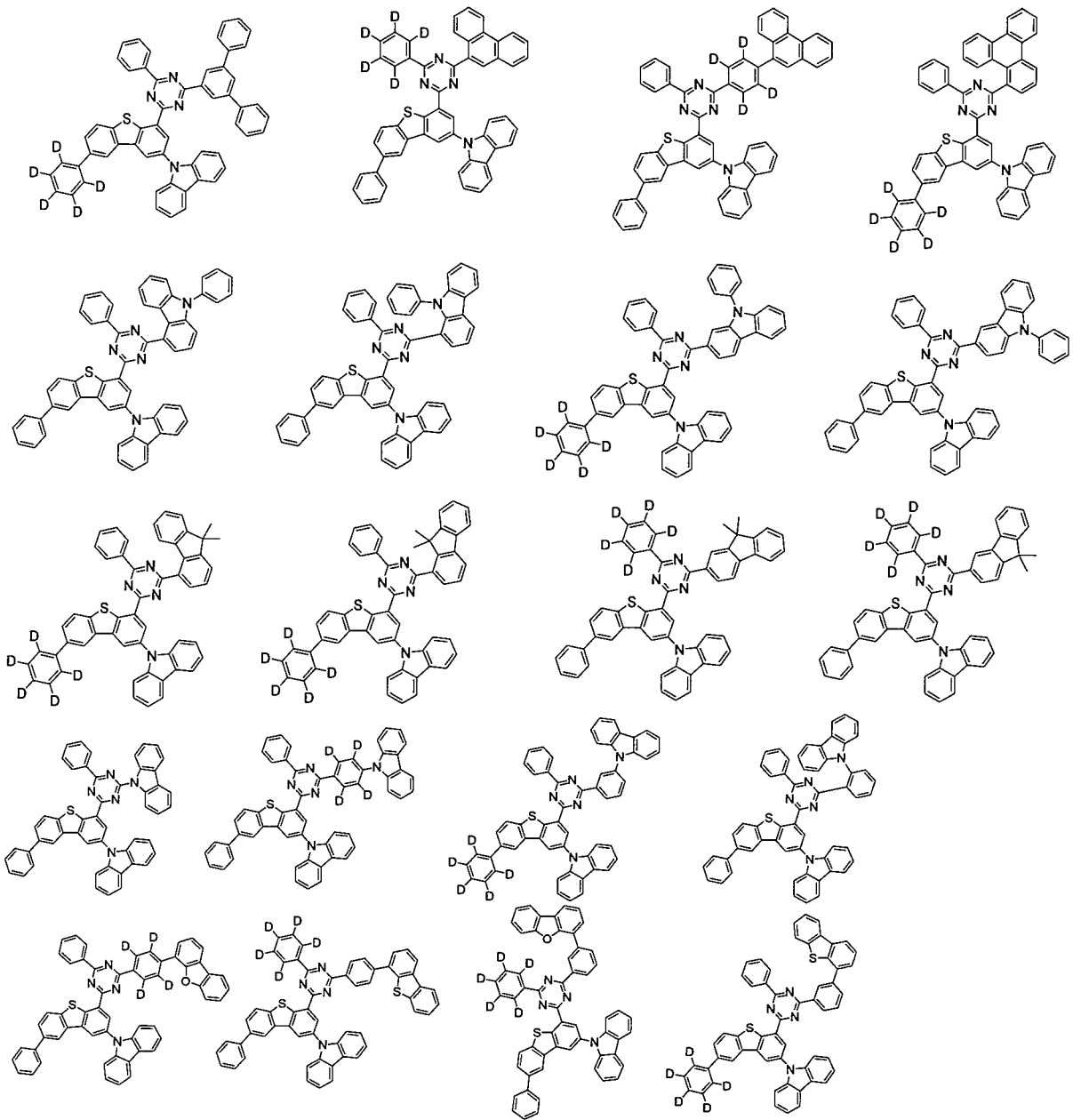


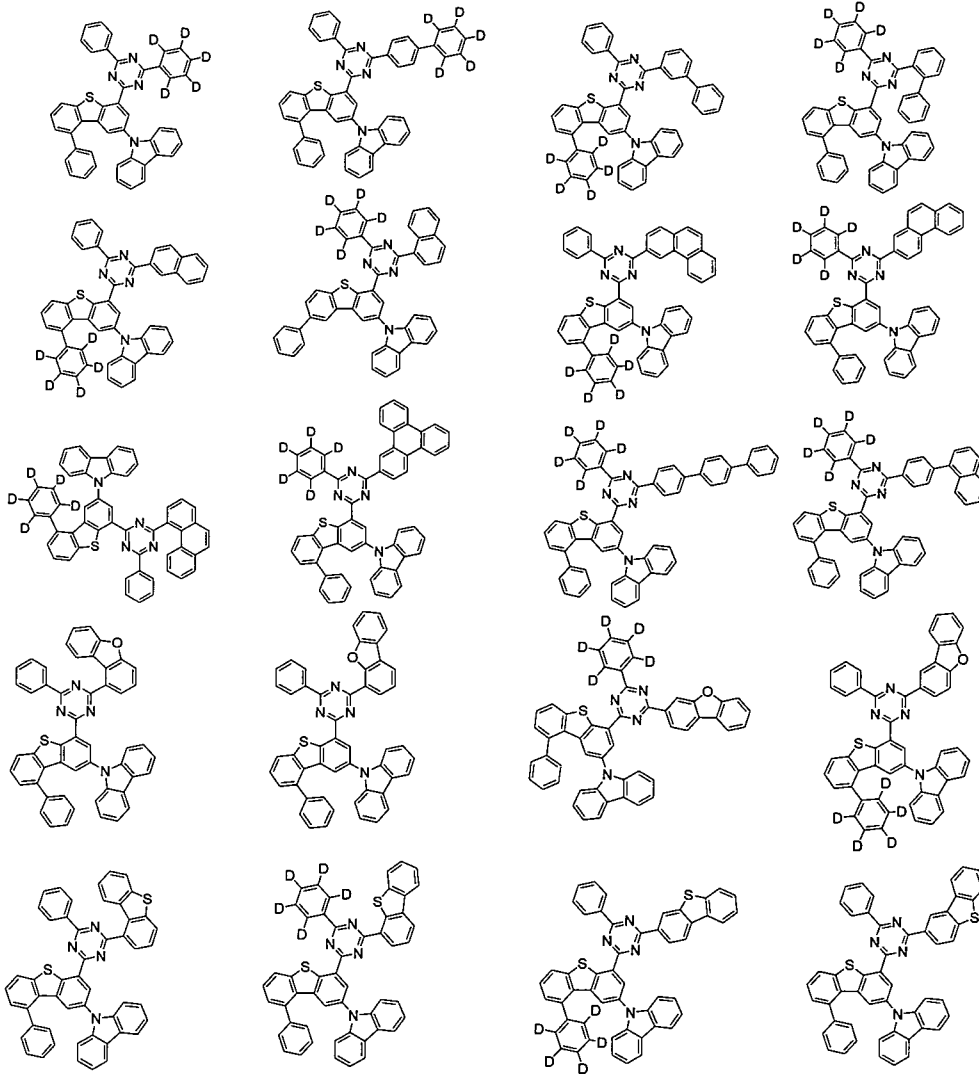


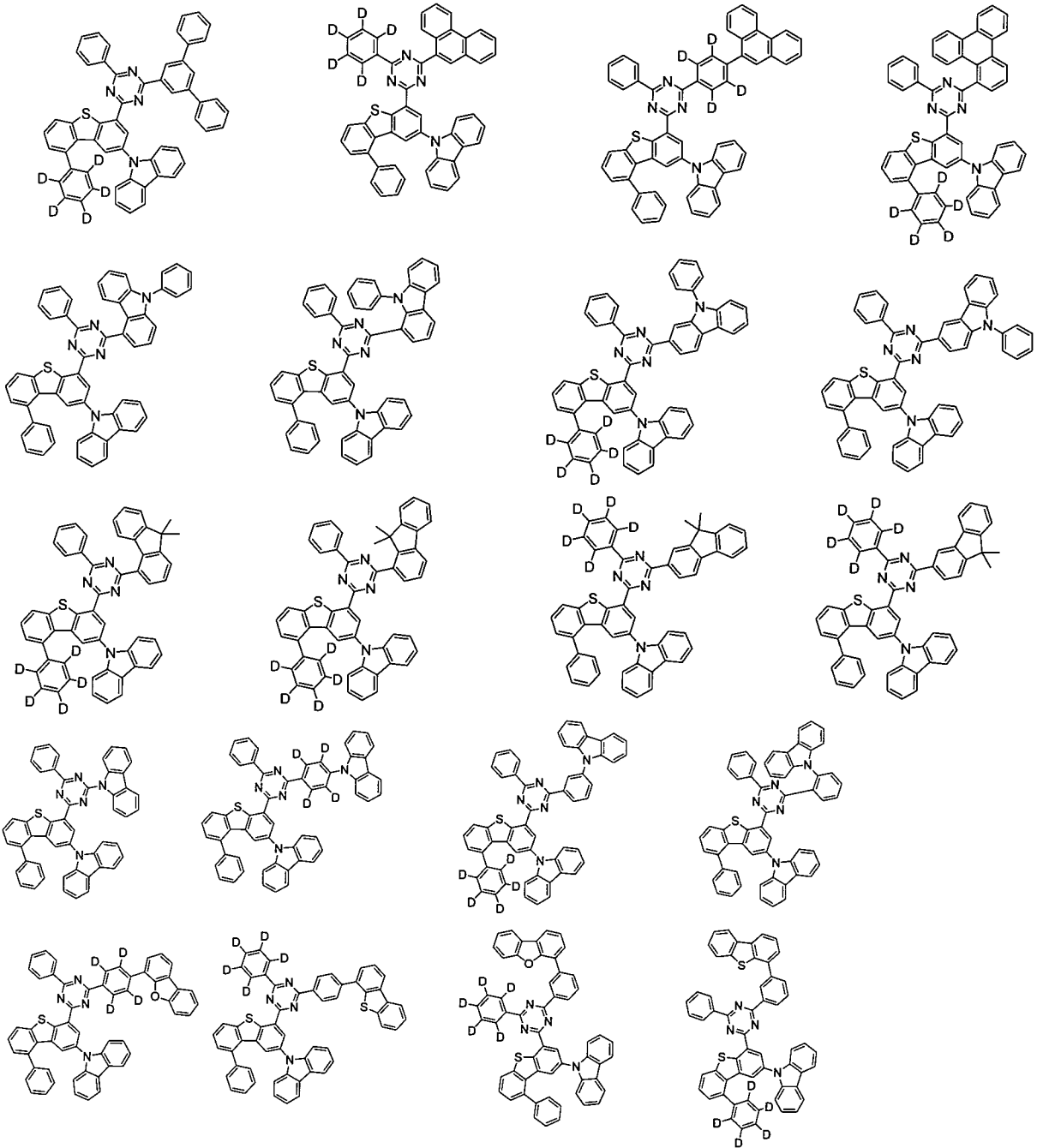


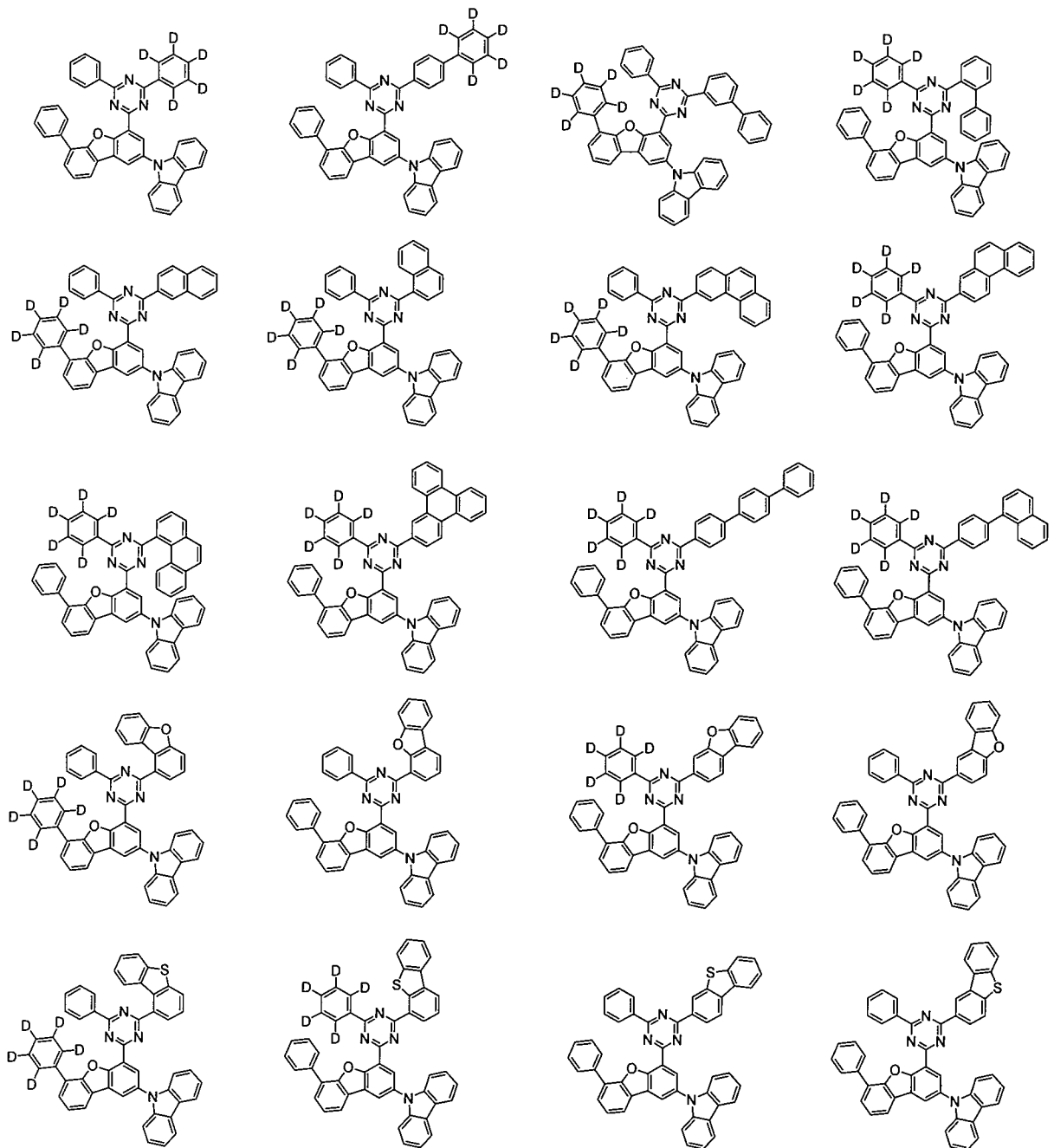


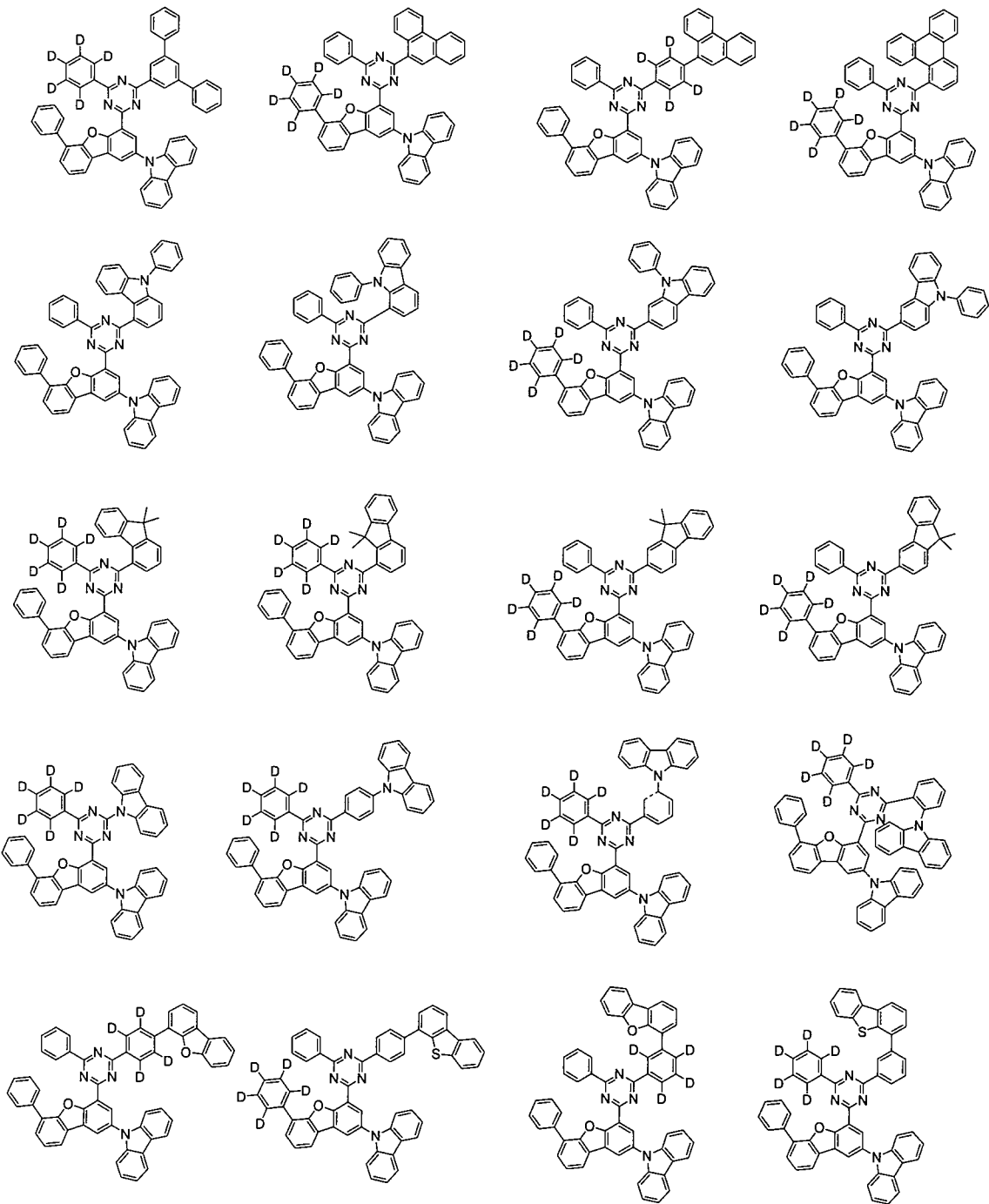


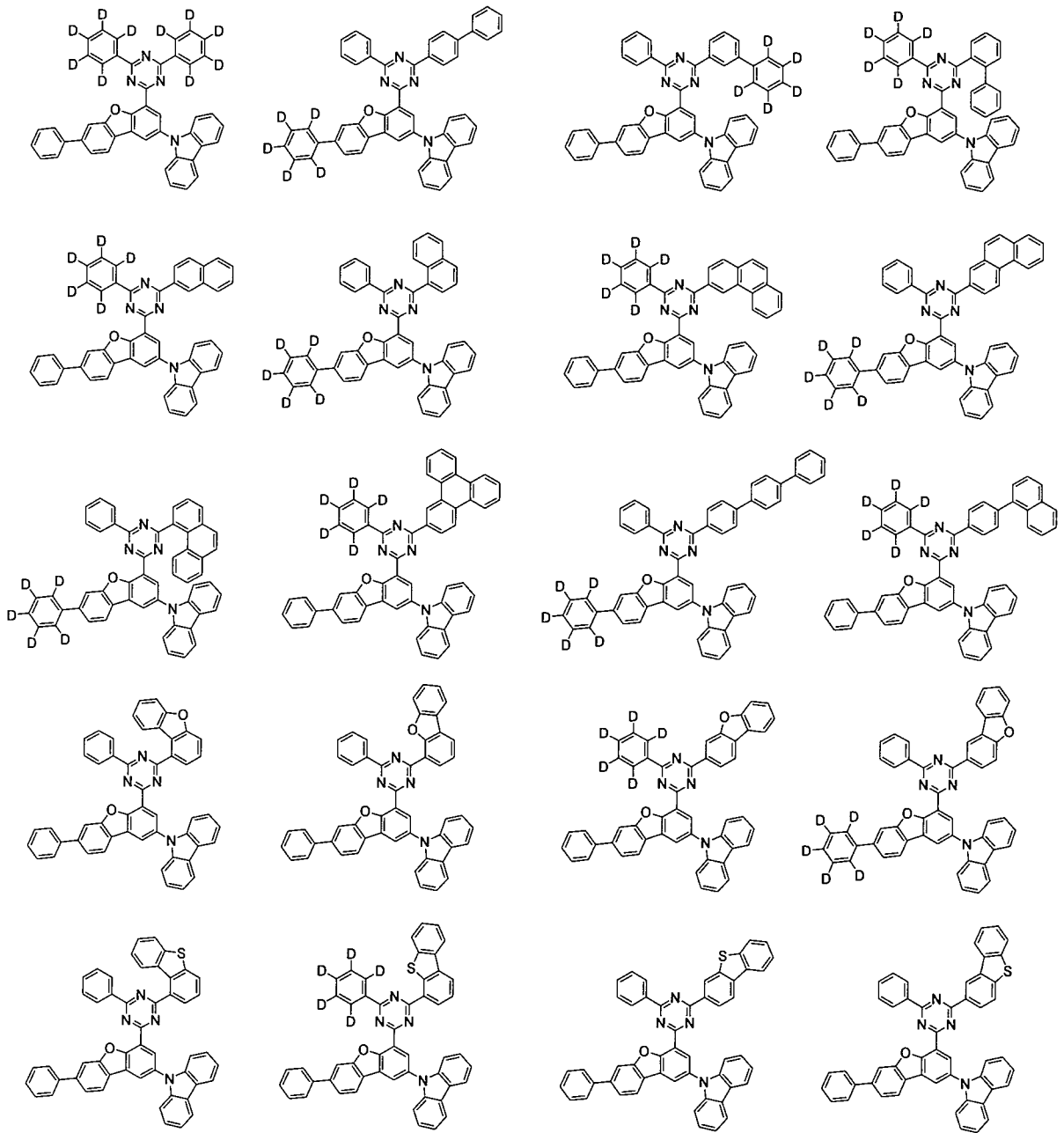


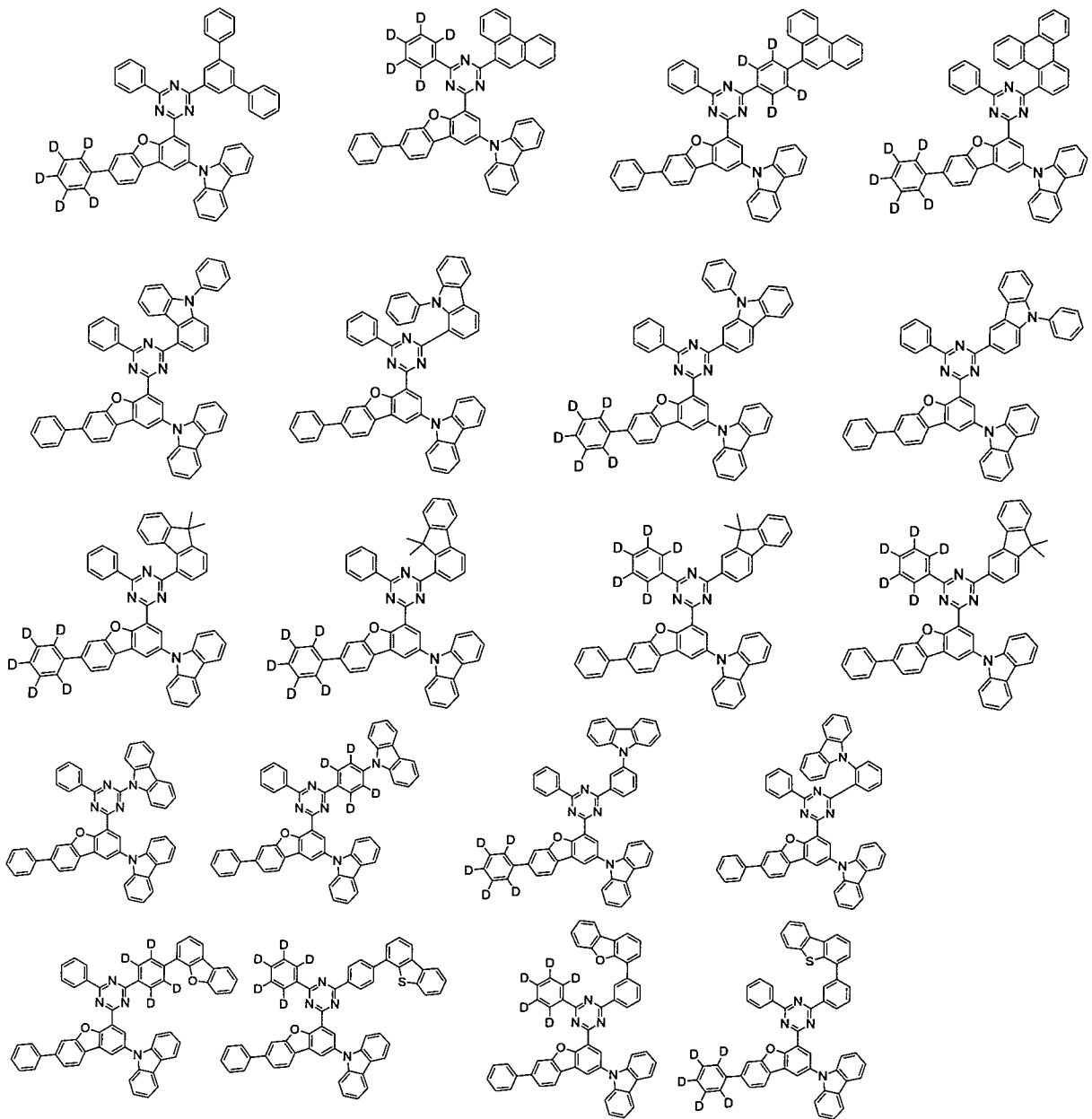


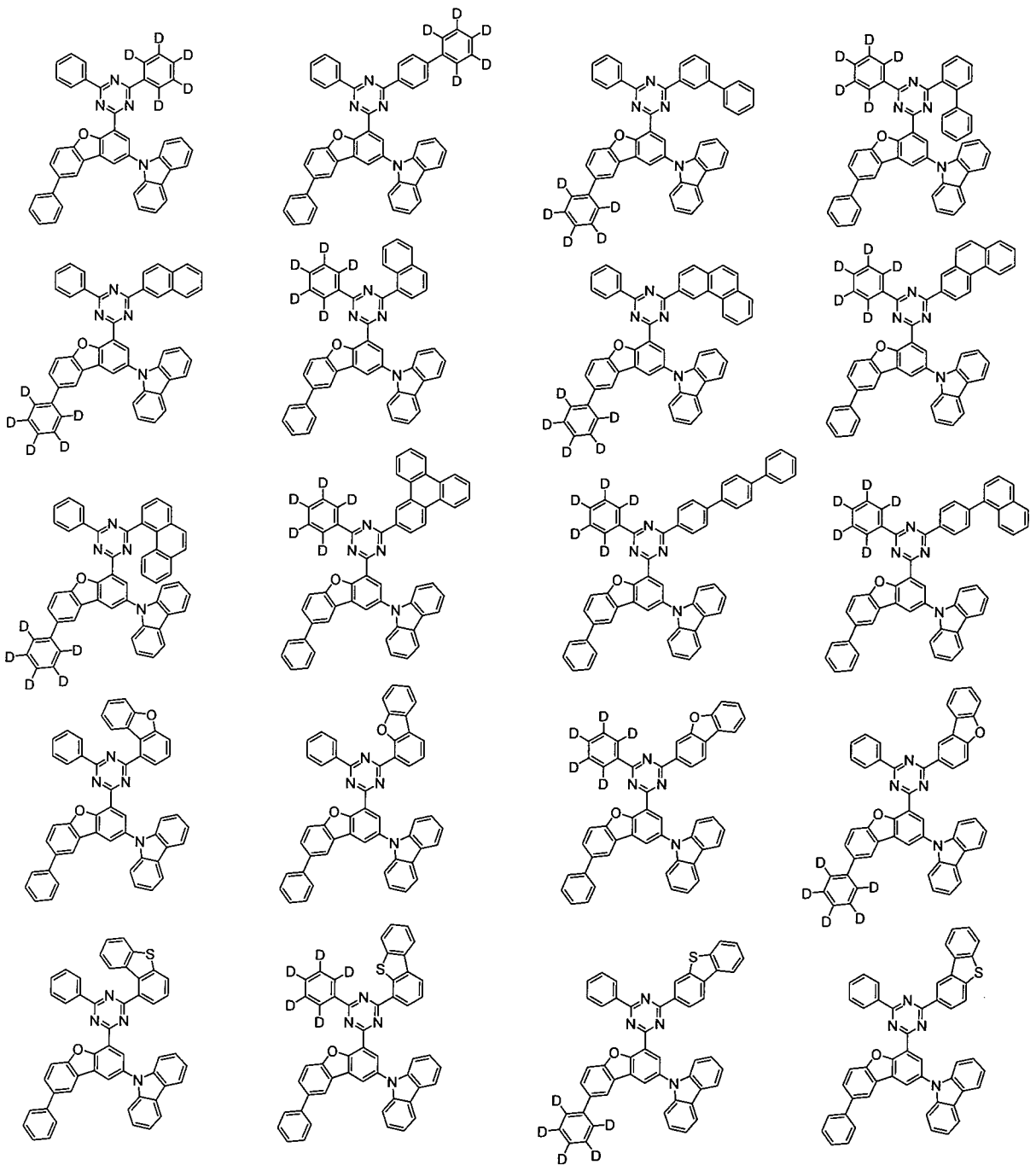


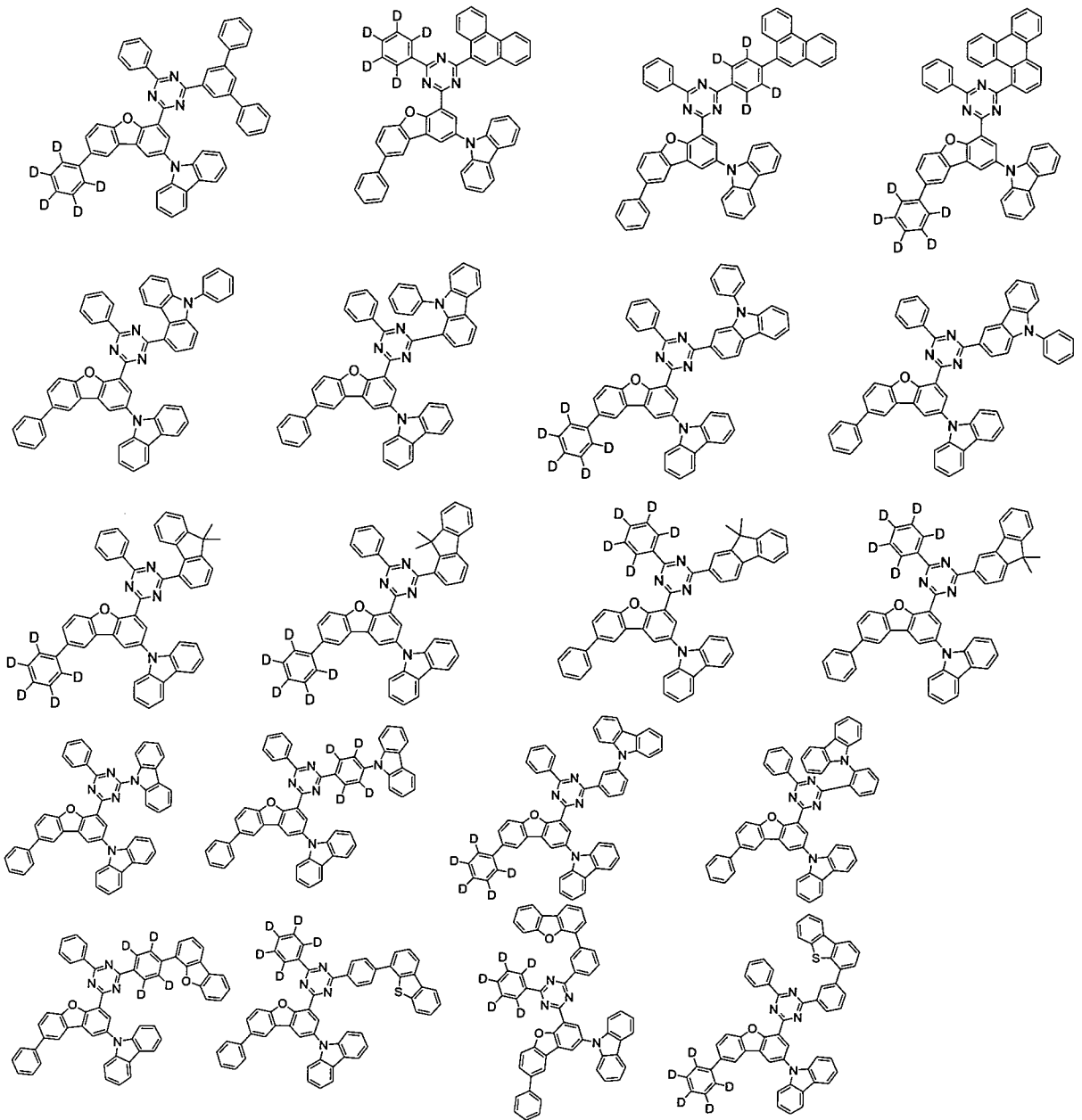


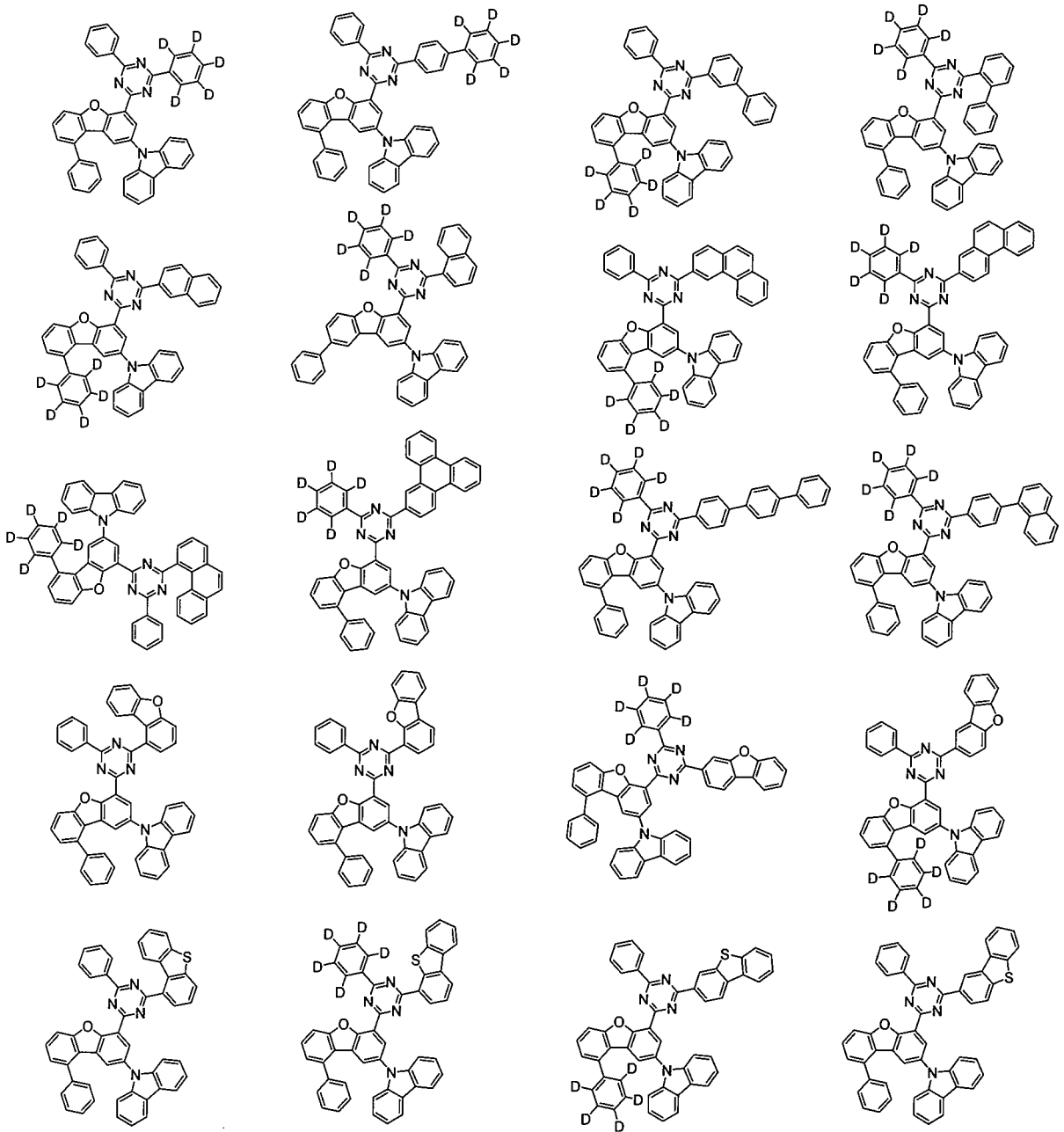


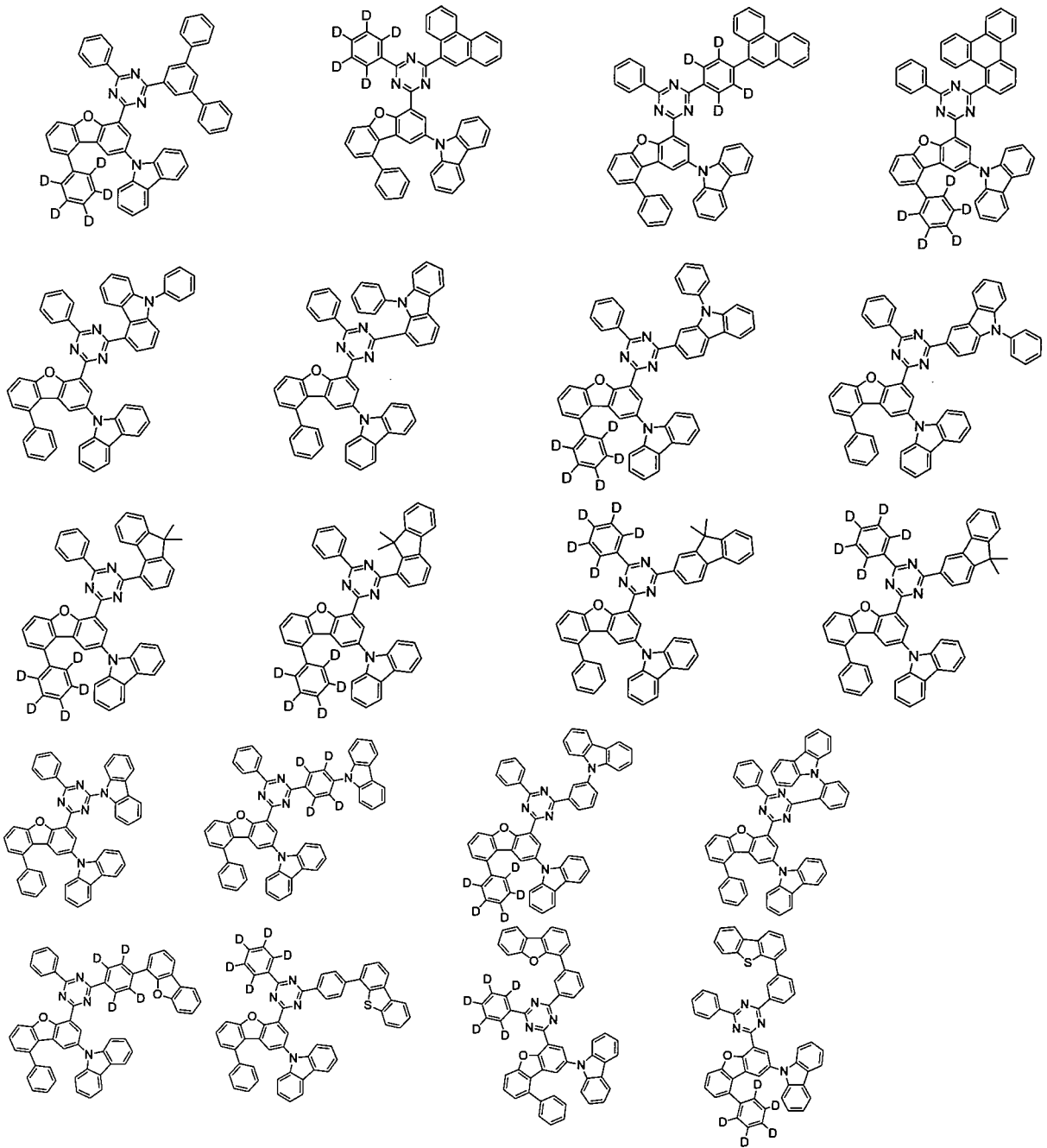


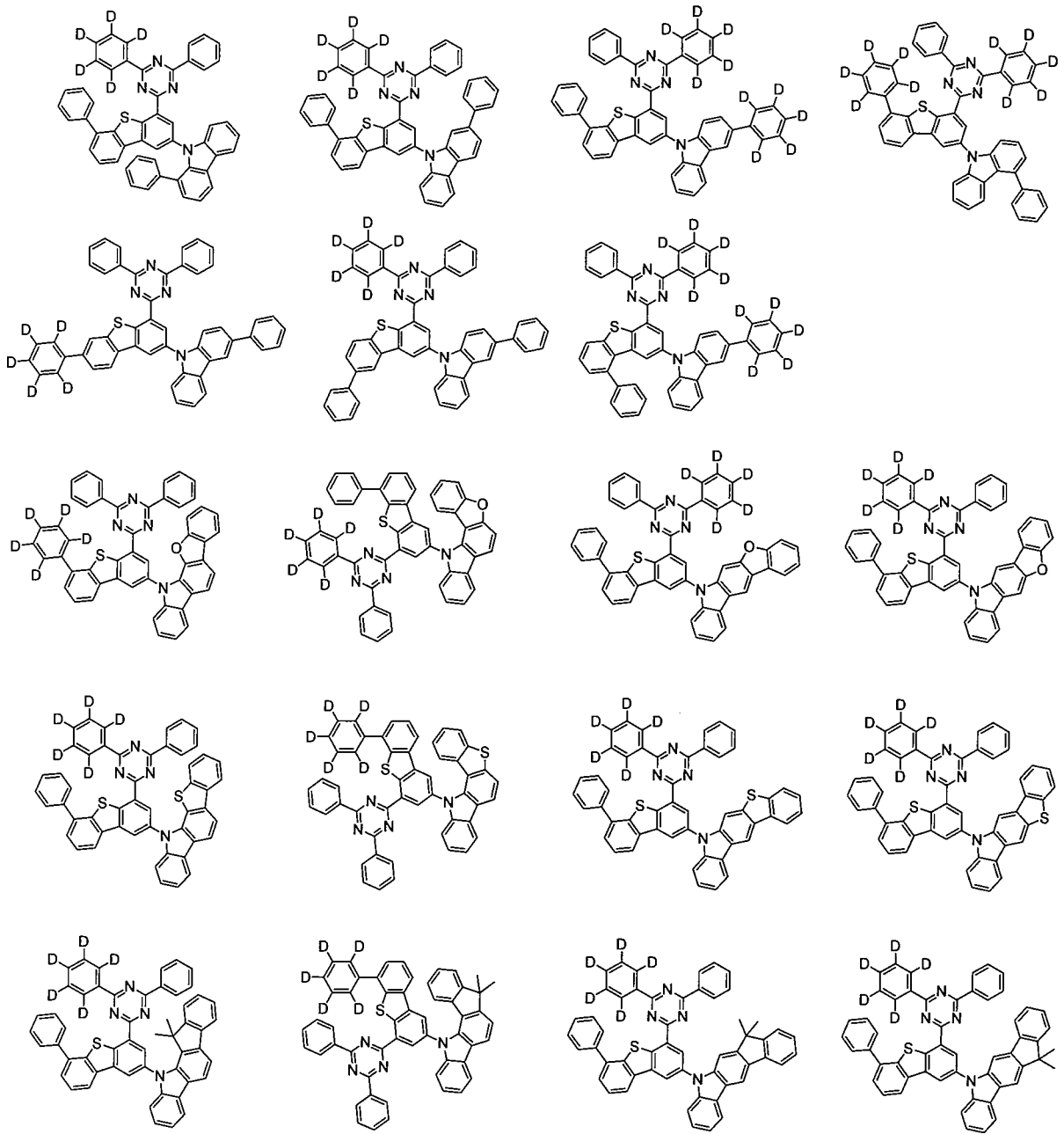


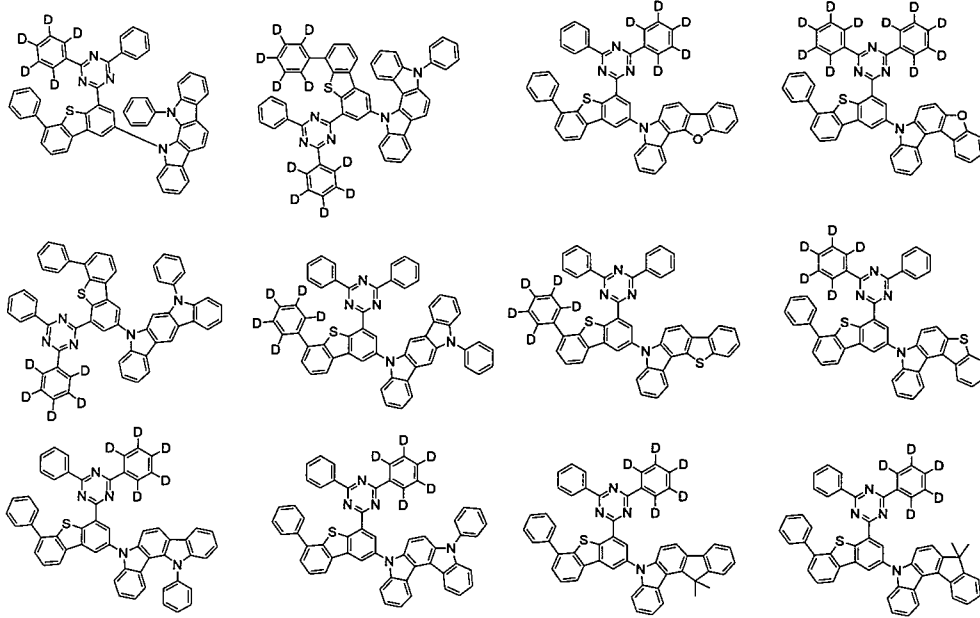


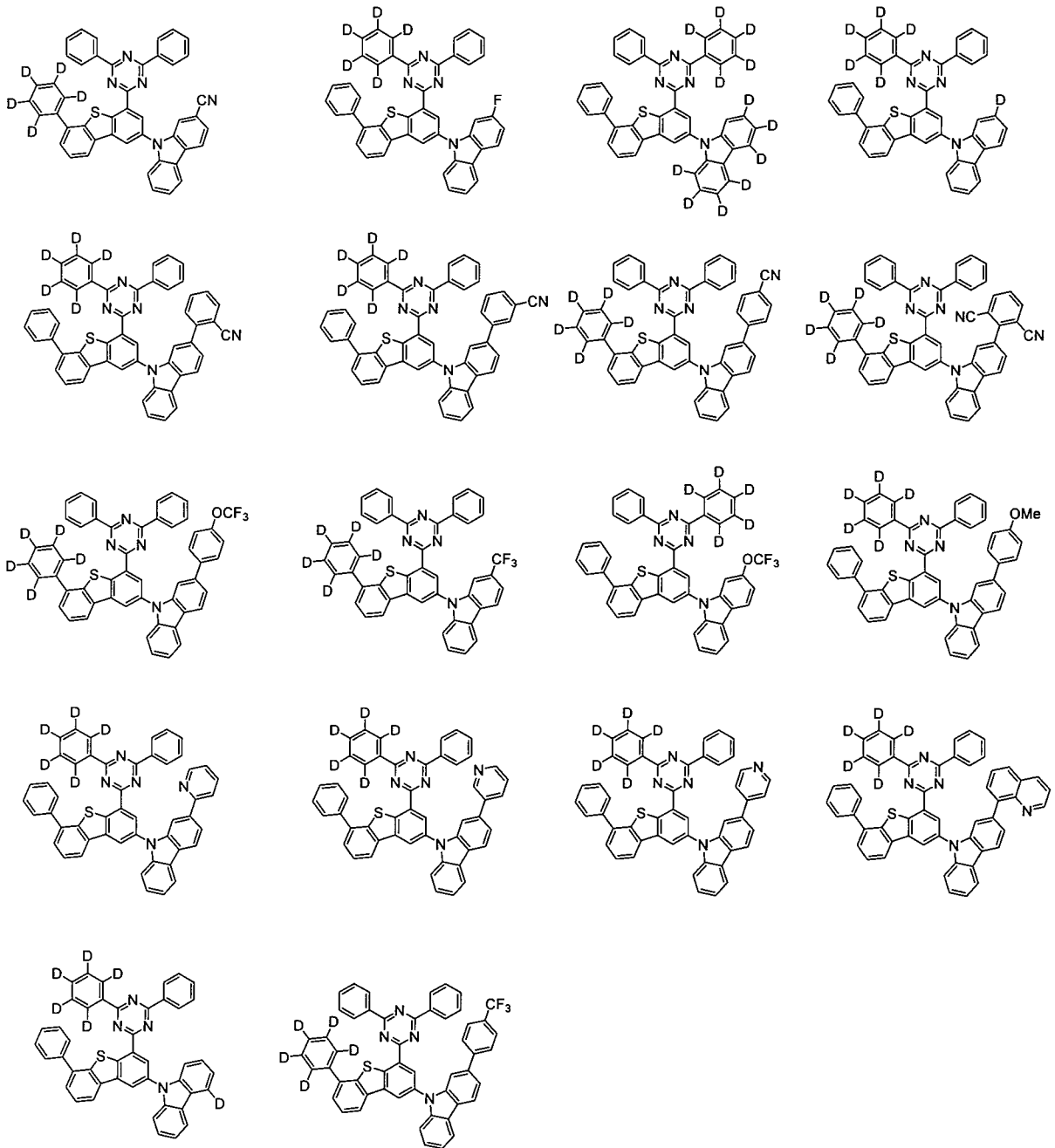


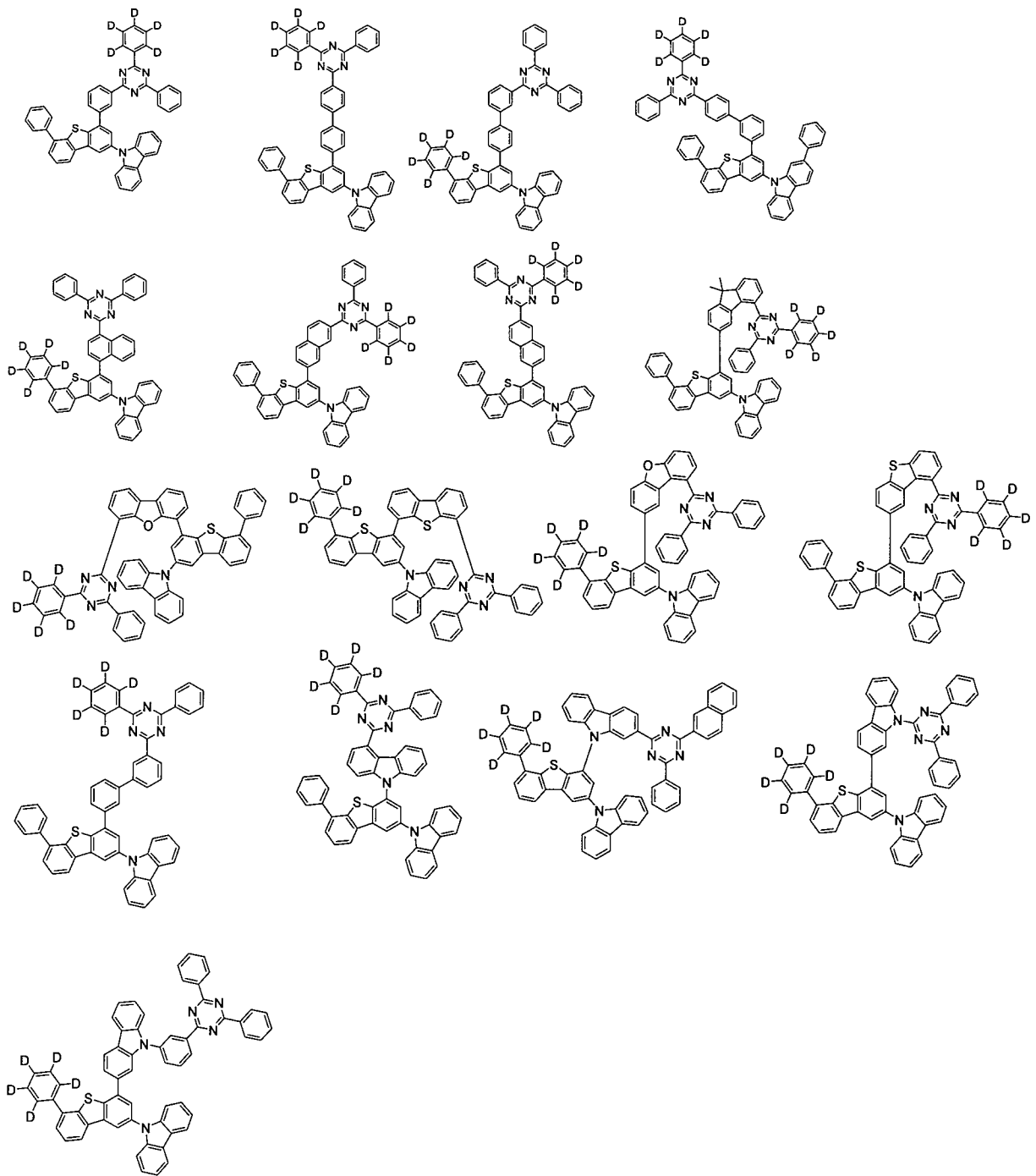


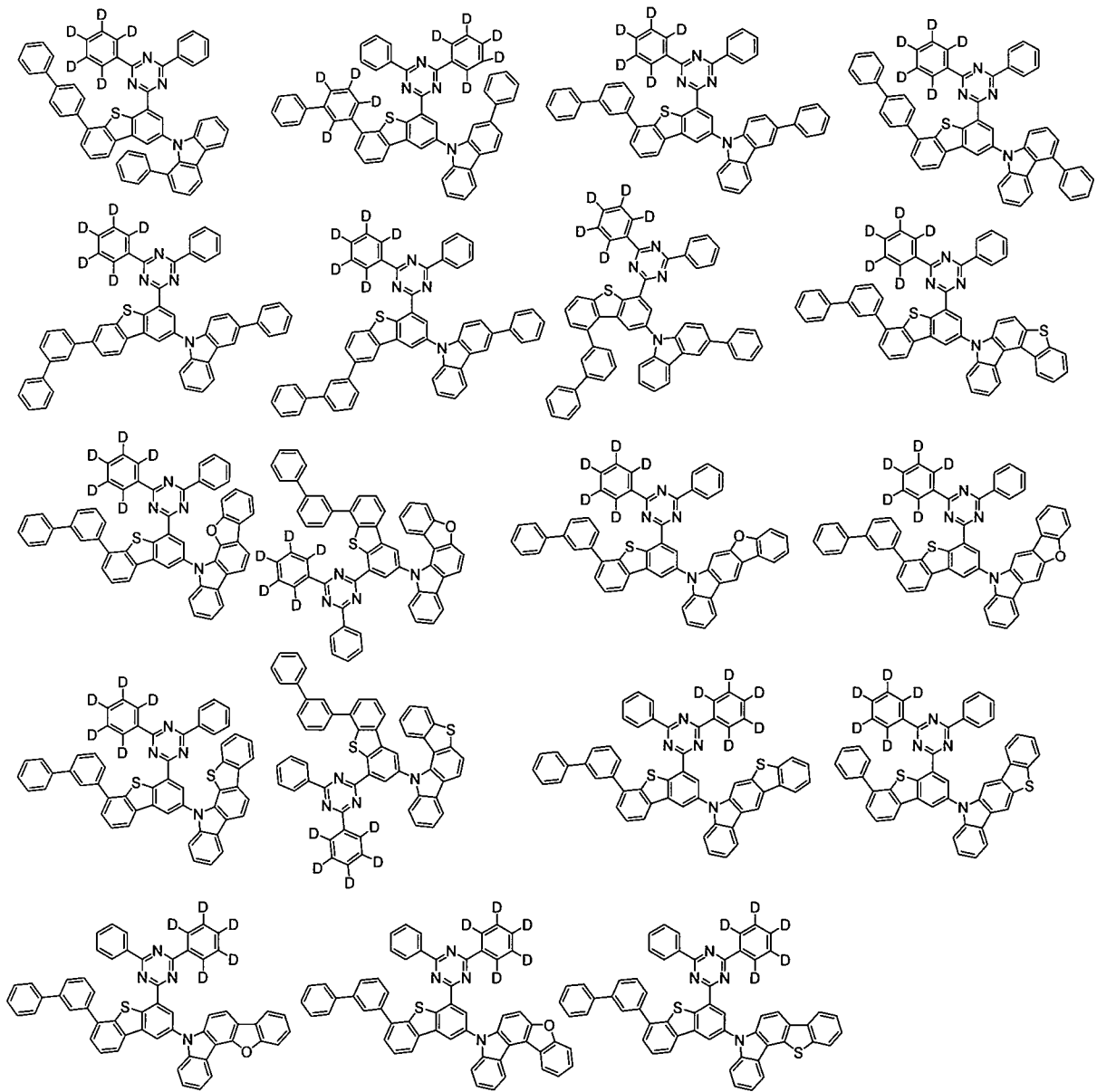


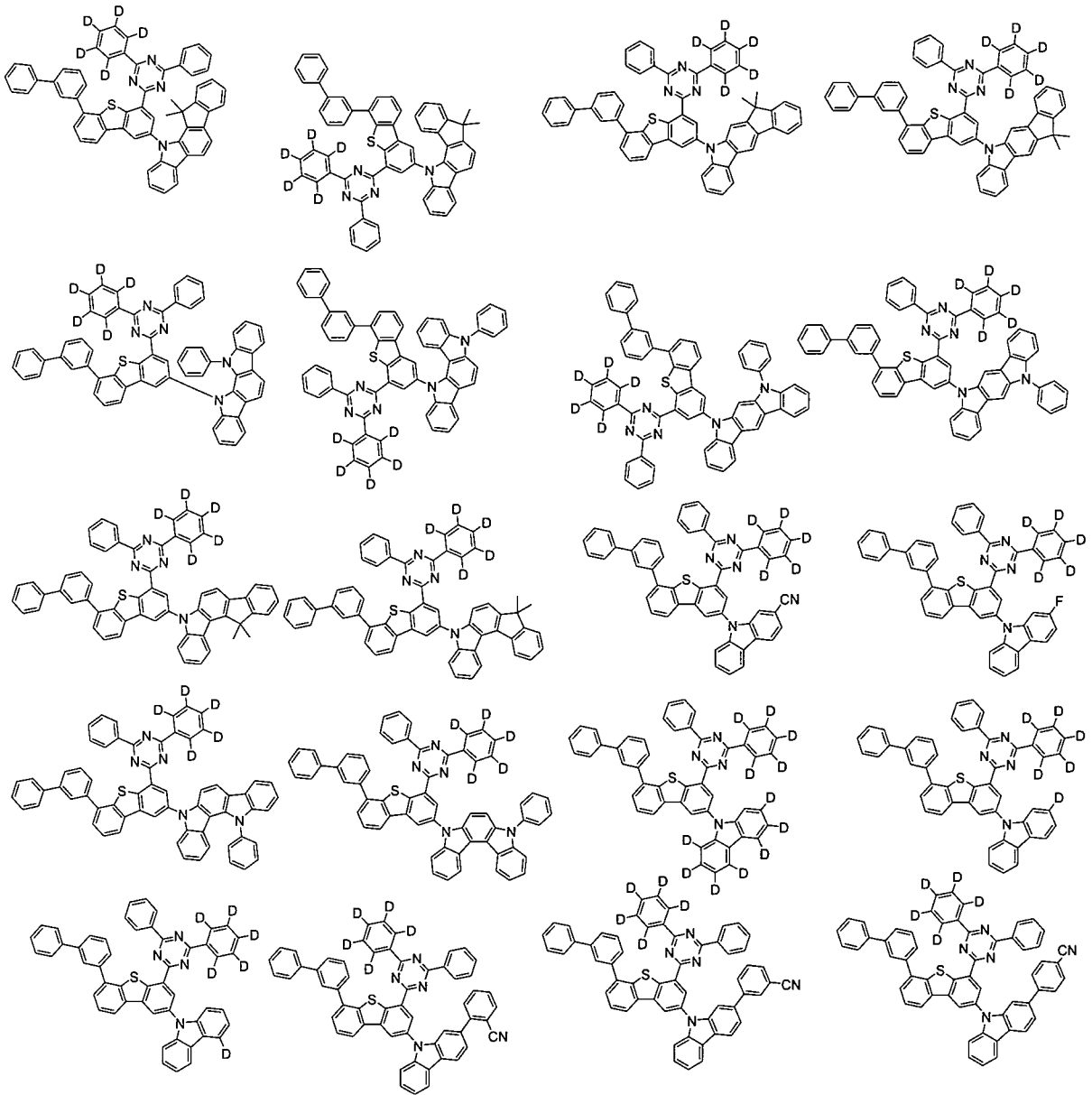


