

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일

2024년 8월 15일 (15.08.2024)



WIPO PCT



(10) 국제공개번호

WO 2024/167337 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 405/14 (2006.01)

H10K 50/11 (2023.01)

C07D 409/14 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H10K 85/60 (2023.01)

MG, MK, MN, MU, 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.

(21) 국제출원번호:

PCT/KR2024/001891

(22) 국제출원일:

2024년 2월 8일 (08.02.2024)

(25) 출원언어:

한국어

(26) 공개언어:

한국어

(30) 우선권정보:

10-2023-0017584 2023년 2월 9일 (09.02.2023) KR

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

(72) 발명자: 김훈준 (KIM, Hoon Jun); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한미연 (HAN, Miyeon); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이정하 (LEE, Jung-ha); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 오중석 (OH, Joongsuk); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 조혜민 (CHO, Hye Min); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이호중 (LEE, Ho-jung); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 허정희 (HEO, Jeong-hoe); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

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

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD,

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

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

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

4
3
2
1

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

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

WO 2024/167337 A1

명세서

발명의 명칭: 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자 기술분야

[1] 관련 출원(들)과의 상호 인용

[2] 본 출원은 2023년 2월 9일자 한국 특허 출원 제10-2023-0017584호에 기초한 우선권의 이익을 주장하며, 해당 한국 특허 출원의 문헌에 개시된 모든 내용은 본 명세서의 일부로서 포함된다.

[3]

[4] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

[5]

배경기술

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

[7]

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

[9]

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

[11]

[12] [선행기술문헌]

[13] [특허문헌]

[14] (특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호

[15]

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[16] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

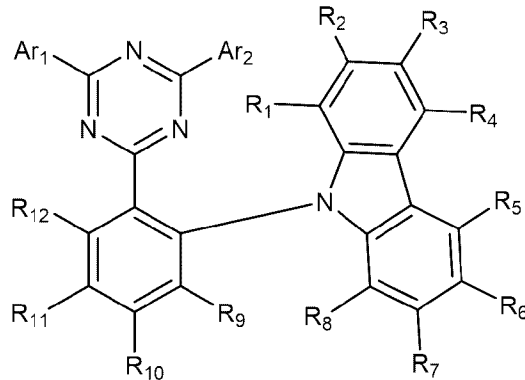
[17]

과제 해결 수단

[18] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[19] [화학식 1]

[20]



[21] 상기 화학식 1에서,

[22] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

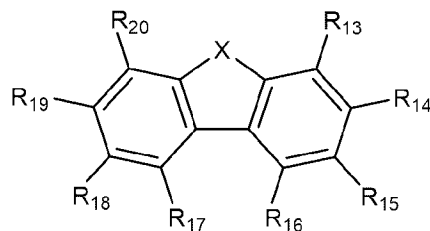
[23] R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고, 단, R₁ 내지 R₈ 중 적어도 하나는 중수소이고,

[24] R₉ 내지 R₁₁ 중 어느 하나는 하기 화학식 2와의 결합이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고,

[25] R₁₂는 수소 또는 중수소이고,

[26] [화학식 2]

[27]



[28] 상기 화학식 2에서,

[29] X는 O 또는 S이고,

[30] R₁₃ 내지 R₁₆ 중 어느 하나는 상기 화학식 1과의 결합이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

[31] R₁₇ 내지 R₂₀은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이다.

[32]

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

[34]

발명의 효과

[35] 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물 층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압, 및/또는 수명 특성 향상 효과를 나타낼 수 있다. 특히, 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입 및 수송, 전자억제, 발광, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다.

[36]

도면의 간단한 설명

[37] 도 1은 기판(1), 양극(2), 유기물층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

[38] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자억제층(7), 발광층(8), 정공억제층(9), 전자수송층(10), 전자주입층(11) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

[39] 도 3은 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자억제층(7), 발광층(8), 정공억제층(9), 전자주입 및 수송층(12) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

[40]

발명의 실시를 위한 형태

[41] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

[42]

[43] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[44]

[45] 본 명세서 있어서, $\frac{a}{b}$ 및 $\frac{c}{d}$ 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미하고, "D"는 중수소를 의미한다.

[46]

[47] 본 명세서 있어서, "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐릴기일 수 있다. 즉, 비페닐릴기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다. 일례로, "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 "비치환되거나, 또

는 중수소, 할로젠, 시아노, C_{1-10} 알킬, C_{1-10} 알콕시 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된"; 또는 "비치환되거나, 또는 중수소, 할로젠, 시아노, 메틸, 에틸, 페닐 및 나프틸로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된"이라는 의미로 이해될 수 있다. 또한, 본 명세서 있어서, "1개 이상의 치환기로 치환된"이라는 용어는 "1개 내지 치환 가능한 수소의 최대 개수로 치환된"이라는 의미로 이해될 수 있다. 또는, 본 명세서 있어서, "1개 이상의 치환기로 치환된"이라는 용어는 "1개 내지 5개의 치환기로 치환된", 또는 "1개 또는 2개의 치환기로 치환된"이라는 의미로 이해될 수 있다.

[48]

[49] 본 명세서 있어서, "상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된다"는 것은 어느 하나의 치환기의 수소가 다른 치환기로 치환된 것을 말한다.

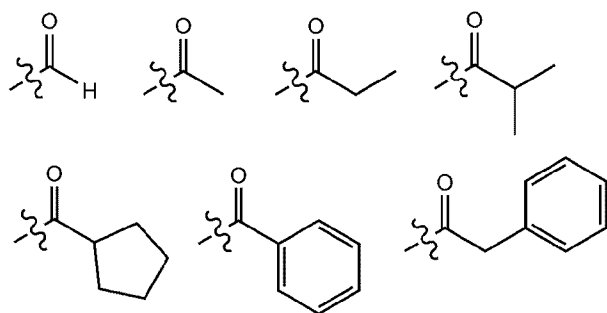
[50]

[51] 본 명세서 있어서, "화학식 또는 화합물 구조에 치환기가 표시되지 않은 경우"에 있어서, 중수소의 함량이 0%, 수소의 함량이 100% 등 중수소를 명시적으로 배제하지 않는 한, 화학식 또는 화합물 구조 내에 수소와 중수소가 혼재되어 있는 것으로 볼 수 있다.

[52]

[53] 본 명세서 있어서, 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

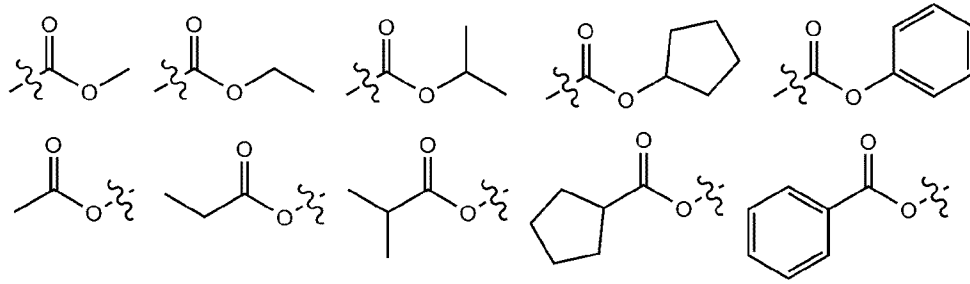
[54]



[55]

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

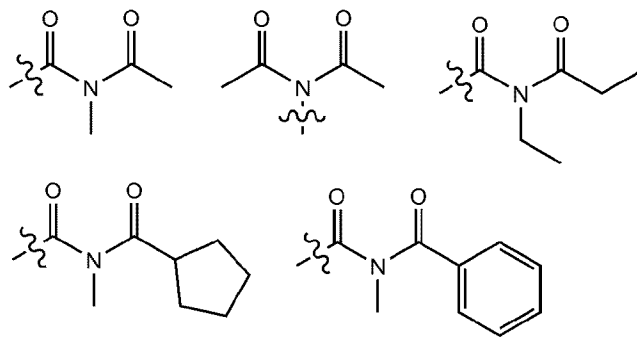
[57]



[58]

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

[60]



[61]

[62] 본 명세서에 있어서, 치환 또는 비치환된 실릴기는 $-\text{Si}(\text{Z}_1)(\text{Z}_2)(\text{Z}_3)$ 를 의미하고, 여기서 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_{1-60} 알킬, 치환 또는 비치환된 C_{1-60} 할로알킬, 치환 또는 비치환된 C_{2-60} 알케닐, 치환 또는 비치환된 C_{2-60} 할로알케닐, 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_{1-10} 알킬, 치환 또는 비치환된 C_{1-10} 할로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-20} 아릴일 수 있다. 상기 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[63]

[64] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[65]

[66] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 플루오로, 클로로, 브로모, 또는 아이오도가 있다.

[67]

[68] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상

기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸프로필, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 이소헵틸, 1-메틸헵틸, 2-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, 4-메틸헵틸, 5-메틸헵틸, 사이클로펜틸메틸, 사이클로헵틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵틸, 2,4,4-트리메틸-1-펜틸, 2,4,4-트리메틸-2-펜틸, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[69]

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

[71]

[72] 본 명세서에 있어서, 상기 지방족고리기(Alicyclic group)는 고리 형성 원자로 탄소만을 포함하면서 방향족성을 갖지 않는 포화 또는 불포화 탄화수소 고리 화합물로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하는 것으로, 단환 또는 축합다환 화합물 모두를 포괄하는 것으로 이해된다. 일 실시상태에 따르면, 상기 지방족고리기의 탄소수는 3 내지 60 이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 지방족고리기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 지방족고리기의 탄소수는 3 내지 20이다. 이러한 지방족고리기의 예로 사이클로알킬기와 같은 단일 고리기(monocyclic group), 다리 걸친 탄화수소기(bridged hydrocarbon group), 스피로 고리 탄화수소기(spiro hydrocarbon group), 방향족 탄화수소 화합물의 수소화된 유도체로부터 유래된 치환기 등을 들 수 있다.

[73]

[74] 구체적으로, 상기 사이클로알킬기의 예로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[75]

[76] 또한, 상기 다리 걸친 탄화수소기의 예로 바이사이클로[1.1.0]부틸, 바이사이클로[2.2.1]헵틸, 바이사이클로[4.2.0]옥타-1,3,5-트리에닐, 아다만틸, 데칼리닐 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[77]

[78] 또한, 상기 스피로 고리 탄화수소기의 예로 스피로[3.4]옥틸, 스피로[5.5]운데카닐 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[79]

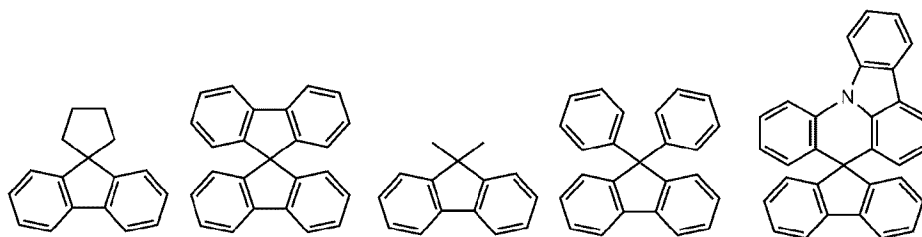
[80] 또한, 상기 방향족 탄화수소 화합물의 수소화된 유도체로부터 유래된 치환기는 단환 또는 다환의 방향족 탄화수소 화합물의 불포화 결합 일부에 수소가 첨가된 화합물로부터 유래된 치환기를 의미하는 것으로, 이러한 치환기의 예로 1*H*-인데닐, 2*H*-인데닐, 4*H*-인데닐, 2,3-디하이드로-1*H*-인데닐, 1,4-디하이드로나프탈레닐, 1,2,3,4-테트라하이드로나프탈레닐, 6,7,8,9-테트라하이드로-5*H*-벤조[7]아눌레닐(6,7,8,9-tetrahydro-5*H*-benzo[7]annulenyl), 6,7-디하이드로-5*H*-벤조사이클로헵테닐 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[81]

[82] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 고리 형성 원자로 탄소만을 포함하면서 방향족성을 갖는 단환 또는 축합다환 화합물로부터 유래된 치환기를 의미하는 것으로 이해되며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐릴기, 터페닐릴기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[83]

[84] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다. 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, 등이 될 수



있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[85]

[86] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기(Heterocyclic group)는 고리 형성 원자로 탄소 외에 O, N, Si 및 S 중에서 선택되는 1개 이상의 헤테로원자를 더 포함하는 단환 또는 축합다환 화합물로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하는 것으로, 방향

족성을 갖는 치환기 또는 방향족성을 갖지 않는 치환기 모두를 포괄하는 것으로 이해된다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 탄소수 2 내지 60이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 20이다. 이러한 헤테로고리기의 예로 헤테로아릴기, 헤테로방향족 화합물의 수소화된 유도체로부터 유래된 치환기 등을 들 수 있다.

[87]

[88] 구체적으로, 상기 헤테로아릴기는 고리 형성 원자로 탄소 외에 N, O 및 S 중에서 선택되는 1개 이상의 헤테로원자를 더 포함하는 단환 또는 축합다환 화합물로부터 유래된 치환기를 의미하는 것으로, 방향족성을 갖는 치환기를 의미한다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 탄소수 2 내지 60이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 20이다. 상기 헤테로아릴기의 예로 티오펜일기, 퓨라닐기, 피롤일기, 이피다졸일기, 티아졸일기, 옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아졸일기, 피리디닐기, 비피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 아크리디닐기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도피리미디닐기, 피리도피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌일기, 카바졸일기, 벤즈옥사졸일기, 벤조이피다졸일기, 벤조티아졸일기, 벤조카바졸일기, 벤조티오펜일기, 디벤조티오펜일기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 페난트롤리닐기, 이소옥사졸일기, 티아디아졸일기 및 페노티아지닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[89]

[90] 또한, 상기 헤테로방향족 화합물의 수소화된 유도체로부터 유래된 치환기는 단환 또는 다환의 헤테로방향족 화합물의 불포화 결합 일부에 수소가 첨가된 화합물로부터 유래된 치환기를 의미하는 것으로, 이러한 치환기의 예로 1,3-디하이드로이소벤조퓨라닐(1,3-dihydroisobenzofuranyl), 2,3-디하이드로벤조퓨라닐(2,3-dihydrobenzofuranyl), 1,3-디하이드로벤조[c]티오펜일(1,3-dihydrobenzo[c]thiophenyl), 2,3-디하이드로[b]티오펜일(2,3-디하이드로[b]티오펜일) 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[91]

[92] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴실릴기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수

있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[93]

[94] 본 명세서에 있어서, "중수소화된 또는 중수소로 치환된"이라는 의미는 화합물, 2가의 연결기 또는 1가의 치환기 내 치환 가능한 수소 중 적어도 하나가 중수소로 치환됨을 의미한다.

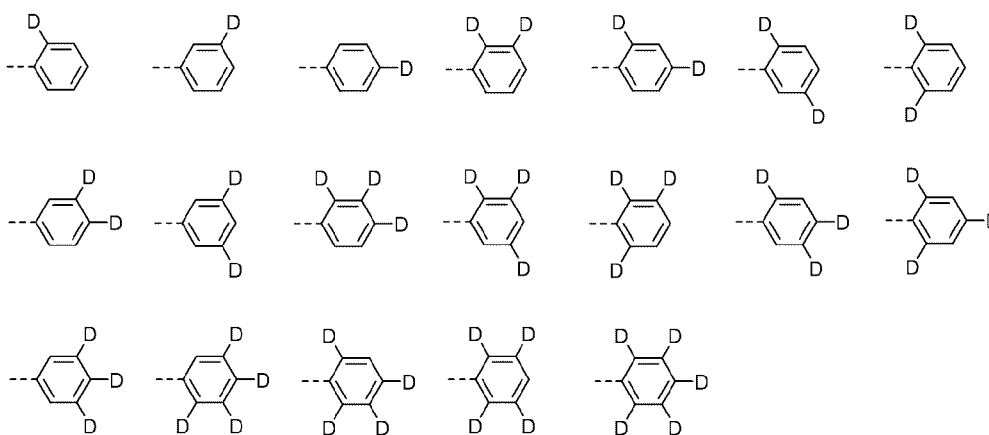
[95]

[96] 또한, "비치환되거나 또는 중수소로 치환된" 또는 "중수소로 치환 또는 비치환된"이라는 의미는 "비치환되거나 또는 치환 가능한 수소 중 1개 내지 최대 개수가 중수소로 치환된"을 의미한다. 일례로, "비치환되거나 또는 중수소로 치환된 페난트릴"이라는 용어는 페난트릴 구조 내 중수소로 치환 가능한 수소의 최대 개수가 9개라는 점 고려할 때, "비치환되거나 또는 1개 내지 9개의 중수소로 치환된 페난트릴"이라는 의미로 이해될 수 있다.

[97]

[98] 또한, "중수소화된 구조"라는 의미는 적어도 하나의 수소가 중수소로 치환된 모든 구조의 화합물, 2가의 연결기 또는 1가의 치환기를 포괄하는 것을 의미한다. 일례로, 페닐의 중수소화된 구조는 하기와 같이 페닐기 내 치환가능한 적어도 하나의 수소가 중수소로 치환된 모든 구조의 1가의 치환기들을 일컫는 것으로 이해될 수 있다.

[99]



[100]

[101] 또한, 화합물의 "중수소 치환율" 또는 "중수소화도"는 화합물 내 존재할 수 있는 수소의 총 개수(화합물 내 중수소로 치환 가능한 수소의 개수 및 치환된 중수소의 개수의 총 합)에 대한 치환된 중수소의 개수의 비율을 백분율로 계산한 것을 의미한다. 따라서 화합물의 "중수소 치환율" 또는 "중수소화도"가 "K%"라고

함은, 화합물 내 중수소로 치환 가능한 수소 중 K%가 중수소로 치환된 것을 의미한다.

[102]

[103] 이 때, 화합물의 중수소 치환 여부는 MALDI-TOF MS(Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization Time-of-Flight Mass Spectrometer), 핵자기 공명 분광법(^1H NMR), TLC/MS(Thin-Layer Chromatography/Mass Spectrometry), 또는 GC/MS(Gas Chromatography/Mass Spectrometry) 등을 이용하여 통상적으로 알려진 방법에 따라 측정할 수 있다.

[104]

[105] 보다 구체적으로, MALDI-TOF MS를 이용하는 경우, 상기 "중수소 치환율" 또는 "중수소화도"는 MALDI-TOF MS 분석을 통해 화합물 내에 치환된 중수소 개수를 구한 다음, 화합물 내 존재할 수 있는 수소의 총 개수 대비 치환된 중수소의 개수의 비율을 백분율로 계산하여 구할 수 있다.

[106]

[107] 또한, TLC/MS를 이용하는 경우, 상기 "중수소 치환율" 또는 "중수소화도"는 반응의 종결시점에 분자량들이 이루는 분포의 최대값(max.값)을 기준으로 치환율을 계산하여 구할 수 있다.

[108]

[109] 또한, 핵자기 공명 분광법(^1H NMR)을 이용하는 경우, 상기 "중수소 치환율" 또는 "중수소화도"는 ^1H NMR 상의 integration 비율을 이용하여 총 peak의 적분량으로부터 계산하여 구할 수 있다.

[110]

[111] 한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[112]

[113] 상기 화학식 1의 화합물은 트리아진과 오쏘(ortho) 위치에 결합된 카바졸을 포함하며, 상기 카바졸은 하나 이상의 중수소를 포함한다. 또한 상기 화학식 1의 화합물은, 트리아진 및 카바졸이 결합한 벤젠 고리에 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이 결합하되, 트리아진에 대하여 오쏘(ortho) 위치가 아닌 탄소에 결합한 구조를 갖는다. 이러한 구조를 만족함에 따라 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자에 사용되어 저전압, 고효율, 및 장수명 특성을 나타낼 수 있다.

[114]

[115] 보다 구체적으로, 본 발명의 발명자들은 벤젠 고리를 기준으로 카바졸일기가 트리아진의 오쏘(ortho) 위치에 치환된 구조를 갖는 화합물의 경우, 입체 장애가 유발되어 트리아진 모이어티와 카바졸 모이어티가 뒤튼 형태를 갖게 되고, 이러한 구조에서 카바졸일기의 전자 주개(electron donating) 특성으로 인해 전체적인 분자의 안정성은 증가되면서, 전자 분포는 분리되어, 상기 화합물이 추가적인

CT(charge transfer) 특성을 가지게 되고, 이를 통해 상기 화합물을 채용한 소자의 전압 및 효율 증가가 유도됨을 확인하여, 본 발명을 완성하였다.

[116]

[117] 다만, 이러한 구조에서는 카바졸일기의 전자 부족 현상이 야기될 수 있는 바, 이러한 문제의 극복을 위해 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 카바졸일기에 수소 대신 중수소 또는 아릴기를 가지면서, 벤젠 고리에 디벤조플라닐 또는 디벤조티오펜을 추가로 포함하고, 이에 따라 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 분자의 안정성 및 전자 특성이 극대화될 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 채용하는 유기 발광 소자의 수명 특성이 보다 향상될 수 있다.

[118]

[119] 바람직하게는, 상기 화학식 1의 R_{10} 이 화학식 2와의 결합이고, R_9 및 R_{11} 은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이거나; 또는

[120] 상기 화학식 1의 R_{11} 이 화학식 2와의 결합이고, R_9 및 R_{10} 은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소일 수 있다.

[121]

[122] 또한, 상기 화학식 2의 R_{13} 이 상기 화학식 1과의 결합이고, R_{14} , R_{15} 및 R_{16} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이거나;

[123] 상기 화학식 2의 R_{14} 가 상기 화학식 1과의 결합이고, R_{13} , R_{15} 및 R_{16} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이거나;

[124] 상기 화학식 2의 R_{15} 가 상기 화학식 1과의 결합이고, R_{13} , R_{14} 및 R_{16} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이거나; 또는

[125] 상기 화학식 2의 R_{16} 이 상기 화학식 1과의 결합이고, R_{13} , R_{14} 및 R_{15} 는 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴일 수 있다.

[126]

[127] 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-6 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[128] [화학식 1-1]

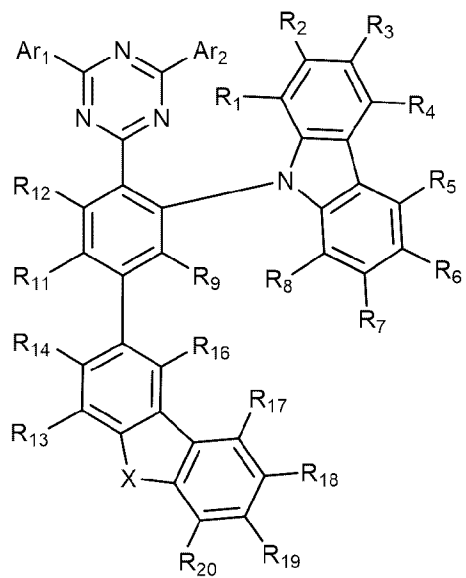
[illegible]

[화학식 1-2]

[illegible]

[화학식 1-3]

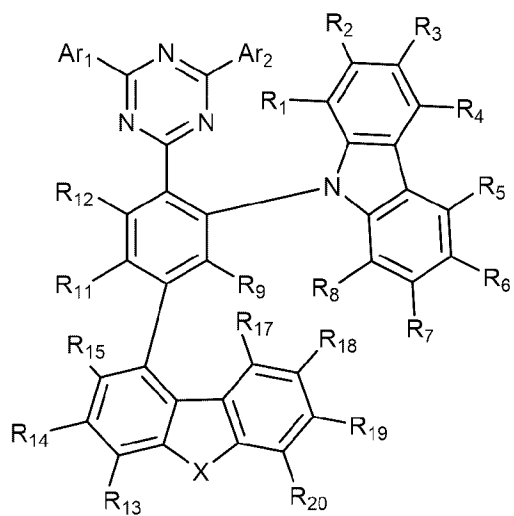
[133]



[134]

[화학식 1-4]

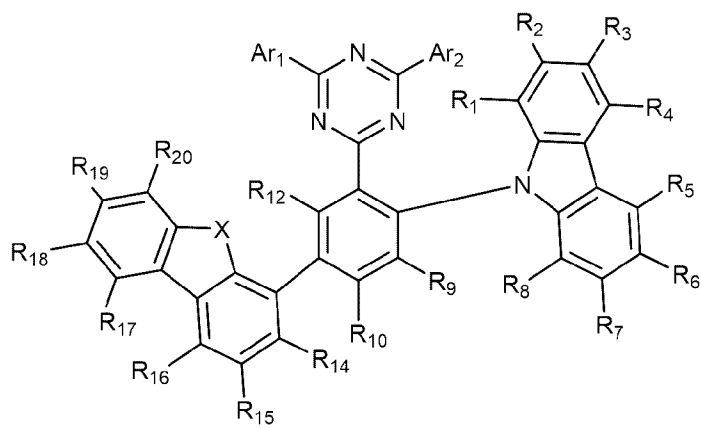
[135]



[136]

[화학식 1-5]

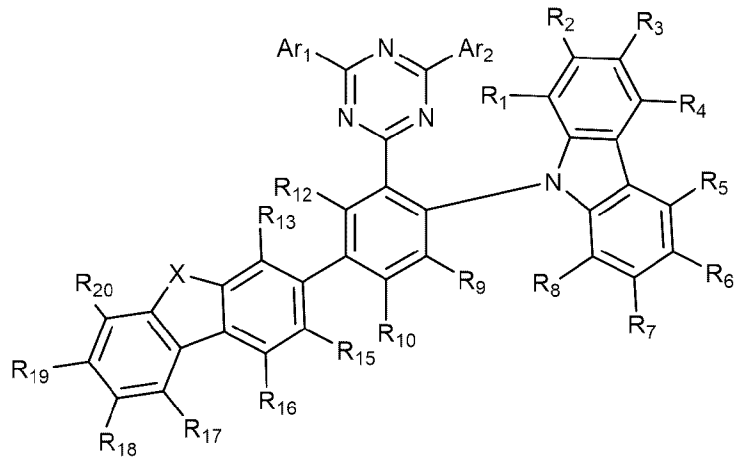
[137]



[138]

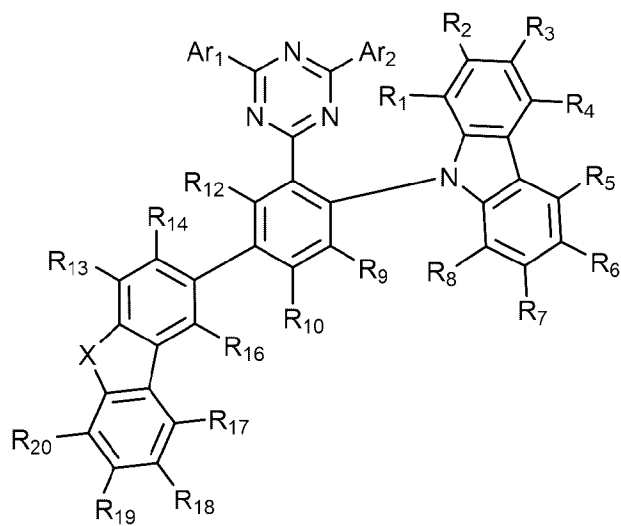
[화학식 1-6]

[139]



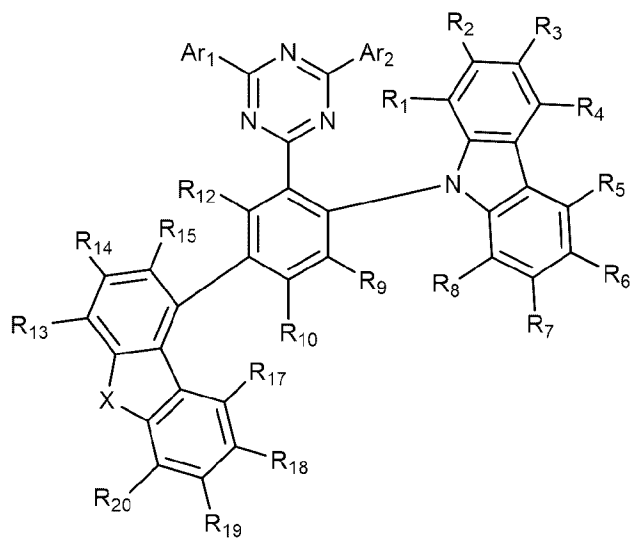
[140] [화학식 1-7]

[141]



[142] [화학식 1-8]

[143]



[144] 상기 화학식 1-1 내지 1-8에서,

[145] Ar₁, Ar₂, X, 및 R₁ 내지 R₂₀은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[146]

- [147] 바람직하게는, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 중수소; 또는 중수소로 치환 또는 비치환된 C_{6-20} 아릴이다.
- [148]
- [149] 바람직하게는, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 중수소; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐(바람직하게는, 5개의 중수소로 치환된 페닐)이다.
- [150]
- [151] 보다 바람직하게는, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 중수소; 또는 5개의 중수소로 치환된 페닐이다.
- [152]
- [153] 바람직하게는, R_1 내지 R_8 는 모두 중수소이거나; 또는 R_1 내지 R_8 중 어느 하나는 중수소로 치환 또는 비치환된 C_{6-12} 아릴이고, 나머지는 모두 중수소일 수 있다.
- [154]
- [155] 일례로, R_1 내지 R_8 는 모두 중수소일 수 있다. 또는, R_1 내지 R_8 중 어느 하나는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐이고, 나머지는 중수소일 수 있다.
- [156]
- [157] 바람직하게는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_{6-20} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-20} 헤테로아릴이다.
- [158]
- [159] 바람직하게는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐; 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐; 비페닐릴; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 비페닐릴이다.
- [160]
- [161] 바람직하게는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐(바람직하게는, 5개의 중수소로 치환된 페닐)이다.
- [162]
- [163] 바람직하게는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐; 또는 15개의 중수소로 치환된 페닐이다.
- [164]
- [165] 바람직하게는, R_9 내지 R_{11} 중 화학식 2와 결합하지 않은 나머지는 모두 수소이다.
- [166]
- [167] 바람직하게는, R_{12} 는 수소이다.
- [168]
- [169] 바람직하게는, R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-20} 아릴이다.
- [170]

[171] 바람직하게는, R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 페닐; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐이다.

[172]

[173] 바람직하게는, R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 이 모두 수소이거나; 모두 중수소이거나; R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 비치환된 C_{6-20} 아릴이고, 나머지는 모두 수소이거나; 또는 R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 치환 가능한 모든 위치가 중수소로 치환된 C_{6-20} 아릴이고, 나머지는 모두 중수소이다.

