

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020년 6월 18일 (18.06.2020) **WIPO | PCT**



(10) 국제공개번호
WO 2020/122460 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 405/04 (2006.01) *C07D 409/14* (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 409/04 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/016165

(22) 국제출원일: 2019년 11월 22일 (22.11.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0160135 2018년 12월 12일 (12.12.2018) KR

(71) 출원인: 삼성에스디아이 주식회사 (**SAMSUNG SDI CO., LTD.**) [KR/KR]; 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR).

(72) 발명자: 강동민 (**KANG, Dong Min**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 이병관 (**LEE, Byoungkwan**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 김준석 (**KIM, Jun Seok**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 이남현 (**LEE, Namheon**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 이상진 (**LEE, Sangshin**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 김동영 (**KIM, Dongyeong**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 류진현 (**LUI, Jinhyun**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 유은선 (**YU,**

Eun Sun); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 이윤만 (**LEE, Yoonman**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). 정호국 (**JUNG, Ho Kuk**); 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 팬코리아특허법인 (**PANKOREA PATENT AND LAW FIRM**); 06234 서울시 강남구 논현로85길 70, 13층, Seoul (KR).

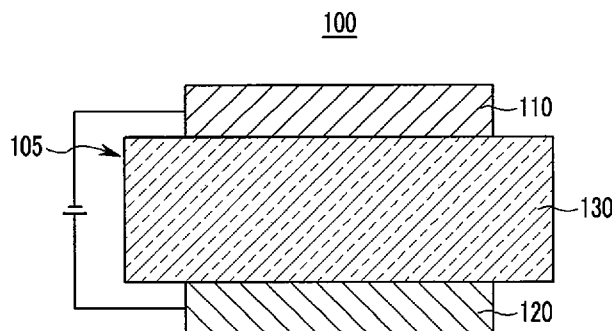
(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR,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

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, 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

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

(54) 발명의 명칭: 유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【도 1】



(57) Abstract: The present invention pertains to: a compound which is for an organic optoelectronic diode and represented by chemical formula 1; and an organic optoelectronic diode and a display device which comprise the compound. Details of chemical formula 1 are as defined in the specification.

(57) 요약서: 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다. 화학식 1에 대한 상세 내용은 명세서 내에 정의한 바와 같다.

[다음 쪽 계속]



WO 2020/122460 A1

(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML,
MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

【명세서】**【발명의 명칭】**

유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【기술분야】

5 유기 광전자 소자용 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.

10 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 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.

15 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 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 주목 받고 있다. 유기 발광 소자는 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 유기 발광 소자의 성능은 전극 사이에 위치하는 유기 재료에 의해 많은 영향을 받는다.

20 **【발명의 상세한 설명】**

【기술적 과제】

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

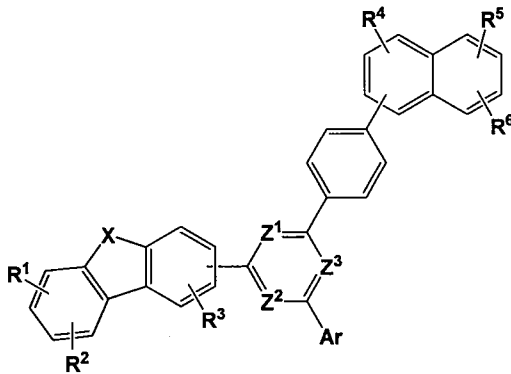
다른 구현예는 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

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

【기술적 해결방법】

일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

5 Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

Z¹ 내지 Z³은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z¹ 내지 Z³ 중 적어도 둘은 N이고,

10 R^a 및 R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 양극과 음극, 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

15 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】

20 도 1 및 도 2는 각각 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

<부호의 설명>

100, 200: 유기 발광 소자

105: 유기층

110: 음극

120: 양극

130: 발광층

140: 정공 보조층

【발명의 실시를 위한 최선의 형태】

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

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된
10 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 시아노기, 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

15 본 발명의 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가
20 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 디벤조퓨란일기, 디벤조티오펜일기 또는 카바졸일기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는
25 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 C6 내지 C18 아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기 또는 트리페닐렌기로 치환된 것을 의미한다.

본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O,
30 S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고,

나머지는 탄소인 것을 의미한다.

본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서, 탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리, 예컨대 플루오레닐기 등을 포함할 수 있다.

아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉,

탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리스에닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

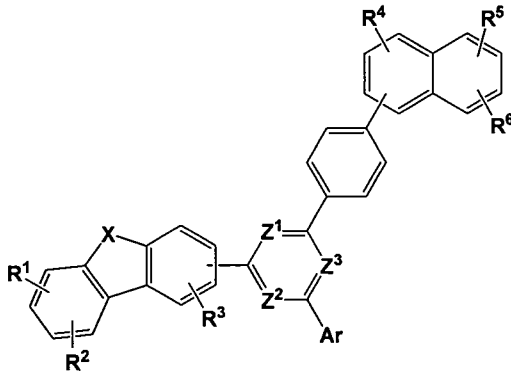
보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진릴기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진릴기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아진릴기, 치환 또는 비치환된 페녹사진릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란릴기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜릴기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 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.

일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표현된다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

5 Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

Z¹ 내지 Z³은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z¹ 내지 Z³ 중 적어도 둘은 N이고,

10 R^a 및 R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

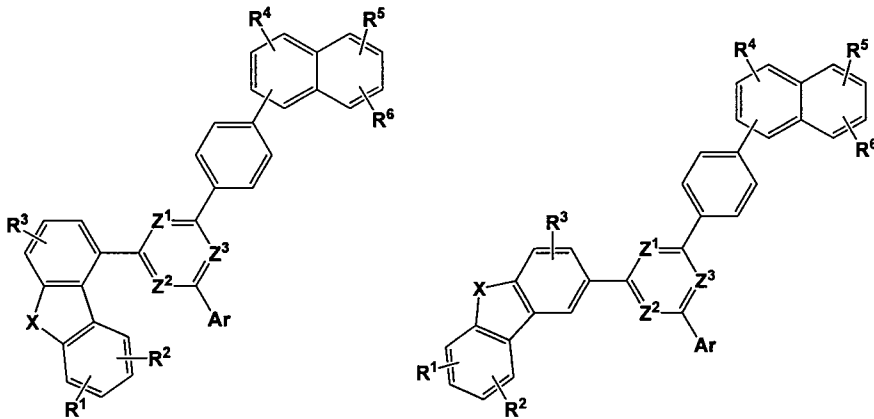
상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 피리미딘 또는 트리아진 코어를 중심으로 나프틸기가 비치환된 para-페닐렌으로 연결되고, 동시에 디벤조퓨란(또는 디벤조티오펜)이 상기 코어에 연결기 없이 직접 치환되는 구조이다.

15 특히, 코어와 나프틸기 사이에 비치환된 para-페닐렌을 도입하여 적당한 LUMO 에너지와 레드 호스트에 적합한 T1 에너지 레벨을 갖게 함으로써 장수명/저전압 구동 특성을 나타내는 레드 호스트를 개발할 수 있다.

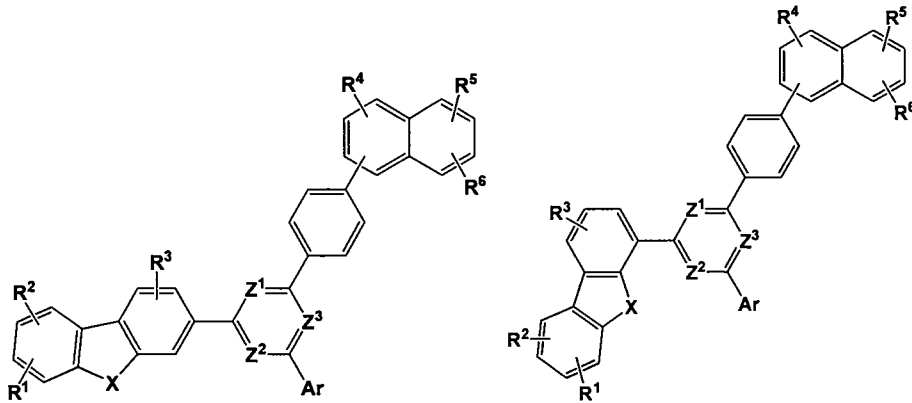
또한, 코어에 디벤조퓨란(또는 디벤조티오펜)이 연결기 없이 직접 치환됨으로써 빠른 전자 이동 특성을 갖게 되어 저구동 특성이 더욱 향상될 수
20 있다.

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-4 중 하나로 표현될 수 있다.

[화학식 1-1][화학식 1-2]



[화학식 1-3][화학식 1-4]



- 5 상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-4에서, X, Ar, Z¹ 내지 Z³ 및 R¹ 내지 R⁶은 전술한 바와 같다.

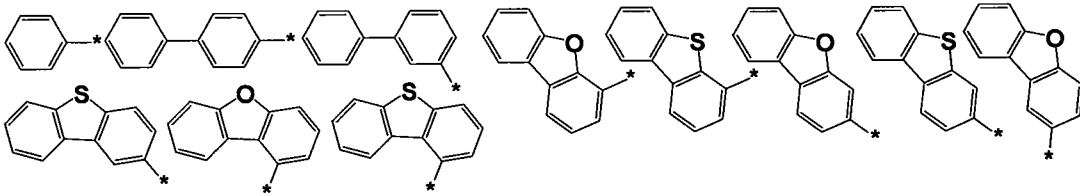
예컨대 상기 화학식 1은 상기 화학식 1-1 또는 화학식 1-3으로 표현될 수 있다.

- 10 일 예로 상기 Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 헤테로고리기일 수 있고, 예컨대 상기 Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기 또는 C2 내지 C12 헤테로고리기일 수 있으며, 예컨대 상기 Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

- 15 더욱 구체적인 일 예로 상기 Ar은 비치환된 페닐기, 비치환된 바이페닐기, 페닐기로 치환되거나 비치환된 디벤조푸란일기 또는 페닐기로 치환되거나 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

가장 구체적인 일 예로 상기 Ar은 하기 그룹 I에 나열된 치환기에서 선택되는 하나일 수 있다.

[그룹 I]



일 예로 상기 Z^1 은 내지 Z^3 은 각각 N일 수 있다.

일 예로 상기 R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소 또는 C6 내지 C18

- 5 아릴기일 수 있고, 예컨대 상기 R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소 또는 C6 내지 C12 아릴기일 수 있다.

구체적인 일 예로 상기 R^1 내지 R^3 은 각각 독립적으로 수소 또는 페닐기일 수 있고, 예컨대 R^1 및 R^2 는 수소이고 R^3 는 페닐기일 수 있으며, 예컨대 R^1 및 R^2 중 어느 하나는 페닐기이고 R^3 는 수소일 수 있다.

