

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(10) 국제공개번호

(43) 국제공개일
2019년 9월 26일 (26.09.2019) WIPO | PCT

WO 2019/182402 A1

- (51) 국제특허분류: C07D 239/26 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C07D 401/10 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) H01L 51/52 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2019/003363
- (22) 국제출원일: 2019년 3월 22일 (22.03.2019)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2018-0033291 2018년 3월 22일 (22.03.2018) KR 공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.) [KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 허정오 (HUH, Jungoh); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 허동욱 (HEO, Dong Uk); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한미연 (HAN, Miyeon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이재탁 (LEE, Jae Tak); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 양정훈 (YANG, Junghoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 윤희경 (YUN, Heekyung); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워837 빌딩, 6층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.



WO 2019/182402 A1

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

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

11
8
7
6
4
3
2
1

(57) Abstract: The present specification provides a compound represented by formula 1 and an organic light emitting device comprising same.

(57) 요약서: 본 명세서는 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 명세서는 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [2] 본 출원은 2018년 03월 22일 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2018-0033291호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

배경기술

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

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [5] 본 명세서는 소자의 구동 전압, 효율 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있는 화합물 및 상기 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하고자 한다.

과제 해결 수단

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

[7] [화학식 1]

[8] **HAr—L1—L2—Ar1**

[9] 상기 화학식 1에 있어서,

[10] HAr은 하기 화학식 A-1 또는 A-2로 표시되는 기이며,

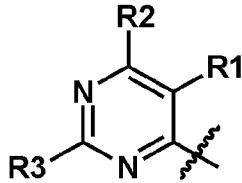
[11] L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이며,

[12] Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기이고,

[13] L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이거나, Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기이며,

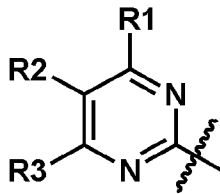
[14] [화학식 A-1]

[15]



[16] [화학식 A-2]

[17]




[18] 상기 화학식 A-1 및 A-2에 있어서,

[19] R1 내지 R3 중 하나는 페닐기이고, 나머지는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 분지쇄의 알킬기; 메틸기; 또는 치환 또는 비치환된 단환의 헤테로아릴기이거나,

[20] R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기이며, 나머지는 치환 또는 비치환된 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기; 알킬기, 아릴기 또는 아릴옥시기로 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 아릴기; 피리디닐기; 디벤조티오펜기; 디벤조퓨라닐기; 또는 카바졸릴기이거나,

[21] R1 내지 R3 중 인접한 기는 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

[22]  는 상기 화학식 1의 L1에 결합되는 부위이다.

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

발명의 효과

[24] 본 명세서에 따른 화학식 1의 화합물을 유기물층의 재료로 포함하는 유기 발광 소자는 낮은 구동전압, 높은 효율 및/또는 장수명의 특성을 갖는다.

도면의 간단한 설명

[25] 도 1, 2 및 8은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자의 예를 도시한

것이다.

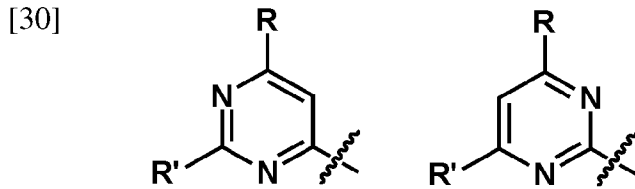
[26] 도 3 내지 7은 2 이상의 스택을 포함하는 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

[27] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.

[28] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[29] 본 명세서의 일 실시상태 따른 화학식 A-1 또는 A-2의 기는 상기 R1 내지 R3의 3개의 sp² 위치에 모두 치환기가 결합되는 반면, 종래의 피리미디닐기인 하기 구조는 3개의 sp² 위치 중 2개의 위치인 R 및 R'에 치환기가 결합된다.



[31] 따라서, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 A-1 및 A-2의 기는 화학 반응에 취약한 사이트가 제거된 새로운 피리미디닐기이다. 이는, 상기 화학식 A-1 및 A-2의 기를 포함하는 화합물의 화학적 안정성이 강화됨을 의미한다. 상기 화학식 1의 화합물을 유기 발광 소자의 유기물층에 포함하면, 유기 발광 소자의 구동 시 발생하는 전자나 정공에 의한 해리(dissociation) 확률을 현저히 떨어뜨리기 때문에, 유기 발광 소자의 전압을 낮추고, 효율을 높이며, 수명 특성을 크게 높일 수 있다.

[32] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 상기 화학식 A-1 및 A-2는 상기 3개의 sp² 위치에 치환기를 포함하므로, 상기 예시한 종래의 피리미디닐기보다 전자량 조절이 용이하여, 이를 유기 발광 소자의 유기물층에 포함하는 유기 발광 소자의 효율 및 수명을 동시에 높일 수 있다.

[33] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 상기 화학식 A-1 및 A-2는 상기 3개의 sp² 위치에 치환기를 포함하므로, 상기 화학식 1의 분자량을 높여주므로, 상기 화학식 1의 화합물로 필름을 형성 시, 막질을 단단하게 해주는 효과가 있다.


[34] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[35] 본 명세서에 있어서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.

[36] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[37] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정되지 않으며, 치환기가 2개 이상

치환되는 경우, 2개 이상의 치환기는 서로 같거나 상이할 수 있다.

- [38] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 알킬기; 시클로알킬기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 아민기; 포스핀옥사이드기; 아릴기; 및 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 또는 2개 이상의 치환기로 치환되거나, 상기 군에서 선택된 치환기 중 2개 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 상기 군에서 선택된 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성하거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.
- [39] 상기 "치환 또는 비치환된"이라는 용어의 정의에서, "상기 군에서 선택된 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성"한다는 것은 "상기 군에서 선택된 어느 치환기'가 '해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기'와 스피로 결합하여 스피로 고리를 형성"하는 것을 의미한다.
- [40] 본 명세서에 있어서, 는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 할로젠기는 플루오로기(-F), 클로로기(-Cl), 브로모기(-Br) 또는 아이오도기(-I)가 될 수 있다.
- [42] 본 명세서에 있어서, 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸부틸, 1-에틸부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸프로필, 1,1-디메틸프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [43] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [44] 본 명세서에 있어서, 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시,

n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

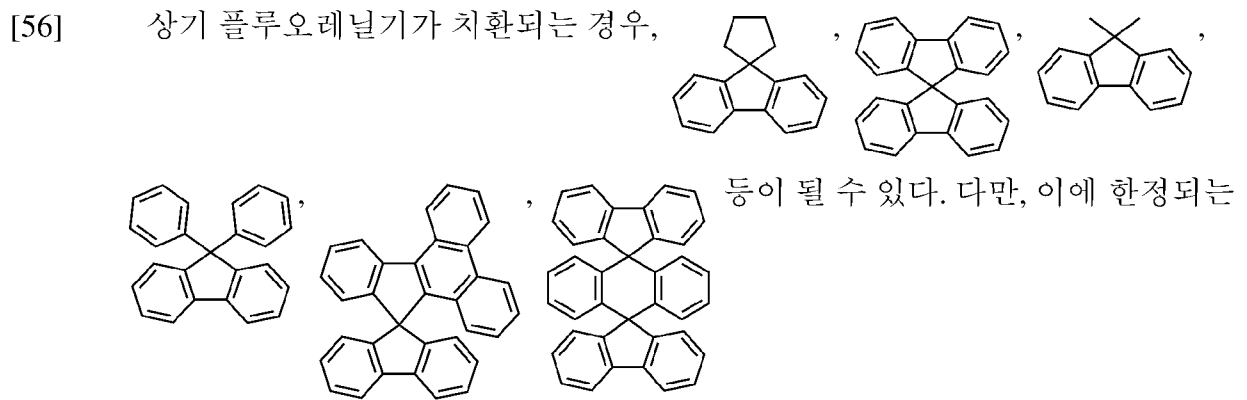
- [45] 본 명세서에 있어서, 아민기는 -NH₂; N-알킬아민기; N,N-디알킬아민기; N,N-(알킬)(아릴)아민기; N,N-(알킬)(헤테로아릴)아민기, N-아릴아민기; N,N-디아릴아민기; N,N-(아릴)(헤테로아릴)아민기; N-헤테로아릴아민기; 및 N,N-디헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 바이페닐아민기, 안트라세닐아민기, (9-메틸-안트라세닐)아민기, 디페닐아민기, 디톨릴아민기, N,N-(페닐)(톨릴)아민기, N,N-(페닐)(바이페닐)아민기, N,N-(페닐)(나프틸)아민기, N,N-(바이페닐)(나프틸)아민기, N,N-(나프틸)(플루오레닐)아민기; N,N-(페닐)(페난트레닐)아민기, N,N-(바이페닐)(페난트레닐)아민기, N,N-(페닐)(플루오레닐)아민기; N,N-(페닐)(터페닐)아민기, N,N-(페난트레닐)(플루오레닐)아민기, N,N-(바이페닐)(플루오레닐)아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [46] 본 명세서에 있어서, N,N-(알킬)(아릴)아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [47] 본 명세서에 있어서, N,N-(아릴)(헤테로아릴)아민기는 아민기의 N에 아릴기 및 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [48] 본 명세서에 있어서, N,N-(알킬)(헤테로아릴)아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [49] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노알킬아민기, 또는 치환 또는 비치환된 디알킬아민기가 있다. 상기 알킬아민기 중의 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기일 수 있다. 상기 알킬기를 2 이상 포함하는 알킬아민기는 직쇄의 알킬기, 분지쇄의 알킬기, 또는 직쇄의 알킬기와 분지쇄의 알킬기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 알킬아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [50] 본 명세서에 있어서, N-알킬아민기, N,N-디알킬아민기, 알킬티옥시기, N,N-(알킬)(아릴)아민기, N,N-(알킬)(헤테로아릴)아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [51] 본 명세서에 있어서, 포스핀옥사이드기는 구체적으로 알킬포스핀옥사이드기, 아릴포스핀옥사이드기 등이 있으며, 더욱 구체적으로 디페닐포스핀옥사이드기, 디나프틸포스핀옥사이드기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인

것이 바람직하며, 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다.

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

[54] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 플루오란테닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[55] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.



것은 아니다.

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

[58] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, N,N-(알킬)(아릴)아민기, N-아릴아민기, N-디아릴아민기 및 N,N-(아릴)(헤테로아릴)아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시기, p-토릴옥시기, m-토릴옥시기, 3,5-디메틸-페녹시기, 2,4,6-트리메틸페녹시기, p-tert-부틸페녹시기, 3-바이페닐옥시기, 4-바이페닐옥시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 4-메틸-1-나프틸옥시기, 5-메틸-2-나프틸옥시기, 1-안트라세닐옥시기, 2-안트라세닐옥시기, 9-안트라세닐옥시기, 1-페난트레닐옥시기, 3-페난트레닐옥시기, 9-페난트레닐옥시기 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[59] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된

모노아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 디아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기를 2 이상 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

- [60] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자(이종 원자)를 1개 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1개 이상 포함할 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 헤테로아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜일기, 퓨라닐기, 피롤릴기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 바이피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 트리아졸릴기, 아크리디닐기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸릴기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도피리미디닐기, 피리도피라지닐기, 피라지노피라지닐기, 피리도인돌릴기, 벤조티에노피리미디닐기, 인데노카바졸릴기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 벤조티오펜일기, 디벤조티오펜일기, 벤조퓨라닐기, 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 페난쓰롤리닐기(phenanthrolinyl), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [61] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴기를 2개 이상 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로아릴기, 다환식 헤테로아릴기, 또는 단환식 헤테로아릴기와 다환식 헤테로아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 전술한 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [62] 본 명세서에 있어서, N-헤테로아릴아민기, N,N-디헤테로아릴아민기, N,N-(아릴)(헤테로아릴)아민기 및 N,N-(알킬)(헤테로아릴)아민기 중의 헤테로아릴기의 예시는 전술한 헤테로아릴기의 예시와 같다.
- [63] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 아릴기에 결합 위치가 두 개 있는 것 즉 2가기를 의미한다. 이들은 각각 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기의 설명이 적용될 수 있다.
- [64] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌기는 헤테로아릴기에 결합 위치가 두 개 있는 것 즉 2가기를 의미한다. 이들은 각각 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기의 설명이 적용될 수 있다.
- [65] 본 명세서에 있어서, 인접한 기가 서로 결합하여 형성되는 치환 또는 비치환된 고리에서, "고리"는 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 의미한다.

[66] 본 명세서에 있어서, 탄화수소고리는 방향족 탄화수소고리, 지방족 탄화수소고리 또는 방향족 탄화수소고리와 지방족 탄화수소고리의 축합고리일 수 있다. 일 실시상태에 있어서, 상기 지방족 탄화수소고리와 방향족 탄화수소고리는 1가가 아닌 것을 제외하고 각각 상기 시클로알킬기와 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

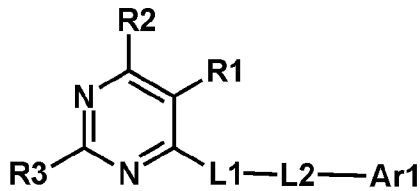
[67] 본 명세서에 있어서, 방향족고리는 단환 또는 다환일 수 있으며, 1가가 아닌 것을 제외하고 상기 아릴기 또는 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[68] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 탄소가 아닌 원자(이종 원자)를 1개 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1개 이상 포함할 수 있다. 상기 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

[69] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시된다.

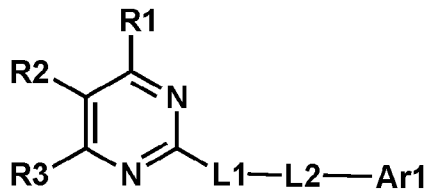
[70] [화학식 1-1]

[71]



[72] [화학식 1-2]

[73]



[74] 상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서,

[75] L1, L2 및 Ar1의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고,

[76] R1 내지 R3의 정의는 상기 화학식 A-1 및 A-2에서 정의한 바와 동일하다.

[77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 C₁₀₋₂₀의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₂₀의 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이다.

[78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 C₁₀₋₁₅의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₁₅의 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이다.

[79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴렌기; 치환 또는 비치환된 2가의 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 2가의

트리아지닐기; 또는 치환 또는 비치환된 2가의 다환의 헥테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이다.

