

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국



(10) 국제공개번호

WO 2019/164331 A1

(43) 국제공개일  
2019년 8월 29일 (29.08.2019) WIPO | PCT

(51) 국제특허분류: MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI  
C07F 5/02 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01) (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML,  
H01L 51/00 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01) MR, NE, SN, TD, TG).

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/002206

공개:

(22) 국제출원일: 2019년 2월 22일 (22.02.2019)

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:  
10-2018-0021871 2018년 2월 23일 (23.02.2018) KR

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

(72) 발명자: 서상덕 (SUH, Sang Duk); 34122 대전시 유성구  
문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 홍성길  
(HONG, Sung Kil); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG  
화학 기술연구원, Daejeon (KR). 차용범 (CHA, Yong-  
bum); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연  
구원, Daejeon (KR). 김성소 (KIM, Seong So); 34122 대  
전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon  
(KR). 천민승 (CHUN, Minseung); 34122 대전시 유성구  
문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

(74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강  
남구 강남대로 318, 타워837 빌딩, 6층, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국  
내 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 역  
내 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), 유  
럽 (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,



WO 2019/164331 A1

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

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

4
3
2
1

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

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

## 명세서

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

- [1] 본 명세서는 2018년 2월 23일에 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2018-0021871호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 명세서는 헤테로고리 화합물, 및 헤테로고리 화합물을 이용하여 형성된 유기 발광 소자에 관한 것이다.

### 배경기술

- [3] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어 질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [4] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

### 발명의 상세한 설명

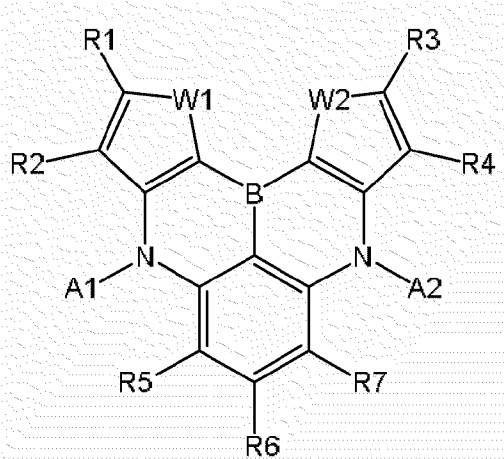
#### 기술적 과제

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

#### 과제 해결 수단

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

[8]



[9] 상기 화학식 1에서

[10] W1 및 W2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

[11] A1 및 A2는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

[12] R1 내지 R7는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

[13] R1 내지 R7, A1 및 A2는 인접하는 치환기와 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[14] 또한, 본 명세서의 또 하나의 실시상태는 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

### 발명의 효과

[15] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 색순도의 특성을 얻을 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

[16] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.

[17] 도 2는 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.

[18] 도 3은 화합물 BD-A와 화합물 9의 양자계산을 진행하여 최적화된 구조를 도시한 것이다.

[19] [부호의 설명]

[20] 1: 기판

[21] 2: 제1 전극

- [22] 3: 유기물층
- [23] 4: 제2 전극
- [24] 5: 정공주입층
- [25] 6: 정공수송층
- [26] 7: 전자저지층
- [27] 8: 발광층
- [28] 9: 전자수송층
- [29] 10: 전자주입층

### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [30] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.
- [31] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [32] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [33] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [34] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치, 즉 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [35] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 아릴기로 치환된 아릴기, 헤테로아릴기로 치환된 아릴기, 아릴기로 치환된 헤테로고리기, 알킬기로 치환된 아릴기 동일 수 있다.
- [36] 본 명세서에 있어서, 상기 할로젠기는 플루오로기, 클로로기, 브로모기, 아이오도기 등이 될 수 있다.
- [37] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸,

tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[38] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[39] 본 명세서에 있어서, 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 더 구체적으로 탄소수 1 내지 10인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시기; 에톡시기; n-프로폭시기; 이소프로폭시기; i-프로필옥시기; n-부톡시기; 이소부톡시기; tert-부톡시기; sec-부톡시기; n-펜틸옥시기; 네오펜틸옥시기; 이소펜틸옥시기; n-헥실옥시기; 3,3-디메틸부틸옥시기; 2-에틸부틸옥시기; n-옥틸옥시기; n-노닐옥시기; n-데실옥시기; 벤질옥시기; p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[40] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

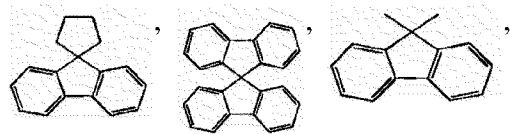
[41] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다.

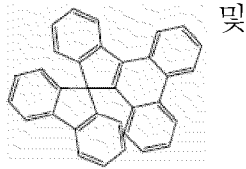
[42] 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[43] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 트리페닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오렌기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

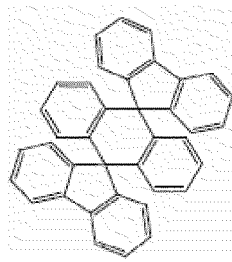
[44] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오렌기는 치환될 수 있으며, 인접한 기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[45] 상기 플루오렌기가 치환되는 경우,





및



등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은

아니다.

- [46] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [47] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 헤테로아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨라닐기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리딜기, 바이피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 트리아졸릴기, 아크리딜기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미딜기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤리닐기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [48] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴기가 2 이상을 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로아릴기, 다환식 헤테로아릴기, 또는 단환식 헤테로아릴기와 다환식 헤테로아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 전술한 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [49] 본 명세서에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기 및 N-알킬헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기의 예시는 전술한 헤테로아릴기의 예시와 같다.
- [50] 본 명세서에 있어서, "인접한 기와 결합하여 고리를 형성"은 오쏘(ortho)위치에

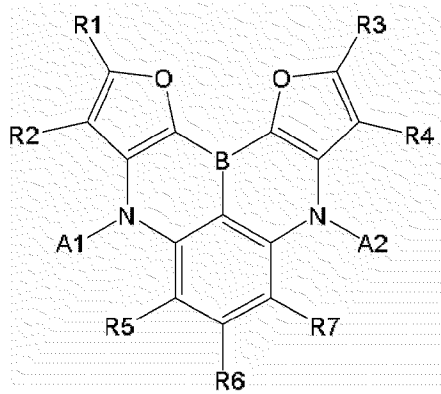
있는 치환기와 결합하여 지방족고리, 방향족 고리나, 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 형성하는 것을 말한다.

[51] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시된다.

[52] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다.

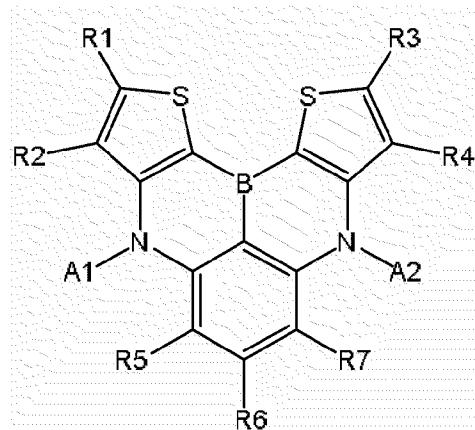
[53] [화학식 2]

[54]



[55] [화학식 3]

[56]



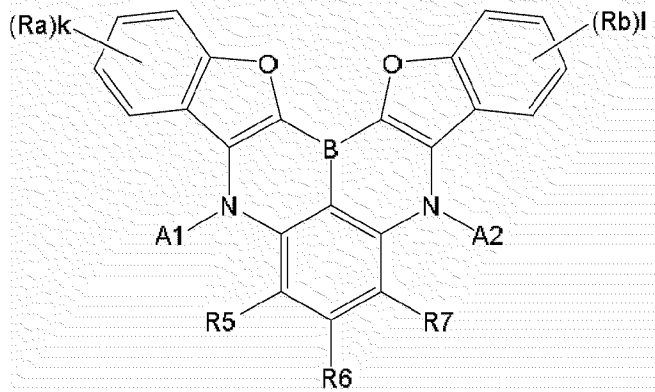
[57] 상기 화학식 2 및 3에 있어서,

[58] A1, A2, 및 R1 내지 R7는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[59] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4 또는 5으로 표시된다.

[60] [화학식 4]

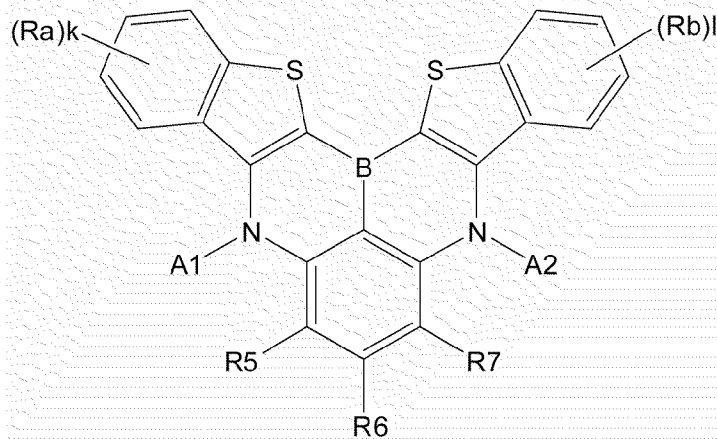
[61]



[62]

[화학식 5]

[63]



[64]

상기 화학식 4 및 5에 있어서,

[65]

A1, A2, 및 R5 내지 R7는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[66]

Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 치환기가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,

[67]

k 및 l은 각각 0 내지 4의 정수이고,

[68]

k 및 l이 각각 복수일 때, 상기 괄호 안의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[69]

본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R7, Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 치환기가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[70]

본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R7, Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 니트릴기; 할로젠기; 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의

알킬기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 N, O, 및 S 중 어느 하나 이상을 함유 헤테로아릴기이다.

- [71] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 및 R2는 서로 결합하여 고리를 형성한다.
- [72] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R3 및 R4는 서로 결합하여 고리를 형성한다.
- [73] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 및 R2는 서로 결합하여 방향족 고리를 형성한다.
- [74] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R3 및 R4는 서로 결합하여 방향족 고리를 형성한다.
- [75] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 및 R2는 서로 결합하여 헤테로 고리를 형성한다.
- [76] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R3 및 R4는 서로 결합하여 헤테로 고리를 형성한다.
- [77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 알킬기, 알콕시기, 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로젠기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 또는 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; F; Cl; Br; I; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 이소프로필기; 부틸기; 터부틸기; 펜틸기; 헥실기; 헵틸기; 옥틸기; 메톡시기; 에톡시기; 프로폭시기; 부톡시기; 터부톡시기; 펜톡시기; 메틸기로 치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 안트라센기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 파이렌기; 또는 트리페닐렌기이다.
- [80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; F; 메틸기; 터부틸기; 메톡시기; 트리메틸실릴기; 메틸기, 터부틸기 또는 트리메틸실릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기이다.
- [81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R5 및 R7은 수소이다.
- [82] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 수소; 알킬기; 알킬기로 치환된 실릴기; 아릴기로 치환된 실릴기; 할로젠기로 치환된 알콕시기; 알콕시기; 아릴기; 아릴기로 치환된 아릴기; 시클로알킬기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된 아민기; 또는 N, O, 또는 S를 함유하는 탄소수 3 내지 30의

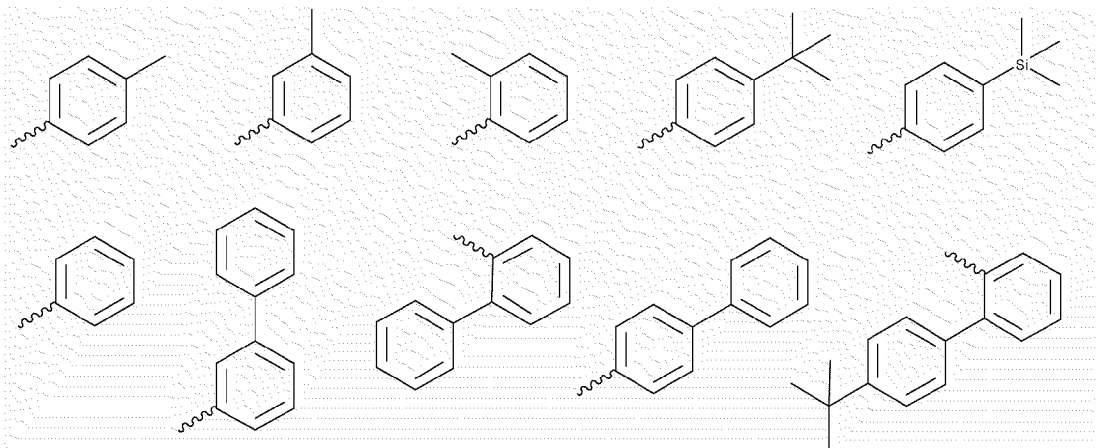
- 헤테로고리기이다.
- [83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 수소; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기; 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된 실릴기; 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 할로젠기로 치환된 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된 아민기; 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기; 또는 N, O, 또는 S를 함유하는 단환 또는 다환의 헤테로고리기이다.
- [84] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 수소; 메틸기; 터부틸기; 페닐기로 치환된 페닐기; 비페닐기; 페닐기; 터페닐기; 메틸기 또는 터부틸기로 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 메틸기로 치환된 실릴기; 페닐기로 치환된 실릴기; 플루오로기로 치환된 메톡시기; 메톡시기; 시클로헥실기; 아다만틸기; 카바졸기; 피리딘기; 피리미딘기; 트리아진기; 퓨란기; 티오펜기; 벤조퓨란기; 벤조티오펜기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 이미다졸기; 페노사진기; 페노티아진기; 또는 디메틸디히드로아크리딘기이다.
- [85] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 수소, 터부틸기, 페닐기, 터부틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기로 치환된 아민기, 트리플루오로메톡시기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 카바졸기, 페노사진기, 페노티아진기, 또는 디메틸디히드로아크리딘기이다.
- [86] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 A1 및 A2와 결합하여, 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성한다.
- [87] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 A1 및 A2와 결합하여, 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성한다.
- [88] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6는 A1 및 A2와 결합하여, 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 어느 하나 이상을 포함하는 헤테로고리를 형성한다.
- [89] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 알킬기, 알콕시기, 알킬실릴기, 또는 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [90] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기, 또는 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.
- [91] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; F; Cl; Br; I; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 이소프로필기; 부틸기; 터부틸기; 메톡시기; 에톡시기; 프로폭시기; 이소프로폭시기; 터부톡시기; 부톡시기; 트리메틸실릴기; 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는

비치환된 페닐기; 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 비페닐기; 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 터페닐기; 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 안트라센기; 또는 알킬기 또는 알킬실릴기로 치환 또는 비치환된 페난트렌기이다.

- [92] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **Ra** 및 **Rb**는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 플루오로기; 메틸기; 터부틸기; 메톡시기; 트리메틸실릴기 또는 터부틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 트리메틸실릴기이다.
- [93] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [94] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 **N**, **O**, 또는 **S**를 함유하는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [95] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 10 내지 30의 다환의 아릴기, 치환 또는 비치환된 **N**, **O**, 또는 **S**를 함유하는 탄소수 3 내지 30의 단환의 헤테로아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 **N**, **O**, 또는 **S**를 함유하는 탄소수 3 내지 30의 다환의 헤테로아릴기이다.
- [96] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고, 상기 탄소수 6 내지 30의 아릴기의 예시로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오렌기, 안트라센기, 플루오렌기, 페난트렌기, 트리페닐렌기, 또는 파이렌기가 있으나, 이로 한정하는 것은 아니며,
- [97] 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 구성된 그룹에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [98] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [99] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 **A1** 및 **A2**는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기이다.

- [100] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 터부틸기, 시클로헥실기, 또는 트리메틸실릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는
- [101] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 메틸기, 터부틸기, 시클로헥실기 또는 트리메틸실릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기이다.
- [102] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 A2는 하기 치환기들로 표시될 수 있다.