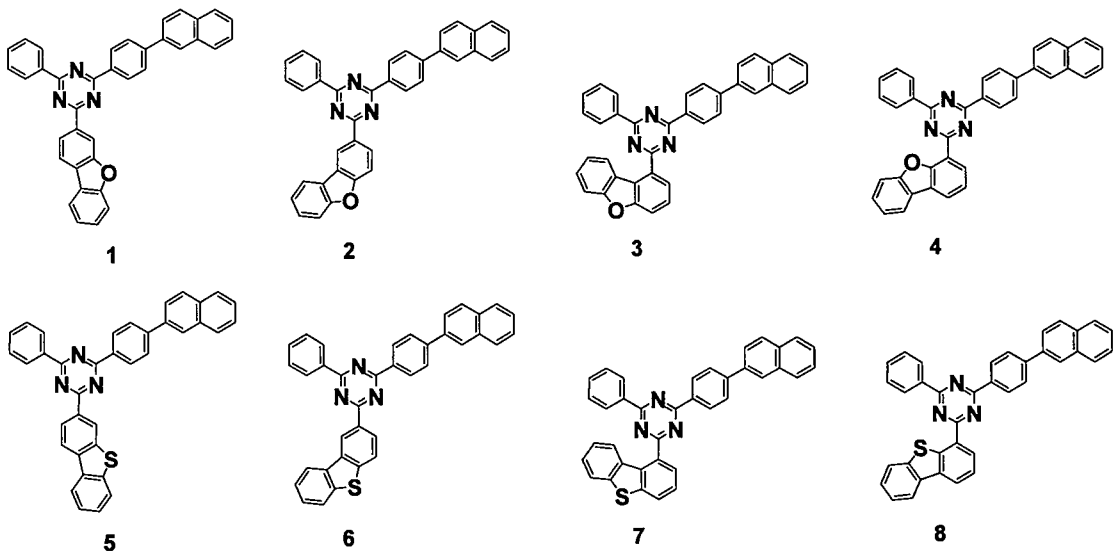
- 10 구체적인 일 예로 상기 R^4 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

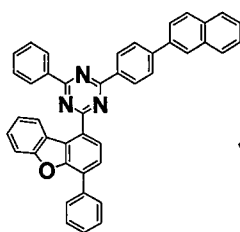
예컨대 상기 R^1 내지 R^3 은 각각 독립적으로 수소이거나 R^1 내지 R^3 중 어느 하나가 페닐기이고 나머지는 수소이며, 상기 R^4 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

일 예로 상기 Z^1 은 내지 Z^3 은 각각 N일 수 있다.

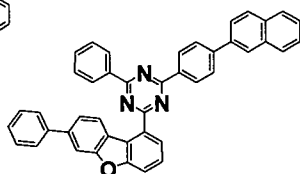
- 15 일 실시예에 따르면 상기 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

[그룹 1]

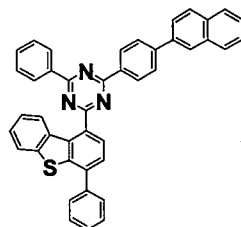




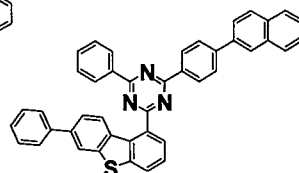
33



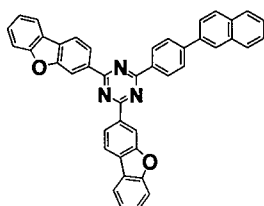
34



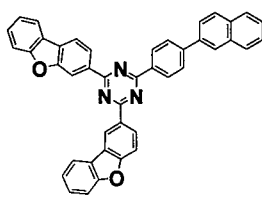
35



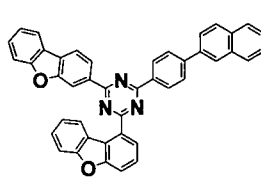
36



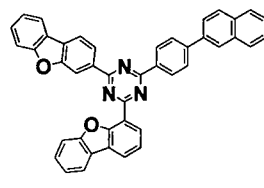
37



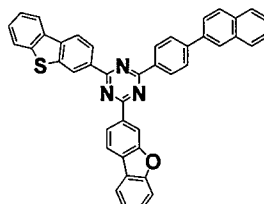
38



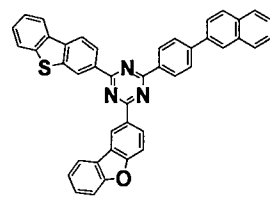
39



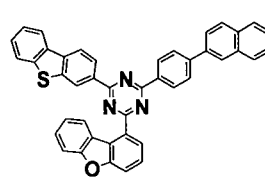
40



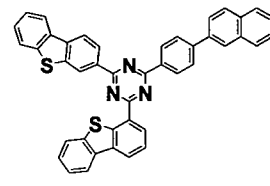
41



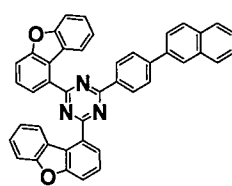
42



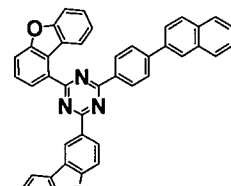
43



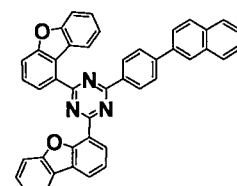
44



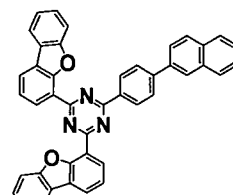
45



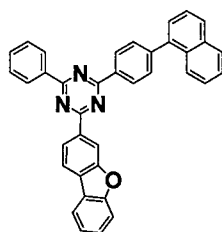
46



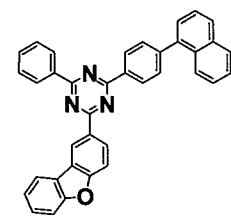
47



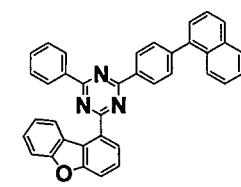
48



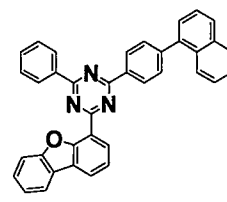
49



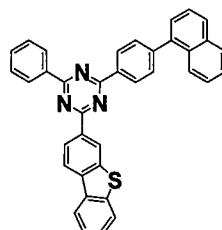
50



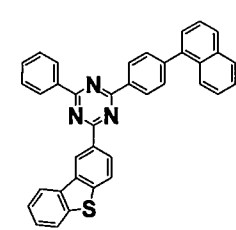
51



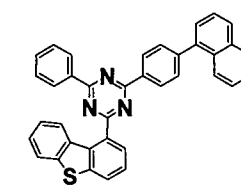
52



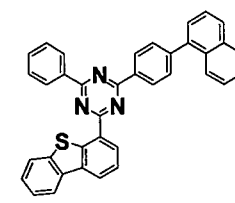
53



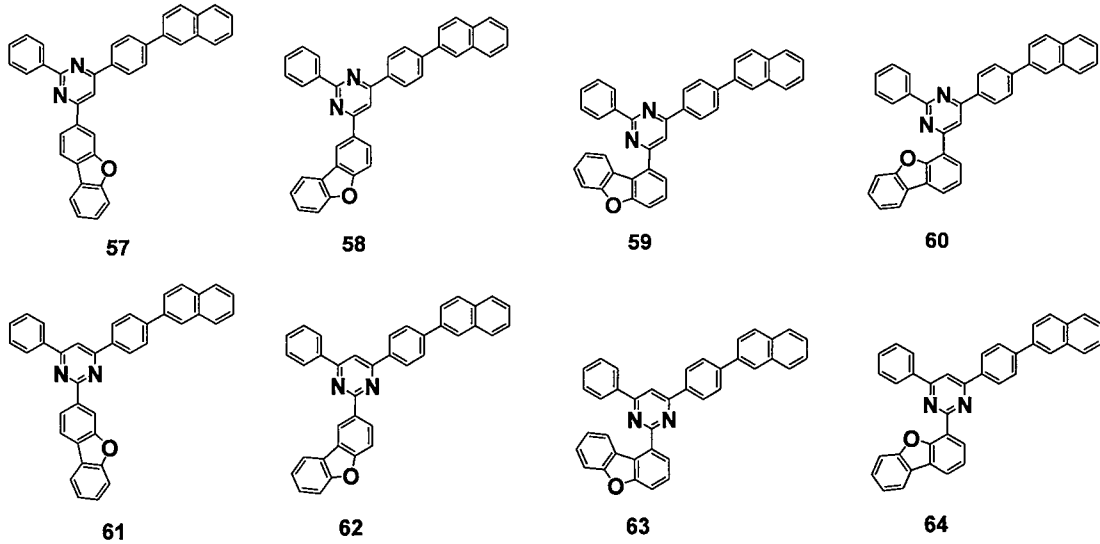
54



55



56



이하 상술한 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

- 5 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.

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

- 10 도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 양극(120)과 음극(110), 그리고 양극(120)과 음극(110) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

- 15 양극(120)은 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-
- 20 디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

음극(110)은 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/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

5 유기층(105)은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함한다.

상기 유기층(105)은 발광층(130)을 포함할 수 있으며, 상기 발광층(130)은 예컨대 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함할 수 있다.

발광층(130)은 예컨대 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 각각 인광 호스트로서 포함할 수 있다.

10 상기 발광층(130)은 1종 이상의 화합물을 더 포함하는 조성물을 포함할 수 있다.

예컨대 도펀트를 더 포함할 수 있다. 도펀트는 예컨대 인광 도펀트일 수 있고, 예컨대 적색, 녹색 또는 청색의 인광 도펀트일 수 있으며, 예컨대 적색 인광 도펀트일 수 있다.

15 일 예로 상기 적색 인광 도펀트의 최대 발광 파장은 550nm 내지 750nm일 수 있다.

인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

20 [화학식 Z]

LMX^a

상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X^a는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.

25 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X^a는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.

일 예로 상기 M은 Ir 또는 Pt일 수 있다.

30 도펀트는 발광층(130) 내에서 유기 광전자 소자용 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. 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는

2종 이상 포함될 수 있다.

예컨대 정공 특성을 갖는 화합물을 제2 호스트로서 더 포함할 수 있다.

전술한 유기 광전자 소자용 화합물과 정공 특성을 갖는 제2 호스트는 각각 1:99 내지 99:1의 중량비로 포함될 수 있다. 상기 범위 내에서 전자 수송 특성을 갖는

- 5 호스트와 정공 수송 특성을 갖는 호스트의 적절한 중량비를 맞추어 바이폴라 특성을 구현함으로써 효율과 수명을 개선할 수 있다. 예컨대 약 10:90 내지 90:10, 약 20:80 내지 80:20, 약 30:70 내지 70:30, 약 40:60 내지 60:40 또는 약 50:50의 중량비로 포함될 수 있다.