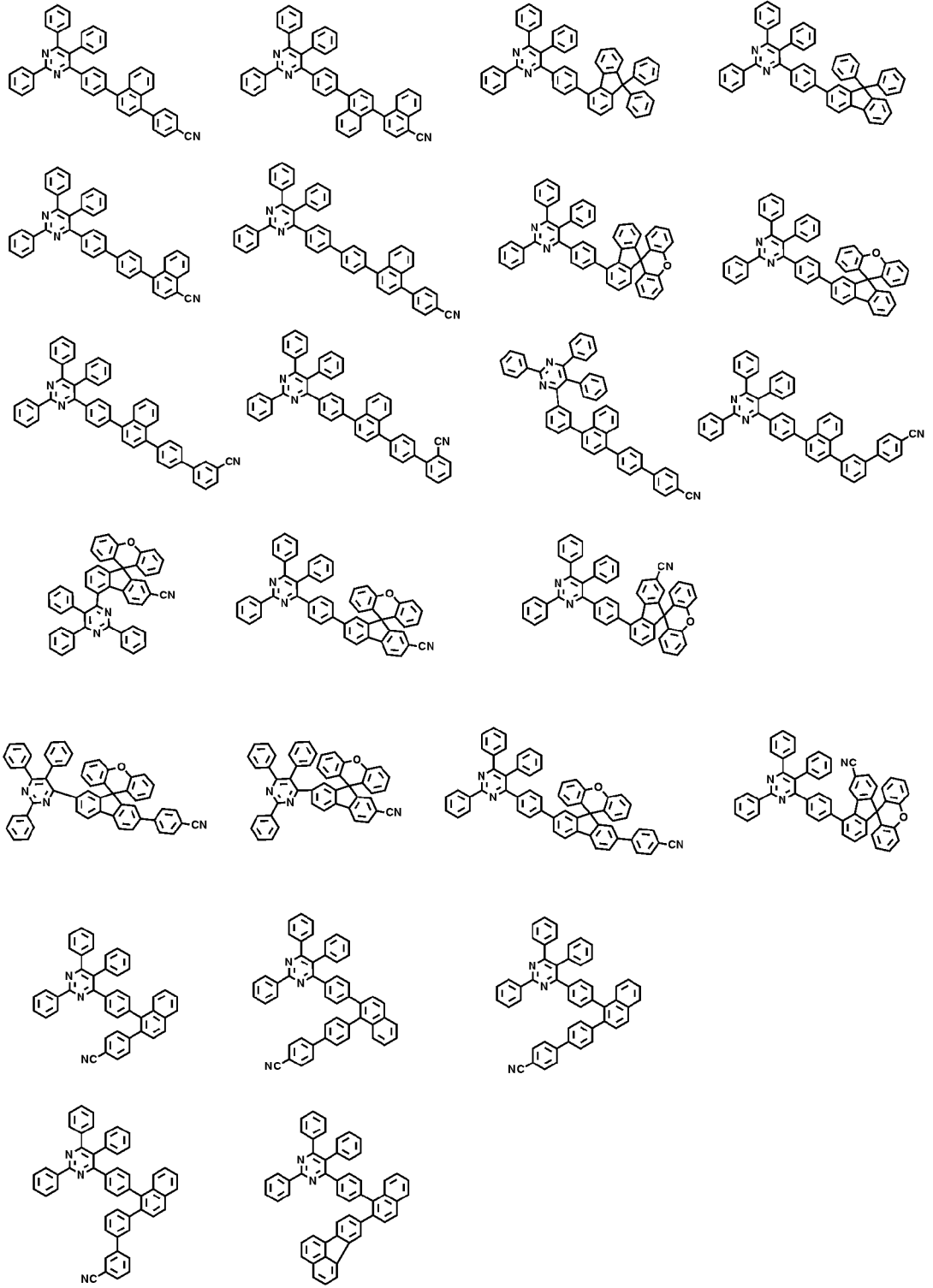
- [80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 알킬기, 시아노기로 치환된 아릴기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 알킬기로 치환된 헥테로아릴기, 아릴기 또는 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 아릴렌기; 또는 알킬기, 아릴기, 헥테로아릴기 또는 아릴헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헥테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이다.
- [81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 시아노기로 치환된 아릴기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 알킬기로 치환된 헥테로아릴기, 아릴기 또는 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 바이페닐렌기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 2가의 나프틸기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 2가의 플루오레닐기; 2가의 디벤조퓨라닐기; 2가의 디벤조티오펜기; 아릴기, 헥테로아릴기 또는 아릴헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 2가의 카바졸릴기; 또는 2가의 스피로플루오렌잔테닐기이고, 나머지는 직접결합이다.
- [82] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 2가의 바이페닐기; 시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, 트리페닐레닐기, 메틸기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 디벤조티오펜기 또는 카바졸릴기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 2가의 나프틸기; 2가의 스피로[플루오렌-9,9'잔텐]일기; 2가의 9,9'-디메틸플루오레닐기; 2가의 9,9'-디페닐플루오레닐기; 2가의 디벤조퓨라닐기; 2가의 디벤조티오펜기; 또는 페닐기, 디벤조티오펜기 또는 페닐카바졸릴기로 치환 또는 비치환된 2가의 카바졸릴기이고, 나머지는 직접결합이다.
- [83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 시아노기; 시아노기, 아릴포스핀옥사이드기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 아릴기 또는 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 또는 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 헥테로아릴기이다.
- [84] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 시아노기; 시아노기, 아릴포스핀옥사이드기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 아릴기, 피리디닐기, 트리아지닐기 또는 다환의 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 또는 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 헥테로아릴기이다.

- [85] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 시아노기; 시아노기, 아릴포스핀옥사이드기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오란테닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 트리페닐레닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 스피로[플루오렌-9,9'잔텐]일기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 인데노카바졸릴기; 베타-카르볼리닐기; 피리도인돌릴기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 벤조싸이에노피리미디닐기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기; 벤즈옥사졸릴기; 벤조티아졸릴기; 디벤조퓨라닐기; 디벤조티오펜기; 시아노기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 또는 페난쓰롤리닐기이다.
- [86] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 시아노기; 시아노기, 디페닐포스핀옥사이드기, 트리플루오로메톡시기로 치환된 페닐기, 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 피리디닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기 또는 카바졸릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오란테닐기; 메틸기 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 트리페닐레닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 스피로[플루오렌-9,9'잔텐]일기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 메틸기 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 인데노카바졸릴기; 베타-카르볼리닐기; 피리도인돌릴기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 벤조싸이에노피리미디닐기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기; 벤즈옥사졸릴기; 벤조티아졸릴기; 디벤조퓨라닐기; 디벤조티오펜기; 시아노기 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 또는 페난쓰롤리닐기이다.
- [87] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 한 개는 페닐기이고, 나머지 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 시클로알킬기; 분지쇄의 알킬기; 메틸기; 또는 단환의 헤테로아릴기이다.
- [88] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 한 개는 페닐기이고, 나머지 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 시클로헥실기; 메틸기; 1-메틸프로필기; 또는 피리디닐기이다.
- [89] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 나머지 한 개는 알킬기; 알킬기, 아릴기 또는 아릴옥시기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 피리디닐기; 디벤조티오펜기; 디벤조퓨라닐기; 또는 카바졸릴기이다.
- [90] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나

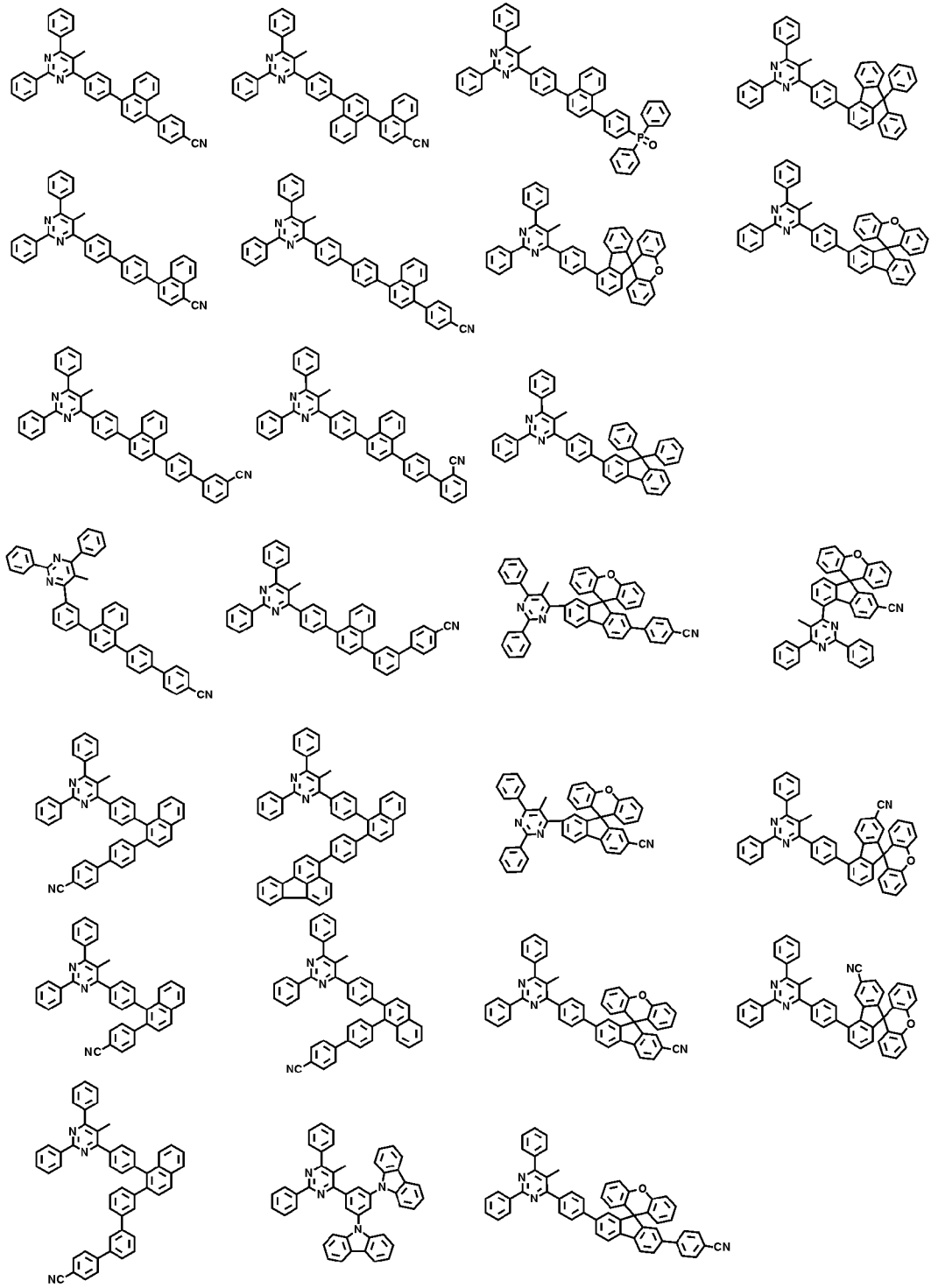
상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 나머지 한 개는 알킬기; 알킬기, 아릴기 또는 아릴옥시기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 페난트레닐기; 피리디닐기; 디벤조티오펜기; 디벤조퓨라닐기; 또는 카바졸릴기이다.

- [91] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 나머지 한 개는 알킬기; 페닐기; 아릴기 또는 아릴옥시기로 치환된 페닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 페난트레닐기; 피리디닐기; 디벤조티오펜기; 디벤조퓨라닐기; 또는 카바졸릴기이다.
- [92] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 나머지 한 개는 메틸기, 페녹시기, 페닐기 또는 플루오란테닐기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 페난트레닐기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 메틸기; n-프로필기; 이소프로필기; 9H-카바졸-9-일기; 디벤조퓨라닐기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [93] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 인접한 기는 서로 결합하여, 헤테로고리를 형성한다.
- [94] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3 중 인접한 기는 서로 결합하여, 트리벤조페리미딘(tribenzoperimidine) 고리를 형성한다.
- [95] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R3는 각각 독립적으로 페닐기이고, R1 내지 R3는 서로 결합하여 트리벤조페리미딘(tribenzoperimidine) 고리를 형성한다.
- [96] 본 명세서의 몇몇 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이거나, Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기이다.
- [97] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중에서 선택된다.

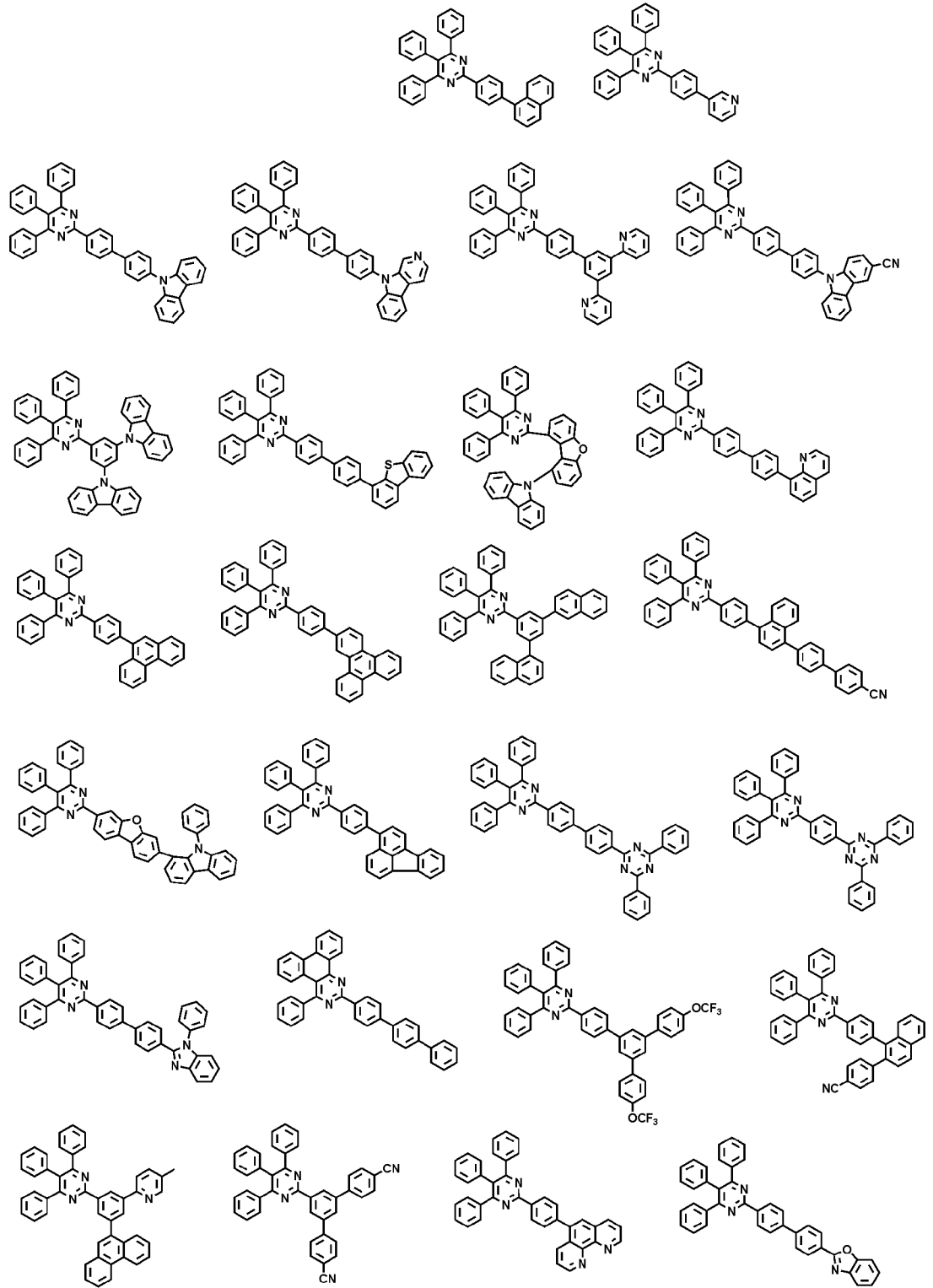
[99]



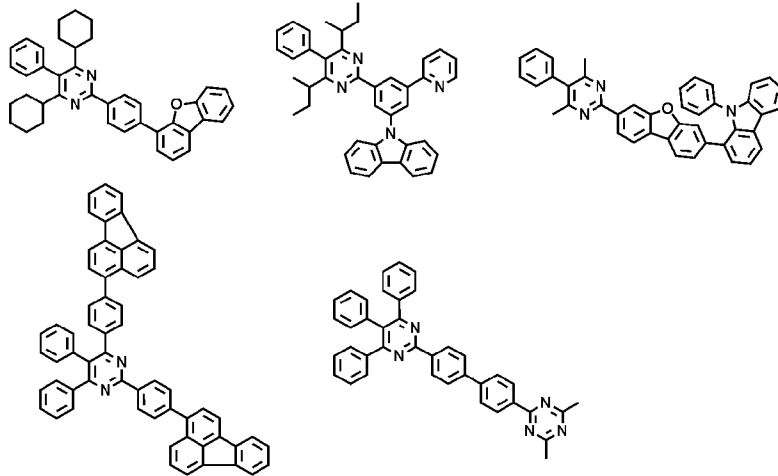
[100]



[101]



[103]



[104] 본 명세서의 일 실시상태는 전술한 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[105] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[106] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 발광층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 많은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[107] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자의 구조는 도 1, 도 2 및 도 8에 나타난 것과 같은 구조를 가질 수 있으나 이에만 한정되는 것은 아니다.

[108] 도 1에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 정공수송층(4), 발광층(6), 정공차단층(7), 전자 주입 및 수송층(8) 및 음극(11)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 주입 및 수송층(8)에 포함될 수 있다.

[109] 도 2에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 정공수송층(4), 전자차단층(5), 발광층(6), 전자 주입 및 수송층(8) 및 음극(11)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 주입 및 수송층(8)에 포함될 수 있다.

[110] 도 8에는 기관(1), 양극(2), p-도핑된 정공수송층(4p), 정공수송층(4R, 4G, 4B), 발광층(6RP, 6GP, 6BF), 제1 전자수송층(9a), 제2 전자수송층(9b), 전자주입층(10), 음극(11) 및 캡핑층(14)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 제1 전자수송층(9a) 및 제2 전자수송층(9b) 중 1층 이상의 층에

포함될 수 있다.