[174]

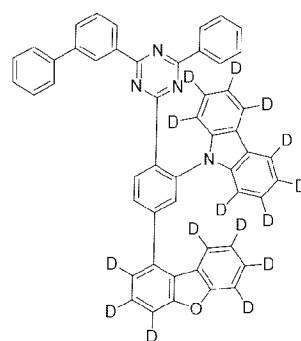
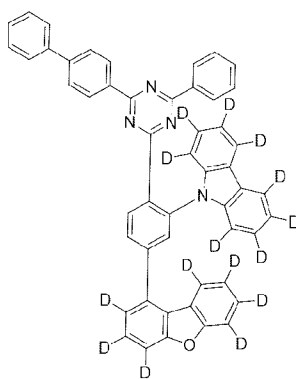
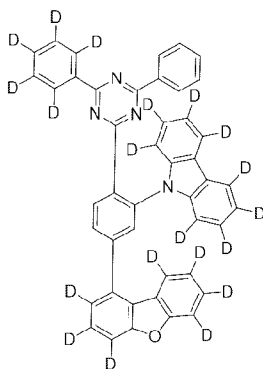
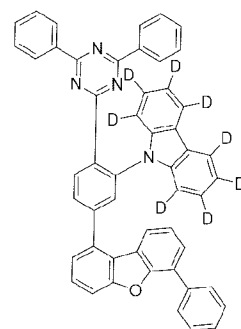
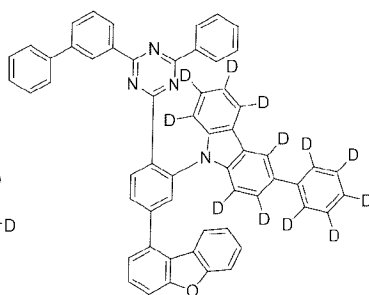
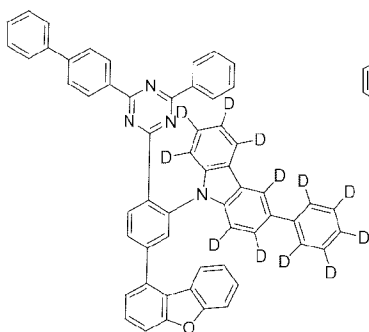
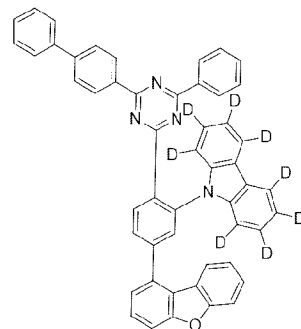
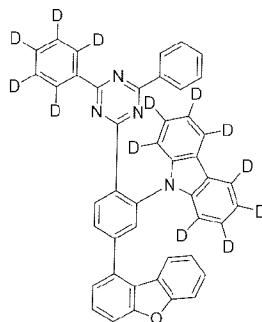
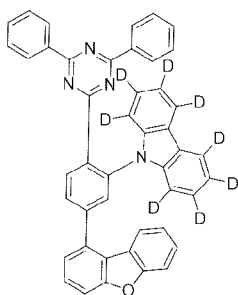
[175] 보다 바람직하게는, R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 이 모두 수소이거나; 모두 중수소이거나; R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 페닐이고 나머지는 모두 수소이거나; 또는 R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 5개의 중수소로 치환된 페닐이고, 나머지는 모두 중수소이다.

[176]

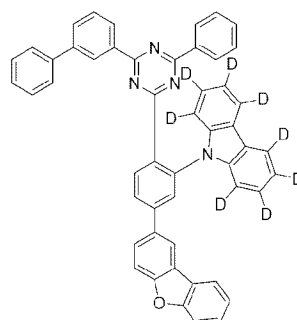
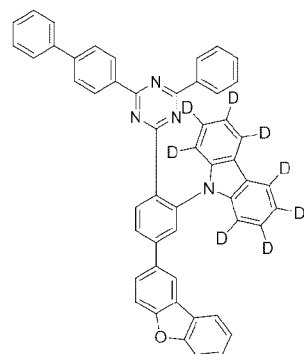
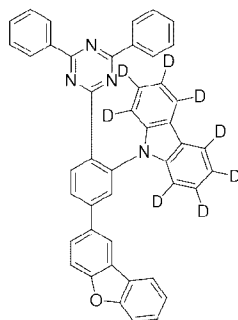
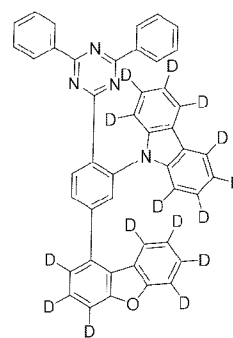
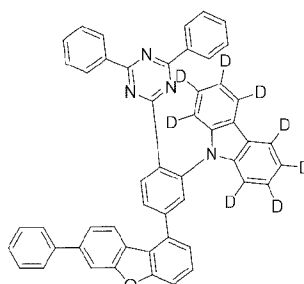
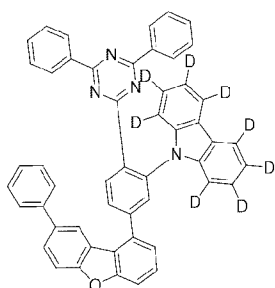
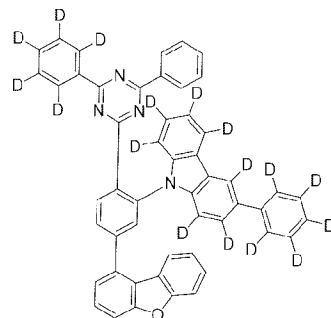
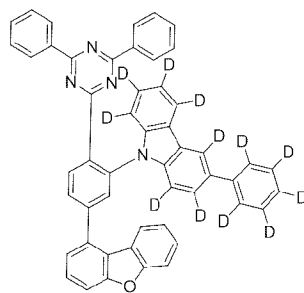
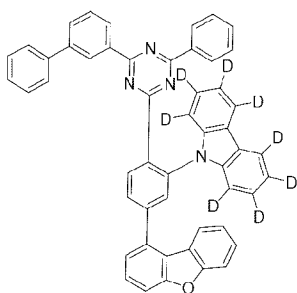
[177] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예는 다음과 같다:

[178]

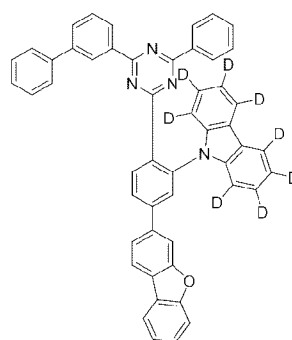
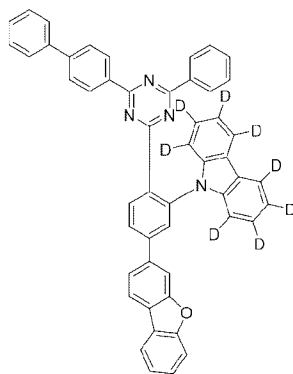
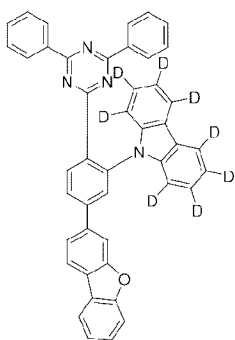
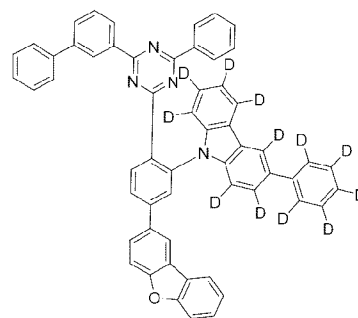
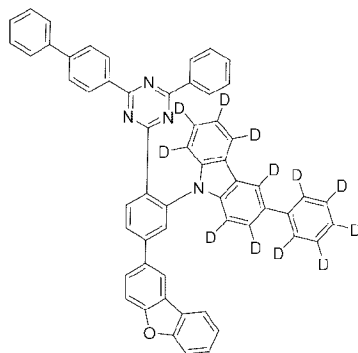
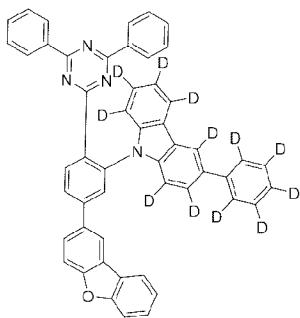
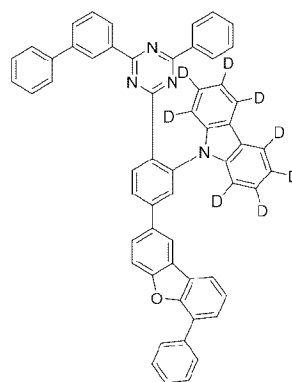
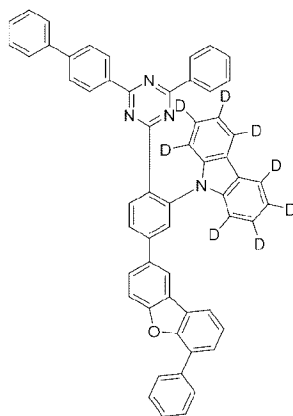
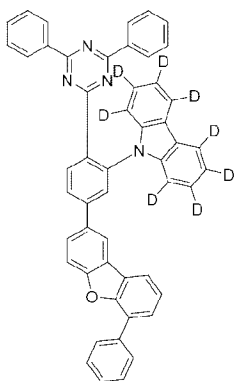
[179]



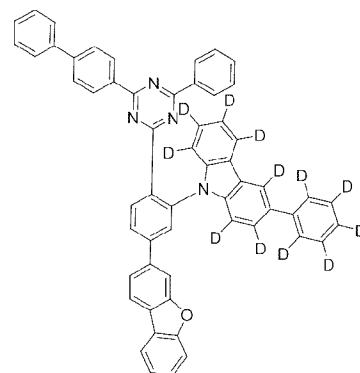
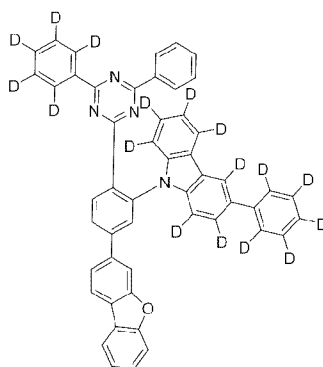
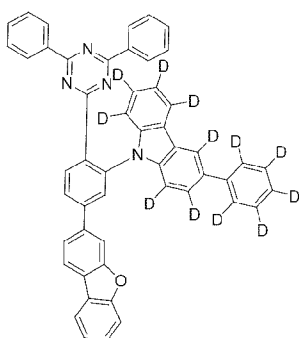
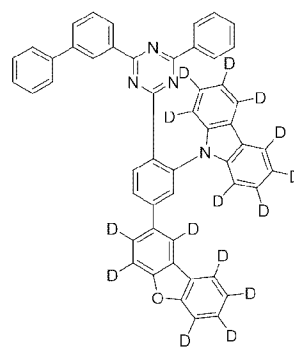
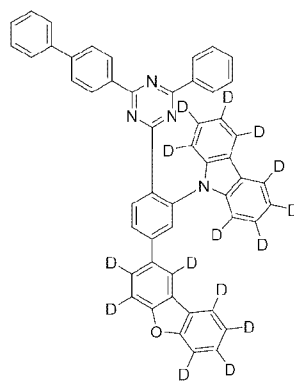
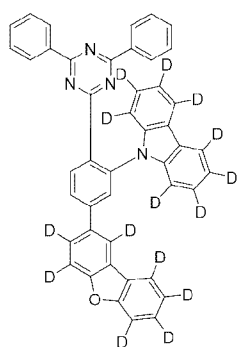
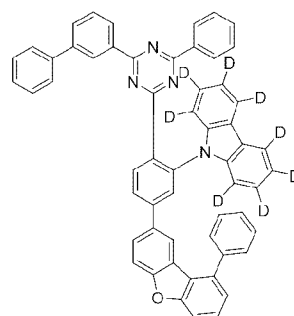
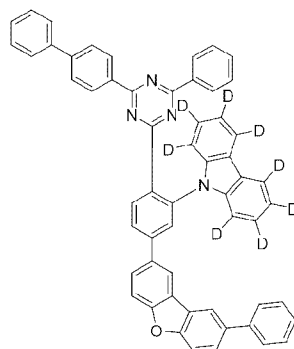
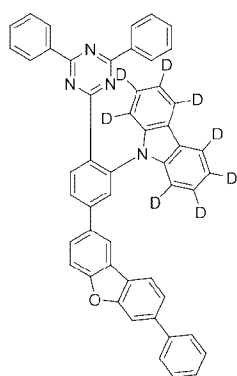
[180]



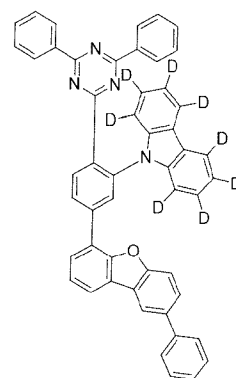
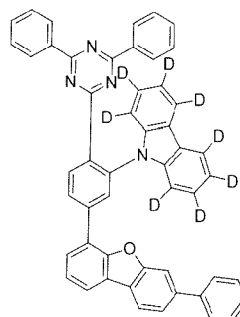
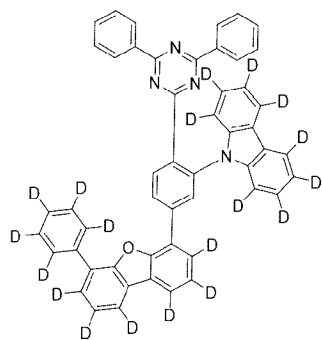
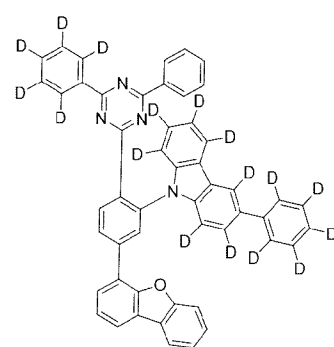
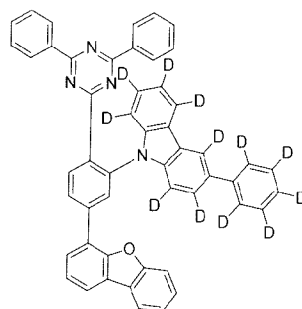
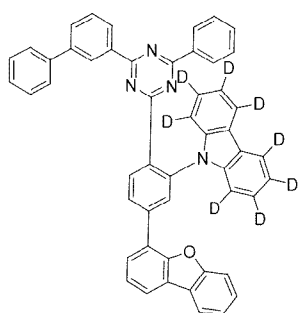
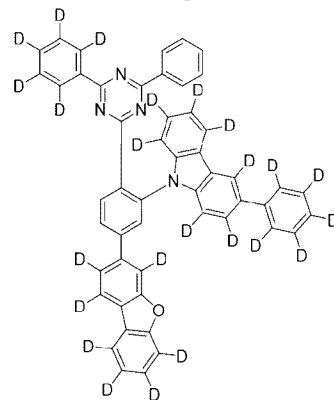
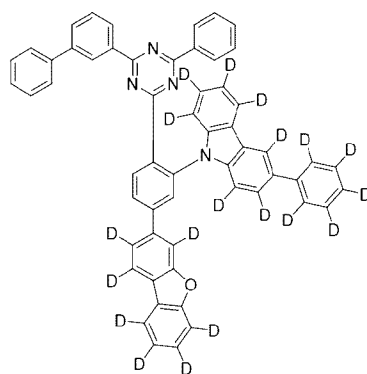
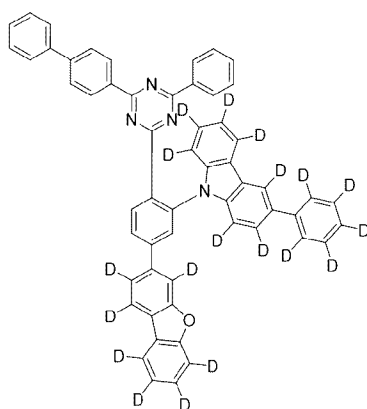
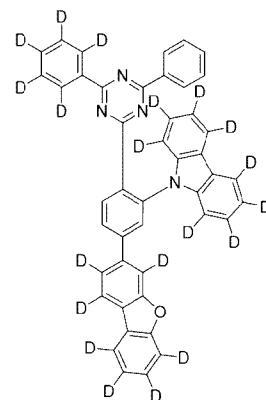
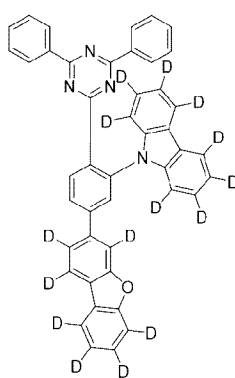
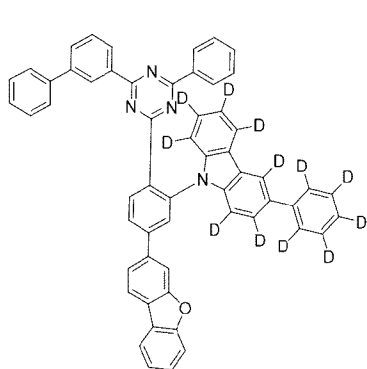
[181]



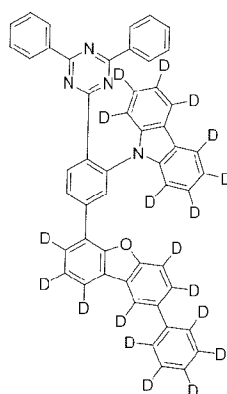
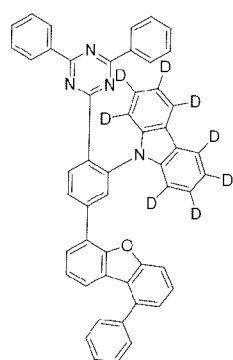
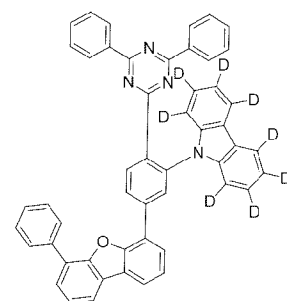
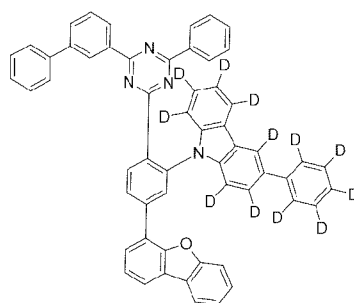
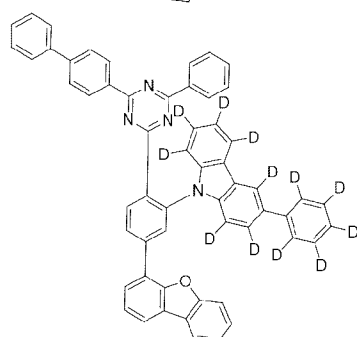
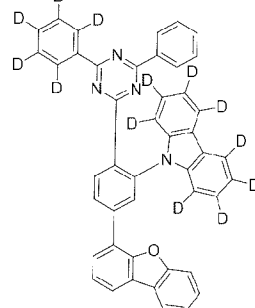
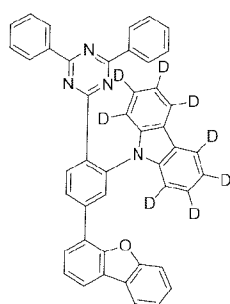
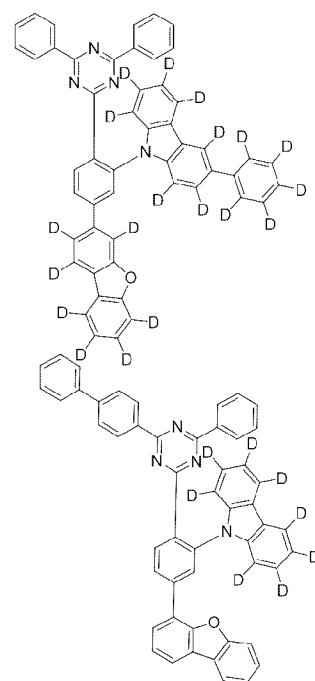
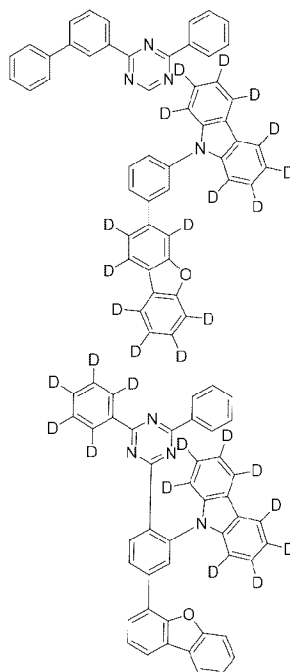
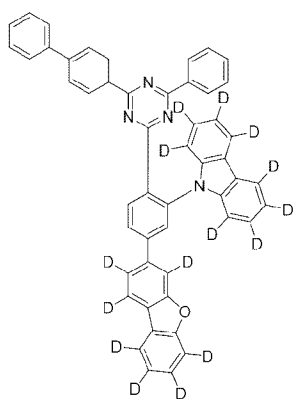
[182]



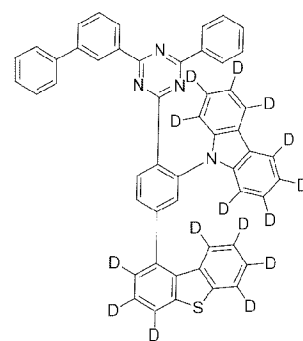
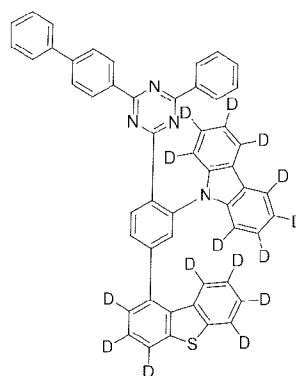
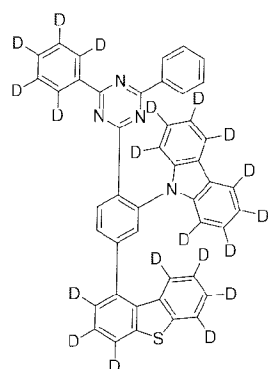
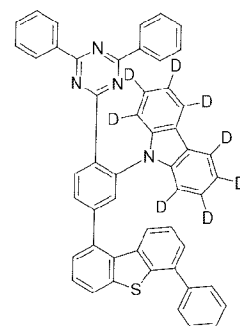
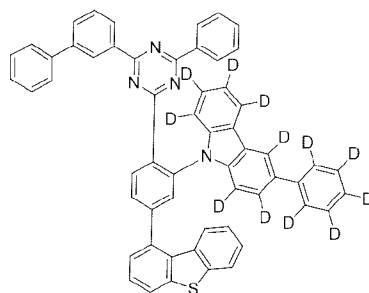
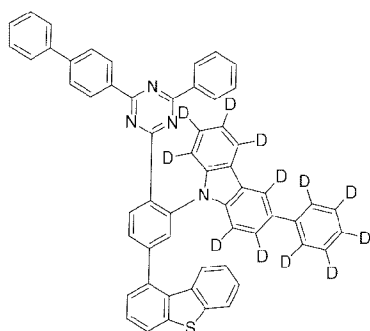
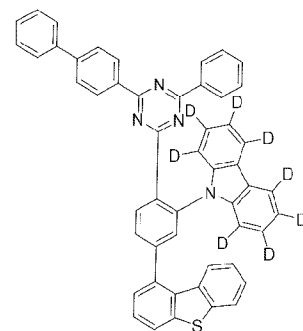
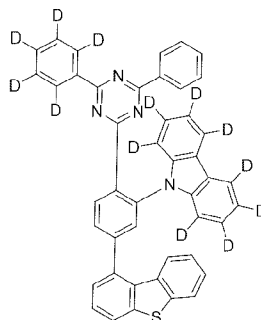
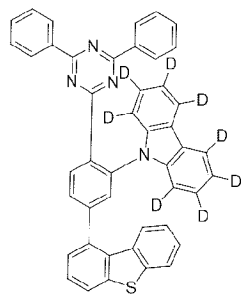
[183]



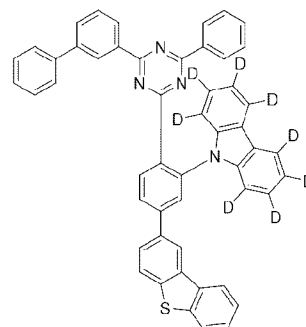
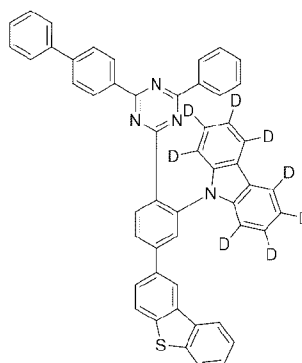
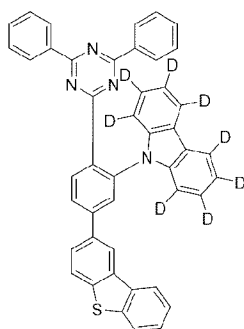
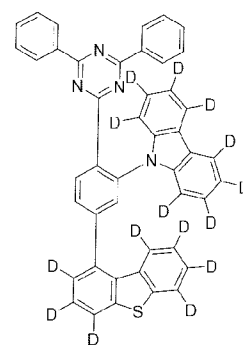
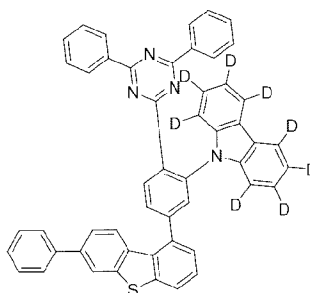
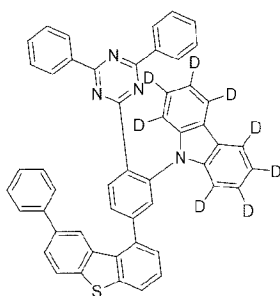
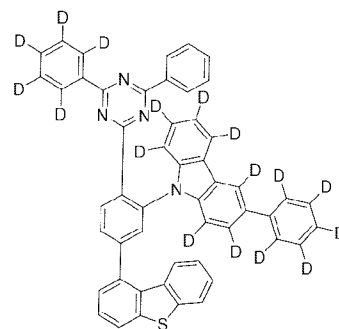
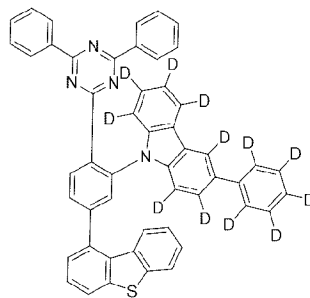
[184]



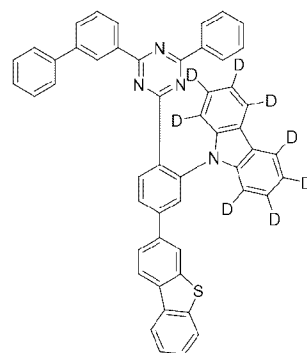
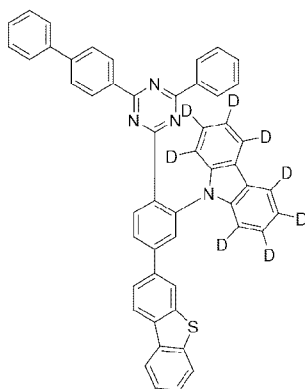
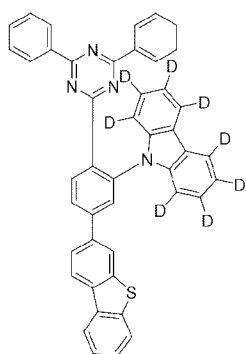
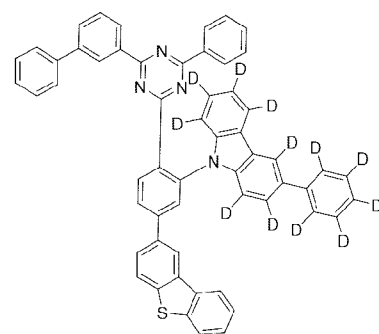
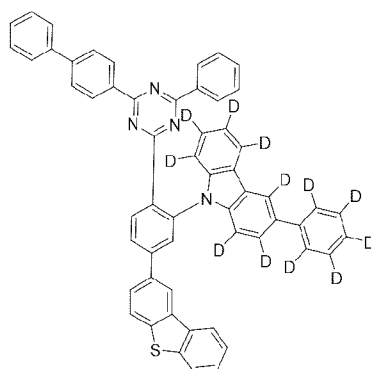
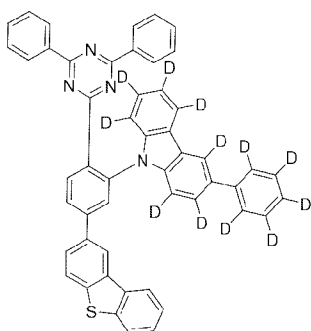
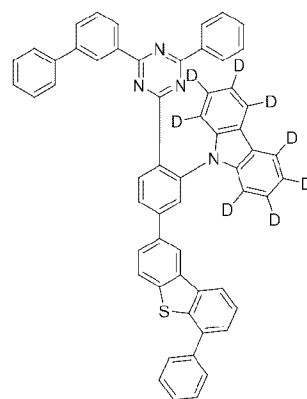
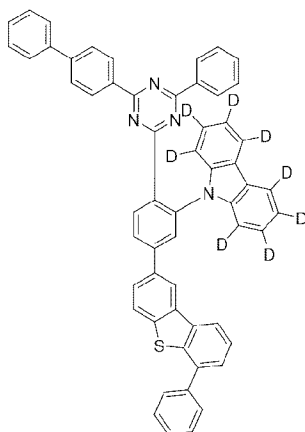
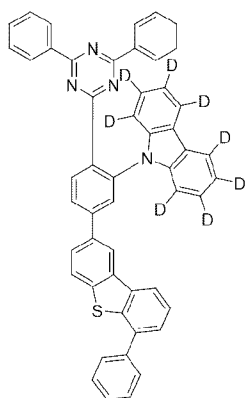
[185]



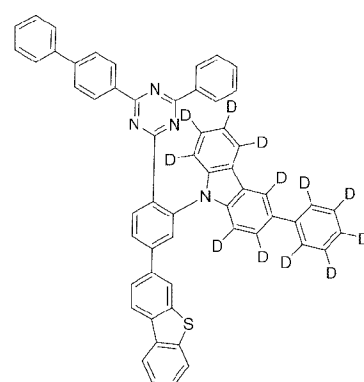
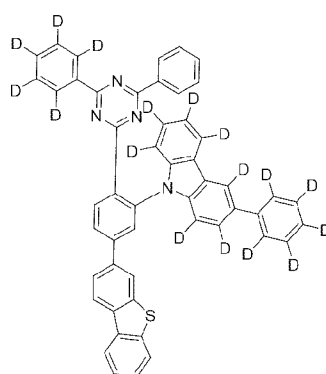
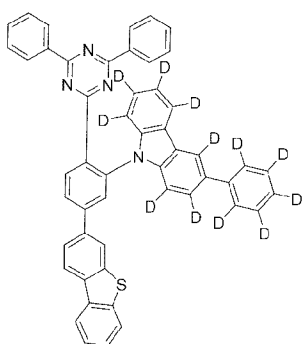
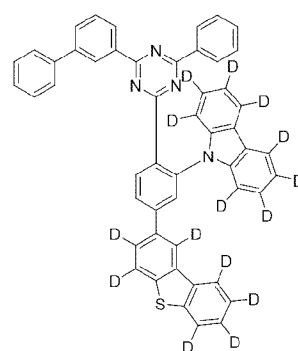
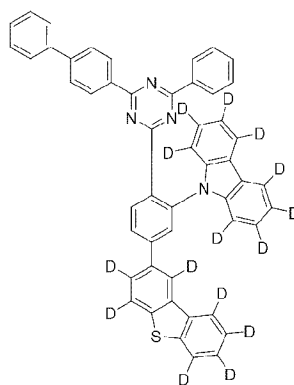
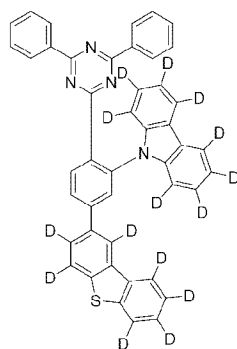
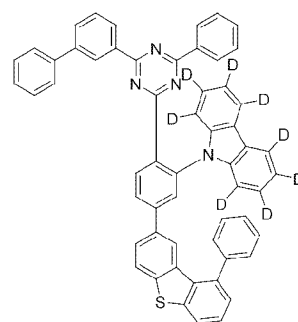
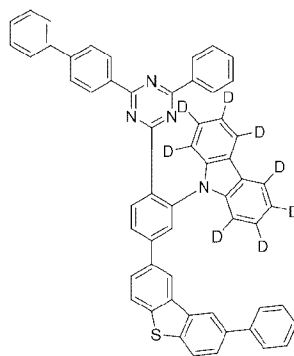
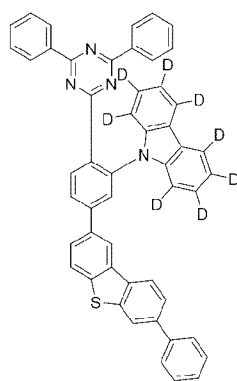
The chemical structure of compound 1 is shown. It features a central triphenylamine core. One phenyl ring is substituted with a biphenyl group. The other two phenyl rings are connected to a fluorene system, which is deuterated at several positions (indicated by 'D').