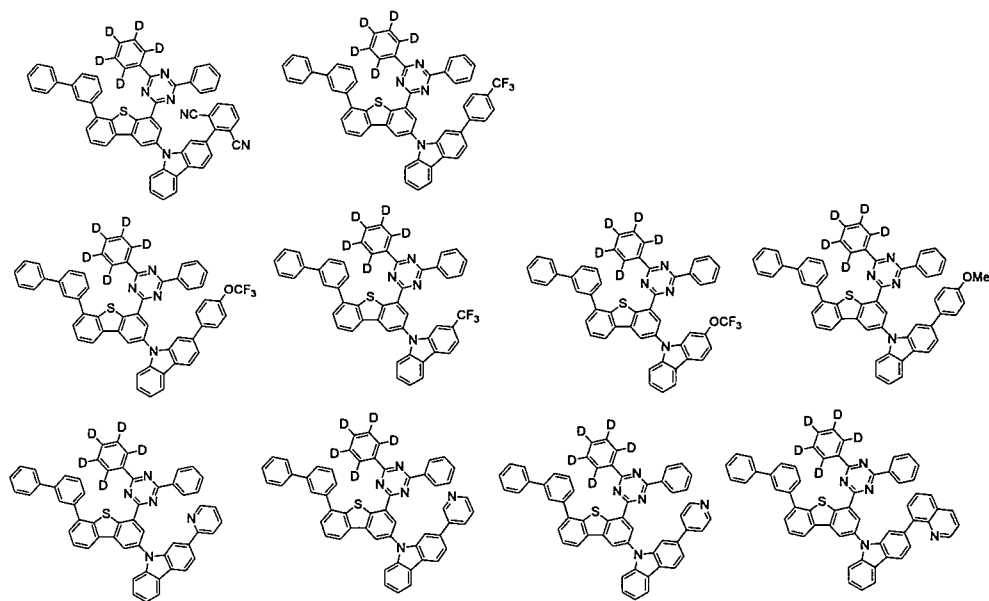


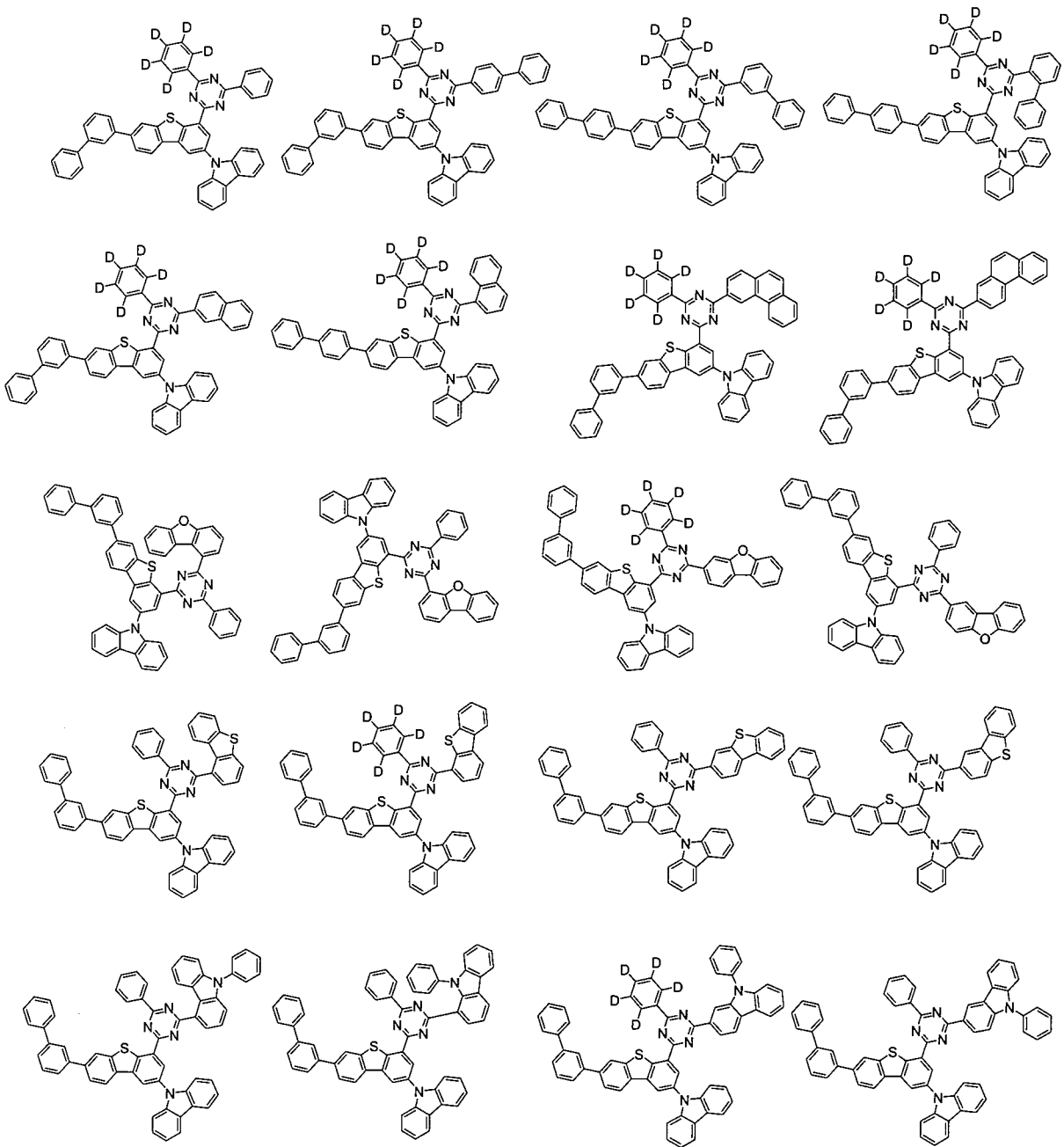


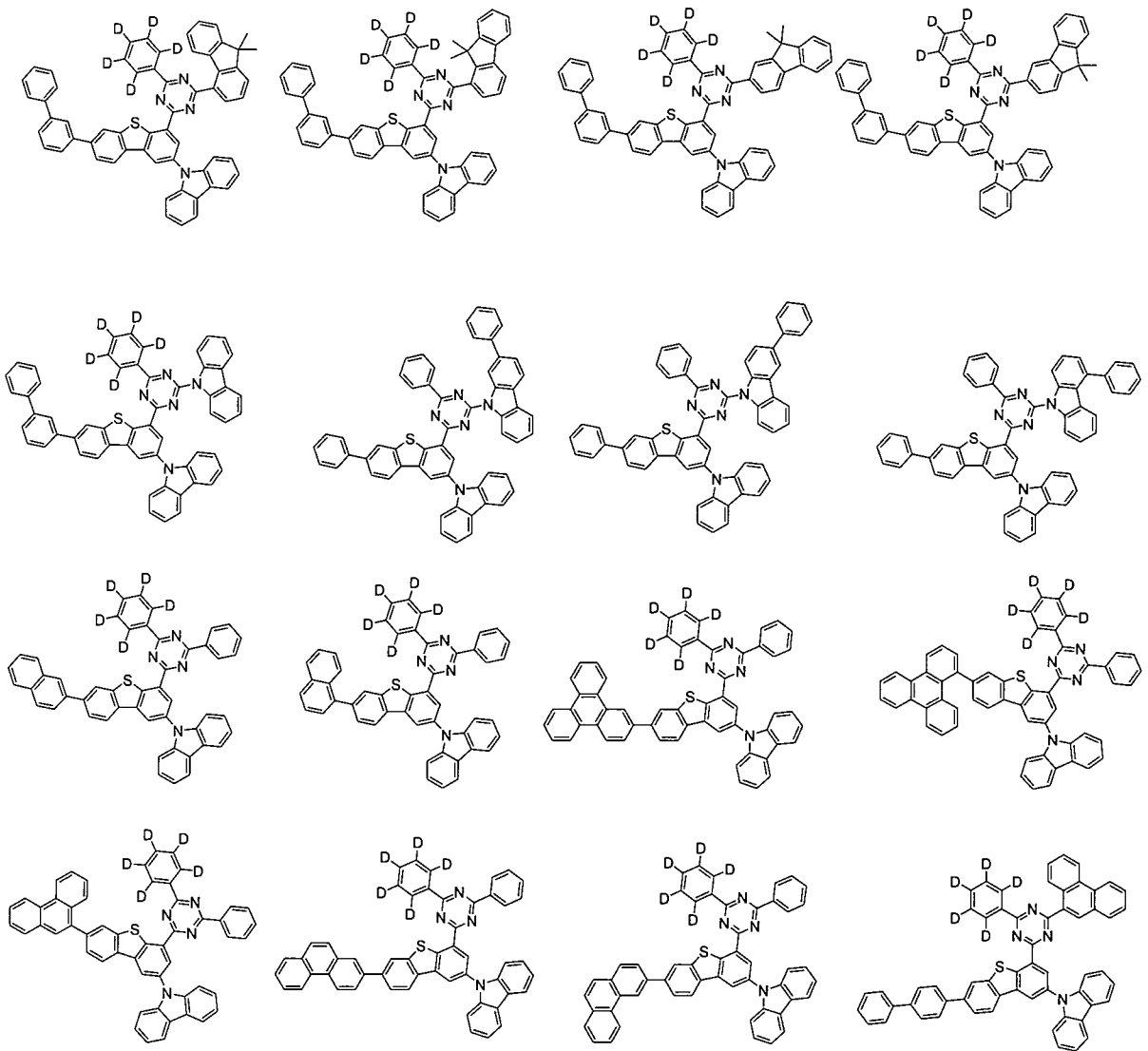


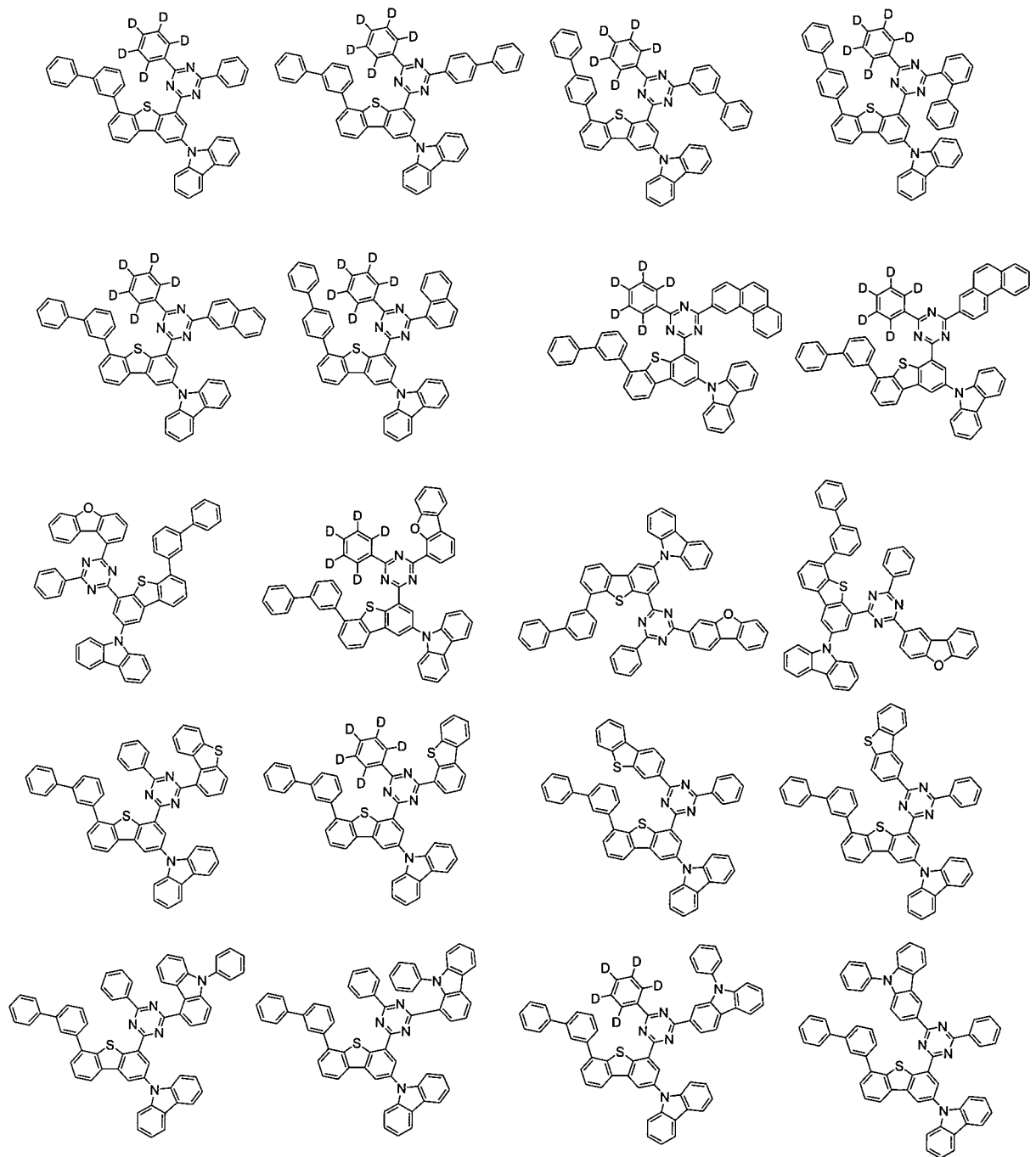


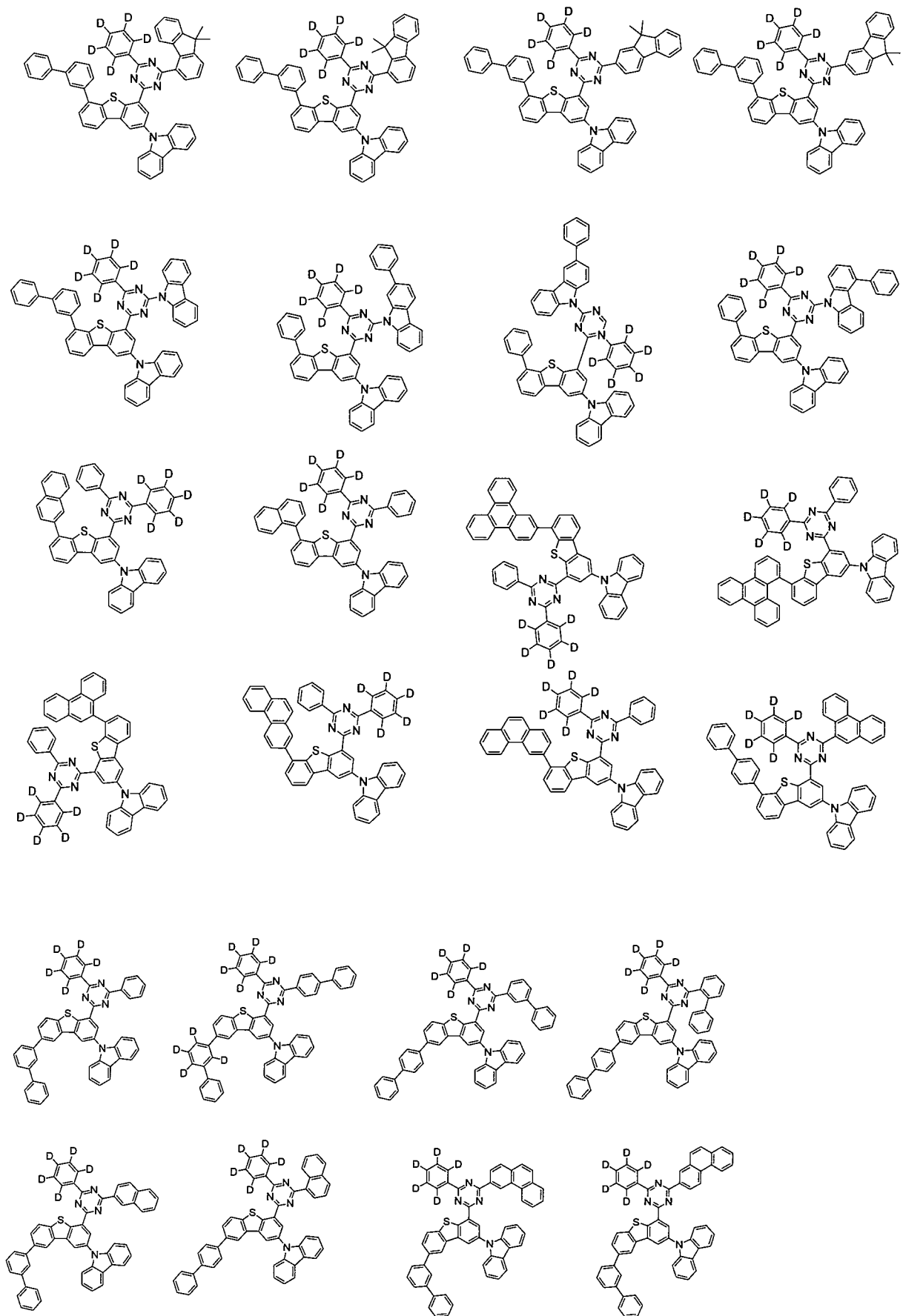


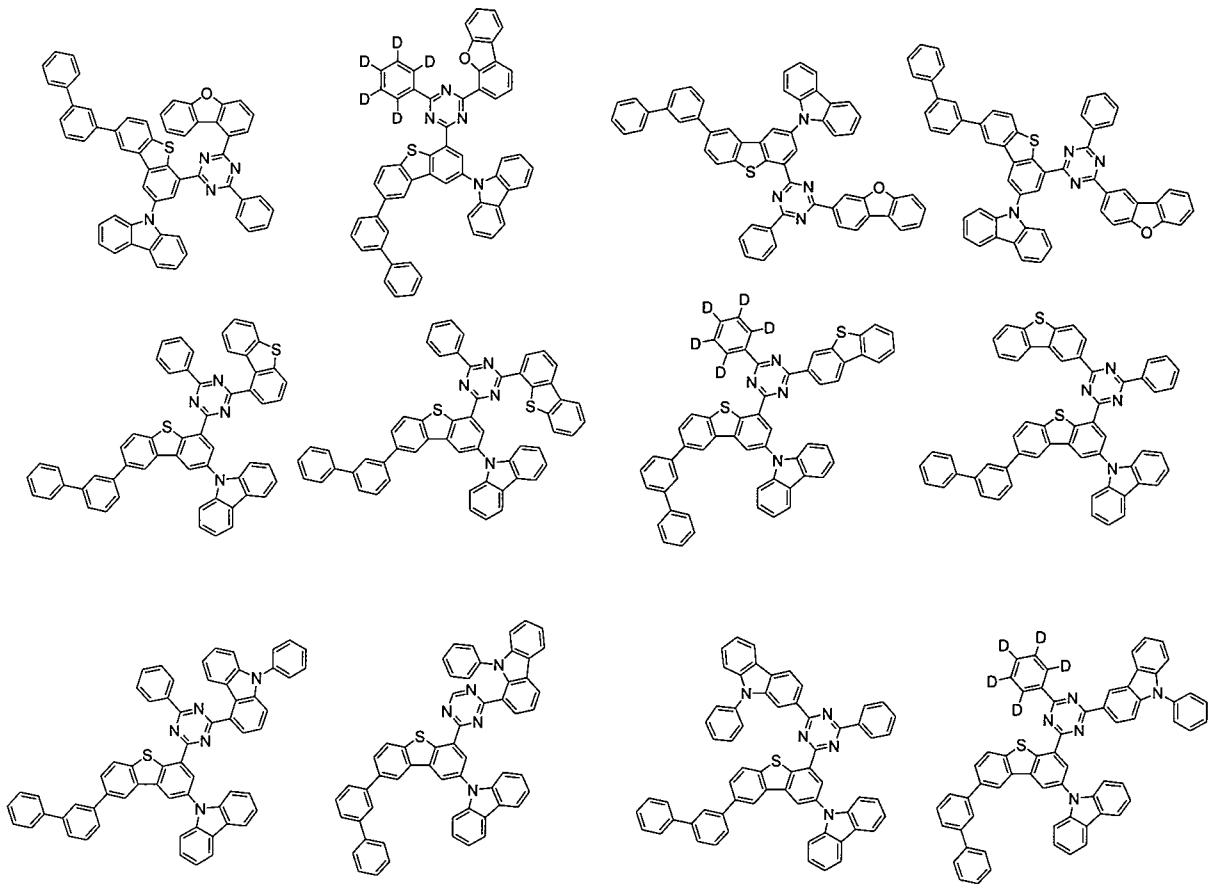


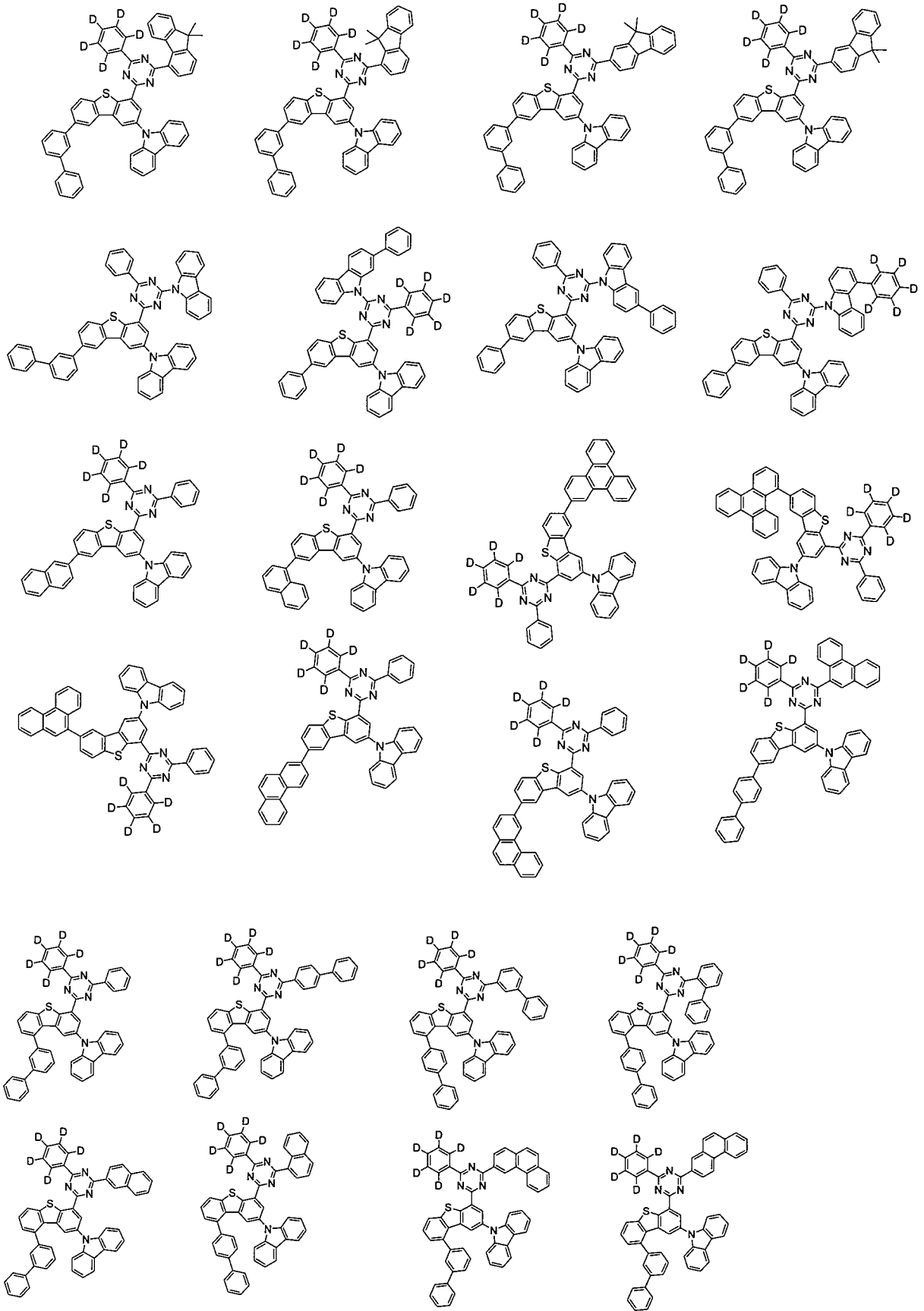


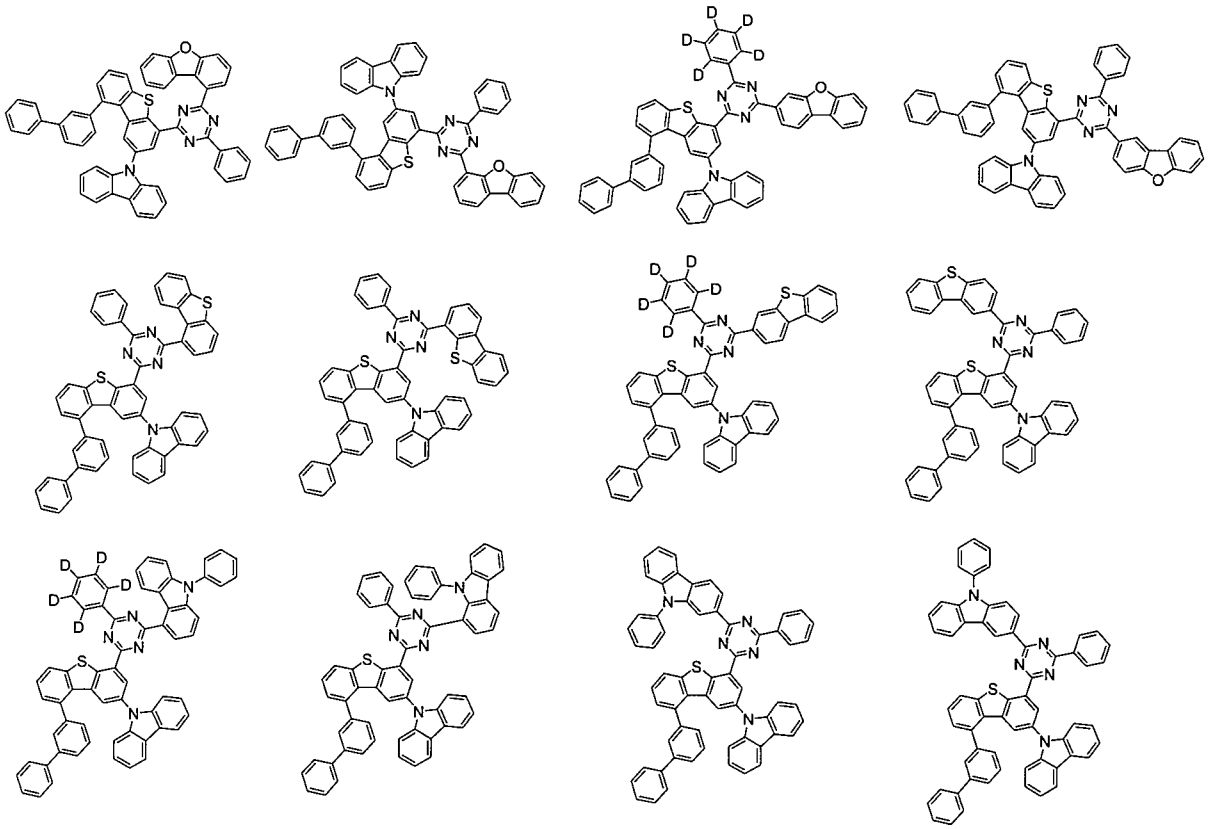


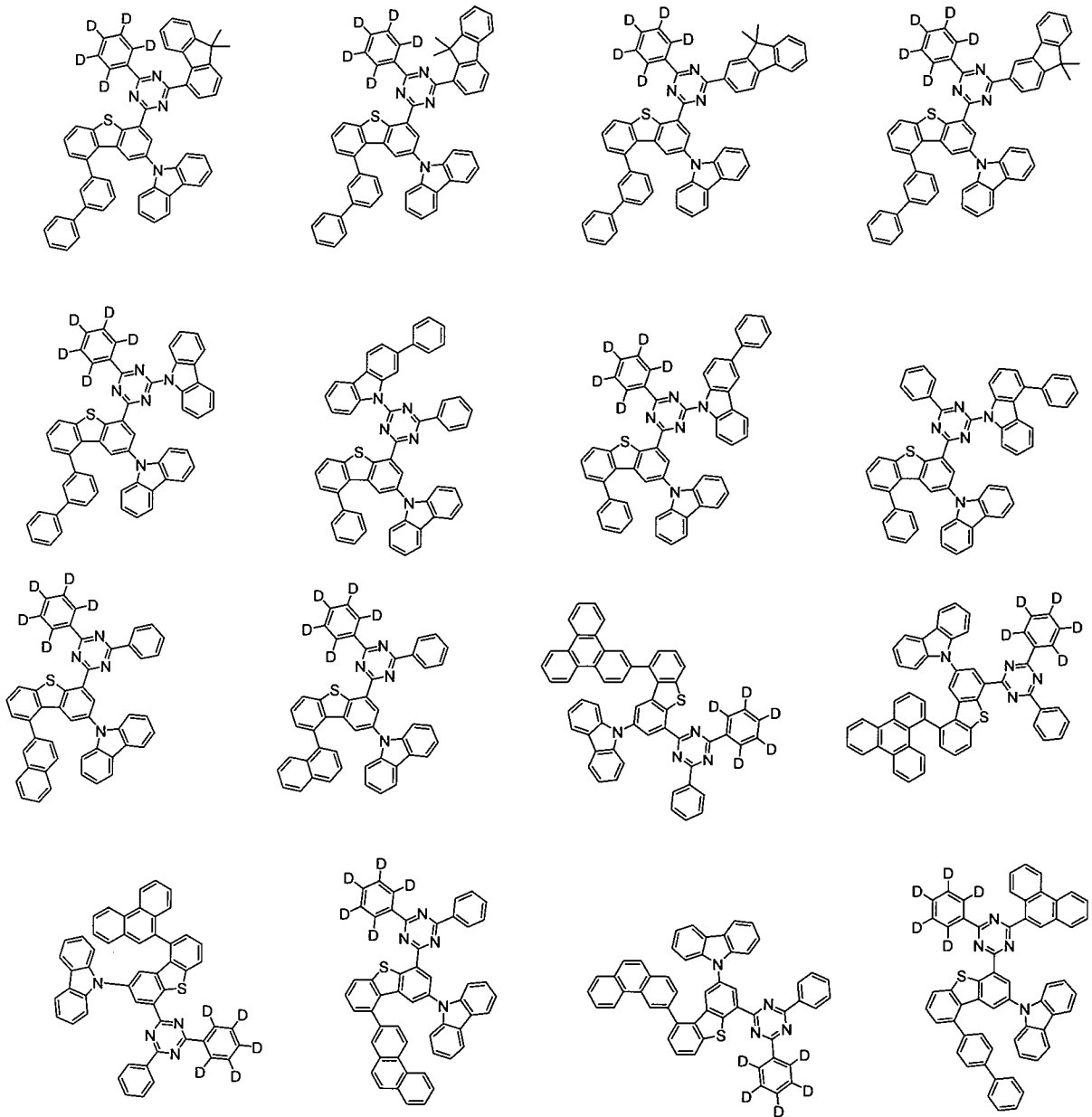


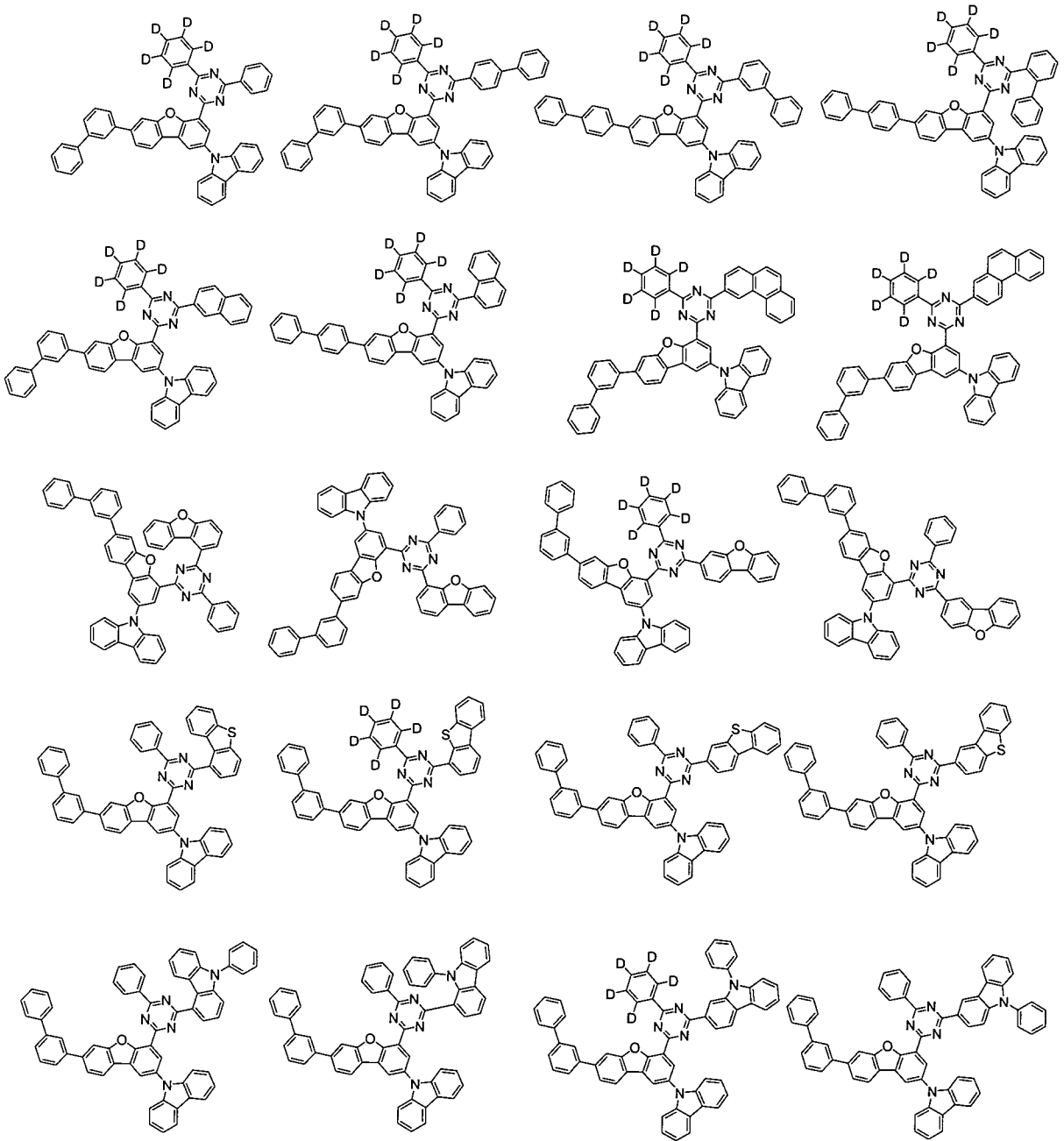


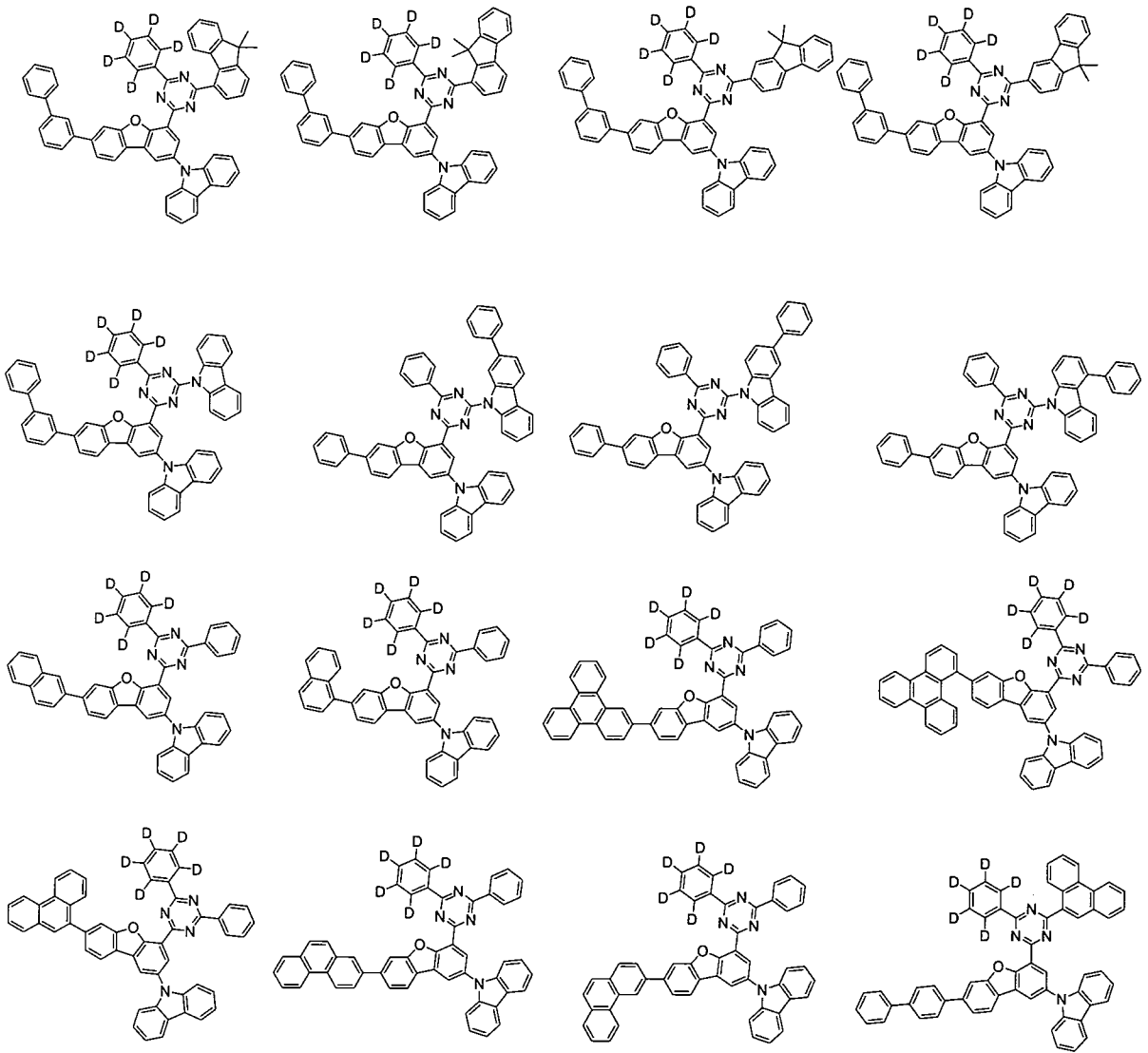


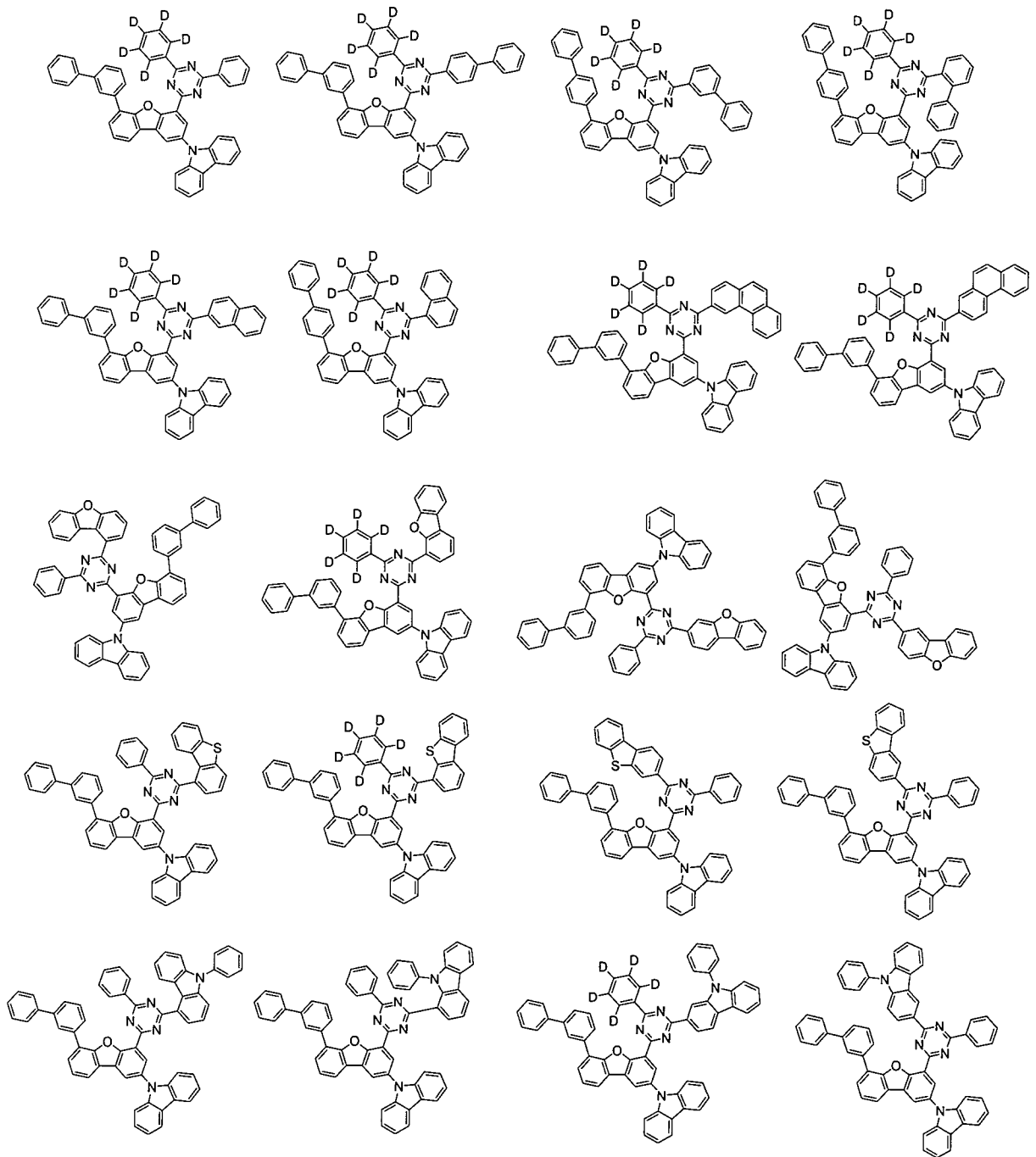


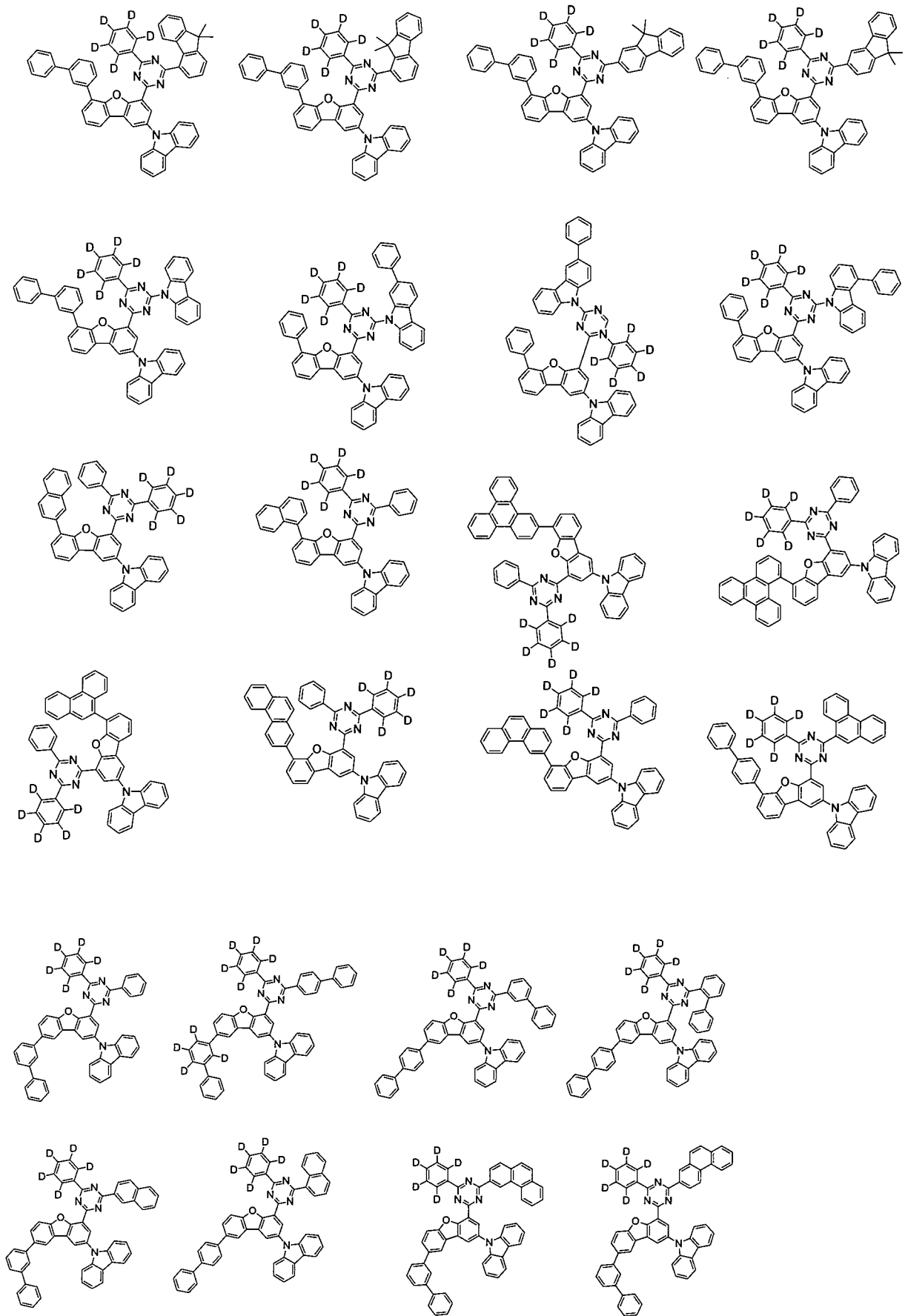


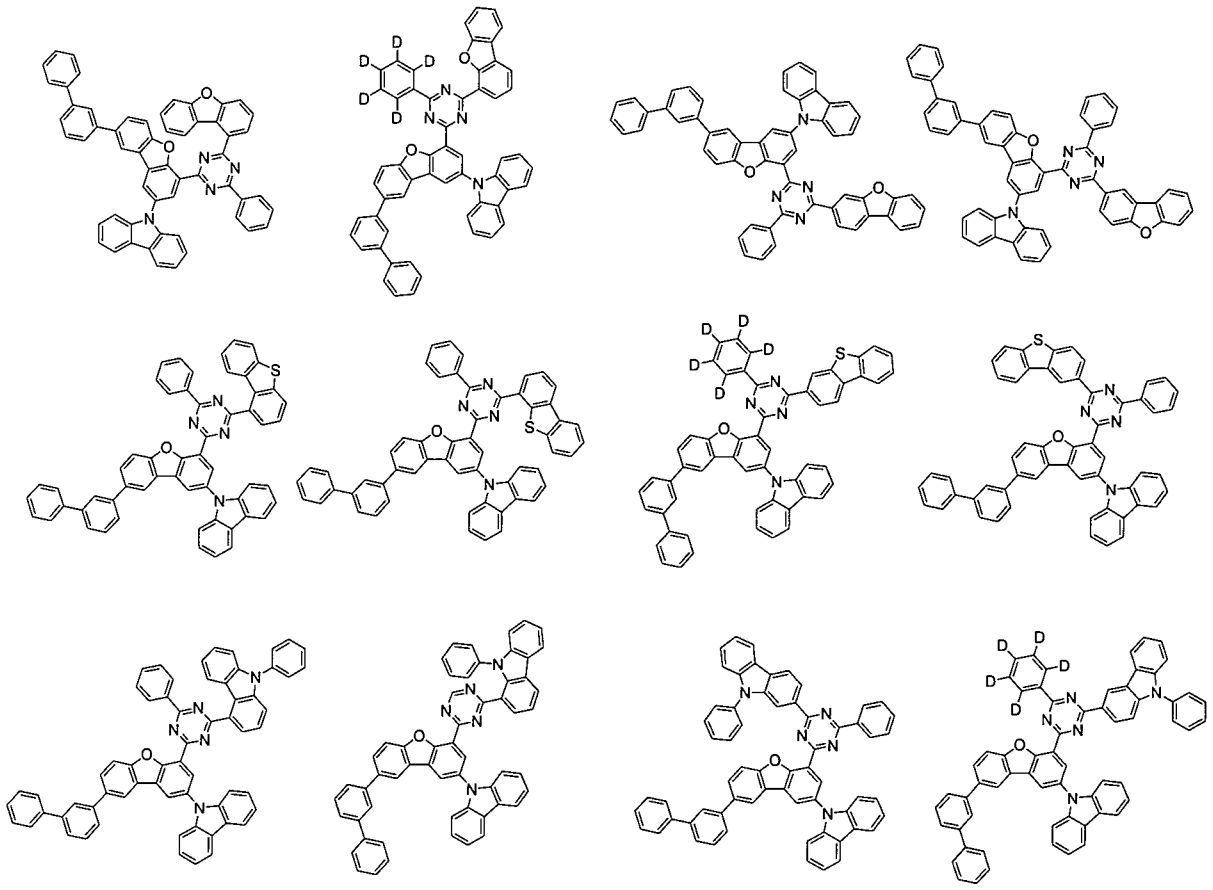


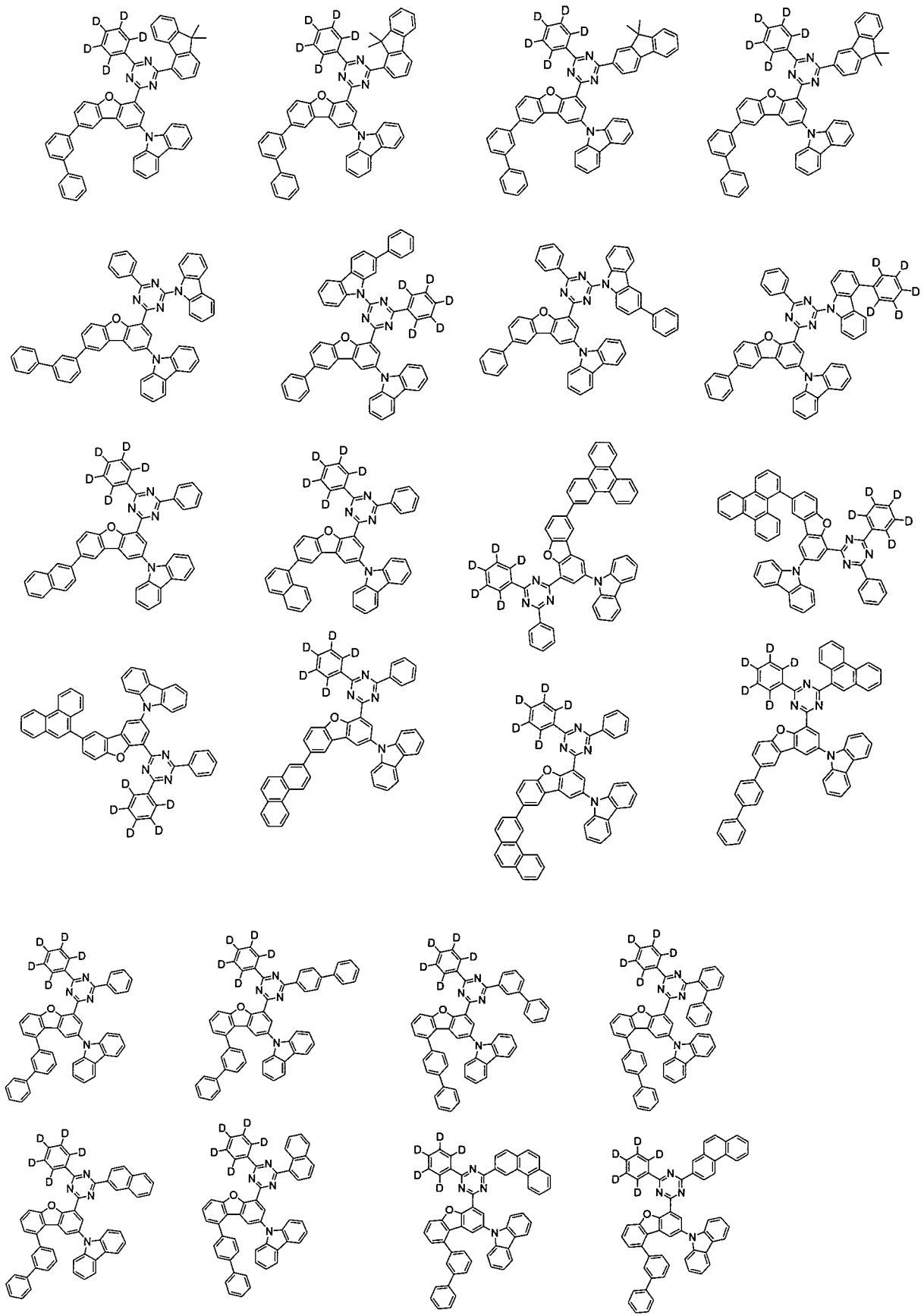


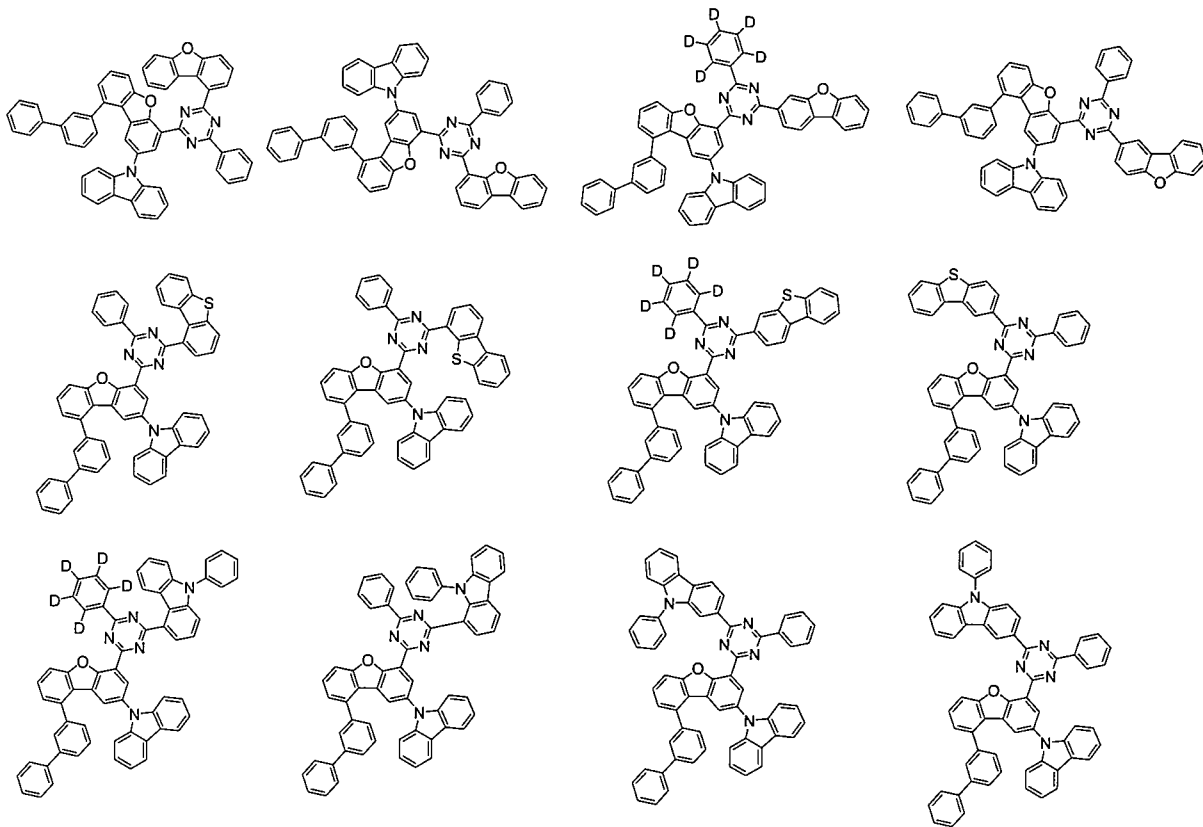