- [111] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기 발광 소자는 두 개 이상의 독립된 소자가 직렬로 연결된 텐덤 구조일 수 있다. 일 실시상태에 있어서, 상기 텐덤 구조는 각각의 유기 발광 소자가 전하생성층으로 접합된 형태일 수 있다. 텐덤 구조의 소자는 같은 밝기를 기준으로 단위 소자보다 낮은 전류에서 구동 가능하므로, 소자의 수명 특성이 크게 향상되는 장점이 있다.
- [112] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하는 제1 스택; 1층 이상의 발광층을 포함하는 제2 스택; 및 상기 제1 스택과 상기 제2 스택의 사이에 구비된 1층 이상의 전하생성층을 포함한다.
- [113] 본 명세서의 다른 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하는 제1 스택; 1층 이상의 발광층을 포함하는 제2 스택; 및 1층 이상의 발광층을 포함하는 제3 스택을 포함하고, 상기 제1 스택과 상기 제2 스택의 사이; 및 상기 제2 스택과 상기 제3 스택의 사이에 각각 1층 이상의 전하생성층을 포함한다.
- [114] 본 명세서에 있어서, 전하생성층(Charge Generating layer)이란 전압을 걸면 정공과 전자가 발생하는 층을 의미한다. 상기 전하생성층은 N형 전하생성층 또는 P형 전하생성층일 수 있다. 본 명세서에서, N형 전하생성층이란 P형 전하생성층보다 양극에 가깝게 위치한 전하생성층을 의미하고, P형 전하생성층이란 N형 전하생성층보다 음극에 가깝게 위치한 전하생성층을 의미한다.
- [115] 상기 N형 전하생성층 및 P형 전하생성층은 접하여 구비될 수 있으며, 이 경우 NP 접합을 형성한다. NP 접합에 의하여 P형 전하생성층 내에서 정공이, N형 전하생성층 내에서 전자가 용이하게 형성된다. 전자는 N형 전하생성층의 LUMO 준위를 통하여 양극 방향으로 수송되고, 정공은 P형 유기물층의 HOMO 준위를 통하여 음극 방향으로 수송된다.
- [116] 상기 제1 스택, 제2 스택 및 제3 스택은 각각 1층 이상의 발광층을 포함하며, 추가로 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 정공수송 및 정공주입을 동시에 하는 층(정공 주입 및 수송층), 및 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층(전자 주입 및 수송층) 중 1층 이상의 층을 더 포함할 수 있다.
- [117] 상기 제1 스택 및 제2 스택을 포함하는 유기 발광 소자를 도 3에 예시하였다.
- [118] 도 3에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 제1 정공수송층(4a), 전자차단층(5), 제1 발광층(6a), 제1 전자수송층(9a), N형 전하생성층(12), P형 전하생성층(13), 제2 정공수송층(4b), 제2 발광층(6b), 전자 주입 및 수송층(8) 및 음극(11)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 전자 주입 및 수송층(8)에 포함될 수 있다.
- [119] 상기 제1 스택 내지 제 3 스택을 포함하는 유기 발광 소자를 도 4 내지 7에

예시하였다.

- [120] 도 4에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 제1 정공수송층(4a), 전자차단층(5), 제1 발광층(6a), 제1 전자수송층(9a), 제1 N형 전하생성층(12a), 제1 P형 전하생성층(13a), 제2 정공수송층(4b), 제2 발광층(6b), 제2 전자수송층(9b), 제2 N형 전하생성층(12b), 제2 P형 전하생성층(13b), 제3 정공수송층(4c), 제3 발광층(6c), 제3 전자수송층(9c) 및 음극(11)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 제1 전자수송층(9a), 제2 전자수송층(9b) 및 제3 전자수송층(9c) 중 1층 이상의 층에 포함될 수 있다.
- [121] 도 5에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 제1 정공수송층(4a), 제2 정공수송층(4b), 제1 청색 형광 발광층(6BFa), 제1 전자수송층(9a), 제1 N형 전하생성층(12a), 제1 P형 전하생성층(13a), 제3 정공수송층(4c), 적색 인광 발광층(6RP), 황색 녹색 인광 발광층(6YGP), 녹색 인광 발광층(6GP), 제2 전자수송층(9b), 제2 N형 전하생성층(12b), 제2 P형 전하생성층(13b), 제4 정공수송층(4d), 제5 정공수송층(4e), 제2 청색 형광 발광층(6BFb), 제3 전자수송층(9c), 전자주입층(10), 음극(11) 및 캡핑층(14)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 제3 전자수송층(9c), 제2 전자수송층(9b) 및 제1 전자수송층(9a) 중 1층 이상의 층에 포함될 수 있다.
- [122] 도 6에는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(3), 제1 정공수송층(4a), 제2 정공수송층(4b), 제1 청색 형광 발광층(6BFa), 제1 전자수송층(9a), 제1 N형 전하생성층(12a), 제1 P형 전하생성층(13a), 제3 정공수송층(4c), 적색 인광 발광층(6RP), 녹색 인광 발광층(6GP), 제2 전자수송층(9b), 제2 N형 전하생성층(12b), 제2 P형 전하생성층(13b), 제4 정공수송층(4d), 제5 정공수송층(4e), 제2 청색 형광 발광층(6BFb), 제3 전자수송층(9c), 전자주입층(10), 음극(11) 및 캡핑층(14)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 제3 전자수송층(9c), 제2 전자수송층(9b) 및 제1 전자수송층(9a) 중 1 이상의 층에 포함될 수 있다.
- [123] 도 7에는 기관(1), 양극(2), 제1 p-도핑된 정공수송층(4pa), 제1 정공수송층(4a), 제2 정공수송층(4b), 제1 청색 형광 발광층(6BFa), 제1 전자수송층(9a), 제1 N형 전하생성층(12a), 제1 P형 전하생성층(13a), 제3 정공수송층(4c), 제4 정공수송층(4d), 제2 청색 형광 발광층(6BFb), 제2 전자수송층(9b), 제2 N형 전하생성층(12b), 제2 P형 전하생성층(13b), 제5 정공수송층(4e), 제6 정공수송층(4f), 제3 청색 형광 발광층(6BFc), 제3 전자수송층(9c), 전자주입층(10), 음극(11) 및 캡핑층(14)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 제1 전자수송층(9a), 제2 전자수송층(9b), 및 제3 전자수송층(9c)

중 1층 이상의 층에 포함될 수 있다.

- [124] 상기 N형 전하생성층은 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(F4TCNQ), 불소-치환된 3,4,9,10-페릴렌테트라카르복실릭 디안하이드라이드(PTCDA), 시아노-치환된 PTCDA, 나프탈렌테트라카르복실릭 디안하이드라이드(NTCDA), 불소-치환된 NTCDA, 시아노-치환된 NTCDA, 헥사아자트리페닐린 유도체 등일 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 일 실시상태에 있어서, 상기 N형 전하생성층은 벤조이미다조페난트리닌계 유도체와 Li의 금속을 동시에 포함할 수 있다.
- [125] 상기 P형 전하생성층은 아릴아민계 유도체와 시아노기를 포함하는 화합물을 동시에 포함할 수 있다.
- [126] 본 명세서의 유기 발광 소자는 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조 방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [127] 상기 화합물 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층이 형성된 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [128] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공수송층, 정공주입층, 전자차단층, 정공수송 및 정공주입을 동시에 하는 층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층, 및 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 본 명세서의 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트 및 도판트를 포함하며, 상기 도판트의 최대 발광 파장은 400 nm 내지 520 nm이다.
- [130] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 발광층의 도판트는 청색 형광 도판트다.
- [131] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 2층 이상의 발광층을 포함하고, 상기 2층 이상의 발광층 중 적어도 한 층은 청색 형광 도판트를 포함한다.
- [132] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 2층 이상의 발광층 중 적어도 2층의 최대 발광 파장은 서로 상이하다.
- [133] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 2층 이상의 발광층 중 적어도 한 층은 인광성 도판트를 포함하고, 나머지층 중 적어도 한 층은 형광성 도판트를 포함한다.
- [134] 상기 유기 발광 소자가 2 이상의 발광층을 포함하는 경우, 도 4 내지 7에 도시한

바와 같이 각각의 발광층이 수직적으로 적층되거나, 도 8에 도시한 바와 같이 각각의 발광층이 수평적으로 적층될 수 있다.

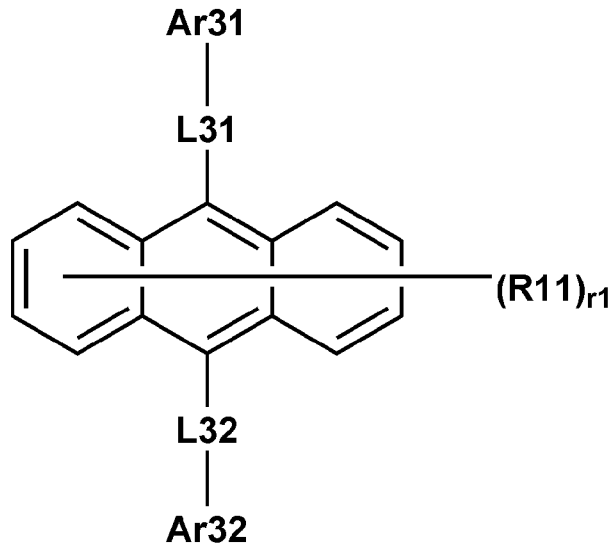
- [135] 본 명세서의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공수송층, 정공주입층, 또는 정공수송 및 정공주입을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공수송층, 정공주입층, 또는 정공수송 및 정공주입을 동시에 하는 층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [136] 또 하나의 본 명세서의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [137] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 발광층은 청색 형광 도판트를 포함할 수 있다.
- [138] 또 하나의 본 명세서의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [139] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 호스트로 포함할 수 있다.
- [140] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 화학식 1로 표시되는 화합물을 도판트로 포함할 수 있다.
- [141] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트 및 도판트를 포함한다. 이때, 상기 도판트의 함량은 호스트 100 중량부를 기준으로 1 중량부 내지 20 중량부로 포함될 수 있으며, 바람직하게는 1 중량부 내지 10 중량부로 포함된다.
- [142] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 제2 전극은 음극이다.
- [143] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 제2 전극은 양극이다.
- [144] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 정공차단층을 포함하고, 상기 정공차단층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [145] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층 이외에 아릴아미노기, 카바졸릴기 또는 벤조카바졸기릴를 포함하는 화합물을 포함하는 정공주입층 또는 정공수송층을 더 포함한다.
- [146] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 화합물, 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

- [147] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [148] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 물리 증착 방법(PVD: physical Vapor Deposition)을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 제1 전극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 제2 전극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 제1 전극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [149] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다. 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [150] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 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.
- [151] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al, Mg/Ag과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [152] 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 엑시톤의 전자주입층 또는 전자 주입 재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의

유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.

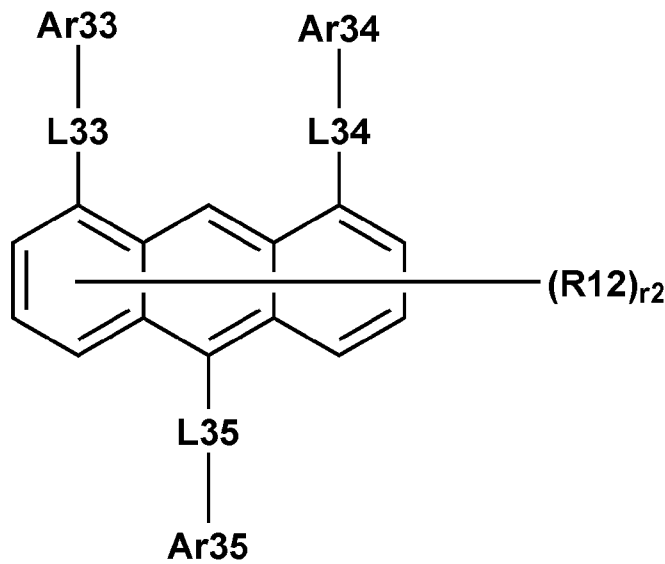
- [153] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [154] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 p-도핑된 정공수송층은 p형 도판트를 포함하는 정공수송층을 의미한다.
- [155] 상기 발광층의 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAQ; 10-히드록시벤조퀴놀린-금속 화합물 벤즈옥사졸, 벤조티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [156] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도판트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로 고리 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 파이렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로 고리 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [157] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 발광층의 호스트로 중수소로 치환 또는 비치환된 안트라센 유도체를 사용할 수 있다. 일 실시상태에 있어서, 안트라센 유도체가 중수소화되면 수명이 향상되므로, 보다 다양한 소자 구조에서 호스트 물질으로 이용 가능한 장점이 있다.
- [158] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 호스트는 하기 화학식 H1 또는 H2로 표시되는 화합물일 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 하기 화합물을 포함하는 경우, 상기 유기물층과 발광층 간의 에너지 준위가 적절하게 조절되어, 상기 유기물층에서 발광층으로 이동하는 전자량 조절이 용이하므로, 유기 발광 소자의 수명이 개선되는 효과가 있다.
- [159] [화학식 H1]

[160]



[161] [화학식 H2]

[162]



[163] 상기 화학식 H1 및 H2에 있어서,

[164] L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

[165] Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

[166] R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이고,

[167] r1은 1 내지 8의 정수이며,

[168] r2는 1 내지 7의 정수이고,

[169] r1이 2 이상인 경우, R11은 서로 같거나 상이하며,

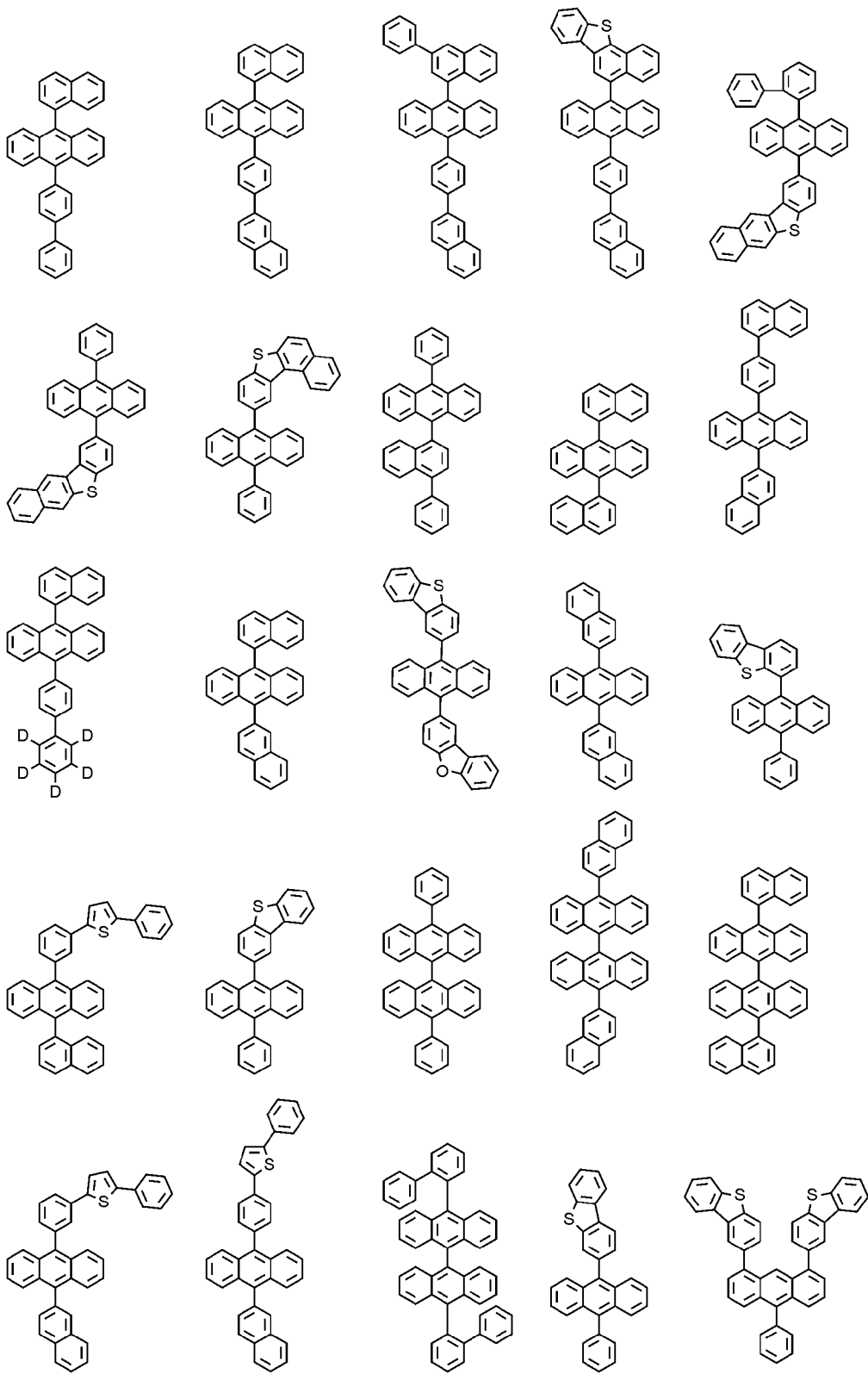
[170] r2가 2 이상인 경우, R12는 서로 같거나 상이하다.