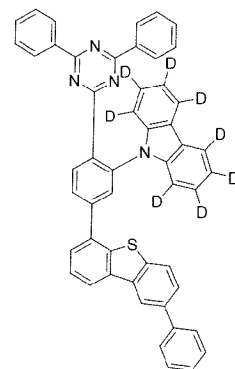
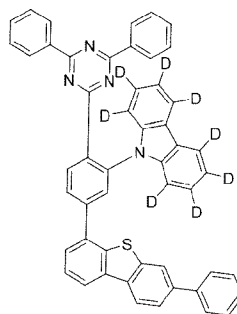
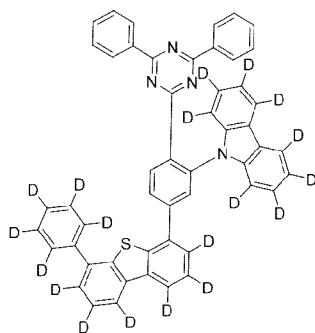
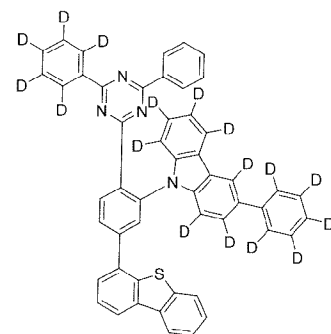
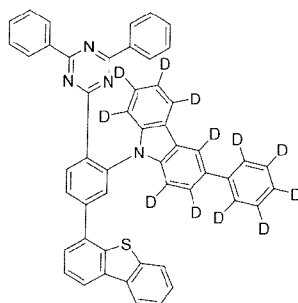
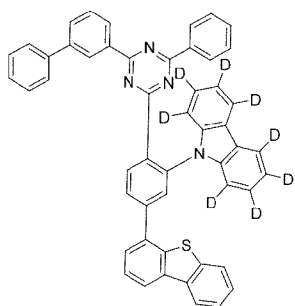
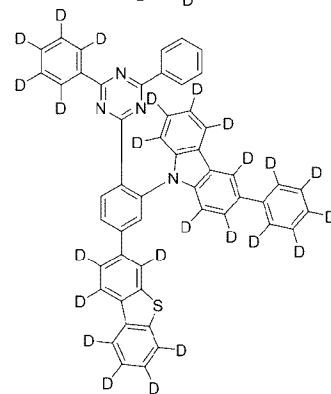
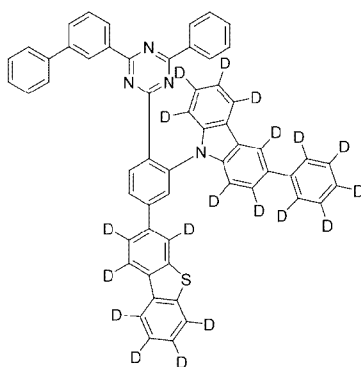
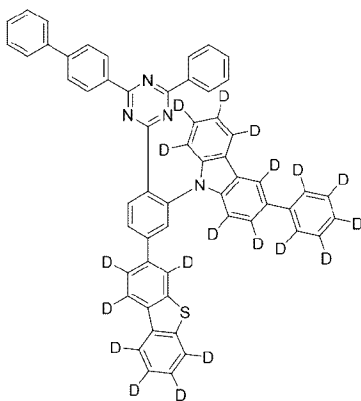
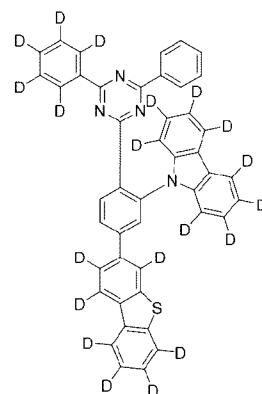
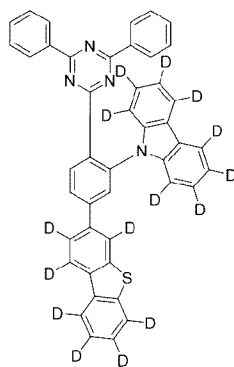
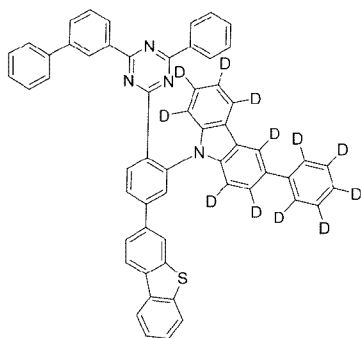
[187]



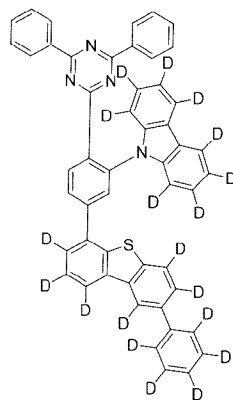
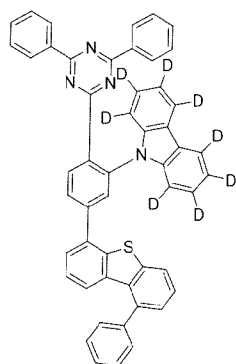
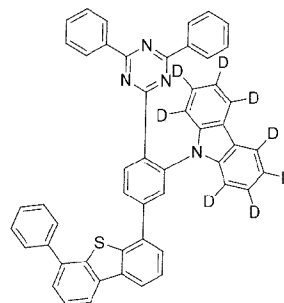
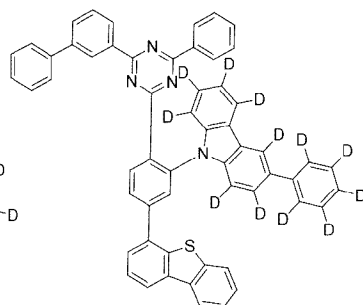
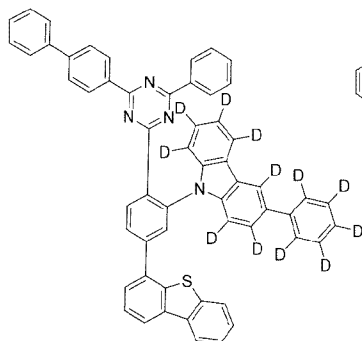
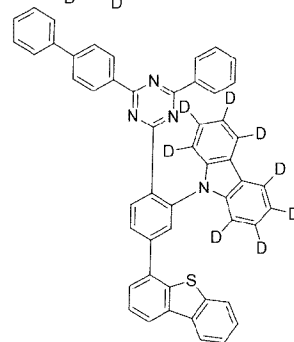
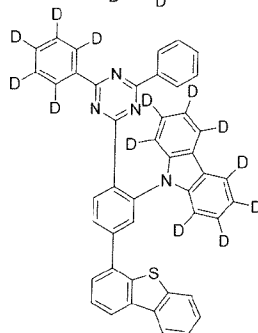
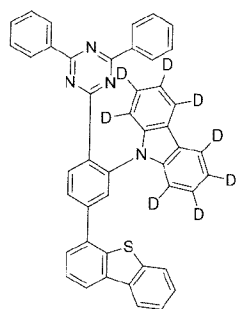
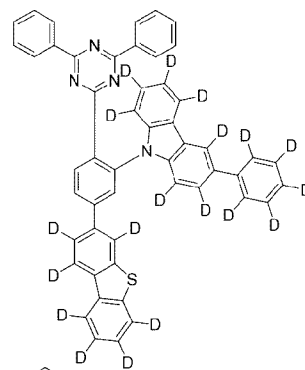
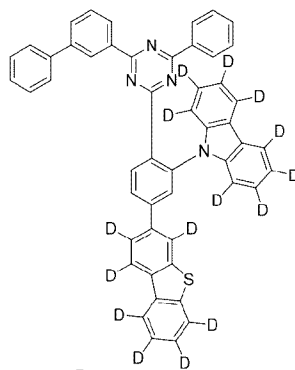
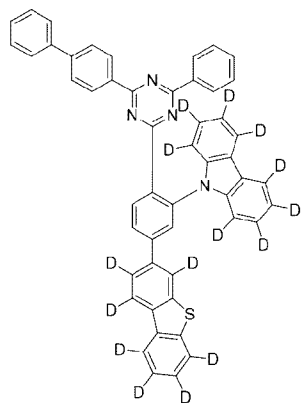
[188]



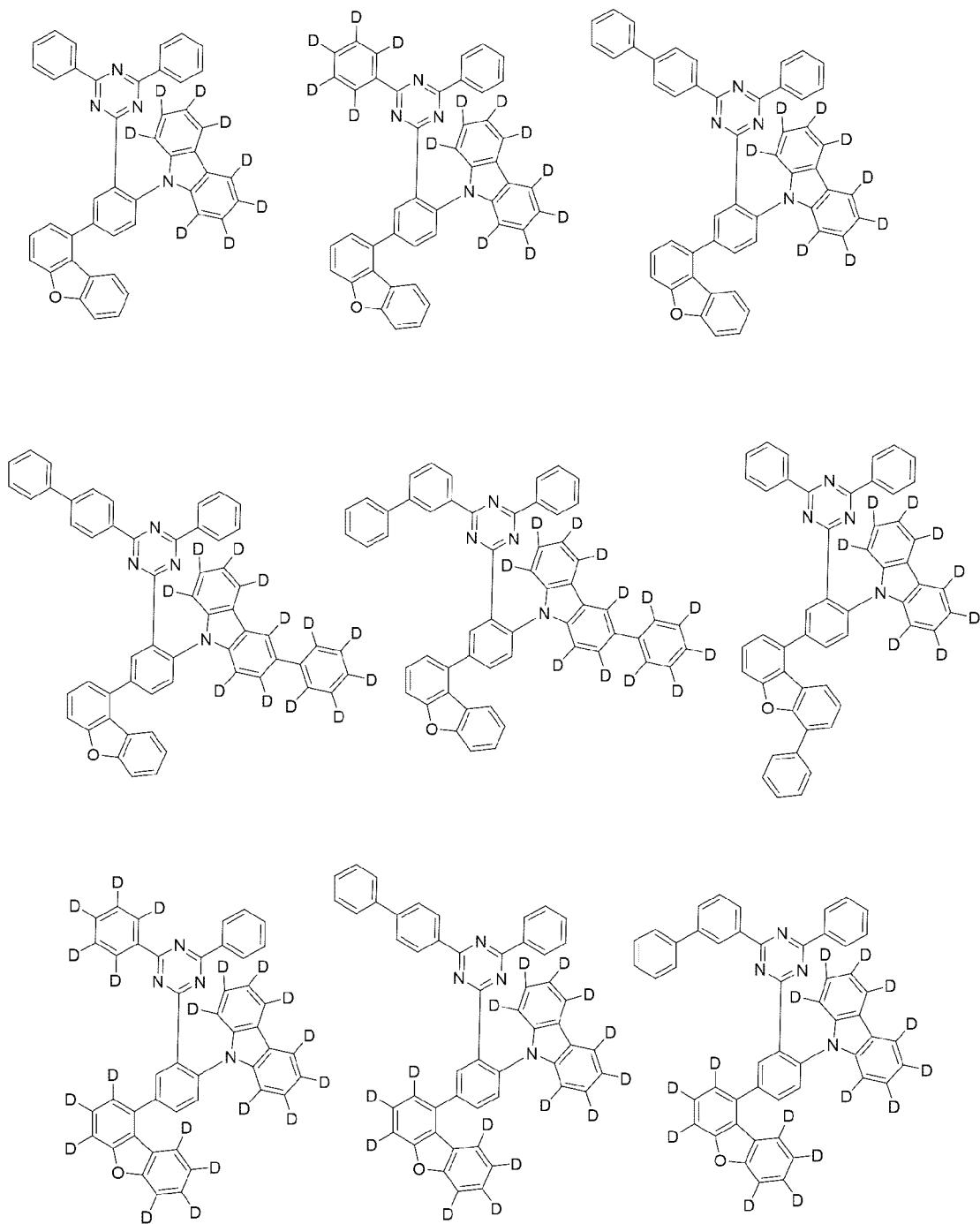
[189]



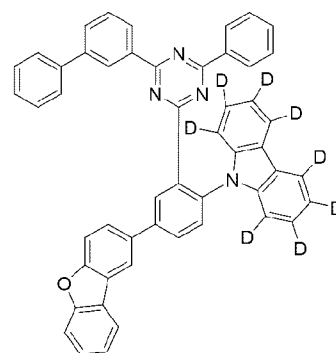
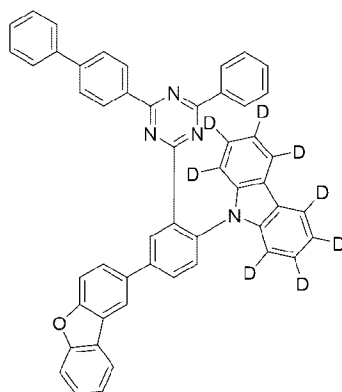
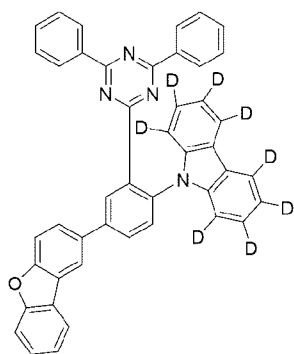
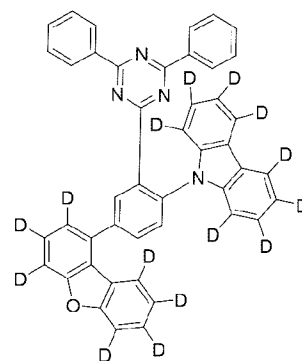
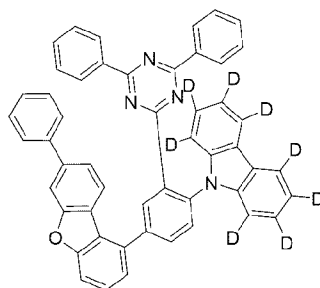
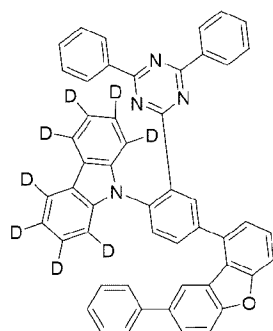
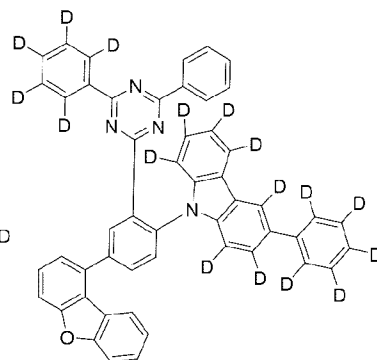
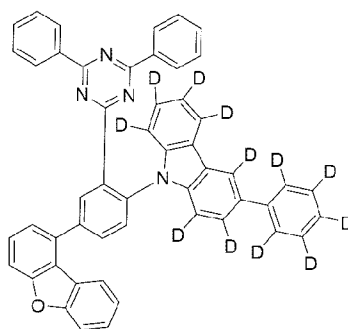
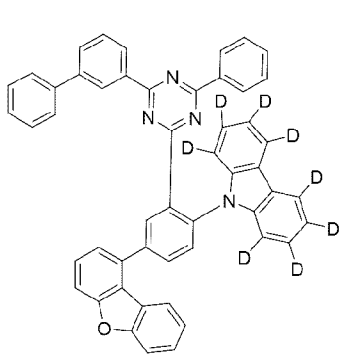
[190]



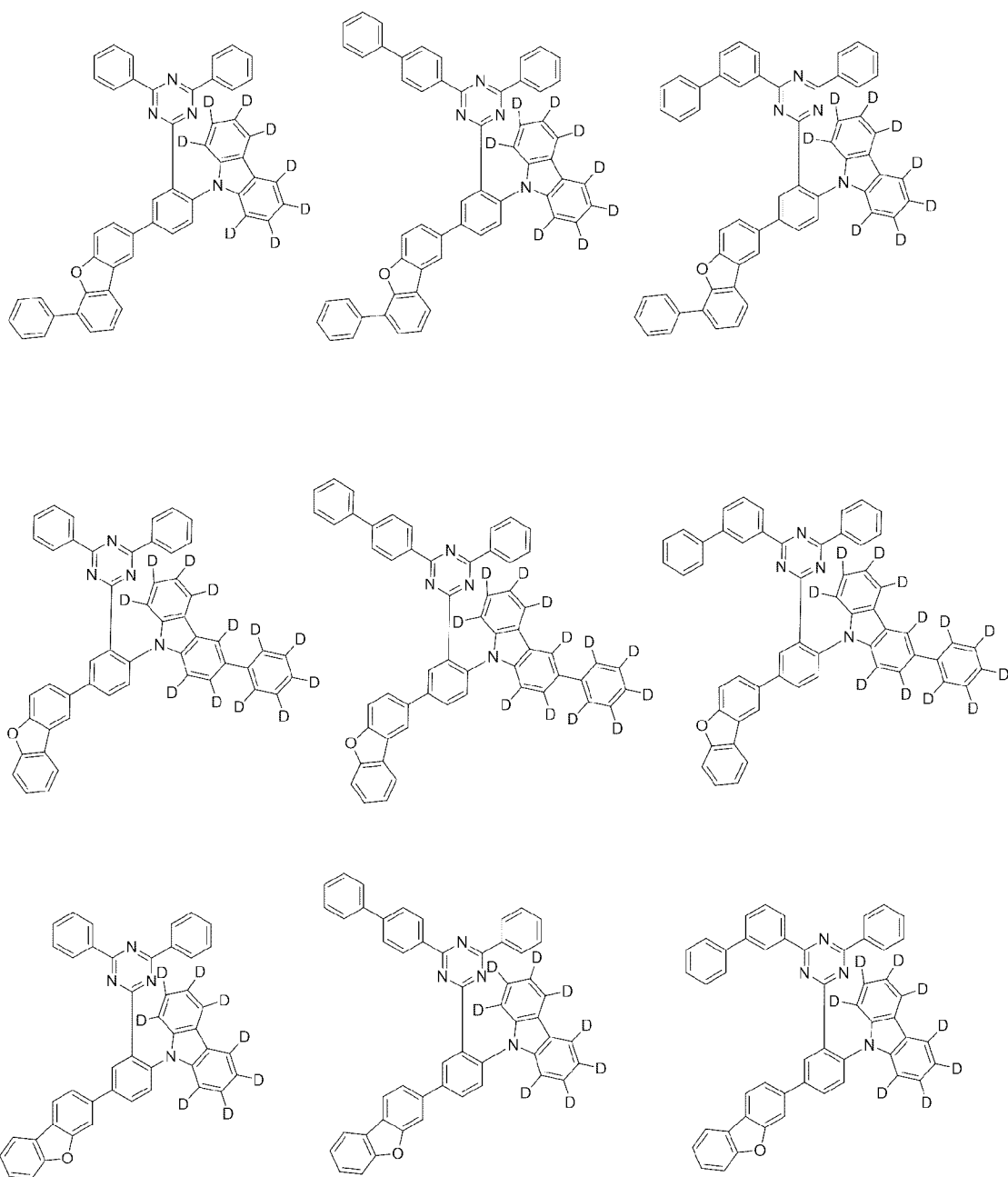
[191]



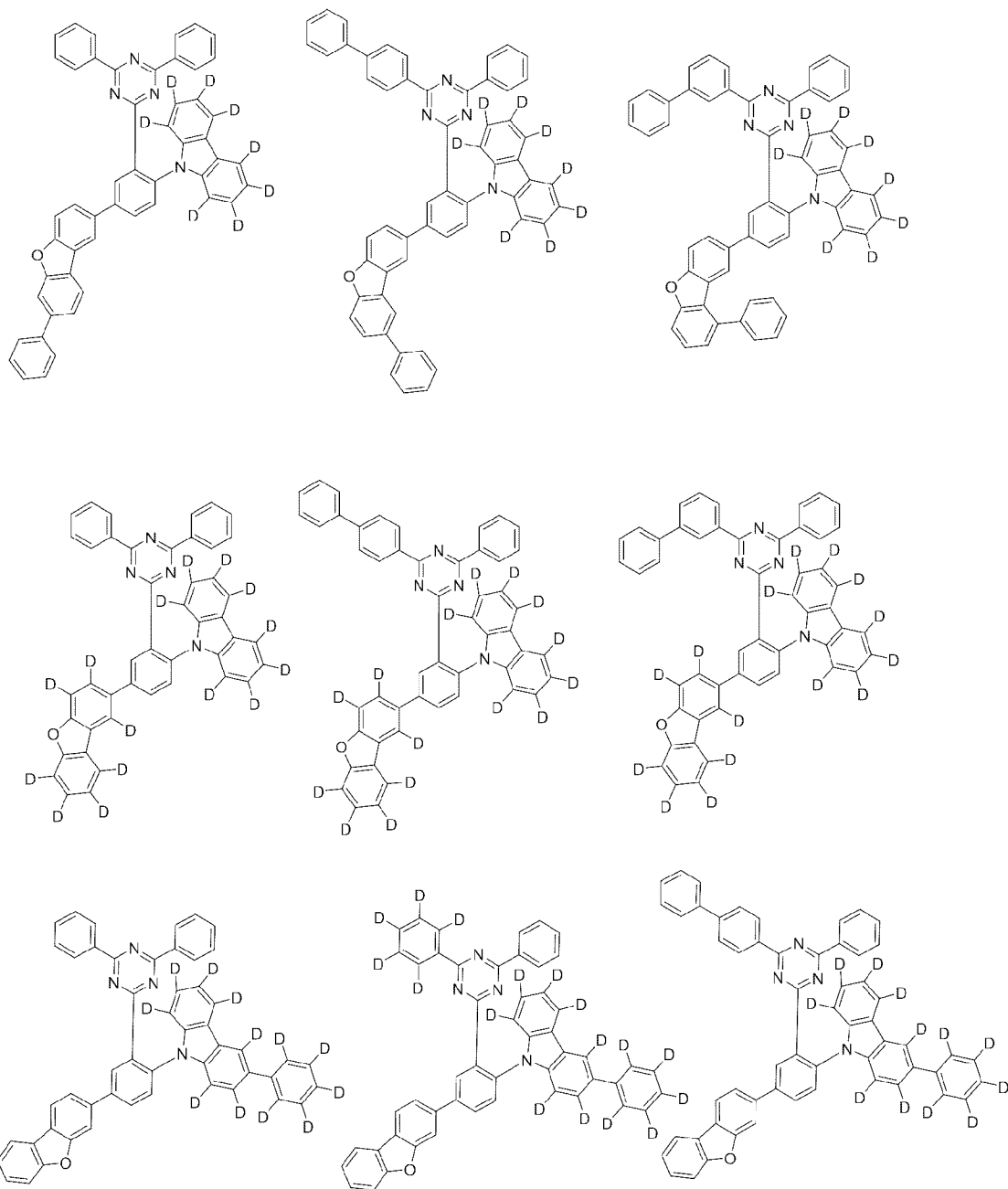
[192]



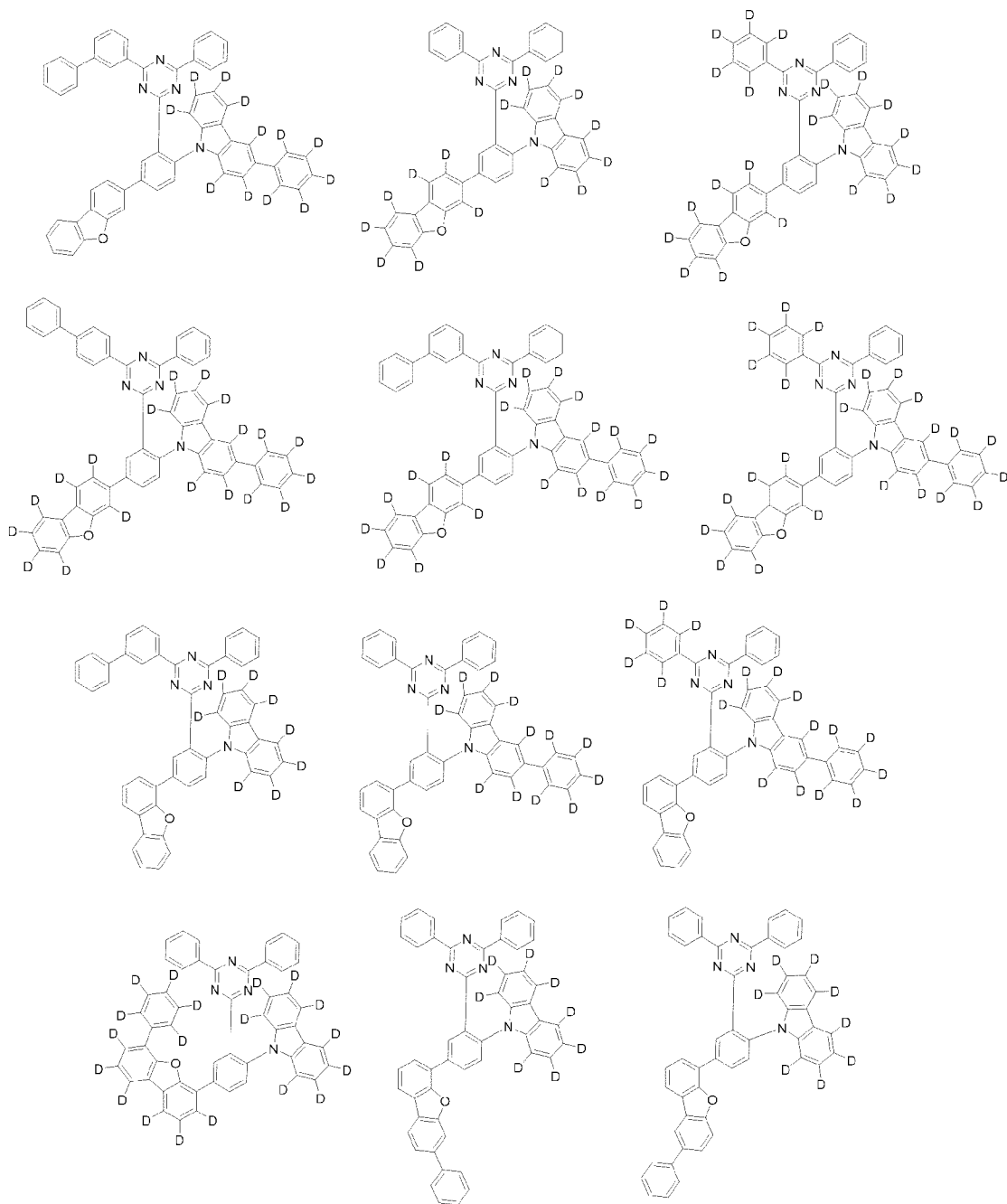
[193]



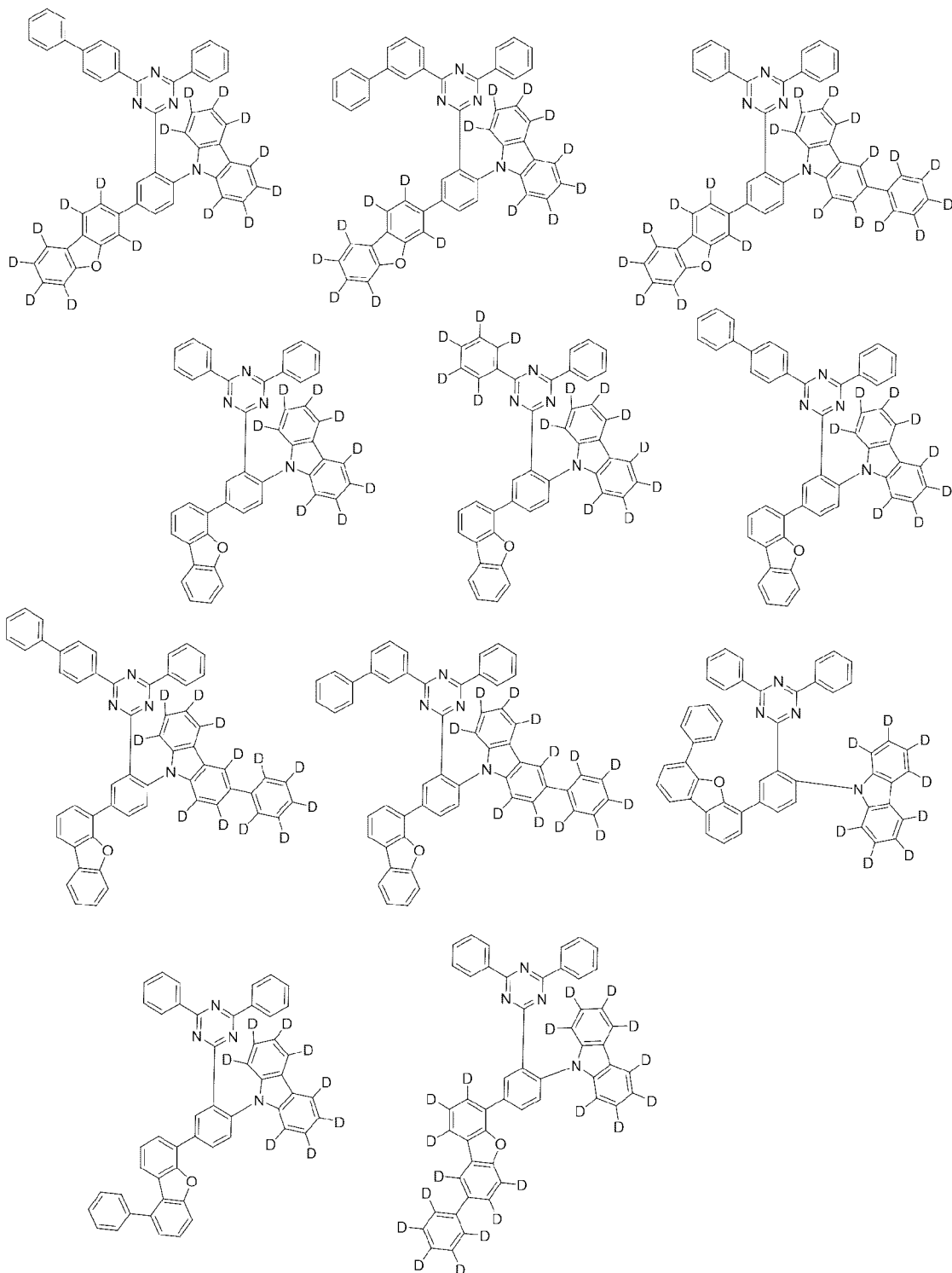
[194]