[103]

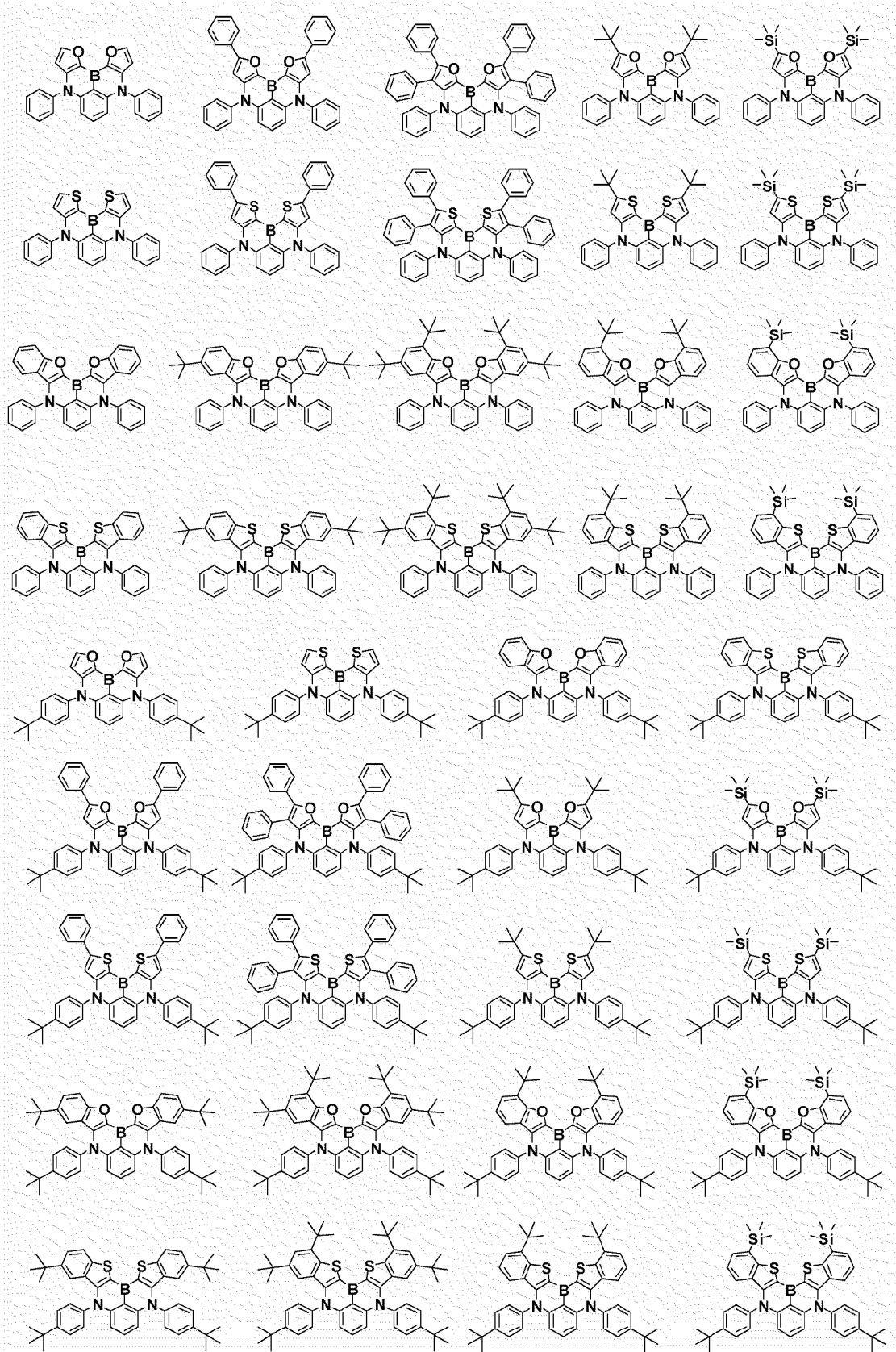


- [104]  $\text{---}$ 는 코어와 결합되는 부위이다.
- [105] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 메틸기, 터부틸기, 또는 시클로헥실기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 터부틸기로 치환 또는 비치환된 비페닐기이다.
- [106] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 R5는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [107] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A2 및 R7은 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [108] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 R5는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성한다.
- [109] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A2 및 R7은 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성한다.
- [110] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A1 및 R5는 서로 결합하여 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 N, O 또는 S를 포함하는 헤테로고리를 형성한다.
- [111] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A2 및 R7은 서로 결합하여 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 N, O 또는 S를 포함하는 헤테로고리를

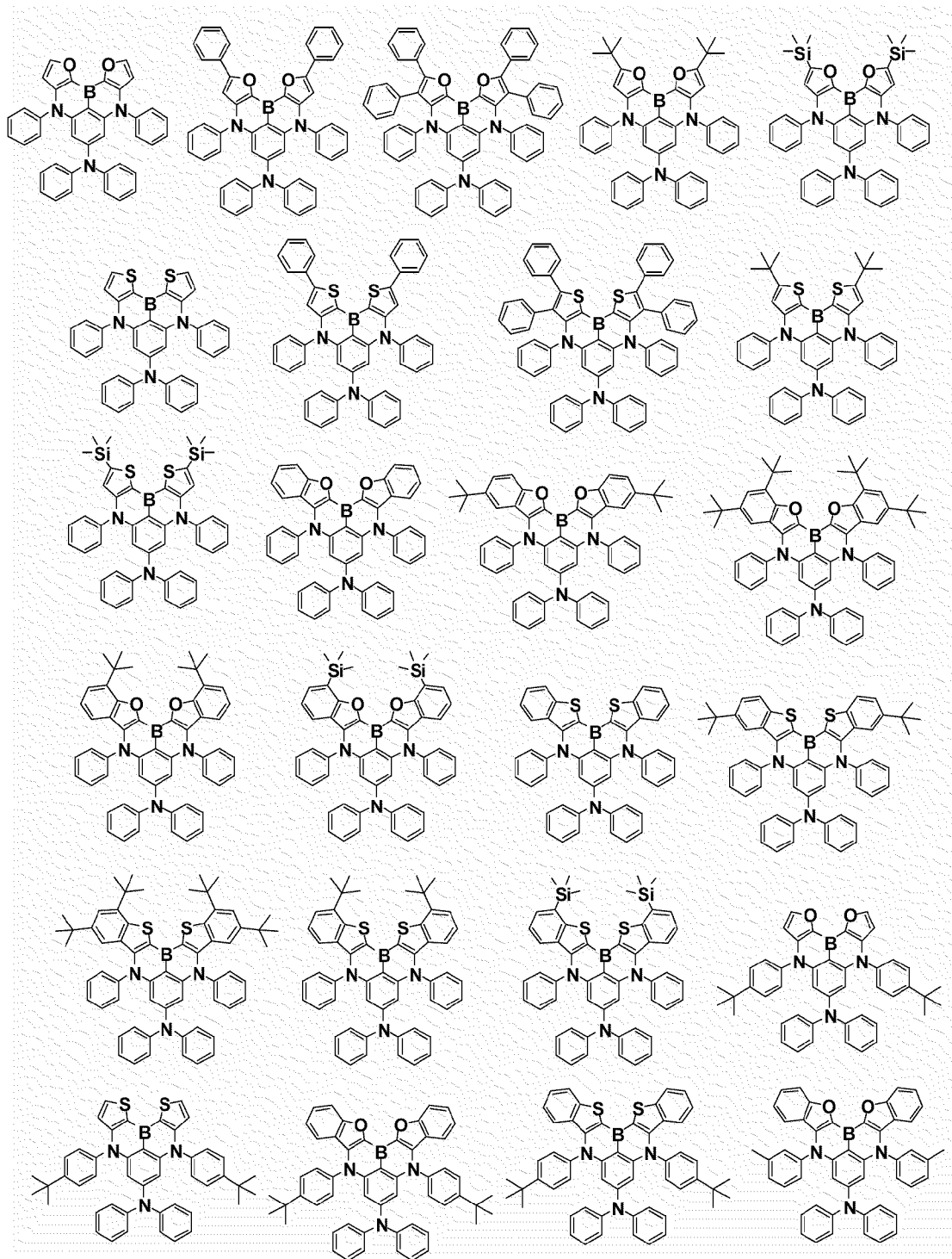
형성한다.

- [112] 본 명세서의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물은 하기 구조식들로 표시될 수 있다.

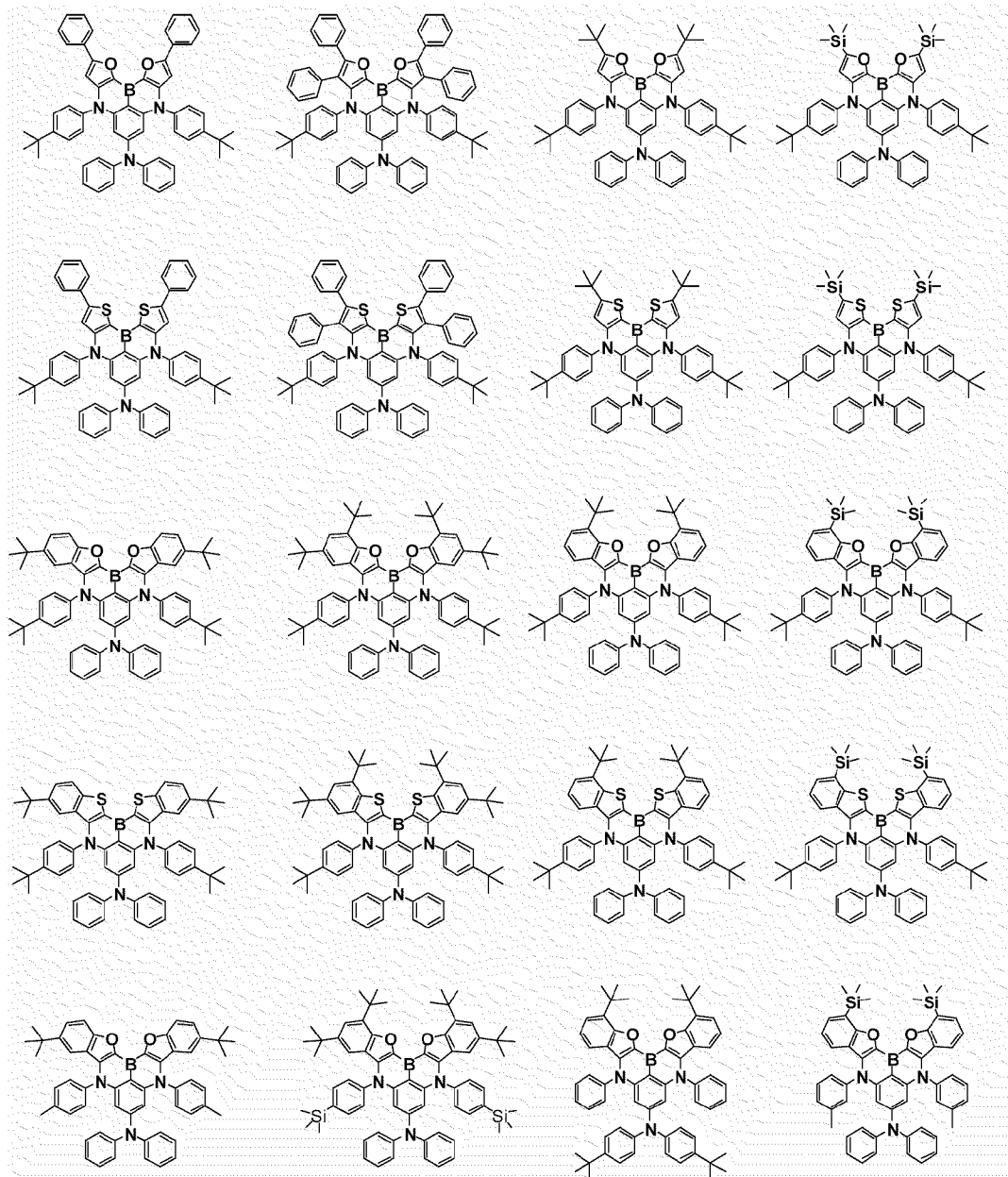
[113]



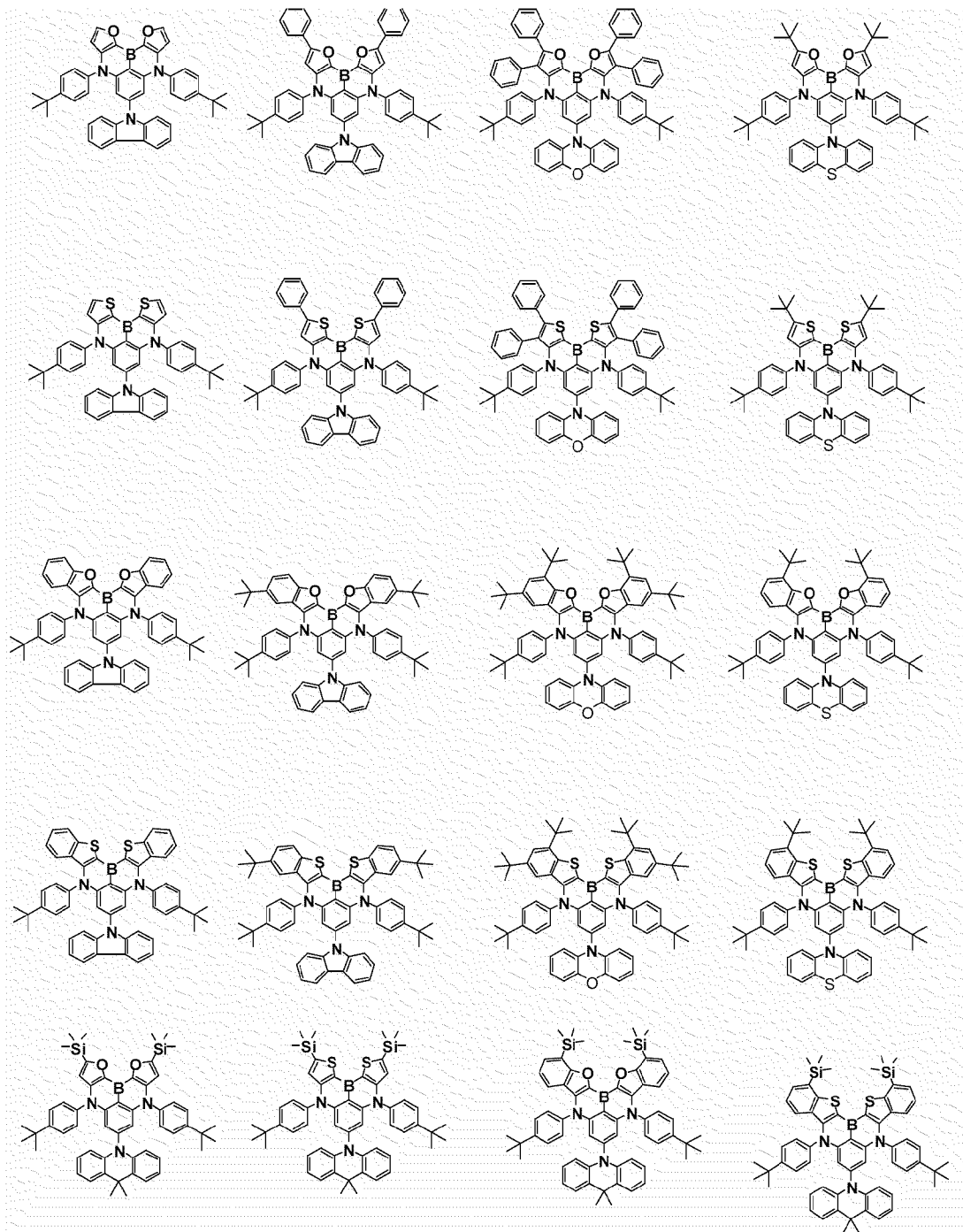
[114]