- 10 정공 특성을 갖는 제2 호스트의 예로는 카바졸 모이어티를 포함하는 화합물, 벤조카바졸 모이어티를 포함하는 화합물 등을 들 수 있다. 카바졸 모이어티를 포함하는 화합물로서는 예컨대 인돌로카바졸 또는 카바졸에 아민이 치환된 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 벤조카바졸 모이어티를 포함하는 화합물로서는 예컨대 벤조인돌로카바졸 또는 벤조카바졸에 아민이 치환된 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

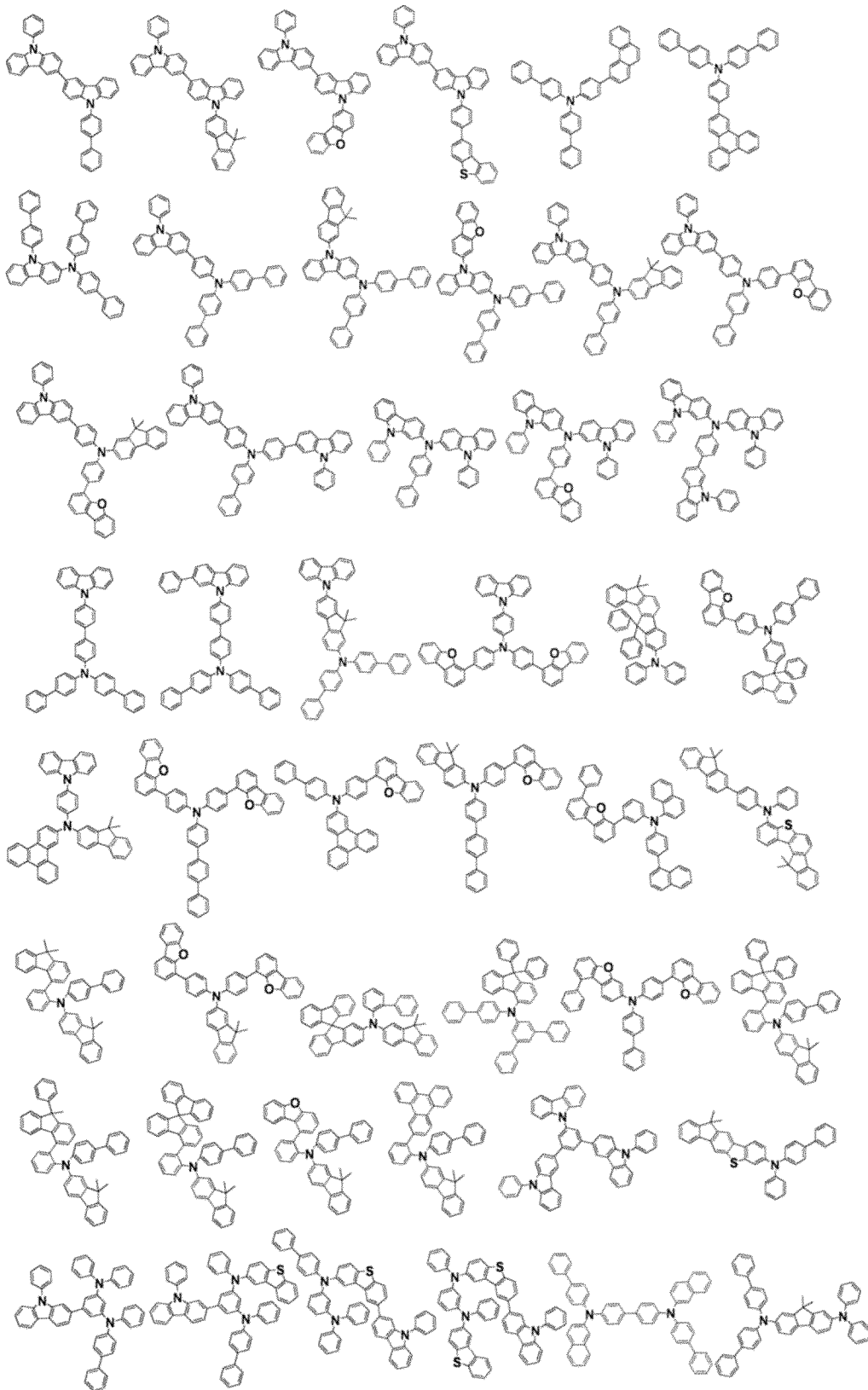
- 15 도 2를 참고하면, 유기 발광 소자(200)는 발광층(130) 외에 정공 보조층(140)을 더 포함한다. 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(130) 사이의 정공 주입 및/또는 정공 이동성을 더욱 높이고 전자를 차단할 수 있다. 정공 보조층(140)은 예컨대 정공 수송층, 정공 주입층 및/또는 전자 차단층일 수 있으며, 적어도 1층을 포함할 수 있다.

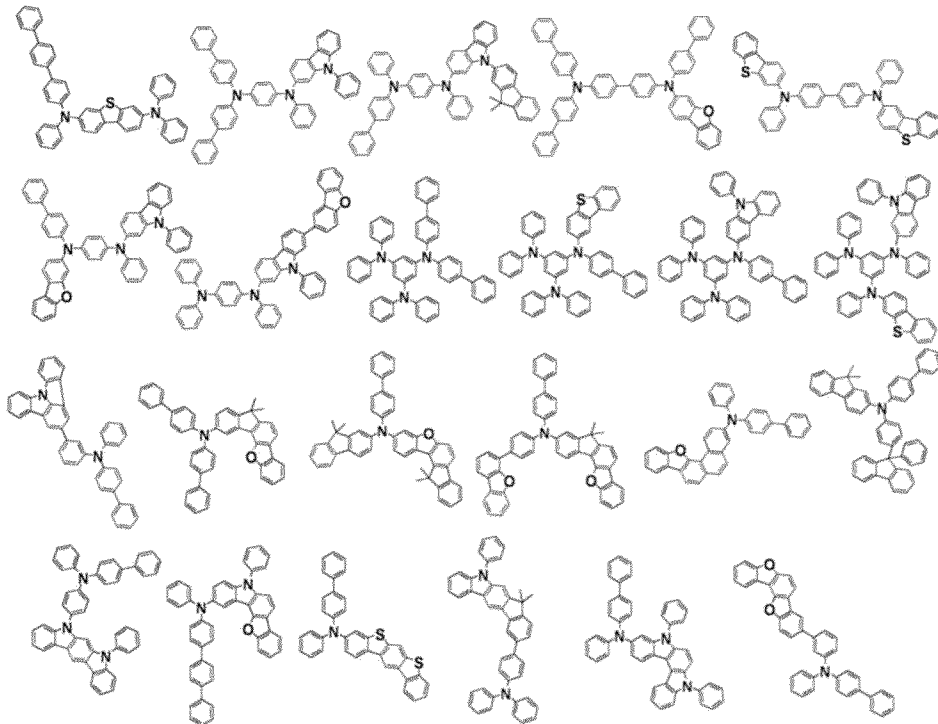
- 20 상기 정공 보조층(140)은 예컨대 하기 그룹 E에 나열된 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

구체적으로 상기 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(130) 사이의 정공 수송층, 및 상기 발광층(130)과 상기 정공 수송층 사이의 정공 수송 보조층을 포함할 수 있고, 하기 그룹 E에 나열된 화합물 중 적어도 하나가 상기 정공 수송 보조층에

25 포함될 수 있다.

[그룹 E]





상기 정공 수송 보조층에는 전술한 화합물 외에도 US5061569A, JP1993-009471A, WO1995-009147A1, JP1995-126615A, JP1998-095973A 등에 기재된 공지의
5 화합물 및 이와 유사한 구조의 화합물도 사용될 수 있다.

또한, 본 발명의 일 구현예에서는 도 1 또는 도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 전자 수송층, 전자주입층, 정공주입층 등을 더 포함한 유기 발광 소자일 수도 있다.

유기 발광 소자(100, 200)는 기판 위에 양극 또는 음극을 형성한 후,
10 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법 등으로 유기층을 형성한 후, 그 위에 음극 또는 양극을 형성하여 제조할 수 있다.

상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

15 【발명의 실시를 위한 형태】

이하 실시예를 통하여 상술한 구현예를 보다 상세하게 설명한다. 다만

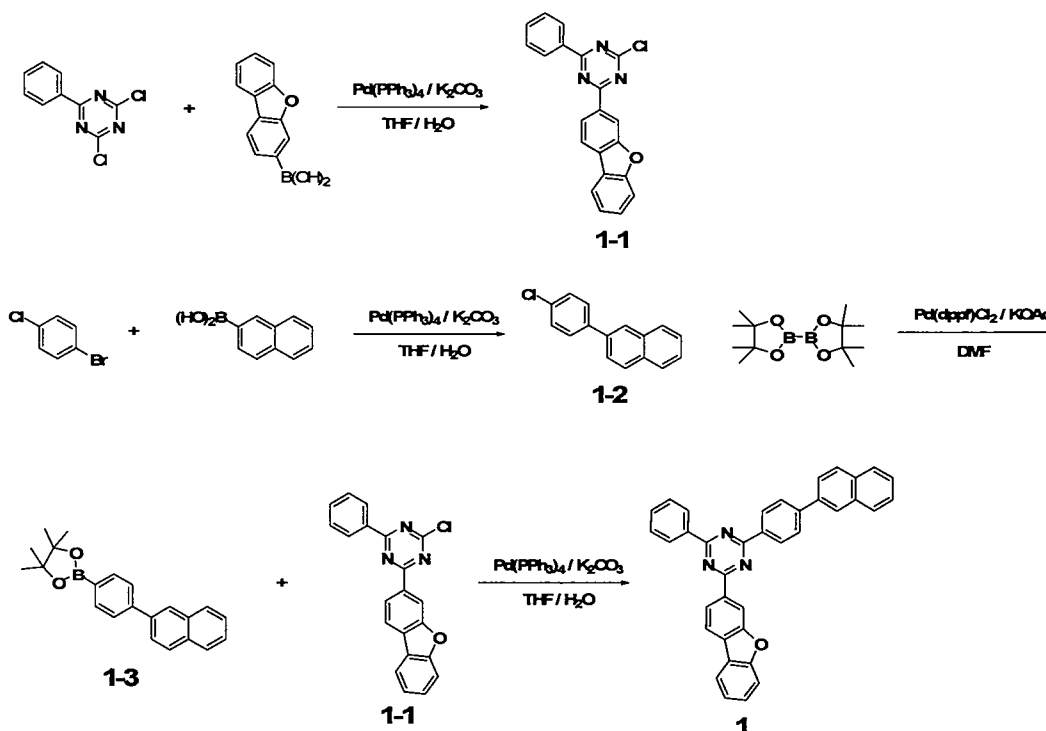
하기의 실시예는 단지 설명의 목적을 위한 것이며 권리범위를 제한하는 것은 아니다.

(유기 광전자 소자용 화합물의 제조)

합성예 1: 화합물 1의 합성

5

[반응식 1]



a) 중간체 1-1의 합성

10 둥근 바닥 플라스크에 2,4-디클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 22.6g (100 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL 및 증류수 100 mL에 넣고, 다이벤조퓨란-3-보론산(CAS No.: 395087-89-5) 0.9 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량을 넣은 후, 질소 대기하에서 가열 환류한다. 6 시간 후 반응액을 냉각시키고, 물층을 제거한 후, 유기층을 감압하에서 건조시킨다. 얻어진 고체를 물과 헥산으로 씻어준 후, 고체를 톨루엔 200 mL로 재결정하여 중간체 1-1을 21.4 g(60% 수율) 얻었다.