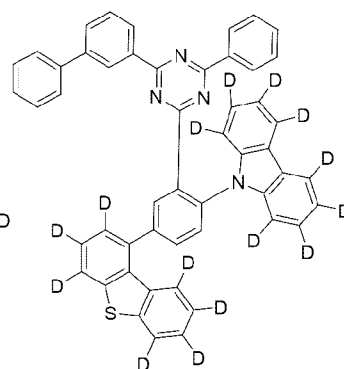
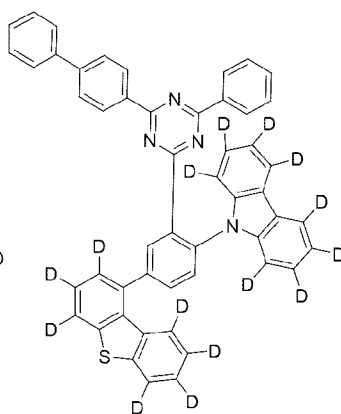
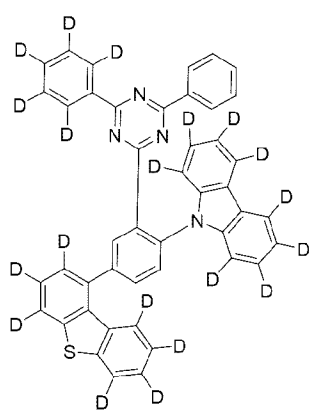
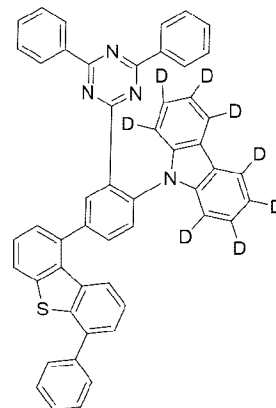
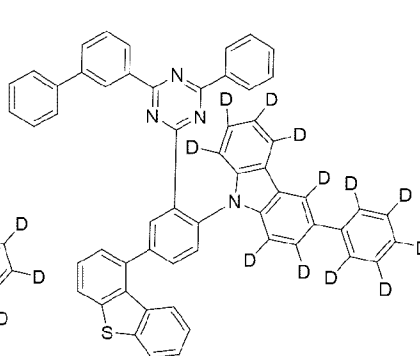
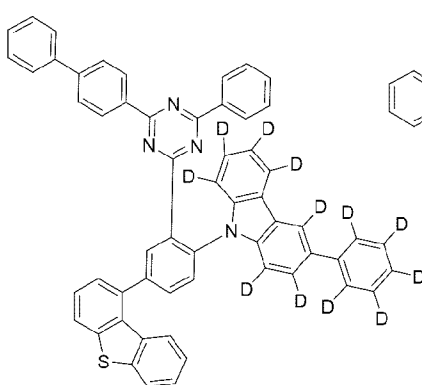
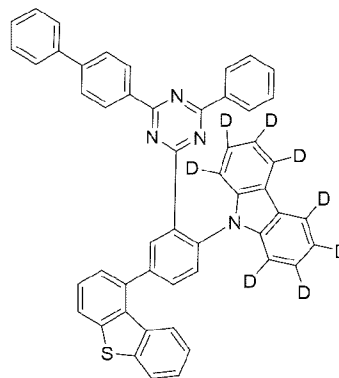
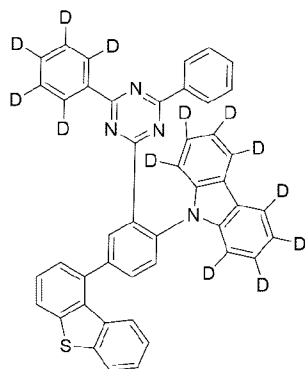
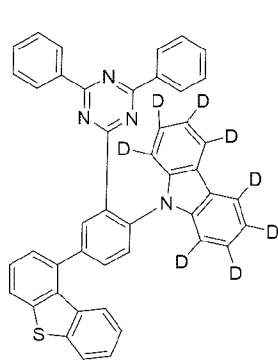
[195]

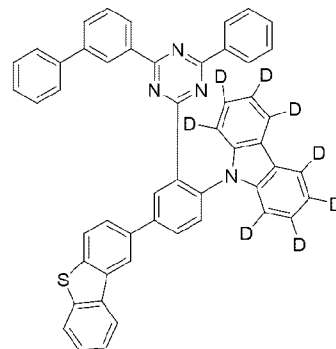
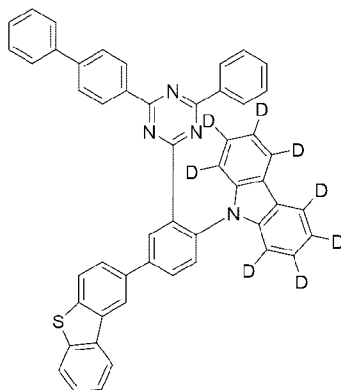
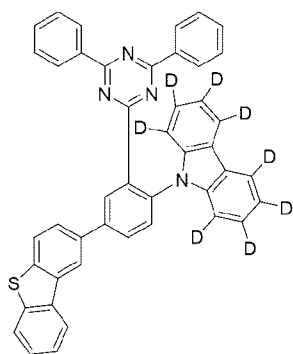
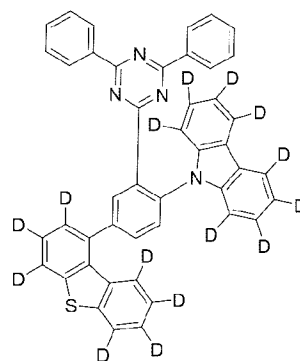
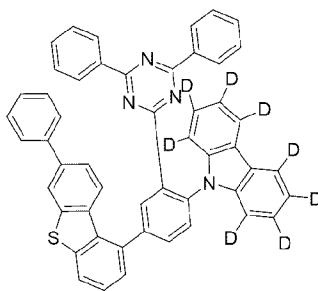
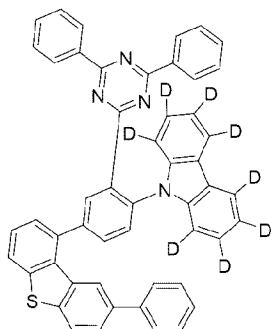
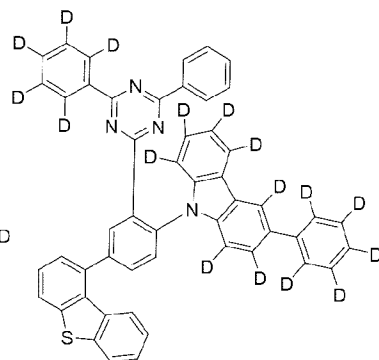
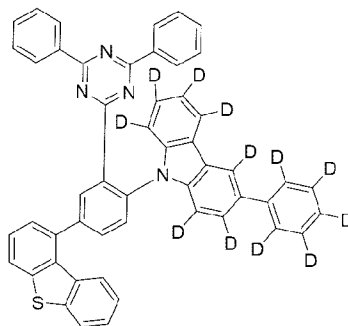


[196]

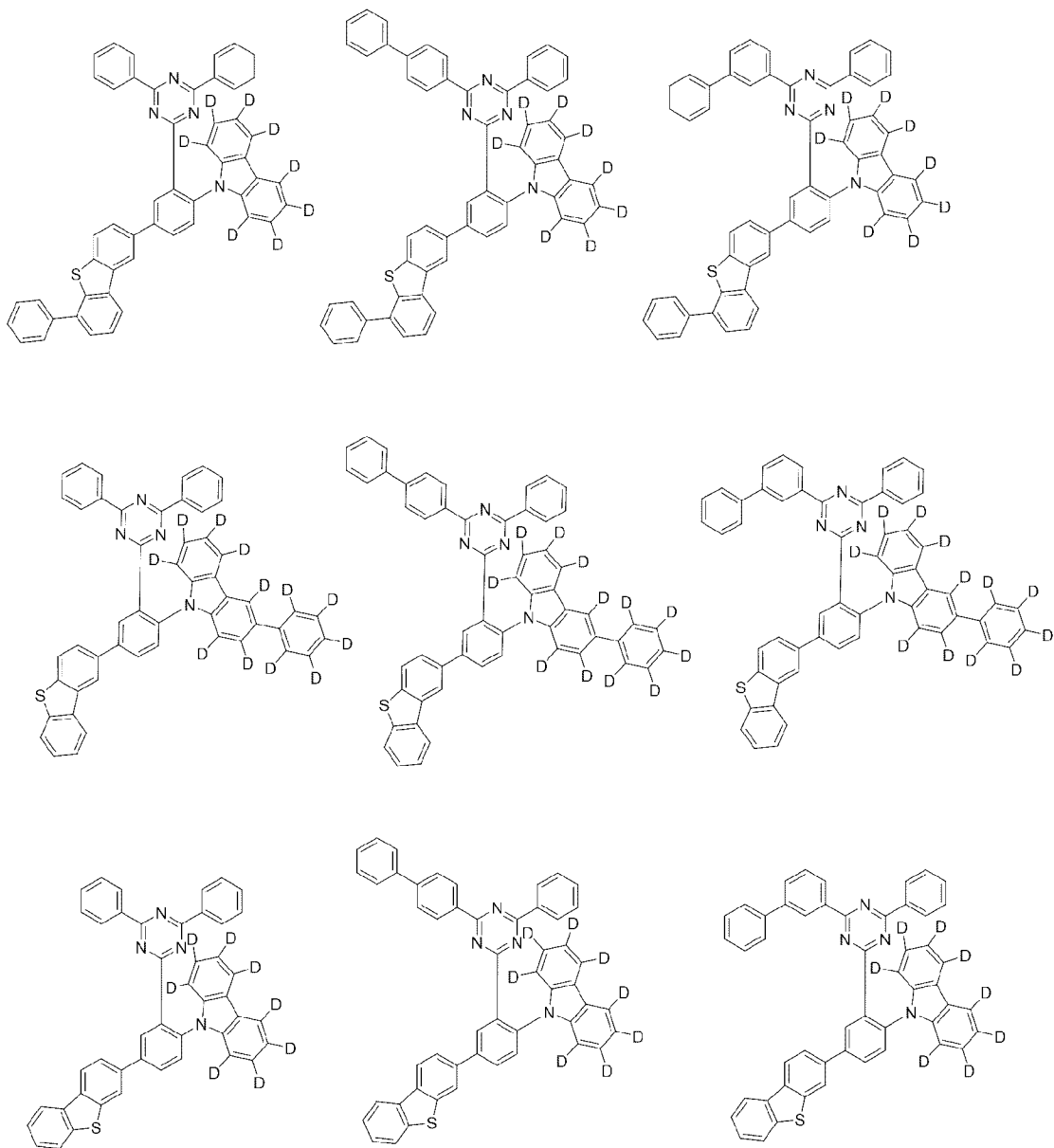


[197]

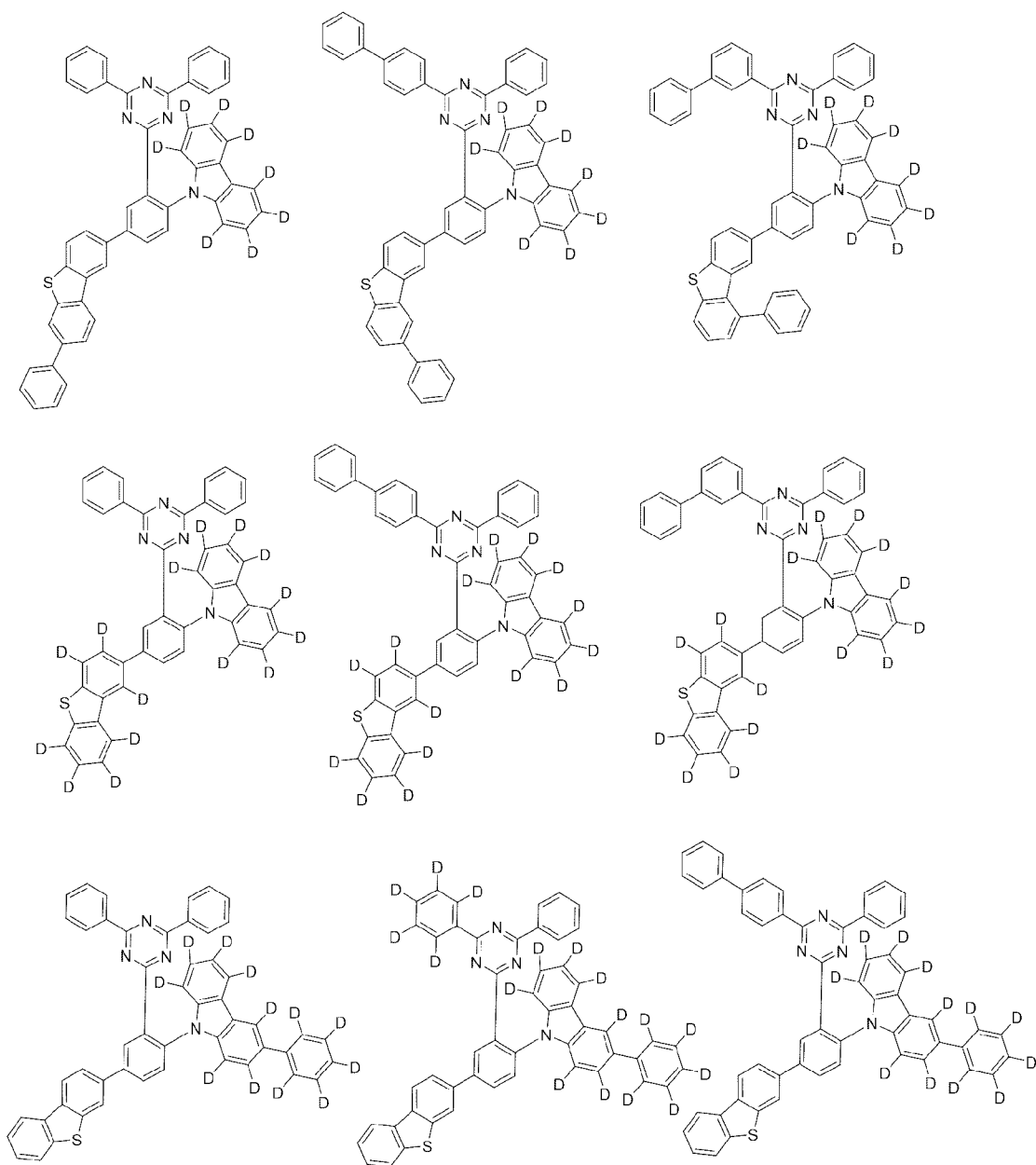




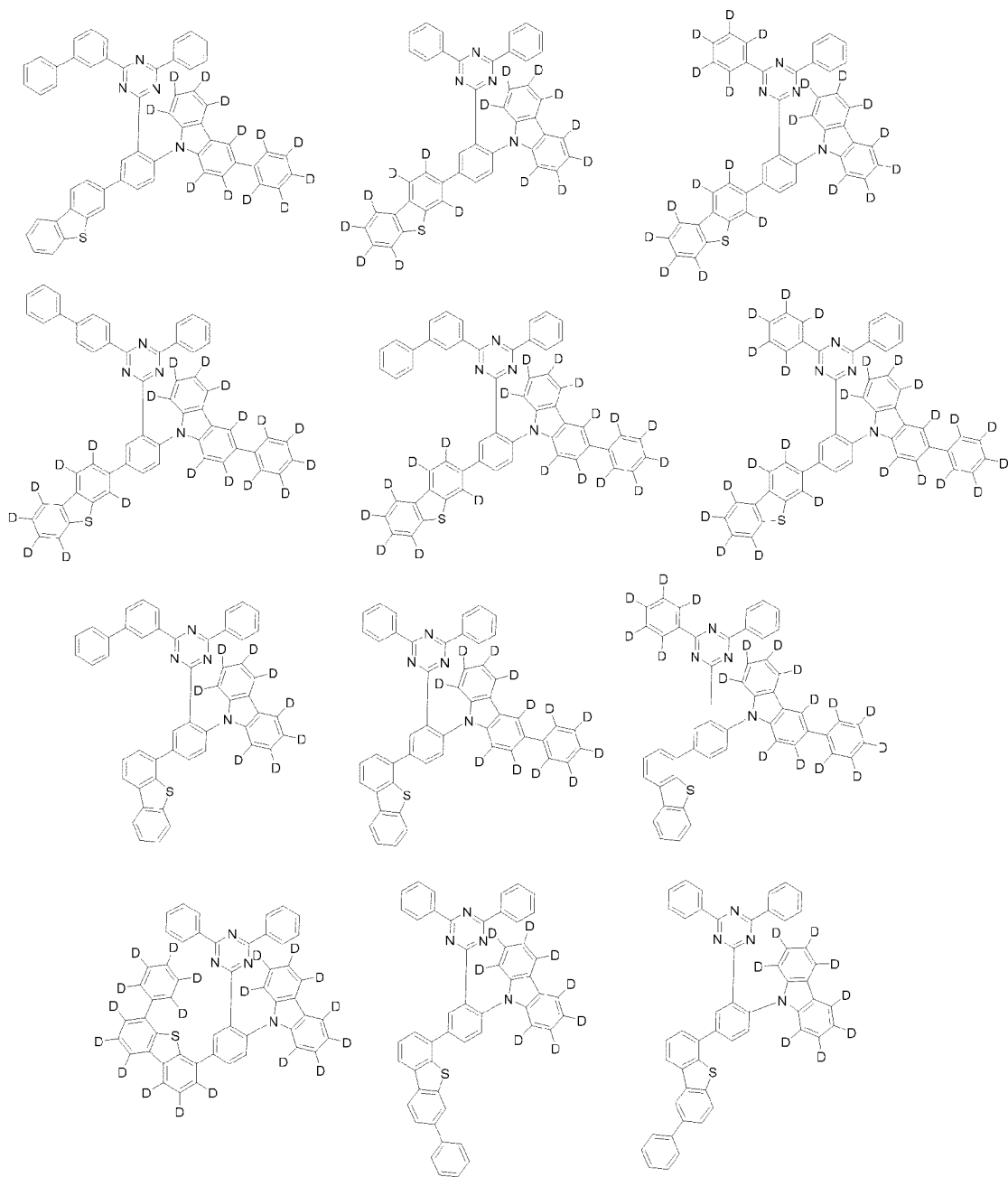
[199]



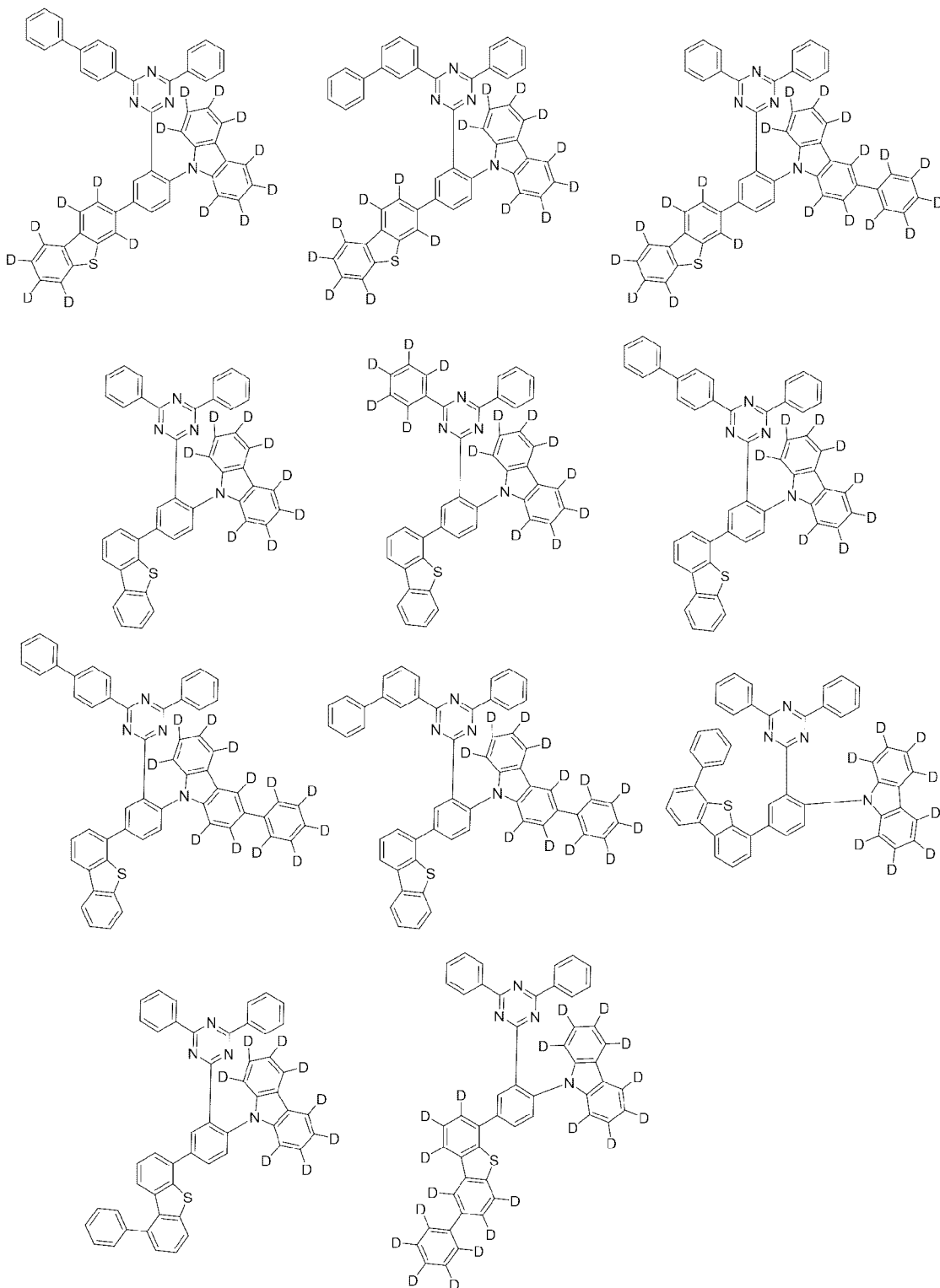
[200]



[201]



[202]



[203]

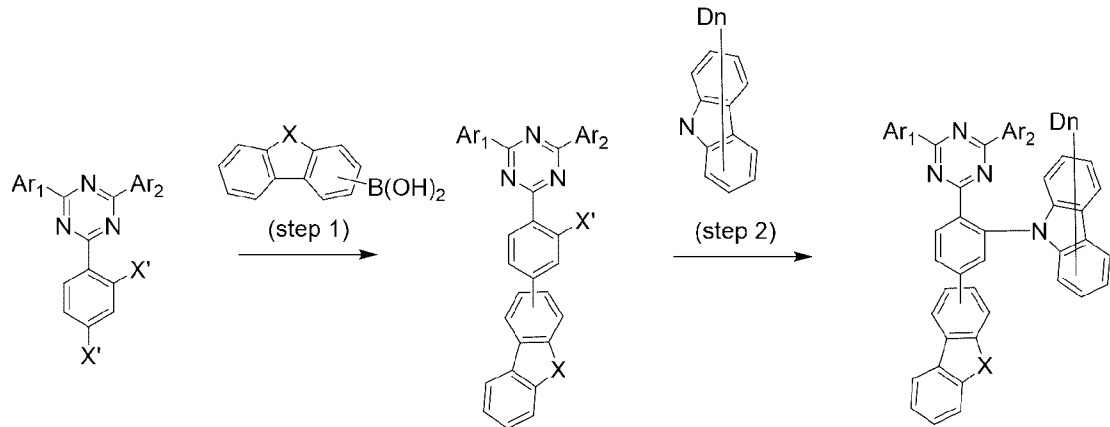
[204] 또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조 방법을 제공한다.

[205] 일례로, 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조될 수 있다. 하기 반응식 1은, 화학식 1의 R_{10} 이 화학식 2와의 결합이고, R_9 , R_{11} ,

및 R_{12} 가 수소이며, R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합이 아닌 나머지와 R_{17} 내지 R_{20} 이 모두 수소인 경우를 예시한 것이다:

[206] [반응식 1]

[207]



[208] 상기에서, Ar_1 , Ar_2 , 및 X 는 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 같으며, D 는 중수소이고, n 은 1 내지 8의 정수이고, X' 은 할로젠이다. 바람직하게는 X' 은 각각 독립적으로, 플루오로, 클로로, 또는 브로모이다.

[209]

[210] 상기 반응식 1의 step 1은 스즈키 커플링 반응으로서, 팔라듐 촉매와 염기 존재 하에 수행하는 것이 바람직하며, 스즈키 커플링 반응을 위한 반응기는 당업계에 알려진 바에 따라 변경이 가능하다.

[211]

[212] 상기 반응식 1의 step 2는 아민 치환 반응으로서, 팔라듐 촉매와 염기 존재 하에 수행하는 것이 바람직하며, 아민 치환 반응을 위한 반응기는 당업계에 알려진 바에 따라 변경이 가능하다.

[213]

[214] 상기 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.

[215]

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

[217]

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

[219]

[220] 또한, 상기 유기물 층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 특히, 본 발명에 따른 화합물은 발광층의 호스트로 사용할 수 있다.

[221]

[222] 또한, 상기 유기물 층은 정공주입층, 정공수송층, 또는 전자억제층을 포함할 수 있고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 전자억제층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[223]

[224] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물 층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물 층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 내지 도 3에 예시되어 있다.

[225]

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

[227]

[228] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자억제층(7), 발광층(8), 정공억제층(9), 전자수송층(10), 전자주입층(11) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자억제층, 발광층, 정공억제층, 전자수송층, 및 전자주입층 중 1층 이상에 포함될 수 있고, 일례로 발광층에 포함될 수 있다.

[229]

[230] 도 3은 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자억제층(7), 발광층(8), 정공억제층(9), 전자주입 및 수송층(12) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자억제층, 발광층, 정공억제층, 전자주입 및 수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있고, 일례로 발광층에 포함될 수 있다.

[231]

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

[233]

[234] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물 층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.

[235]

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

[237]

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

[239]

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

[241]

[242] 상기 양극 물질로는 통상 유기물 층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[243]

[244] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[245]

[246] 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료

에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입 층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물 층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[247]

[248] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[249]

[250] 상기 전자억제층은 음극에서 주입된 전자가 발광층에서 재결합하지 않고 양극 쪽으로 전달되는 것을 억제하여 유기 발광 소자의 효율을 향상시키는 역할을 한다. 전자억제층에는 전자수송층보다 전자 친화력이 작은 물질이 바람직하다.

[251]

[252] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[253]

[254] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 특히, 본 발명에서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 호스트 재료로 사용할 수 있으며, 이 경우 유기 발광 소자의 저전압, 고효율 및/또는 고수명 특성을 얻을 수 있다.

[255]

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

[257]

[258] 상기 전자수송층은 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq_3 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.

[259]

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

[261]

[262] 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-크레

줄라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[263]

[264] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 전자 수송 물질 및 전자 주입 물질을 동시에 증착하여 전자 주입 및 수송층의 단일층으로 제조할 수 있다.

[265]

[266] 상기 정공억제층은 양극에서 주입된 정공이 발광층에서 재결합되지 않고 전자 수송층으로 넘어가는 것을 방지하며, 정공억제층에는 이온화에너지가 큰 물질이 바람직하다.

[267]

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

[269]

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

[271]

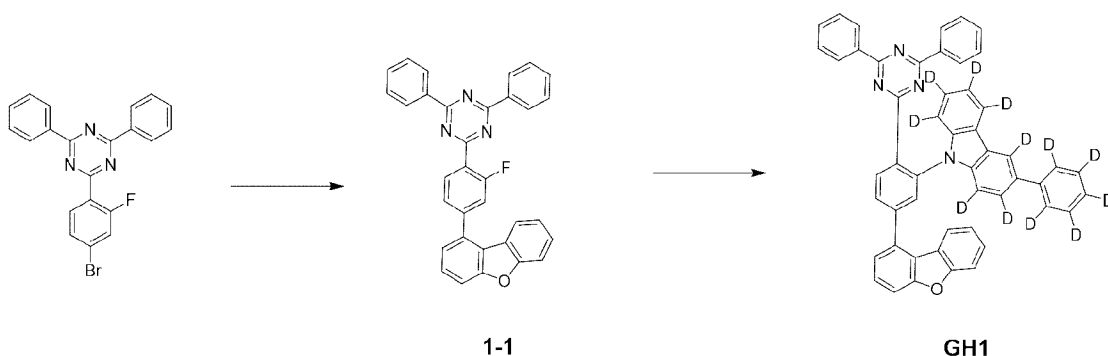
[272] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조는 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[273]

[274] [제조예]

[275] 제조예 1: 화합물 GH1의 제조

[276]



[277] 제조예 1-1: 화합물 1-1의 제조

[278] 질소 분위기에서 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(30 g, 73.8 mmol)와 dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid(15.7 g, 73.8mmol)를 테트라하이드로퓨란 600ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(30.6 g, 221.5mmol)를 물31 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(2.6 g, 2.2mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1822 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과

하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 1-1(29.2g, 80%, MS: $[M+H]^+ = 494.5$)을 제조하였다.

[279]

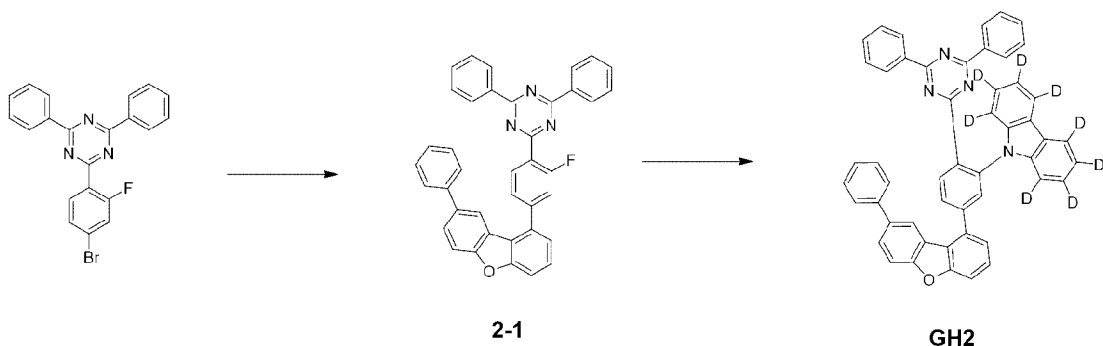
[280] 제조예 1-2: 화합물 GH1의 제조

[281] 질소 분위기에서 1-1(10 g, 20.3 mmol)와 3-(phenyl-d5)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d7(5.2 g, 20.3mmol)를 DMF 200ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘 아세테이트(6 g, 60.8mmol)를 투입하고 6시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 443 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 노란색의 고체 화합물 GH1(10.9g, 74%, MS: $[M+H]^+ = 729.9$)을 제조하였다.