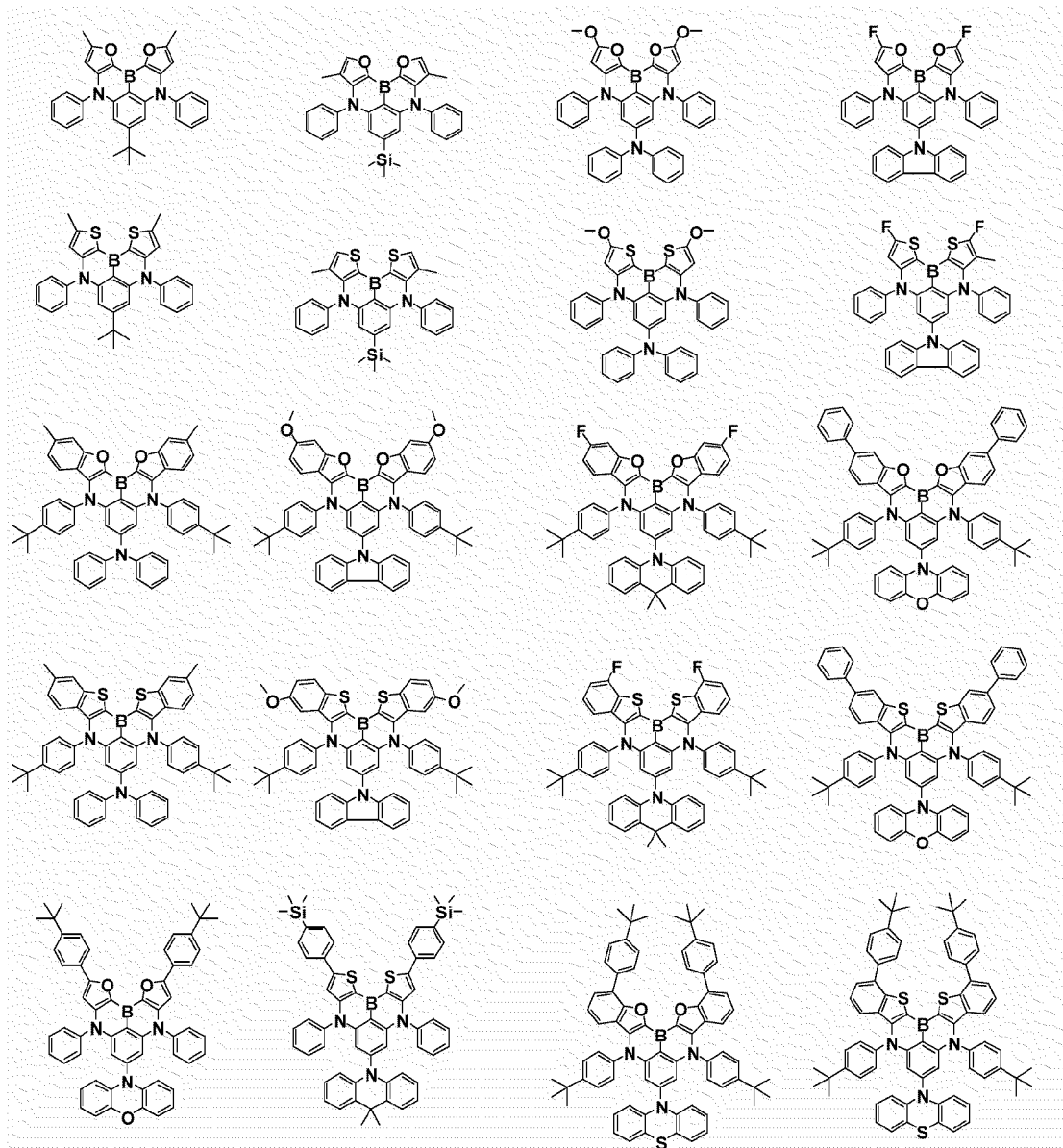
[115]



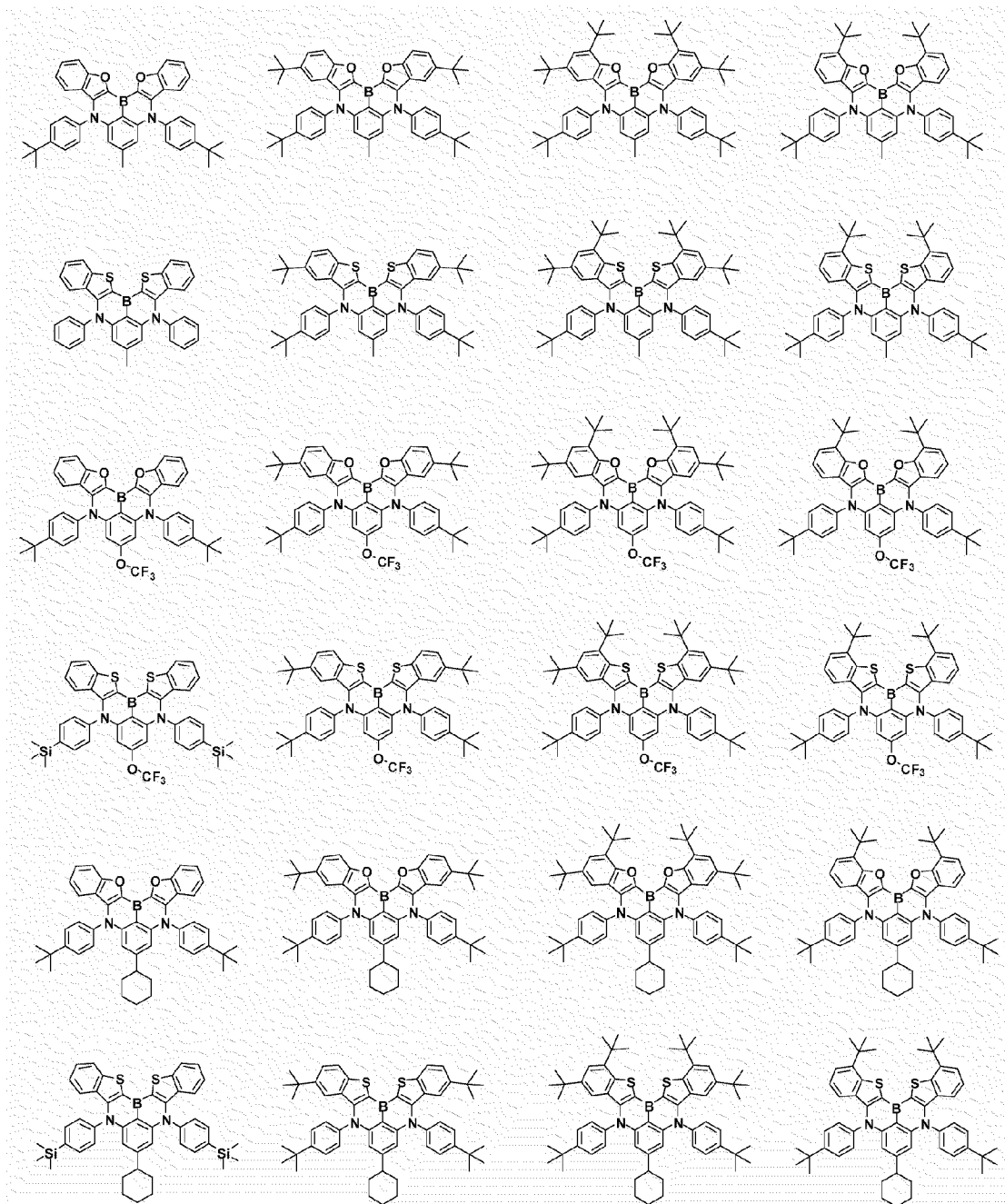
[116]



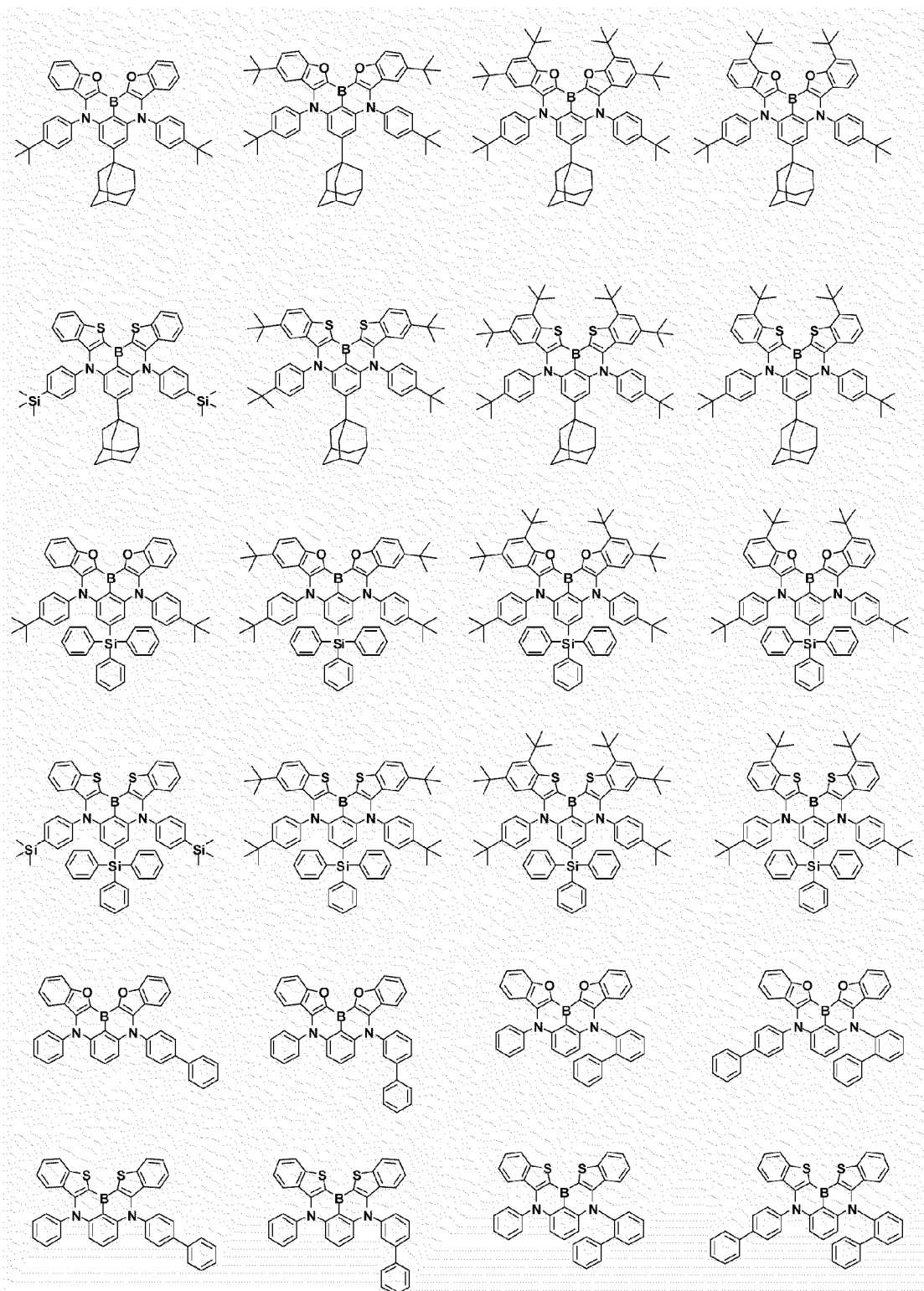
[117]



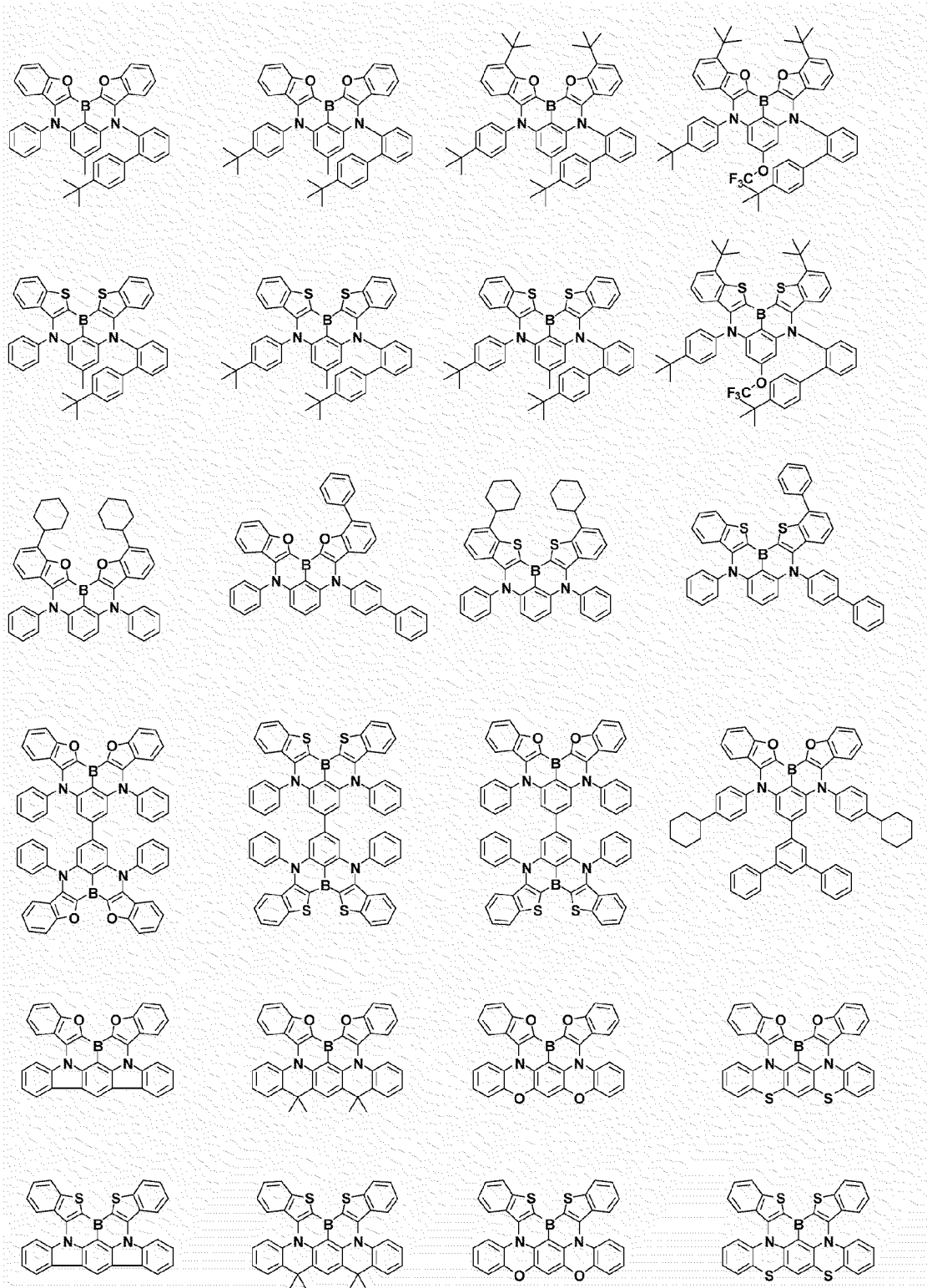
[118]



[119]



[120]



[121] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드; 상기 애노드에 대향하여 구비된 캐소드; 및 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 구비된 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함하고; 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

- [122] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [123] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함할 수 있다.
- [124] 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [125] 도 1에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 유기물층(3), 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [126] 상기 도 1은 유기 발광 소자를 예시한 것이며 이에 한정되지 않는다.
- [127] 도 2에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자저지층(7), 발광층(8), 전자수송층(9), 전자주입층(10) 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [128] 상기 도 2는 유기 발광 소자를 예시한 것이며 이에 한정되지 않는다.
- [129] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/ 제1 전극/ 유기물층/ 제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [130] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/ 제1 전극/ 유기물층/발광층/ 제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [131] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/ 제1 전극/ 발광층/ 유기물층/ 제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [132] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/제1 전극/유기물층/발광층/유기물층/제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [133] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/제1 전극/정공주입층/발광층/유기물층/제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [134] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/제1 전극/정공주입층/전자저지층/발광층/전자주입층/제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [135] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/제1 전극/정공주입층/전자저지층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.
- [136] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판/제1 전극/정공주입층/정공수송층/전자저지층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주

입층/제2전극이 순차적으로 적층된 구조이다.

- [137] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [138] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 호스트와 도펀트를 포함한다.
- [139] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 호스트와 도펀트를 99:1 내지 1:99의 중량비로 포함한다.
- [140] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 호스트와 도펀트를 99:1 내지 50:50의 중량비로 포함한다.
- [141] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 도펀트로 포함한다.
- [142] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층의 호스트로 유기화합물을 사용할 수 있다.
- [143] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층의 호스트로 안트라센계 유기화합물을 사용할 수 있다.
- [144] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 전자주입 및 수송층, 또는 정공저지층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자수송층, 전자주입 및 수송층, 또는 정공저지층에 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [145] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 수송층, 및 전자저지층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 수송층, 및 전자저지층에 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [146] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층 및 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.

