

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구

국제사무국

(43) 국제공개일

2020 년 9 월 17 일 (17.09.2020)



(10) 국제공개번호

WO 2020/185026 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 405/14 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01)

C07D 409/14 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

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, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(21) 국제출원번호:

PCT/KR2020/003492

(22) 국제출원일:

2020 년 3 월 13 일 (13.03.2020)

(25) 출원언어:

한국어

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(26) 공개언어:

한국어

(30) 우선권정보:

10-2019-0029228 2019 년 3 월 14 일 (14.03.2019) KR

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

(72) 발명자: 김민준 (KIM, Minjun); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 서상덕 (SUH, Sang Duk); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김서연 (KIM, Seoyeon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

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

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

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유

(54) Title: COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DIODE COMPRISING SAME

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

6
5
2
1

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

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



WO 2020/185026 A1

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 출원은 2019년 3월 14일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2019-0029228호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [3] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 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. 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

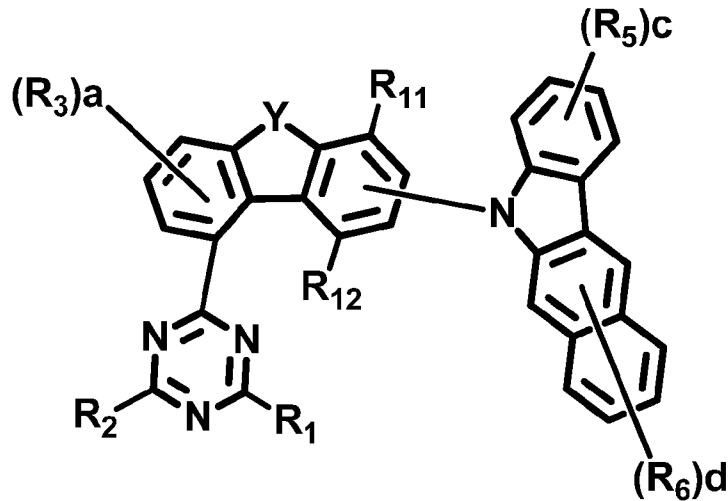
기술적 과제

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

과제 해결 수단

- [5] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [6] [화학식 1]

[7]



[8] 상기 화학식 1에 있어서,

[9] Y는 O; 또는 S이고,

[10] R₁ 및 R₂는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,[11] R₃, R₅ 및 R₆은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성하고,[12] R₁₁ 및 R₁₂는 수소이고,

[13] a는 1 내지 3의 정수이며,

[14] c는 1 내지 4의 정수이고,

[15] d는 1 내지 6의 정수이며,

[16] a, c 및 d가 각각 2 이상인 경우, 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[17] 또한, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[18] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성의 향상이 가능하다.

도면의 간단한 설명

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

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

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [21] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.
- [22] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [23] 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.
- [24] 본 명세서에 있어서, 어떤 부제가 다른 부제 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부제가 다른 부제에 접해있는 경우뿐 아니라 두 부제 사이에 또 다른 부제가 존재하는 경우도 포함한다.
- [25] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [26] 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.
- [27] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아민기; 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, 헤테로고리기로 치환된 아릴기, 아릴기로 치환된 헤테로고리기, 알킬기로 치환된 아릴기 등일 수 있다.
- [28] 본 명세서에 있어서, 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 더 구체적으로는 탄소수 1 내지 10인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기; 에틸기; 프로필기; n-프로필기; 이소프로필기; 부틸기; n-부틸기; 이소부틸기; tert-부틸기; sec-부틸기; 1-메틸부틸기; 1-에틸부틸기; 펜틸기; n-펜틸기; 이소펜틸기; 네오펜틸기; tert-펜틸기; 헥실기; n-헥실기; 1-메틸펜틸기; 2-메틸펜틸기; 4-메틸-2-펜틸기; 3,3-디메틸부틸기; 2-에틸부틸기; 헵틸기; n-헵틸기; 1-메틸헥실기; 시클로펜틸메틸기; 시클로헥실메틸기; 옥틸기; n-옥틸기; tert-옥틸기; 1-메틸헵틸기; 2-에틸헥실기; 2-프로필펜틸기; n-노닐기; 2,2-디메틸헵틸기; 1-에틸프로필기; 1,1-디메틸프로필기; 이소헥실기; 2-메틸펜틸기; 4-메틸헥실기; 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [29] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 탄소수 3 내지 20인 것이 더 바람직하다. 구체적으로 시클로프로필기; 시클로부틸기; 시클로펜틸기; 3-메틸시클로펜틸기;

2,3-디메틸시클로펜틸기; 시클로헥실기; 3-메틸시클로헥실기;
4-메틸시클로헥실기; 2,3-디메틸시클로헥실기; 3,4,5-트리메틸시클로헥실기;
4-tert-부틸시클로헥실기; 시클로헵틸기; 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에
한정되는 것은 아니다.

- [30] 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; 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.

- [31] 본 명세서에 있어서, 아민기는 -NH₂; 알킬아민기; N-알킬아릴아민기; 아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기; N-알킬헤테로아릴아민기 및 헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기; 디메틸아민기; 에틸아민기; 디에틸아민기; 페닐아민기; 나프틸아민기; 바이페닐아민기; 안트라세닐아민기; 9-메틸안트라세닐아민기; 디페닐아민기; N-페닐나프틸아민기; 디톨릴아민기; N-페닐톨릴아민기; 트리페닐아민기; N-페닐바이페닐아민기; N-페닐나프틸아민기; N-바이페닐나프틸아민기; N-나프틸플루오레닐아민기; N-페닐페난트레닐아민기; N-바이페닐페난트레닐아민기; N-페닐플루오레닐아민기; N-페닐터페닐아민기; N-페난트레닐플루오레닐아민기; N-바이페닐플루오레닐아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [32] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 -SiRaRbRc의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 Ra, Rb 및 Rc는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기; 트리에틸실릴기; t-부틸디메틸실릴기; 비닐디메틸실릴기; 프로필디메틸실릴기; 트리페닐실릴기; 디페닐실릴기; 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [33] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 60일 수 있고, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하며, 탄소수 6 내지 20인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하다. 더 구체적으로는 탄소수 6 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기; 바이페닐기; 터페닐기 등이 될 수

있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 30인 것이 바람직하고 더 구체적으로 탄소수 10 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기; 안트라세닐기; 페난트릴기; 트리페닐기; 파이레닐기; 페날레닐기; 페릴레닐기; 크라이세닐기; 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [34] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자, 즉 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종원자는 O, N, Se 및 S 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60일 수 있고, 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하며, 탄소수 2 내지 20인 것이 더 바람직하고, 상기 헤테로아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 헤테로아릴기의 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.

- [35] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오르토(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한" 기로 해석될 수 있다.

- [36] 본 명세서에 있어서, 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성하는 것의 의미는 전술한 바와 같이 인접한 기가 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 탄화수소고리 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성하는 것을 의미하며, 단환 또는 다환을 형성할 수 있으며, 지방족, 방향족 또는 이들의 축합된 형태일 수 있으며 이를 한정하지 않는다.

- [37] 본 명세서에 있어서, 인접하는 기는 서로 결합하여 고리를 형성한다는 의미는 인접하는 기와 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 지방족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 지방족 헤테로고리; 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로고리; 또는 이들이 조합된 형태를 형성하는 것을 의미한다.

- [38] 본 명세서에 있어서, 지방족 탄화수소고리란 방향족이 아닌 고리로서 탄소와

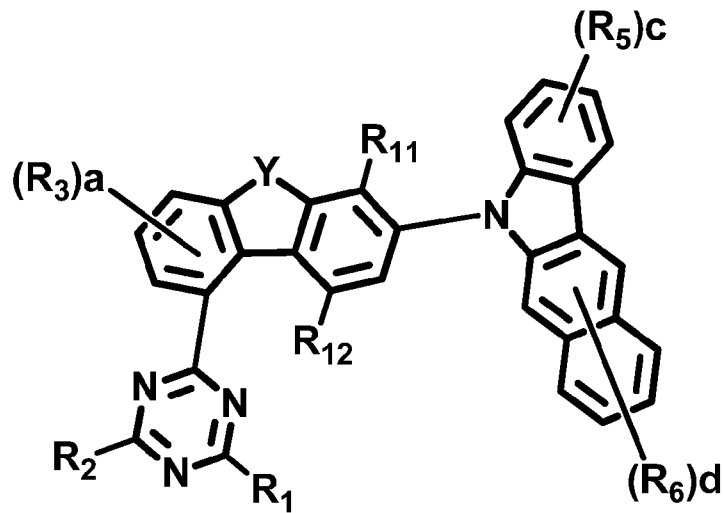
수소 원자로만 이루어진 고리를 의미한다.

- [39] 본 명세서에 있어서, 방향족 탄화수소고리의 예로는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센 등이 있으나 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [40] 본 명세서에 있어서, 지방족 헤테로고리란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 지방족고리를 의미한다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 방향족 헤테로고리란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 방향족고리를 의미한다.
- [42] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 상기 아릴기에 결합위치가 두 개 있는 것을 의미한다.
- [43] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Y는 O 또는 S이다.
- [44] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Y는 O이다.
- [45] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, Y는 S이다.
- [46] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [47] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기이다.
- [48] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [49] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 15의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기이다.
- [50] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 15의 아릴기이다.
- [51] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [52] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로, 페닐기; 또는 나프틸기이다.
- [53] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 , R_5 및 R_6 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [54] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 , R_5 및 R_6 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 치환

또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

- [55] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 , R_5 및 R_6 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [56] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 , R_5 및 R_6 은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [57] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 , R_5 및 R_6 은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성할 수 있다.
- [58] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 은 수소; 또는 인접하는 R_3 는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 벤젠고리를 형성한다.
- [59] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 은 수소; 또는 인접하는 R_3 는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성한다.
- [60] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_3 은 수소이다.
- [61] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 인접하는 R_3 는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성한다.
- [62] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_5 및 R_6 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 인접하는 기는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성한다.
- [63] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_5 는 수소; 또는 인접하는 R_5 는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성한다.
- [64] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_6 은 수소이다.
- [65] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_{11} 및 R_{12} 는 수소이다.
- [66] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시된다.
- [67] [화학식 1-1]

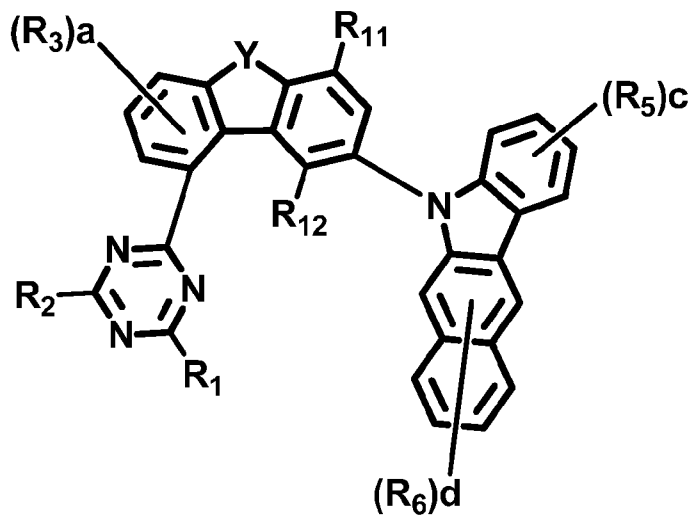
[68]



[69]

[화학식 1-2]

[70]



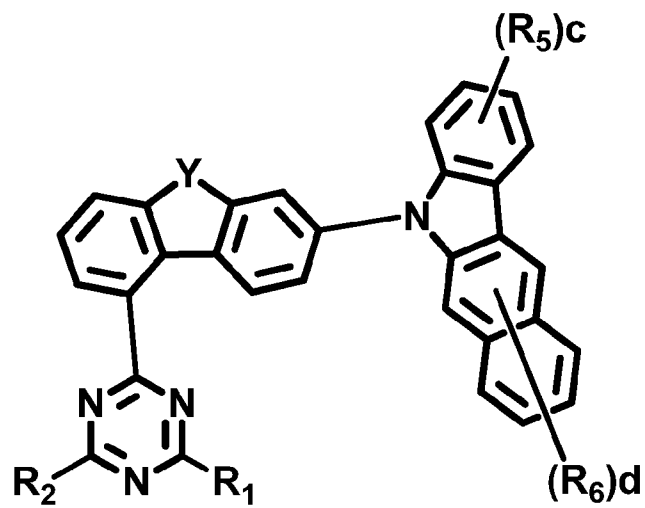
[71] 상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서,

[72] Y, R₁, R₂, R₃, R₅, R₆, R₁₁, R₁₂, a, c 및 d의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

[73] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3 중 어느 하나로 표시된다.

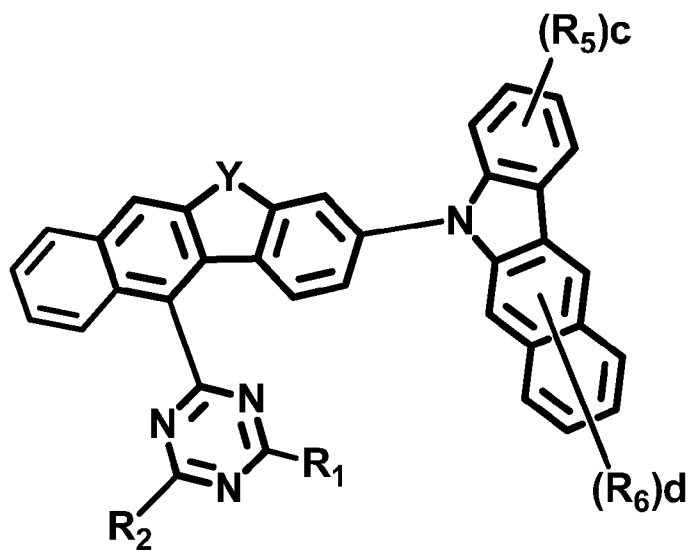
[74] [화학식 1-1-1]

[75]



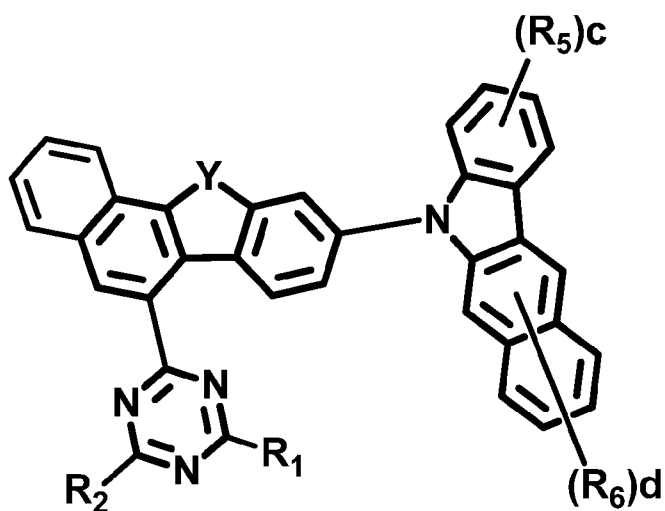
[76] [화학식 1-1-2]

[77]



[78] [화학식 1-1-3]

[79]



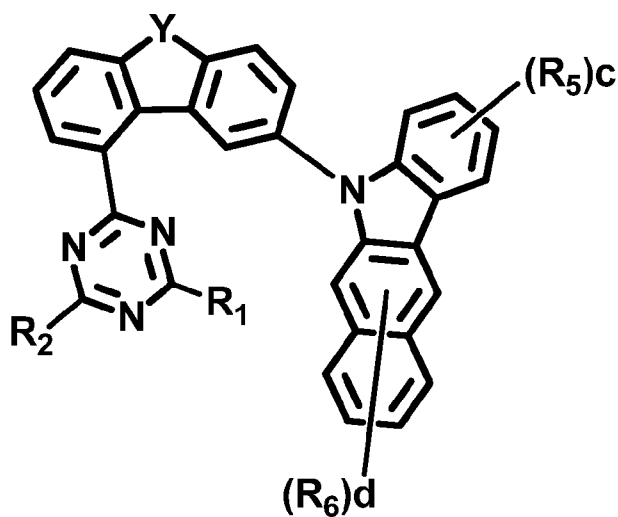
[80] 상기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3에 있어서,

[81] Y , R_1 , R_2 , R_5 , R_6 , c 및 d 의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

[82] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2-1 내지 1-2-3 중 어느 하나로 표시된다.

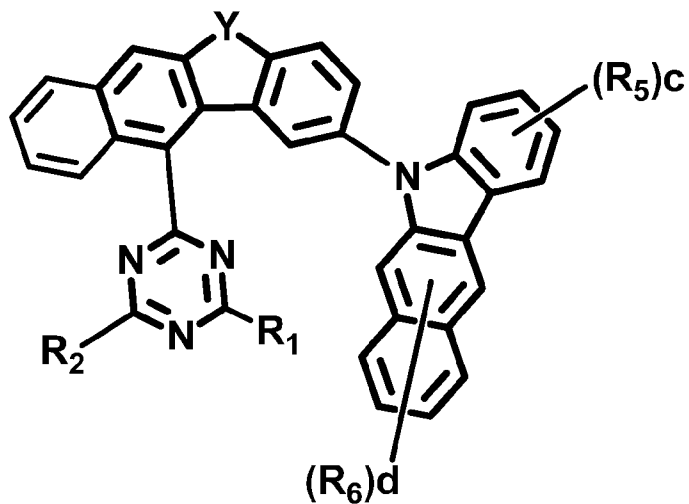
[83] [화학식 1-2-1]

[84]



[85] [화학식 1-2-2]

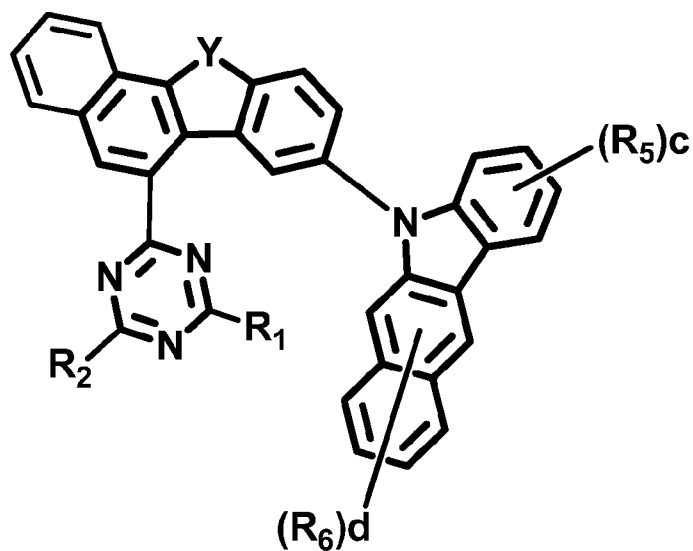
[86]



[87]

[화학식 1-2-3]

[88]



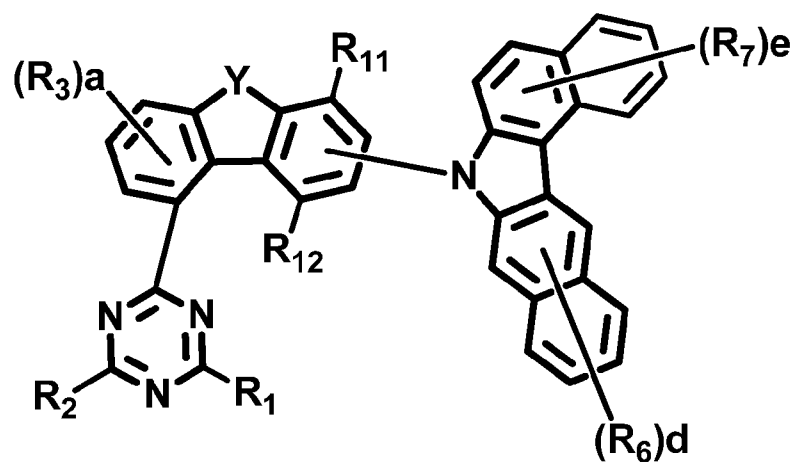
[89] 상기 화학식 1-2-1 내지 1-2-3에 있어서,

[90] Y, R₁, R₂, R₅, R₆, c 및 d의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

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

[92] [화학식 2]

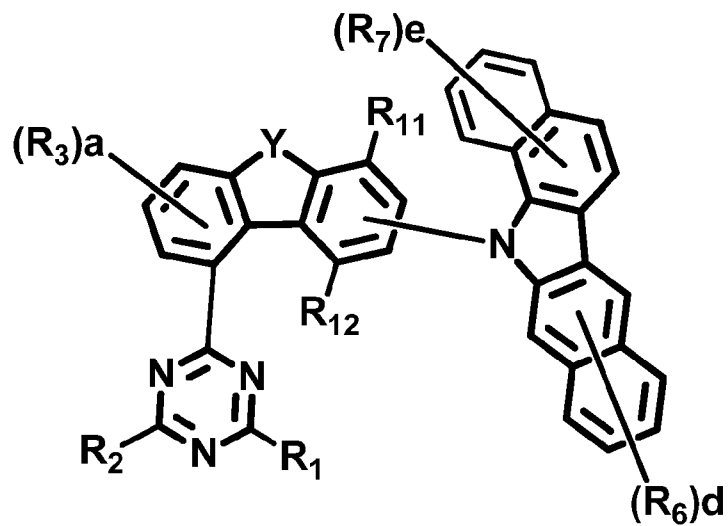
[93]



[94]

[화학식 3]