15

b) 중간체 1-2의 합성

둥근 바닥 플라스크에 1-Bromo-4-chloro-benzene 50.0 g (261.16 mmol), 2-naphthalene boronic acid 44.9 g (261.16 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 9.1 g (7.83 mmol), 탄산칼륨 71.2 g (522.33 mmol)을 테트라하이드로퓨란 1000 mL 및 증류수 500 mL에 녹인 후 질소 대기하에서 가열 환류한다. 6 시간 후 반응액을 냉각시키고,

물층을 제거한 후, 유기층을 감압하에서 건조시킨다. 얻어진 고체를 물과 헥산으로 씻어준 후, 고체를 톨루엔 200 mL로 재결정하여 중간체 1-2을 55.0 g(88% 수율) 얻었다.

c) 중간체 1-3의 합성

5 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 1-2 100.0 g (418.92 mmol)을 DMF 1000 mL에 넣고, 다이클로로다이페닐포스피노페로센 팔라듐 17.1 g (20.95 mmol), 비스피나콜라토 다이보론 127.7 g (502.70 mmol), 초산칼륨 123.3 g (1256.76 mmol)을 넣은 후, 질소 대기하에서 12 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고, 물 2 L에 적하시켜 고체를 잡는다. 얻어진 고체를 끓는 톨루엔에 녹여 실리카겔에서 여과한 후 여액을 농축한다. 농축된 고체를 소량의 헥산과 교반 후, 고체를 여과하여 중간체 1-3를 28.5 g(70% 수율) 얻었다.

d) 화합물 1의 합성

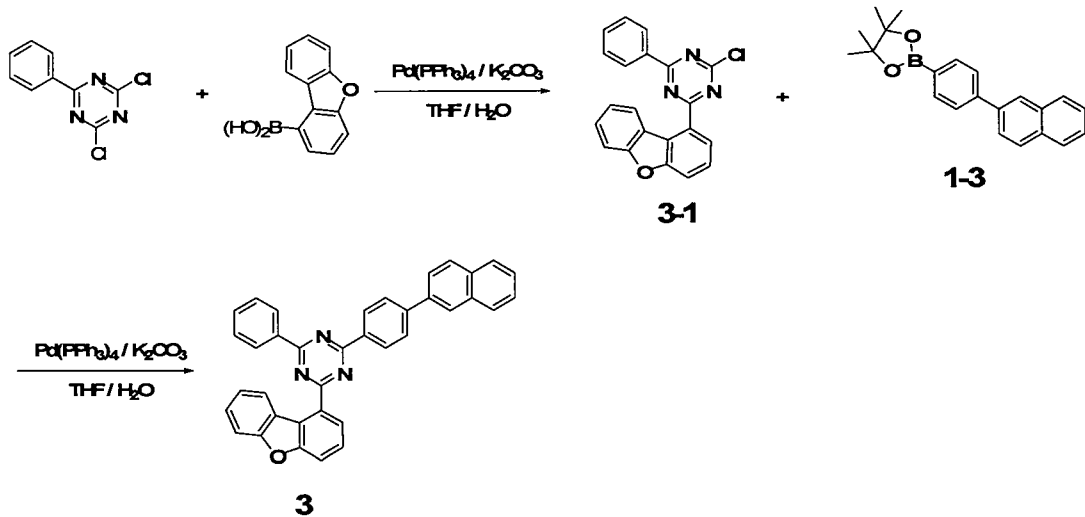
15 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-1 10.0 g (27.95 mmol), 중간체 1-3 11.1 g (33.54 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 1.0 g (0.84 mmol), 및 탄산칼륨 7.7 g (55.90 mmol)을 넣고 테트라하이드로퓨란 150 mL, 증류수 75 mL에 녹인 후 질소 대기하에서 가열 환류한다. 12 시간 후 반응액을 냉각시키고, 물층을 제거한 후, 유기층을 감압하에서 건조시킨다. 얻어진 고체를 물과 메탄올으로 씻어준 후, 고체를 톨루엔 200 mL로 재결정하여 화합물 1을 13.4 g(91% 수율) 얻었다.

LC/MS calculated for: C₃₇H₂₃N₃O Exact Mass: 525.18 found for 525.22 [M+H]

20

합성예 2: 화합물 3의 합성

[반응식 2]



a) 중간체 3-1의 합성

2,4-dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine과 1-dibenzofuranylboronic acid를 각각 1.0
5 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 3-1을 합성하였다.

b) 화합물 3의 합성

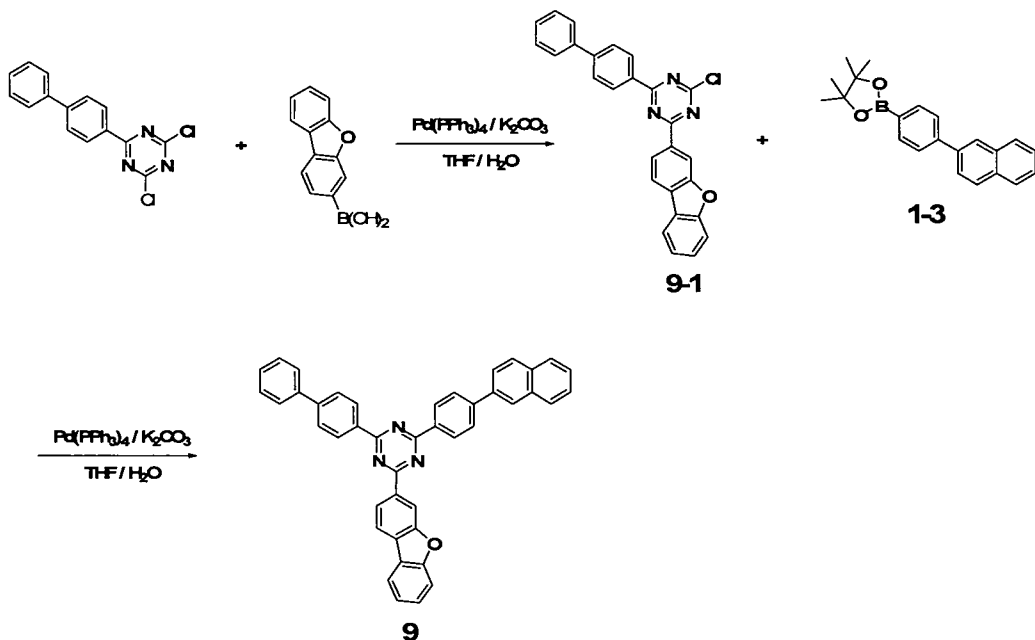
중간체 3-1과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 d)와
같은 방법으로 화합물 3을 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₃₇H₂₃N₃O Exact Mass: 525.18 found for 525.25 [M+H]

10

합성예 3: 화합물 9의 합성

[반응식 3]



a) 중간체 9-1의 합성

2-Biphenyl-4-yl-4,6-dichloro-[1,3,5]triazine과 3-dibenzofuranyl boronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 9-1을 합성하였다.

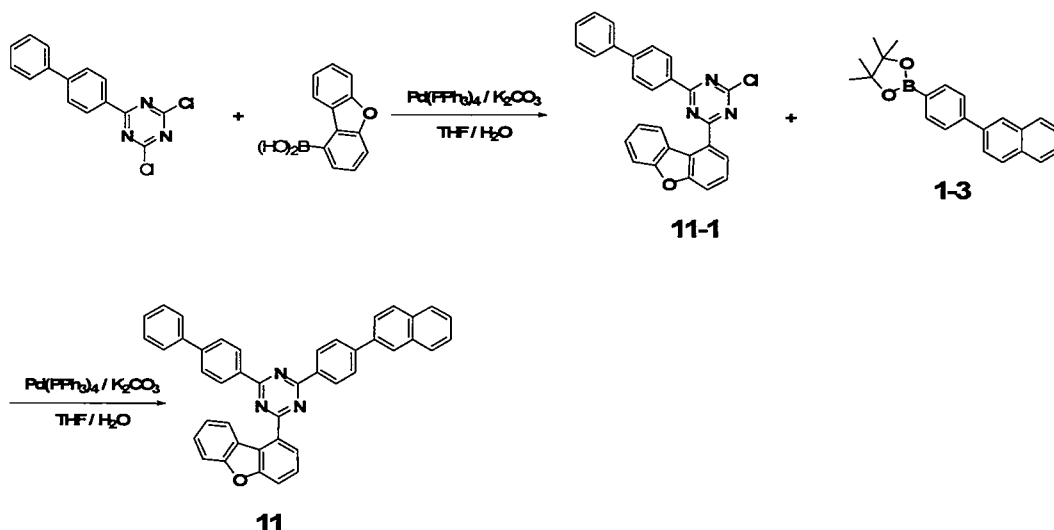
b) 화합물 9의 합성

5 중간체 9-1과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 9을 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₄₃H₂₇N₃O Exact Mass: 601.22 found for 601.27 [M+H]

합성예 4: 화합물 11의 합성

[반응식 4]

a) 중간체 11-1의 합성

2-Biphenyl-4-yl-4,6-dichloro-[1,3,5]triazine과 1-dibenzofuranyl boronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 11-1을 합성하였다.

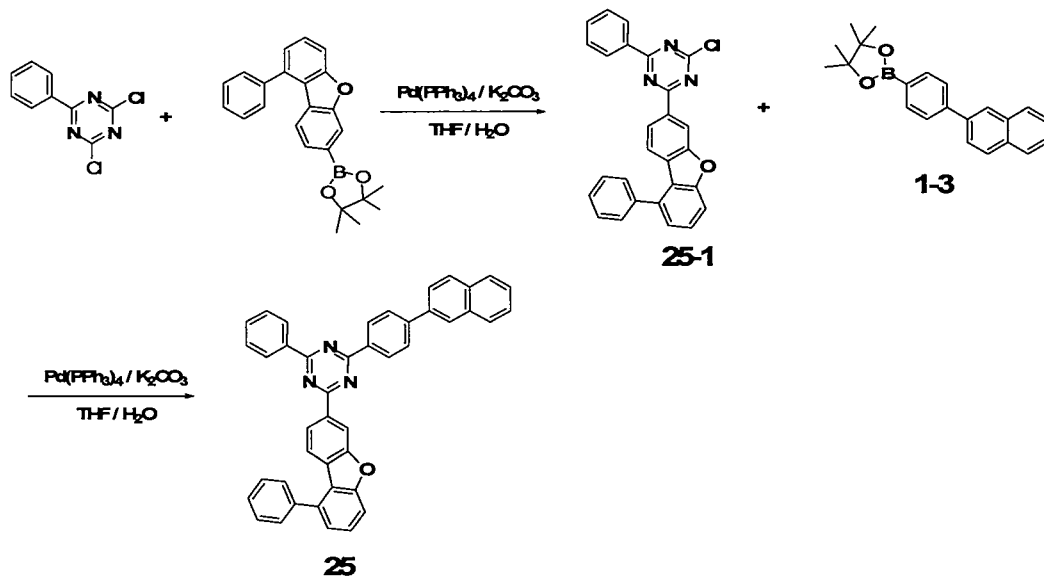
b) 화합물 11의 합성

15 중간체 11-1과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 11을 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₄₃H₂₇N₃O Exact Mass: 601.22 found for 601.25 [M+H]

합성예 5: 화합물 25의 합성

[반응식 5]



a) 중간체 25-1의 합성

2,4-dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine과 1-Phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-

- 5 [1,3,2]dioxaborolan-2-yl)-dibenzofuran를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 25-1을 합성하였다.