[282]

[283] 제조예 2: 화합물 GH2의 제조

[284]



[285]

[286] 제조예 2-1: 화합물 2-1의 제조

[287] dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 (8-phenyldibenzo[b,d]furan-1-yl)boronic acid을 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 2-1(31.1g, 74%, MS: $[M+H]^+ = 570.6$)을 제조하였다.

[288]

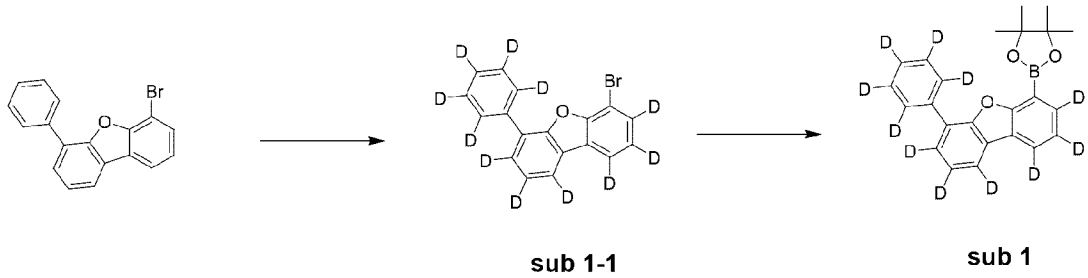
[289] 제조예 2-2: 화합물 GH2의 제조

[290] 화합물 1-1 대신 화합물 2-1을 사용하고, 3-(phenyl-d5)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d7 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d8를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH2(8.8g, 69%, MS: $[M+H]^+ = 725.9$)을 제조하였다.

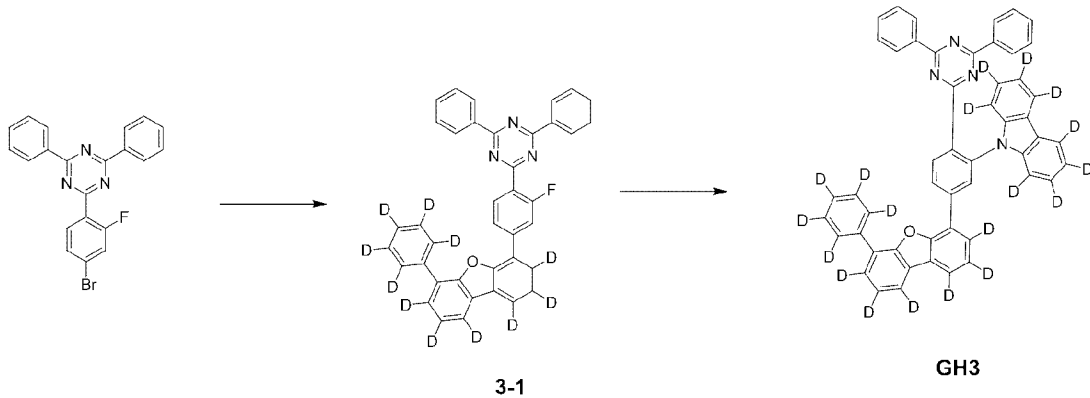
[291]

[292] 제조예 3: 화합물 GH3의 제조

[293]



[294]



[295] 제조예 3-1: 화합물 sub 1-1의 제조

[296] 질소 분위기에서 4-bromo-6-phenyldibenzo[b,d]furan (50 g, 154.7 mmol), TfOH (10 ml)을 C₆D₆ (500ml)에 넣고 40도에서 6시간 교반하였다. 반응 종료 후 실온으로 온도를 낮춰준 후 D₂O(100 ml)를 넣고 30분 교반한 뒤 트리메틸아민(trimethylamine) (12 ml)를 적가하였다. 반응액을 분액 깔대기에 옮기고, 물과 클로로포름으로 추출하였다. 추출액을 MgSO₄로 건조 후, 에탄올로 재결정하여 화합물 sub 1-1을 44.5g 수득하였다. (수율 86%, MS[M+H]⁺=334)

[297]

[298] 제조예 3-2: 화합물 sub 1의 제조

[299] 질소 분위기에서 sub1-1(50 g, 149.7 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(38.4 g, 164.7mmol)를 Diox 1000ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(43.2 g, 449.1mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(2.6 g, 4.5mmol) 및 트리시클로헥실포스핀 (2.5 g, 9mmol)을 투입하였다. 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터 처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 571 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 회색의 고체 화합물 sub1(51.4g, 90%, MS: [M+H]⁺ = 382.4)을 제조하였다.

[300]

[301] 제조예 3-3: 화합물 3-1의 제조

[302] dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 화합물 sub1을 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 3-1(24.4g, 57%, MS: [M+H]⁺ = 581.7)을 제조하였다.

[303]

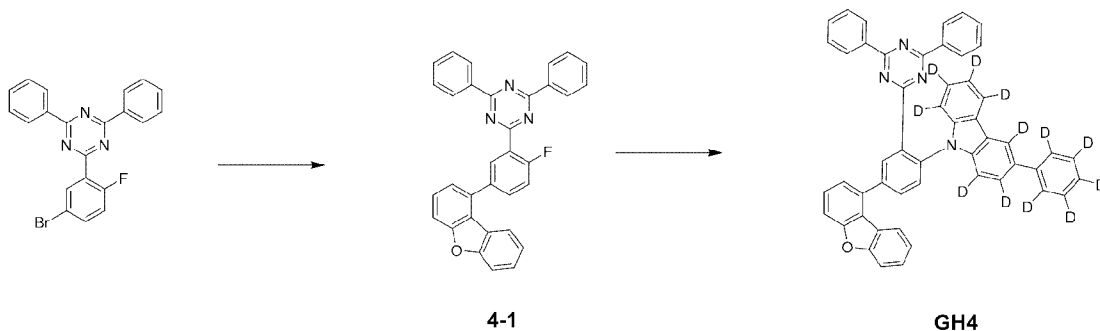
[304] 제조예 3-4: 화합물 GH3의 제조

[305] 화합물 1-1 대신 화합물 3-1을 사용하고, 3-(phenyl-d5)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d7 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d8를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH3(8g, 63%, MS: [M+H]⁺ = 737)을 제조하였다.

[306]

[307] 제조예 4: 화합물 GH4의 제조

[308]



[309] 제조예 4-1: 화합물 4-1의 제조

[310] 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(5-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것 외에는 제조예 3-3과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 4-1(26.2g, 72%, MS: [M+H]⁺ = 494.5)을 제조하였다.

[311]

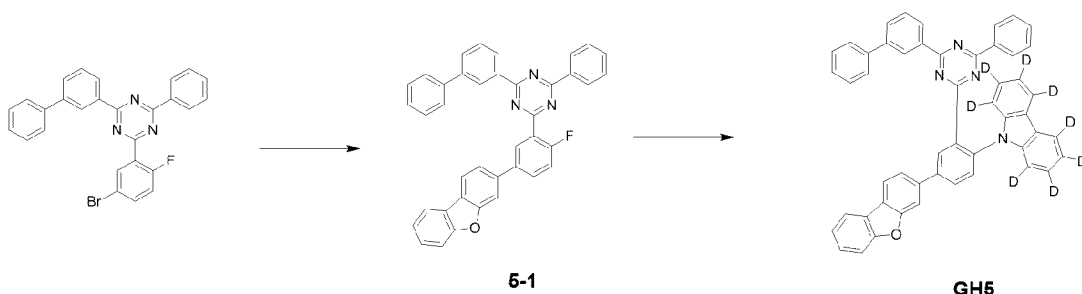
[312] 제조예 4-2: 화합물 GH4의 제조

[313] 화합물 1-1 대신 화합물 4-1을 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH4(7.5g, 51%, MS: [M+H]⁺ = 729.9)을 제조하였다.

[314]

[315] 제조예 5: 화합물 GH5의 제조

[316]



[317] 제조예 5-1: 화합물 5-1의 제조

[318] 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-([1,1'-biphenyl]-3-yl)-4-(5-bromo-2-fluorophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine을 사용하고 dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]furan-3-ylboronic acid를 사용

한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 5-1(20.5g, 58%, MS: $[M+H]^+ = 570.6$)을 제조하였다.

[319]

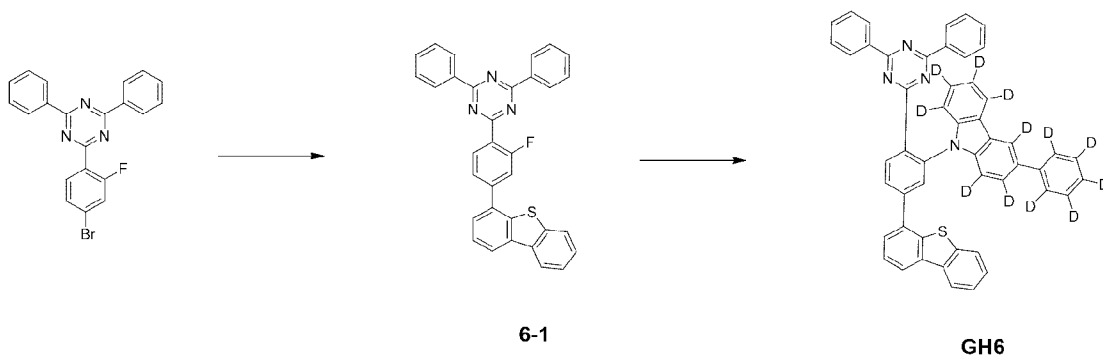
[320] 제조예 5-2: 화합물 GH5의 제조

[321] 화합물 1-1 대신 화합물 5-1을 사용하고, 3-(phenyl-d₅)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d₇ 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH5(9.4g, 74%, MS: $[M+H]^+ = 725.9$)을 제조하였다.

[322]

[323] 제조예 6: 화합물 GH6의 제조

[324]



[325] 제조예 6-1: 화합물 6-1의 제조

[326] dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid를 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 6-1(24.8g, 66%, MS: $[M+H]^+ = 510.6$)을 제조하였다.

[327]

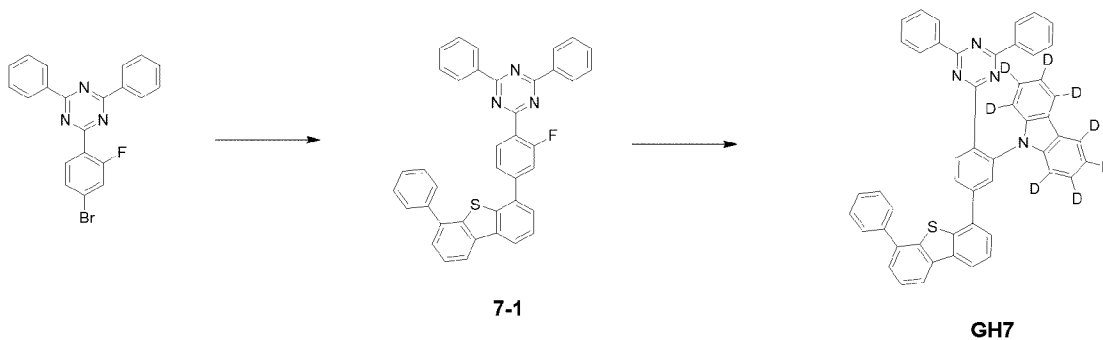
[328] 제조예 6-2: 화합물 GH6의 제조

[329] 화합물 1-1 대신 화합물 6-1을 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH6(7g, 48%, MS: $[M+H]^+ = 746$)을 제조하였다.

[330]

[331] 제조예 7: 화합물 GH7의 제조

[332]



[333] 제조예 7-1: 화합물 7-1의 제조

[334] dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 (6-phenyldibenzo[b,d]thiophen-4-yl)boronic acid를 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 7-1(30.3g, 70%, MS: $[M+H]^+ = 586.7$)을 제조하였다.

[335]

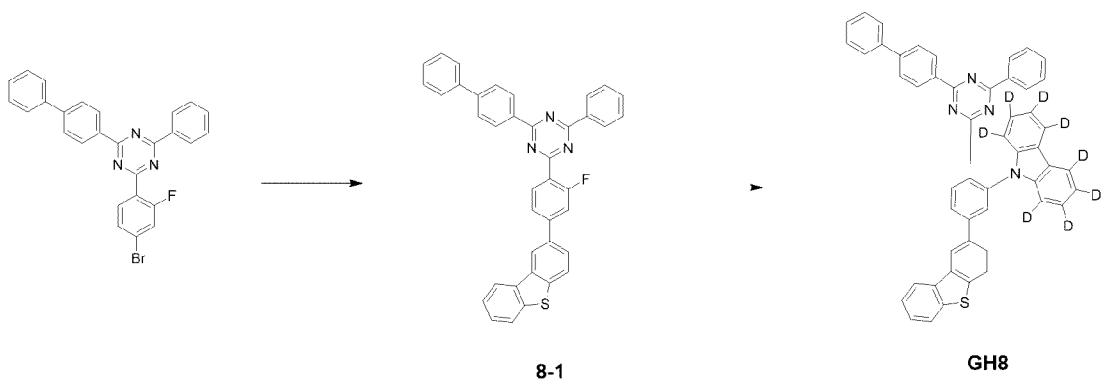
[336] 제조예 7-2: 화합물 GH7의 제조

[337] 화합물 1-1 대신 화합물 7-1을 사용하고, 3-(phenyl-d5)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d7 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d8를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH7(6.6g, 52%, MS: $[M+H]^+ = 742$)을 제조하였다.

[338]

[339] 제조예 8: 화합물 GH8의 제조

[340]



[341] 제조예 8-1: 화합물 8-1의 제조

[342] 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(4-bromo-2-fluorophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine 을 사용하고 dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]thiophen-2-ylboronic acid를 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 8-1(23.3g, 64%, MS: $[M+H]^+ = 586.7$)을 제조하였다.

[343]

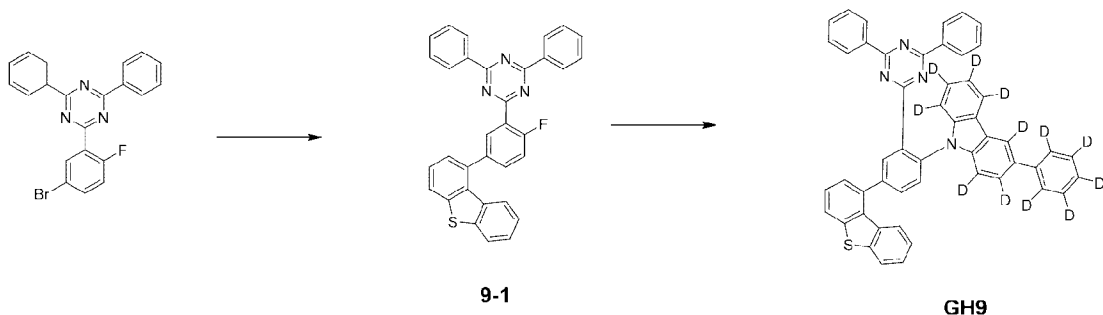
[344] 제조예 8-2: 화합물 GH8의 제조

[345] 화합물 1-1 대신 화합물 8-1을 사용하고, 3-(phenyl-d5)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d7 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d8를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH8(7.6g, 60%, MS: $[M+H]^+ = 742$)을 제조하였다.

[346]

[347] 제조예 9: 화합물 GH9의 제조

[348]



[349] 제조예 9-1: 화합물 9-1의 제조

[350] 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(5-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하고 dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]thiophen-1-ylboronic acid를 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 9-1(28.6g, 76%, MS: [M+H]⁺ = 510.6)을 제조하였다.

[351]

[352] 제조예 9-2: 화합물 GH9의 제조

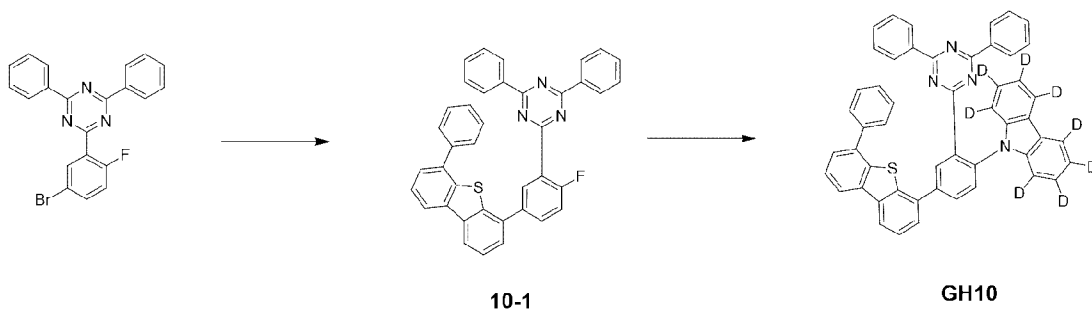
[353] 화합물 1-1 대신 화합물 9-1을 사용한 것 외에는 제조예 1-2와 동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH9(11g, 75%, MS: [M+H]⁺ = 746)을 제조하였다.

[354]

[355]

[356] 제조예 10: 화합물 GH10의 제조

[357]



[358] 제조예 10-1: 화합물 10-1의 제조

[359] 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(5-bromo-2-fluorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하고 dibenzo[b,d]furan-1-ylboronic acid 대신 (6-phenyldibenzo[b,d]thiophen-4-yl)boronic acid를 사용한 것 외에는 제조예 1-1과 동일한 방법으로 흰색의 고체 화합물 10-1(22.9g, 53%, MS: [M+H]⁺ = 586.7)을 제조하였다.

[360]

[361] 제조예 10-2: 화합물 GH10의 제조

[362] 화합물 1-1 대신 화합물 10-1을 사용하고, 3-(phenyl-d₅)-9H-carbazole-1,2,4,5,6,7,8-d₇ 대신 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈를 사용한 것 외에는 제조예 1-2와

동일한 방법으로 노란색의 고체 화합물 GH10(8.2g, 65%, MS: $[M+H]^+ = 742$)을 제조하였다.

[363]

[364] [실시예]

[365] 실시예 1

[366] ITO(indium tin oxide)가 100 nm의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[367] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 HI-A를 60 nm의 두께로 열진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.

[368] 상기 정공 주입층 상에 하기 화합물 HAT를 진공 증착하여 5 nm 두께의 제1 정공 수송층을 형성하고, 상기 제1 정공수송층 상에 하기 화합물 HT-A를 진공 증착하여 50 nm 두께의 제2 정공수송층을 형성하였다.

[369] 상기 정공수송층 위에, 하기 화합물 HT-B를 45 nm 두께로 열 진공 증착하여 전자억제층을 형성하였다.

[370] 상기 전자억제층 위에, 앞서 제조한 화합물 GH1을 하기 화합물 GH-H와 1:1 중량비로 혼합한 뒤, 하기 화합물 GD와 90:10의 중량비로 40 nm의 두께로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

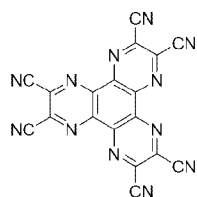
[371] 상기 발광층 위에, 하기 화합물 ET-A를 5 nm의 두께로 진공 증착하여 정공억제층을 형성하였다.

[372] 상기 정공억제층 위에, 하기 화합물 ET-B와 하기 화합물 LiQ를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 35 nm의 두께의 전자 주입 및 수송층을 형성하였다.

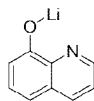
[373] 상기 전자 주입 및 수송층 상에 1 nm의 두께로 리튬 플루오라이드(LiF)를 증착한 후, 이어서 100 nm 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[374] 상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 0.04 nm/sec 내지 0.09 nm/sec를 유지하였고, 리튬 플루오라이드의 증착 속도는 0.03 nm/sec를 유지하였으며, 알루미늄의 증착속도는 0.2 nm/sec를 유지하였다. 증착시 진공도는 1×10^{-7} torr 내지 5×10^{-5} torr를 유지하였다.

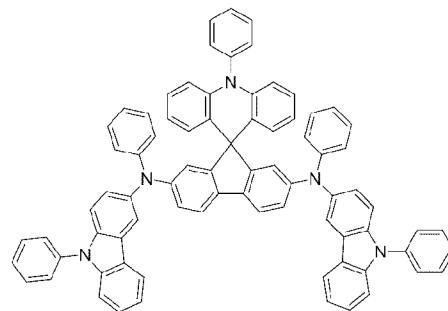
[375]



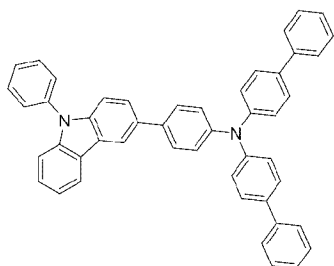
HAT



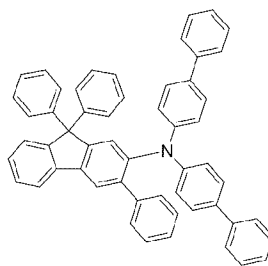
LiQ



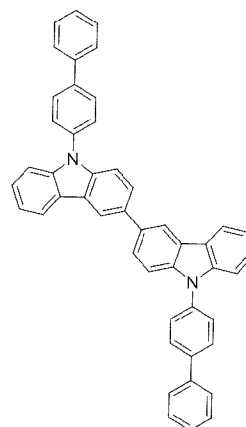
HI-A



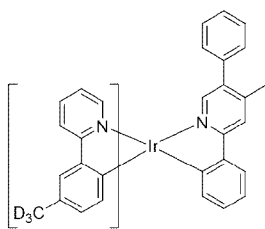
HT-A



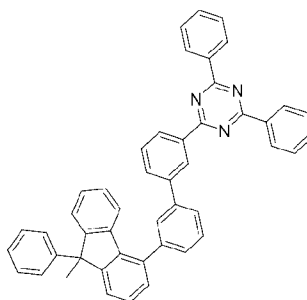
HT-B



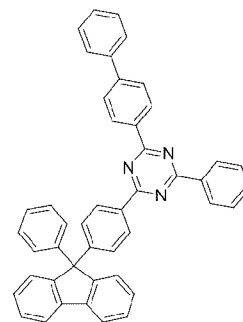
GH-H



GD



ET-A



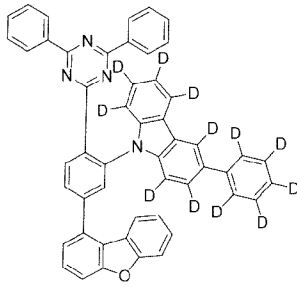
ET-B

[376]

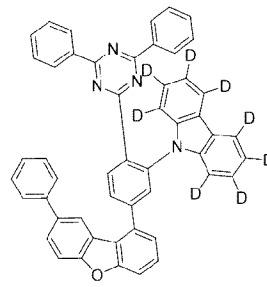
[377] 실시예 2 내지 10

[378] 상기 실시예 1에서 GH1 대신, 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 10의 유기 발광 소자를 제조하였다. 상기 실시예에서 사용된 화합물의 구조를 정리하면 하기와 같다.

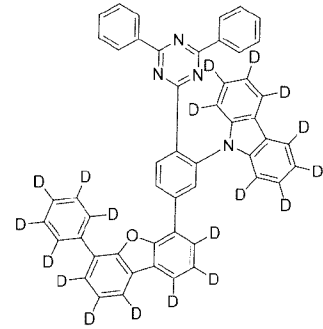
[379]



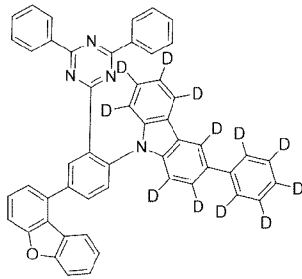
GH1



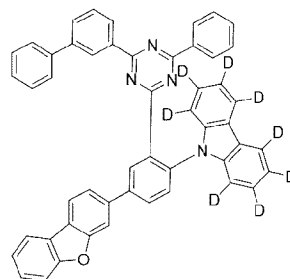
GH2



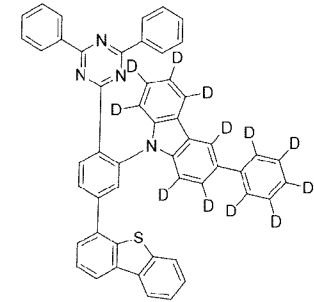
GH3



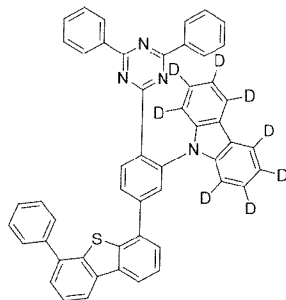
GH4



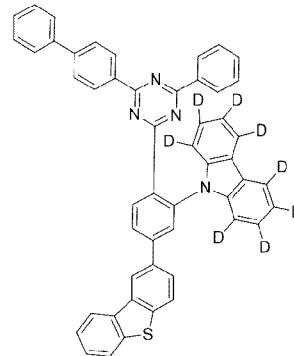
GH5



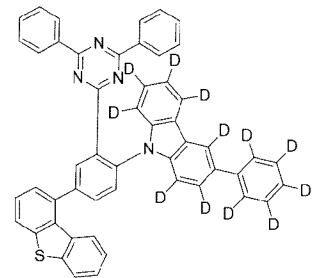
GH6



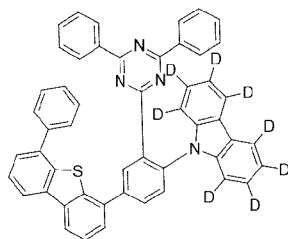
GH7



GH8



GH9



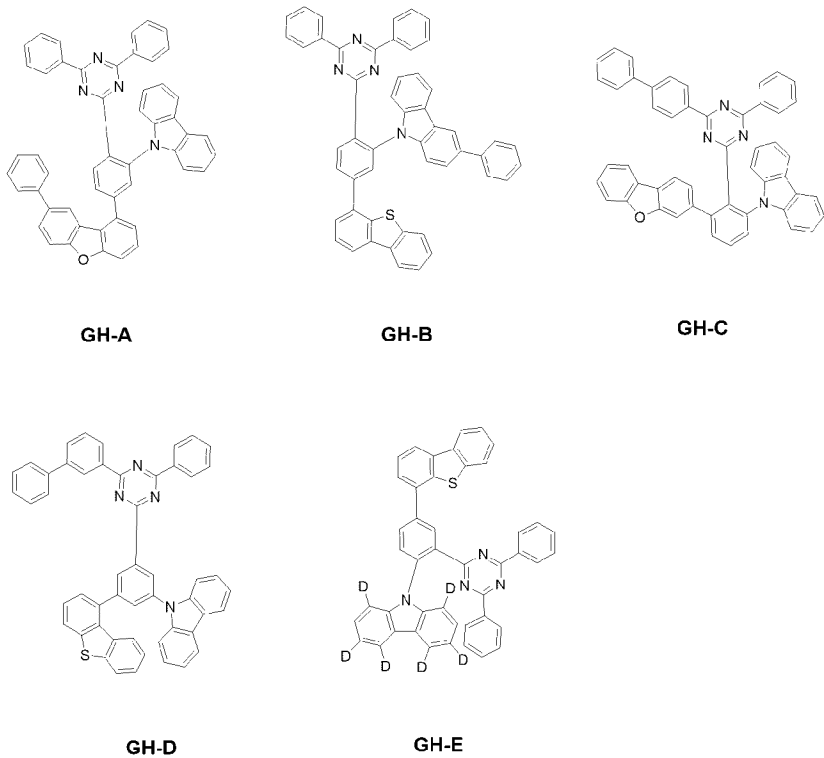
GH10

[380]

[381] 비교예 1 내지 5

[382] 상기 실시예 1에서 GH1 대신, 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 비교예 1 내지 5의 유기 발광 소자를 제조하였다. 비교예 1 내지 5에서 사용한 GH-A 내지 GH-E의 구조는 다음과 같다.

[383]



[384]

[385] [실험예]

[386] 상기 실시예 1 내지 실시예 10 및 비교예 1 내지 5에서 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하여 전압, 효율, 발광색, 수명(T_{95})을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, 전압 및 효율은 10 mA/cm^2 의 전류 밀도를 인가하여 측정하였으며, T_{95} 은 전류 밀도 20 mA/cm^2 에서 초기 휘도가 95 %로 저하할 때까지의 시간(hr)을 의미한다.

[387]

[388] [표1]

구분	발광층 화합물	전압(V) (@ 10 mA/cm^2)	효율(cd/A) (@ 10 mA/cm^2)	발 광 색	$T_{95}(\text{hr})$ (@ 20 mA/cm^2)
실시 예 1	GH1	3.51	90.4	녹색	160
실시 예 2	GH2	3.44	89.1	녹색	180
실시 예 3	GH3	3.55	91.7	녹색	155

실시 예 4	GH4	3.47	90.5	녹색	160
실시 예 5	GH5	3.64	91.4	녹색	175
실시 예 6	GH6	3.48	93.2	녹색	170
실시 예 7	GH7	3.51	93.5	녹색	180
실시 예 8	GH8	3.46	88.8	녹색	155
실시 예 9	GH9	3.49	89.1	녹색	175
실시 예 10	GH10	3.57	92.2	녹색	175
비교 예 1	GH-A	3.46	89.3	녹색	90
비교 예 2	GH-B	3.47	93.2	녹색	95
비교 예 3	GH-C	3.87	75.4	녹색	110
비교 예 4	GH-D	3.75	71.8	녹색	105
비교 예 5	GH-E	3.51	88.9	녹색	130

[389]

[390] 상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층의 호스트로 사용하여 제조된 실시예의 유기 발광 소자의 경우, 비교예의 유기 발광 소자에 비하여 전압, 효율 및/또는 수명 측면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[391]

[392] 보다 구체적으로, 상기 실시예의 유기 발광 소자는 비교화합물GH-D를 채용한 비교예 4의 유기 발광 소자 대비 낮은 구동 전압, 높은 효율 및 현저히 향상된 수명 특성을 나타낼 수 있다. 이로써, 벤젠 고리를 기준으로 트리아진 모이어티와 카바졸 모이어티가 입체 장애가 유발되도록 뒤튼린 형태를 갖게 됨에 따라 추가적인 CT(charge transfer) 특성을 나타내는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물

은 소자 특성을 향상시킬 수 있는 반면, 비교화합물GH-D는 카바졸일기가 트리아진의 메타(meta) 위치에 존재하여 입체 장애가 유발될 수 없어 CT 특성을 나타내지 못하므로, 소자 특성 향상에 기여하지 못함을 알 수 있다.