[171] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 아릴렌기이다.

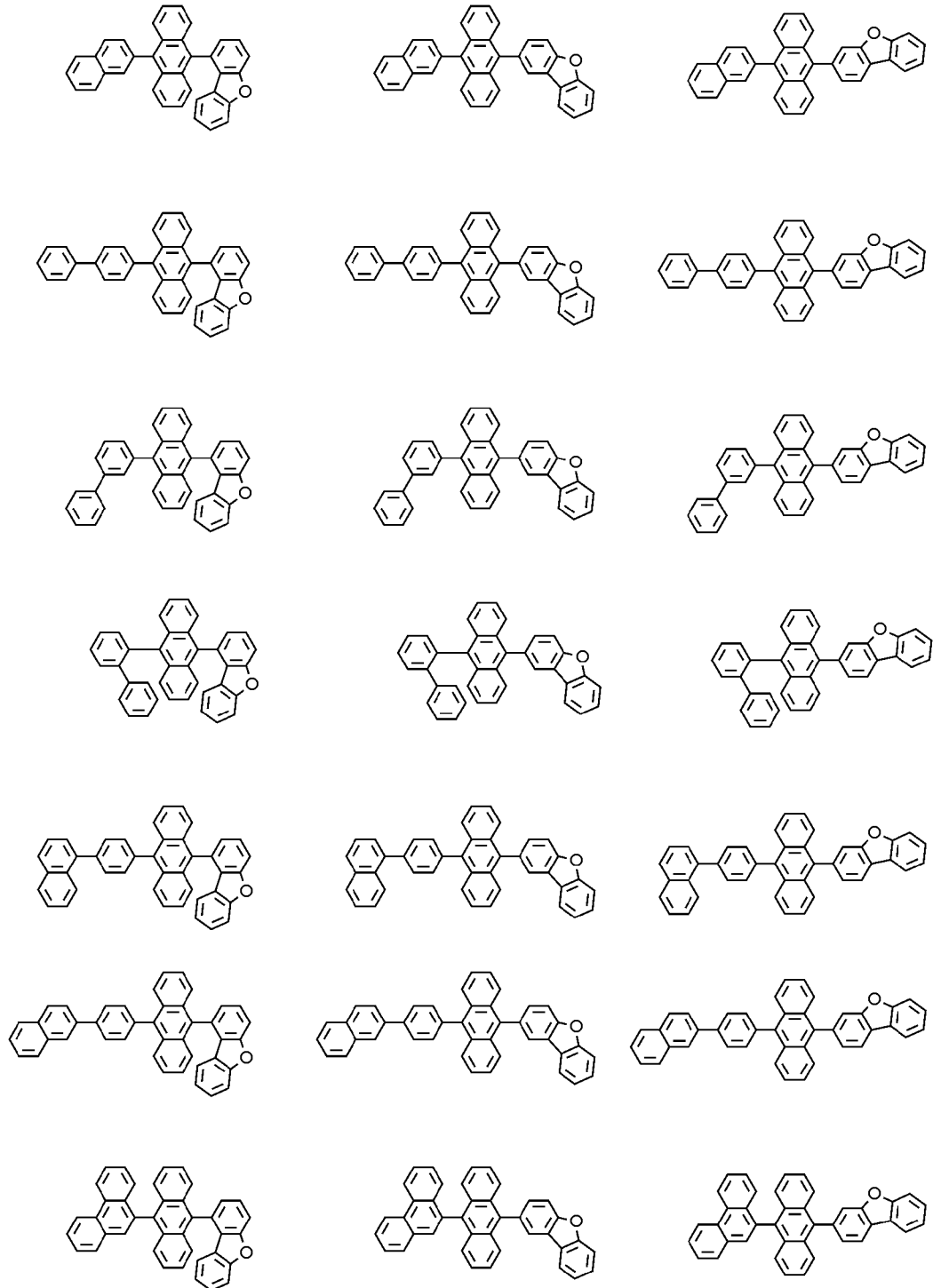
- [172] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 C₆₋₂₂의 아릴렌기이다.
- [173] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 C₆₋₁₈의 아릴렌기이다.
- [174] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 C₆₋₁₄의 아릴렌기이다.
- [175] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L31 내지 L35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 페닐렌기; 2가의 나프틸기; 또는 2가의 안트라세닐기이다.
- [176] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [177] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소로 치환 또는 비치환된 C₆₋₂₂의 아릴기; 또는 C₂₋₂₄의 헤테로아릴기이다.
- [178] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소로 치환 또는 비치환된 C₆₋₁₈의 아릴기; 또는 C₂₋₂₀의 헤테로아릴기이다.
- [179] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소로 치환 또는 비치환된 C₆₋₁₄의 아릴기; 또는 C₂₋₁₆의 헤테로아릴기이다.
- [180] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar31 내지 Ar35는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소로 치환 또는 비치환된 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 티오펜기; 디벤조퓨라닐기; 디벤조티오펜기; 벤조[b]나프토[1,2-d]퓨라닐기; 벤조[b]나프토[2,3-d]퓨라닐기; 벤조[d]나프토[1,2-b]퓨라닐기; 벤조[b]나프토[2,1-d]티오펜기; 벤조[b]나프토[1,2-d]티오펜기; 또는 벤조[b]나프토[2,3-d]티오펜기이다.
- [181] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11은 수소; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [182] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11은 수소; 또는 C₆₋₁₆의 아릴기로 치환 또는 비치환된 C₆₋₁₆의 아릴기이다.
- [183] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11은 수소; 또는 C₆₋₁₂의 아릴기로 치환 또는 비치환된 C₆₋₁₂의 아릴기이다.
- [184] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11은 수소; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [185] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R12는 수소이다.
- [186] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 호스트는 하기 화합물 중에서

선택되는 어느 하나 이상이다.

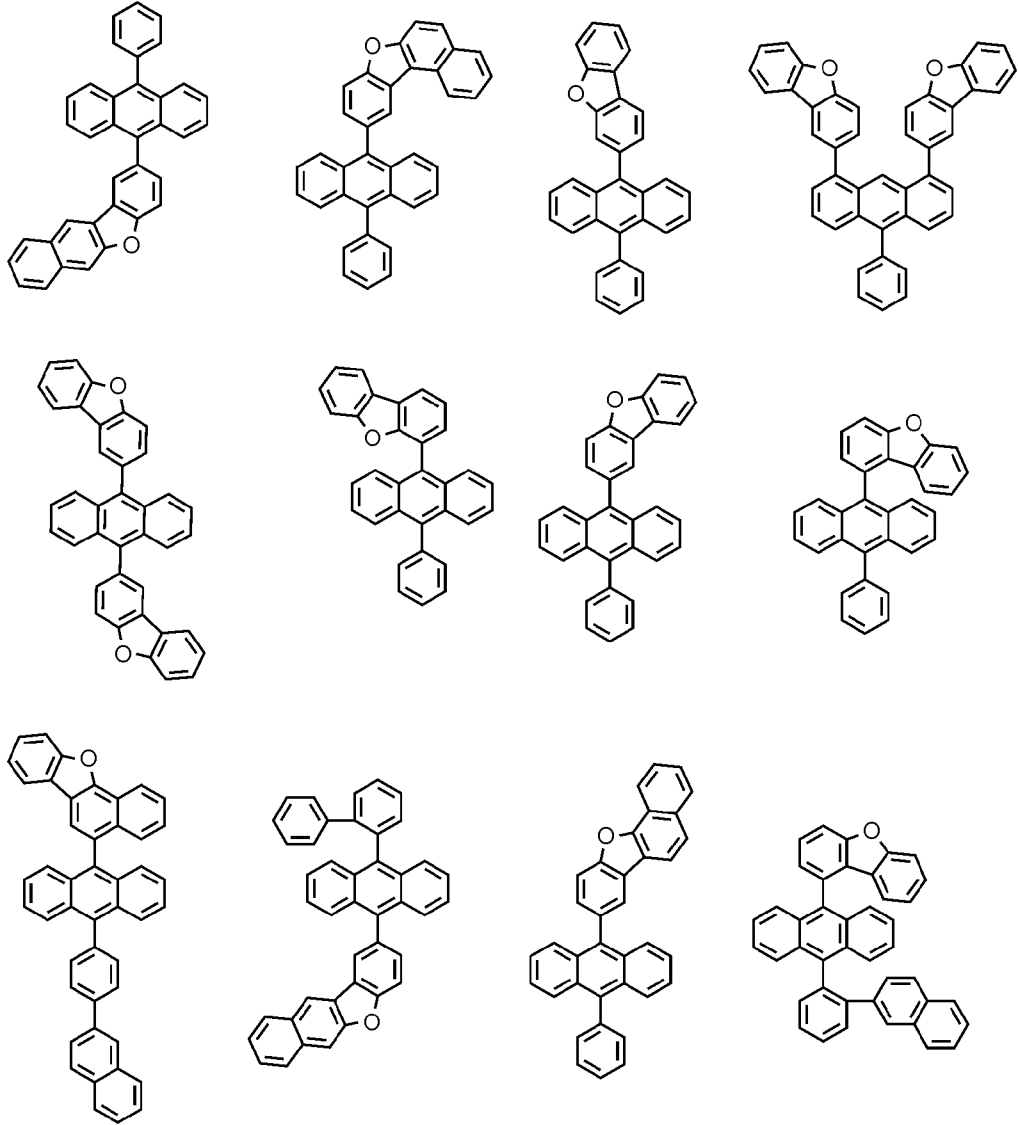
[187]



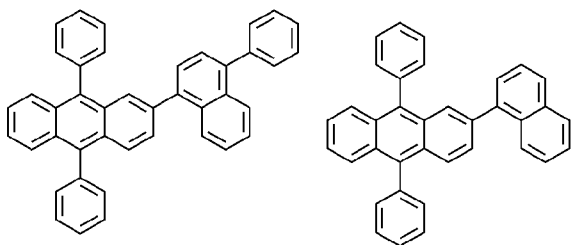
[188]



[189]



[190]



[191] 상기 도판트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 파이렌, 안트라센, 크라이센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 또는 2개 이상의 치환기가 치환 또는 비치환된 것을 사용할 수 있다. 구체적으로 스티릴아민,

스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[192] 상기 전자수송층의 전자 수송 물질로는 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 Al착물; 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 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따른다.

[193] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자 주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 엑시톤의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

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

[195] 상기 캡핑층(14)은 유기 발광 소자를 커버함으로써 외부로부터 유입된 산소 및 수분의 유입을 막아주고, 음극(11)을 통과하는 광의 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다. 상기 캡핑층은 광학적 영향이 거의 없을 정도로 얇게 형성된 기능층으로, 캡핑층의 두께는 5nm 이하로 형성할 수 있으며, 유기물질 또는 무기물질로 이루어진 절연층일 수 있다.

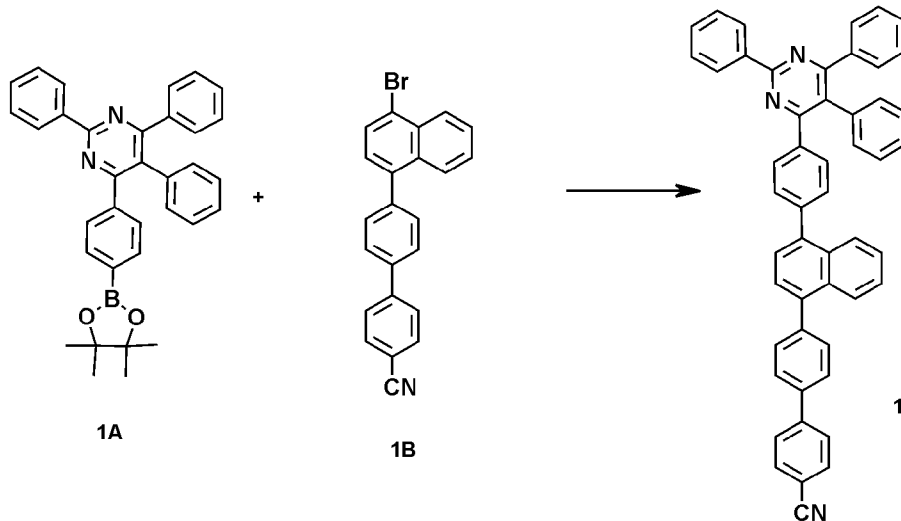
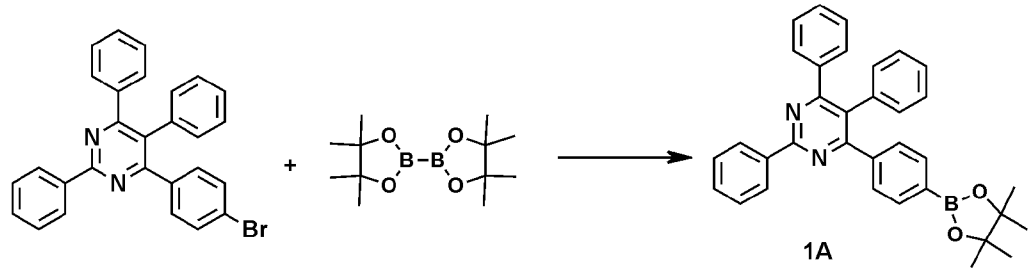
[196] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[197] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[198] <합성예 1> 화합물 1의 제조

[199]



[200] (1) 화합물 1A의 제조

[201] 4-(4-브로모페닐)-2,5,6-트리페닐피리미딘(30 g, 64.8 mmol), 비스피나콜레이트다이보레인(18.1 g, 71.3 mmol) 및 칼륨 아세테이트(19.1 g, 213.9 mmol)를 다이옥산(700 mL)에 녹이고 130 °C로 가열하였다. 비스다이벤질리딘아세톤 팔라듐(Pd(dba₂))(1.12 g, 1.94 mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(PCy₃)(1.12 g, 3.88 mmol)을 첨가한 후 4시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각 후 용매를 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1A(28 g, 수율 85%)를 얻었다.

[202] MS: [M+H]⁺ = 510

[203] (2) 화합물 1의 제조

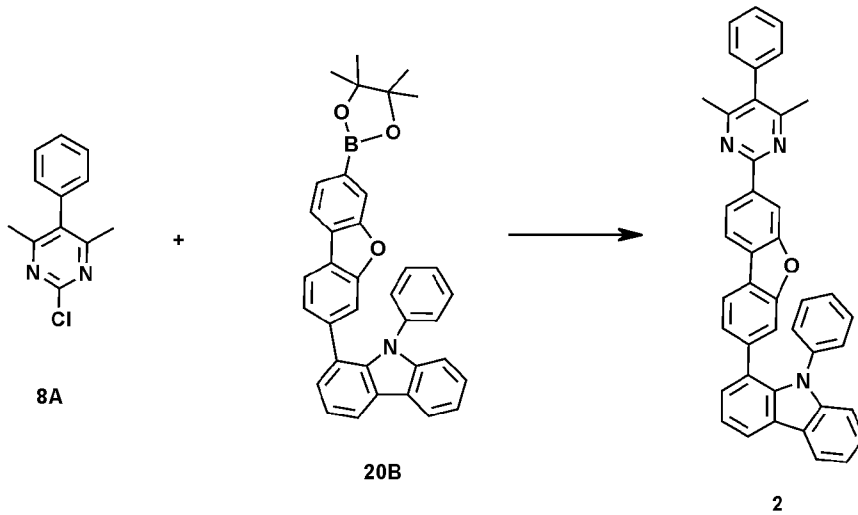
[204] 화합물 1A(12.8 g, 25 mmol), 화합물 1B(5.8 g, 25 mmol) 및 탄산칼륨(K₂CO₃)(10.4 g, 75 mmol)을 테트라하이드로푸란(THF)(300 mL) 및 H₂O(100 ml)에 녹이고 90 °C로 가열하였다. 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(Pd(PPh₃)₄)(0.58

g, 0.5 mmol)를 첨가한 후 4 시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각 후 물층을 제거하였다. 유기층에 황산마그네슘(MgSO₄)을 넣은 후 여과하였다. 농축 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1(15 g, 수율 87%)을 얻었다.