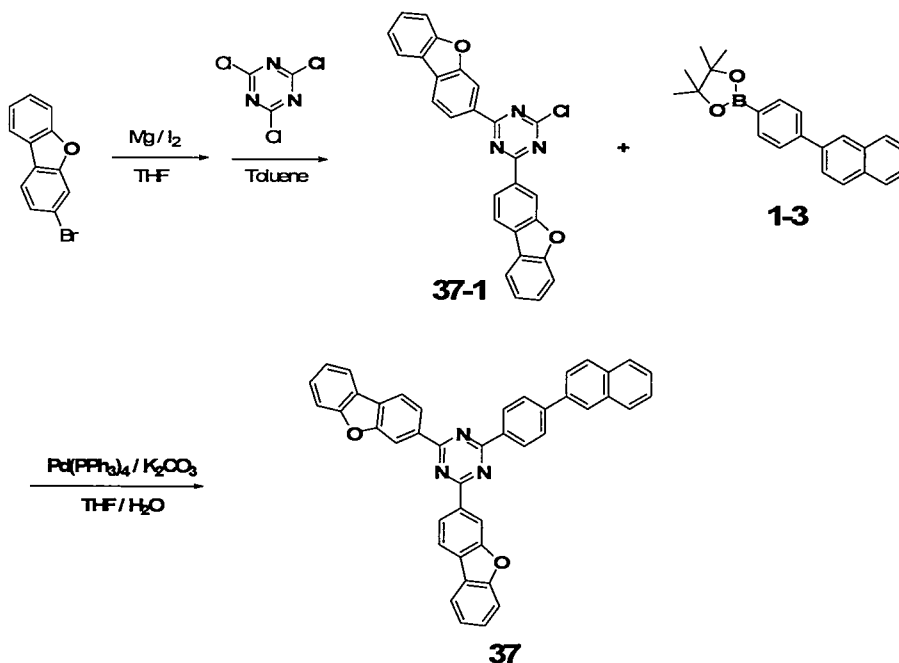
b) 화합물 25의 합성

중간체 25-1과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 25을 합성하였다.

- 10 LC/MS calculated for: $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3\text{O}$ Exact Mass: 601.22 found for 601.26 $[\text{M}+\text{H}]$

합성예 6: 화합물 37의 합성

[반응식 6]



a) 중간체 37-1의 합성

- 질소 환경에서 magnesium(2.7 g, 111.64 mmol)과 iodine(0.6 g, 2.23 mmol)을
- 5 tetrahydrofuran(THF) 100 mL에 넣고 30분간 교반시킨 후, 여기에 THF 300mL에 녹아있는 3-bromo-dibenzofuran (27.6 g, 111.6 mmol)을 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한다. 이렇게 만들어진 혼합액을 toluene 400mL에 녹아있는 시아누릭클로라이드 8.2 g (44.66 mmol) 용액에 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한 후 80 °C에서 12시간 동안 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한
- 10 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 고체를 toluene/methanol 용매로 재결정하여 중간체 37-1(20.0 g, 40 %)을 얻었다.

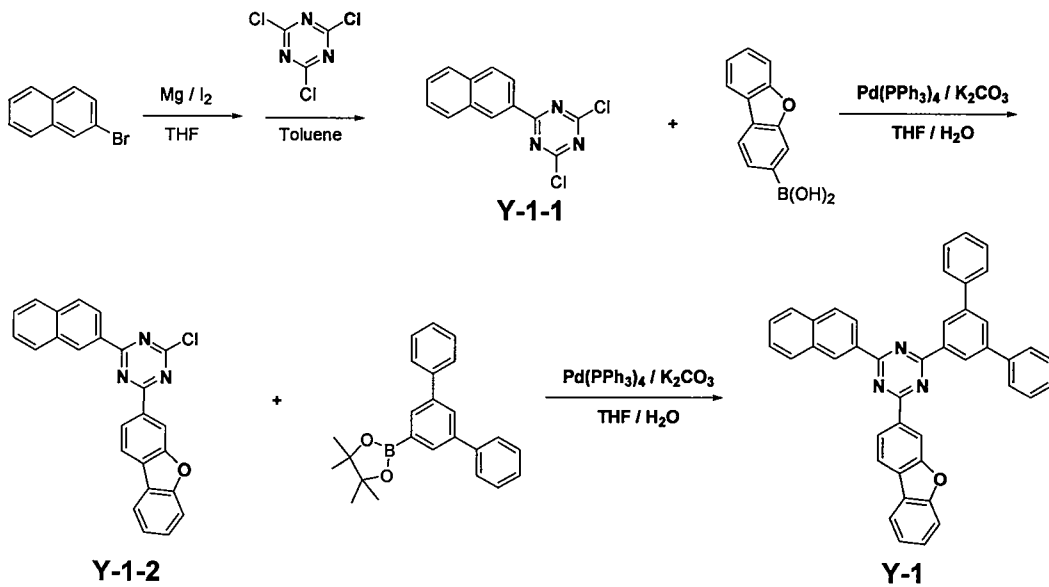
b) 화합물 37의 합성

중간체 37-1과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 37을 합성하였다.

- 15 LC/MS calculated for: C₄₃H₂₅N₃O₂ Exact Mass: 615.19 found for 615.24 [M+H]

비교합성예 1: 화합물 Y-1의 합성

[반응식 7]



a) 중간체 Y-1-1의 합성

2-bromonaphthalene과 시아누릭클로라이드를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기
5 합성예 6의 a)와 같은 방법으로 중간체 Y-1-1을 합성하였다.

b) 중간체 Y-1-2의 합성

중간체 Y-1-1과 3-dibenzofuranyl boronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기
합성예 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 Y-1-2을 합성하였다.

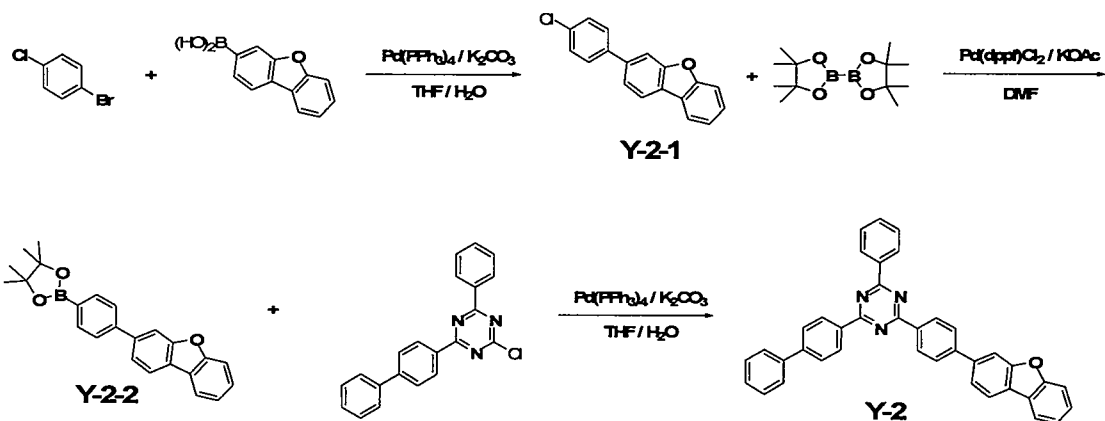
c) 화합물 Y-1의 합성

10 중간체 Y-1-2와 4,4,5,5-tetramethyl-2-[1,1';3',1'']terphenyl-5'-yl-
[1,3,2]dioxaborolane을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로
화합물 Y-1을 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₄₃H₂₇N₃O Exact Mass: 601.22 found for 601.27 [M+H]

15 비교합성예 2: 화합물 Y-2의 합성

[반응식 8]



a) 중간체 Y-2-1의 합성

1-Bromo-4-chloro-benzene과 3-dibenzofuranyl boronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 b)와 같은 방법으로 중간체 Y-2-1을 합성하였다.

b) 중간체 Y-2-2의 합성

중간체 Y-2-1 과 비스피나콜라토 다이보론을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 c)와 같은 방법으로 중간체 Y-2-2을 합성하였다.

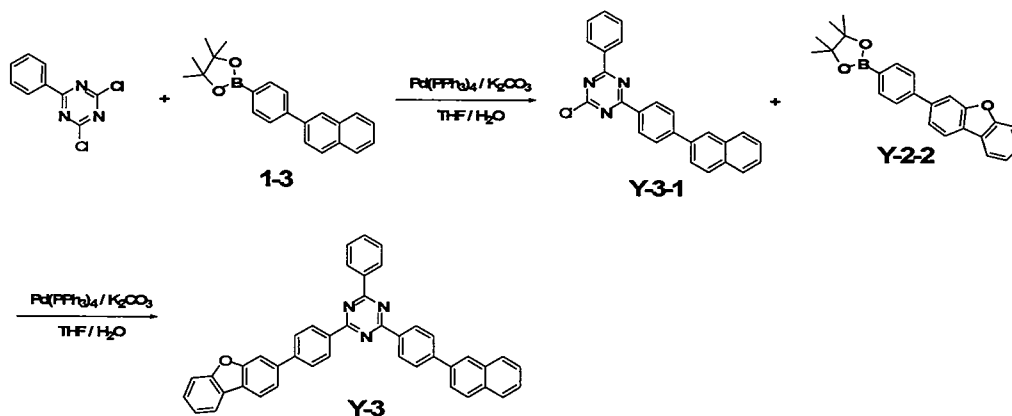
c) 화합물 Y-2의 합성

중간체 Y-2-2와 2-Biphenyl-4-yl-4-chloro-6-phenyl-[1,3,5]triazine 을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-2를 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₃₉H₂₅N₃O Exact Mass: 551.20 found for 551.25 [M+H]

비교합성예 3: 화합물 Y-3의 합성

[반응식 9]



a) 중간체 Y-3-1의 합성

2,4-dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine과 중간체 1-3을 각각 1.0 당량씩 사용하여

상기 합성에 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 Y-3-1을 합성하였다.

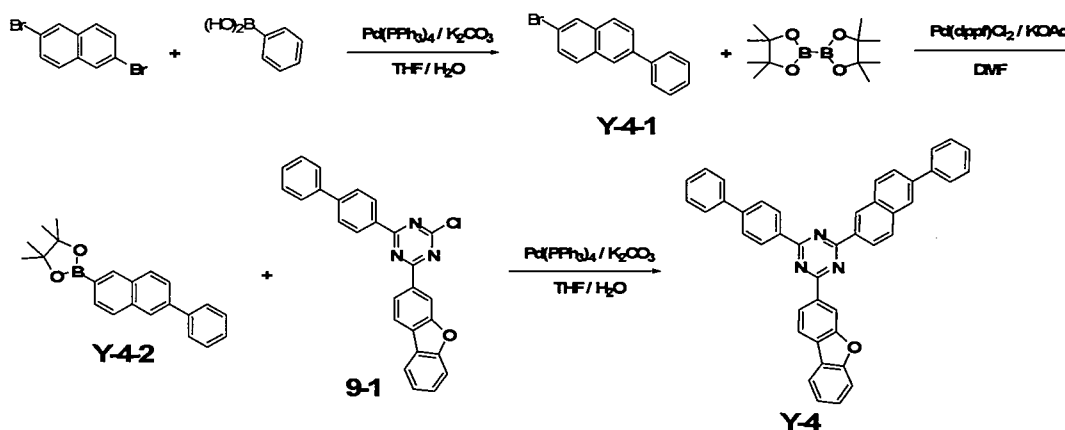
b) 화합물 Y-3의 합성

중간체 Y-3-1과 중간체 Y-2-2를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-3을 합성하였다.