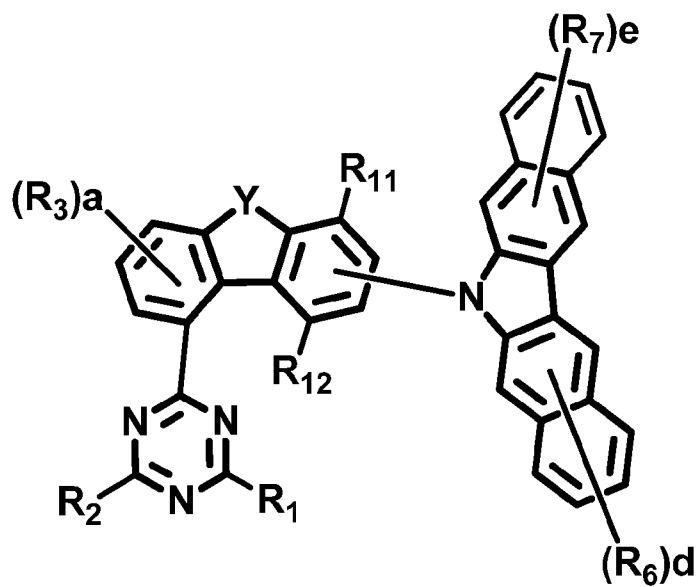
[95]



[96]

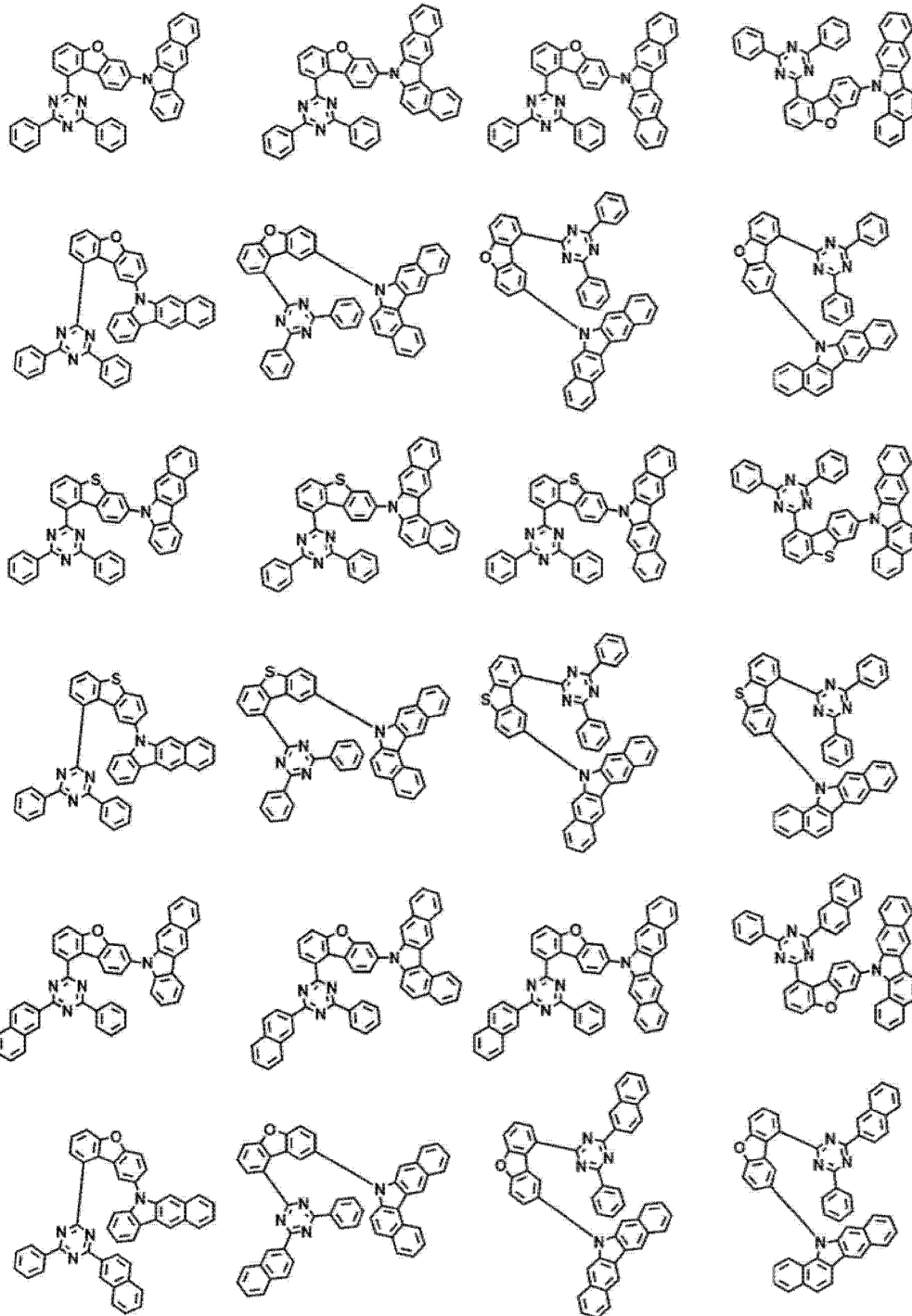
[화학식 4]

[97]

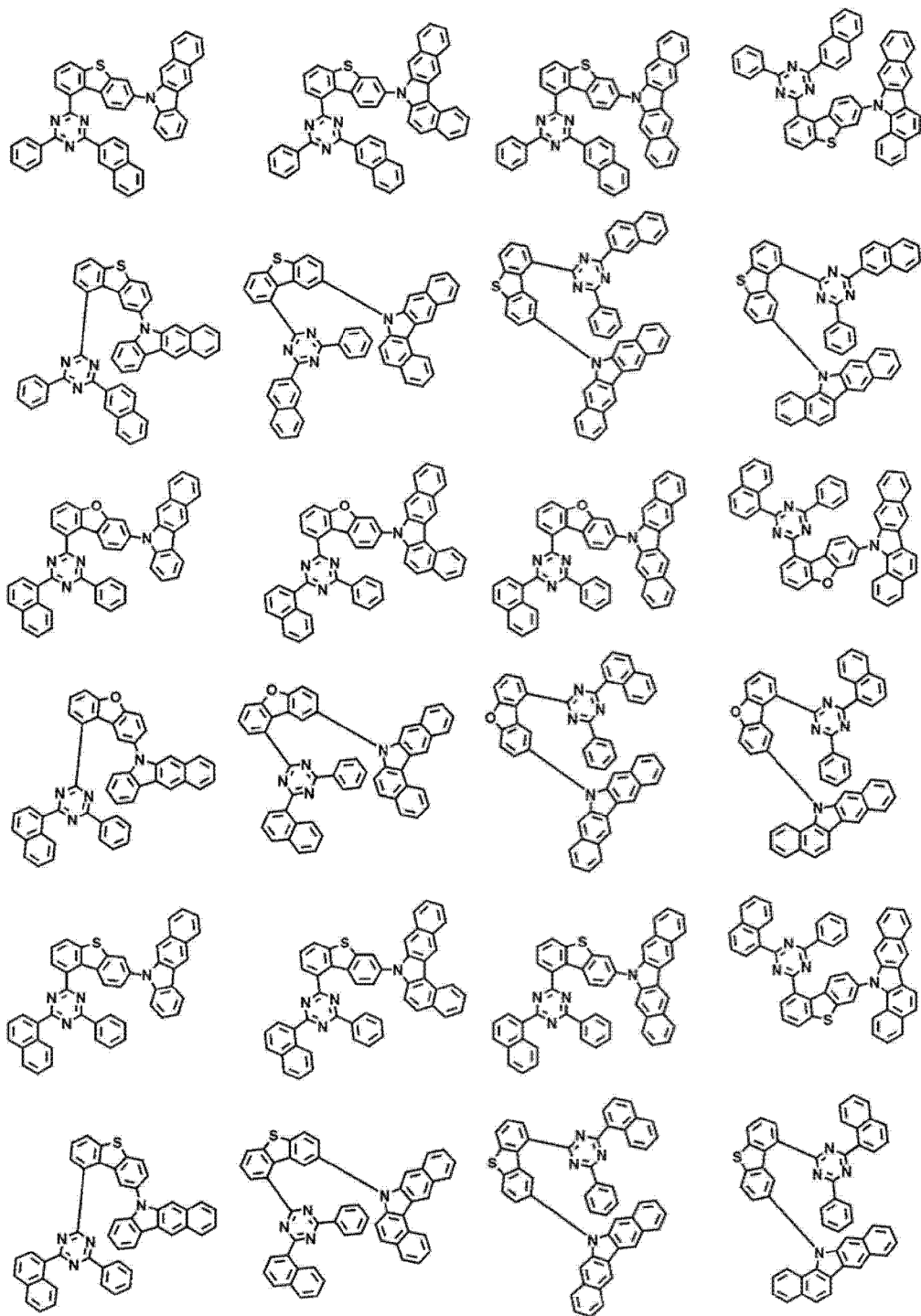


- [98] 상기 화학식 2 내지 4에 있어서,
- [99] Y, R₁ 내지 R₃, R₆, R₁₁, R₁₂, a 및 d의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 같고,
- [100] R₇은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,
- [101] e는 1 내지 6의 정수이고, e가 2 이상인 경우, 2 이상의 R₇은 서로 같거나 상이하다.
- [102] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중에서 선택된다.

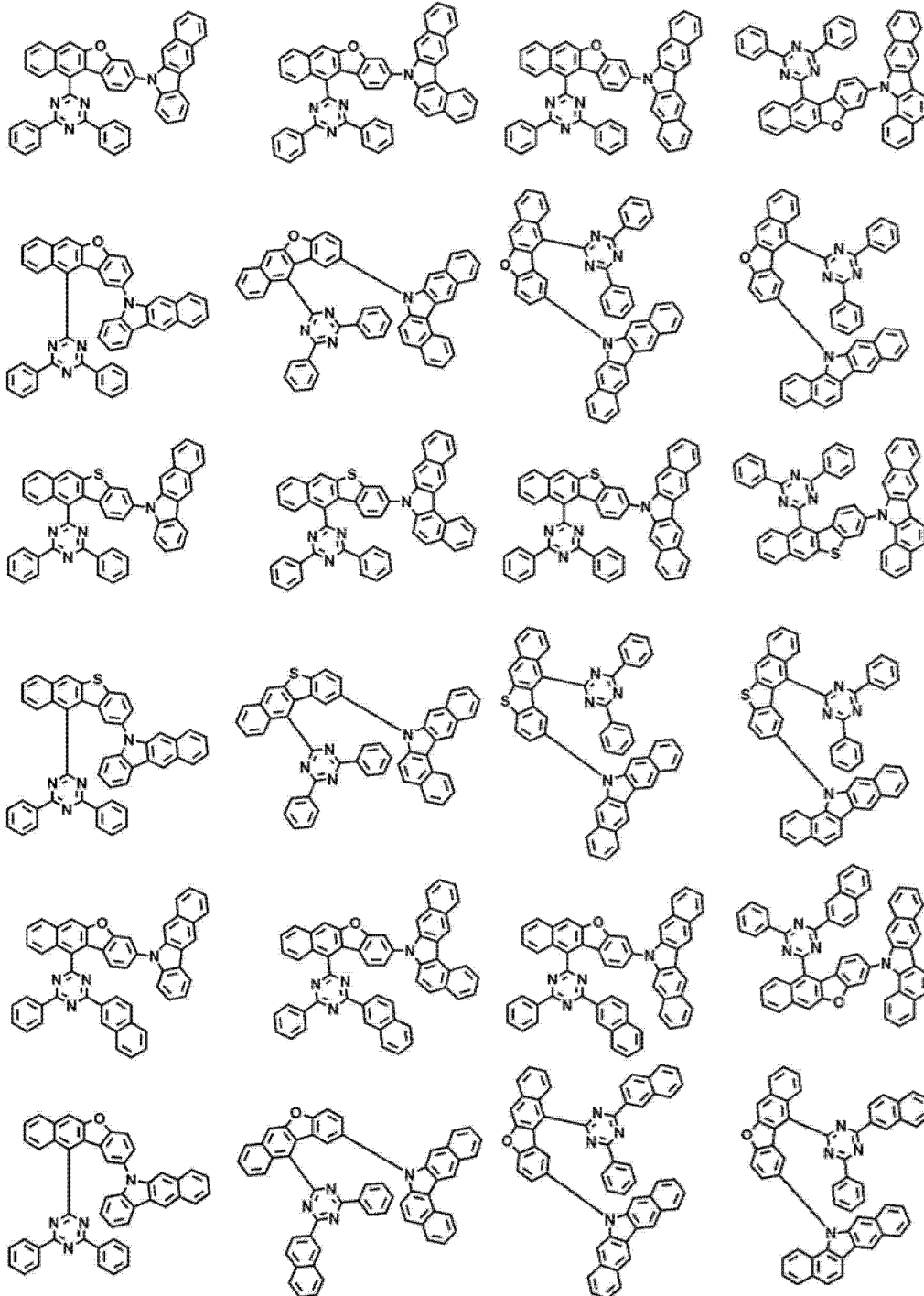
[103]



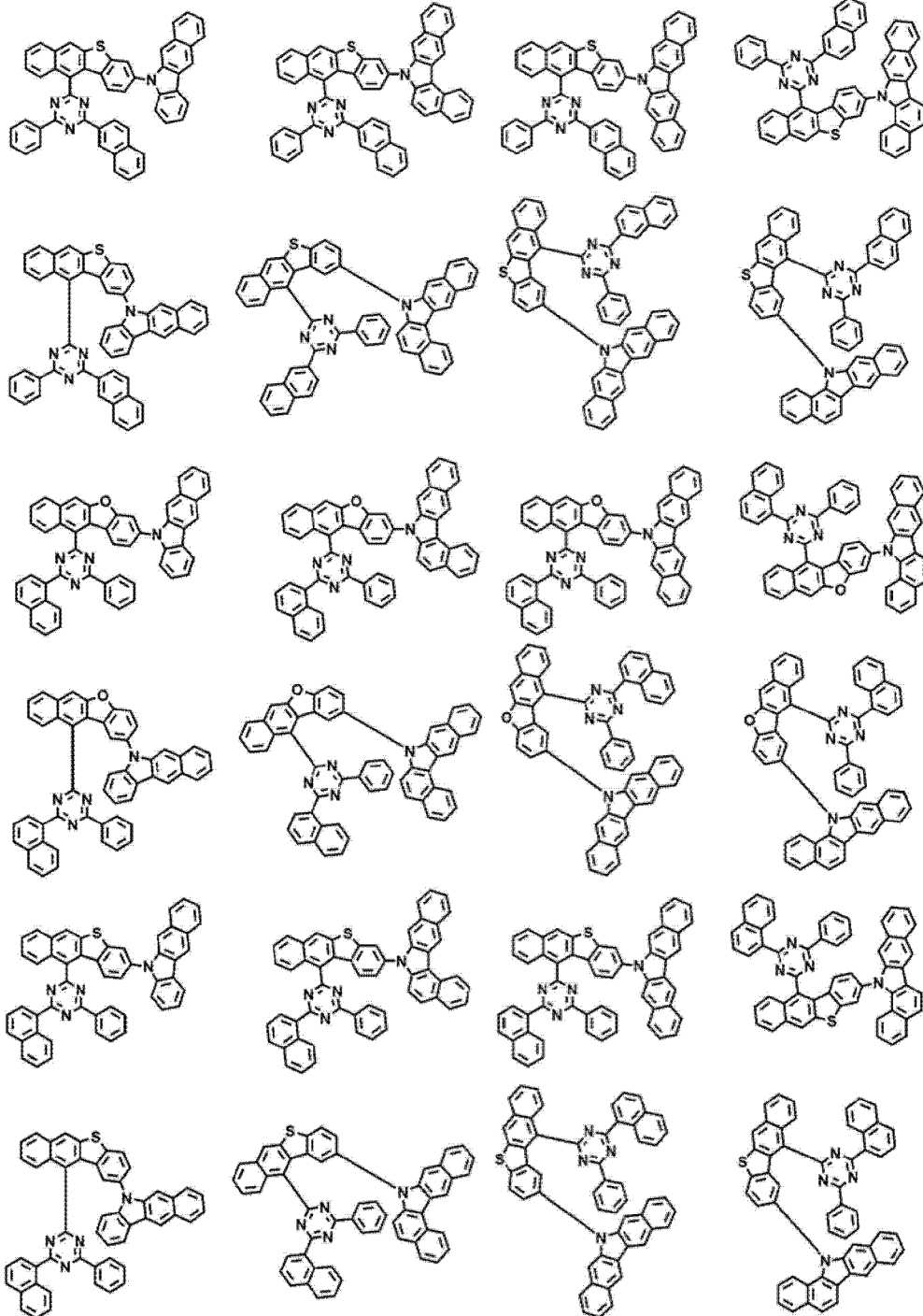
[104]



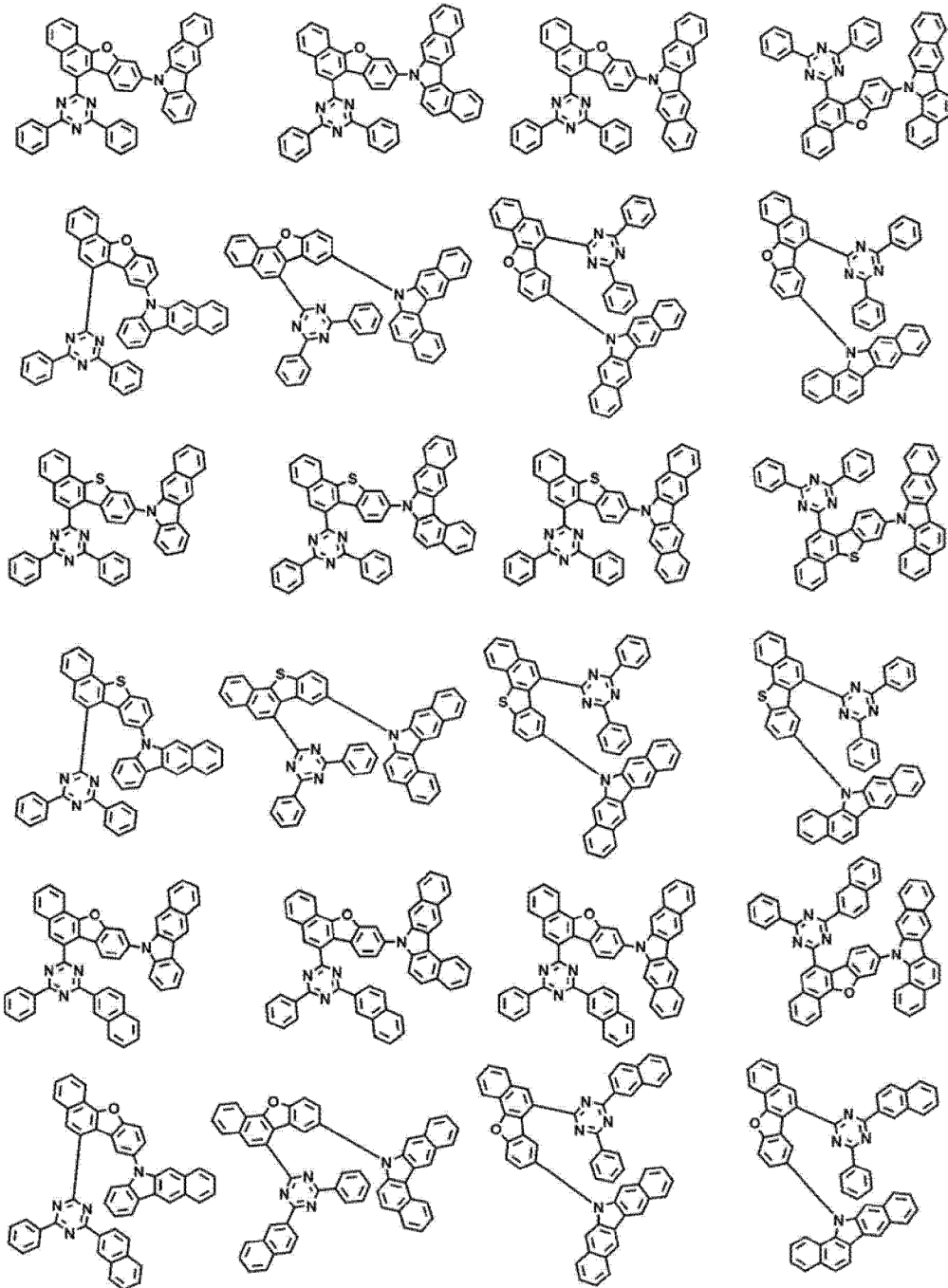
[105]