- [147] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸화합물의), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)화합물의](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [148] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [149] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [150] 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [151] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [152] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유

화합물로는 헥테로고리 화합물, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [153] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [154] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 헥테로고리 화합물을 이용하여 형성되는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [155] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기판 상에 애노드, 유기물층 및 캐소드를 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 애노드를 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 캐소드로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 캐소드 물질부터 유기물층, 애노드 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [156] 본 명세서는 또한, 상기 헥테로고리 화합물을 이용하여 형성된 유기 발광 소자의 제조 방법을 제공한다.
- [157] 구체적으로 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 기판을 준비하는 단계; 상기 기판 상에 캐소드 또는 애노드를 형성하는 단계; 상기 캐소드 또는 애노드 상에 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계; 및 상기 유기물층 상에 애노드 또는 캐소드를 형성하는 단계를 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 헥테로고리 화합물을 이용하여 형성된다.
- [158] 상기 전자 수송 물질로는 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 캐소드로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq<sub>3</sub>를 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 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.
- [159] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 캐소드로부터의 전자주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란

다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [160] 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.

- [161] 상기 정공저지층은 정공의 캐소드 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 정공주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 구체적으로 옥사다이아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP, 알루미늄 착물 (aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

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

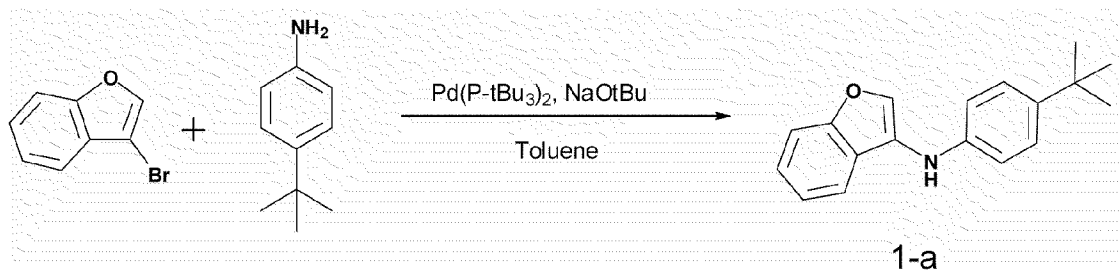
### 발명의 실시를 위한 형태

- [163] [합성예]

- [164] 합성예 1: 화합물 1의 합성

- [165] 단계 1) 화합물 1-a의 합성

- [166]

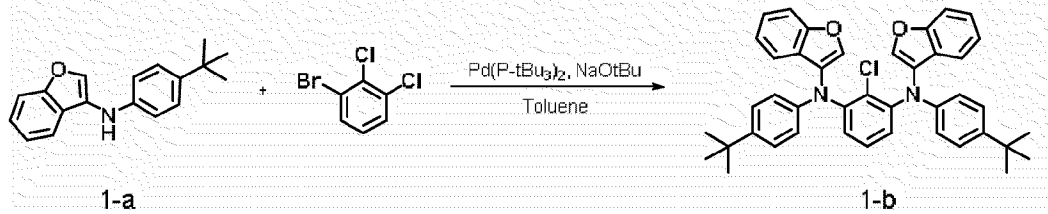


- [167] 3 구 플라스크에 3-브로모벤조퓨란 (15.0g, 76.1mmol), 4-(터부틸)아닐린 (12.5g, 83.7mmol)을 톨루엔 450ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(11.0g, 114.2mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.8g, 1.5mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-a 15.2g을

수득하였다. (수율 75%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 265)

[168] 단계 2) 화합물 1-b의 합성

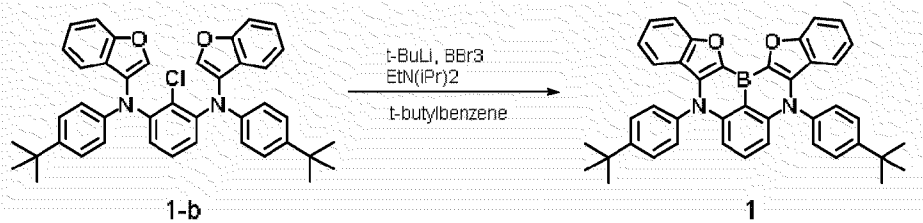
[169]



[170] 3 구 플라스크에 화합물 1-a (15.0g, 56.5mmol), 1-브로모-2,3-디클로로벤젠 (6.4g, 28.3mmol)을 톨루엔 300ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(10.9g, 113.1mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.6g, 1.1mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-b 27.5g을 수득하였다. (수율 76%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 639)

[171] 단계 3) 화합물 1의 합성

[172]

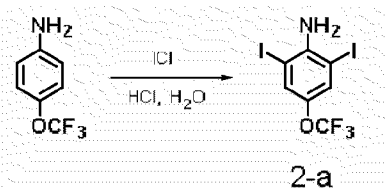


[173] 3 구 플라스크에 화합물 1-b (25.0 g, 39.1mmol) 을 터부틸벤젠 500ml에 녹인 후 0 °C까지 냉각하였다. 질소 분위기 하에서 1.7 M의 터부틸리튬 인 펜테인(tert-butyllithium in pentane) (35ml, 58.7mmol)을 첨가하고 60 °C에서 2시간 교반하였다. 이 후 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 BBr<sub>3</sub> (6ml, 58.7mmol)를 첨가한 후 상온에서 0.5시간 교반하였다. 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 N,N-디이소프로필에틸아민 (10ml, 58.7mmol)를 첨가한 후 60°C에서 2시간 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, 에틸아세테이트와 H<sub>2</sub>O을 이용해 분액 깔대기에서 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 승화정제를 통해 화합물 1 2.6g을 수득하였다. (수율 11%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 612)

[174] 합성예 2: 화합물 2의 합성

[175] 단계 1) 화합물 2-a의 합성

[176]

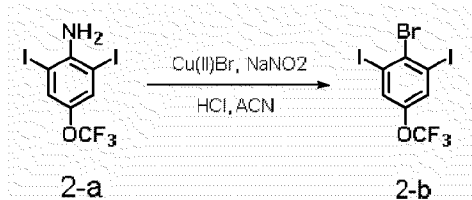


[177] 3 구 플라스크에 4-(트리플루오로메톡시)아닐린 (15.0g, 84.7mmol), 포타슘

아이오다이드(35.1g, 211.7mmol)을 conc.H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1ml, MeOH 420ml에 녹이고 30% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 1ml를 천천히 넣어주며 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면, 디클로로메탄과 H<sub>2</sub>O을 이용해 분액 깔대기에서 추출하였다. 추출액을 NaHSO<sub>3</sub> 수용액, H<sub>2</sub>O로 차례로 씻어준 후, MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-a 25.4g을 수득하였다. (수율 70%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 428)

[178] 단계 2) 화합물 2-b의 합성

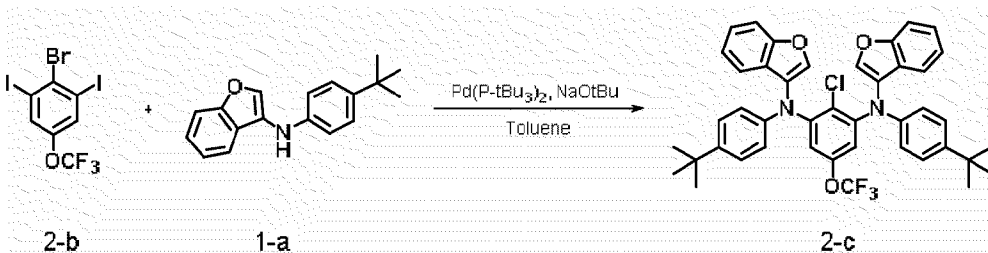
[179]



[180] 3 구 플라스크에 화합물 2-a (20.0g, 46.6mmol), acetic acid 100ml를 넣고 후 0 °C까지 냉각하였다. 질소 분위기 하에서 소듐 니트라이트 (4.8g, 69.9mmol)을 H<sub>2</sub>O 20ml에 녹여 첨가하고 이어서 conc. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 20ml를 첨가한 후 0.5시간 교반하였다. 이 후 상온에서 브롬화 구리(14.7g, 102.6mmol)을 45% HBr 수용액 340ml에 녹여 첨가해 1시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 H<sub>2</sub>O을 이용해 분액 깔대기에서 추출하였다. H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. NaHCO<sub>3</sub> 수용액, H<sub>2</sub>O로 차례로 씻어준 후, MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-b 16.1g을 수득하였다. (수율 70%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 492)

[181] 단계 3) 화합물 2-c의 합성

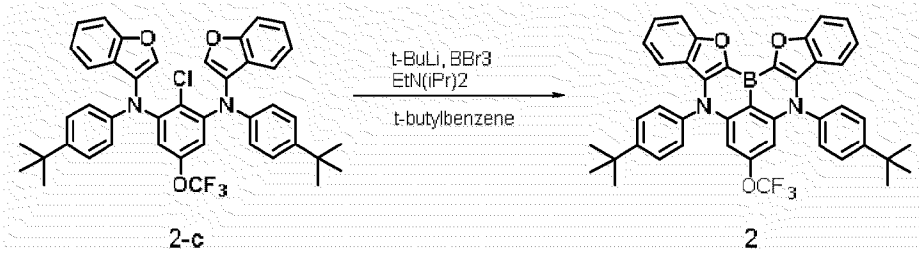
[182]



[183] 3구 플라스크에 화합물 2-b (15.0g, 30.4mmol), 화합물 1-a (8.9g, 33.5mmol)을 톨루엔 450ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(4.4g, 45.7mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3g, 0.6mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-c 15.9g을 수득하였다. (수율 72%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 723)

[184] 단계 4) 화합물 2의 합성

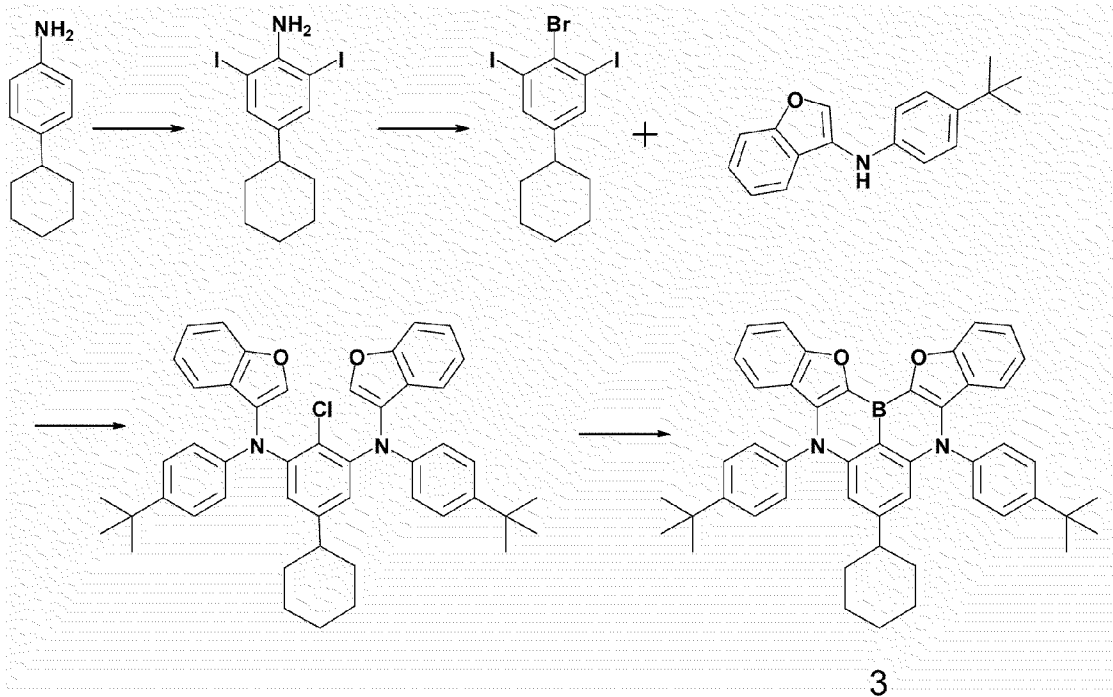
[185]



[186] 3 구 플라스크에 화합물 2-c (15.0 g, 20.7mmol) 을 터부틸벤젠 300ml에 녹인 후 0 °C까지 냉각하였다. 질소 분위기 하에서 1.7 M의 터부틸리튬 인 펜테인(tert-butyllithium in pentane) (18ml, 31.1mmol)을 첨가하고 60 °C에서 2시간 교반하였다. 이 후 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 BBr<sub>3</sub> (3 ml, 31.1mmol)를 첨가한 후 상온에서 0.5시간 교반하였다. 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 N,N-디이소프로필에틸아민 (5ml, 31.1mmol)를 첨가한 후 60 °C에서 2시간 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, 에틸아세테이트와 H<sub>2</sub>O을 이용해 분액 깔대기에서 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 승화정제를 통해 화합물 2 1.7g을 수득하였다. (수율 12%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 696)

[187] 합성예 3: 화합물 3의 합성

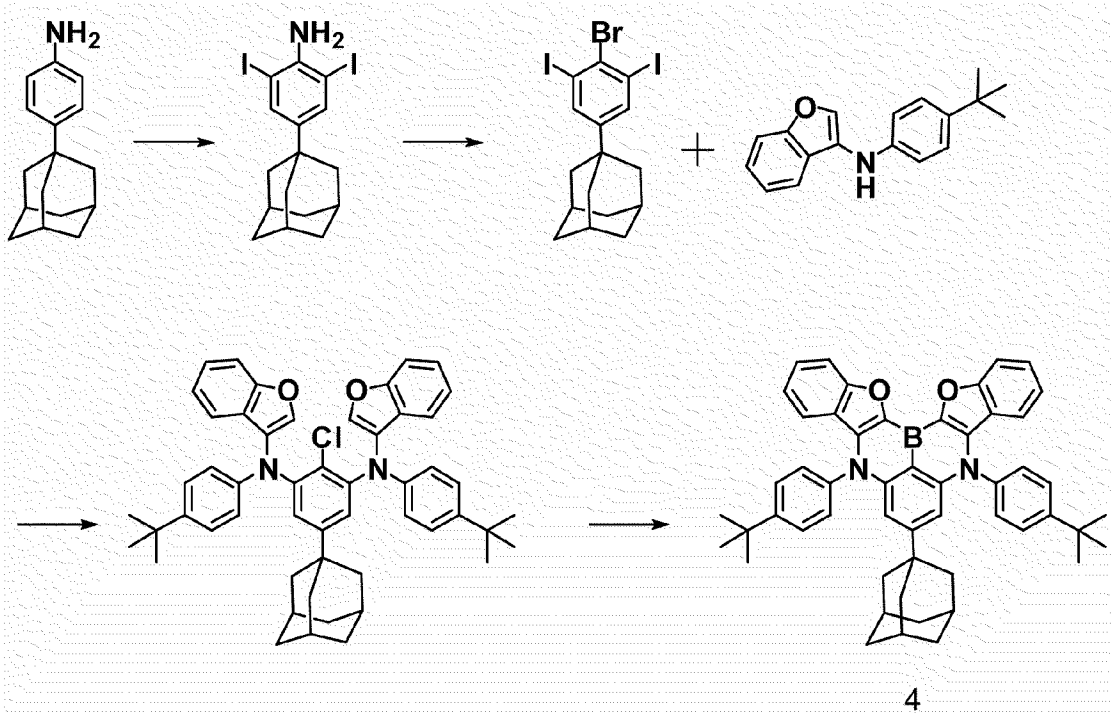
[188]



[189] 합성예 2에서, 4-(트리플루오로메톡시)아닐린을 4-시클로헥실아닐린으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 2의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 합성하여 화합물 3을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup>= 694)

[190] 합성예 4: 화합물 4의 합성

[191]



[192]

합성예 2에서, 4-(트리플루오로메톡시)아닐린을 4-((3r,5r,7r)-아다만탄-1-일)아닐린으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 2의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 합성하여 화합물 4를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup>= 746)

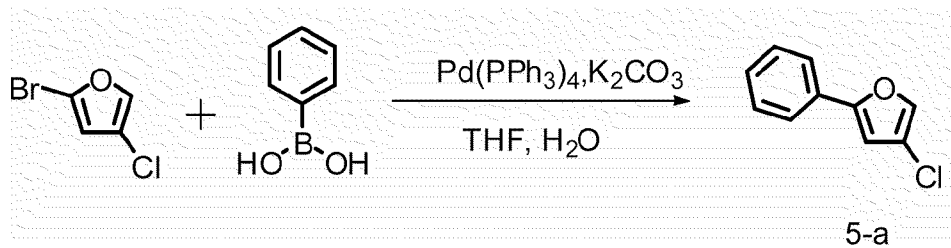
[193]