[393]

[394] 또한, 상기 실시예의 유기 발광 소자는 비교화합물GH-A 및 GH-B를 각각 채용한 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자 대비 현저히 향상된 수명 특성을 나타냄을 알 수 있다. 이는 비교화합물GH-A 및 GH-B의 경우 카바졸 모이어티의 전자 부족 현상으로 인해 분자의 안정성이 저하되었기 때문으로 판단되며, 이에 따라 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 비교화합물GH-A 및 GH-B와 달리 카바졸 모이어티에 중수소를 가짐으로써 향상된 분자의 안정성을 가짐이 확인된다.

[395]

[396] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 R₁₂ 위치에 디벤조푸라닐 또는 디벤조티오페닐이 위치하는 화합물의 효과 비교를 위해, 비교화합물 GH-C를 채용한 비교예 3의 유기 발광 소자의 특성을 확인하였다. 그 결과, 비교예 3의 유기 발광 소자는 실시예의 유기 발광 소자 대비 전압, 효율 및 수명 측면 모두에서 열악한 특성을 나타냄을 알 수 있고, 이는 디벤조푸라닐-트리아진-카바졸 모이어티들이 모두 뒤틀린 구조를 형성하는 경우 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서의 디벤조푸라닐/디벤조티오페닐이 나타내는 분자의 안정성 및 전자 특성 향상 효과를 나타내지 못했기 때문으로 판단된다.

[397]

[398] 또한, 벤젠 고리에서 카바졸일기가 트리아진의 오쏘 위치에 존재하고, 카바졸일기의 파라 위치에 디벤조푸라닐/디벤조티오페닐기가 존재하는 구조의 경우, 디벤조푸라닐/디벤조티오페닐기의 전자 받개(electron donating) 특성이 카바졸일기에 직접적인 영향을 주기 때문에 카바졸일기의 전자 부족 현상이 보다 심해질 수 있다. 따라서, 이러한 구조를 가지면서 카바졸일기의 일부만 중수소가 치환되어 있는 화합물의 경우 카바졸일기에 존재하는 수소 원자의 불안정성으로 인하여, 상기 화합물을 채용한 소자의 수명 특성의 증가폭이 크지 않을 수 있다. 이는 실시예의 유기 발광 소자의 수명 데이터 및 비교화합물 GH-E를 채용한 유기 발광 소자의 수명 데이터를 비교하여 확인 가능하다.

[399]

[400] [부호의 설명]

[401] 1: 기판 2: 양극

[402] 3: 유기물층 4: 음극

[403] 5: 정공주입층 6: 정공수송층

[404] 7: 전자억제층 8: 발광층

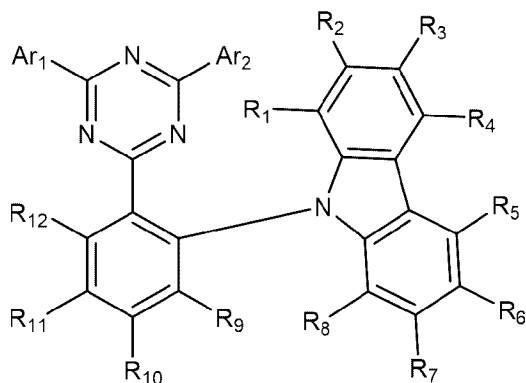
[405] 9: 정공억제층 10: 전자수송층

[406] 11: 전자주입층 12: 전자 주입 및 수송층

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

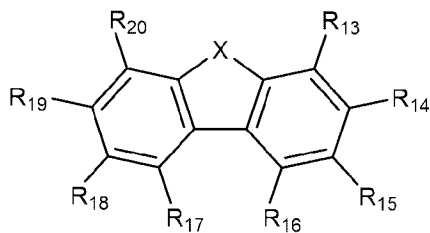
Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이고, 단, R_1 내지 R_8 중 적어도 하나는 중수소이고,

R_9 내지 R_{11} 중 어느 하나는 하기 화학식 2와의 결합이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고,

R_{12} 는 수소 또는 중수소이고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X는 O 또는 S이고,

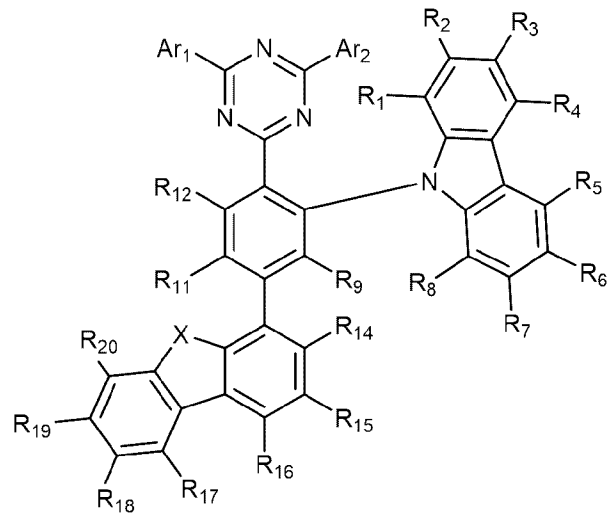
R_{13} 내지 R_{16} 중 어느 하나는 상기 화학식 1과의 결합이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이고,

R_{17} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴이다.

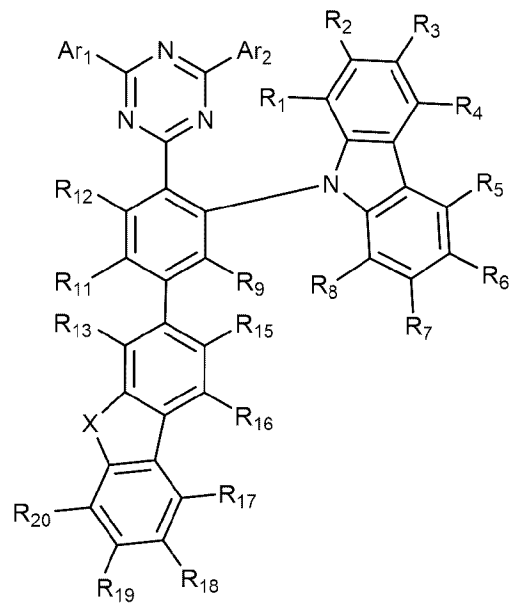
[청구항 2] 제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-6 중 어느 하나로 표시되는,
화합물:

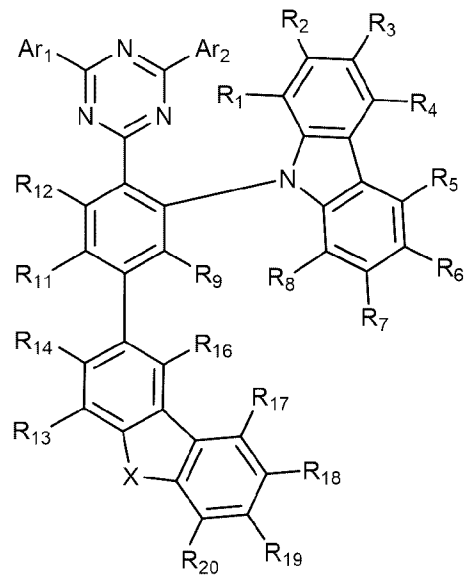
[화]학식 1-1]



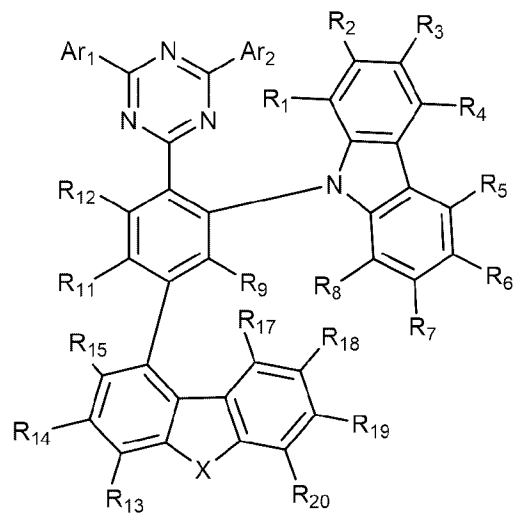
[화]학식 1-2]



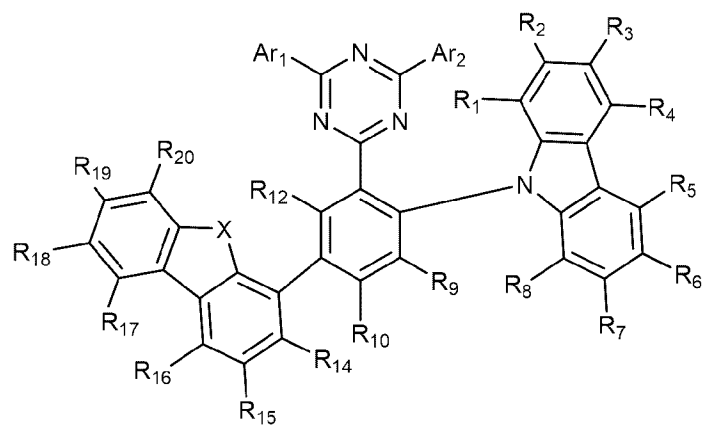
[화]학식 1-3]



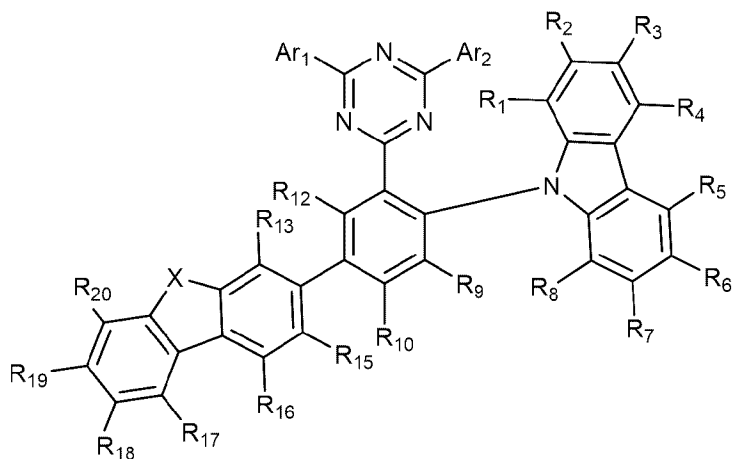
[화] 화학식 1-4]



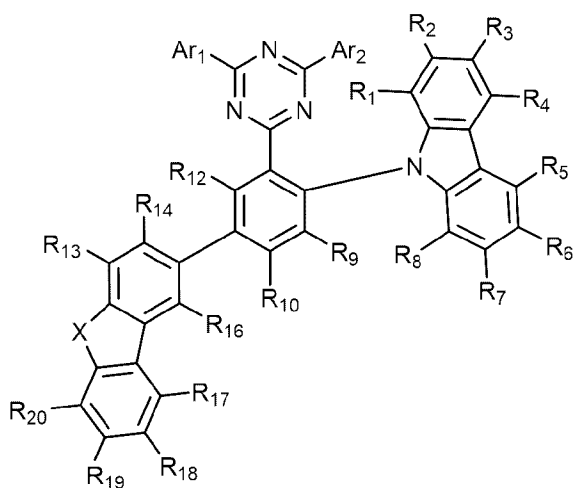
[화] 화학식 1-5]



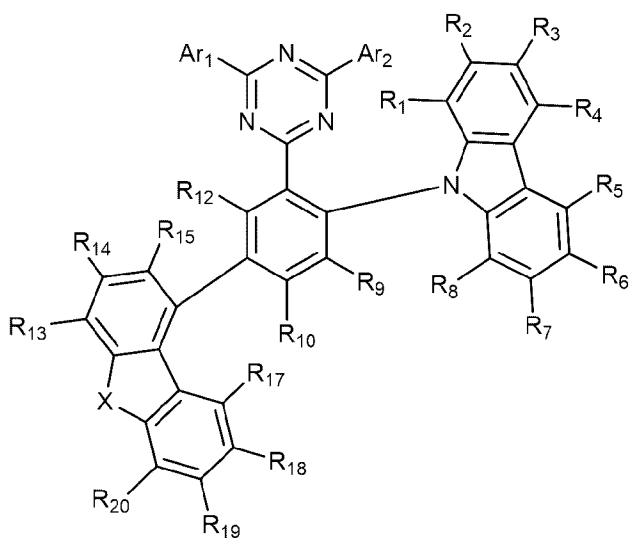
[화] 화학식 1-6]



[화학식 1-7]



[화학식 1-8]



상기 화학식 1-1 내지 1-8에서,

Ar₁, Ar₂, X, 및 R₁ 내지 R₂₀은 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 3]

제1항에 있어서,

R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로, 중수소; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐인,
화합물.

[청구항 4] 제1항에 있어서,
 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐; 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐; 비페닐릴; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 비페닐릴인,
화합물.

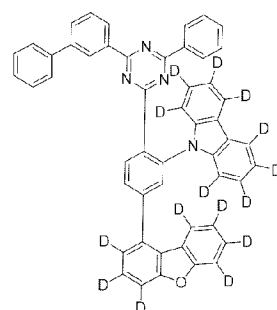
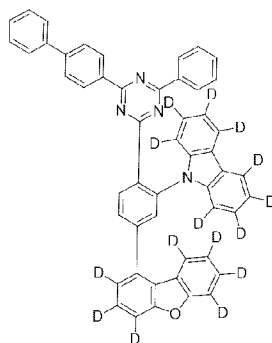
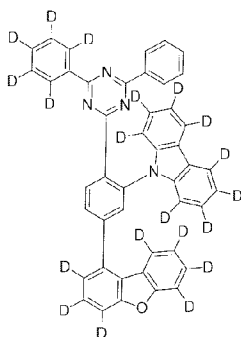
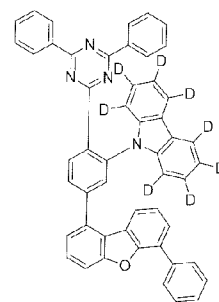
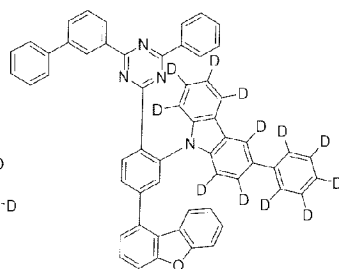
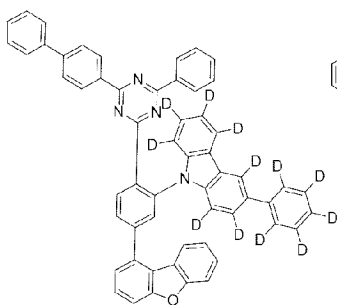
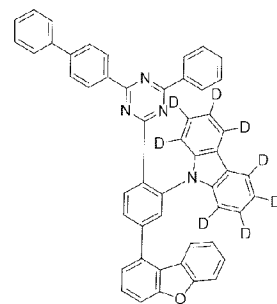
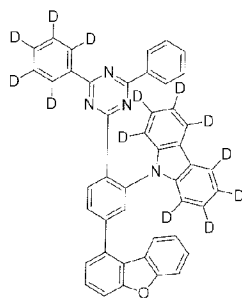
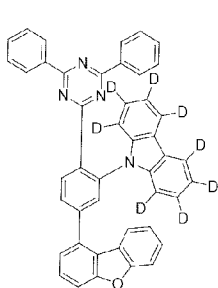
[청구항 5] 제1항에 있어서,
 R_9 내지 R_{11} 중 화학식 2와 결합하지 않은 나머지는 모두 수소인,
화합물.

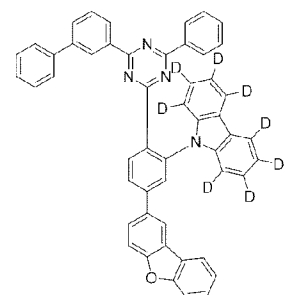
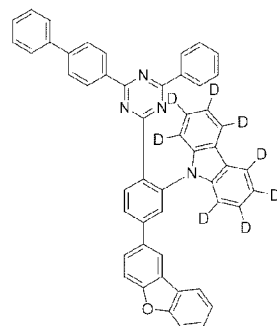
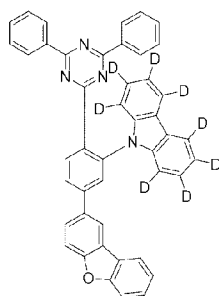
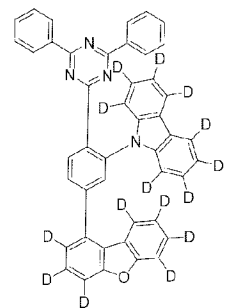
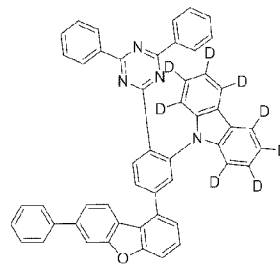
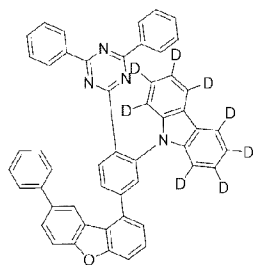
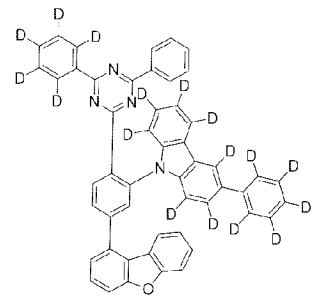
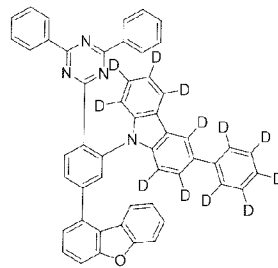
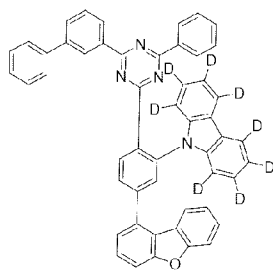
[청구항 6] 제1항에 있어서,
 R_{12} 는 수소인,
화합물.

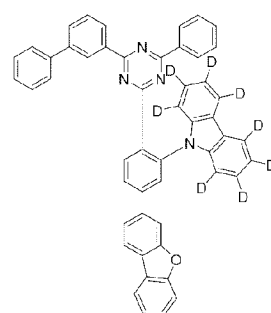
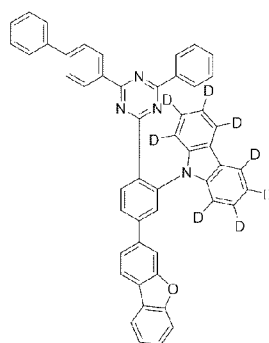
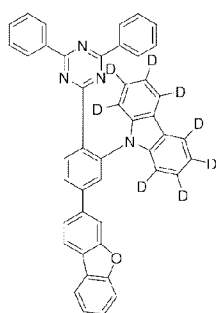
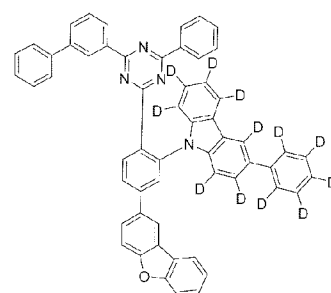
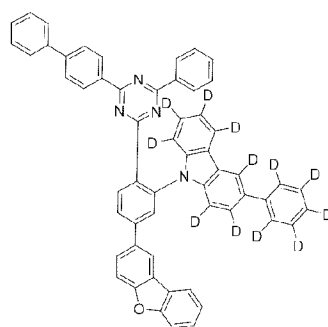
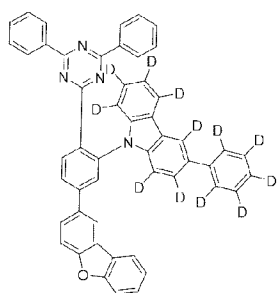
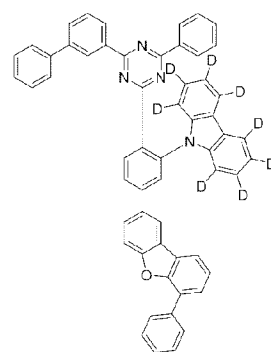
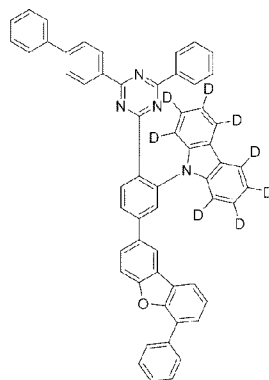
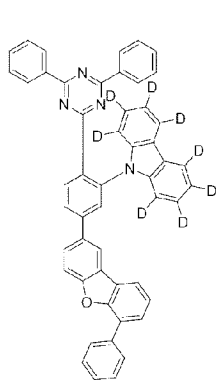
[청구항 7] 제1항에 있어서,
 R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 페닐; 또는 1개 이상의 중수소로 치환된 페닐인,
화합물.

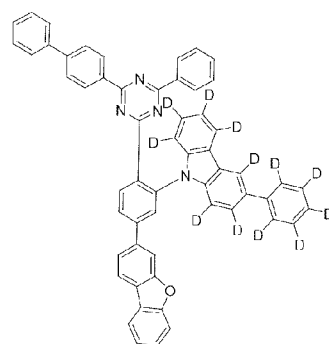
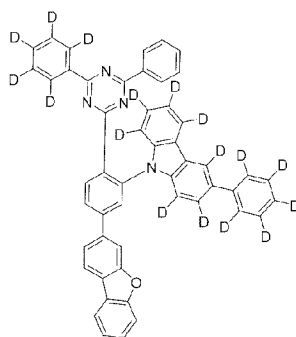
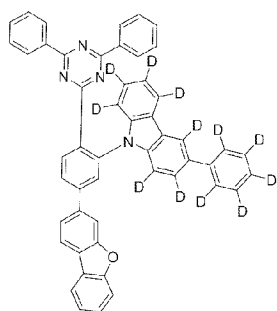
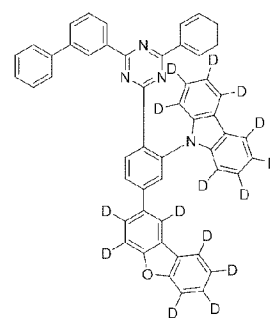
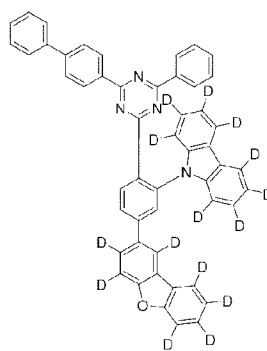
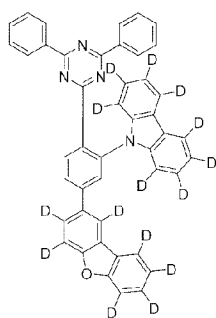
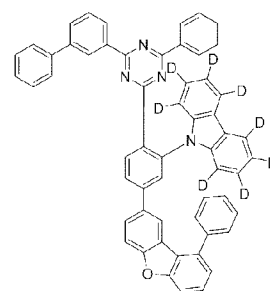
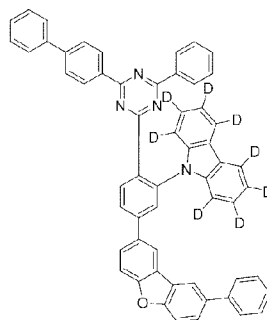
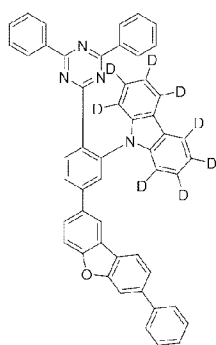
[청구항 8] 제1항에 있어서,
 R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 이 모두 수소이거나; 모두 중수소이거나; R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 페닐이고 나머지는 모두 수소이거나; 또는 R_{13} 내지 R_{16} 중 화학식 1과 결합하지 않은 나머지 및 R_{17} 내지 R_{20} 중 하나가 5개의 중수소로 치환된 페닐이고 나머지는 모두 중수소인,
화합물.

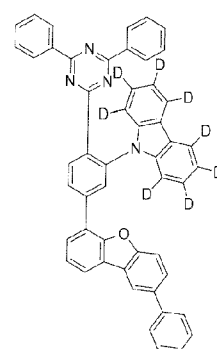
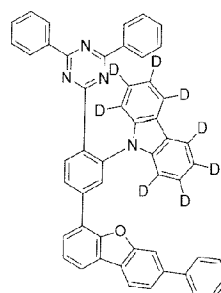
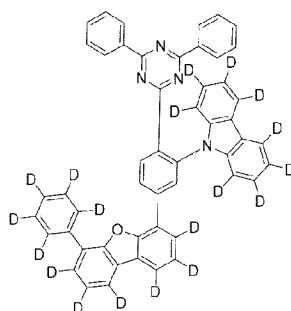
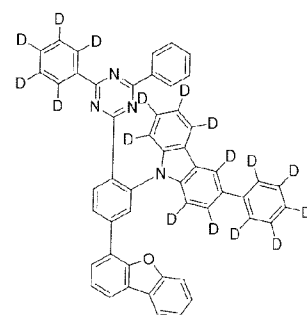
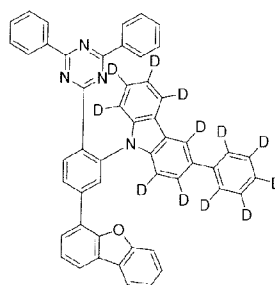
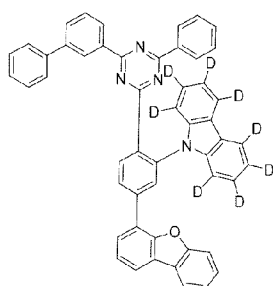
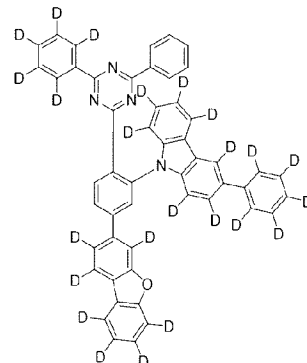
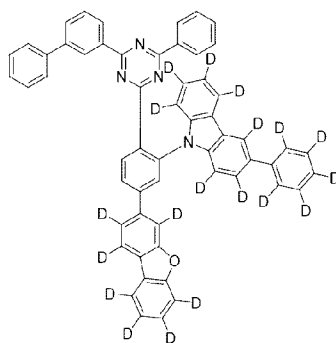
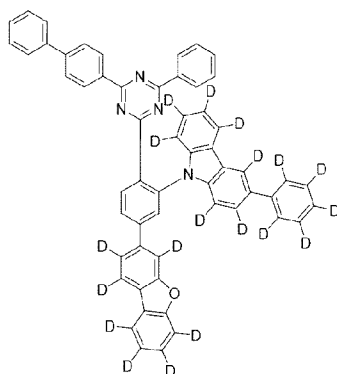
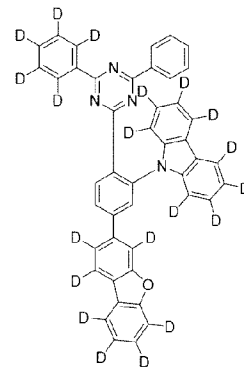
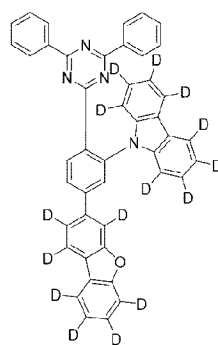
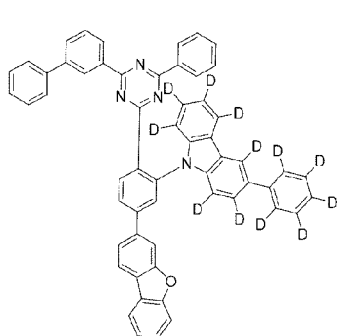
[청구항 9] 제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,
화합물:

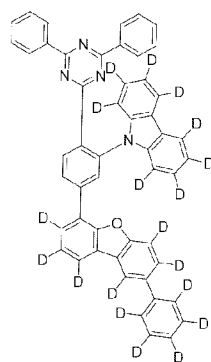
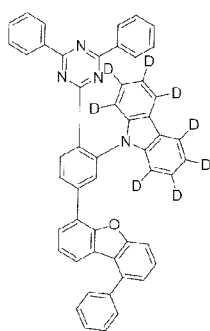
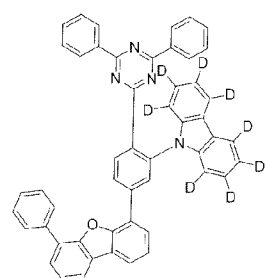
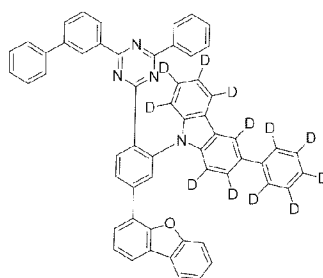
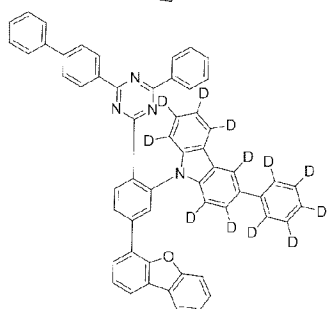
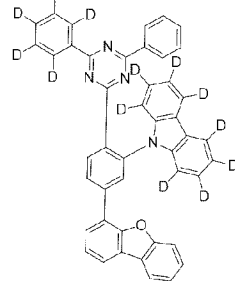
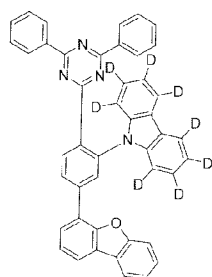
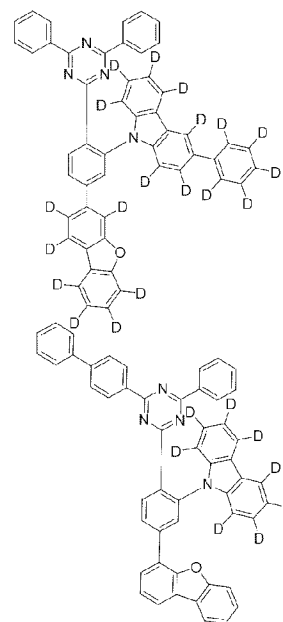
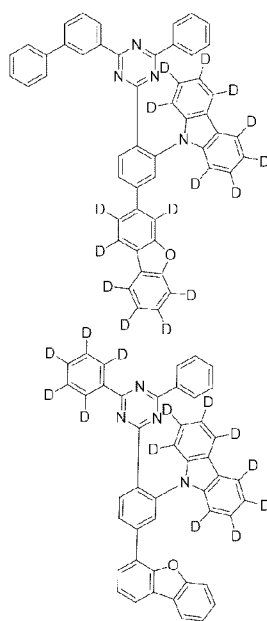
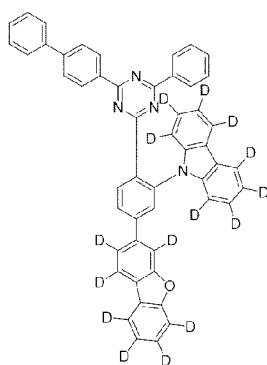