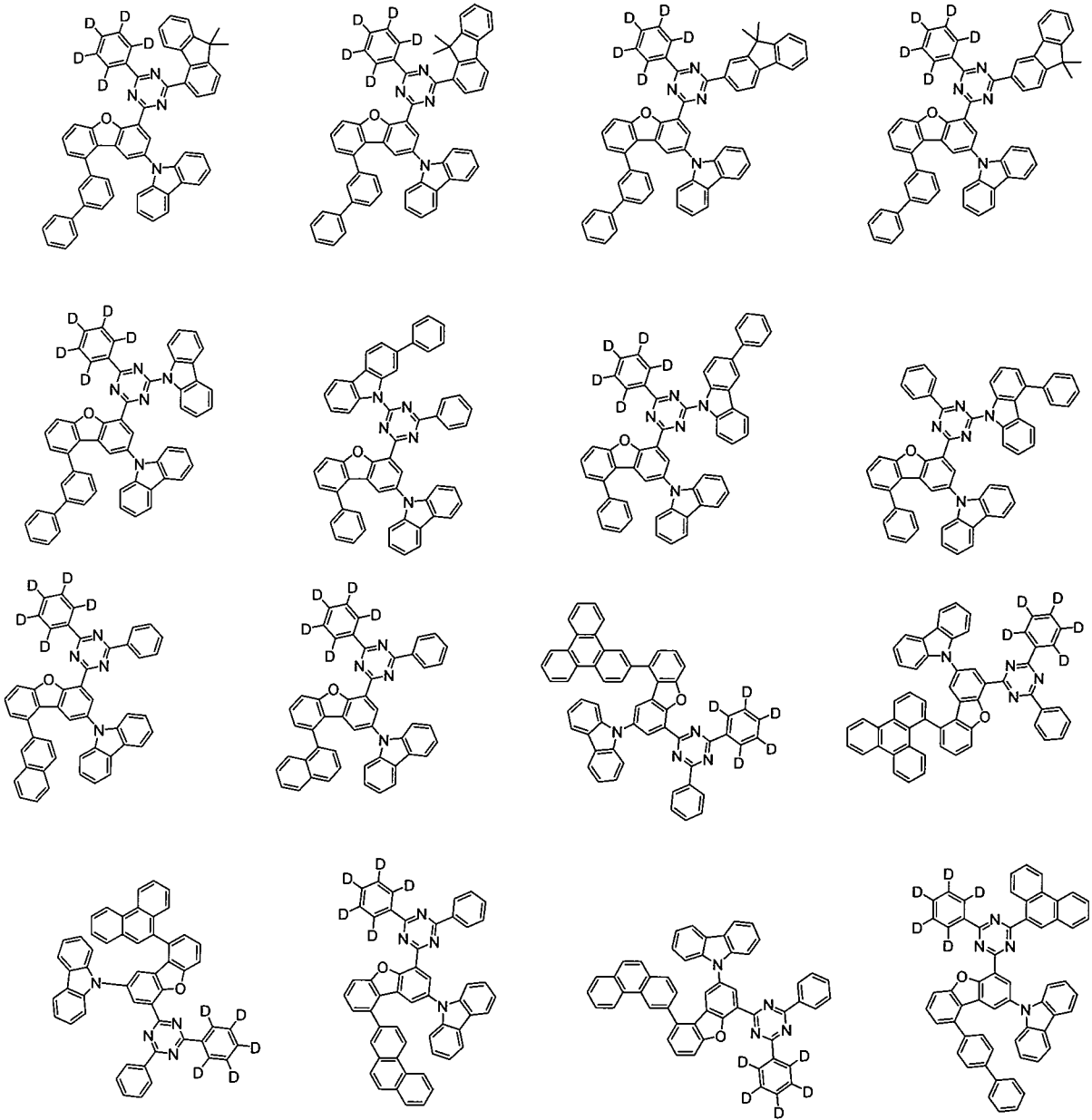












【청구항 9】

- 5 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 제 1항 내지 제 8항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

【도면】

【도 1】

4
3
2
1

【도 2】

4
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/012236

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 409/14(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 498/04(2006.01)i, C07D 513/04(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 409/14; C07D 209/82; C07D 307/91; C07D 403/10; C07D 405/14; C07D 487/04; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 498/04; C07D 513/04

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus) & Keywords: organic light-emitting diode, light-emitting layer, deuterium