합성예 5: 화합물 5의 합성

[194]

단계 1) 화합물 5-a의 합성

[195]



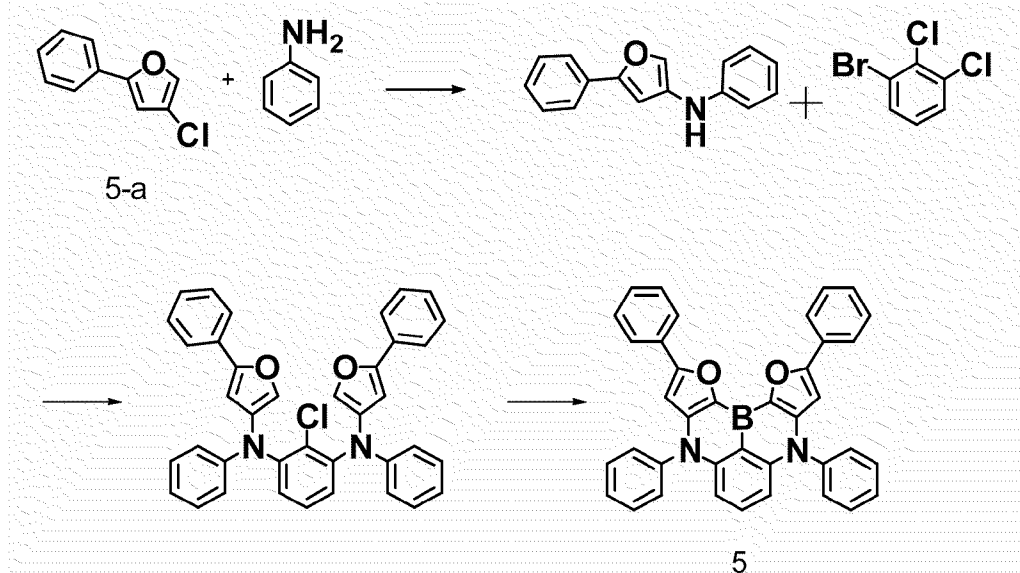
[196]

3 구 플라스크에 2-브로모-4-클로로퓨란 (20.0g, 110.2mmol), 페닐 보론산(14.1g, 115.8mmol)을 THF 400ml에 녹이고 포타슘 카보네이트 (91.4g, 661.5mmol)을 H<sub>2</sub>O 133ml에 녹여 넣는다. 여기에 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (2.5g, 2.2mmol)를 넣고, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 8시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, 반응액을 분액 깔대기에 옮기고, 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-a을 16.0g 수득하였다. (수율 81%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 178)

[197]

단계 2) 화합물 5의 합성

[198]

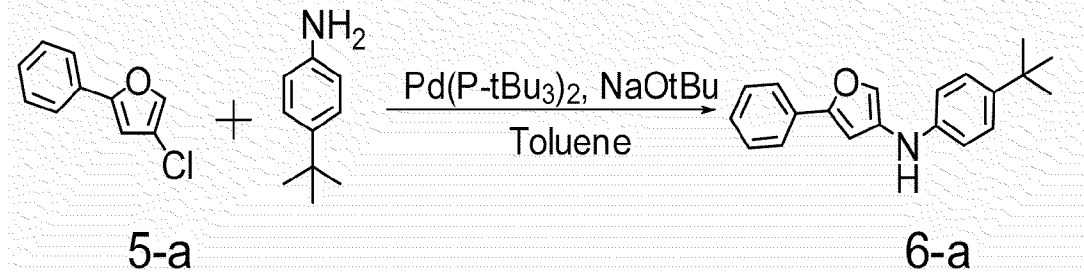


[199] 합성예 1에서, 3-브로모벤조퓨란을 화합물 5-a로, 4-(터부틸)아닐린을 아닐린으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 합성하여 화합물 5를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup>= 522)

[200] 합성예 6: 화합물 6의 합성

[201] 단계 1) 화합물 6-a의 합성

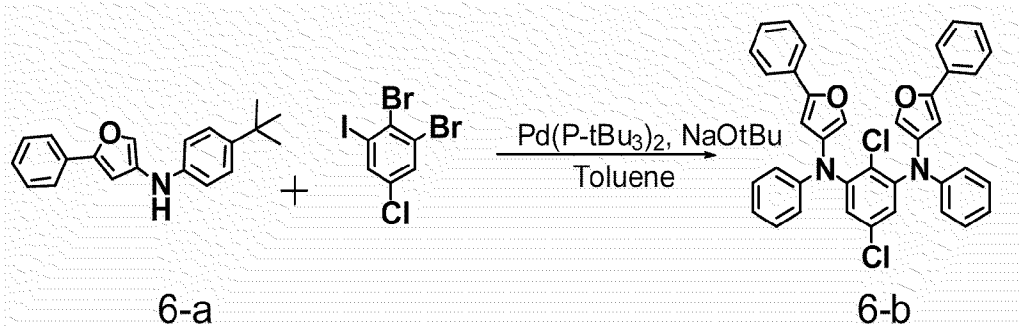
[202]



[203] 3 구 플라스크에 화합물 5-a (15.0g, 84.0mmol), 4-(터부틸)아닐린 (13.2g, 88.2mmol)을 톨루엔 450ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(12.1g, 126.0mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.9g, 1.7mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 6-a 17.4g을 수득하였다. (수율 71%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 291)

[204] 단계 2) 화합물 6-b의 합성

[205]



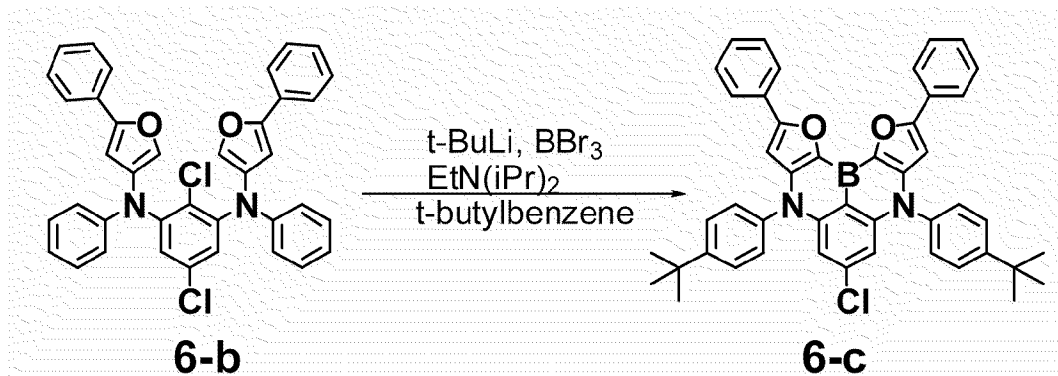
[206]

3 구 플라스크에 화합물 6-a (15.0g, 51.5mmol), 1,2-디브로모-5-클로로-3-아이오도벤젠 (9.5g, 25.7mmol)을 톨루엔 300ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(9.9g, 103.0mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.5g, 1.0mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 6-b 24.3g을 수득하였다. (수율 77%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 613)

[207]

단계 3) 화합물 6-c의 합성

[208]



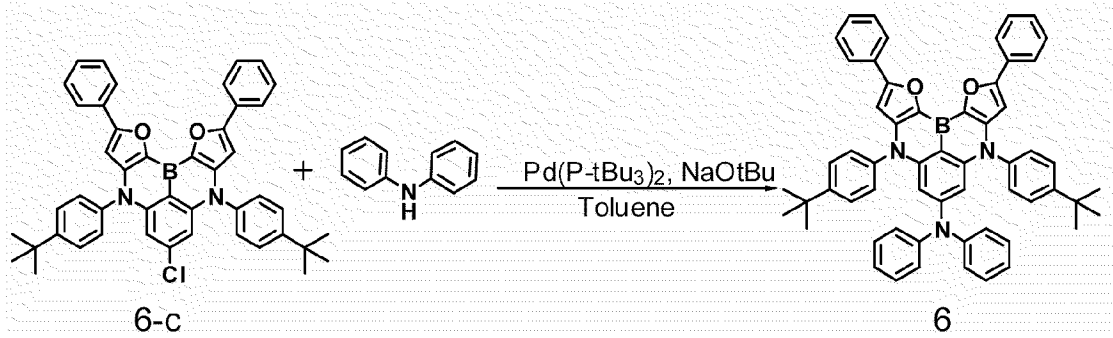
[209]

3 구 플라스크에 화합물 6-b (24.0 g, 39.1mmol) 을 터부틸벤젠 480ml에 녹인 후 0 °C까지 냉각하였다. 질소 분위기 하에서 1.7M의 터부틸리튬 인 펜테인(tert-butyllithium in pentane) (35ml, 58.7mmol)을 첨가하고 60 °C에서 2시간 교반하였다. 이 후 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 BBr<sub>3</sub> (6 ml, 58.7mmol)를 첨가한 후 상온에서 0.5시간 교반하였다. 다시 반응물을 0 °C까지 냉각하고 N,N-디이소프로필에틸아민 (10ml, 58.7mmol)를 첨가한 후 60 °C에서 2시간 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, 에틸아세테이트와 H<sub>2</sub>O을 이용해 분액 깔대기에서 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 6-c 6.3g을 수득하였다. (수율 23%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 699)

[210]

단계 4) 화합물 6의 합성

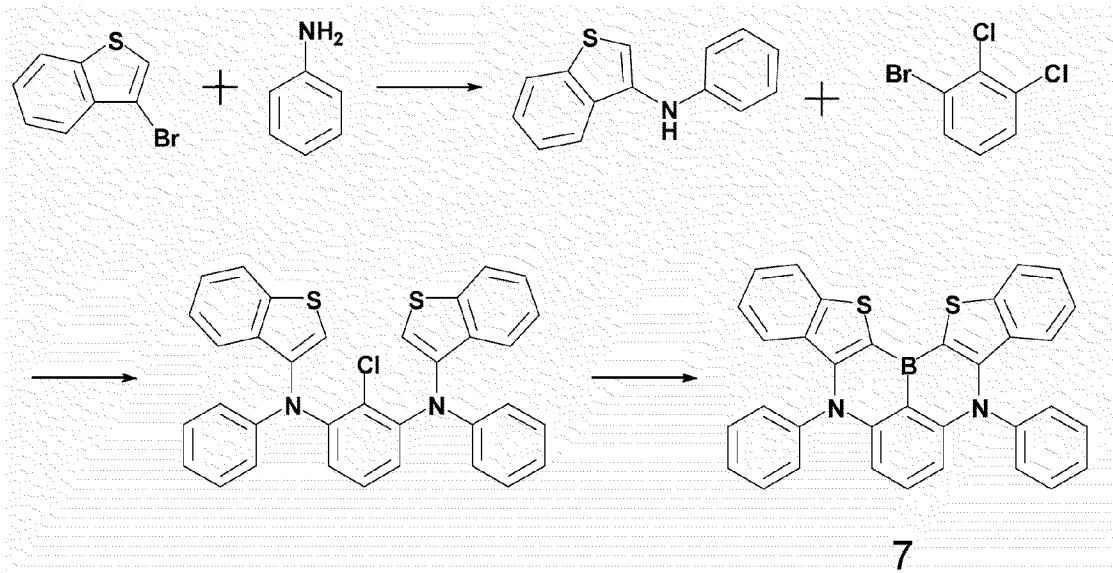
[211]



[212] 3 구 플라스크에 화합물 6-c (6.0g, 8.6mmol), 디페닐아민 (1.6g, 9.4mmol)을 톨루엔 150ml에 녹이고 소듐 터부톡사이드(1.2g, 12.9mmol), 비스(트리-터부틸포스핀)팔라듐(0) (0.1g, 0.2mmol)을 넣은 후, 아르곤 분위기 환류 조건하에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후, H<sub>2</sub>O를 넣고 반응액을 분액 깔대기에 옮겨 추출하였다. 추출액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조, 농축하고 시료를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 승화정제를 통해 화합물 6 2.5g을 수득하였다. (수율 35%, MS[M+H]<sup>+</sup>= 831)

[213] 합성예 7: 화합물 7의 합성

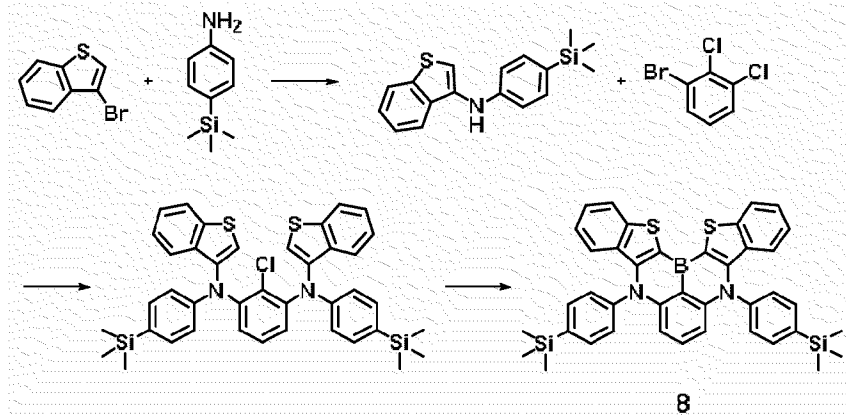
[214]



[215] 합성예 1에서, 3-브로모벤조퓨란을 3-브로모벤조[b]티오펜으로, 4-(터부틸)아닐린을 아닐린으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 합성하여 화합물 7을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup>= 532)

[216] 합성예 8: 화합물 8의 합성

[217]



[218] 합성에 1에서, 3-브로모벤조푸란을 3-브로모벤조[b]티오펜으로, 4-(터부틸)아닐린을 4-(트리메틸실릴)아닐린으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 합성하여 화합물 8을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup>= 676)

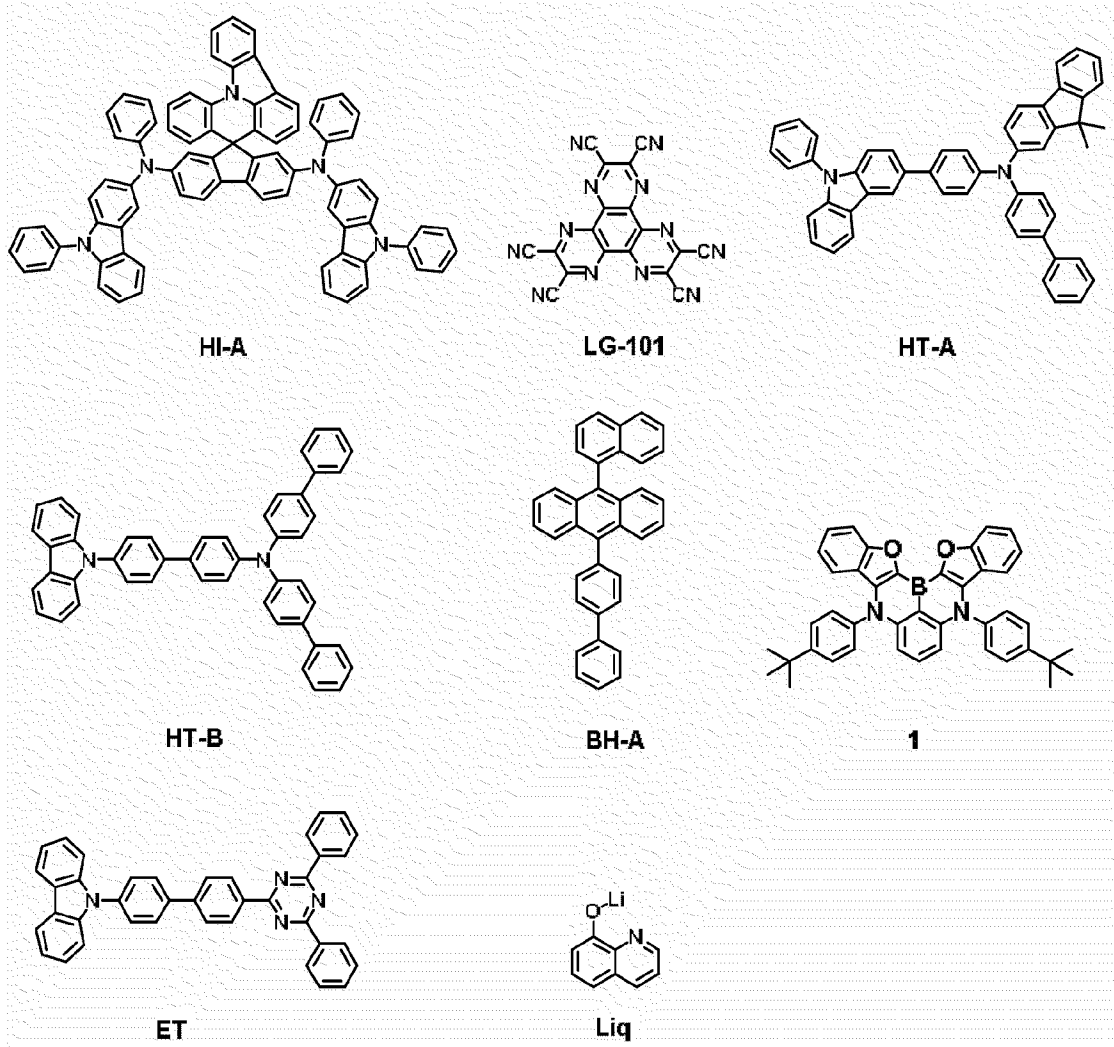
[219] [소자실시예]