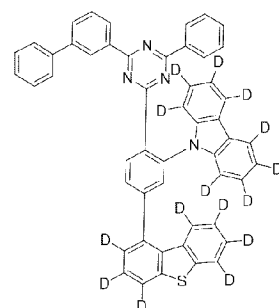
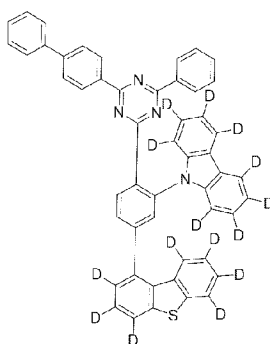
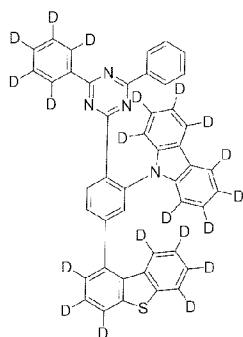
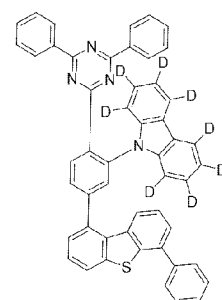
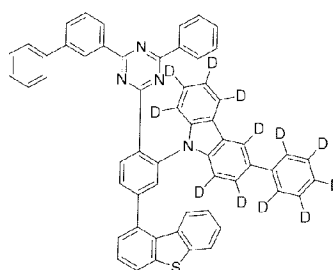
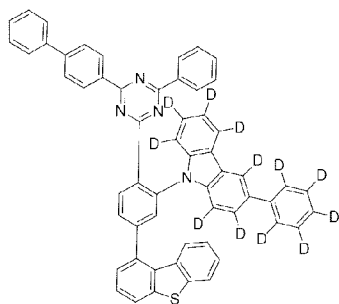
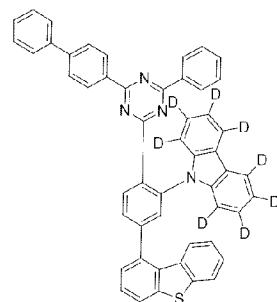
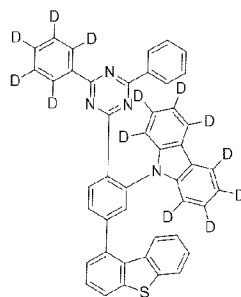
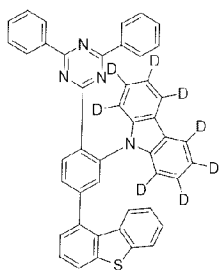


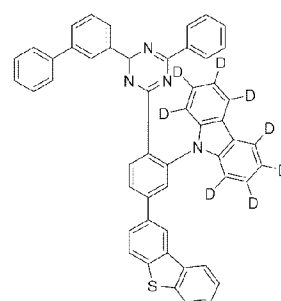
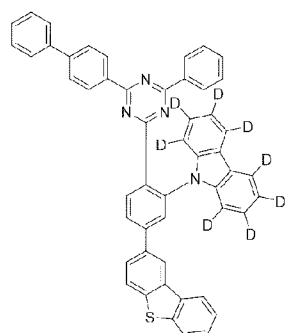
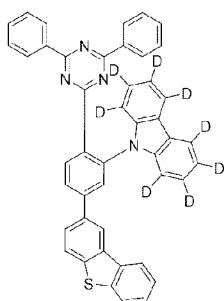
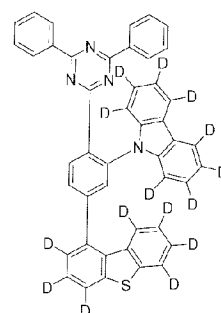
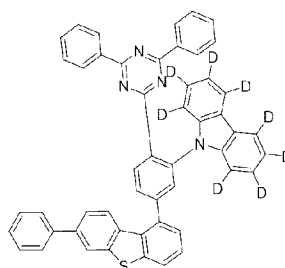
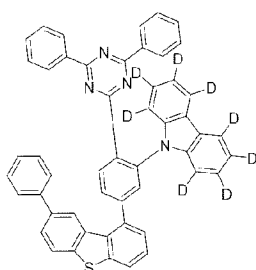
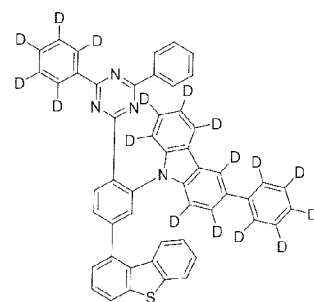
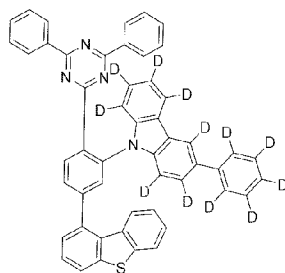
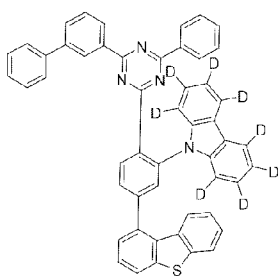


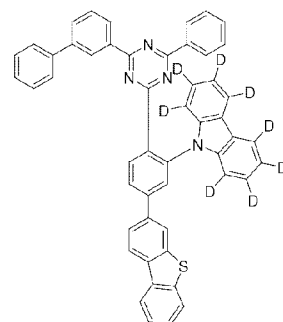
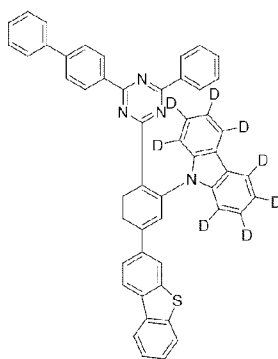
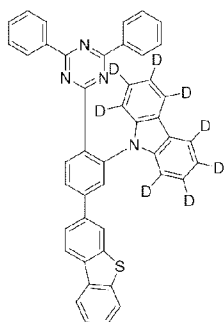
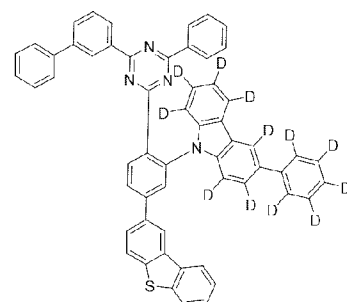
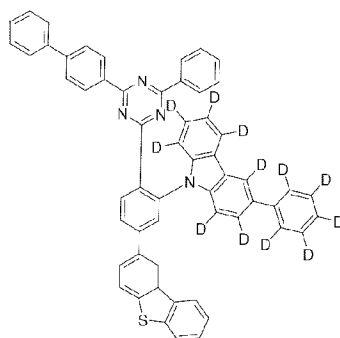
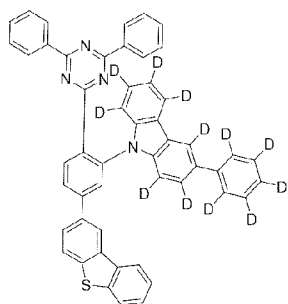
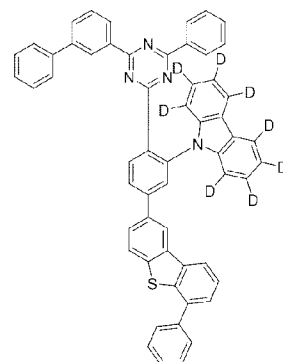
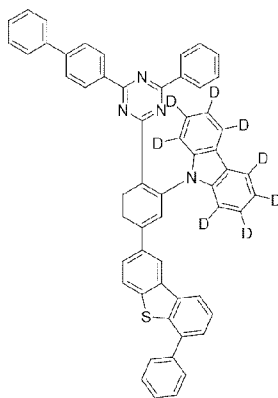
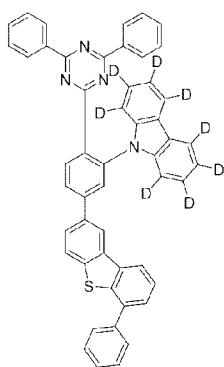


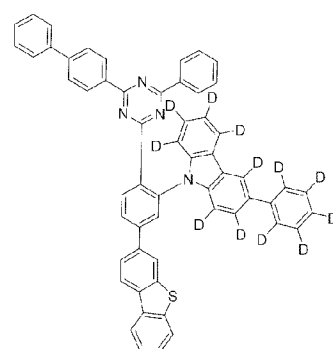
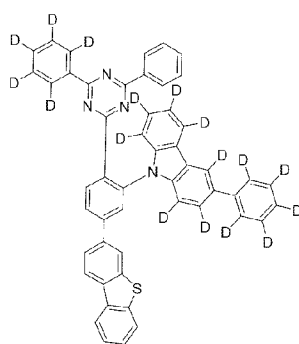
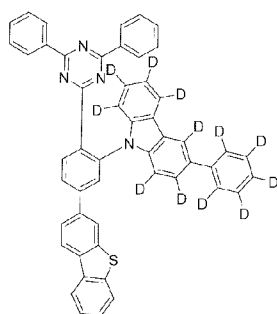
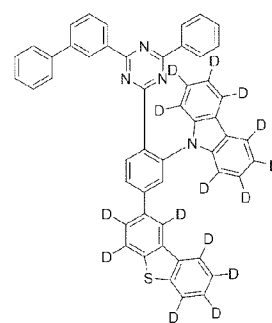
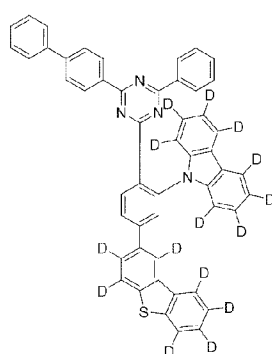
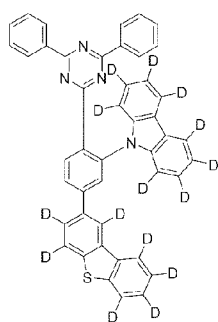
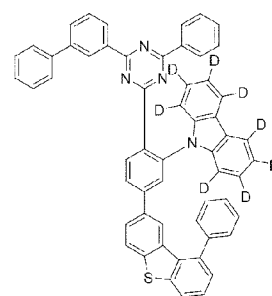
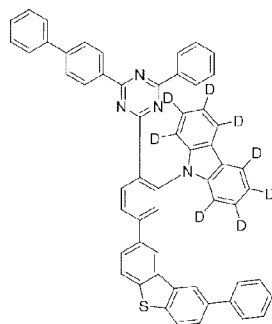
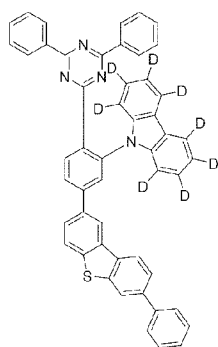


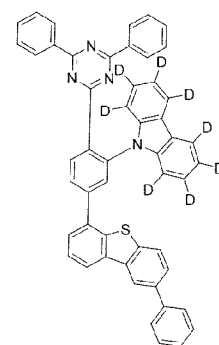
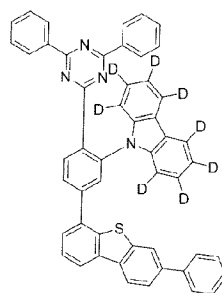
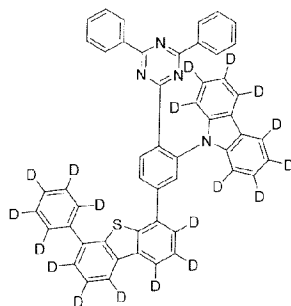
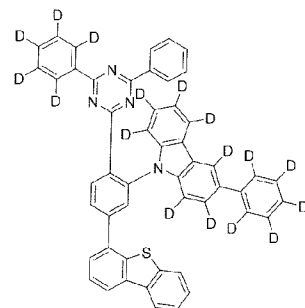
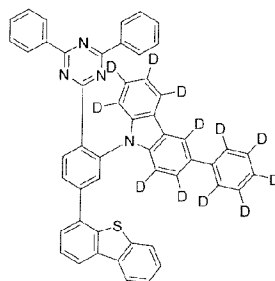
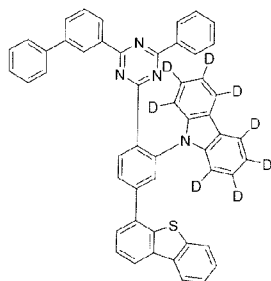
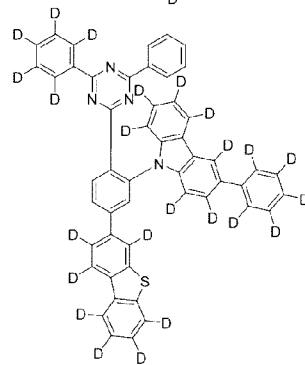
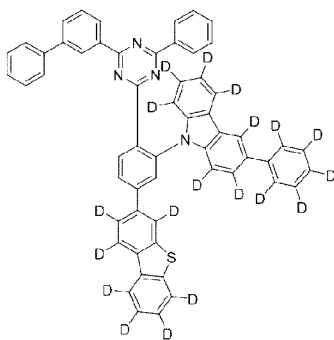
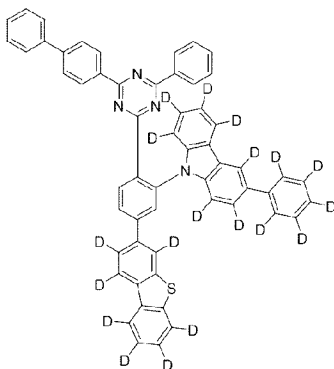
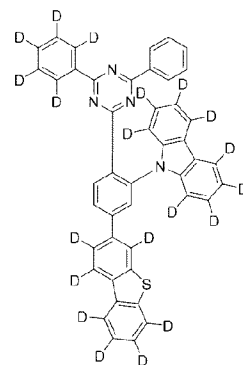
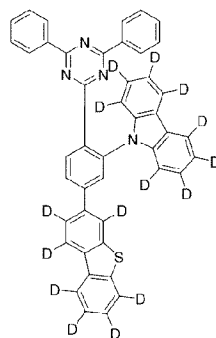
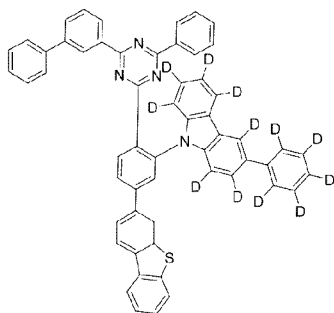


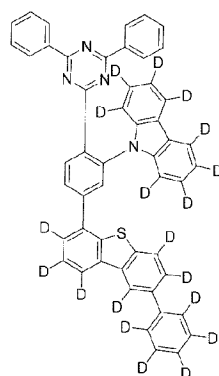
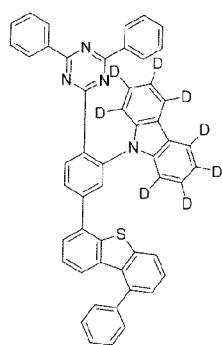
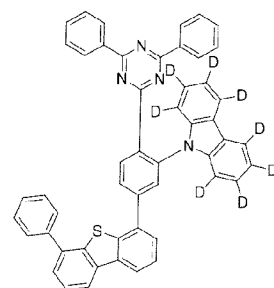
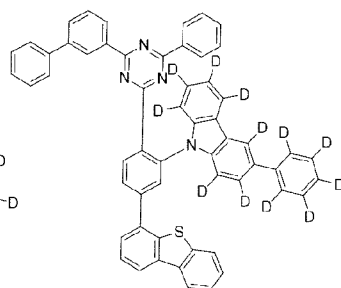
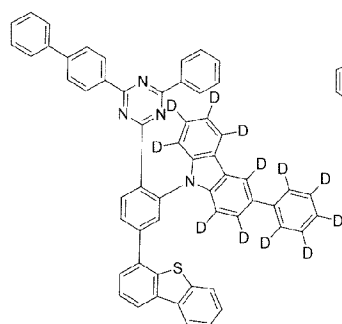
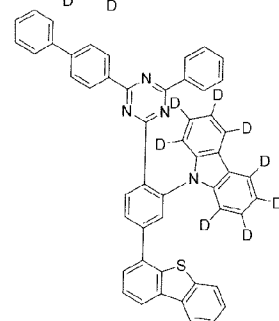
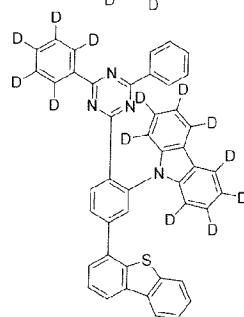
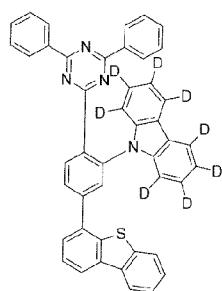
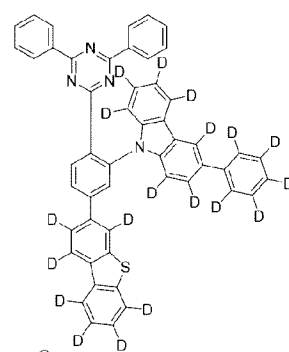
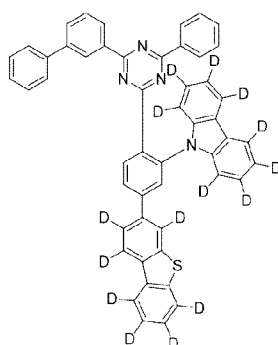
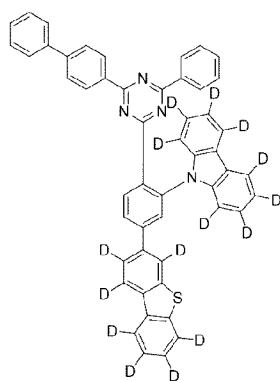


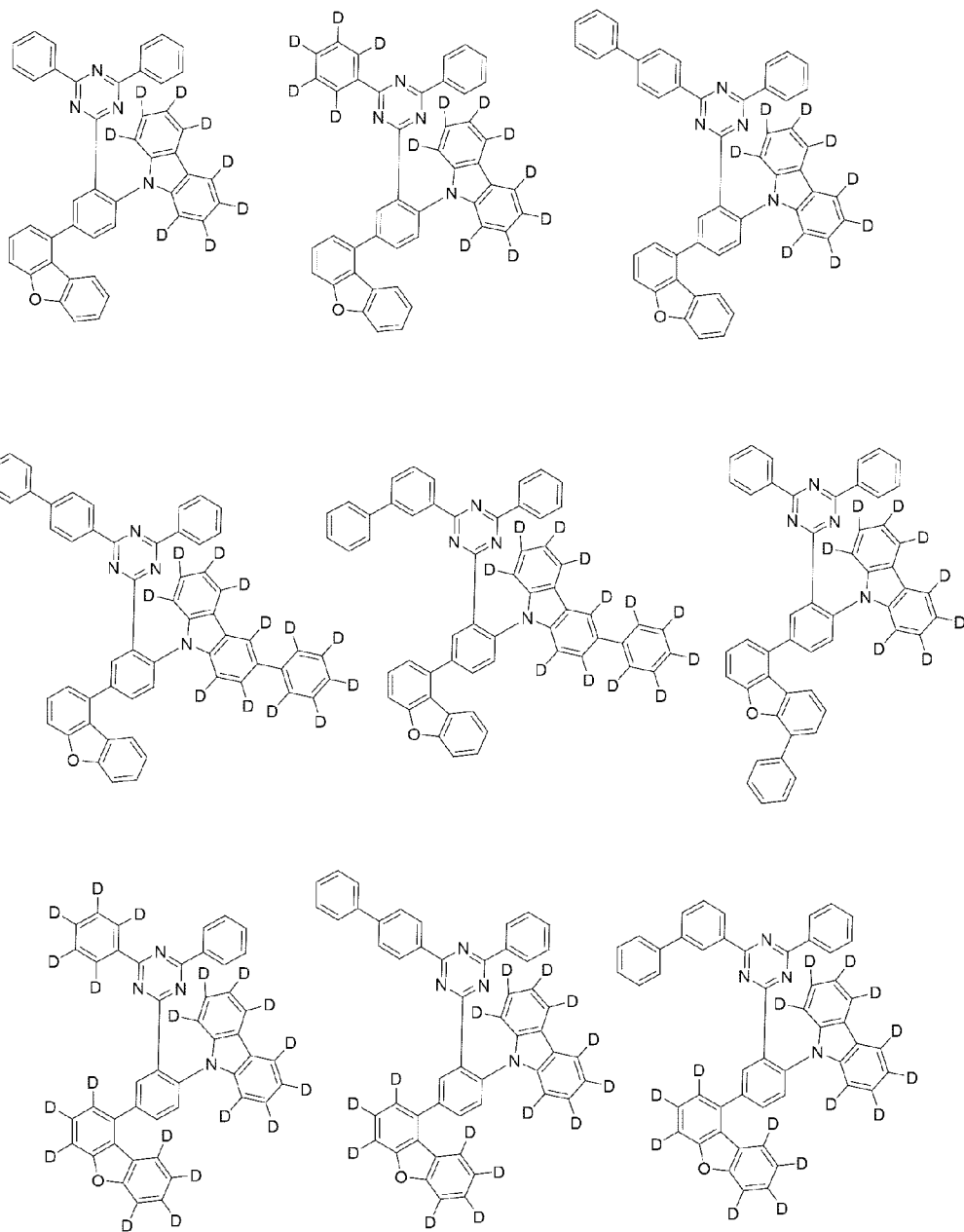


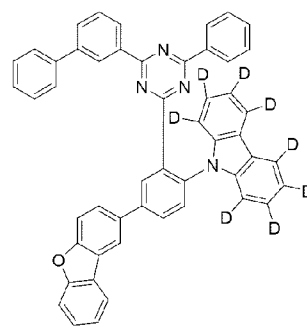
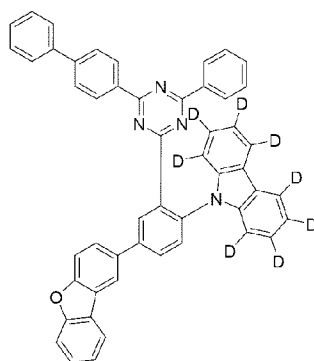
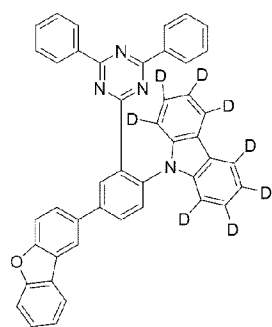
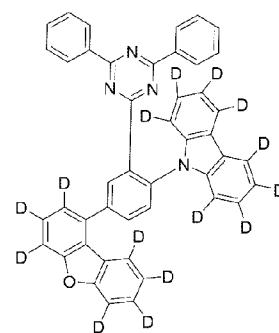
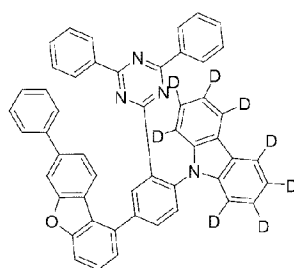
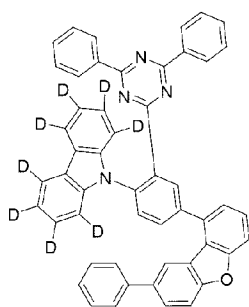
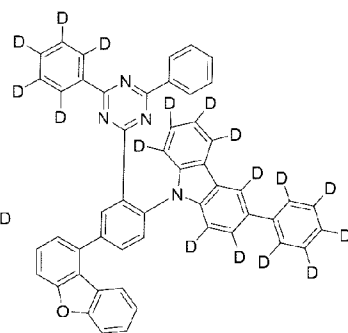
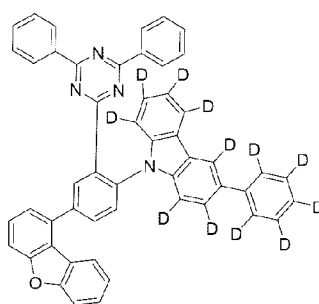
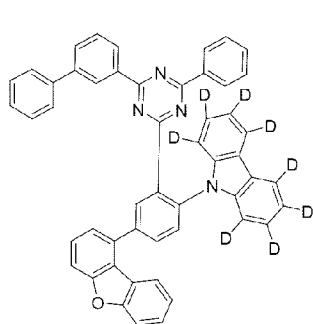


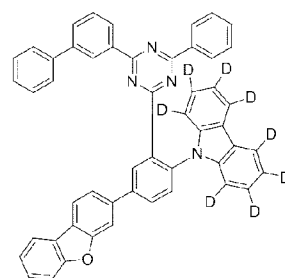
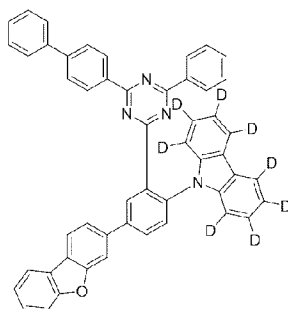
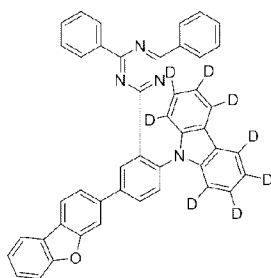
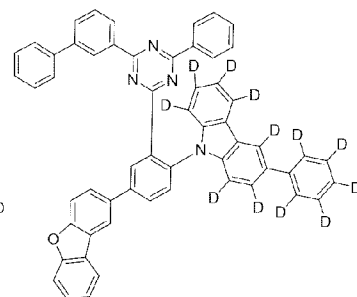
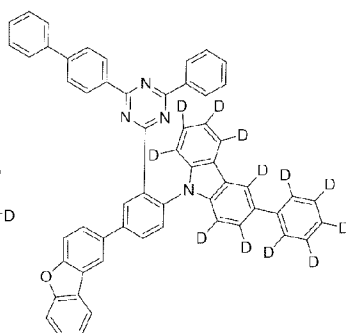
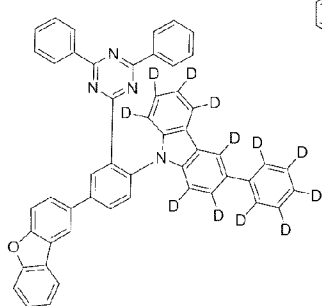
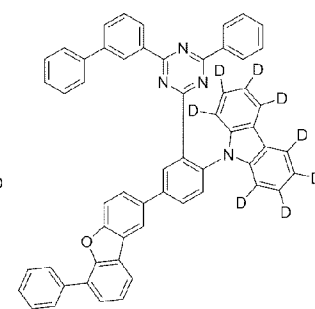
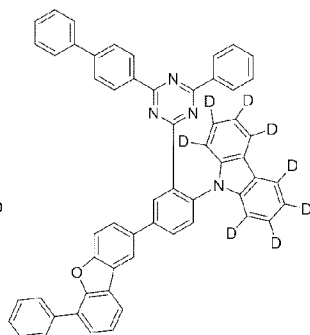
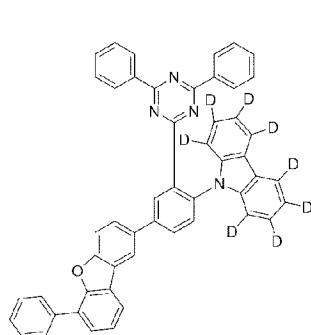


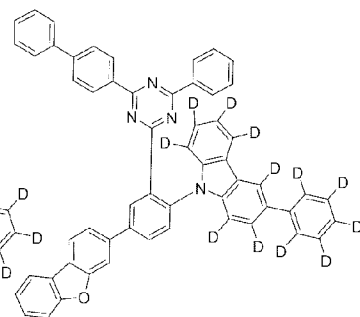
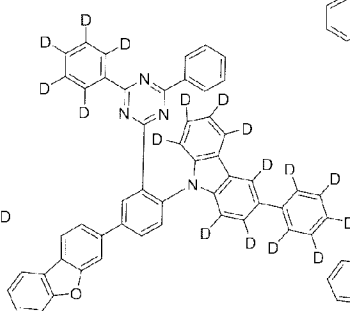
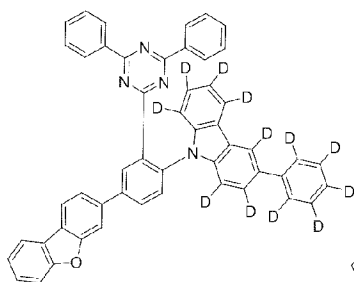
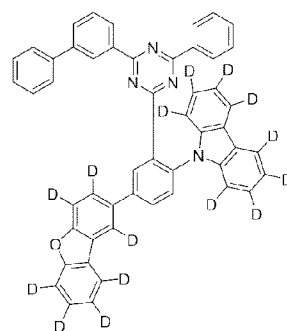
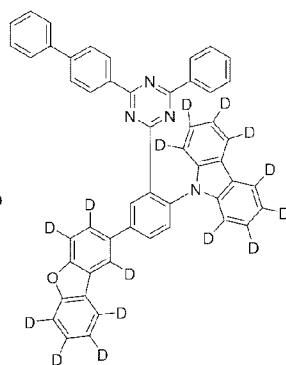
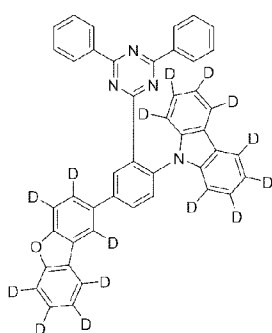
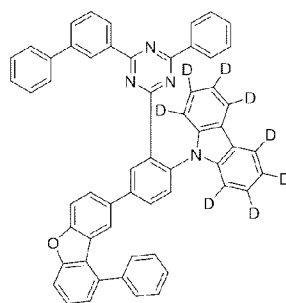
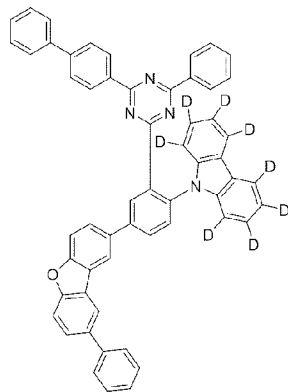
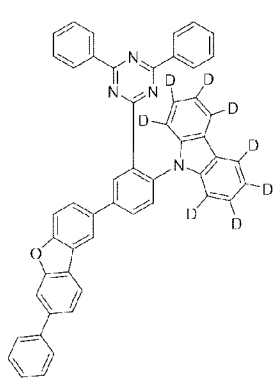