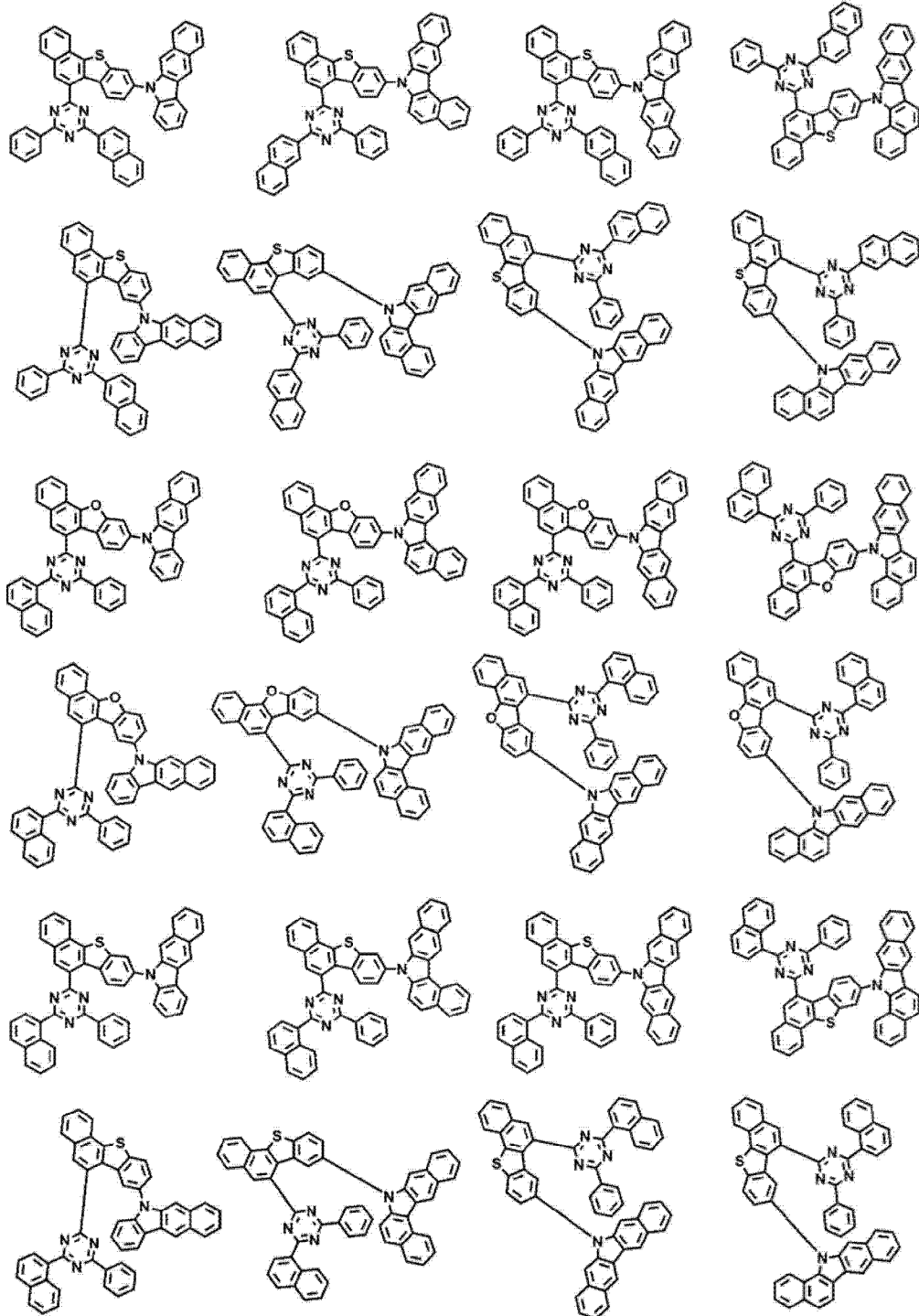
[106]



[107]



[108]



[109] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 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 1 층 이상은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[110] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공

주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 차단층, 정공 차단층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[112] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트를 포함하며, 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[113] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 인광 호스트를 포함하며, 상기 인광 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

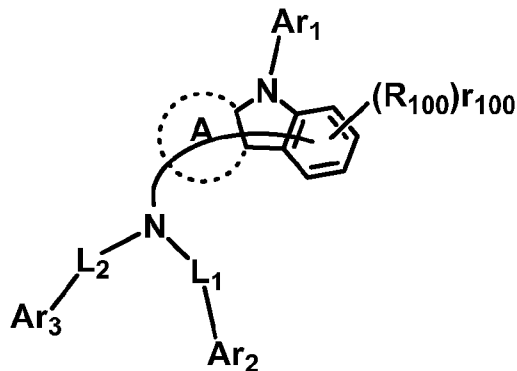
[114] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 적색 발광 화합물이다.

[115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 2층 이상의 발광층을 포함하고, 상기 2층 이상의 발광층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하지 않은 발광층은 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함할 수 있다.

[116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 제1 호스트로써 포함하고, 상기 화학식 100으로 표시되는 화합물을 제2 호스트로써 더 포함한다.

[117] [화학식 100]

[118]



[119] 상기 화학식 100에 있어서,

[120] A는 치환 또는 비치환된 나프탈렌이고,

[121] Ar₁은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이며,

[122] L₁ 및 L₂는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이며,

[123] Ar₂ 및 Ar₃는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는

군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 60의
헤테로아릴기이며,

- [124] R_{100} 은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
- [125] r_{100} 은 0 내지 4의 정수이고, r_{100} 이 2 이상인 경우 R_{100} 은 서로 같거나 상이하다.
- [126] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 발광층은 상기 화학식 100으로 표시되는 화합물을 제2 호스트로써 더 포함한다. 이 때, 상기 발광층에 포함되는 전체 호스트 100 중량부를 기준으로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 10 내지 70 중량부로 포함될 수 있으며, 바람직하게는 20 내지 50 중량부로 포함된다.
- [127] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 발광층은 상기 발광층에 포함되는 전체 호스트 100 중량부를 기준으로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 40 내지 60 중량부 및 상기 화학식 100으로 표시되는 화합물을 40 내지 60 중량부를 포함할 수 있다.
- [128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 발광층은 호스트를 포함하고, 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물: 상기 화학식 100으로 표시되는 화합물을 1:1의 중량비로 포함할 수 있다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, A는 나프탈렌이다.
- [130] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [131] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.
- [132] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴기이다.
- [133] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 또는 치환 또는 비치환된 터페닐기이다.
- [134] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 은 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 또는 터페닐기이다.
- [135] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L_1 및 L_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.
- [136] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L_1 및 L_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기이다.
- [137] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L_1 및 L_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴렌기이다.

- [138] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L_1 및 L_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.
- [139] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L_1 및 L_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 페닐기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 또는 나프틸렌기이다.
- [140] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [141] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기이다.
- [142] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 12의 헤테로아릴기이다.
- [143] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기; 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이다.
- [144] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 디벤조티오펜기; 디벤조푸라닐기; 또는 디메틸플루오레닐기이다.
- [145] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_{100} 은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [146] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_{100} 은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기이다.
- [147] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_{100} 은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 10의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 10의 헤테로아릴기이다.

[148] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R_{100} 은 수소이다.

[149] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, r_{100} 은 0이다.

[150] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, r_{100} 은 1이다.

[151] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, r_{100} 은 2이다.

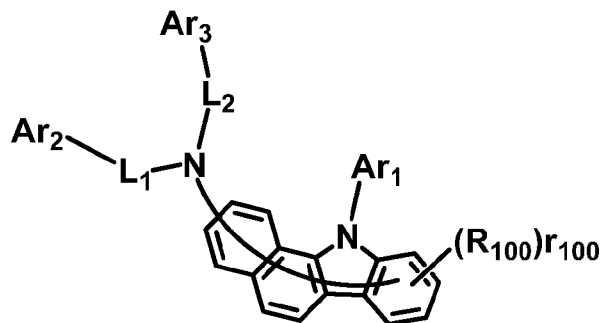
[152] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, r_{100} 은 3이다.

[153] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, r_{100} 은 4이다.

[154] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 100은 하기 화학식 100-1 내지 100-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

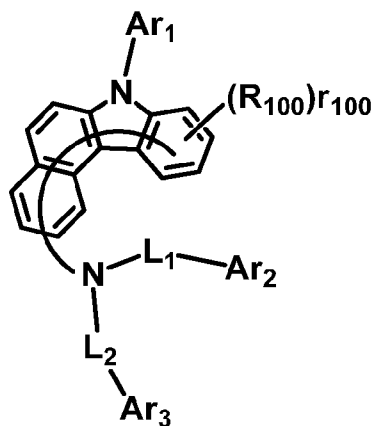
[155] [화학식 100-1]

[156]



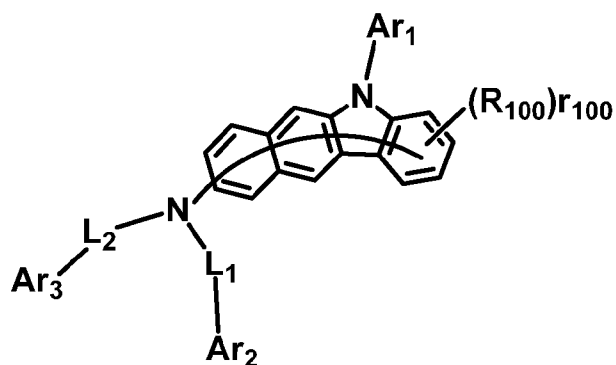
[157] [화학식 100-2]

[158]



[159] [화학식 100-3]

[160]

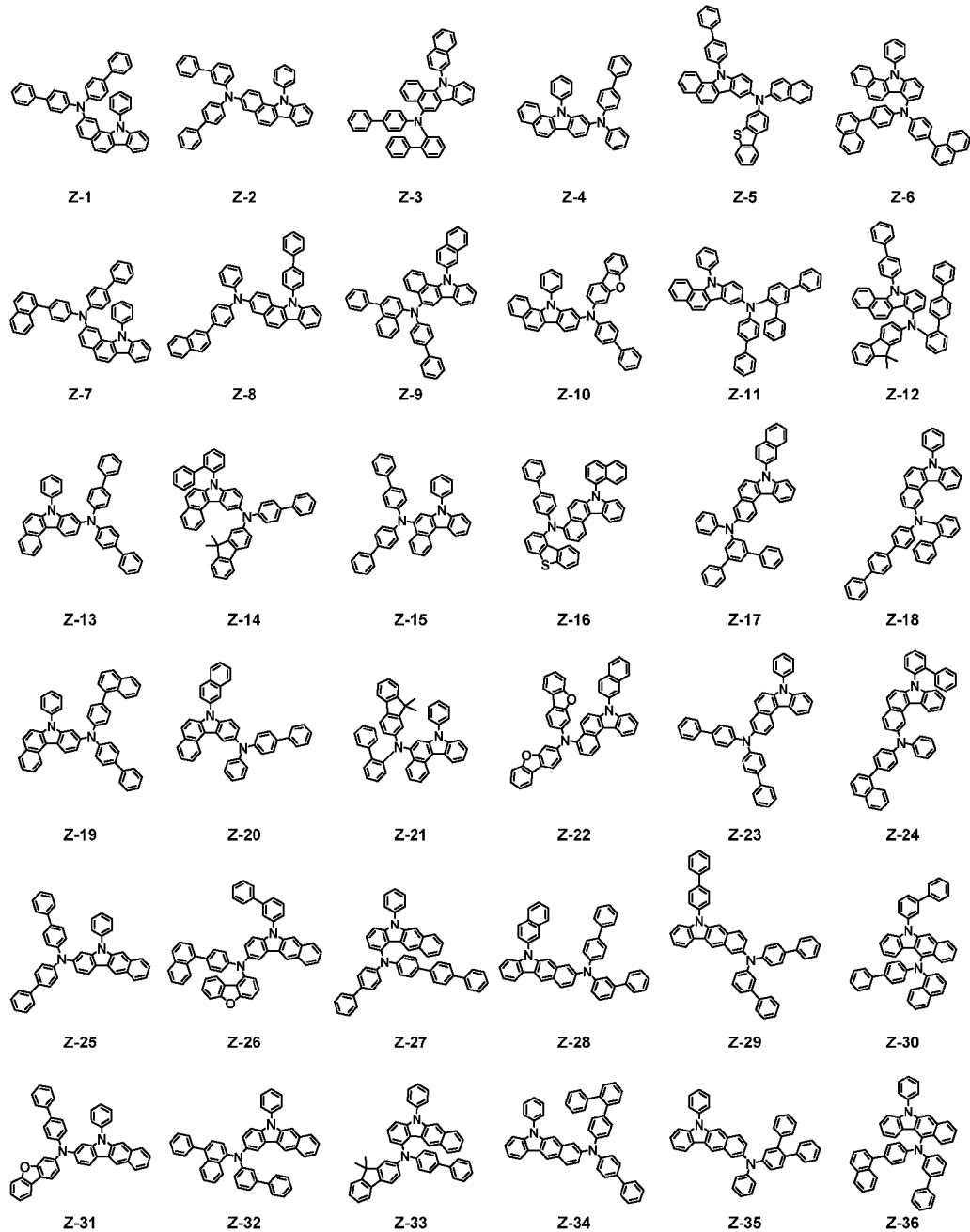


[161] 상기 화학식 100-1 내지 100-3에 있어서, 치환기의 설명은 전술한 화학식

100에서의 정의가 적용된다.

[162] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 100은 하기 화합물 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[163]



[164] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극 또는 음극이다.

[165] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제2 전극은 음극 또는 양극이다.

[166] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다.

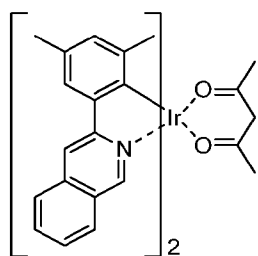
[167] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층

- 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [168] 예컨대, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조가 도 1 또는 도 2에 예시되어 있다. 상기 도 1 및 도 2는 유기 발광 소자를 예시한 것이며 이에 한정되는 것은 아니다.
- [169] 도 1에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 발광층(5) 및 제2 전극(6)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층에 포함된다.
- [170] 도 2에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 제2 전극(6)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [171] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 유기물층 중 1층 이상에 포함된다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 1층 이상에 포함된다.
- [172] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 화합물, 즉 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [173] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [174] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기판 상에 양극, 유기물층 및 음극을 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 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질, 유기물층 및 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다.
- [175] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [176] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다. 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [177] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 예를 들어, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO),

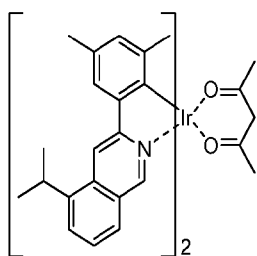
인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜),
 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [178] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 예를 들어, 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [179] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로, 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [180] 상기 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로, 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아민기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아민기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있다. 또한, 스티릴아민 화합물은 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴아민기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [181] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 도펀트는 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

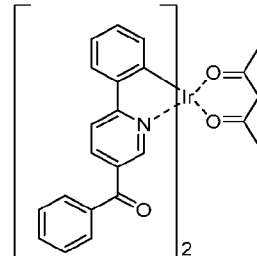
[182]



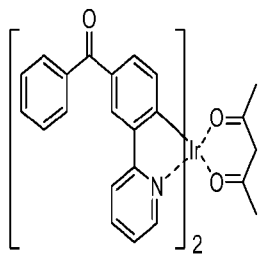
Dp-1



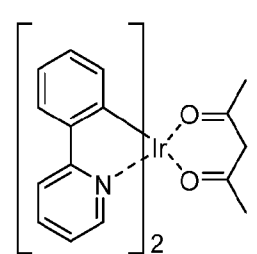
Dp-2



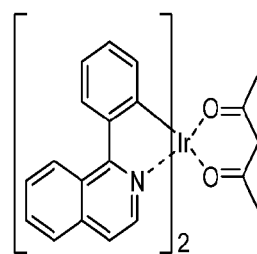
Dp-3



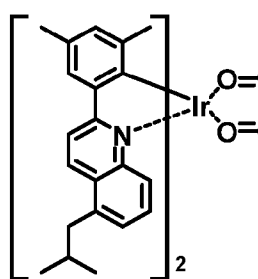
Dp-4



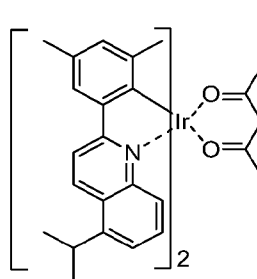
Dp-5



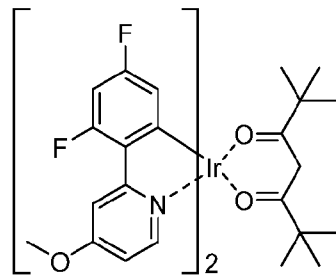
Dp-6



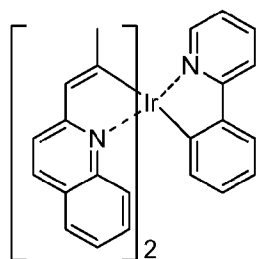
Dp-7



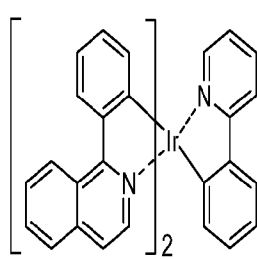
Dp-8



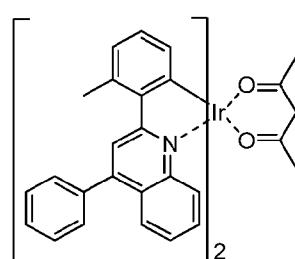
Dp-9



Dp-10

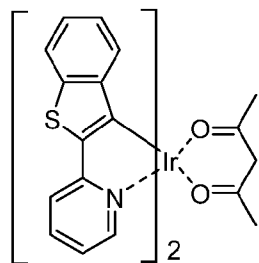


Dp-11

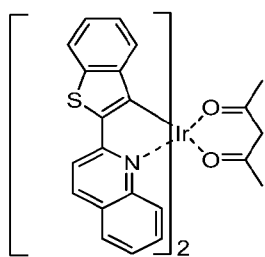


Dp-12

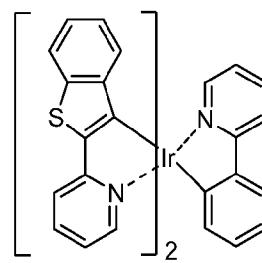
[183]



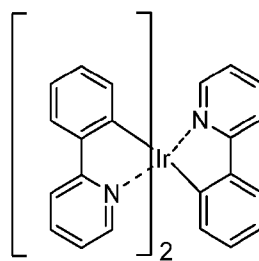
DP-13



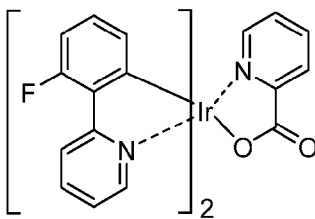
Dp-14



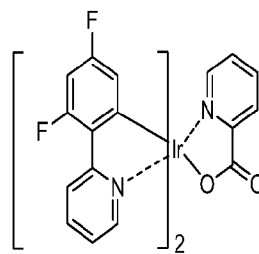
Dp-15



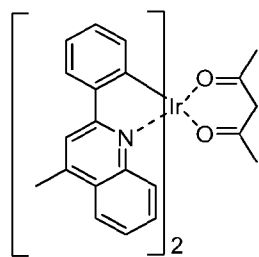
DP-16



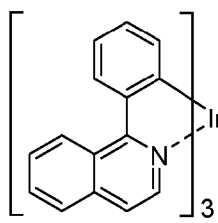
Dp-17



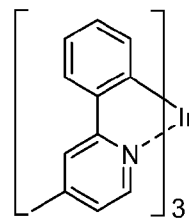
Dp-18



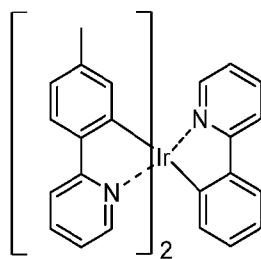
Dp-19



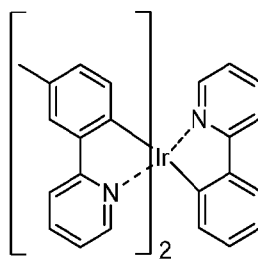
Dp-20



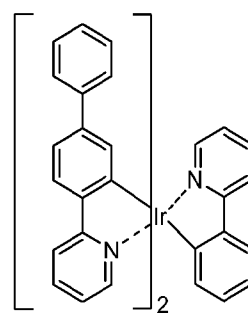
Dp-21



Dp-22

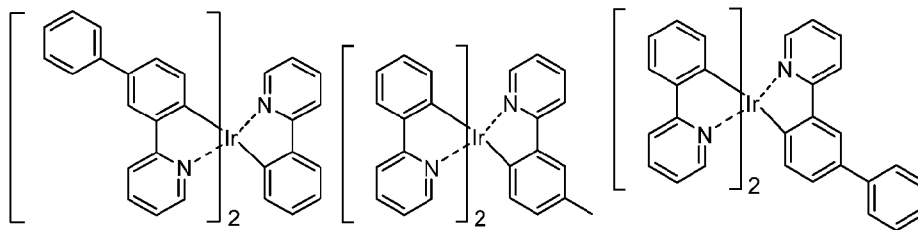


Dp-23



Dp-24

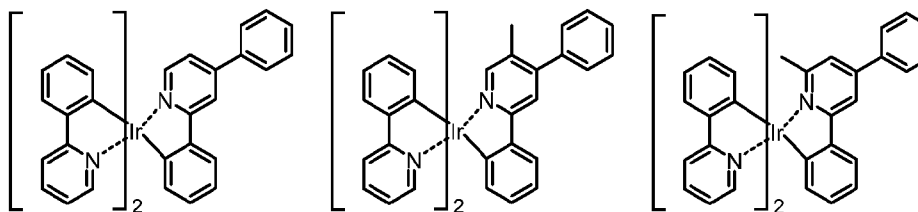
[184]