[220] 실시예 1

[221] ITO(Indium Tin Oxide)가 1,400 Å의 두께로 박막 코팅된 유리기판을 세제에 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때 세제로는 피셔사(Fischer Co.)의 Decon™ CON705 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 0.22μm sterilizing filter로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필 알코올, 아세톤 및 메탄올의 용제로 각각 10분간 초음파 세척하고, 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후, 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[222] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-A와 LG-101을 각각 650Å, 50Å의 두께로 순차적으로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 정공수송층으로 하기 HT-A를 600Å 두께로 진공 증착한 후 전자저지층으로 하기 HT-B를 50Å의 두께로 열 진공 증착하였다. 이어서 발광층으로 BH-A와 화합물 1을 96:4의 중량비로 200Å의 두께로 진공 증착하였다. 이어서, 전자 수송층으로 ET와 Liq로 표시되는 화합물을 1:1의 중량비로 360Å의 두께로 열 진공 증착하고 이어서 하기 Liq로 표시되는 화합물을 5Å의 두께로 진공 증착하여 전자 주입층을 형성하였다. 상기 전자주입층 위에 순차적으로 마그네슘과 은을 10:1의 중량비로 220Å의 두께로, 알루미늄을 1000Å 두께로 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

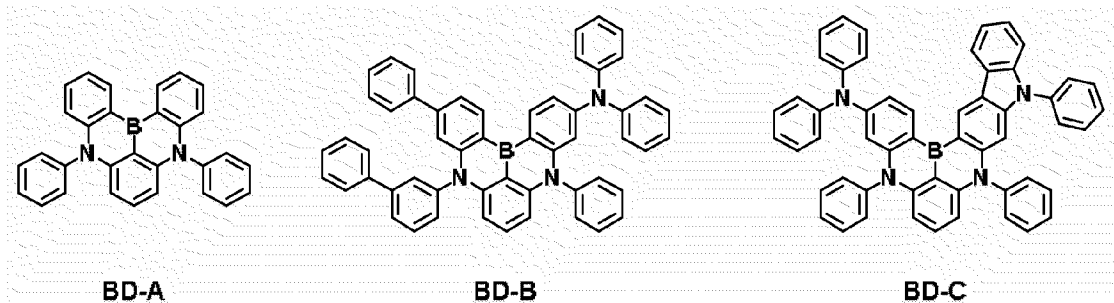
[223]



[224] 실시예 2 내지 실시예 8 및 비교예 1 내지 비교예 3

[225] 상기 실시예 1에서 도펀트 재료로 표 1에 기재한 화합물들을 대신 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 실시예 2 내지 실시예 8 및 비교예 1 내지 비교예 3의 유기 발광 소자를 각각 제작하였다.

[226]



[227] 상기 실시예 1 내지 실시예 8 및 비교예 1 내지 비교예 3에서 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하여, 전압, 효율, 수명(T95)을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 여기서, 전압, 효율은 10mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도를 인가하여 측정되었으며, FWHM(반치폭)은 이 때 측정되는 스펙트럼으로부터 구하여

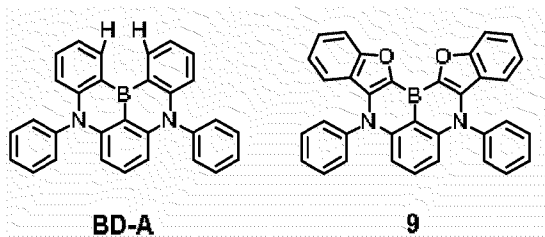
나타내었다. T95은 전류 밀도  $20\text{mA}/\text{cm}^2$ 에서 초기 휘도가 95%로 저하할 때까지의 시간을 의미한다.

[228] [표1]

	도펀트	@ $10\text{mA}/\text{cm}^2$			@ $20\text{mA}/\text{cm}^2$
		V	QE	FWHM(nm)	LT95
실시예 1	화합물1	3.88	7.61	21	110
실시예 2	화합물2	3.92	7.76	20	105
실시예 3	화합물3	3.93	7.76	21	106
실시예 4	화합물4	3.96	7.58	20	101
실시예 5	화합물5	3.85	7.65	20	119
실시예 6	화합물6	3.91	7.63	21	115
실시예 7	화합물7	3.90	7.75	20	116
실시예 8	화합물8	3.95	7.71	21	100
비교예 1	BD-A	3.98	7.30	25	81
비교예 2	BD-B	4.05	7.02	26	76
비교예 3	BD-C	4.16	6.91	26	69

[229] 상기 [표 1]에서 볼 수 있는 바와 같이 보론 원자에 육각 고리만 연결된 구조들에 비해 위의 두 고리가 오각 고리인 [화학식 1]의 구조들을 유기 발광 소자의 도펀트로 적용 시 FWHM(full width at half maximum)이 작고 효율이 높으며 높은 수명을 나타낸다. 이에 대한 원인을 파악하기 하기 두 화합물에 대해 양자 계산을 진행하여 최적화된 구조를 도 3에 나타내었다. 양자 계산은 Schrodinger Material Science Suite 프로그램의 밀도범함수이론(DFT) 계산으로 진행하였고 이 때 범함수는 B3LYP를, 기저함수는 6-31G\*를 사용하였다.

[230]



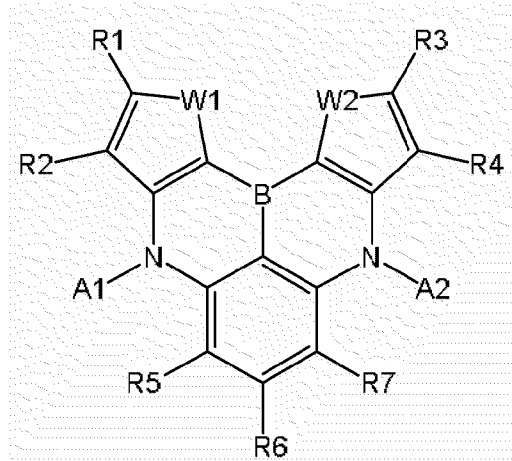
[231] BD-A와 같이 육각 고리로만 되어 있는 물질은 상기에 표시한 두 수소 원자 사이의 거리가 가까워 그 반발력으로 인해 두 육각 고리가 틀어져 있다. 반면에, 화합물 9와 같이 [화학식 1]의 구조를 갖는 화합물들은 이 위치에 수소 원자가 없어 구조가 더 평평한 구조를 갖는다. 이와 같이 평평한 구조를 갖는

화합물일수록 진동 에너지가 줄어들어 보다 좁은 발광 스펙트럼을 나타내 높은 효율을 보이고 구조적으로도 보다 안정해 수명의 증가를 보였다. 결과적으로 상기 화학식 1의 화합물을 유기 발광 소자의 발광층 도펀트로 사용하였을 때, 고색순도, 고효율, 장수명의 소자를 얻을 수 있다.

## 청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서

W1 및 W2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

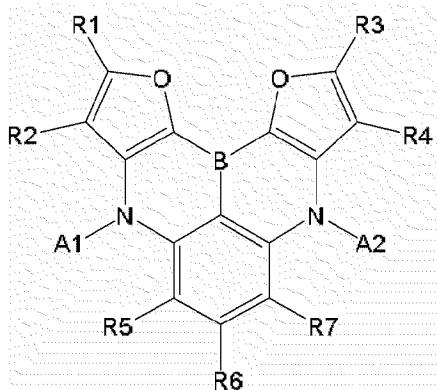
A1 및 A2는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

R1 내지 R7는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

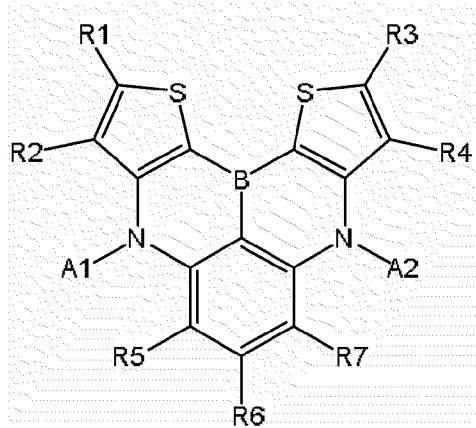
R1 내지 R7, A1 및 A2는 인접하는 치환기와 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]

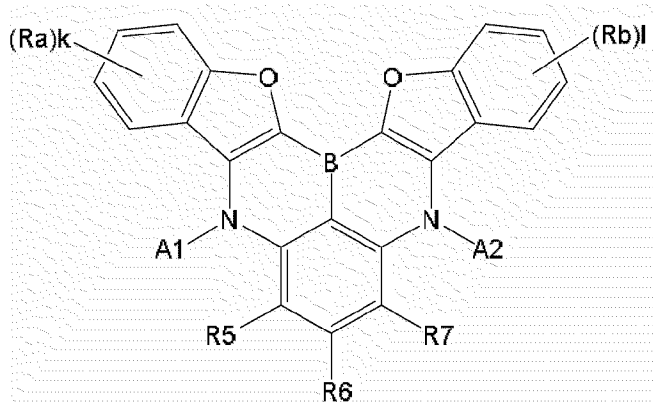


상기 화학식 2 및 3에 있어서,

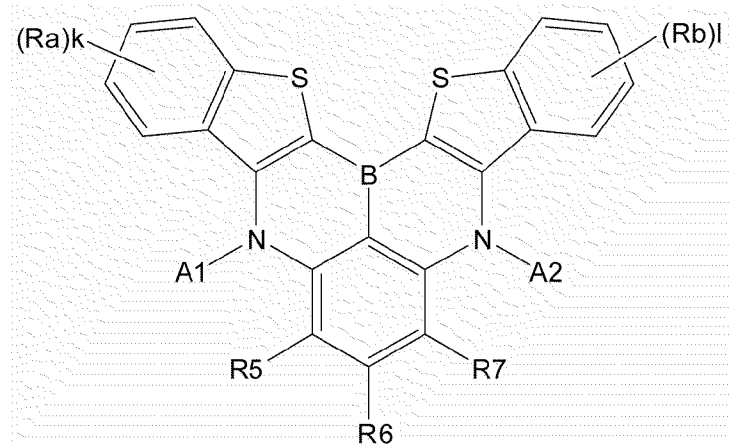
A1, A2, 및 R1 내지 R7는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[청구항 3] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4 또는 5로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 4 및 5에 있어서,

A1, A2, 및 R5 내지 R7는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

Ra 및 Rb는 서로 같거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소,

니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 치환기가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,

$k$  및  $l$ 은 각각 0 내지 4의 정수이고,

$k$  및  $l$ 이 각각 복수일 때, 괄호 안의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 4]

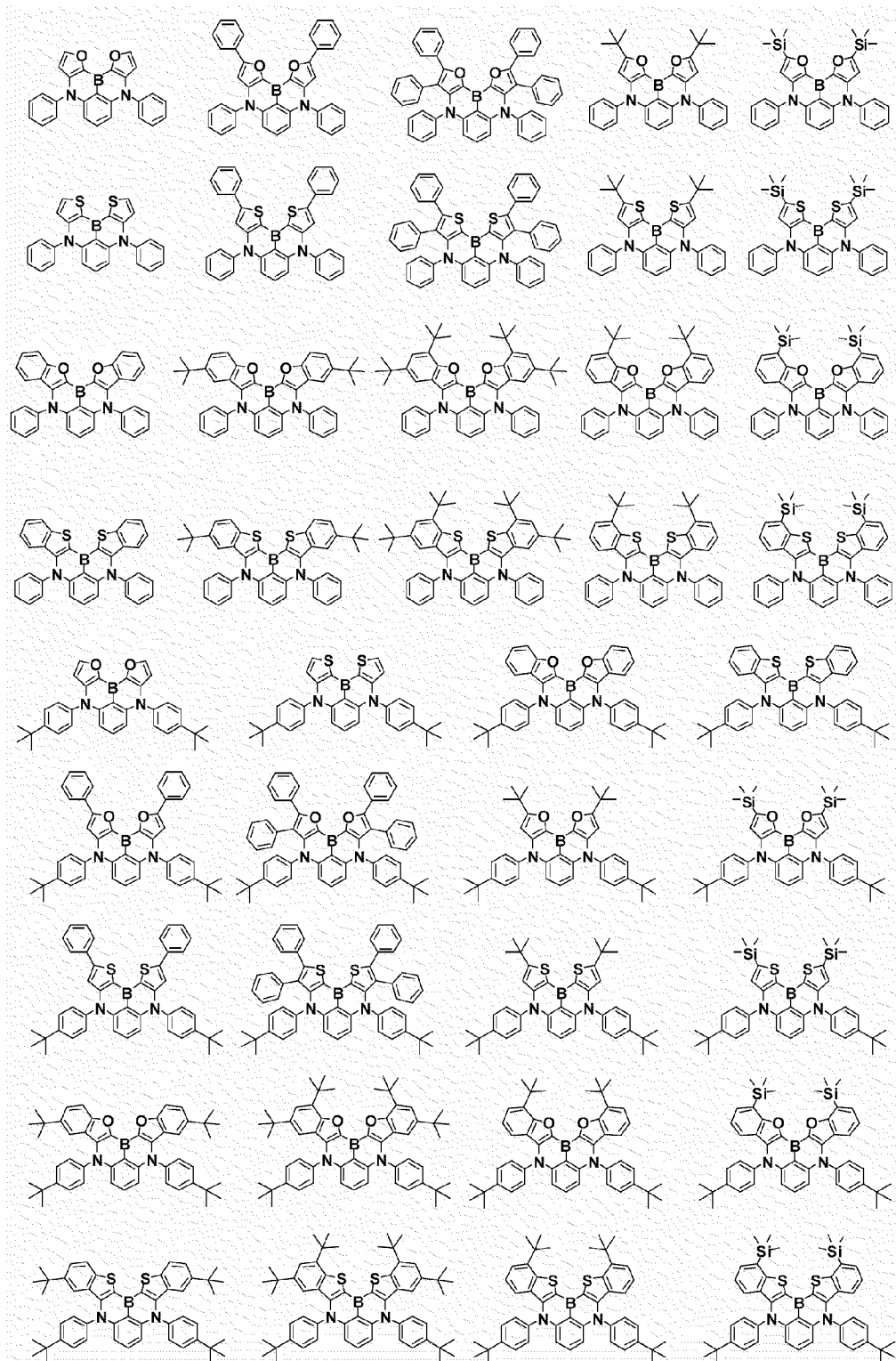
청구항 1에 있어서, 상기 R1 내지 R7는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 니트릴기; 할로젠기; 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 10의 N, O, 또는 S 함유 헤테로아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