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2018-0068882 A (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 22 June 2018 See claims 1, 8-10, 20.	1-9
A	KR 10-2018-0051355 A (LG CHEM, LTD.) 16 May 2018 See the entire document.	1-9
A	JP 2017-092276 A (KONICA MINOLTA, INC.) 25 May 2017 See the entire document.	1-9
A	KR 10-2017-0053590 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 16 May 2017 See the entire document.	1-9
A	KR 10-2017-0067671 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 16 June 2017 See the entire document.	1-9



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

“&” document member of the same patent family


Date of the actual completion of the international search

10 JANUARY 2020 (10.01.2020)

Date of mailing of the international search report

10 JANUARY 2020 (10.01.2020)

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/KR2019/012236

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2018-0068882 A	22/06/2018	US 2018-0166634 A1	14/06/2018
KR 10-2018-0051355 A	16/05/2018	CN 109071513 A	21/12/2018
		EP 3415512 A2	19/12/2018
		EP 3415512 A4	26/12/2018
		JP 2019-513131 A	23/05/2019
		KR 10-1885899 B1	06/08/2018
		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
JP 2017-092276 A	25/05/2017	JP 6593114 B2	23/10/2019
KR 10-2017-0053590 A	16/05/2017	KR 10-1830709 B1	21/02/2018
		TW 201722939 A	01/07/2017
		WO 2017-078494 A1	11/05/2017