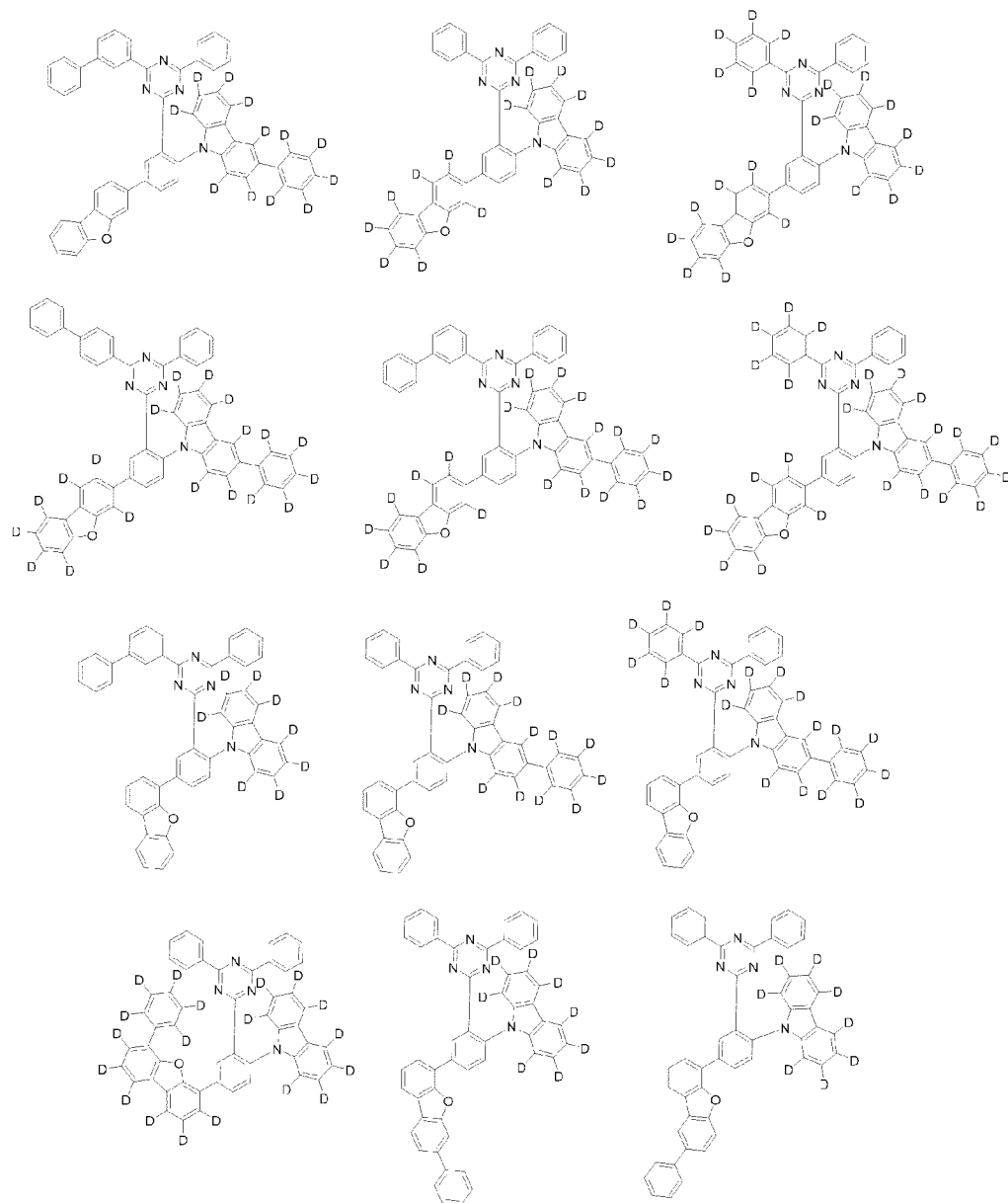


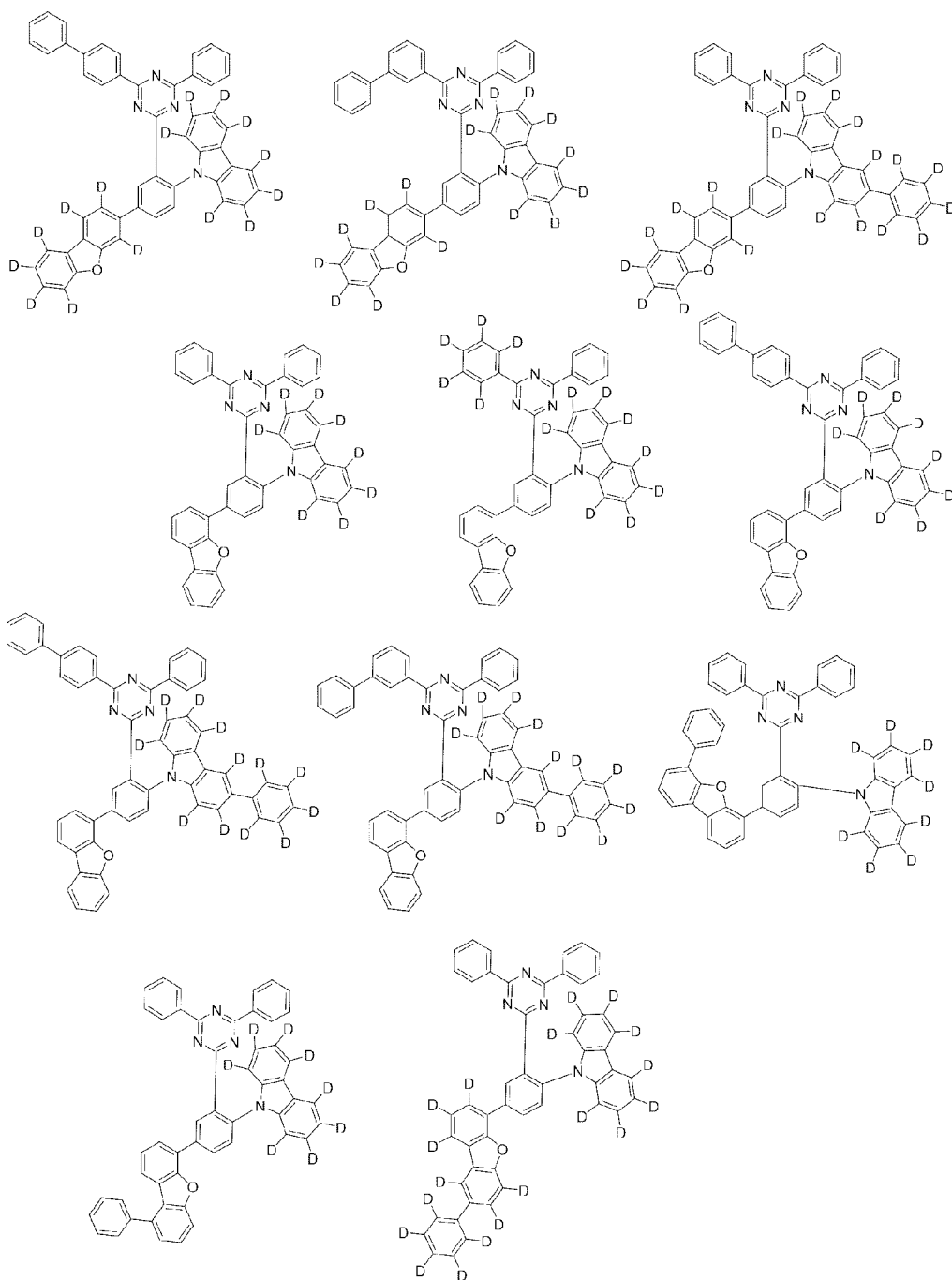


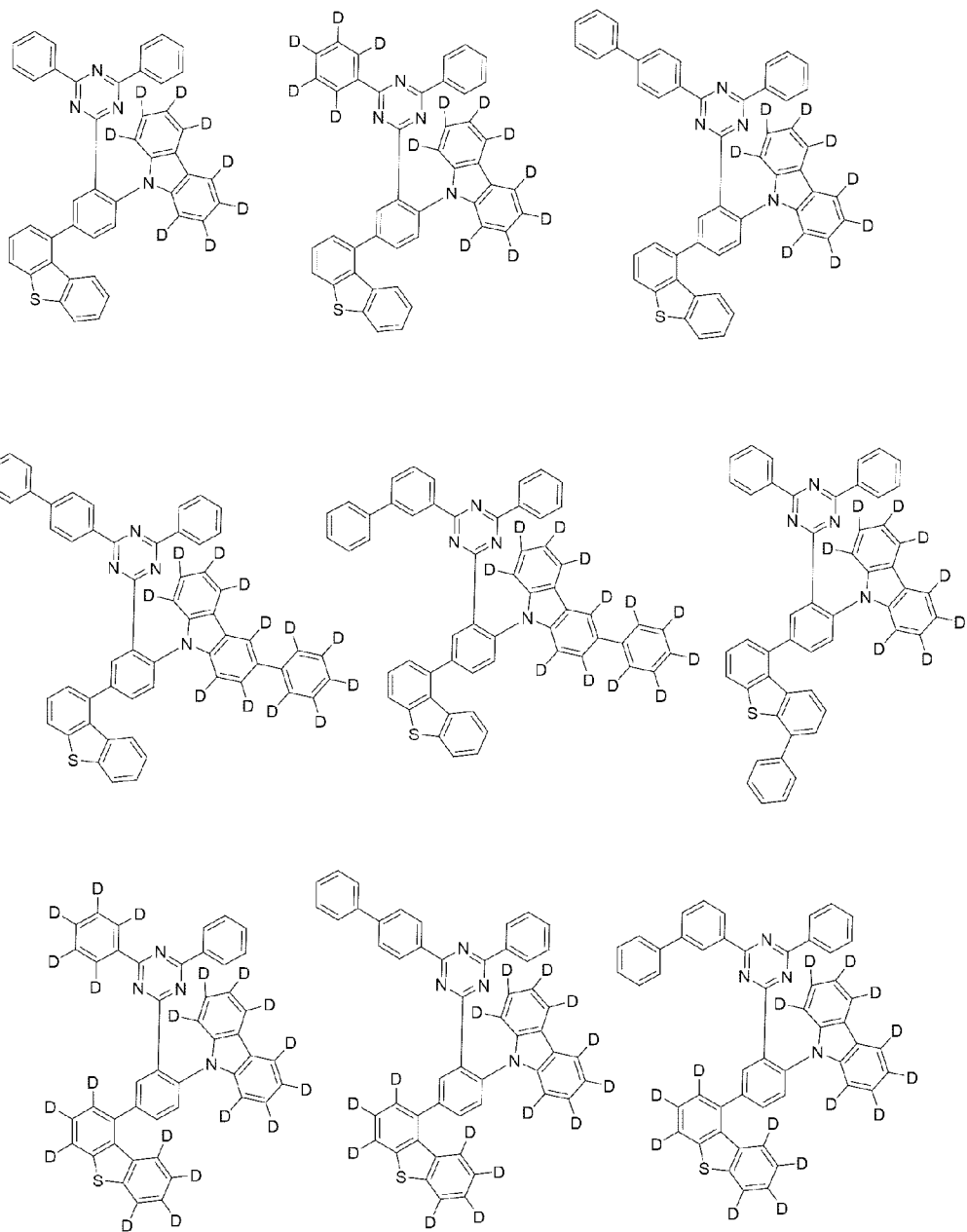


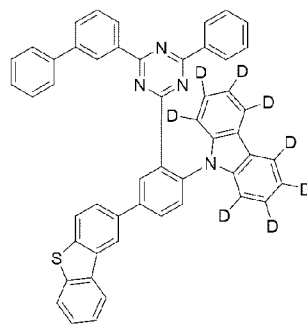
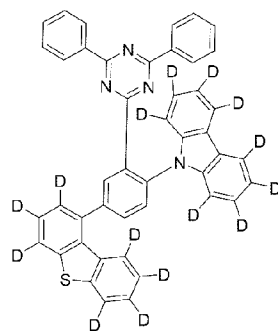
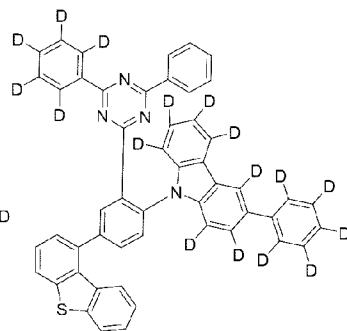


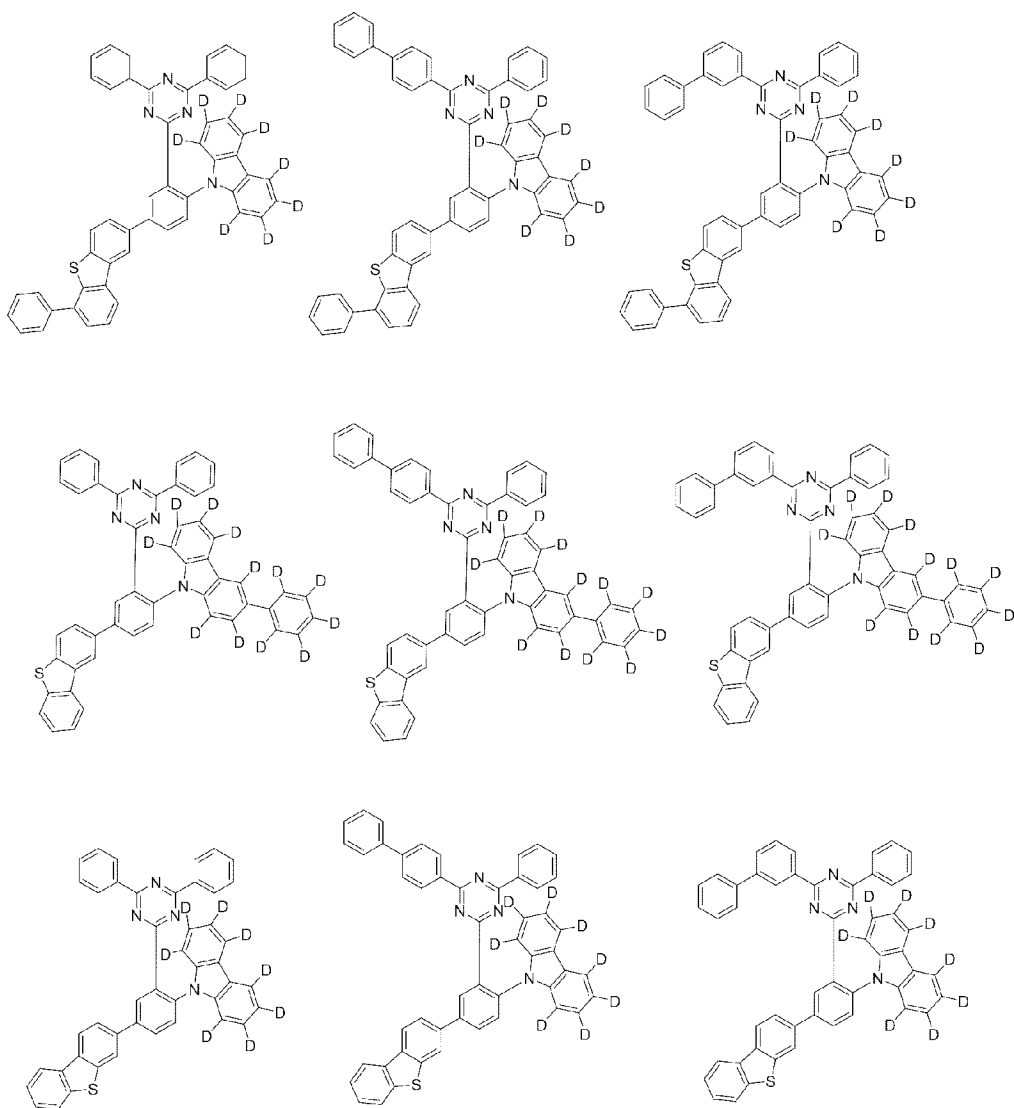


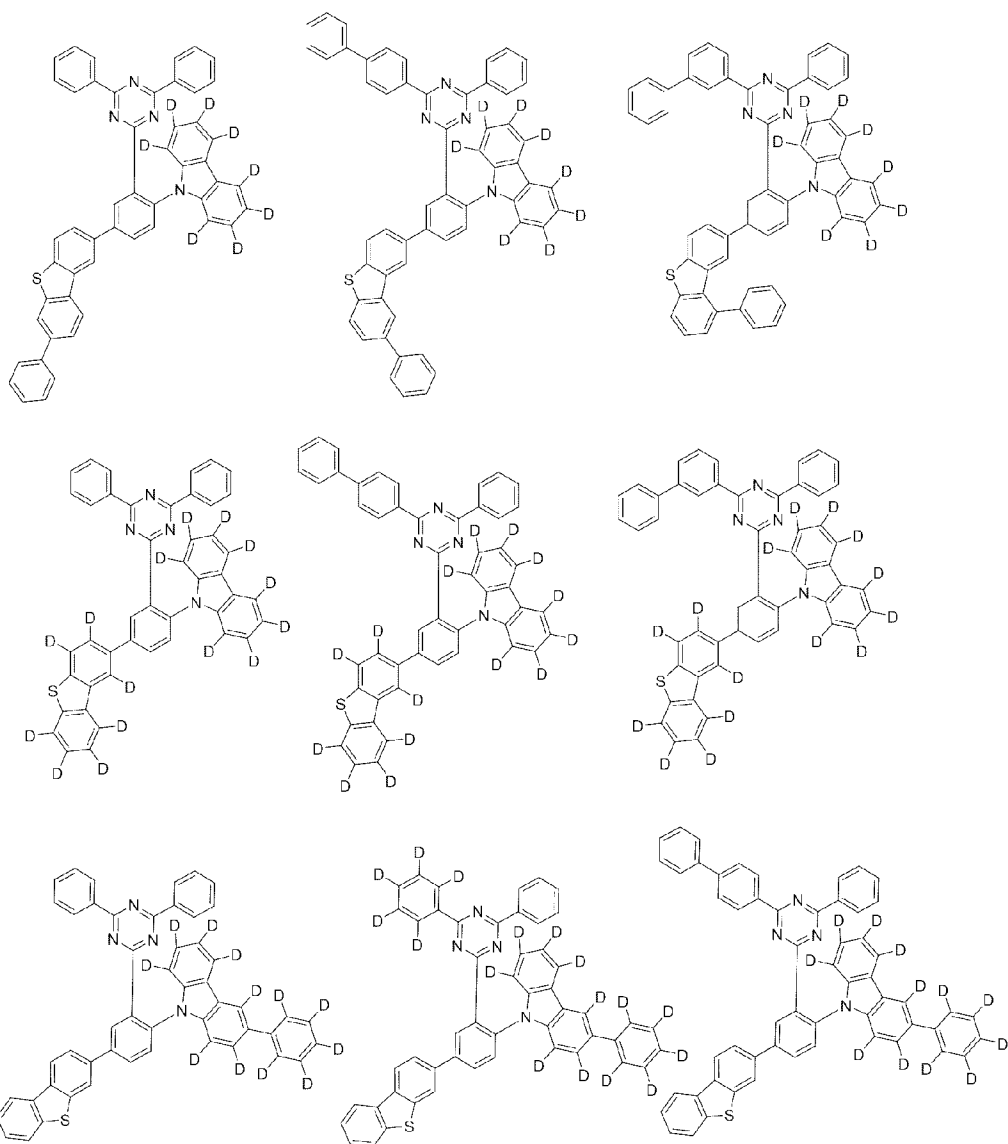


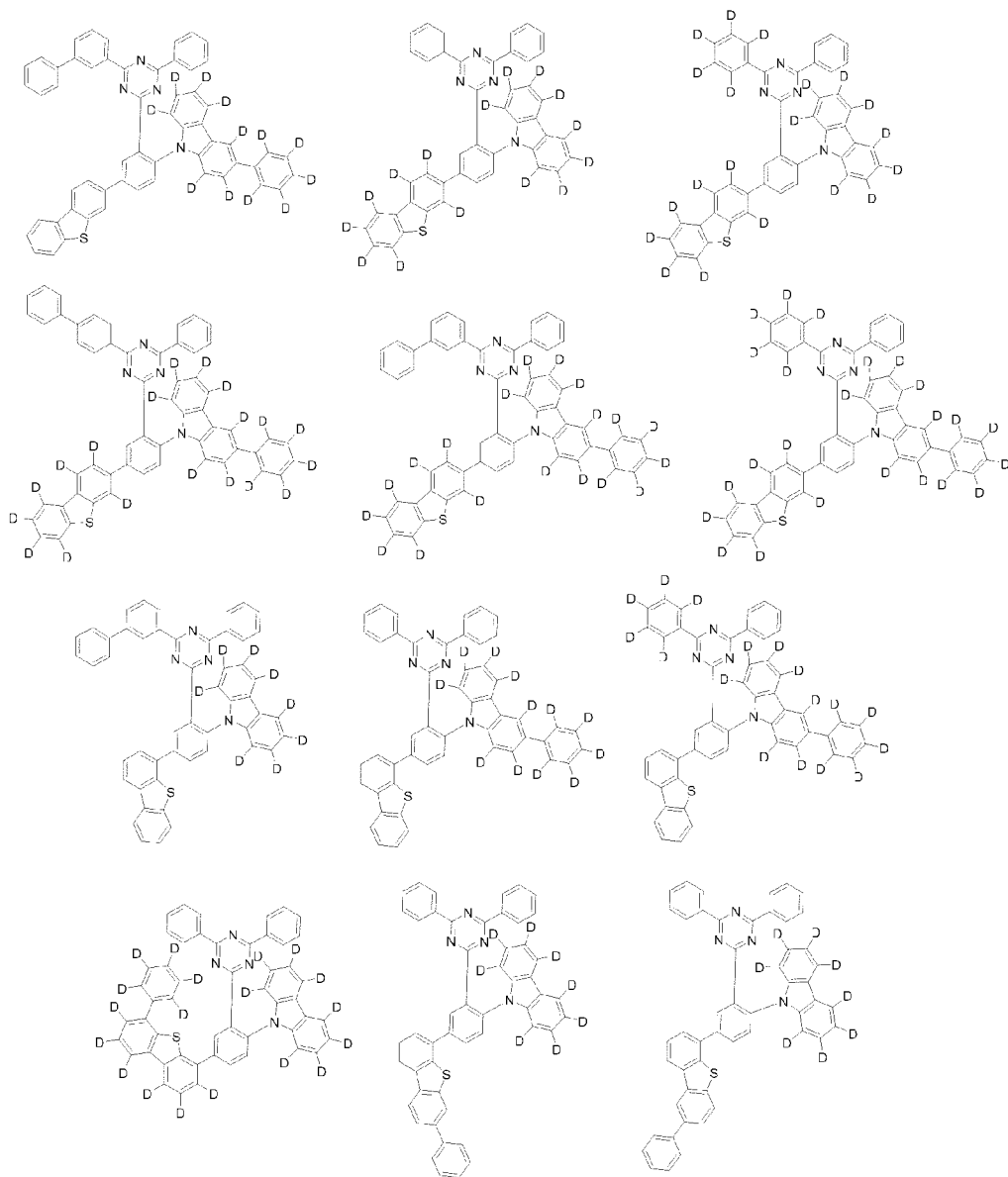


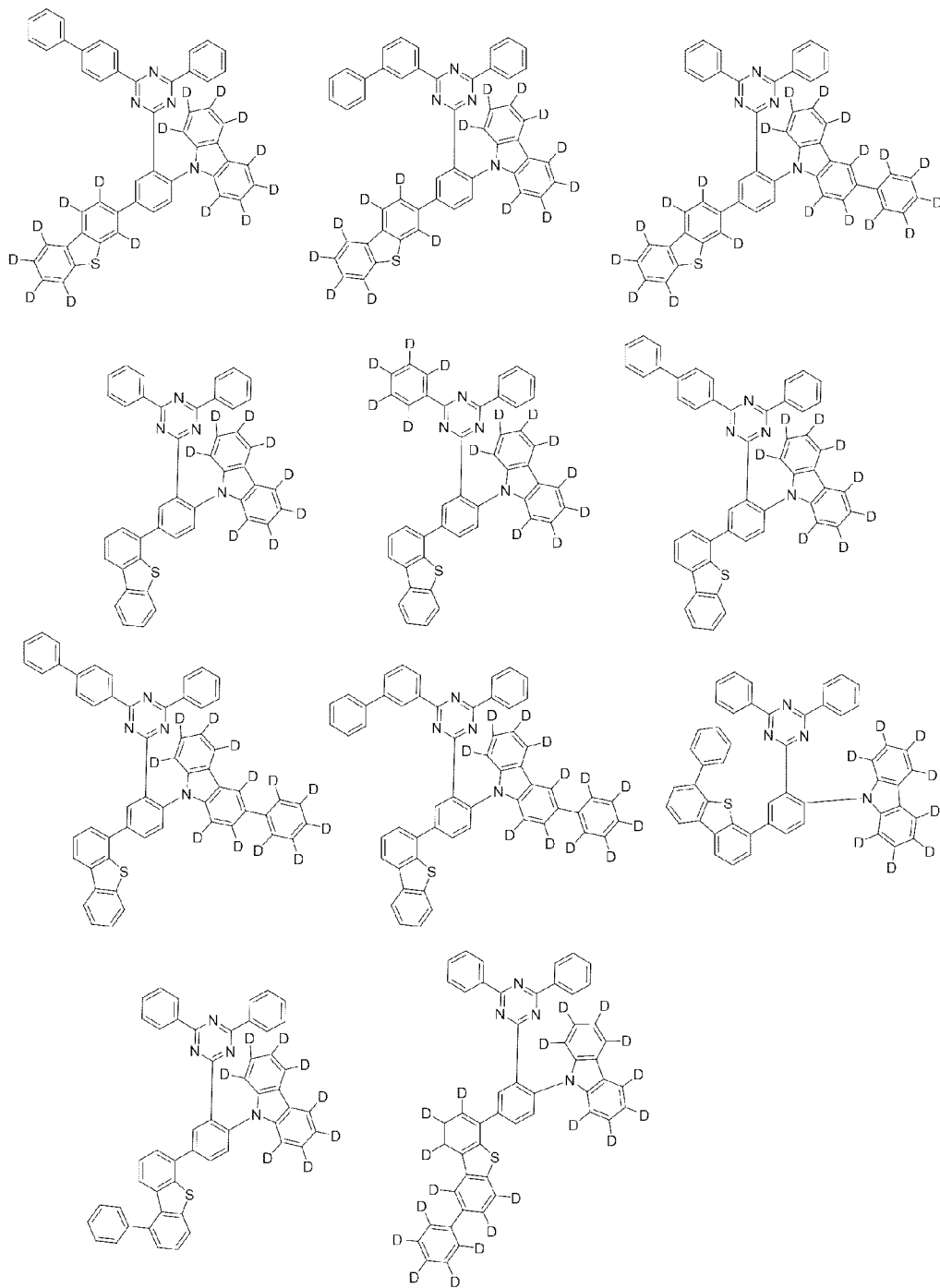












- [청구항 10] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 제1항 내지 제9항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.
- [청구항 11] 제10항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인, 유기 발광 소자.

[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
11
10
9
8
7
6
5
2
1

[도3]

4
12
9
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2024/001891

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; H10K 85/60(2023.01)i; H10K 50/11(2023.01)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)

C07D 405/14(2006.01); C07D 409/14(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01)

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & keywords: 유기광소자 (OLED), 발광층 (light emitting layer), 트리아졸 (triazole)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2022-031033 A1 (LG CHEM, LTD.) 10 February 2022. See claims 1-19.	1-11
A	KR 10-2020-0083171 A (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 08 July 2020 (2020-07-08) See entire document.	1-11
A	KR 10-2021-0067976 A (LG CHEM, LTD.) 08 June 2021 (2021-06-08) See entire document.	1-11
A	US 2020-0331898 A1 (CYNORA GMBH) 22 October 2020 (2020-10-22) See entire document.	1-11
A	WO 2020-032424 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD. et al.) 13 February 2020 (2020-02-13) See entire document.	1-11
PX	WO 2023-200282 A1 (LG CHEM, LTD.) 19 October 2023. See claims 1-19; and page 93.	1-11



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

“D” document cited by the applicant in the international application

“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

13 May 2024

Date of mailing of the international search report

17 May 2024

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2024/001891

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)		Publication date (day/month/year)
WO	2022-031033	A1	10 February 2022	KR 10-2020-0017727	A	19 February 2020
				KR 10-2595751	B1	30 October 2023
KR	10-2020-0083171	A	08 July 2020	CN 111384300	A	07 July 2020
				EP 3675194	A1	01 July 2020
				EP 3675194	B1	05 April 2023
				JP 2020-107868	A	09 July 2020
				JP 7299020	B2	27 June 2023
				US 2020-0212314	A1	02 July 2020
KR	10-2021-0067976	A	08 June 2021	CN 113812015	A	17 December 2021
				US 2022-0384733	A1	01 December 2022
				WO 2021-107741	A1	03 June 2021
US	2020-0331898	A1	22 October 2020	EP 3476915	A1	01 May 2019
				EP 3704210	A1	09 September 2020
				EP 3704210	B1	09 February 2022
				US 11718608	B2	08 August 2023
				US 2023-0278992	A1	07 September 2023
				WO 2019-086297	A1	09 May 2019
WO	2020-032424	A1	13 February 2020	KR 10-2020-0017727	A	19 February 2020
				KR 10-2595751	B1	30 October 2023
WO	2023-200282	A1	19 October 2023	KR 10-2023-0148765	A	25 October 2023

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; H10K 85/60(2023.01)i; H10K 50/11(2023.01)i; C09K 11/06(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 405/14(2006.01); C07D 409/14(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01)

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 내부검색 시스템), STN (Registry, Caplus), Google & 키워드: 유기광소자 (OLED), 발광층 (light emitting layer), 트리아졸 (triazole)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	WO 2022-031033 A1 (LG CHEM, LTD.) 2022.02.10 청구항 1-19	1-11
A	KR 10-2020-0083171 A (삼성전자주식회사) 2020.07.08 전문	1-11
A	KR 10-2021-0067976 A (주식회사 엔지화학) 2021.06.08 전문	1-11
A	US 2020-0331898 A1 (CYNORA GMBH) 2020.10.22 전문	1-11
A	WO 2020-032424 A1 (DUK SAN NEOLUX CO.,LTD. 등) 2020.02.13 전문	1-11
PX	WO 2023-200282 A1 (LG CHEM, LTD.) 2023.10.19 청구항 1-19; 페이지 93	1-11

☐ 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 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

2024년05월13일(13.05.2024)

국제조사보고서 발송일

2024년05월17일(17.05.2024)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

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

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-5373

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2022-031033 A1	2022/02/10	KR 10-2020-0017727 A	2020/02/19
		KR 10-2595751 B1	2023/10/30
KR 10-2020-0083171 A	2020/07/08	CN 111384300 A	2020/07/07
		EP 3675194 A1	2020/07/01
		EP 3675194 B1	2023/04/05
		JP 2020-107868 A	2020/07/09
		JP 7299020 B2	2023/06/27
		US 2020-0212314 A1	2020/07/02
KR 10-2021-0067976 A	2021/06/08	CN 113812015 A	2021/12/17
		US 2022-0384733 A1	2022/12/01
		WO 2021-107741 A1	2021/06/03
US 2020-0331898 A1	2020/10/22	EP 3476915 A1	2019/05/01
		EP 3704210 A1	2020/09/09
		EP 3704210 B1	2022/02/09
		US 11718608 B2	2023/08/08
		US 2023-0278992 A1	2023/09/07
		WO 2019-086297 A1	2019/05/09
WO 2020-032424 A1	2020/02/13	KR 10-2020-0017727 A	2020/02/19
		KR 10-2595751 B1	2023/10/30
WO 2023-200282 A1	2023/10/19	KR 10-2023-0148765 A	2023/10/25