Dp-25

Dp-26

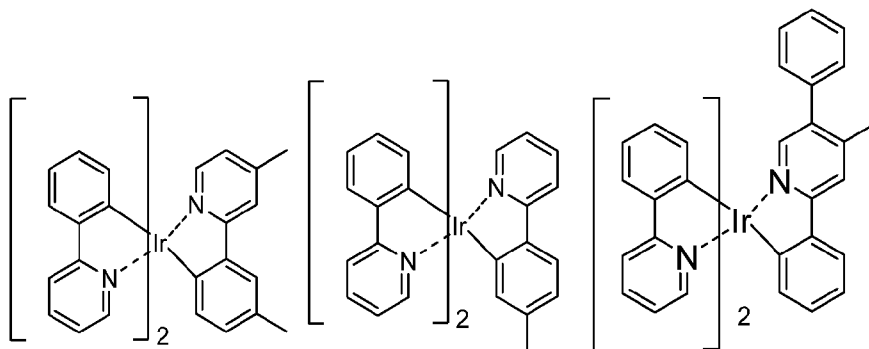
Dp-27



Dp-28

Dp-29

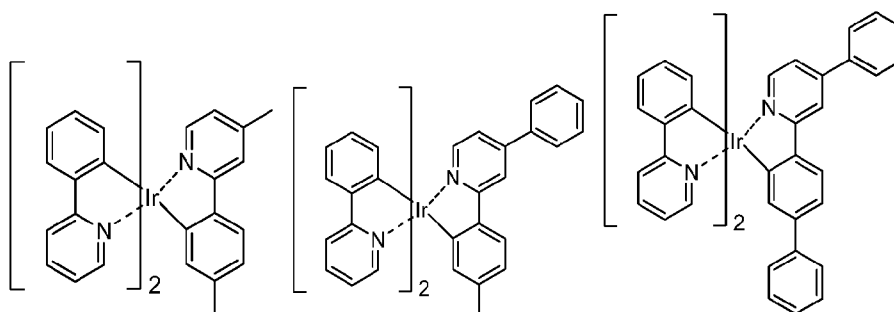
Dp-30



Dp-31

Dp-32

Dp-33

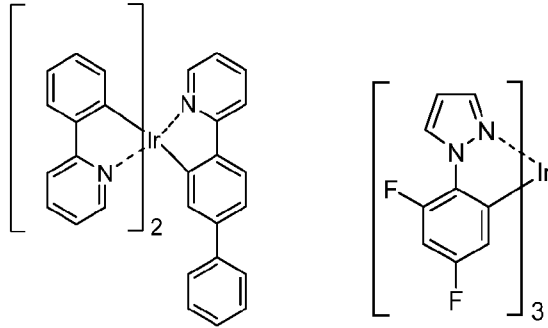


Dp-34

Dp-35

Dp-36

[185]



Dp-37

Dp-38

- [186] 본 명세서에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 발광층 이외의 유기물층에 포함되거나, 추가의 발광층이 구비되는 경우, 상기 발광층의 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송 받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 예를 들어, 8-히드록시퀴놀린 알루미늄 착물(Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BALq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌; 및 브렌 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [187] 상기 정공 주입층은 전극으로부터 정공을 수취하는 층이다. 정공 주입 물질은 정공을 수송하는 능력을 가져 양극으로부터 정공 수취 효과 및 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖는 것이 바람직하다. 또한, 발광층에서 생성된 엑시톤의 전자 주입층 또는 전자 주입 재료에의 이동을 방지할 수 있는 능력이 우수한 물질이 바람직하다. 또한, 박막 형성 능력이 우수한 물질이 바람직하다. 또한, 정공 주입 물질의 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)가 양극물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는, 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물; 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물; 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물; 페릴렌(perylene) 계열의 유기물; 안트라퀴논, 폴리아닐린과 같은 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [188] 상기 정공 수송층은 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층이다. 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는, 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [189] 상기 전자 수송층은 전자 주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를

수송하는 층이다. 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는, 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이, 임의의 원하는 음극 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 음극 물질은 낮은 일함수를 가지며, 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 통상적인 물질이다. 구체적으로, 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨 등이 있고, 각 경우 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따른다.

[190] 상기 전자 주입층은 전극으로부터 전자를 수취하는 층이다. 전자 주입물로는 전자를 수송하는 능력이 우수하고, 음극으로부터의 전자 수취 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 갖는 것이 바람직하다. 또한, 발광층에서 생성된 엑시톤이 정공 주입층으로 이동하는 것을 방지하고, 박막 형성 능력이 우수한 물질이 바람직하다. 구체적으로는, 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 플루오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[191] 상기 금속 착체 화합물로는 8-히드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-히드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-히드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-히드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-히드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-히드록시벤조[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 한정되는 것은 아니다.

[192] 상기 전자 차단층은 전자 주입층으로부터 주입된 전자가 발광층을 지나 정공 주입층으로 진입하는 것을 방지하여 소자의 수명과 효율을 향상시킬 수 있는 층이다. 공지된 재료는 제한 없이 사용 가능하며, 발광층과 정공 주입층 사이에, 또는 발광층과 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 사이에 형성될 수 있다. 상기 정공 차단층은 정공의 음극으로 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 전자 주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 구체적으로, 옥사디아아졸 유도체나 트리아아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 알루미늄 착물 (aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

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

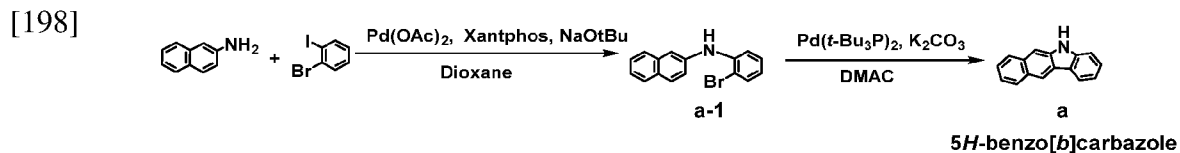
[194] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[195] 합성예 및 실시예

[196] 본 발명의 화합물은 대표적인 반응으로 Buchwald-Hartwig coupling reaction, Heck coupling reaction, Suzuki coupling reaction 등을 이용하여 제조되었다.

[197] 제조예 1.



[199] 1) 화학식 a-1의 제조

[200] naphthalen-2-amine 300.0 g (1.0 eq), 1-bromo-2-iodobenzene 592.7 g (1.0 eq), NaOtBu 302.0 g (1.5 eq), Pd(OAc)₂ 4.70 g (0.01 eq), Xantphos 12.12 g (0.01 eq), 1,4-dioxane 5L에 녹여 환류하여 교반했다. 3 시간 후 반응이 종료되면 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 Ethylacetate에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 70% 정도 제거했다. 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트리 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피하여 화합물 a-1 443.5 g (수율 71 %)를 얻었다. [M+H]=299

[201]

[202] 2) 화학식 a(5H-benzo[b]carbazole)의 제조

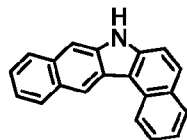
[203] 화학식 a-1 443.5 g (1.0 eq) 에 Pd(t-Bu₃P)₂ 8.56 g (0.01 eq), K₂CO₃ 463.2 g (2.00 eq)을 다이에틸아세트아마이드 (Dimethylacetamide) 4L에 넣고 환류하여 교반했다. 3시간 후 반응물을 물에 부어서 결정을 떨어트리고 여과했다. 여과한 고체를 1,2-dichlorobenzene에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하여 결정을 떨어트리 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화학식 a(5H-benzo[b]carbazole) 174.8 g (수율 48 %)을 얻었다. [M+H]=218

[204]

[205] 제조예 2. 화학식 b(7H-dibenzo[b,g]carbazole)의 제조

[206] 1-bromo-2-iodobenzene 대신 1-bromo-2-iodonaphthalene 을 사용하여 화학식 a의 제조 방법과 같은 방법으로 7H-dibenzo[b,g]carbazole를 합성했다.

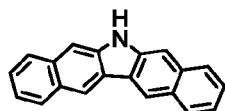
[207]

**7H-dibenzo[b,g]carbazole**

[208] 제조예 3. 화학식 c(6H-dibenzo[b,h]carbazole) 의 제조

[209] 1-bromo-2-iodobenzene 대신 2,3-dibromonaphthalene 을 사용하여 화학식 a의 제조 방법과 같은 방법으로 6H-dibenzo[b,h]carbazole를 합성했다.

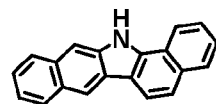
[210]

**6H-dibenzo[b,h]carbazole**

[211] 제조예 4. 화학식 d(13H-dibenzo[a,h]carbazole) 제조

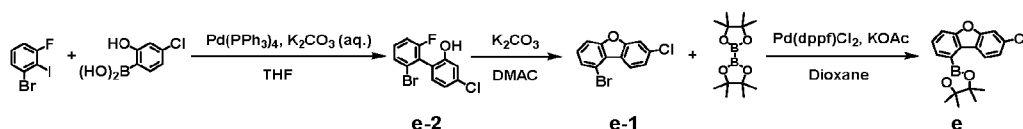
[212] 1-bromo-2-iodobenzene 대신 2-bromo-1-iodonaphthalene 을 사용하여 화학식 a의 제조 방법과 같은 방법으로 13H-dibenzo[a,h]carbazole를 합성했다.

[213]

**13H-dibenzo[a,h]carbazole**

[214] 제조예 5. 화학식 e 제조

[215]



[216] 1) 화학식 e-2의 제조

[217] 1-bromo-3-fluoro-2-iodobenzene 200.0 g (1.0 eq), (4-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 82.3 g (1.0 eq), K₂CO₃ 164.6 g (2.0 eq), Pd(PPh₃)₄ 13.77 g (0.02 eq)를 THF 3L 에 녹여 환류하여 교반했다. 2 시간 후 반응이 종료되면 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 Ethylacetate에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 80% 정도 제거했다. 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트리 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피하여 화합물 e-2 129.5 g (수율 72 %)를 얻었다. [M+H]=300

[218]

[219] 2) 화학식 e-1의 제조

[220] 화학식 e-2 129.5 g (1.0 eq) 에 K₂CO₃ 118.5g (2.00 eq) 을 다이메틸아세트아마이드 (Dimethylacetamide) 2L에 넣고 환류하여 교반했다. 1시간 후 반응물을 물에 부어서 결정을 떨어트리 여과했다. 여과한 고체를 Ethylacetate에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 70% 정도

제거했다. 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트리 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피하여 화합물 e-1 101.6 g (수율 84 %)를 얻었다. $[M+H]=280$

[221]

[222] 3) 화학식 e의 제조

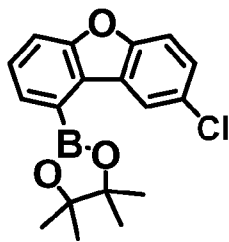
[223] 화학식 e-1 101.6 g (1.0 eq), Bis(pinacolato)diboron 119.1 g (1.3 eq) 에 Pd(dppf)Cl_2 5.28 g (0.02 eq), KOAc 40.4 g (2.00 eq) 을 dioxane 2L에 넣고 환류하여 교반했다. 3 시간 후 반응이 종료되면 감압하여 용매를 제거했다. 여과한 고체를 CHCl_3 에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하여 용매를 90% 정도 제거했다. 이를 다시 환류 상태에서 에탄올을 넣어주며 결정을 떨어트리 식힌 후 여과 해서 화학식 e 103.1 g (수율 87 %)을 얻었다. $[M+H]=329$

[224]

[225] 제조예 6. 화학식 f 제조

[226] (4-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 대신 (5-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 을 사용하여 화학식 e의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 f를 합성했다.

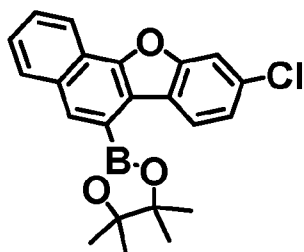
[227]



[228] 제조예 7. 화학식 g 제조

[229] 1-bromo-3-fluoro-2-iodobenzene 대신 3-bromo-1-fluoro-2-iodonaphthalene 을 사용하여 화학식 e의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 g를 합성했다.

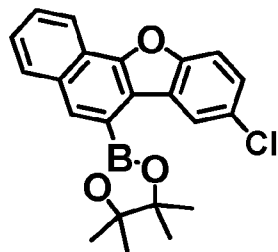
[230]



[231] 제조예 8. 화학식 h 제조

[232] (4-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 대신 (5-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 을 사용하여 화학식 g의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 h를 합성했다.

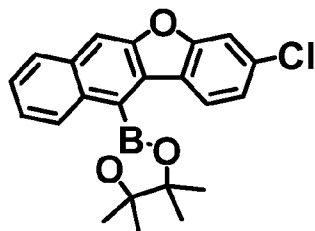
[233]



[234] 제조예 9. 화학식 i 제조

[235] 1-bromo-3-fluoro-2-iodobenzene 대신 1-bromo-3-fluoro-2-iodonaphthalene 을 사용하여 화학식 e의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 i를 합성했다.

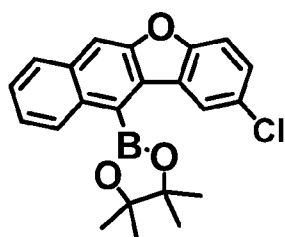
[236]



[237] 제조예 10. 화학식 j 제조

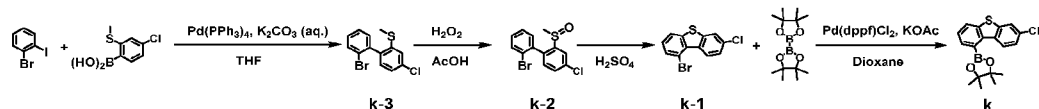
[238] (4-chloro-2-hydroxyphenyl)boronic acid 대신 3-bromo-1-fluoro-2-iodonaphthalene 을 사용하여 화학식 i의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 j를 합성했다.

[239]



[240] 제조예 11. 화학식 k 제조

[241]



[242] 1) 화학식 k-3의 제조

[243] 1-bromo-2-iodobenzene 200.0 g (1.0 eq), (4-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 105.9 g (1.0 eq), K₂CO₃ 173.9 g (2.0 eq), Pd(PPh₃)₄ 14.55 g (0.02 eq)를 THF 3L 에 녹여 환류하여 교반했다. 2 시간 후 반응이 종료되면 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 Ethylacetate에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 80% 정도 제거했다. 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트려 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피하여 화합물 k-3 138.36 g (수율 70 %)를 얻었다. [M+H]=312

[244]

[245] 2) 화학식 k-2의 제조

[246] 화학식 k-3 138.36 g (1.0 eq) 에 H_2O_2 22.5g (2.00 eq) 을 아세트산 1L에 넣고 환류하여 교반했다. 1시간 후 반응물을 물에 부어서 결정을 떨어트리고 여과했다. 여과한 고체를 Ethylacetate에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 80% 정도 제거했다. 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트려 식힌 후 여과했다. 이를 컬럼크로마토그래피하여 화합물 k-2 91.61 g (수율 63 %)를 얻었다. $[M+H]=328$

[247]

[248] 3) 화학식 k-1의 제조

[249] 화학식 k-2 91.61 g (1.0 eq), H_2O_2 500ml 넣고 환류하여 녹이면서 교반했다. 2 시간 후 반응이 종료되면 반응물을 물에 부어서 결정을 떨어 트리고 여과 했다. 여과한 고체를 $CHCl_3$ 에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하여 용매를 80% 정도 제거했다. 이를 다시 환류 상태에서 Hexane을 넣어주며 결정을 떨어트리고 식힌 후 여과 해서 화학식 k-1 50.45 g (수율 61 %)을 얻었다. $[M+H]=296$

[250]

[251] 3) 화학식 k의 제조

[252] 화학식 k-1 50.45 g (1.0 eq), Bis(pinacolato)diboron 55.96 g (1.3 eq) 에 $Pd(dppf)Cl_2$ 2.48g (0.02 eq), KOAc 18.98 g (2.00 eq) 을 dioxnae 800 mL에 넣고 환류하여 교반했다. 3 시간 후 반응이 종료되면 감압하여 용매를 제거했다. 여과한 고체를 $CHCl_3$ 에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하여 용매를 90% 정도 제거했다. 이를 다시 환류 상태에서 에탄올을 넣어주며 결정을 떨어트리고 식힌 후 여과 해서 화학식 k 49.66 g (수율 84 %)을 얻었다. $[M+H]=345$

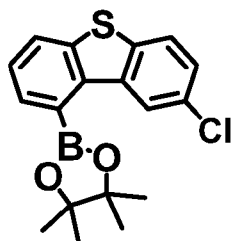
[253]

[254] 제조예 12. 화학식 1 제조

[255] (4-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid대신

(5-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 을 사용하여 화학식 k의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 1를 합성했다.

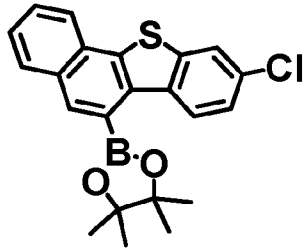
[256]



[257] 제조예 12. 화학식 m 제조

[258] 1-bromo-2-iodobenzene대신 1-bromo-2-iodonaphthalene을 사용하여 화학식 k의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 m를 합성했다.

[259]

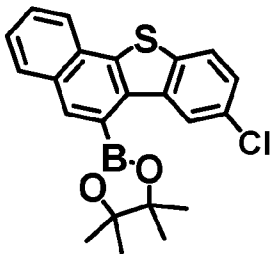


[260] 제조예 13. 화학식 n 제조

[261] (4-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 대신

(5-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 을 사용하여 화학식 m의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 n을 합성했다.

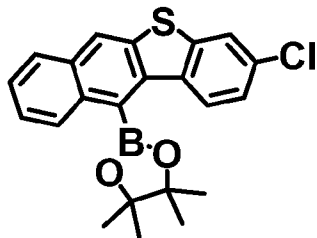
[262]



[263] 제조예 14. 화학식 o 제조

[264] 1-bromo-2-iodobenzene 대신 2-bromo-3-iodonaphthalene을 사용하여 화학식 a의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 o를 합성했다.

[265]

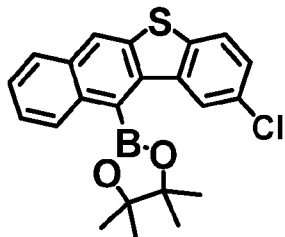


[266] 제조예 15. 화학식 p 제조

[267] (4-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 대신

(5-chloro-2-(methylthio)phenyl)boronic acid 을 사용하여 화학식 o의 제조 방법과 같은 방법으로 화학식 p를 합성했다.

[268]

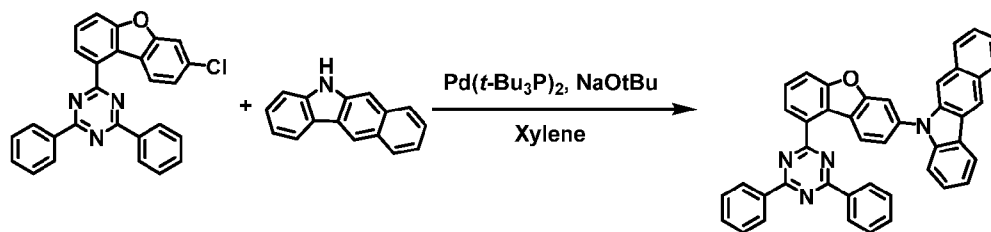


[269] 위에서 합성한 중간체를 활용하여 Triazine이 포함된 중간체를 Suzuki coupling reaction 을 통해 진행 하고 아래의 합성예들의 화합물을 합성했다.