5 LC/MS calculated for: C₄₃H₂₇N₃O Exact Mass: 601.22 found for 601.25 [M+H]

비교합성에 4: 화합물 Y-4의 합성

[반응식 10]



10 a) 중간체 Y-4-1의 합성

2,6-dibromonaphthalene과 phenylboronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 b)와 같은 방법으로 중간체 Y-4-1을 합성하였다.

b) 중간체 Y-4-2의 합성

15 중간체 Y-4-1과 중간체 비스피나콜라토 다이보론을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 c)와 같은 방법으로 중간체 Y-4-2을 합성하였다.

c) 화합물 Y-4의 합성

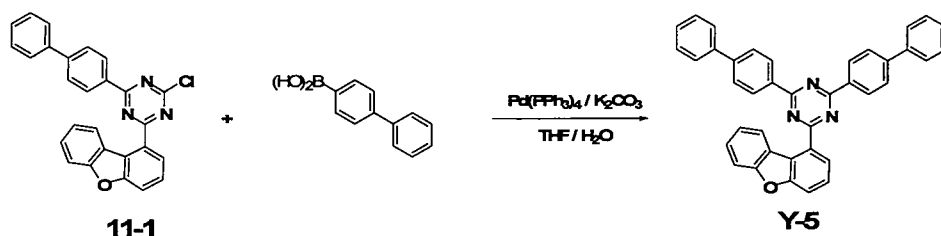
중간체 Y-4-2과 중간체 9-1를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성에 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-4을 합성하였다.

LC/MS calculated for: C₄₃H₂₇N₃O Exact Mass: 601.22 found for 601.26 [M+H]

20

비교합성에 5: 화합물 Y-5의 합성

[반응식 11]

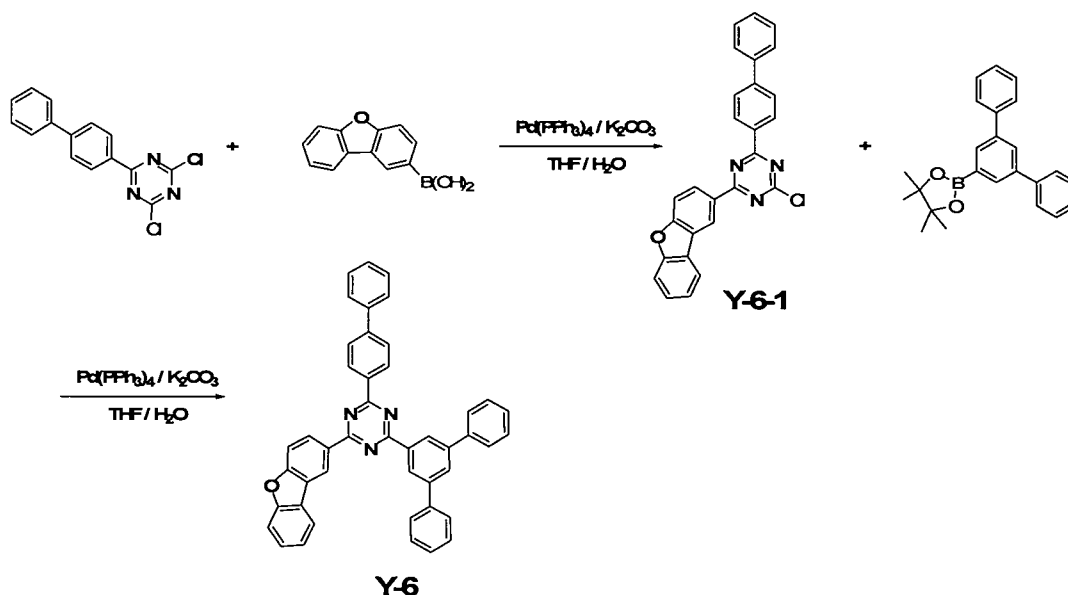


중간체 11-1과 4-biphenylboronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-5을 합성하였다.

5 LC/MS calculated for: $\text{C}_{39}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{O}$ Exact Mass: 551.20 found for 551.25 [M+H]

비교합성예 6: 화합물 Y-6의 합성

[반응식 12]



10 a) 중간체 Y-6-1의 합성

2-Biphenyl-4-yl-4,6-dichloro-[1,3,5]triazine과 2-dibenzofuranyl boronic acid를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 a)와 같은 방법으로 중간체 Y-6-1을 합성하였다.

b) 화합물 Y-6의 합성

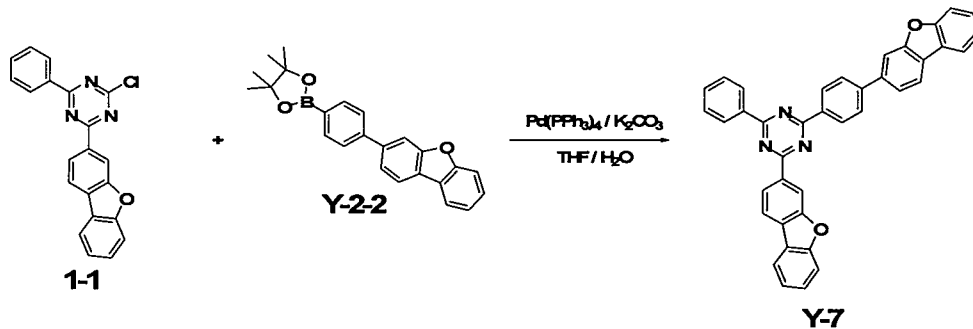
15 중간체 Y-6-1과 4,4,5,5-Tetramethyl-2-[1,1';3',1'']terphenyl-5'-yl-

[1,3,2]dioxaborolane을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-6을 합성하였다.

LC/MS calculated for: $\text{C}_{45}\text{H}_{29}\text{N}_3\text{O}$ Exact Mass: 627.23 found for 627.28 [M+H]

비교합성예 7: 화합물 Y-7의 합성

[반응식 13]

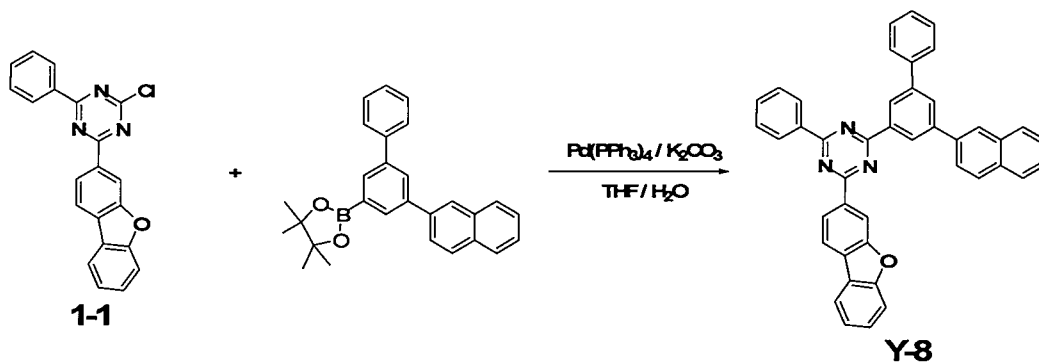


- 5 중간체 1-1과 중간체 Y-2-2를 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-7을 합성하였다.

LC/MS calculated for: $\text{C}_{39}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{O}_2$ Exact Mass: 565.18 found for 565.23 [M+H]

비교합성예 8: 화합물 Y-8의 합성

[반응식 14]



- 중간체 1-1과 4,4,5,5-Tetramethyl-2-(5-naphthalen-2-yl-biphenyl-3-yl)-[1,3,2]dioxaborolane을 각각 1.0 당량씩 사용하여 상기 합성예 1의 d)와 같은 방법으로 화합물 Y-8을 합성하였다.

- 15 LC/MS calculated for: $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3\text{O}$ Exact Mass: 601.22 found for 601.27 [M+H]

(유기 발광 소자의 제작)

실시예 1

- ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수
20 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올
등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음

산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 화합물 A을 진공 증착하여 700Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 주입층 상부에 화합물 B를 50Å의 두께로 증착한 후, 화합물 C를 700Å의 두께로 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화합물 C-1을 400Å의 두께로 증착하여 정공수송보조층을 형성하였다. 정공수송보조층 상부에 화합물 1을 호스트로 사용하고 도펀트로 $[\text{Ir}(\text{piq})_2\text{acac}]$ 2wt% 로 도핑하여 진공 증착으로 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 이어서 상기 발광층 상부에 화합물 D와 Liq를 동시에 1:1 비율로 진공 증착하여 300Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq 15Å과 Al 1200Å을 순차적으로 진공 증착 하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제작하였다.

상기 유기발광소자는 5층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 다음과 같다.

ITO/화합물A(700 Å)/화합물B(50 Å)/화합물C(700 Å)/화합물C-1(400 Å)/EML[화합물 1 : $[\text{Ir}(\text{piq})_2\text{acac}]$ (2wt%)] (400 Å) / 화합물D : Liq(300 Å) / Liq(15 Å) / Al(1200 Å)의 구조로 제작하였다.

화합물 A: N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine

화합물 B: 1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN)

화합물 C: N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine

화합물 C-1: N,N-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-7,7-dimethyl-7H-fluoreno[4,3-b]benzofuran-10-amine

화합물 D: 8-(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline

실시예 2 내지 6

합성에 1의 화합물 1 대신 합성에 2 내지 6의 화합물 3, 화합물 9, 화합물 11, 화합물 25 및 화합물 37 중 어느 하나를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

비교예 1 내지 8

합성에 1의 화합물 1 대신 비교합성에 1 내지 8의 화합물 Y-1 내지 Y-8 중 어느 하나를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

5 평가

실시예 1 내지 6과 비교예 1 내지 8에 따른 유기 발광 소자의 전력효율을 평가하였다.

구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

10 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

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

(3) 전력효율 측정

상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전력 효율(cd/A) 을 계산하였다.

(4) 수명 측정

20 휘도(cd/m²)를 6000 cd/m² 로 유지하고 전류 효율(cd/A)이 90%로 감소하는 시간을 측정하여 결과를 얻었다.

(5) 구동전압 측정

전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 15 mA/cm²에서 각 소자의 구동전압을 측정하여 결과를 얻었다.

25 [표 1]

	제1호스트	색	전력 효율 (cd/A)	구동 전압 (V)	수명 T90 (h)
실시예 1	화합물 1	적색	17.0	4.84	85
실시예 2	화합물 3	적색	18.6	4.75	79

실시예 3	화합물 9	적색	17.1	4.83	77
실시예 4	화합물 11	적색	18.3	4.77	78
실시예 5	화합물 25	적색	18.1	4.80	76
실시예 6	화합물 37	적색	16.9	4.92	55
비교예 1	화합물 Y-1	적색	16.3	6.23	10
비교예 2	화합물 Y-2	적색	12.0	5.35	3
비교예 3	화합물 Y-3	적색	16.7	6.05	47
비교예 4	화합물 Y-4	적색	12.0	5.18	7
비교예 5	화합물 Y-5	적색	12.5	5.00	12
비교예 6	화합물 Y-6	적색	15.2	5.21	10
비교예 7	화합물 Y-7	적색	12.7	5.57	22
비교예 8	화합물 Y-8	적색	15.8	5.23	5

표 1을 참고하면, 실시예 1 내지 6에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 8에 따른 유기 발광 소자와 비교하여 구동 전압, 효율 및 수명이 현저히 개선된 것을 확인할 수 있다.