[205] MS: [M+H]⁺ = 687

[206] <합성예 2> 화합물 2의 제조

[207]

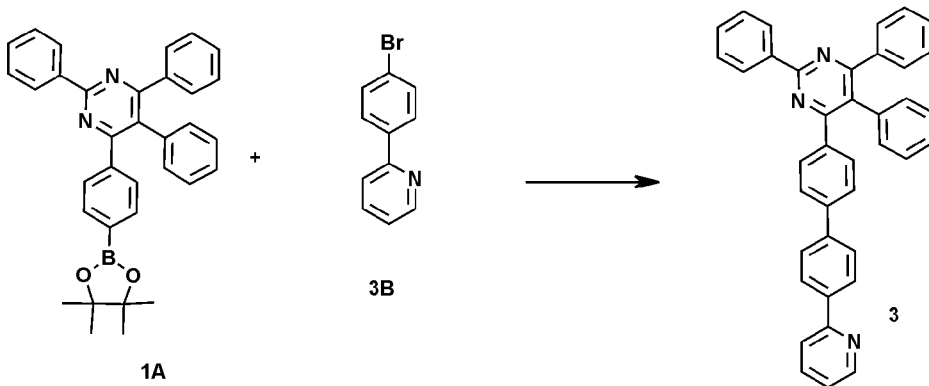


[208] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 8A, 화합물 1B 대신에 화합물 20B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 2(11.5 g, 수율 78%)를 얻었다.

[209] MS: [M+H]⁺ = 591

[210] <합성예 3> 화합물 3의 제조

[211]

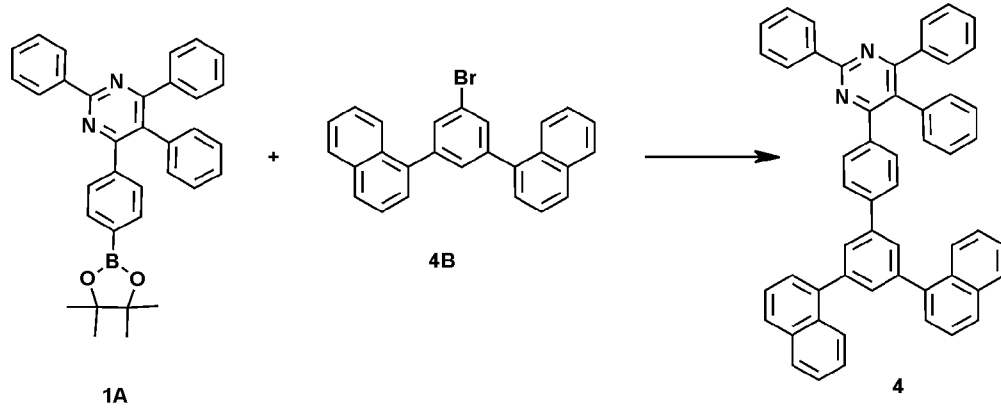


[212] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 3B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 3(10 g, 수율 75%)을 얻었다.

[213] MS: [M+H]⁺ = 537

[214] <합성예 4> 화합물 4의 제조

[215]

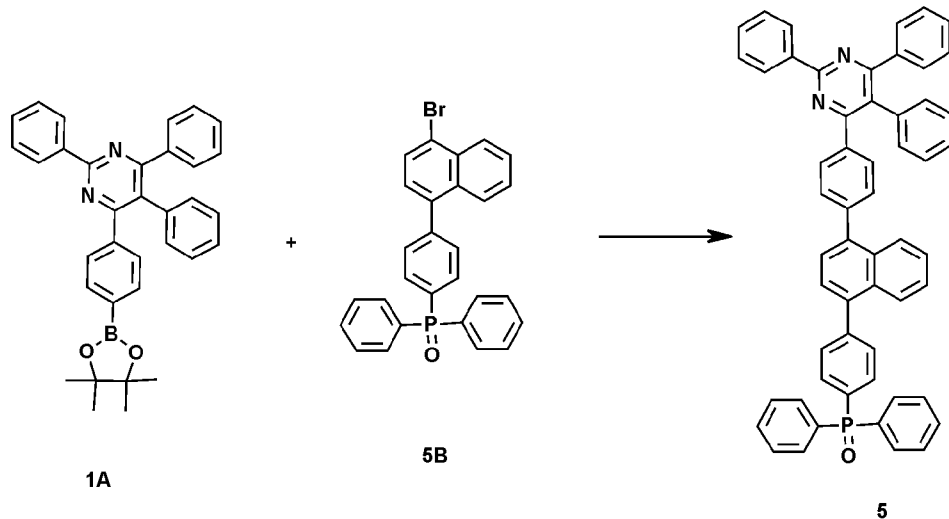


[216] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 4B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 4(14 g, 수율 79%)를 얻었다.

[217] MS: $[M+H]^+ = 712$

[218] <합성예 5> 화합물 5의 제조

[219]

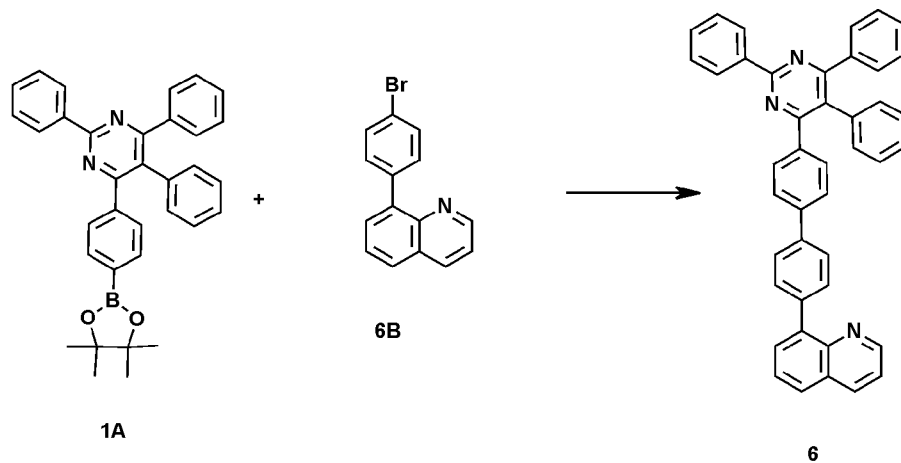


[220] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 5B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 5(13.5 g, 수율 69%)를 얻었다.

[221] MS: $[M+H]^+ = 786$

[222] <합성예 6> 화합물 6의 제조

[223]

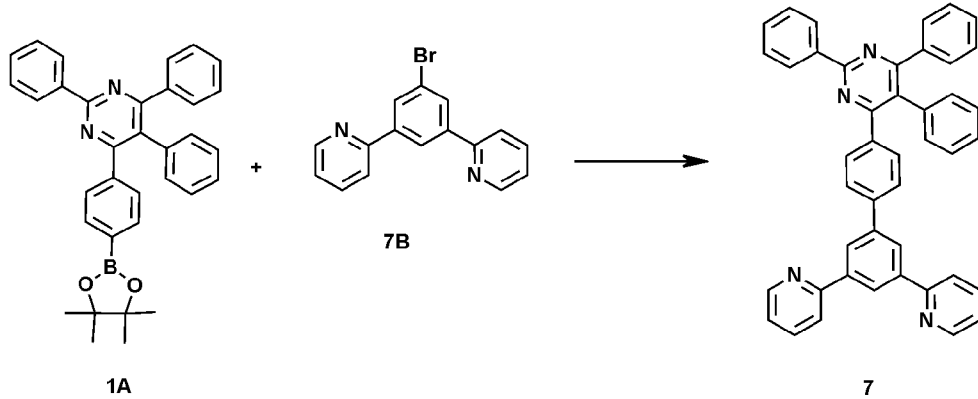


[224] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 6B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 6(12 g, 수율 82%)을 얻었다.

[225] MS: [M+H]⁺ = 587

[226] <합성예 7> 화합물 7의 제조

[227]

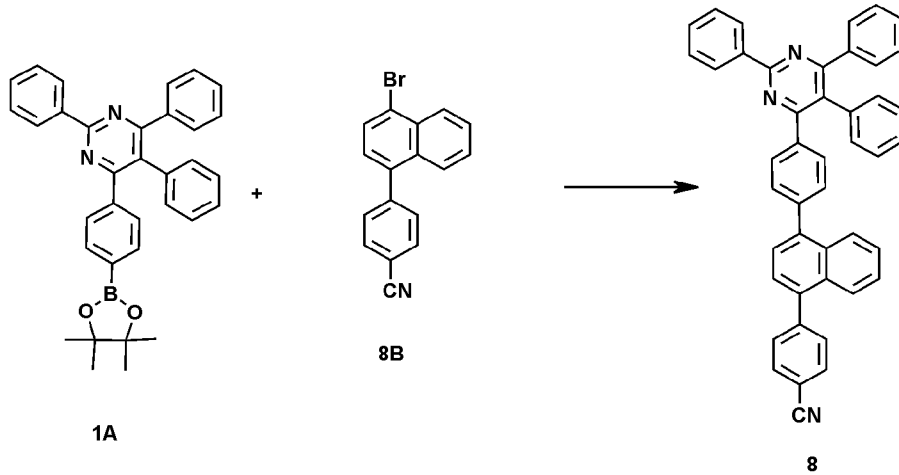


[228] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 7B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 7(10 g, 수율 65%)을 얻었다.

[229] MS: [M+H]⁺ = 614

[230] <합성예 8> 화합물 8의 제조

[231]



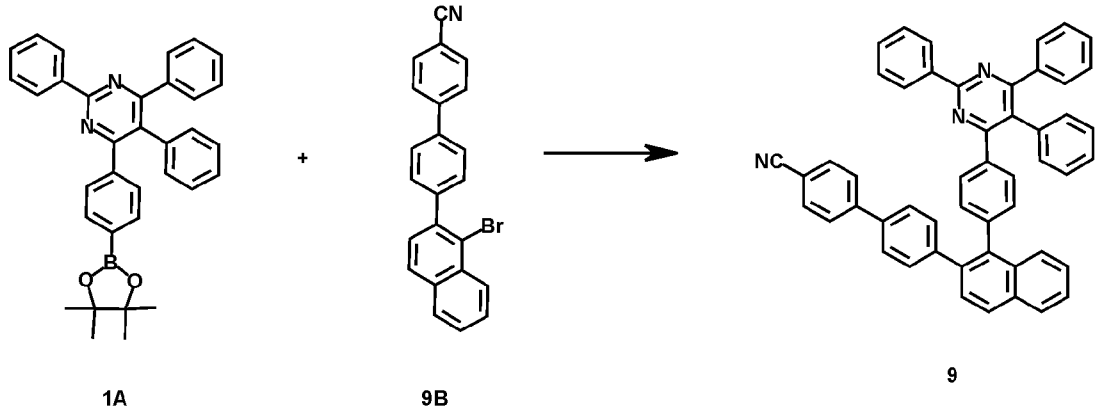
[232] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 8B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 8(12 g, 수율 79%)을 얻었다.

[233] MS: [M+H]⁺ = 611

[234] <합성예 9> 화합물 9의 제조

34

[235]

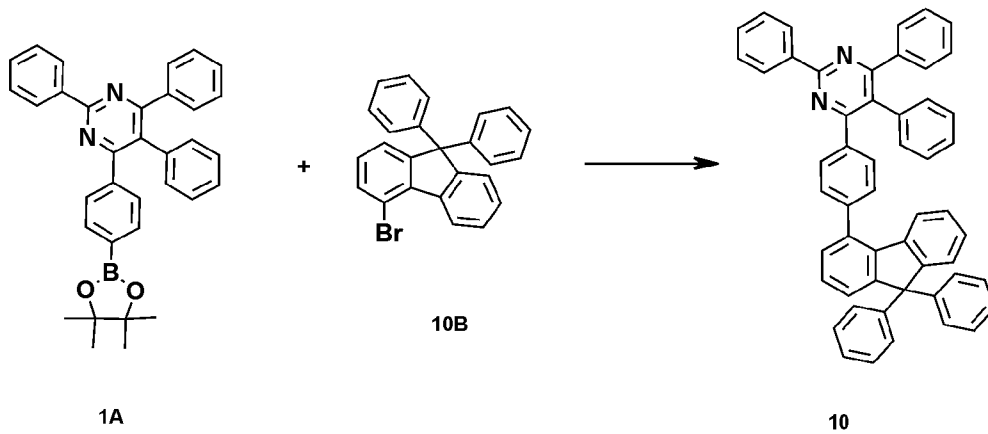


[236] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 9B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 9(14.5 g, 수율 84%)를 얻었다.

[237] MS: [M+H]⁺ = 687

[238] <합성예 10> 화합물 10의 제조

[239]

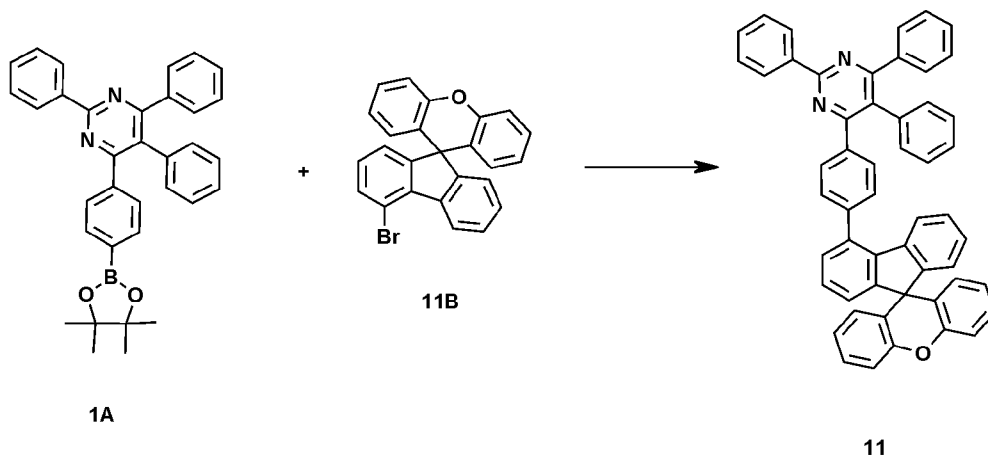


[240] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 10B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 10(16 g, 수율 91%)을 얻었다.

[241] MS: [M+H]⁺ = 700

[242] <합성예 11> 화합물 11의 제조

[243]



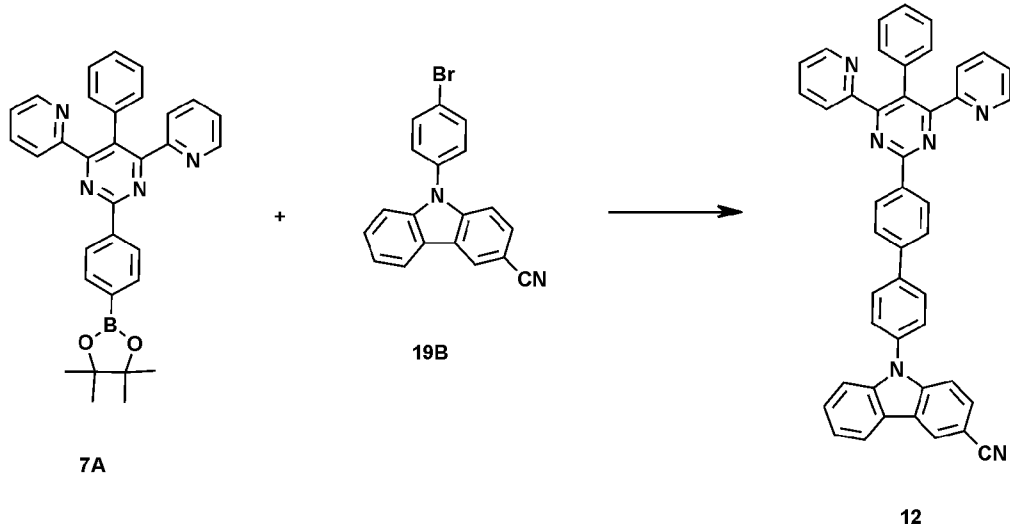
[244] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화학식 1B 대신에 화학식 11B를 사용한 것을

제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 11(15 g, 수율 84 %)을 얻었다.