[270]

[271] 합성예 1

[272]

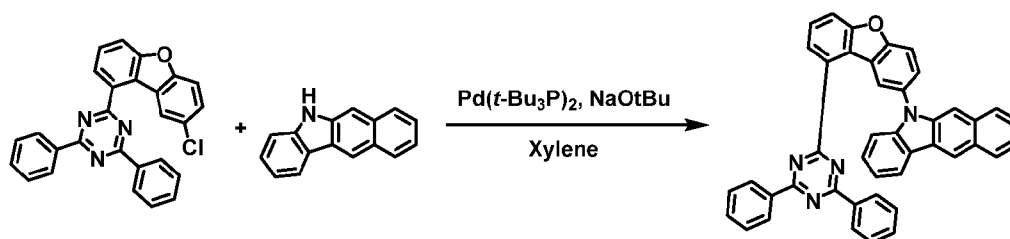


[273] 질소 분위기에서 중간체 1 (20 g, 46.2mmol), 화학식 a (10g, 46.2 mmol), sodium tert-butoxide (8.9 g, 92.4 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 1 14.7g을 얻었다. (수율 52%, MS: [M+H]⁺= 615)

[274]

[275] 합성예 2

[276]

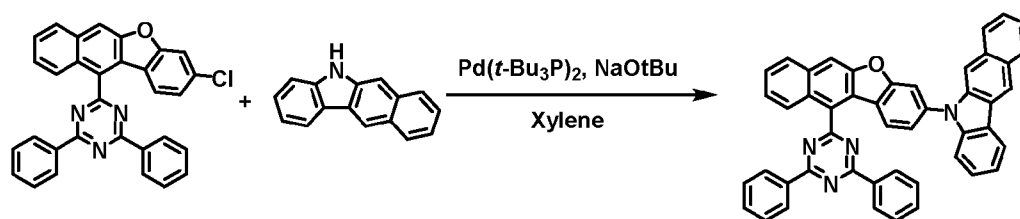


[277] 질소 분위기에서 중간체 2 (20 g, 46.2mmol), 화학식 a (10g, 46.2 mmol), sodium tert-butoxide (8.9 g, 92.4 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 2 19.3g을 얻었다. (수율 68%, MS: [M+H]⁺= 615)

[278]

[279] 합성예 3

[280]

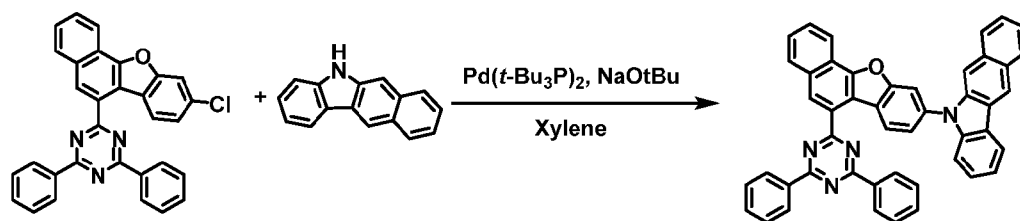


- [281] 질소 분위기에서 중간체 3 (20 g, 41.4mmol), 화학식 a (9g, 41.4 mmol), sodium tert-butoxide (8 g, 82.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 3 16.8g을 얻었다. (수율 61%, MS: [M+H]⁺= 665)

[282]

[283] 합성예 4

[284]

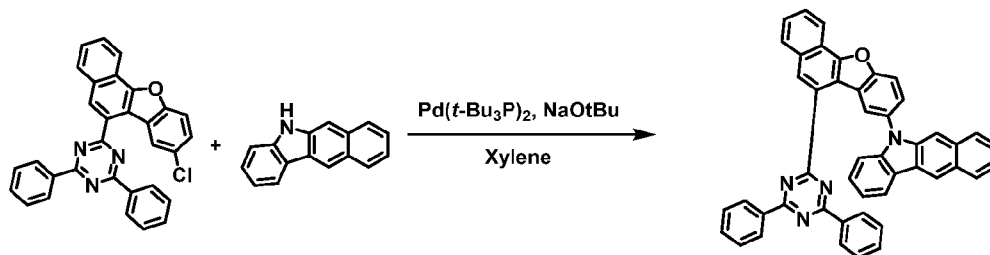


- [285] 질소 분위기에서 중간체 4 (20 g, 41.4mmol), 화학식 a (9g, 41.4 mmol), sodium tert-butoxide (8 g, 82.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 4 16.2g을 얻었다. (수율 59%, MS: [M+H]⁺= 665)

[286]

[287] 합성예 5

[288]



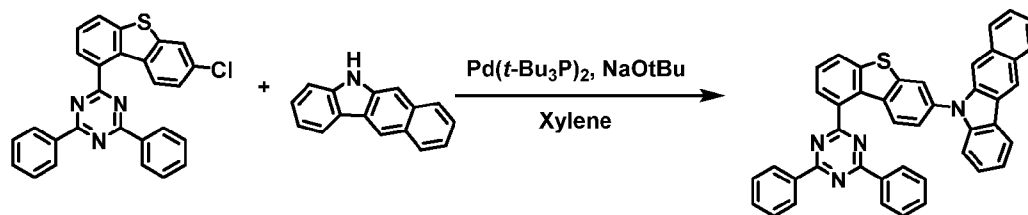
- [289] 질소 분위기에서 중간체 5 (20 g, 41.4mmol), 화학식 a (9g, 41.4 mmol), sodium tert-butoxide (8 g, 82.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을

실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 5 13.7g을 얻었다. (수율 50%, MS: [M+H]⁺= 665)

[290]

[291] 합성예 6

[292]

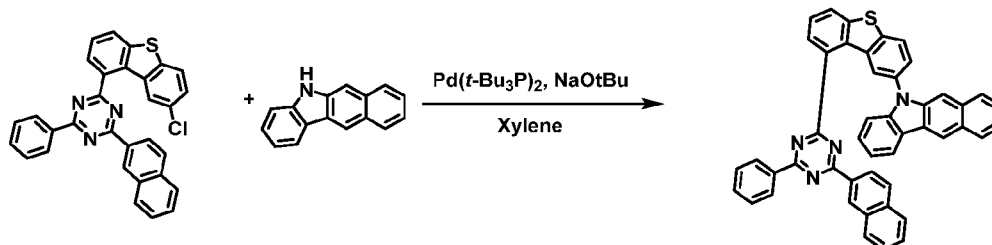


[293] 질소 분위기에서 중간체 6 (20 g, 44.5mmol), 화학식 a (9.7g, 44.5 mmol), sodium tert-butoxide (8.6 g, 89.1 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 6 14.9g을 얻었다. (수율 53%, MS: [M+H]⁺= 631)

[294]

[295] 합성예 7

[296]

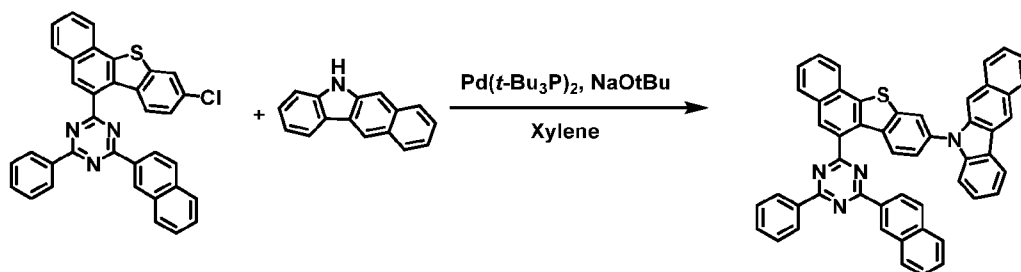


[297] 질소 분위기에서 중간체 7 (20 g, 40.1mmol), 화학식 a (8.7g, 40.1 mmol), sodium tert-butoxide (7.7 g, 80.1 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 7 14.2g을 얻었다. (수율 52%, MS: [M+H]⁺= 681)

[298]

[299] 합성예 8

[300]

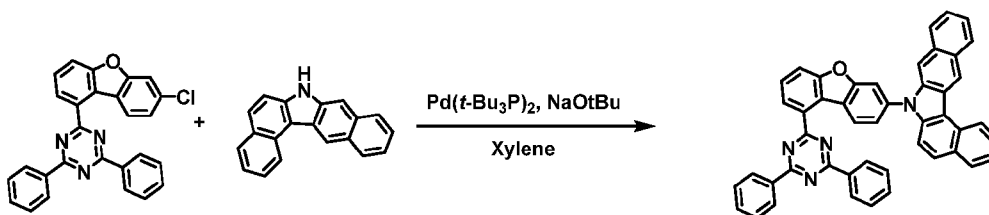


[301] 질소 분위기에서 중간체 8 (20 g, 36.4mmol), 화학식 a (7.9g, 36.4 mmol), sodium tert-butoxide (7 g, 72.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.7 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 8 13.3g을 얻었다. (수율 50%, MS: [M+H]⁺= 731)

[302]

[303] 합성예 9

[304]

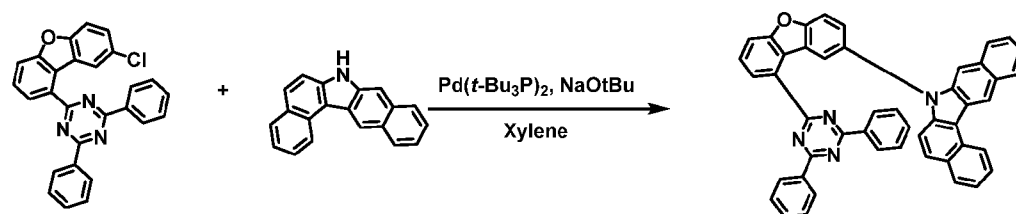


[305] 질소 분위기에서 중간체 9 (20 g, 36.4mmol), 화학식 b (9.7g, 36.4 mmol), sodium tert-butoxide (7 g, 72.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.7 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 9 14.8g을 얻었다. (수율 61%, MS: [M+H]⁺= 665)

[306]

[307] 합성예 10

[308]

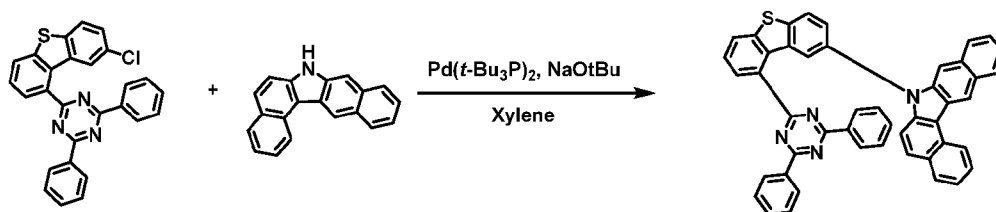


[309] 질소 분위기에서 중간체 10 (20 g, 46.2mmol), 화학식 b (12.3g, 46.2 mmol), sodium tert-butoxide (8.9 g, 92.4 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 10 18.4g을 얻었다. (수율 60%, MS: [M+H]⁺= 665)

[310]

[311] 합성에 11

[312]

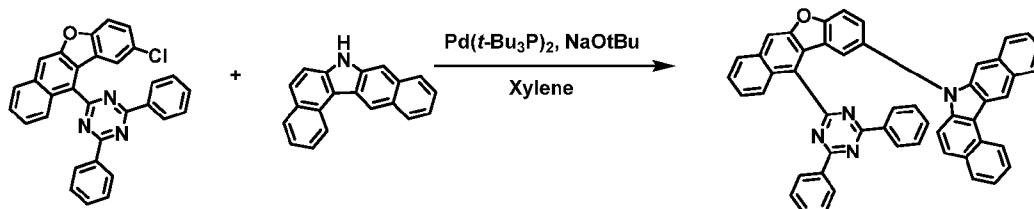


[313] 질소 분위기에서 중간체 11 (20 g, 44.5mmol), 화학식 b (11.9g, 44.5 mmol), sodium tert-butoxide (8.6 g, 89.1 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 11 17.6g을 얻었다. (수율 58%, MS: [M+H]⁺= 681)

[314]

[315] 합성에 12

[316]



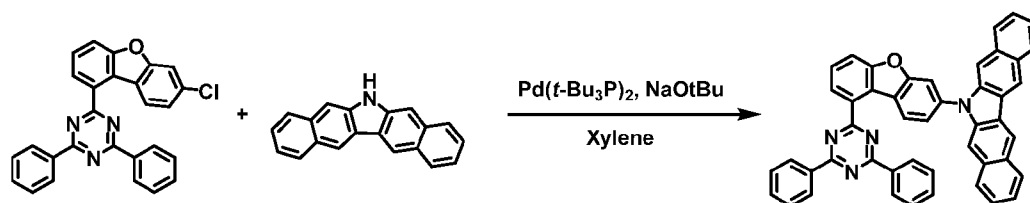
[317] 질소 분위기에서 중간체 12 (20 g, 41.4mmol), 화학식 b (11.1g, 41.4 mmol), sodium tert-butoxide (8 g, 82.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 12 14.8g을 얻었다.

(수율 50%, MS: [M+H]⁺= 715)

[318]

[319] 합성예 13

[320]

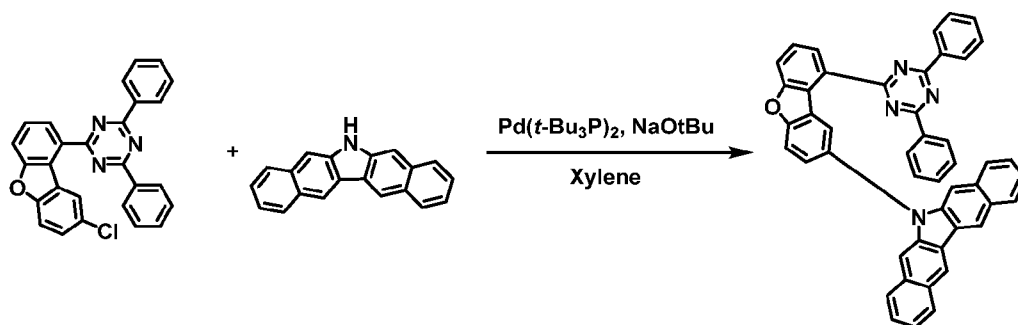


[321] 질소 분위기에서 중간체 13 (20 g, 46.2mmol), 화학식 c (12.3g, 46.2 mmol), sodium tert-butoxide (8.9 g, 92.4 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 13 17.8g을 얻었다. (수율 58%, MS: [M+H]⁺= 665)

[322]

[323] 합성예 14

[324]

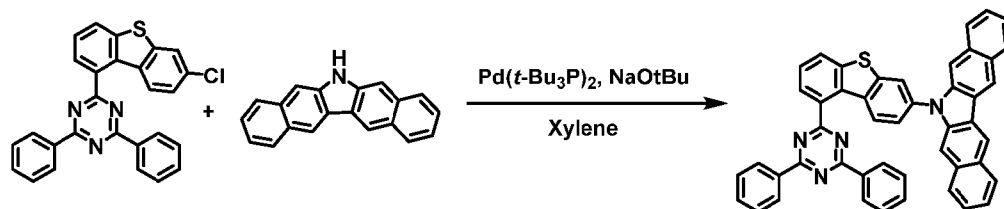


[325] 질소 분위기에서 중간체 14 (20 g, 46.2mmol), 화학식 c (12.3g, 46.2 mmol), sodium tert-butoxide (8.9 g, 92.4 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 14 15.3g을 얻었다. (수율 50%, MS: [M+H]⁺= 665)

[326]

[327] 합성예 15

[328]

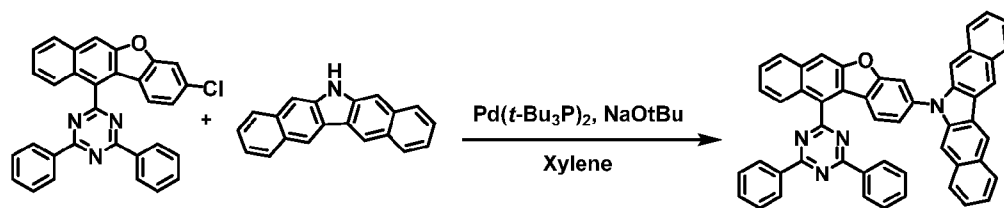


[329] 질소 분위기에서 중간체 15 (20 g, 44.5mmol), 화학식 c (11.9g, 44.5 mmol), sodium tert-butoxide (8.6 g, 89.1 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.5 g, 0.9 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 15 15.4g을 얻었다. (수율 51%, MS: [M+H]⁺= 681)

[330]

[331] 합성예 16

[332]

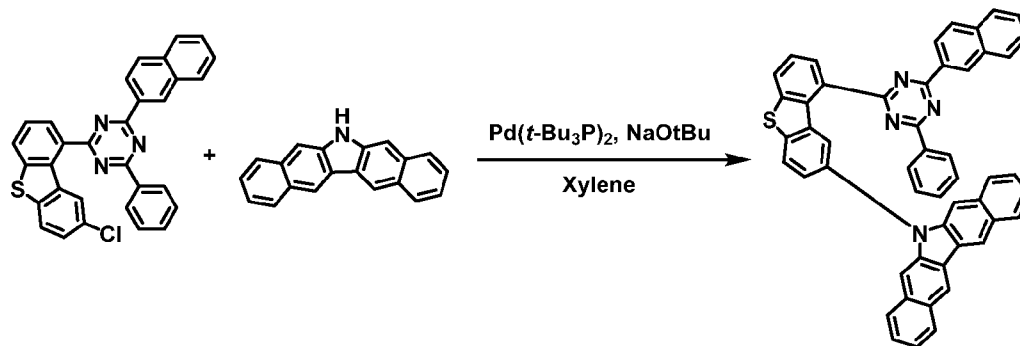


[333] 질소 분위기에서 중간체 16 (20 g, 41.4mmol), 화학식 c (11.1g, 41.4 mmol), sodium tert-butoxide (8 g, 82.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 16 16.9g을 얻었다. (수율 57%, MS: [M+H]⁺= 715)

[334]

[335] 합성예 17

[336]

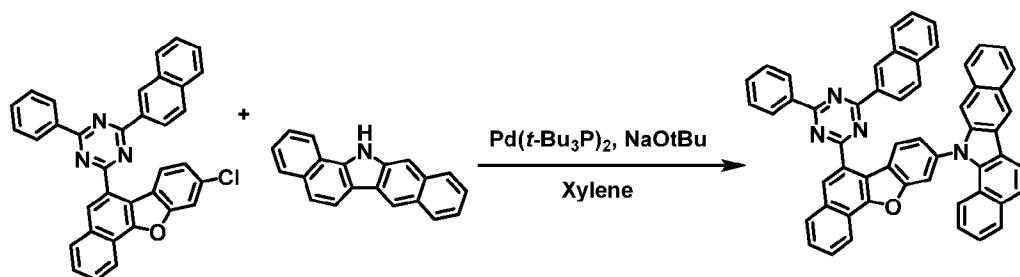


[337] 질소 분위기에서 중간체 17 (20 g, 40.1mmol), 화학식 c (10.7g, 40.1 mmol), sodium tert-butoxide (7.7 g, 80.1 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 17 19.9g을 얻었다. (수율 68%, MS: [M+H]⁺= 731)

[338]

[339] 합성예 18

[340]

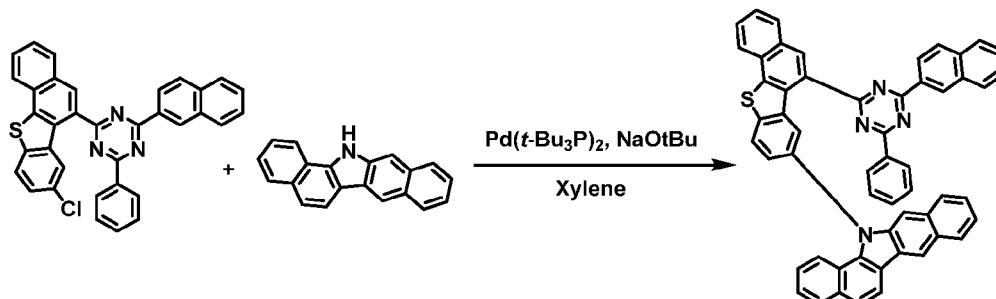


[341] 질소 분위기에서 중간체 18 (20 g, 37.5mmol), 화학식 d (10g, 37.5 mmol), sodium tert-butoxide (7.2 g, 75 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.8 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 18 15.2g을 얻었다. (수율 53%, MS: [M+H]⁺= 765)

[342]

[343] 합성예 19

[344]

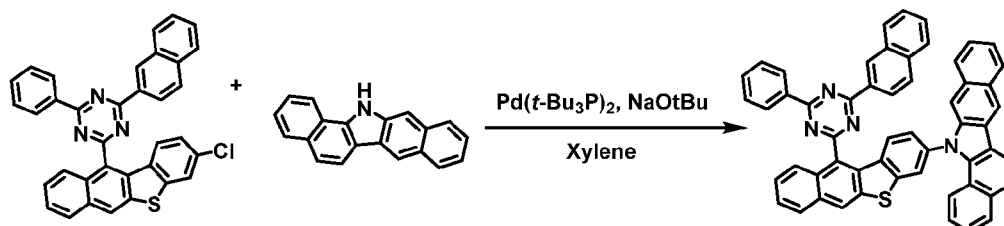


[345] 질소 분위기에서 중간체 19 (20 g, 36.4mmol), 화학식 d (9.7g, 36.4 mmol), sodium tert-butoxide (7 g, 72.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.7 mmol)을 투입했다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 19 14.2g을 얻었다. (수율 50%, MS: [M+H]⁺= 781)

[346]

[347] 합성예 20

[348]



[349] 질소 분위기에서 중간체 20 (20 g, 36.4mmol), 화학식 d (9.7g, 36.4 mmol), sodium tert-butoxide (7 g, 72.8 mmol) 을 Xylene 400 ml에 넣고 교반 및 환류했다. 이 후 bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0) (0.4 g, 0.7 mmol)을 투입했다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거했다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류했다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 20 19.3g을 얻었다. (수율 68%, MS: [M+H]⁺= 781)

[350]

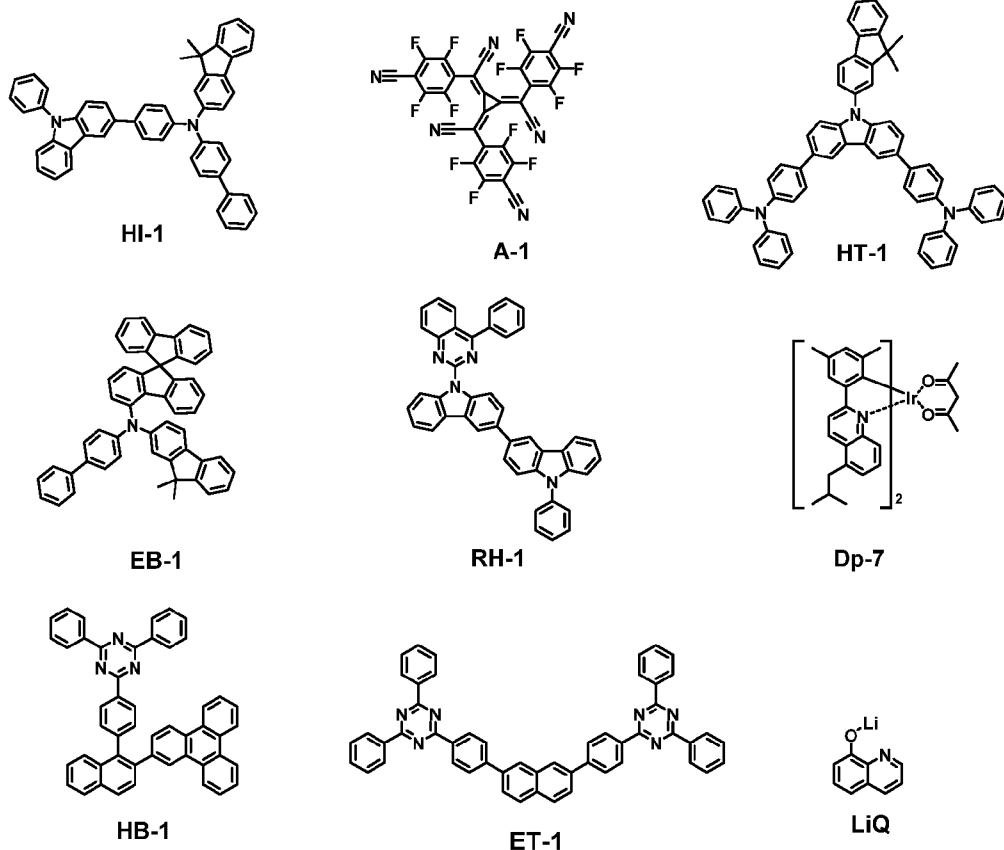
[351] 비교예 1

[352] ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척했다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용했다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행했다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜,

아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

- [353] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 정공주입층으로 하기 HI-1 화합물을 1150Å의 두께로 형성하되 하기 A-1 화합물을 1.5% 농도로 p-doping 했다. 상기 정공주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 진공 증착하여 막 두께 800Å의 정공수송층을 형성했다. 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 150Å으로 하기 EB-1 화합물을 진공 증착하여 전자차단층을 형성했다. 이어서, 상기 EB-1 증착막 위에 하기 RH-1 화합물과 하기 Dp-7 화합물을 98:2의 중량비로 진공 증착하여 400Å 두께의 적색 발광층을 형성했다. 상기 발광층 위에 막 두께 30Å으로 하기 HB-1 화합물을 진공 증착하여 정공저지층을 형성했다. 이어서, 상기 정공저지층 위에 하기 ET-1 화합물과 하기 LiQ 화합물을 2:1의 중량비로 진공 증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성했다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께로 리튬플로라이드(LiF)와 1,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성했다.