KR 10-2017-0067671 A	16/06/2017	CN 108368088 A	03/08/2018
		EP 3392246 A1	24/10/2018
		JP 2019-505478 A	28/02/2019
		TW 201730184 A	01/09/2017
		US 2018-0287072 A1	04/10/2018
		WO 2017-099490 A1	15/06/2017

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 409/14(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 498/04(2006.01)i, C07D 513/04(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 409/14; C07D 209/82; C07D 307/91; C07D 403/10; C07D 405/14; C07D 487/04; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 498/04; C07D 513/04 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus) & 키워드: 유기발광소자(organic light-emitting diode), 발광층(light-emitting layer), 중수소(deuterium)		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2018-0068882 A (삼성전자주식회사) 2018.06.22 청구항 1, 8-10, 20	1-9
A	KR 10-2018-0051355 A (주식회사 엘지화학) 2018.05.16 전체 문헌	1-9
A	JP 2017-092276 A (코니카 미놀타 주식회사) 2017.05.25 전체 문헌	1-9
A	KR 10-2017-0053590 A (희성소재 (주)) 2017.05.16 전체 문헌	1-9
A	KR 10-2017-0067671 A (희성소재 (주)) 2017.06.16 전체 문헌	1-9
<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 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후 “X”에 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 2020년 01월 10일 (10.01.2020)	국제조사보고서 발송일 2020년 01월 10일 (10.01.2020)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 박제현 전화번호 +82-42-481-3349	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2018-0068882 A	2018/06/22	US 2018-0166634 A1	2018/06/14
KR 10-2018-0051355 A	2018/05/16	CN 109071513 A	2018/12/21
		EP 3415512 A2	2018/12/19
		EP 3415512 A4	2018/12/26
		JP 2019-513131 A	2019/05/23
		KR 10-1885899 B1	2018/08/06
		TW 201817727 A	2018/05/16
		TW I641606 B	2018/11/21
		US 2019-0047991 A1	2019/02/14
		WO 2018-084423 A2	2018/05/11
		WO 2018-084423 A3	2018/08/09
JP 2017-092276 A	2017/05/25	JP 6593114 B2	2019/10/23
KR 10-2017-0053590 A	2017/05/16	KR 10-1830709 B1	2018/02/21
		TW 201722939 A	2017/07/01
		WO 2017-078494 A1	2017/05/11
KR 10-2017-0067671 A	2017/06/16	CN 108368088 A	2018/08/03
		EP 3392246 A1	2018/10/24
		JP 2019-505478 A	2019/02/28
		TW 201730184 A	2017/09/01
		US 2018-0287072 A1	2018/10/04
		WO 2017-099490 A1	2017/06/15