5

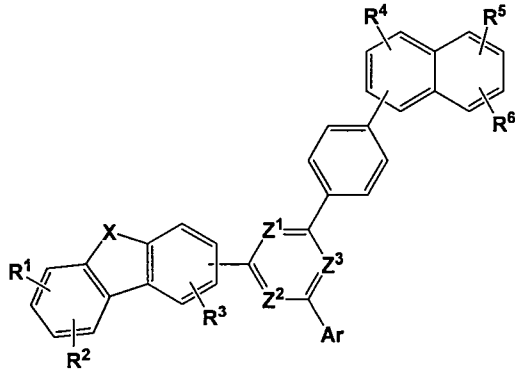
이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

【청구의 범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

Z¹ 내지 Z³은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z¹ 내지 Z³ 중 적어도 둘은 N이고,

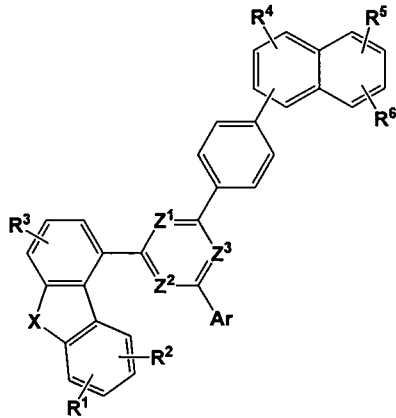
R^a 및 R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

【청구항 2】

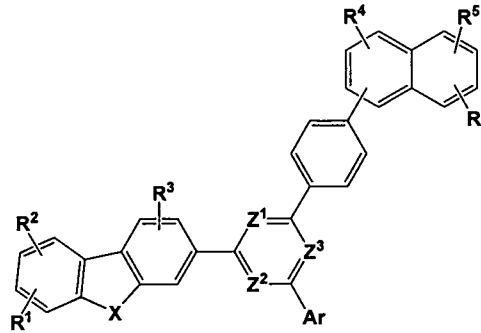
제1항에서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-3으로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 및 화학식 1-3에서,

X는 O 또는 S이고,

Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

Z¹ 내지 Z³은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z¹ 내지 Z³ 중 적어도 둘은 N이고,

R^a 및 R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

【청구항 3】

제1항에서,

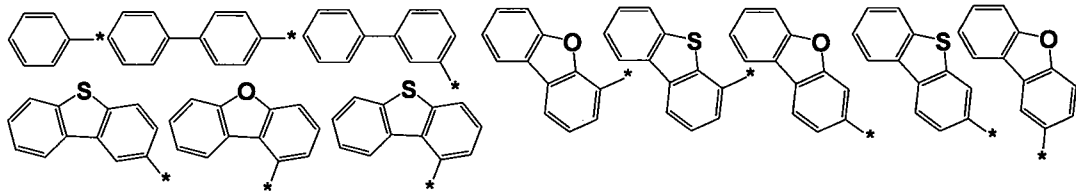
상기 Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기인 유기 광전자 소자용 화합물.

【청구항 4】

제3항에서,

상기 Ar은 하기 그룹 I에 나열된 치환기 중 어느 하나인 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 I]



상기 그룹 I에서, *은 연결 지점이다.

【청구항 5】

제1항에서,

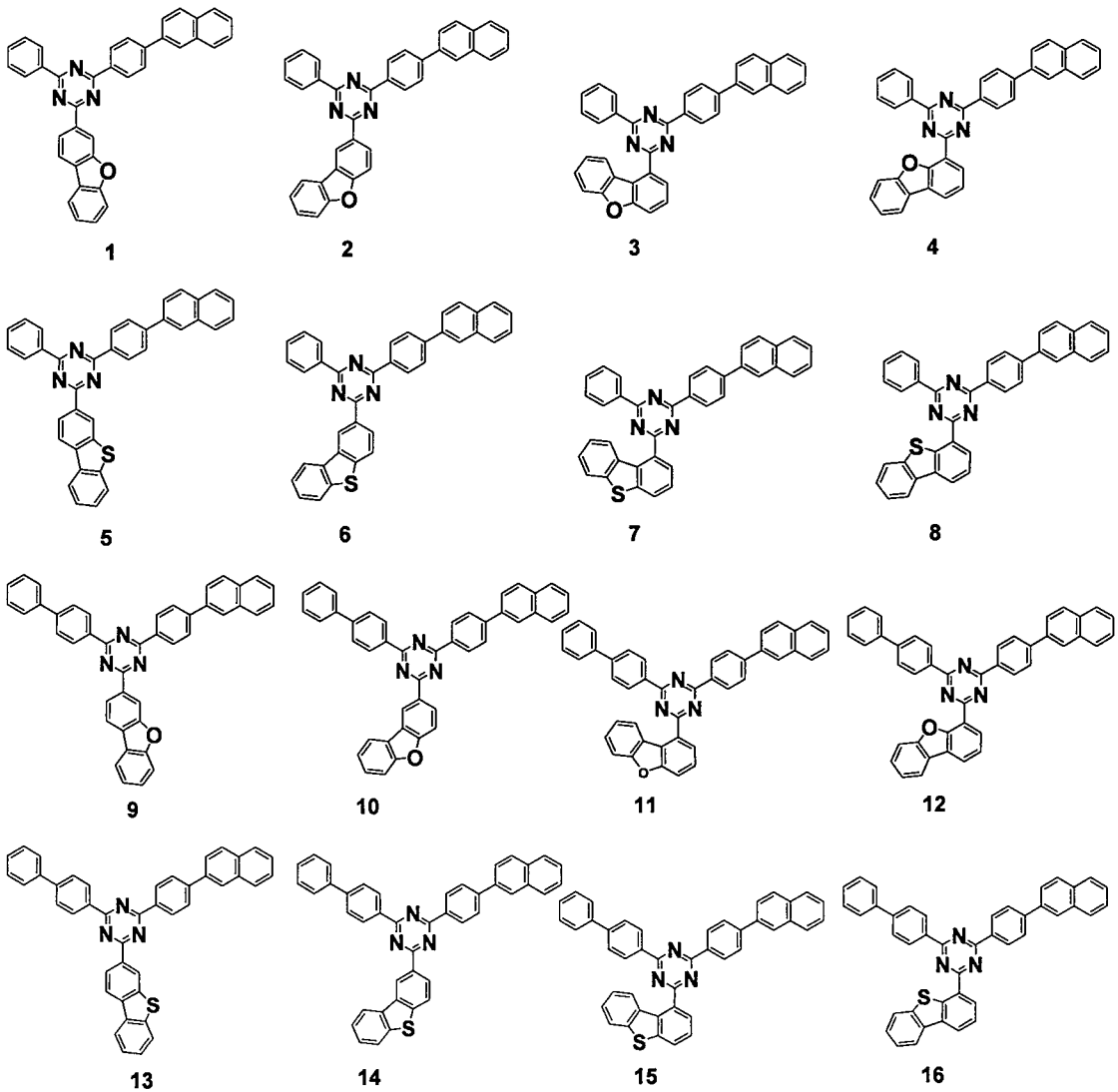
상기 Z^1 은 내지 Z^3 은 각각 N인 유기 광전자 소자용 화합물.

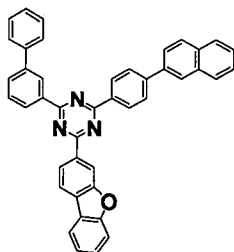
【청구항 6】

제1항에서,

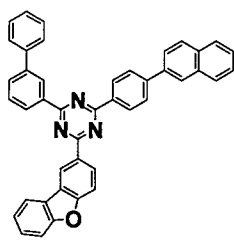
하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 어느 하나인 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 1]