[354]



- [355] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4~0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$ torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작했다.

[356]

[357] 실시예 1 내지 실시예 20

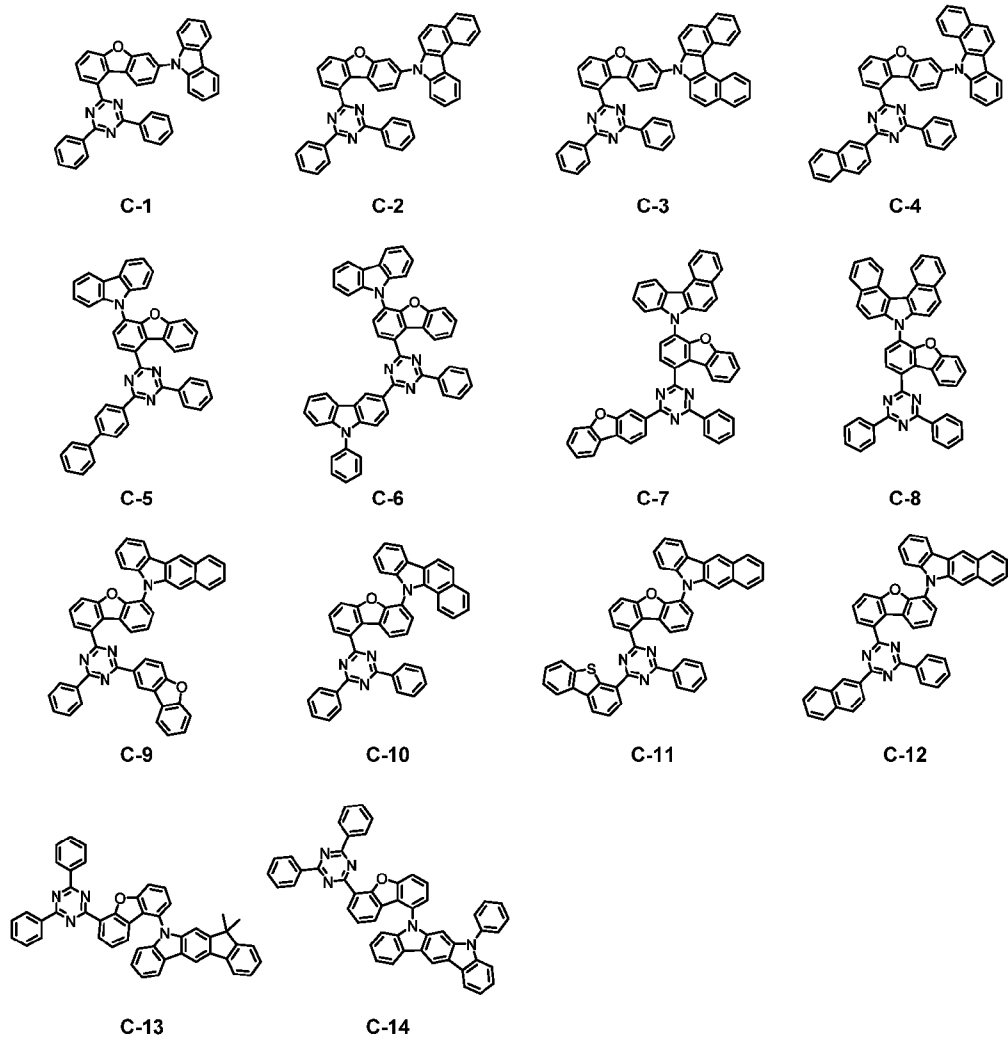
[358] 비교예 1의 유기 발광 소자에서 RH-1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조했다.

[359] 비교예 2 내지 비교예 15

[360] 비교예 1의 유기 발광 소자에서 RH-1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조했다.

[361] 하기 표 1에 기재된 비교예로 적용된 화합물 C-1 내지 C-14는 아래와 같다.

[362]



[363] 실시예 1 내지 실시예 74 및 비교예 1 내지 비교예 15에서 제조한 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 전압, 효율, 수명을 측정(6000 nit 기준)하고 그 결과를 하기 표 1 및 표 2에 나타냈다. 수명 T95는 휘도가 초기 휘도(6000 nit)에서 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

[364]

[365] [표1]

구분	물질	구동전압(V)	효율(cd/A)	수명 T95(hr)	발광색
비교예 1	RH-1	4.34	38.3	193	적색
실시예 1	화합물 1	3.63	44.3	301	적색
실시예 2	화합물 2	3.61	43.7	278	적색
실시예 3	화합물 3	3.67	45.8	323	적색
실시예 4	화합물 4	3.62	45.1	315	적색
실시예 5	화합물 5	3.60	44.5	287	적색
실시예 6	화합물 6	3.71	46.3	274	적색
실시예 7	화합물 7	3.72	45.9	253	적색
실시예 8	화합물 8	3.74	46.5	281	적색
실시예 9	화합물 9	3.51	47.8	319	적색
실시예 10	화합물 10	3.53	47.2	313	적색
실시예 11	화합물 11	3.63	48.4	291	적색
실시예 12	화합물 12	3.50	47.3	302	적색
실시예 13	화합물 13	3.54	48.9	351	적색
실시예 14	화합물 14	3.47	47.1	324	적색
실시예 15	화합물 15	3.50	49.0	305	적색
실시예 16	화합물 16	3.53	48.2	337	적색
실시예 17	화합물 17	3.51	47.6	292	적색
실시예 18	화합물 18	3.40	43.9	253	적색
실시예 19	화합물 19	3.42	45.1	242	적색
실시예 20	화합물 20	3.37	44.5	231	적색
비교예 2	C-1	4.13	37.2	131	적색
비교예 3	C-2	4.81	34.1	140	적색
비교예 4	C-3	4.30	35.1	167	적색
비교예 5	C-4	4.68	33.0	79	적색
비교예 6	C-5	4.41	32.4	97	적색
비교예 7	C-6	4.77	29.7	61	적색
비교예 8	C-7	4.21	34.0	103	적색
비교예 9	C-8	4.19	35.7	114	적색

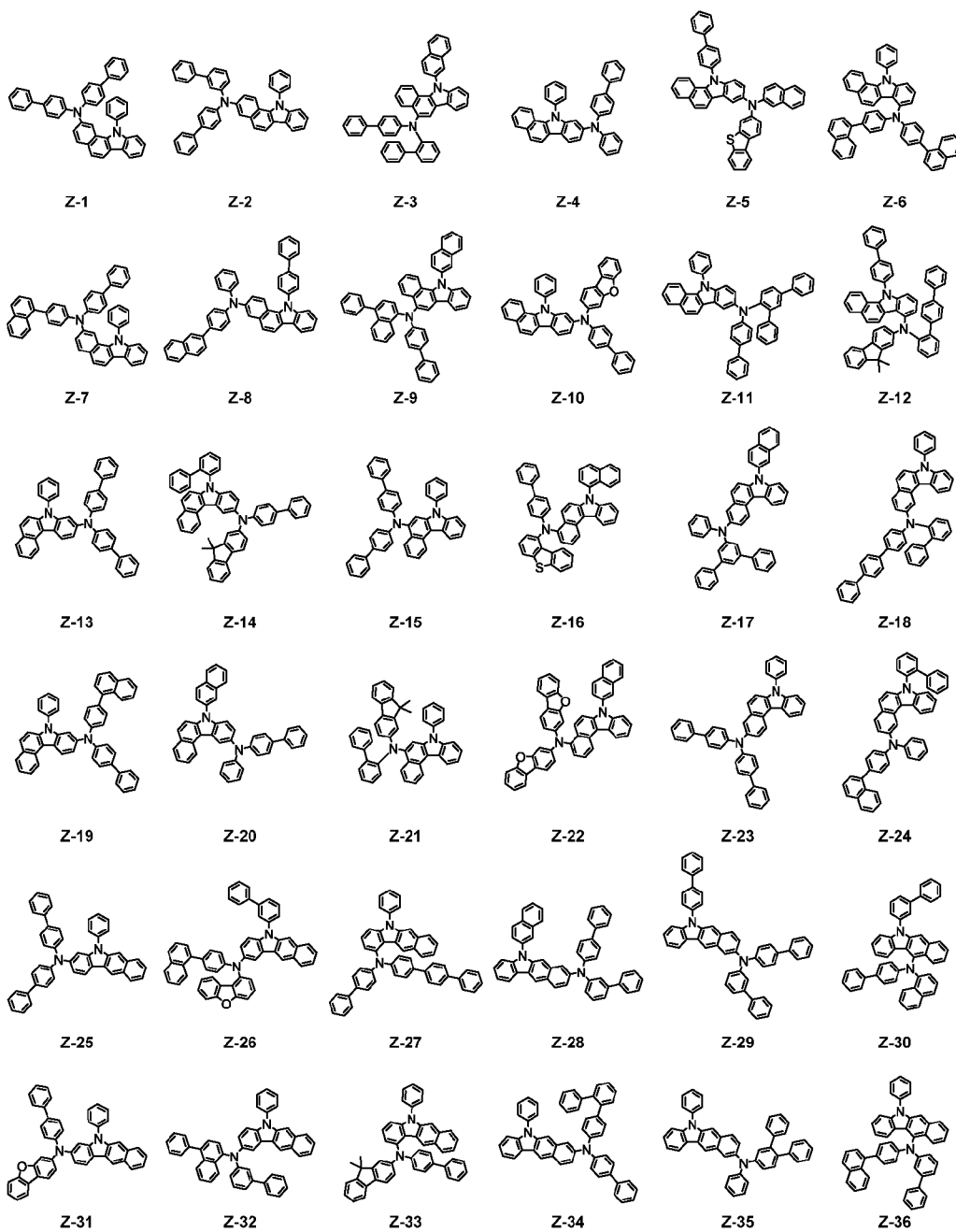
비교예 10	C-9	4.21	37.3	178	적색
비교예 11	C-10	4.59	35.7	142	적색
비교예 12	C-11	4.71	31.3	73	적색
비교예 13	C-12	4.60	32.3	121	적색
비교예 14	C-13	4.61	34.3	73	적색
비교예 15	C-14	4.49	36.7	133	적색

[366] 실시예 21 내지 실시예 74

[367] 비교예 1의 유기 발광 소자에서 RH-1 대신 하기 표 1에 기재된 제1 호스트와 제2 호스트를 1:1 비율로 진공증착 진행했으며 이것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조했다.

[368] 하기 표 2의 제2 호스트로 적용된 화합물은 아래와 같다.

[369]



[370] [표2]

구분	제1호스트	제2호스트	구동전압(V)	효율(cd/A)	수명 T95(hr)	발광색
실시예 21	화합물1	Z-1	3.65	46.2	402	적색
실시예 22		Z-4	3.68	46.9	411	적색
실시예 23		Z-10	3.69	46.2	408	적색
실시예 24		Z-13	3.68	45.2	423	적색
실시예 25		Z-21	3.65	45.9	417	적색
실시예 26		Z-25	3.67	45.1	408	적색
실시예 27		Z-31	3.70	46.3	421	적색
실시예 28		Z-33	3.68	45.0	417	적색
실시예 29	화합물2	Z-1	3.69	44.5	465	적색
실시예 30		Z-4	3.68	44.8	469	적색
실시예 31		Z-10	3.72	45.9	458	적색
실시예 32		Z-13	3.68	44.5	461	적색
실시예 33		Z-21	3.63	45.7	454	적색
실시예 34		Z-25	3.60	45.9	451	적색
실시예 35		Z-31	3.62	45.2	467	적색
실시예 36		Z-33	3.67	45.8	462	적색
실시예 37	화합물8	Z-1	3.78	46.6	453	적색
실시예 38		Z-4	3.77	47.9	451	적색
실시예 39		Z-10	3.79	48.1	449	적색
실시예 40		Z-13	3.75	47.8	467	적색
실시예 41		Z-21	3.71	47.5	452	적색
실시예 42		Z-25	3.79	48.9	461	적색
실시예 43		Z-31	3.72	48.9	468	적색
실시예 44		Z-33	3.78	48.0	455	적색

실시예 45	화합물 13	Z-2	3.60	49.2	427	적색
실시예 46		Z-7	3.68	50.9	3.97	적색
실시예 47		Z-11	3.60	49.9	419	적색
실시예 48		Z-15	3.58	50.7	410	적색
실시예 49		Z-18	3.57	51.5	391	적색
실시예 50		Z-19	3.61	49.8	415	적색
실시예 51		Z-22	3.59	50.7	493	적색
실시예 52		Z-23	3.60	51.9	395	적색
실시예 53		Z-27	3.62	50.7	411	적색
실시예 54		Z-34	3.58	51.8	498	적색
실시예 55	화합물 15	Z-2	3.59	50.9	461	적색
실시예 56		Z-7	3.54	51.3	472	적색
실시예 57		Z-11	3.50	52.8	462	적색
실시예 58		Z-15	3.51	49.5	454	적색
실시예 59		Z-18	3.45	50.3	458	적색
실시예 60		Z-19	3.48	51.7	449	적색
실시예 61		Z-22	3.52	50.9	486	적색
실시예 62		Z-23	3.50	50.4	467	적색
실시예 63		Z-27	3.57	50.5	466	적색
실시예 64		Z-34	3.55	50.0	458	적색
실시예 65	화합물 16	Z-2	3.50	49.7	462	적색
실시예 66		Z-7	3.57	49.3	481	적색
실시예 67		Z-11	3.52	49.4	473	적색
실시예 68		Z-15	3.59	49.9	462	적색
실시예 69		Z-18	3.55	50.5	468	적색
실시예 70		Z-19	3.54	49.7	477	적색
실시예 71		Z-22	3.51	49.5	486	적색
실시예 72		Z-23	3.58	50.3	471	적색
실시예 73		Z-27	3.53	49.7	469	적색
실시예 74		Z-34	3.55	50.5	473	적색

[371]

[372] 실시예 1 내지 20 및 비교예 1 내지 15에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 상기 표 1의 결과를 얻었다. 상기 비교예의 적색 유기 발광 소자는 종래 널리 사용되고 있는 물질을 사용하였으며, 전자 차단층으로 화합물 [EB-1], 적색 발광층으로 RH-1/Dp-7을 사용하는 구조이다. 비교예 2 내지 15은 RH-1 대신 C-1 내지 C-14를 사용하여 유기 발광 소자를 제조했다. 상기 표 1의 결과를 보면 본 발명의 화합물이 적색 발광층의 호스트로 사용했을 때 비교예 물질에 비해서 구동전압이 크게는 30% 가까이 낮아졌으며, 효율 측면에서는 25% 이상 상승을 한 것으로 보아 호스트에서 적색 도판트로의 에너지 전달이 잘 이뤄진다는 것을 알 수 있었다. 또한 높은 효율을 유지하면서도 수명 특성을 2배 이상 크게 개선시킬 수 있는 것을 알 수 있었다. 이것은 결국 비교예 화합물보다 본 발명의 화합물이 전자와 정공에 대한 안정도가 높기 때문이라 판단할 수 있다. 상기 표 2의 결과는 두가지 종류의 호스트를 공증착 한 결과를 나타냈는데 제1 호스트와 제2 호스트를 1:1 비율로 사용했을 때 제1 호스트만 사용한 결과보다 더 우수한 결과를 나타냈다. 제2 호스트를 사용함에 따라 정공의 양이 많아지면서 적색 발광층 내에 전자와 정공이 더 안정적인 균형을 유지하게 되고 효율과 수명이 많이 상승하는 것을 확인 할 수 있었다. 결론적으로 본 발명의 화합물을 적색 발광층의 호스트로 사용하였을 때 유기 발광 소자의 구동전압, 발광 효율 및 수명 특성을 개선할 수 있다는 것을 확인할 수 있다.

[373] [부호의 설명]

[374] 1: 기판

[375] 2: 제1 전극

[376] 3: 정공 주입층

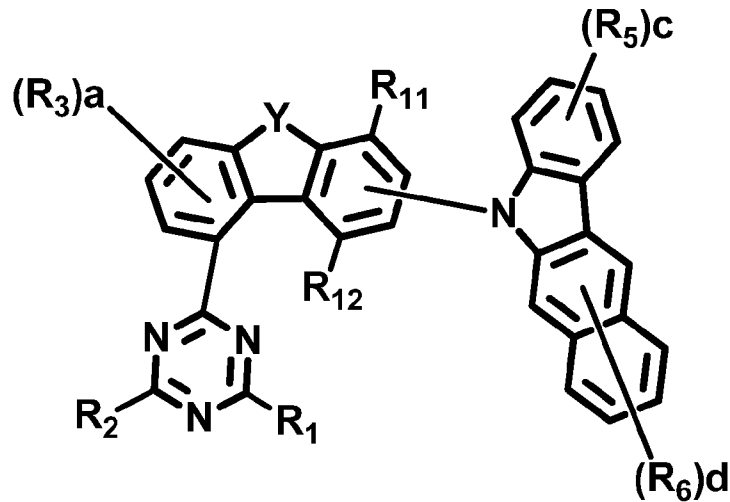
[377] 4: 정공 수송층

[378] 5: 발광층

[379] 6: 제2 전극

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:
[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

Y는 O; 또는 S이고,

R₁ 및 R₂는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

R₃, R₅ 및 R₆은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소;

할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된

시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된

헤테로아릴기이거나, 또는 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성하고,

R₁₁ 및 R₁₂는 수소이고,

a는 1 내지 3의 정수이며,

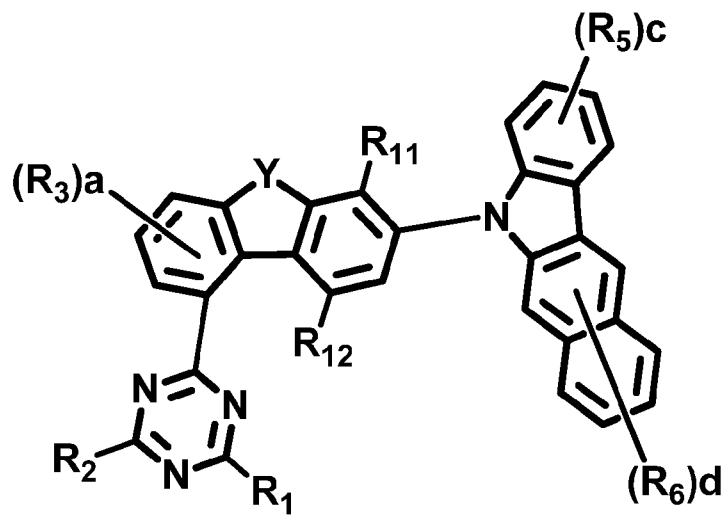
c는 1 내지 4의 정수이고,

d는 1 내지 6의 정수이며,

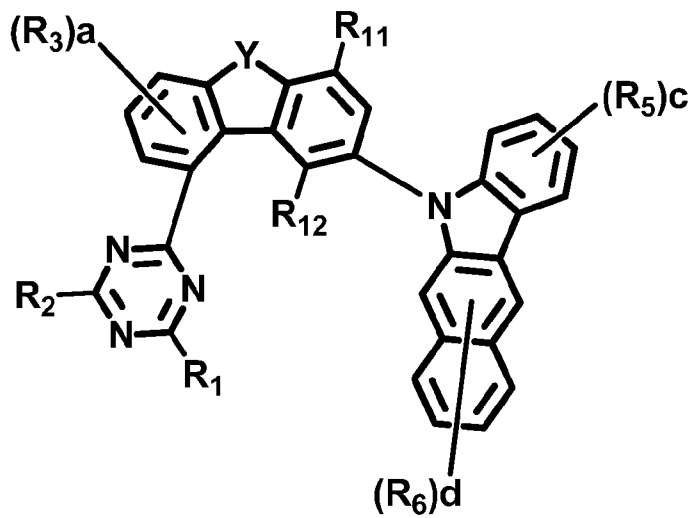
a, c 및 d가 각각 2 이상인 경우, 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시되는
것인 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서,