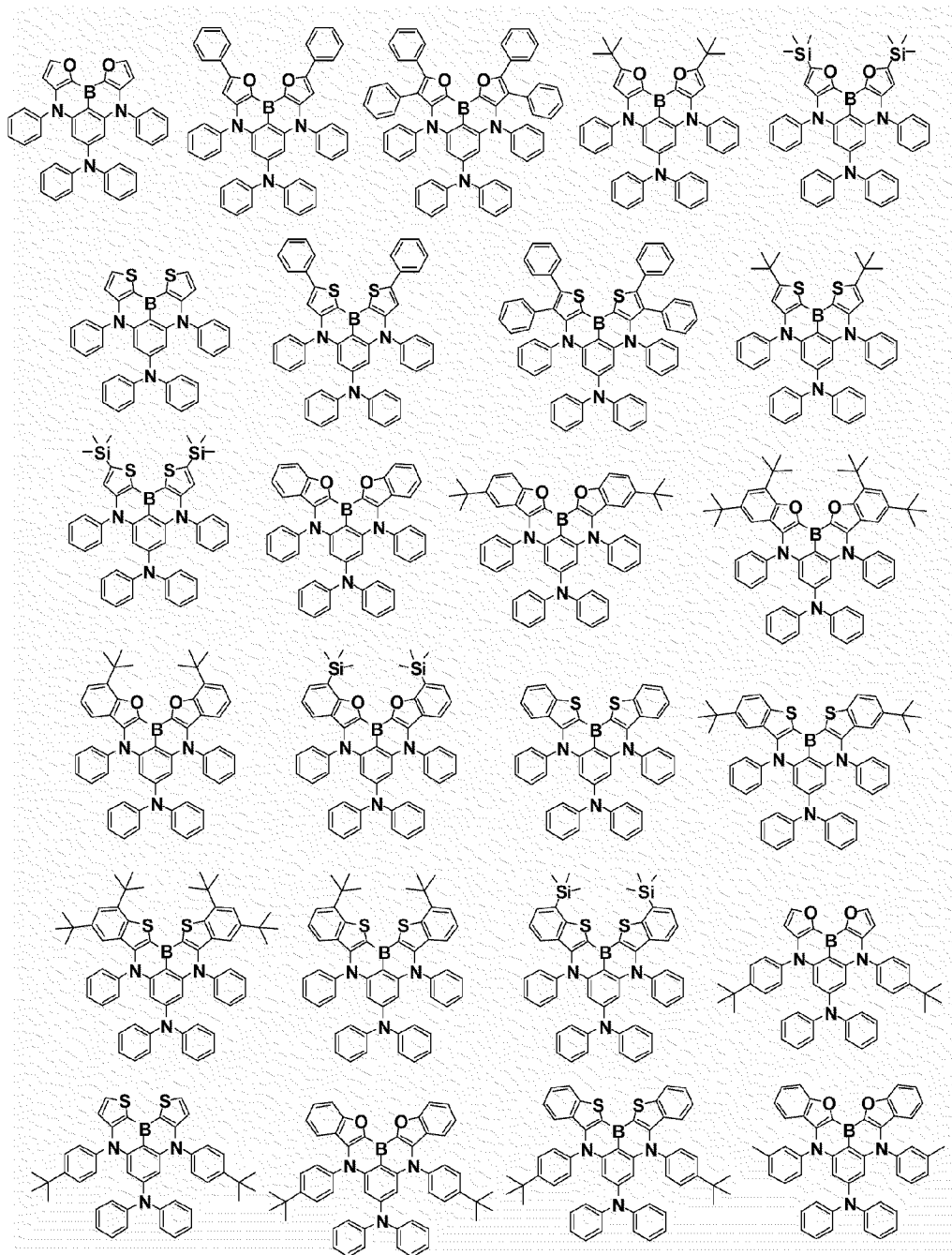
[청구항 5]

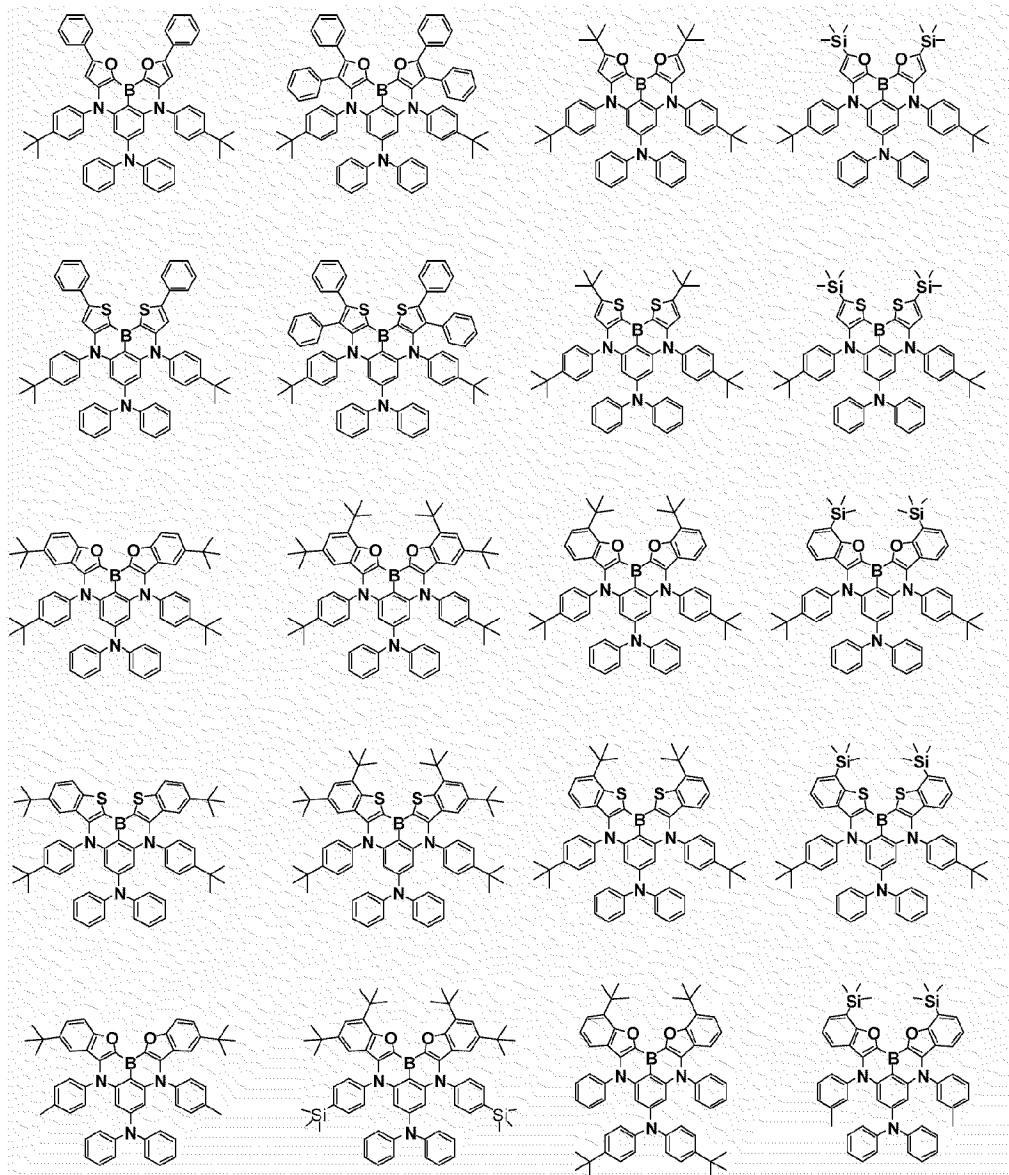
청구항 1에 있어서, 상기 A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환된 실릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

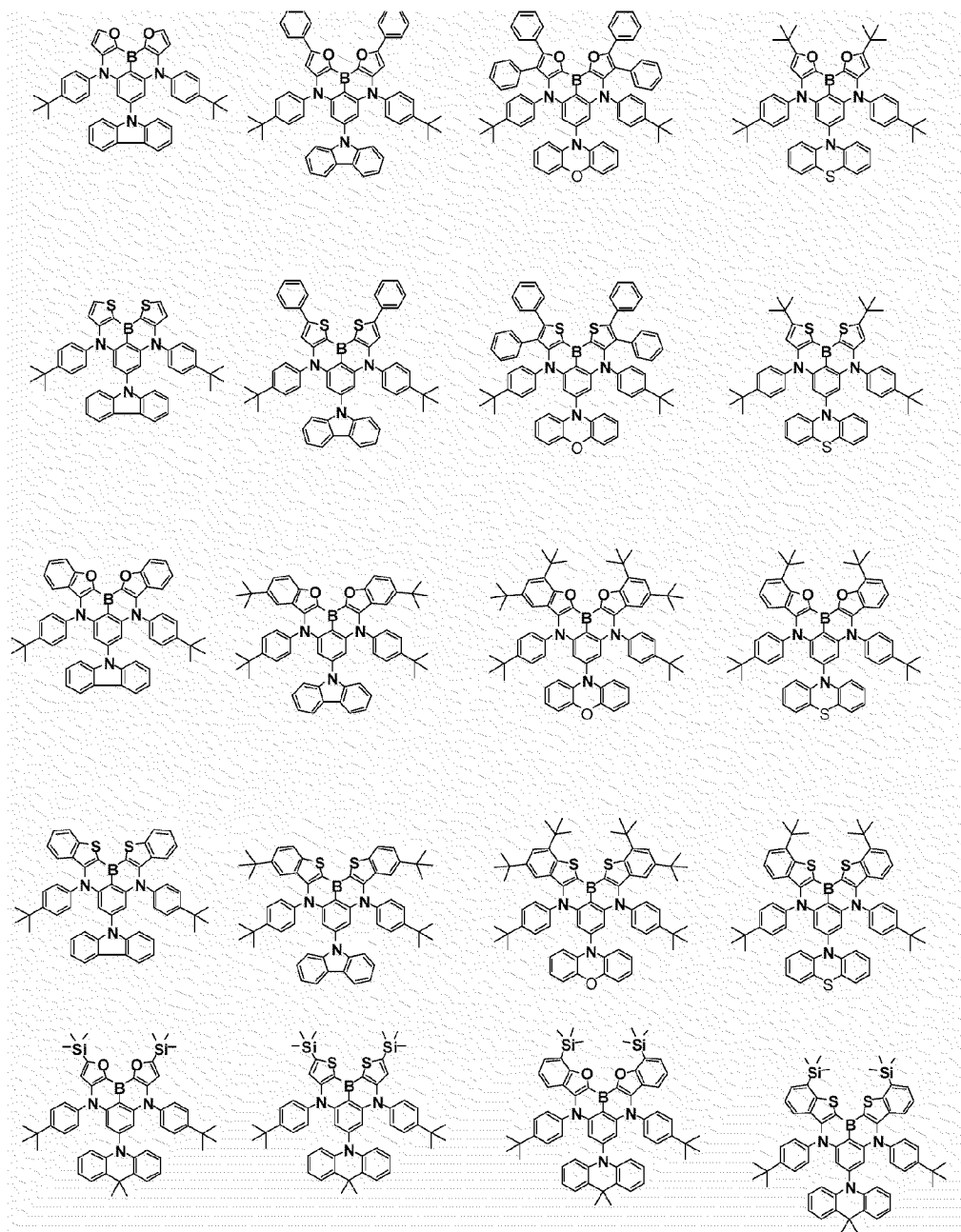
[청구항 6]

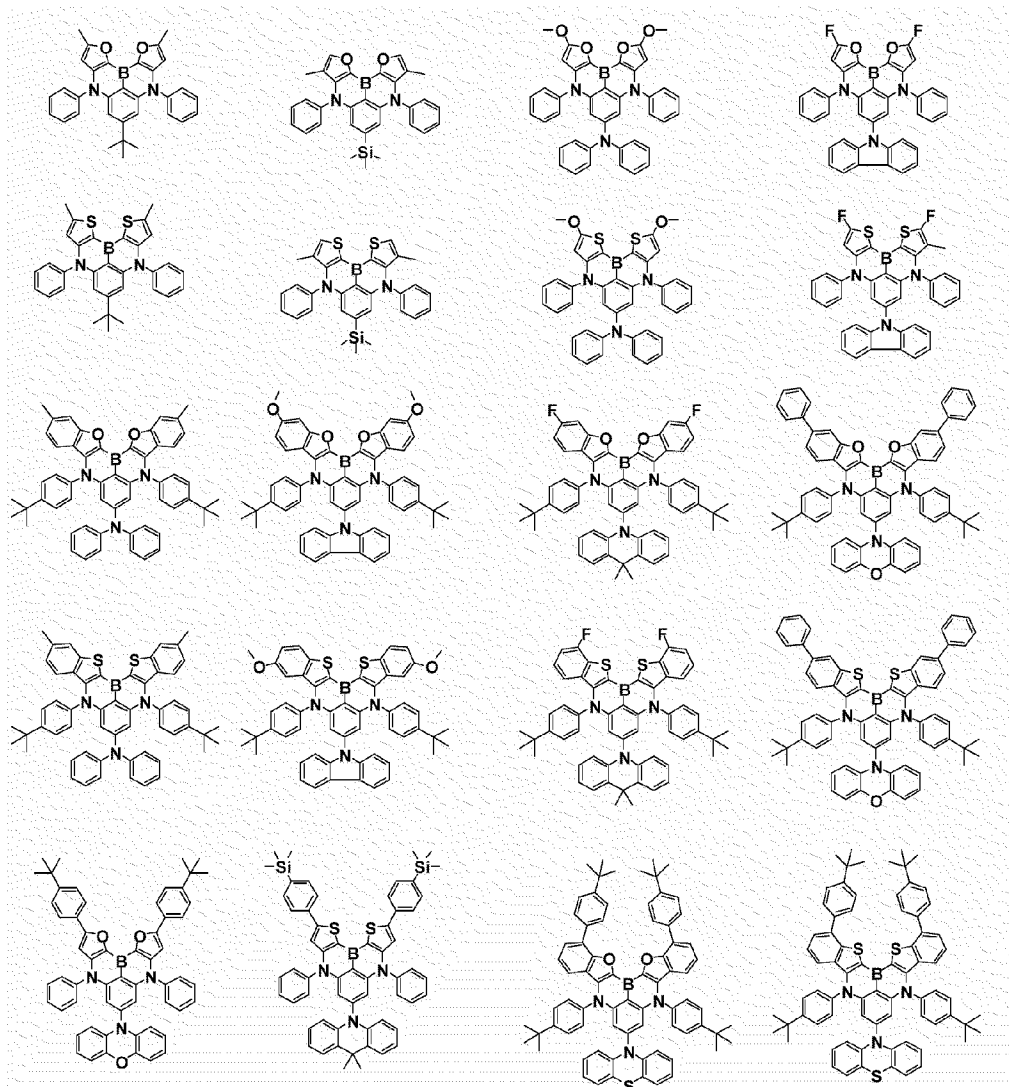
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인 것인 헤테로고리 화합물:

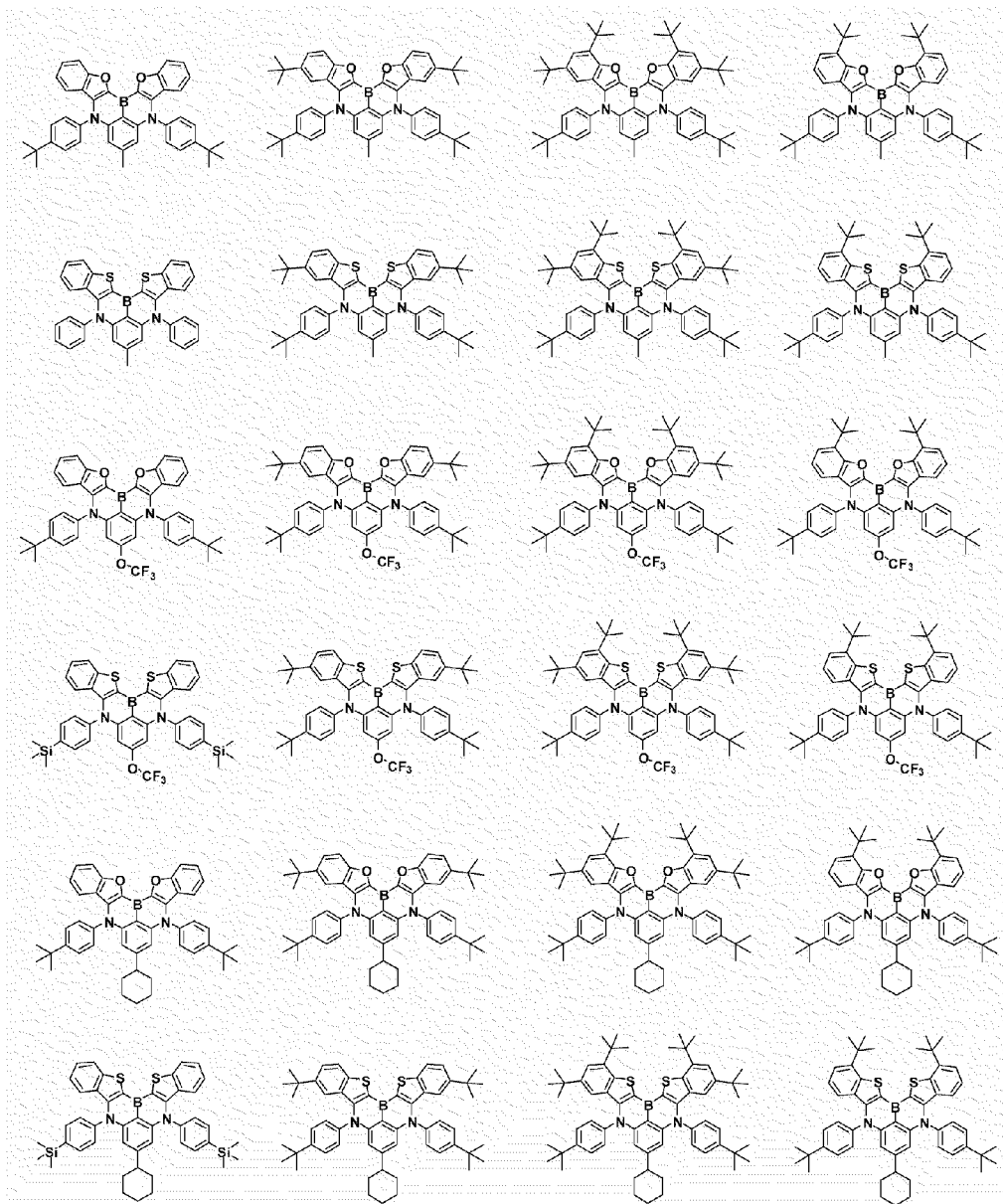


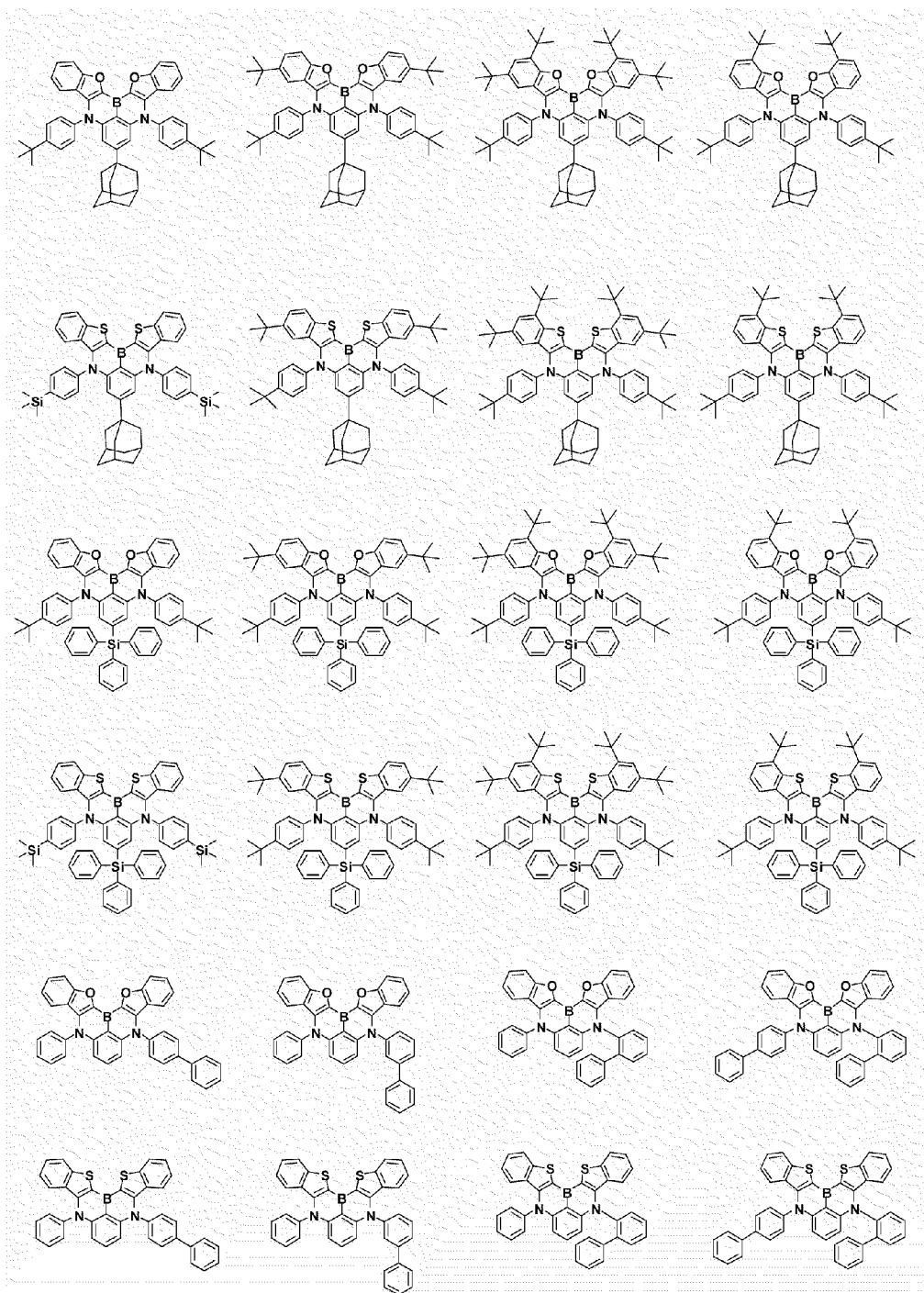


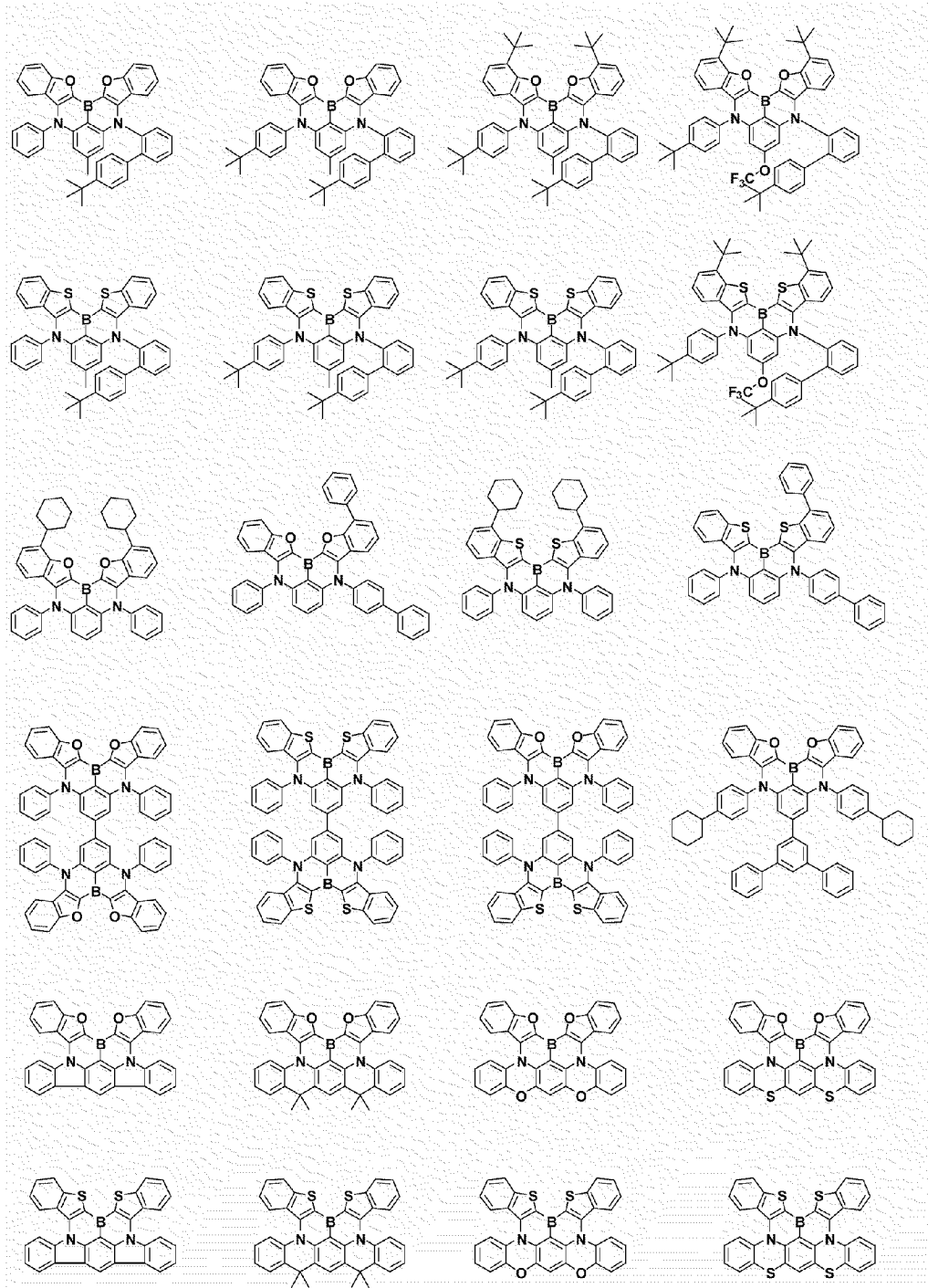












[청구항 7] 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 또는 2층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 6 중 어느 한 항의 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 8] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

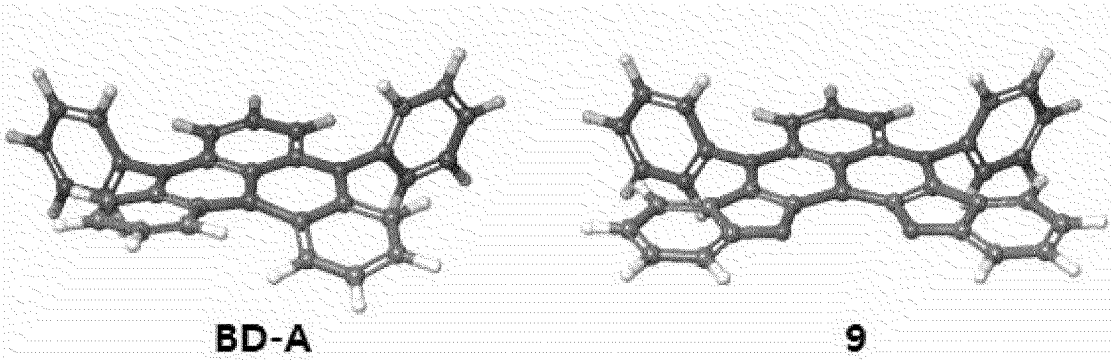
[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
10
9
8
7
6
5
2
1

[도3]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/002206

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

*C07F 5/02(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, C09K 11/06(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)

C07F 5/02; C07F 9/6568; C09K 11/06; F21Y 115/15; H01L 51/00; H01L 51/50

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) &amp; Keywords: heterocycle, boron atom, pentagonal ring, organic light-emitting element, organic matter layer

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2017-0130434 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 28 November 2017 See claim 1; and paragraphs [0075]-[0077], [0092], [0093], [0109]-[0126].	1-8
X	KR 10-2017-0130435 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 28 November 2017 See claims 1, 30-32; and paragraphs [0202], [0203].	1-8
X	KR 10-2016-0119683 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 14 October 2016 See claims 1-20; and paragraphs [0020], [0122], [0123].	1-8
A	CN 107501311 A (AAC TECH NANJING CO., LTD.) 22 December 2017 See the entire document.	1-8
A	KR 10-2018-0007727 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 24 January 2018 See the entire document.	1-8

 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

"&amp;" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

04 JUNE 2019 (04.06.2019)

Date of mailing of the international search report

04 JUNE 2019 (04.06.2019)

Name and mailing address of the ISA/KR



Korean Intellectual Property Office  
Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu,  
Daejeon, 35208, Republic of Korea

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer


Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.

**PCT/KR2019/002206**

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2017-0130434 A	28/11/2017	CN 107851724 A	27/03/2018
		TW 201703305 A	16/01/2017
		US 2018-0301629 A1	18/10/2018
		WO 2016-152544 A1	29/09/2016
KR 10-2017-0130435 A	28/11/2017	CN 107735879 A	23/02/2018
		TW 201638096 A	01/11/2016
		US 2018-0094000 A1	05/04/2018
		WO 2016-152418 A1	29/09/2016
KR 10-2016-0119683 A	14/10/2016	CN 105431439 A	23/03/2016
		CN 106905367 A	30/06/2017
		EP 3109253 A1	28/12/2016
		EP 3109253 B1	24/10/2018
		EP 3345911 A1	11/07/2018
		EP 3345911 B1	28/11/2018
		JP 5935199 B2	15/06/2016
		KR 10-1886773 B1	08/08/2018
		KR 10-1955647 B1	07/03/2019
		KR 10-1955648 B1	07/03/2019
		KR 10-2016-0134881 A	23/11/2016
		KR 10-2017-0121345 A	01/11/2017
		KR 10-2017-0122296 A	03/11/2017
		KR 10-2019-0025065 A	08/03/2019
		TW 201538513 A	16/10/2015
		TW 1636056 B	21/09/2018
US 2015-0236274 A1	20/08/2015		
WO 2015-102118 A1	09/07/2015		
CN 107501311 A	22/12/2017	None	
KR 10-2018-0007727 A	24/01/2018	CN 107619418 A	23/01/2018
		US 2018-0019415 A1	18/01/2018

<b>A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))</b> C07F 5/02(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i		
<b>B. 조사된 분야</b> 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07F 5/02; C07F 9/6568; C09K 11/06; F21Y 115/15; H01L 51/00; H01L 51/50 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: 헤테로고리, 보론원자, 오각고리, 유기발광소자, 유기물층		
<b>C. 관련 문헌</b>		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2017-0130434 A (가코우 호징 관세이 가쿠잉 등) 2017.11.28 청구항 1; 단락 [0075]-[0077], [0092], [0093], [0109]-[0126] 참조.	1-8
X	KR 10-2017-0130435 A (가코우 호징 관세이 가쿠잉 등) 2017.11.28 청구항 1, 30-32; 단락 [0202], [0203] 참조.	1-8
X	KR 10-2016-0119683 A (가코우 호징 관세이 가쿠잉 등) 2016.10.14 청구항 1-20; 단락 [0020], [0122], [0123] 참조.	1-8
A	CN 107501311 A (AAC TECH NANJING CO., LTD.) 2017.12.22 전체 문헌 참조.	1-8
A	KR 10-2018-0007727 A (삼성디스플레이 주식회사) 2018.01.24 전체 문헌 참조.	1-8
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2019년 06월 04일 (04.06.2019)	국제조사보고서 발송일 2019년 06월 04일 (04.06.2019)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 남의호 전화번호 +82-42-481-5580	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2017-0130434 A	2017/11/28	CN 107851724 A TW 201703305 A US 2018-0301629 A1 WO 2016-152544 A1	2018/03/27 2017/01/16 2018/10/18 2016/09/29
KR 10-2017-0130435 A	2017/11/28	CN 107735879 A TW 201638096 A US 2018-0094000 A1 WO 2016-152418 A1	2018/02/23 2016/11/01 2018/04/05 2016/09/29
KR 10-2016-0119683 A	2016/10/14	CN 105431439 A CN 106905367 A EP 3109253 A1 EP 3109253 B1 EP 3345911 A1 EP 3345911 B1 JP 5935199 B2 KR 10-1886773 B1 KR 10-1955647 B1 KR 10-1955648 B1 KR 10-2016-0134881 A KR 10-2017-0121345 A KR 10-2017-0122296 A KR 10-2019-0025065 A TW 201538513 A TW I636056 B US 2015-0236274 A1 WO 2015-102118 A1	2016/03/23 2017/06/30 2016/12/28 2018/10/24 2018/07/11 2018/11/28 2016/06/15 2018/08/08 2019/03/07 2019/03/07 2016/11/23 2017/11/01 2017/11/03 2019/03/08 2015/10/16 2018/09/21 2015/08/20 2015/07/09
CN 107501311 A	2017/12/22	없음	
KR 10-2018-0007727 A	2018/01/24	CN 107619418 A US 2018-0019415 A1	2018/01/23 2018/01/18