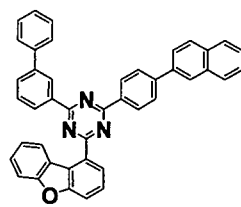




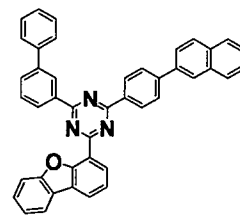
17



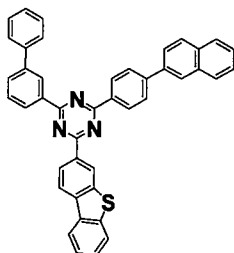
18



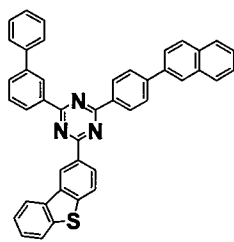
19



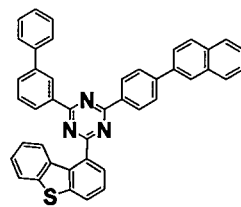
20



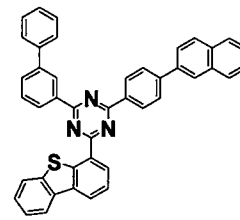
21



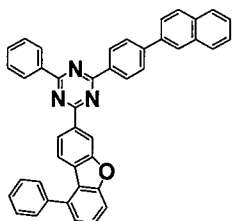
22



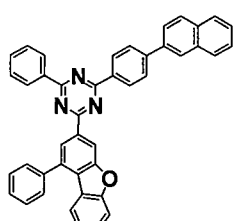
23



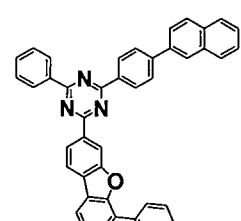
24



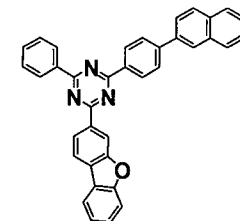
25



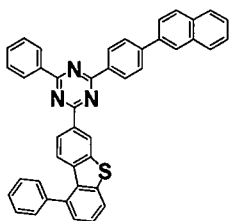
26



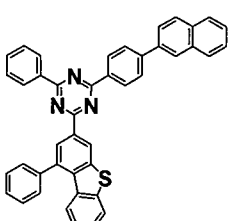
27



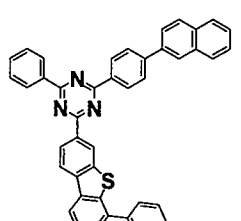
28



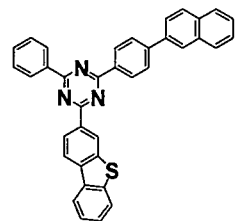
29



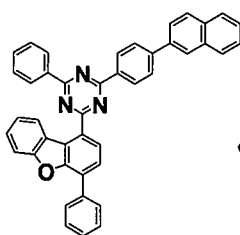
30



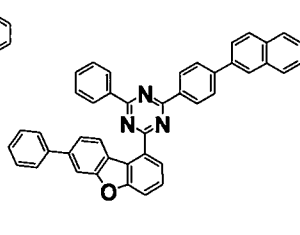
31



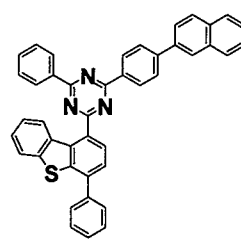
32



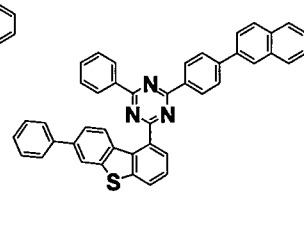
33



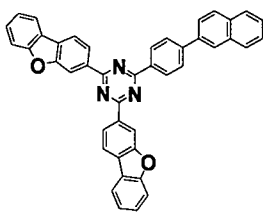
34



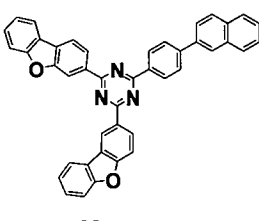
35



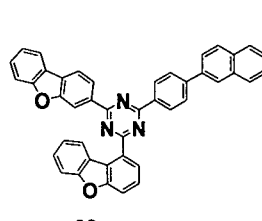
36



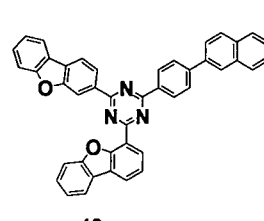
37



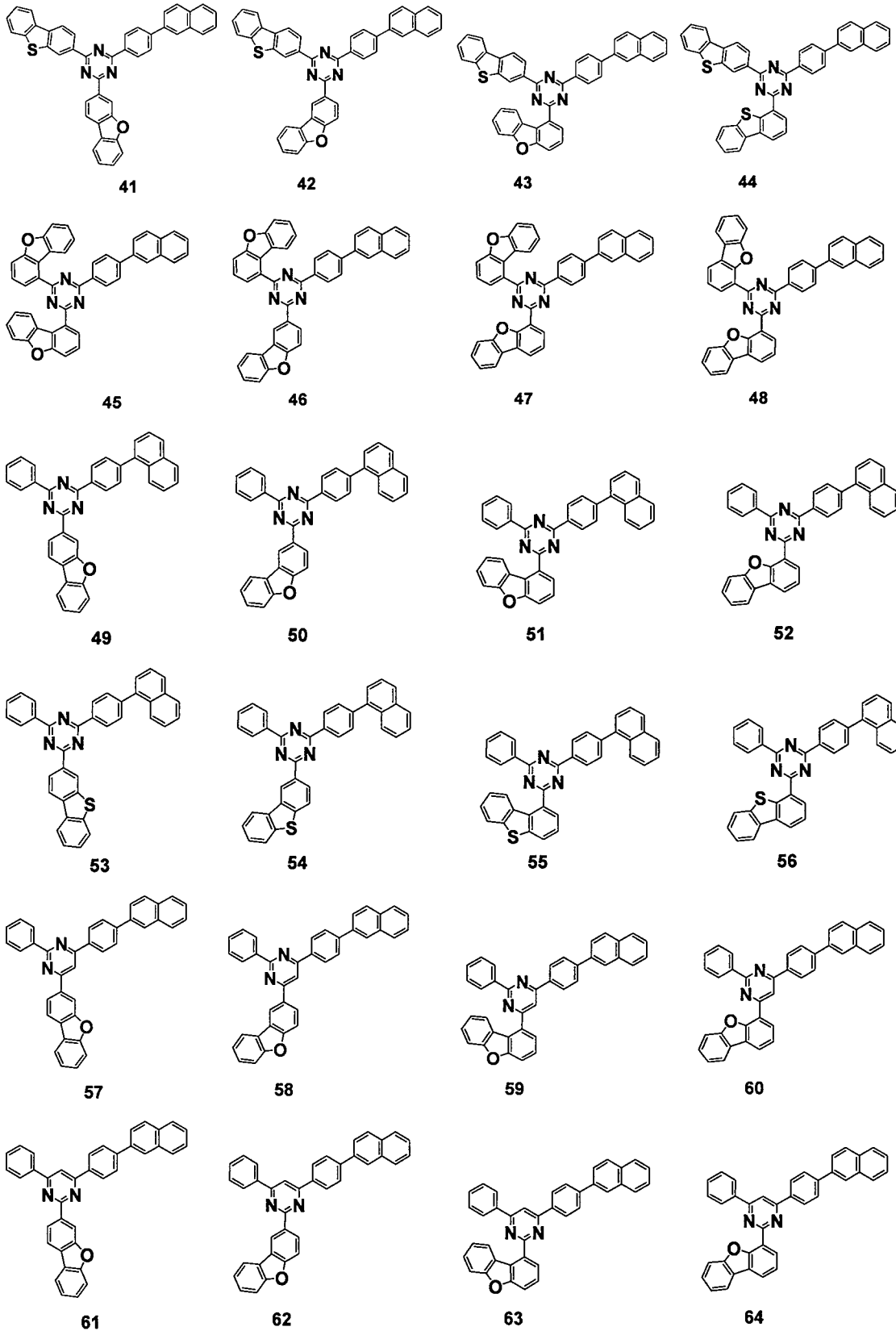
38



39



40

**【청구항 7】**

서로 마주하는 양극과 음극,

상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

【청구항 8】

제7항에 있어서,
상기 유기층은 발광층을 포함하고,
상기 발광층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

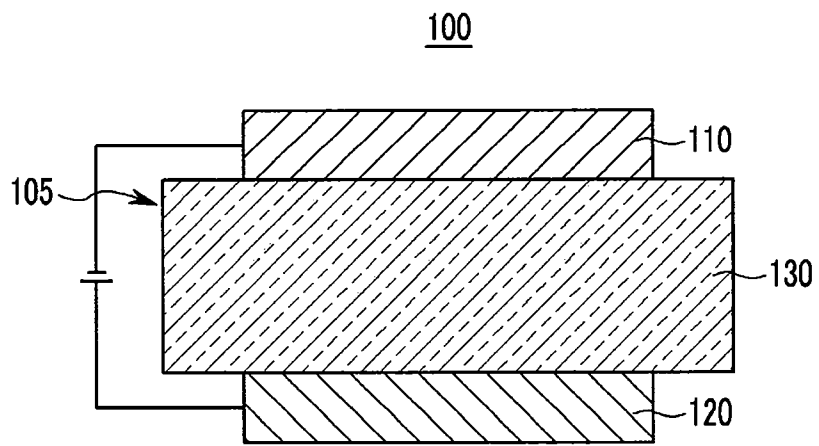
【청구항 9】

제8항에 있어서,
상기 발광층은 도펀트를 더 포함하는 유기 광전자 소자.

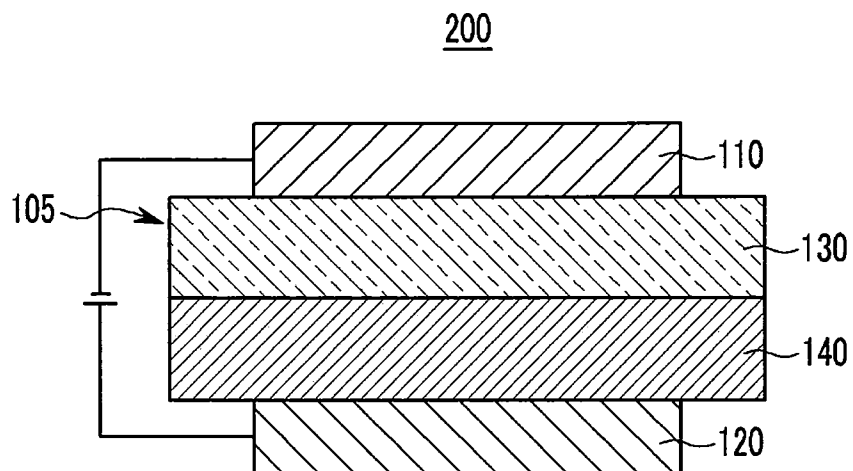
【청구항 10】

제7항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

【도 1】



【도 2】



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/016165

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 405/04(2006.01)i, C07D 405/14(2006.01)i, C07D 409/04(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 405/04; C07D 251/24; C07D 307/91; C07D 333/76; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 405/14; C07D 409/04; C07D 409/14

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & Keywords: dibenzofuran, dibenzothiophene, naphthyl

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2018-217067 A1 (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 29 November 2018 See claims 1, 15; pages 16-17.	1-10
X	KR 10-2014-0046541 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 21 April 2014 See claims 1, 5, 15; paragraphs [0074]-[0076].	1,5,7-10
A	KR 10-2017-0141144 A (LG CHEM, LTD.) 22 December 2017 See paragraphs [0193], [0203].	1-10
A	WO 2017-171420 A1 (LG CHEM, LTD.) 05 October 2017 See the entire document.	1-10
PX	KR 10-2019-0127272 A (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 13 November 2019 See claim 11, compound 6-6; paragraph [0011].	1-10



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

"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

06 MARCH 2020 (06.03.2020)

Date of mailing of the international search report

09 MARCH 2020 (09.03.2020)

Name and mailing address of the ISA/KR



Korean Intellectual Property Office
Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsu-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/KR2019/016165

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2018-217067 A1	29/11/2018	CN 110520504 A KR 10-2018-0129656 A TW 201903122 A	29/11/2019 05/12/2018 16/01/2019
KR 10-2014-0046541 A	21/04/2014	CN 104812750 A KR 10-1423067 B1 KR 10-2014-0144550 A TW 201425527 A WO 2014-054912 A1	29/07/2015 29/07/2014 19/12/2014 01/07/2014 10/04/2014
KR 10-2017-0141144 A	22/12/2017	KR 10-1857704 B1	14/05/2018
WO 2017-171420 A1	05/10/2017	CN 108884059 A JP 2019-512499 A KR 10-1833669 B1 KR 10-2017-0113397 A	23/11/2018 16/05/2019 02/03/2018 12/10/2017
KR 10-2019-0127272 A	13/11/2019	WO 2019-212289 A1	07/11/2019

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 405/04(2006.01)i, C07D 405/14(2006.01)i, C07D 409/04(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 405/04; C07D 251/24; C07D 307/91; C07D 333/76; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 405/14; C07D 409/04; C07D 409/14

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), Google & 키워드:디벤조퓨란(dibenzofuran), 디벤조티오펜(dibenzothiophene), 나프틸(naphthyl)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2018-217067 A1 (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 2018.11.29 청구항 1, 15; 페이지 16-17	1-10
X	KR 10-2014-0046541 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2014.04.21 청구항 1, 5, 15; 단락 [0074]-[0076]	1, 5, 7-10
A	KR 10-2017-0141144 A (주식회사 엘지화학) 2017.12.22 단락 [0193], [0203]	1-10
A	WO 2017-171420 A1 (LG CHEM, LTD.) 2017.10.05 전문	1-10
PX	KR 10-2019-0127272 A (덕산네오룩스 주식회사) 2019.11.13 청구항 11, 6-6; 단락 [0011]	1-10

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

“D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 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 03월 06일 (06.03.2020)

국제조사보고서 발송일

2020년 03월 09일 (09.03.2020)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



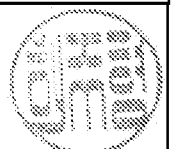
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-8150



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2018-217067 A1	2018/11/29	CN 110520504 A KR 10-2018-0129656 A TW 201903122 A	2019/11/29 2018/12/05 2019/01/16
KR 10-2014-0046541 A	2014/04/21	CN 104812750 A KR 10-1423067 B1 KR 10-2014-0144550 A TW 201425527 A WO 2014-054912 A1	2015/07/29 2014/07/29 2014/12/19 2014/07/01 2014/04/10
KR 10-2017-0141144 A	2017/12/22	KR 10-1857704 B1	2018/05/14
WO 2017-171420 A1	2017/10/05	CN 108884059 A JP 2019-512499 A KR 10-1833669 B1 KR 10-2017-0113397 A	2018/11/23 2019/05/16 2018/03/02 2017/10/12
KR 10-2019-0127272 A	2019/11/13	WO 2019-212289 A1	2019/11/07