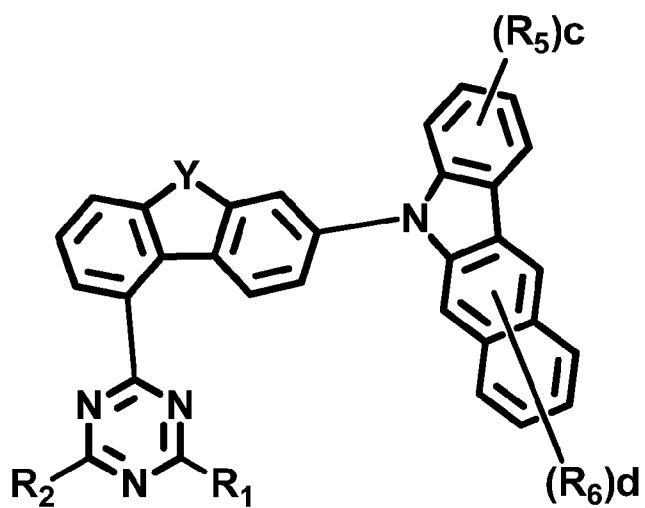
Y, R₁, R₂, R₃, R₅, R₆, R₁₁, R₁₂, a, c 및 d의 정의는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[청구항 3]

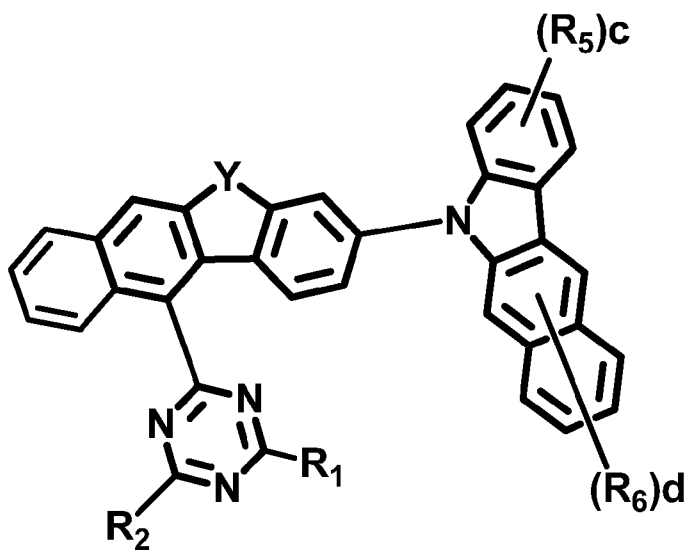
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

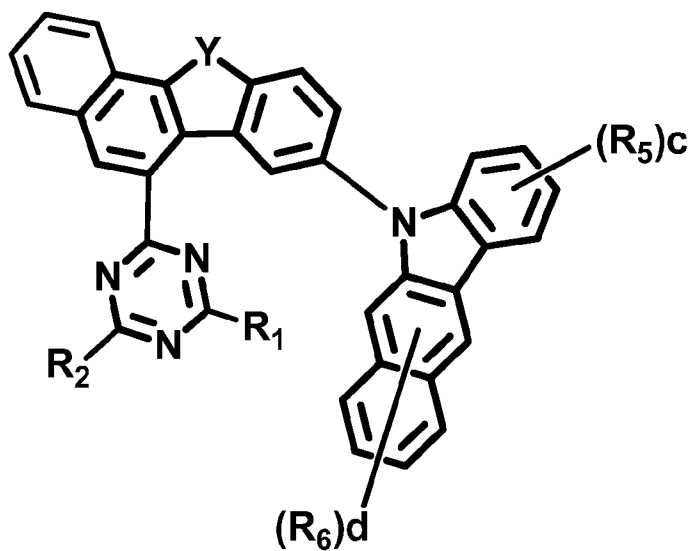
[화학식 1-1-1]



[화학식 1-1-2]



[화학식 1-1-3]



상기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3에 있어서,

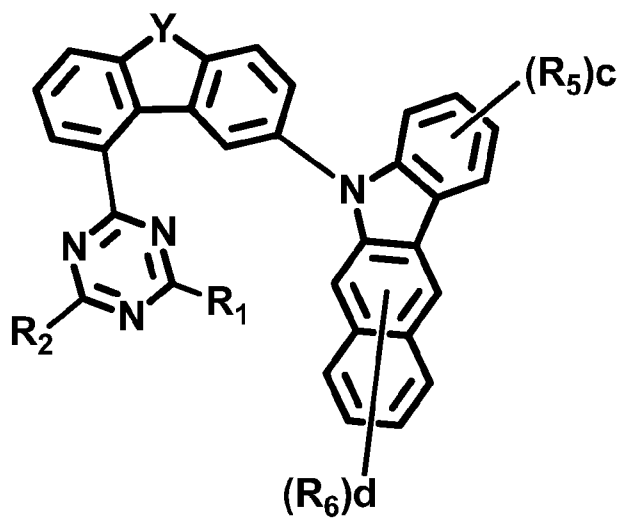
Y, R₁, R₂, R₅, R₆, c 및 d의 정의는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[청구항 4]

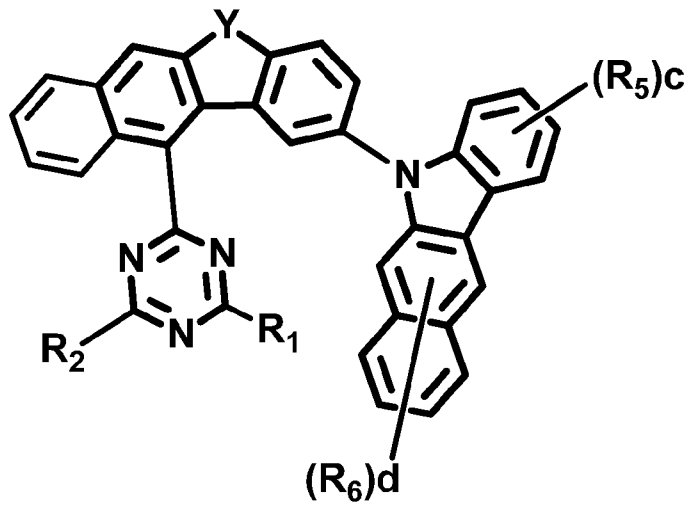
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2-1 내지 1-2-3 중 어느 하나로 표시되는
것인 화합물:

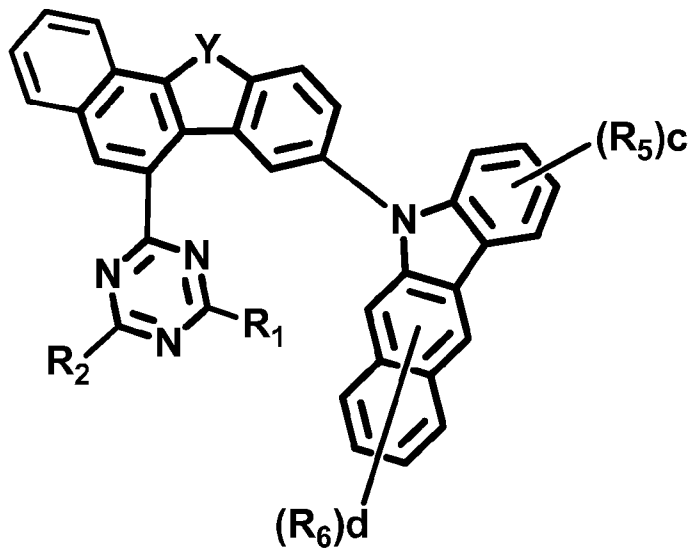
[화학식 1-2-1]



[화학식 1-2-2]



[화학식 1-2-3]



상기 화학식 1-2-1 내지 1-2-3에 있어서,

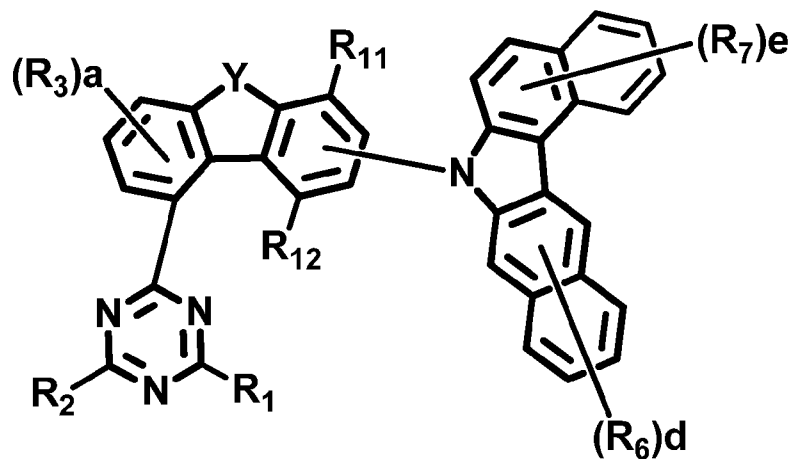
Y, R₁, R₂, R₅, R₆, c 및 d의 정의는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[청구항 5]

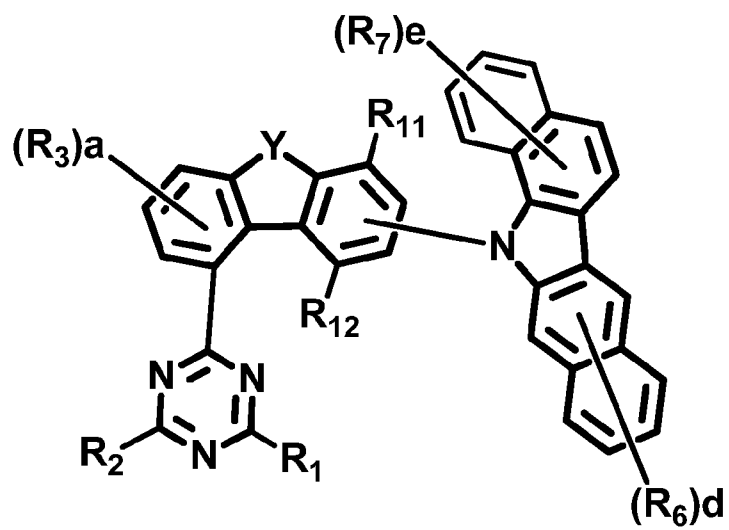
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

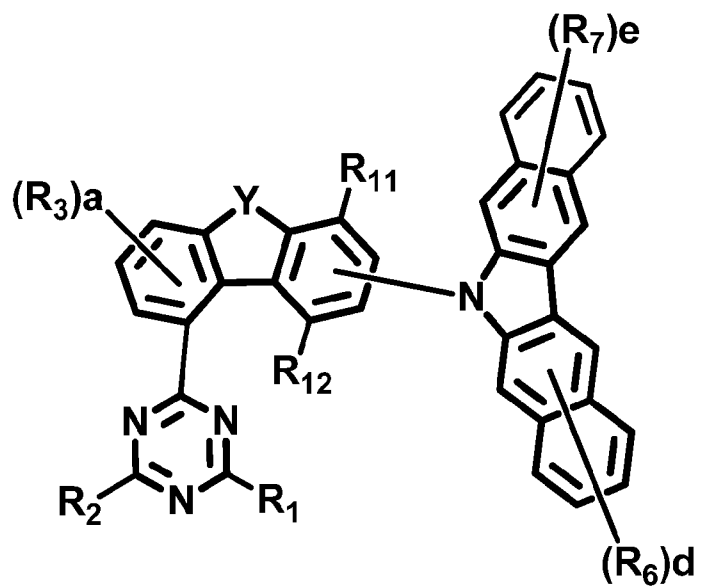
[화학식 2]



[화학식 3]



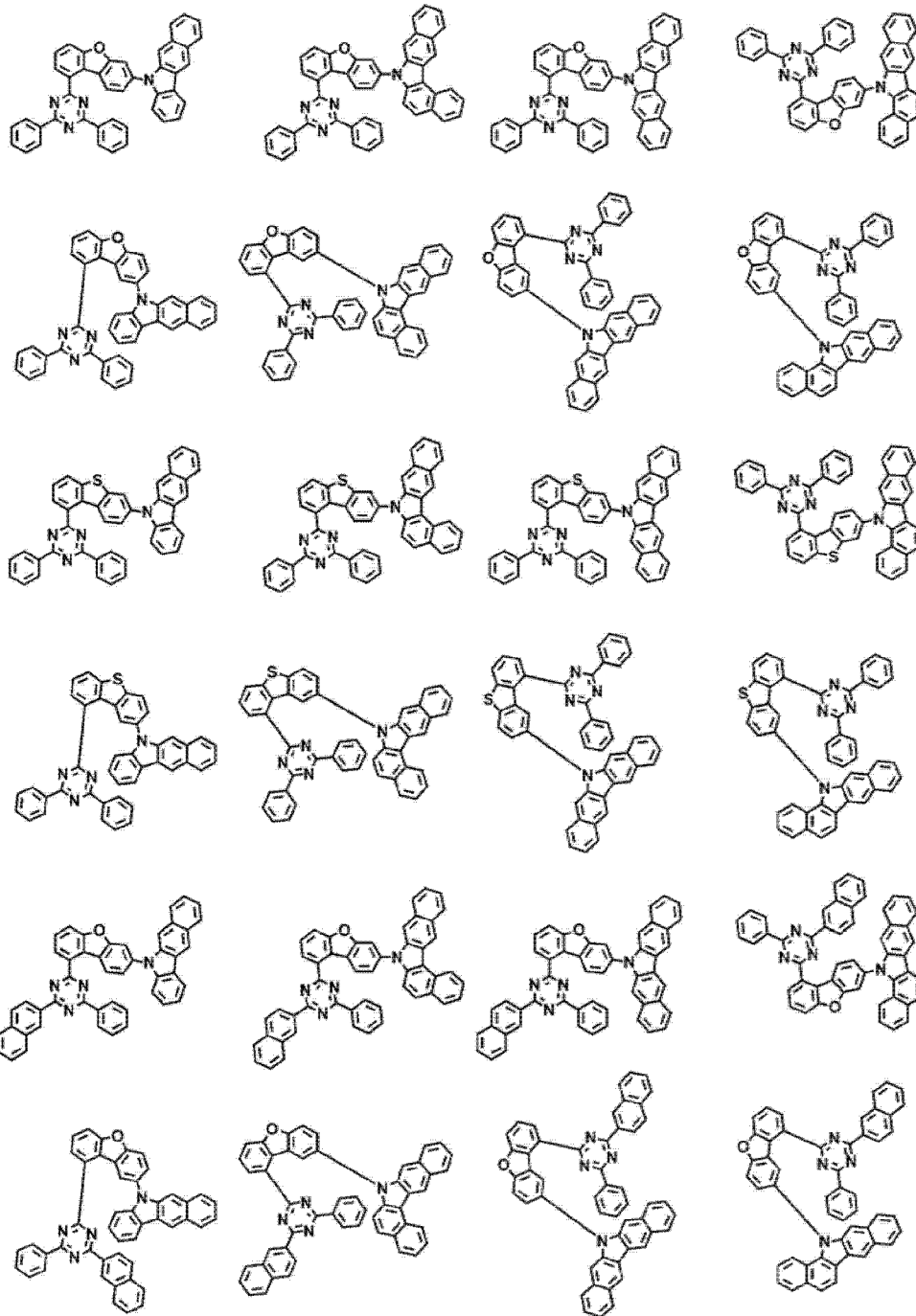
[화학식 4]

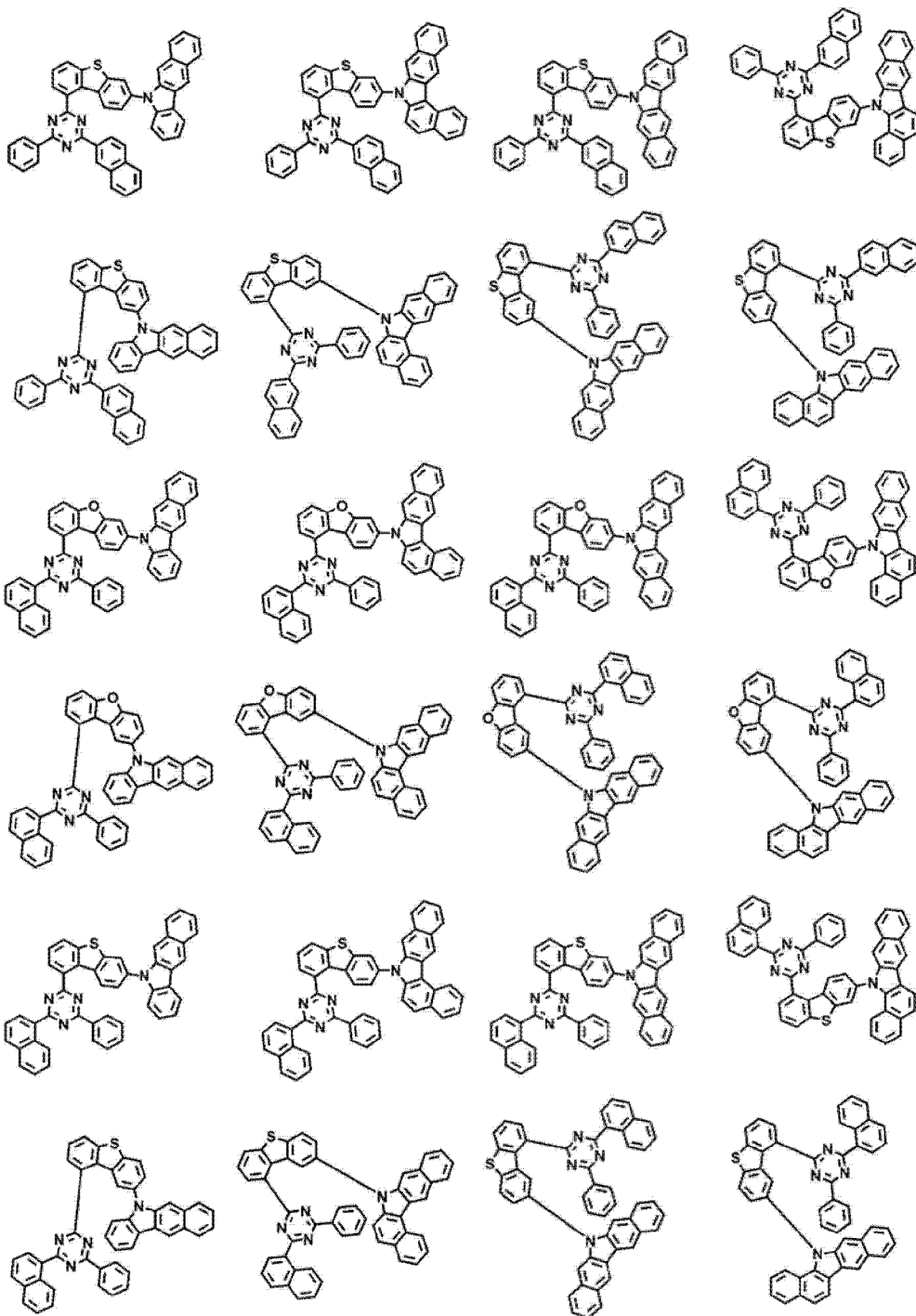


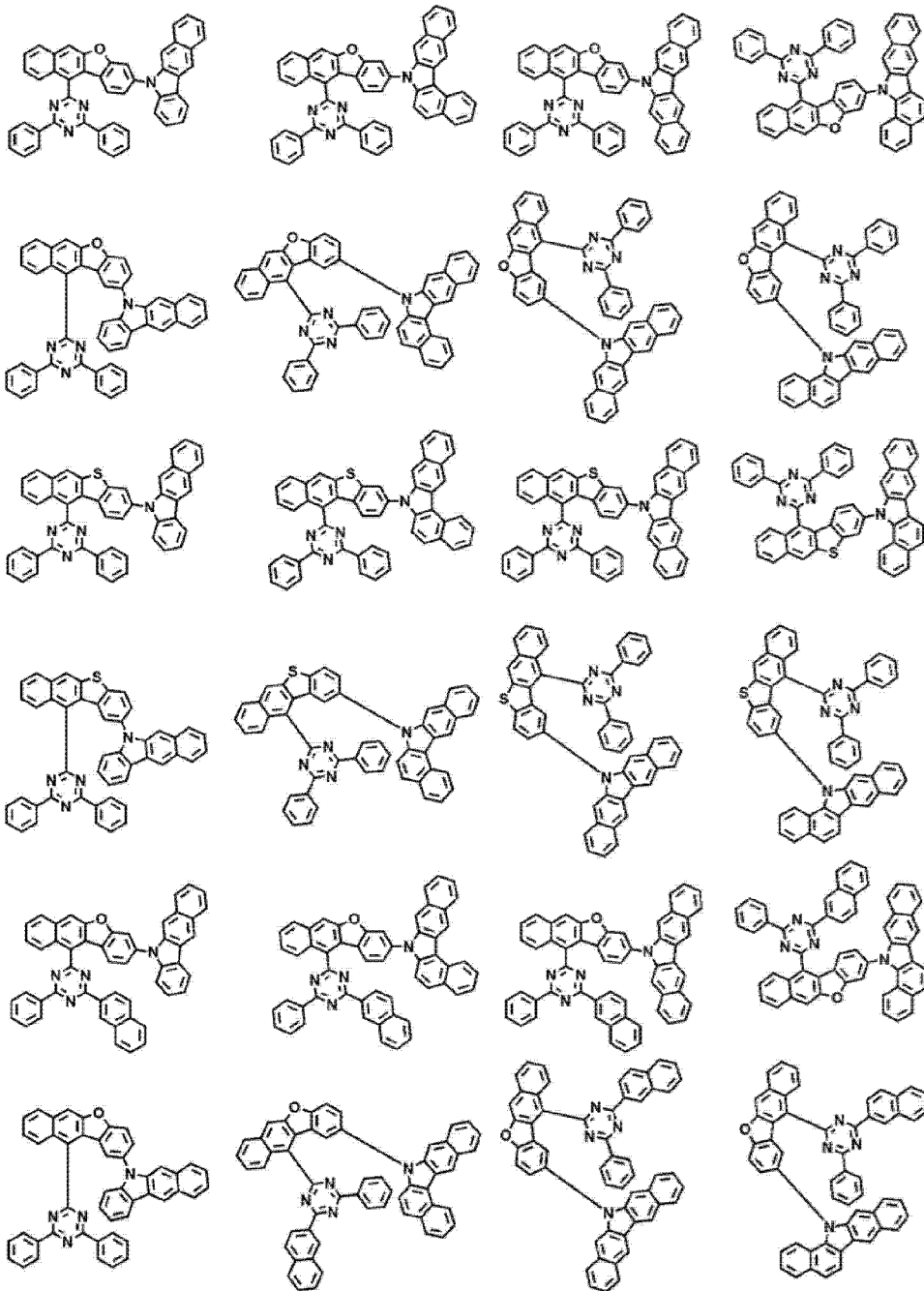
상기 화학식 2 내지 4에 있어서,
Y, R₁ 내지 R₃, R₆, R₁₁, R₁₂, a 및 d의 정의는 화학식 1에서의 정의와 같고,
R₇은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,
e는 1 내지 6의 정수이고, e가 2 이상인 경우, 2 이상의 R₇은 서로 같거나 상이하다.