[245] MS: [M+H]⁺ = 714

[246] <합성예 12> 화합물 12의 제조

[247]

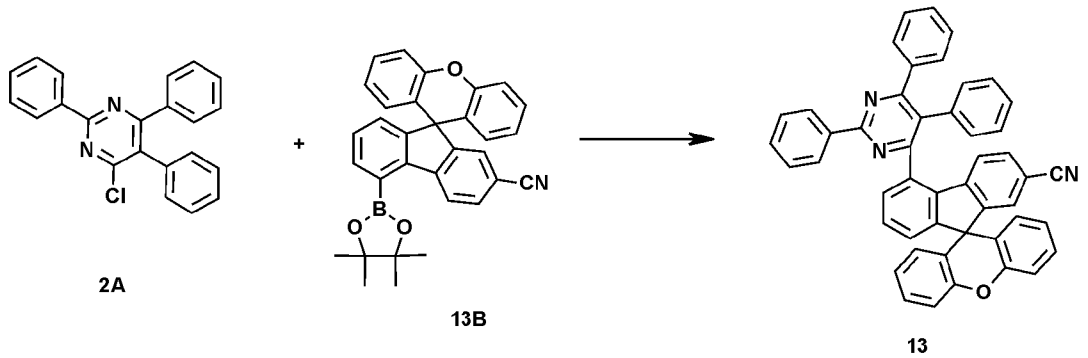


[248] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 7A, 화합물 1B 대신에 화합물 19B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 12(9.8 g, 수율 60 %)를 얻었다.

[249] MS: [M+H]⁺ = 652

[250] <합성예 13> 화합물 13의 제조

[251]

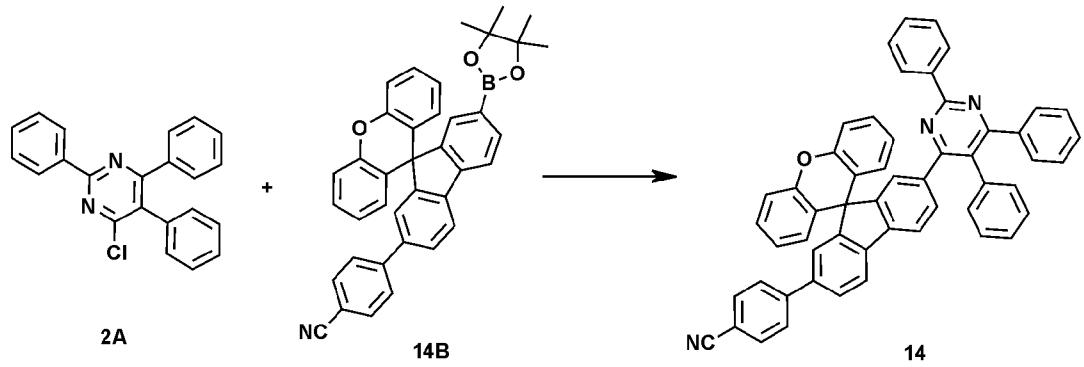


[252] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 2A, 화합물 1B 대신에 화합물 13B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 13(13 g, 수율 78 %)을 얻었다.

[253] MS: [M+H]⁺ = 663

[254] <합성예 14> 화합물 14의 제조

[255]

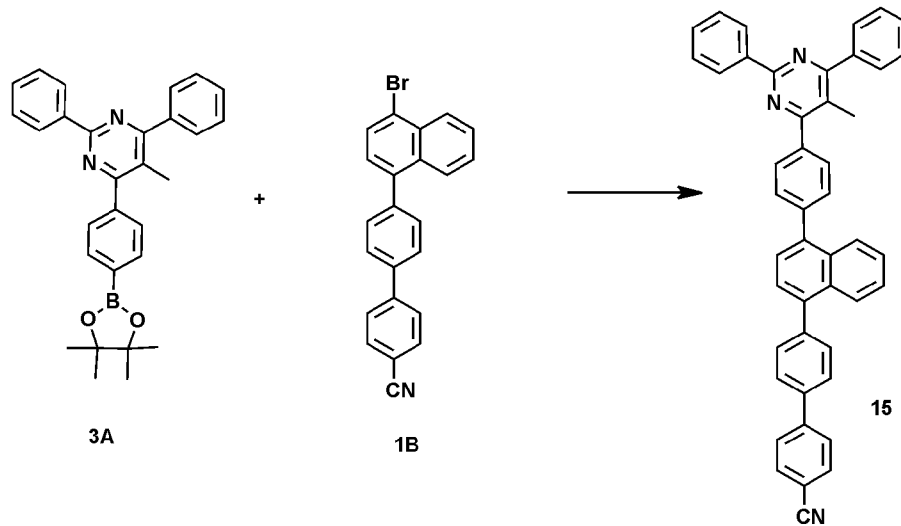


[256] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 2A, 화합물 1B 대신에 화합물 14B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 14(16 g, 수율 87 %)를 얻었다.

[257] MS: [M+H]⁺ = 739

[258] <합성예 15> 화합물 15의 제조

[259]

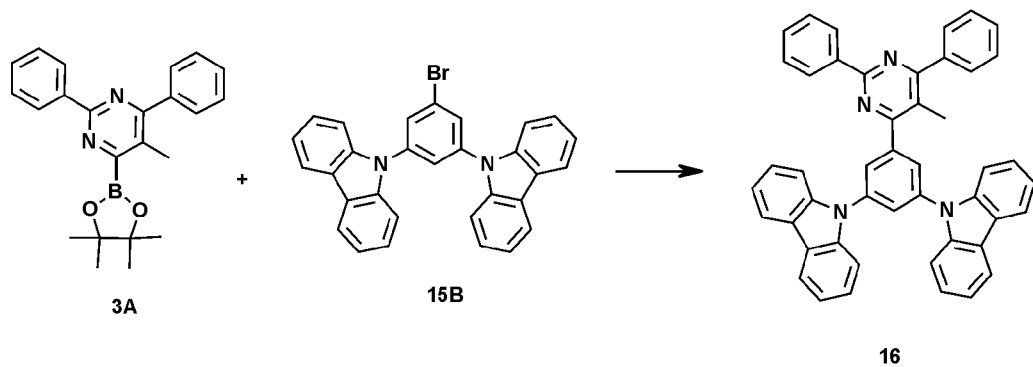


[260] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 3A를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 15(12 g, 수율 77 %)를 얻었다.

[261] MS: [M+H]⁺ = 625

[262] <합성예 16> 화합물 16의 제조

[263]



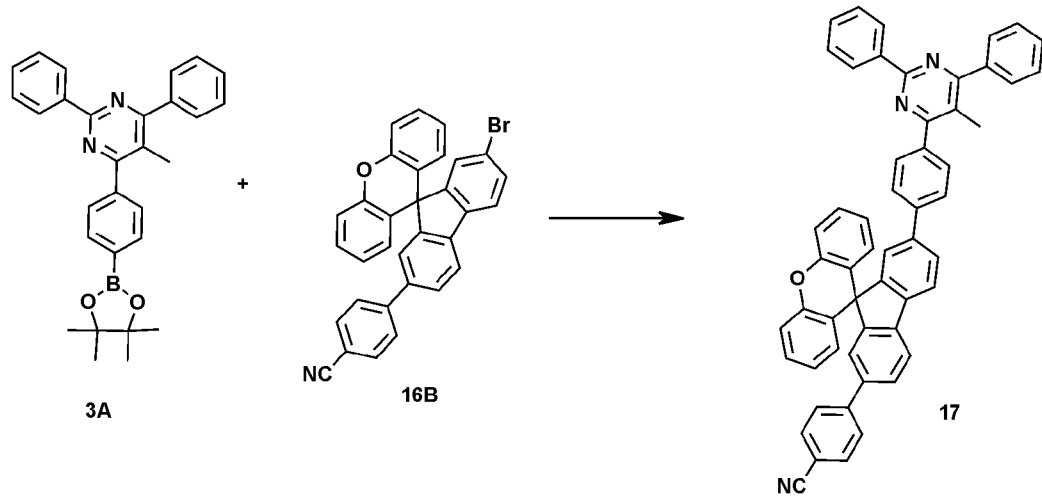
[264] 상기 화합물 15의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 15B를 사용한 것을

제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 16(10 g, 수율 61 %)을 얻었다.

[265] MS: [M+H]⁺ = 652

[266] <합성예 17> 화합물 17의 제조

[267]

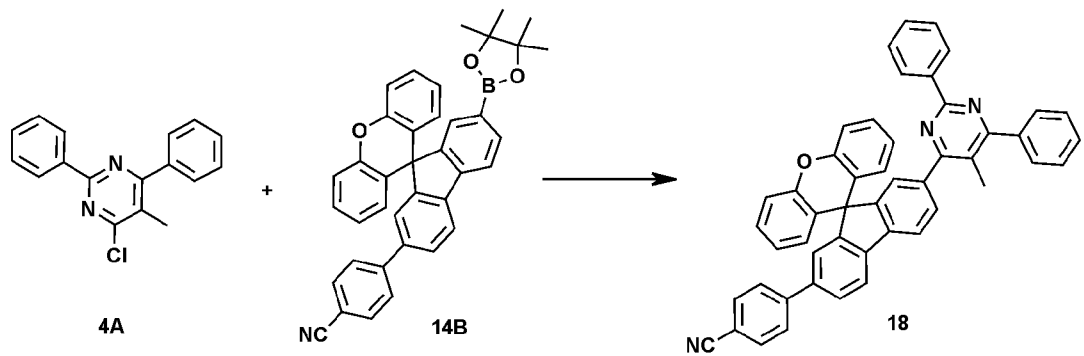


[268] 상기 화합물 15의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 16B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 17(15 g, 수율 80 %)을 얻었다.

[269] MS: [M+H]⁺ = 753

[270] <합성예 18> 화합물 18의 제조

[271]



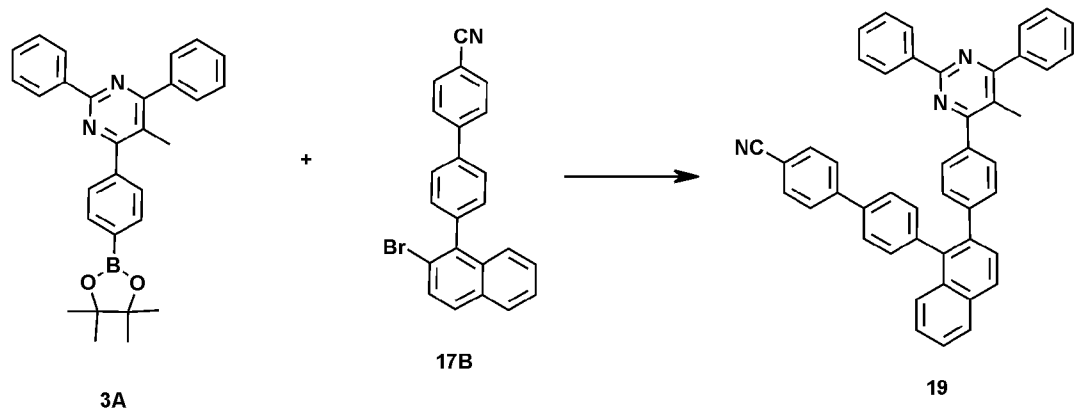
[272] 상기 화합물 14의 제조에 있어서, 화합물 2A 대신에 화합물 4A를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 18(12.4 g, 수율 73 %)을 얻었다.

[273] MS: [M+H]⁺ = 677

[274] <합성예 19> 화합물 19의 제조

38

[275]

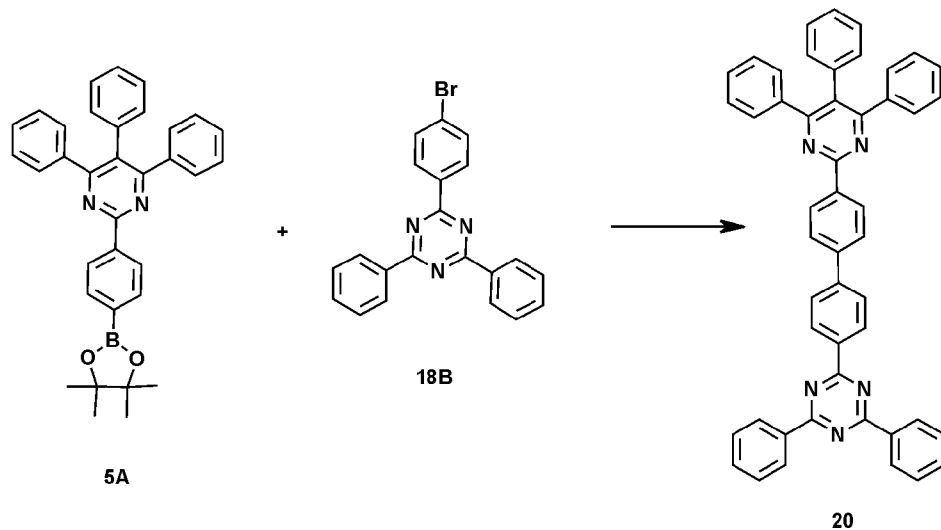


[276] 상기 화합물 15의 제조에 있어서, 화합물 1B 대신에 화합물 17B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 19(11.2 g, 수율 72%)를 얻었다.

[277] MS: [M+H]⁺ = 625

[278] <합성예 20> 화합물 20의 제조

[279]

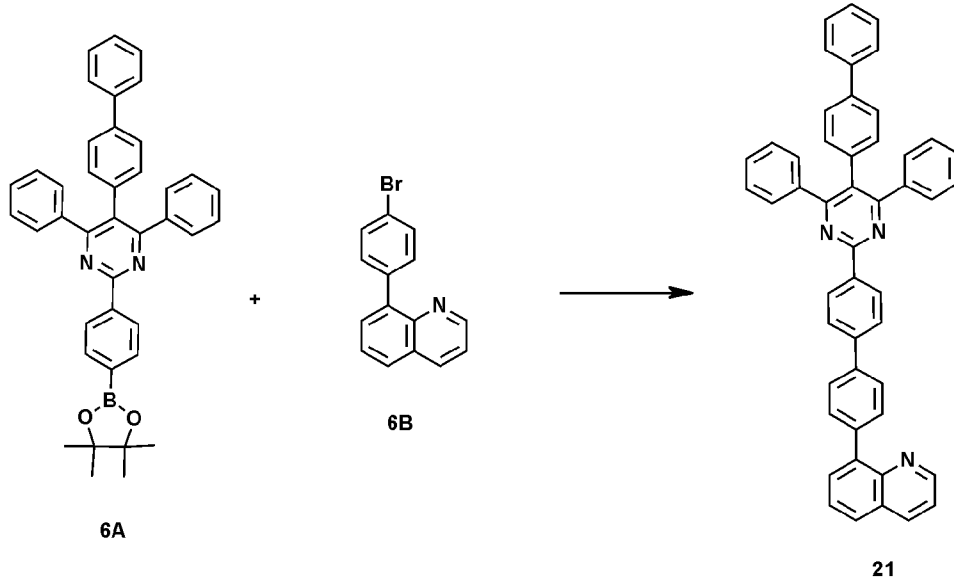


[280] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 5A, 화합물 1B 대신에 화합물 18B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 20(11.2 g, 수율 65%)을 얻었다.

[281] MS: [M+H]⁺ = 691

[282] <합성예 21> 화합물 21의 제조

[283]

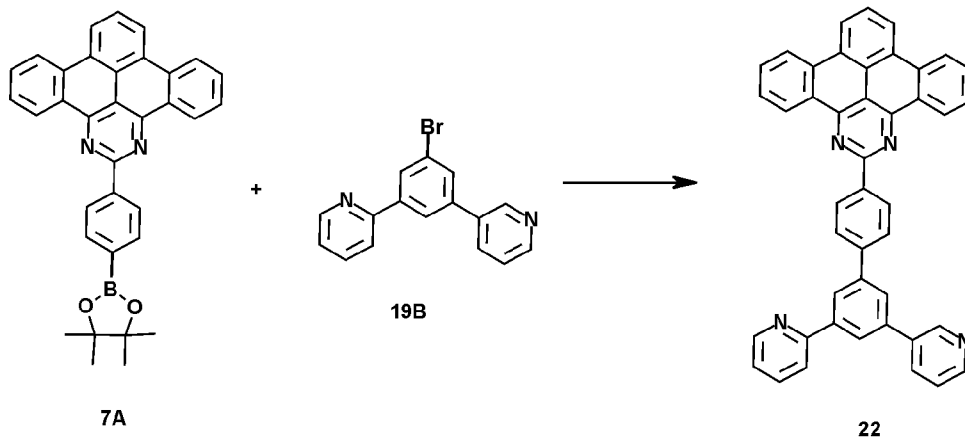


[284] 상기 화합물 6의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 6A를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 21(10.1 g, 수율 61 %)을 얻었다.