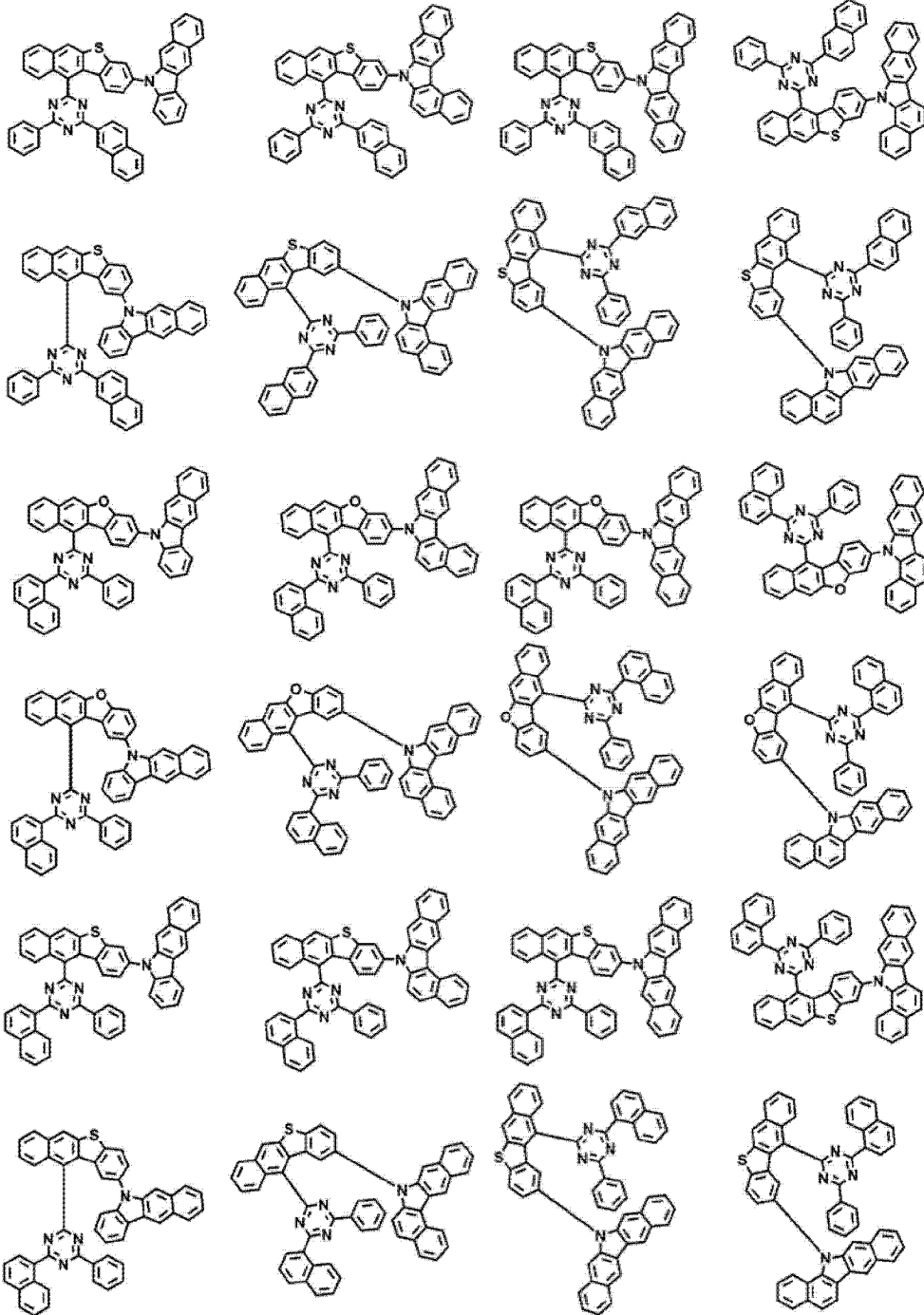
[청구항 6]

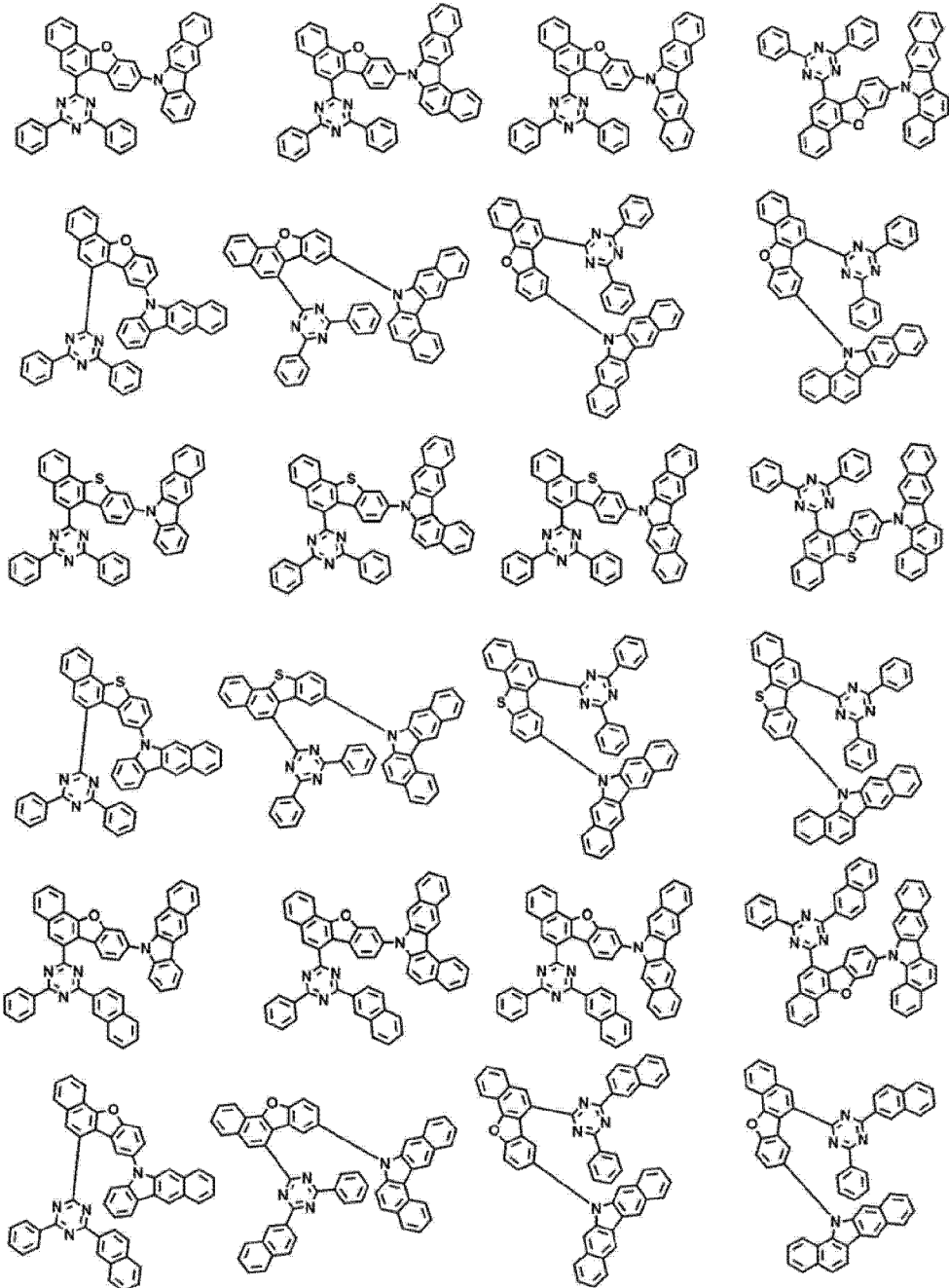
청구항 1에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

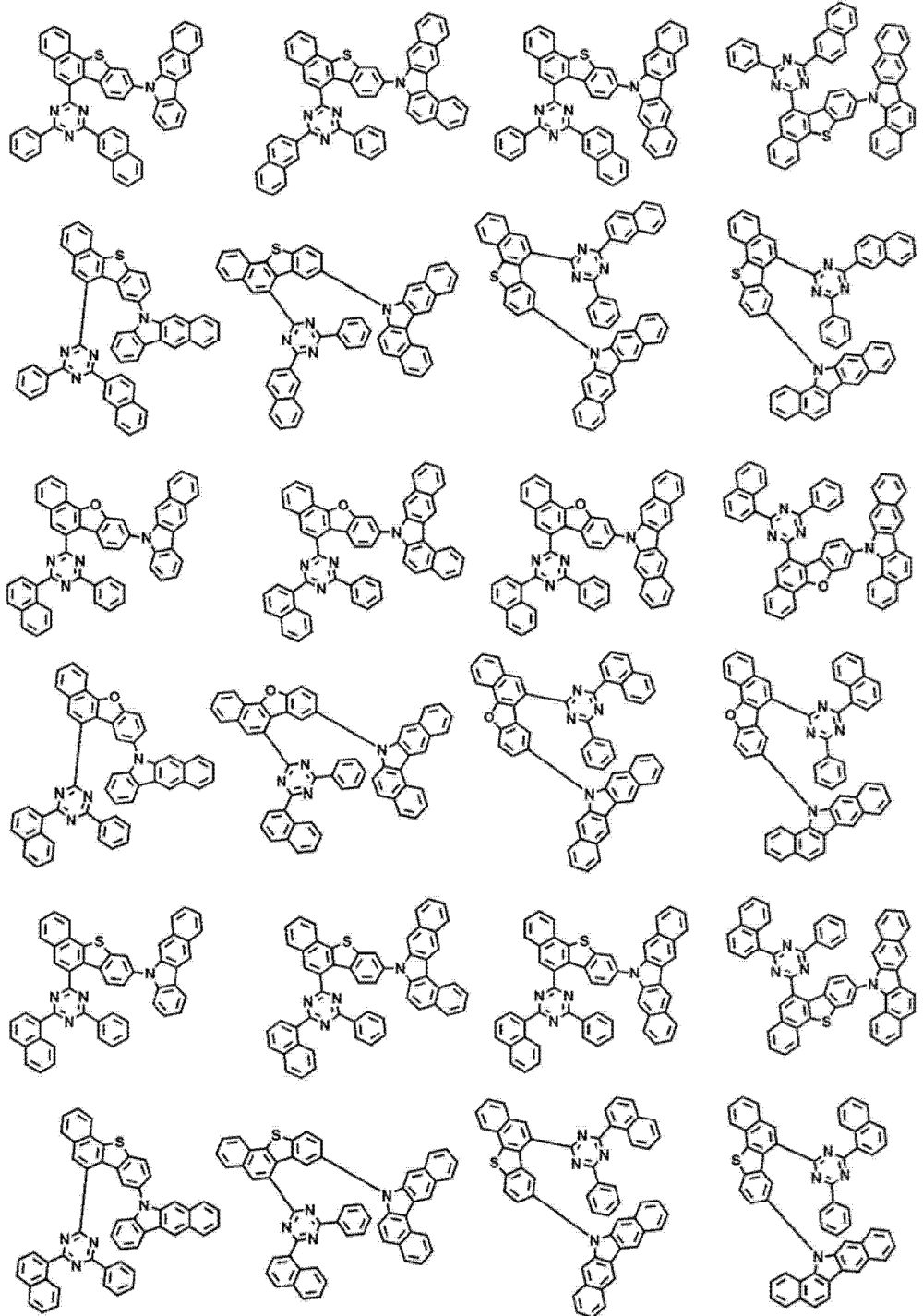












[청구항 7] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 6 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 8] 청구항 7에 있어서,
상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을

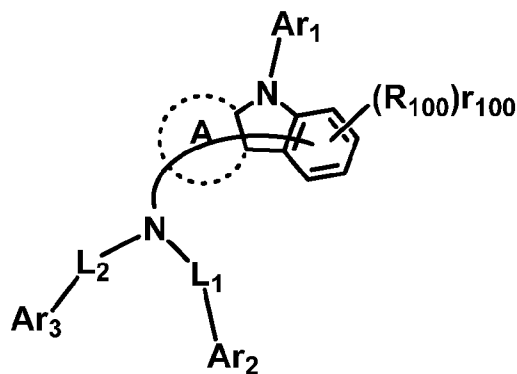
포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 9] 청구항 7에 있어서,
상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트 물질을 포함하며, 상기 호스트 물질은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 10] 청구항 7에 있어서,
상기 유기물층은 발광층, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층, 전자 차단층 및 정공 차단층으로 이루어진 군에서 선택되는 1층 또는 2층 이상을 더 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 11] 청구항 8에 있어서,
상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 제1 호스트로써 포함하고, 하기 화학식 100으로 표시되는 화합물을 제2 호스트로써 더 포함하는 것인 유기 발광 소자:

[화학식 100]



상기 화학식 100에 있어서,

A는 치환 또는 비치환된 나프탈렌이고,

Ar₁은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이며,

L₁ 및 L₂는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이며,

Ar₂ 및 Ar₃는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기이며,

R₁₀₀은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기;

치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

r₁₀₀은 0 내지 4의 정수이고, r₁₀₀이 2 이상인 경우 R₁₀₀은 서로 같거나 상이하다.

[도1]

6
5
2
1

[도2]

6
5
4
3
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2020/003492

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 405/14(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 405/14; C07C 211/54; C07D 209/56; C07D 307/91; C07D 403/04; C07D 405/04; C07D 487/04; C07D 491/048; C07D 409/14; 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) & Keywords: organic light emitting device, light emitting layer, host, dibenzofuran, dibenzothiophene, benzocarbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2018-0108426 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 04 October 2018 See claims 1, 6-12; paragraph [0196].	1-10
Y		11
Y	KR 10-2017-0101577 A (LG CHEM, LTD.) 06 September 2017 See claims 1, 11, 12, 14.	11
X	KR 10-2018-0045798 A (LG CHEM, LTD.) 04 May 2018 See claims 1, 9(page 18, sixth compound), 10, 13.	1-10
Y		11
X	KR 10-2018-0108427 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 04 October 2018 See claims 1, 8(compound 137), 11.	1-10
Y		11
X	KR 10-2018-0041607 A (LG CHEM, LTD.) 24 April 2018 See claims 1, 6(page 9, sixth compound), 7, 10.	1-10
Y		11



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

18 JUNE 2020 (18.06.2020)

Date of mailing of the international search report

18 JUNE 2020 (18.06.2020)

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/KR2020/003492

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2018-0108426 A	04/10/2018	CN 110506042 A	26/11/2019
		CN 110621668 A	27/12/2019
		EP 3604296 A1	05/02/2020
		EP 3604298 A1	05/02/2020
		KR 10-1943428 B1	30/01/2019
		KR 10-2018-0108428 A	04/10/2018
		KR 10-2019-0010694 A	30/01/2019
		TW 201840816 A	16/11/2018
		TW 201840818 A	16/11/2018
		US 2020-0111969 A1	09/04/2020
		US 2020-0123133 A1	23/04/2020
		WO 2018-174678 A1	27/09/2018
		WO 2018-174679 A1	27/09/2018
KR 10-2017-0101577 A	06/09/2017	CN 108698994 A	23/10/2018
		JP 2019-508410 A	28/03/2019
		KR 10-2116161 B1	27/05/2020
		WO 2017-150859 A1	08/09/2017
		WO 2017-150859 A9	08/09/2017
KR 10-2018-0045798 A	04/05/2018	CN 107973786 A	01/05/2018
		KR 10-1961334 B1	22/03/2019
KR 10-2018-0108427 A	04/10/2018	CN 110520420 A	29/11/2019
		CN 110573506 A	13/12/2019
		EP 3604297 A1	05/02/2020
		EP 3611173 A1	19/02/2020
		KR 10-2018-0108425 A	04/10/2018
		KR 10-2019-0010693 A	30/01/2019
		TW 201840815 A	16/11/2018
		TW 201840817 A	16/11/2018
		US 2020-0119285 A1	16/04/2020
		WO 2018-174681 A1	27/09/2018
		WO 2018-174682 A1	27/09/2018
KR 10-2018-0041607 A	24/04/2018	KR 10-1959512 B1	18/03/2019

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 405/14(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 405/14; C07C 211/54; C07D 209/56; C07D 307/91; C07D 403/04; C07D 405/04; C07D 487/04; C07D 491/048;
C07D 409/14; 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: 유기발광소자(organic light emitting device), 발광층(light emitting layer), 호스트(host), 디벤조퓨란(dibenzofuran), 디벤조티오펜(dibenzothiophene), 벤조카바졸(benzocarbazole)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2018-0108426 A (희성소재 株) 2018.10.04 청구항 1, 6-12; 단락 [0196]	1-10
Y		11
Y	KR 10-2017-0101577 A (주식회사 엘지화학) 2017.09.06 청구항 1, 11, 12, 14	11
X	KR 10-2018-0045798 A (주식회사 엘지화학) 2018.05.04 청구항 1, 9(페이지 18, 여섯 번째 화합물), 10, 13	1-10
Y		11
X	KR 10-2018-0108427 A (희성소재 株) 2018.10.04 청구항 1, 8(화합물 137), 11	1-10
Y		11
X	KR 10-2018-0041607 A (주식회사 엘지화학) 2018.04.24 청구항 1, 6(페이지 9, 여섯 번째 화합물), 7, 10	1-10
Y		11

☐ 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 06월 18일 (18.06.2020)

국제조사보고서 발송일

2020년 06월 18일 (18.06.2020)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



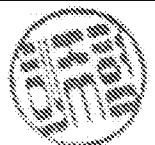
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-8150



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2018-0108426 A	2018/10/04	CN 110506042 A CN 110621668 A EP 3604296 A1 EP 3604298 A1 KR 10-1943428 B1 KR 10-2018-0108428 A KR 10-2019-0010694 A TW 201840816 A TW 201840818 A US 2020-0111969 A1 US 2020-0123133 A1 WO 2018-174678 A1 WO 2018-174679 A1	2019/11/26 2019/12/27 2020/02/05 2020/02/05 2019/01/30 2018/10/04 2019/01/30 2018/11/16 2018/11/16 2020/04/09 2020/04/23 2018/09/27 2018/09/27
KR 10-2017-0101577 A	2017/09/06	CN 108698994 A JP 2019-508410 A KR 10-2116161 B1 WO 2017-150859 A1 WO 2017-150859 A9	2018/10/23 2019/03/28 2020/05/27 2017/09/08 2017/09/08
KR 10-2018-0045798 A	2018/05/04	CN 107973786 A KR 10-1961334 B1	2018/05/01 2019/03/22
KR 10-2018-0108427 A	2018/10/04	CN 110520420 A CN 110573506 A EP 3604297 A1 EP 3611173 A1 KR 10-2018-0108425 A KR 10-2019-0010693 A TW 201840815 A TW 201840817 A US 2020-0119285 A1 WO 2018-174681 A1 WO 2018-174682 A1	2019/11/29 2019/12/13 2020/02/05 2020/02/19 2018/10/04 2019/01/30 2018/11/16 2018/11/16 2020/04/16 2018/09/27 2018/09/27
KR 10-2018-0041607 A	2018/04/24	KR 10-1959512 B1	2019/03/18