[285] MS: [M+H]⁺ = 663

[286] <합성예 22> 화합물 22의 제조

[287]



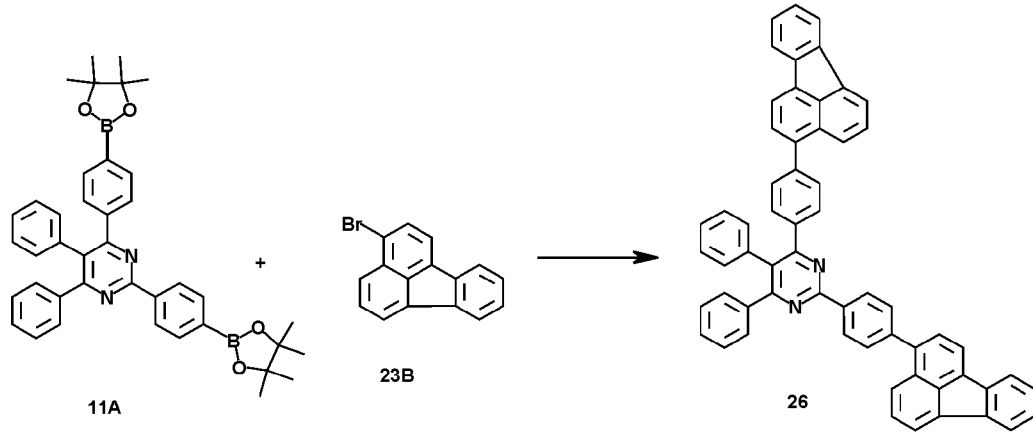
[288] 상기 화합물 21의 제조에 있어서, 화합물 6A 대신에 화합물 7A를 사용하고, 화합물 6B 대신에 화합물 19B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 22(10.5 g, 수율 69 %)를 얻었다.

[289] MS: [M+H]⁺ = 610

[290] <합성예 23> 화합물 23의 제조

[302] <합성예 26> 화합물 26의 제조

[303]

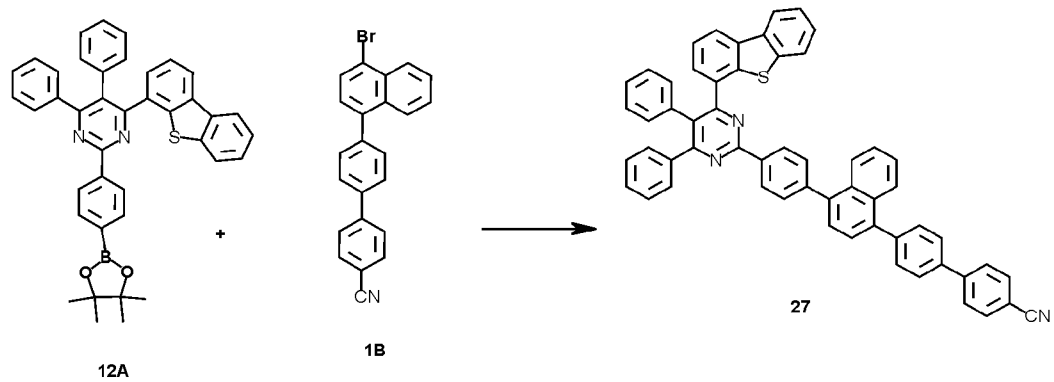


[304] 상기 화합물 21의 제조에 있어서, 화합물 6A 대신에 화합물 11A를 사용하고, 화합물 6B 대신에 화합물 23B를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 26(15 g, 수율 77 %)을 얻었다.

[305] MS: $[M+H]^+ = 784$

[306] <합성예 27> 화합물 27의 제조

[307]

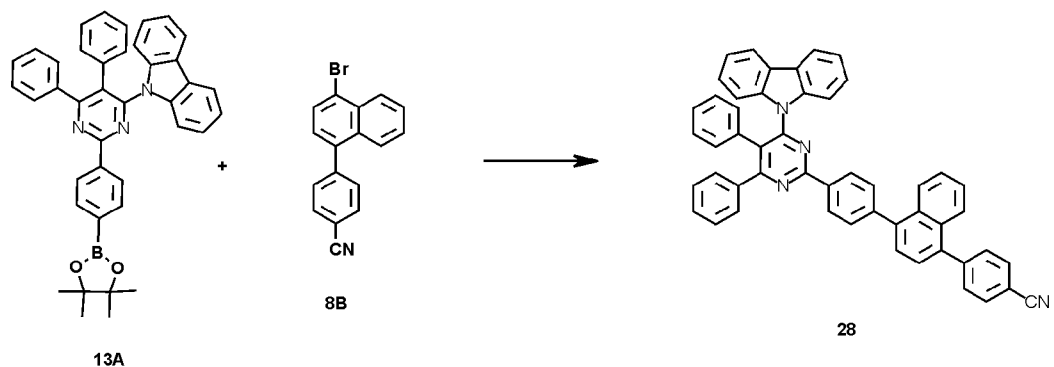


[308] 상기 화합물 1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 12A를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 27(12.5 g, 수율 63 %)을 얻었다.

[309] MS: $[M+H]^+ = 793$

[310] <합성예 28> 화합물 28의 제조

[311]



[312] 상기 화합물 8의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신에 화합물 13A를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 28(10 g, 수율 57 %)을 얻었다.

[313] MS: [M+H]⁺ = 700

[314]

[315] 실험예 2: 소자의 제작

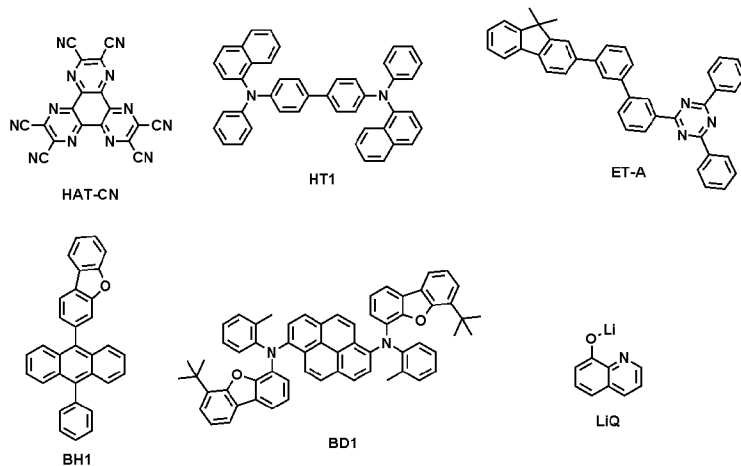
[316] <실시예 1-1>

[317] ITO(인듐주석산화물)가 100nm 두께로 박막 코팅된 유리 기판(corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

[318] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(HAT-CN: hexanitriole hexaazatriphenylene)을 50nm의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공을 수송하는 물질인 HT1(40nm)을 진공 증착한 후 발광층으로 호스트 BH1과 도판트 BD1 화합물을 30nm의 두께로 진공 증착하였다. 상기 발광층 위에 ET-A 화합물을 5nm 두께로 증착하여 정공차단층을 형성한 후, 화합물 1과 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 35nm의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 1.2nm두께로 리튬플로라이드(LiF)와 200nm 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다. 유기 발광 소자를 제조하였다.

[319] 상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 0.04nm/sec 내지 0.07nm/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드의 증착 속도는 0.03nm/sec, 알루미늄의 증착 속도는 0.2nm/sec의 증착 속도를 유지하였다. 증착시 진공도는 2×10⁻⁷ torr 내지 5×10⁻⁶ torr를 유지하였다.

[320]

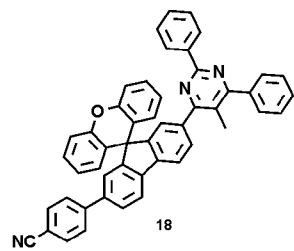
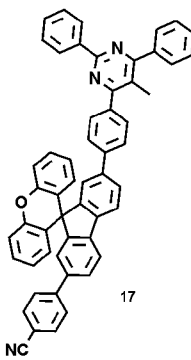
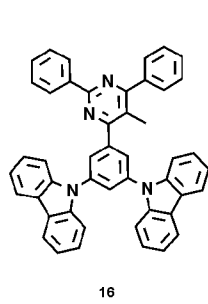
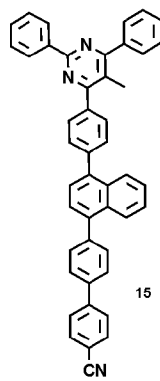
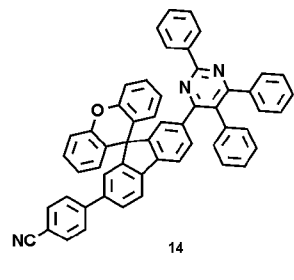
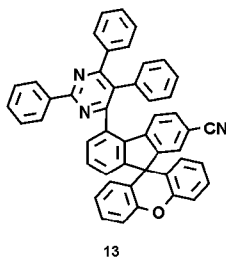
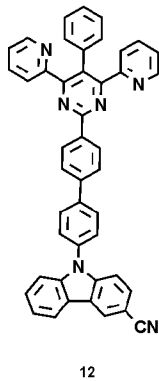
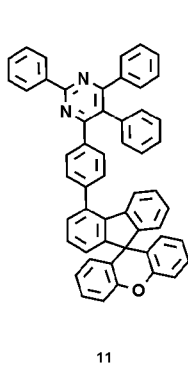
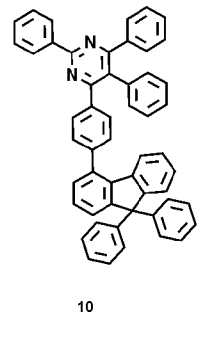
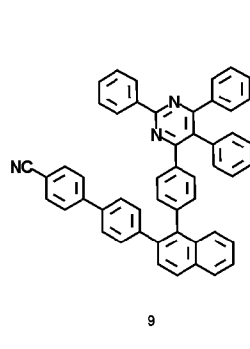
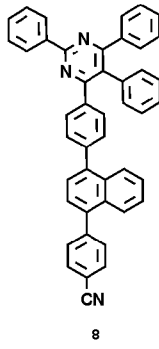
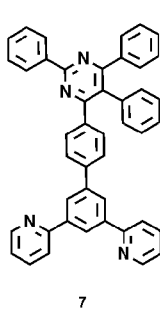
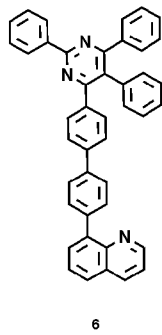
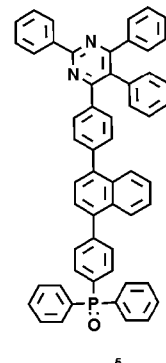
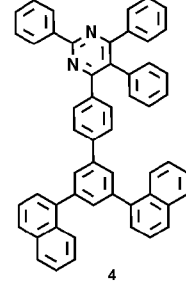
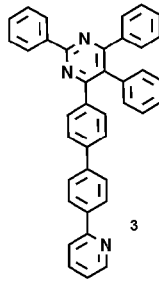
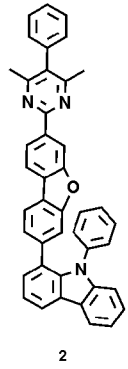
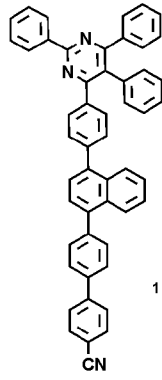


[321]

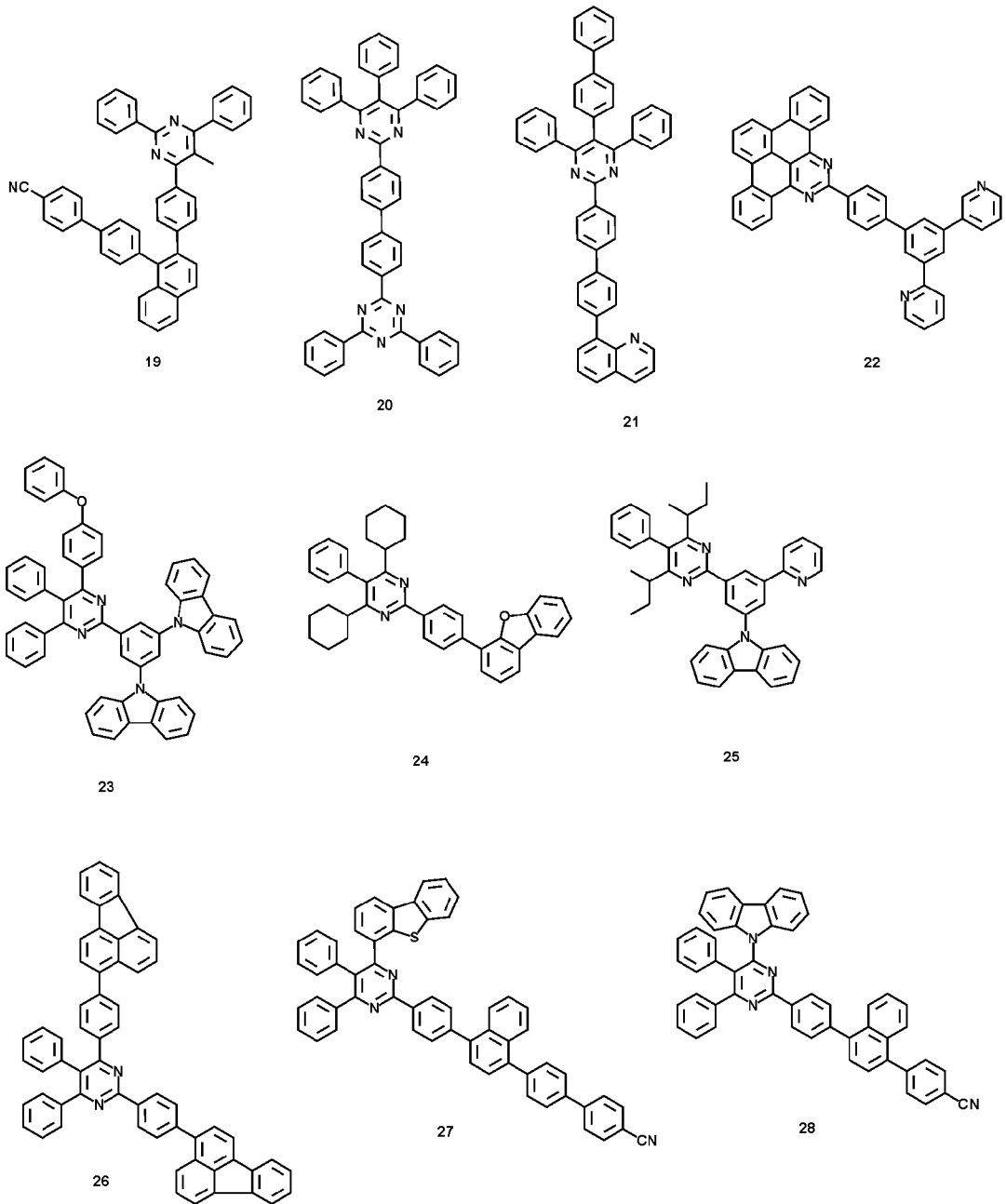
[322] 실시예 1-2 내지 1-28 및 비교예 1-1 내지 1-6

[323] 상기 실시예 1-1에서 상기 전자 주입 및 수송층의 재료로 화합물 1을 사용하는 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1-1과 동일한 방법으로 각 실시예 및 비교예의 유기 발광 소자를 제조하였다.

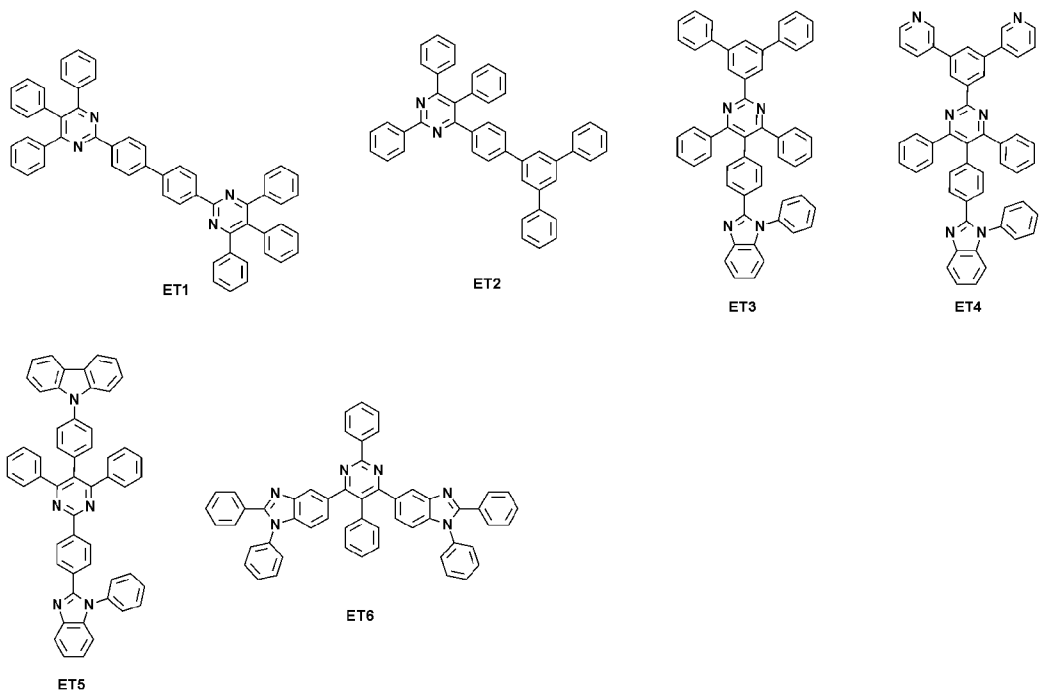
[324]



[325]



[326]



[327] 10 mA/cm²의 전류 밀도에서 제조한 유기 발광 소자의 구동 전압과 발광 효율을 측정하였고, 20 mA/cm²의 전류 밀도에서 소자의 휘도가 초기 휘도 대비 98%가 되는 시간(LT98)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[328]

[329] [표1]

구분	화합물	전압(V)	전류효율(cd/A)	색좌표(x,y)	LT98(h)
실시예 1-1	1	4.01	4.81	(0.138,0.125)	75
실시예 1-2	2	3.87	4.85	(0.138,0.124)	80
실시예 1-3	3	3.98	4.99	(0.138,0.126)	61
실시예 1-4	4	3.97	4.85	(0.138,0.129)	66
실시예 1-5	5	4.10	4.77	(0.138,0.125)	81
실시예 1-6	6	3.87	5.12	(0.138,0.124)	54
실시예 1-7	7	4.01	4.91	(0.138,0.126)	64
실시예 1-8	8	4.07	4.79	(0.138,0.125)	79
실시예 1-9	9	3.85	5.10	(0.138,0.126)	66
실시예 1-10	10	4.00	5.19	(0.139,0.126)	60
실시예 1-11	11	3.99	5.18	(0.138,0.126)	61
실시예 1-12	12	4.08	4.87	(0.138,0.129)	82
실시예 1-13	13	4.08	4.88	(0.138,0.125)	77
실시예 1-14	14	4.04	4.95	(0.138,0.126)	75
실시예 1-15	15	3.90	5.16	(0.138,0.125)	68
실시예 1-16	16	3.98	5.18	(0.138,0.126)	61
실시예 1-17	17	3.97	5.22	(0.138,0.129)	65
실시예 1-18	18	4.00	5.15	(0.138,0.127)	67
실시예 1-19	19	3.85	5.12	(0.138,0.124)	59
실시예 1-20	20	4.11	4.99	(0.138,0.129)	79
실시예 1-21	21	3.95	5.07	(0.138,0.127)	60
실시예 1-22	22	4.10	4.85	(0.138,0.125)	78
실시예 1-23	23	3.98	5.01	(0.138,0.126)	70
실시예 1-24	24	3.98	4.94	(0.138,0.126)	60
실시예 1-25	25	3.81	5.14	(0.138,0.126)	55
실시예 1-26	26	4.09	5.01	(0.138,0.129)	75
실시예 1-27	27	4.06	4.78	(0.138,0.125)	73
실시예 1-28	28	4.08	4.80	(0.138,0.125)	75

비교예 1-1	ET1	4.31	4.19	(0.139,0.129)	38
비교예 1-2	ET2	4.12	4.60	(0.138,0.129)	19
비교예 1-3	ET3	4.24	4.45	(0.138,0.127)	35
비교예 1-4	ET4	4.19	4.54	(0.139,0.125)	38
비교예 1-5	ET5	4.34	4.26	(0.139,0.126)	39
비교예 1-6	ET6	4.47	4.57	(0.139,0.125)	41

[330] 상기 표 1에 의하면, 본 발명의 일 실시상태에 따른 화합물을 포함하는 소자가 ET1 내지 ET6을 포함하는 소자에 비하여 구동 전압이 낮고, 전류 효율이 높으며, 특히 수명 특성이 우수한 것을 확인할 수 있다.

[331]

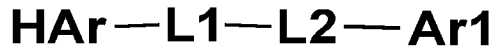
[332] <부호의 설명>

[333] 1: 기판/ 2: 양극/ 3: 정공주입층/ 4: 정공수송층/ 4a: 제1 정공수송층/ 4b: 제2 정공수송층/ 4c: 제3 정공수송층/ 4d: 제4 정공수송층/ 4e: 제5 정공수송층/ 4f: 제6 정공수송층/ 4p: p-도핑된 정공수송층/ 4R: 적색 정공수송층/ 4G: 녹색 정공수송층/ 4B: 청색 정공수송층/ 5: 전자차단층/ 6: 발광층/ 6a: 제1 발광층/ 6b: 제2 발광층/ 6c: 제3 발광층/ 6BF: 청색 형광 발광층/ 6BFa: 제1 청색 형광 발광층/ 6BFb: 제2 청색 형광 발광층/ 6YGP: 황색 녹색 인광 발광층/ 6RP: 적색 인광 발광층/ 6GP: 녹색 인광 발광층/ 7: 정공차단층/ 8: 전자 주입 및 수송층/ 9: 전자수송층/ 9a: 제1 전자수송층/ 9b: 제2 전자수송층/ 9c: 제3 전자수송층/ 10: 전자주입층/ 11: 음극/ 12: N형 전하생성층/ 12a: 제1 N형 전하생성층/ 12b: 제2 N형 전하생성층/ 13: P형 전하생성층/ 13a: 제1 P형 전하생성층/ 13b: 제2 P형 전하생성층/ 14: 캡핑층

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

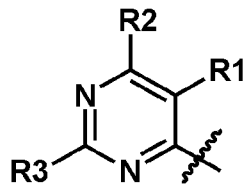
HAr은 하기 화학식 A-1 또는 A-2로 표시되는 기이며,

L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합이며,

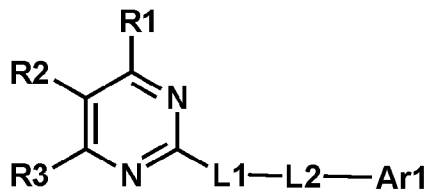
Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기이고,

L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이거나, Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기이며,

[화학식 A-1]



[화학식 A-2]



상기 화학식 A-1 및 A-2에 있어서,

R1 내지 R3 중 한 개는 페닐기이고, 나머지 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 분지쇄의 알킬기; 메틸기; 또는 치환 또는 비치환된 단환의 헤테로아릴기이거나,

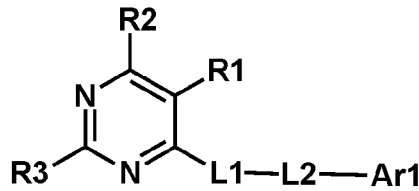
R1 내지 R3 중 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기이며, 나머지 한 개는 치환 또는 비치환된 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기; 알킬기, 아릴기 또는 아릴옥시기로 치환 또는

비치환된 단환 또는 다환의 아릴기; 피리디닐기; 디벤조티오펜닐기; 디벤조퓨라닐기; 또는 카바졸릴기이거나, R1 내지 R3 중 인접한 기는 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

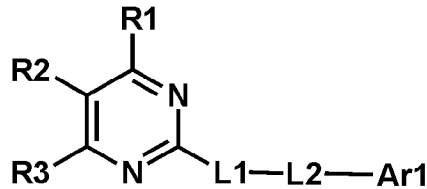
 는 상기 화학식 1의 L1에 결합되는 부위이다.

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

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서,

L1, L2 및 Ar1의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고,

R1 내지 R3의 정의는 상기 화학식 A-1 및 A-2에서 정의한 바와 동일하다.

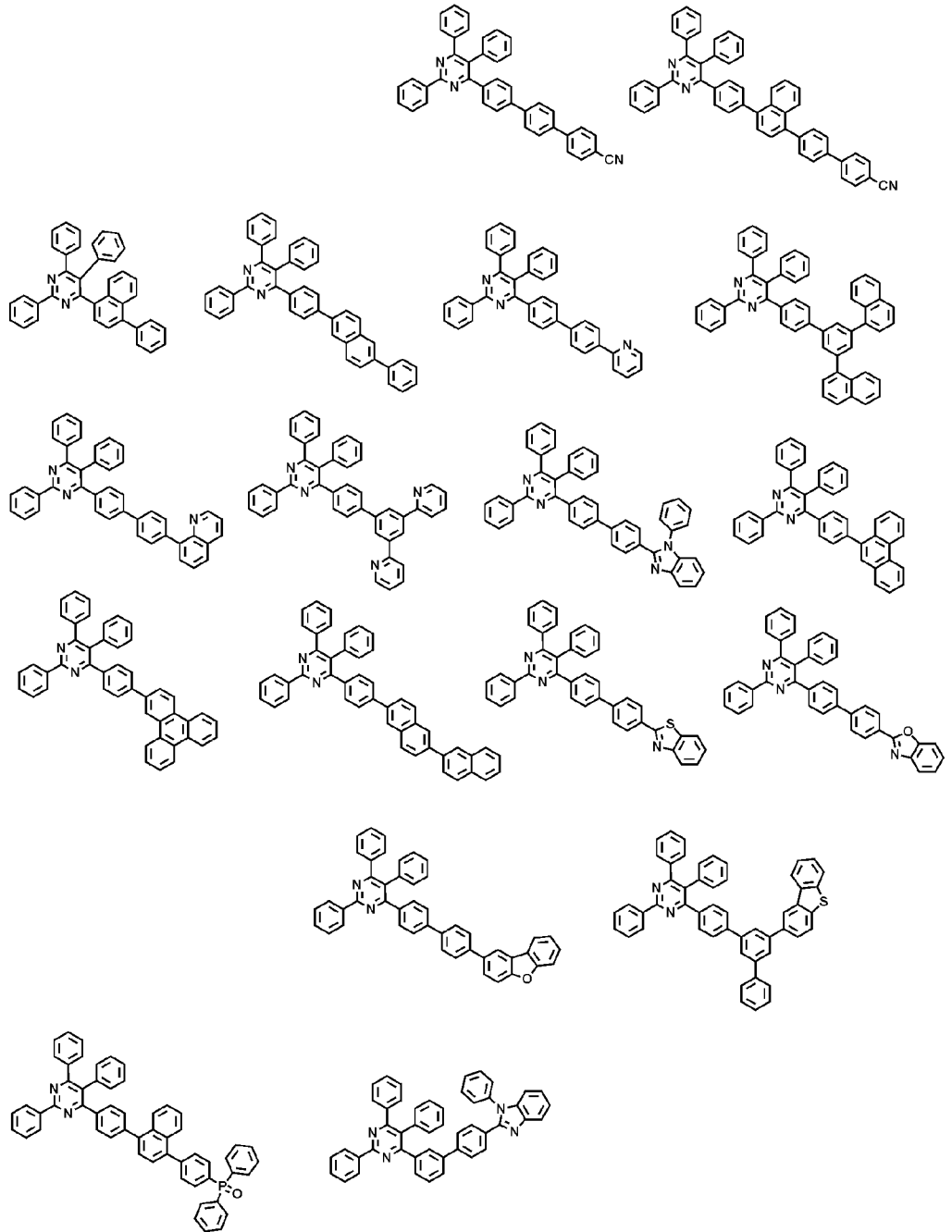
[청구항 3] 청구항 1에 있어서, L1 및 L2로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나는 알킬기, 시아노기로 치환된 아릴기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 알킬기로 치환된 헤테로아릴기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 아릴렌기; 또는 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 또는 아릴헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 단환 또는 다환의 헤테로아릴렌기이고, 나머지는 직접결합인 화합물.

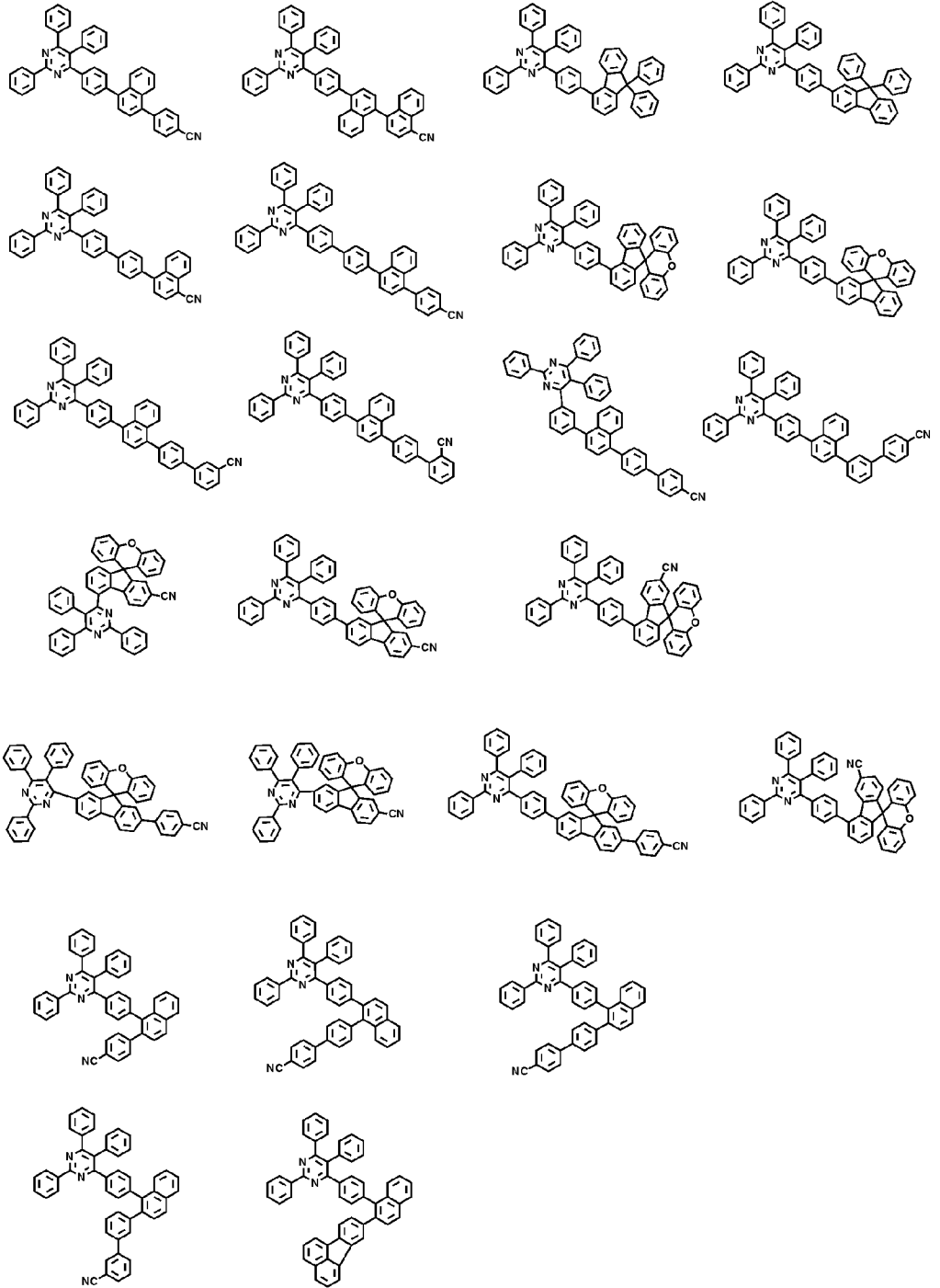
[청구항 4] 청구항 1에 있어서, Ar1은 시아노기; 시아노기, 아릴포스핀옥사이드기, 플루오로알콕시기로 치환된 아릴기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 시아노기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 아릴기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 또는 시아노기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 다환의 헤테로아릴기인 것인 화합물.

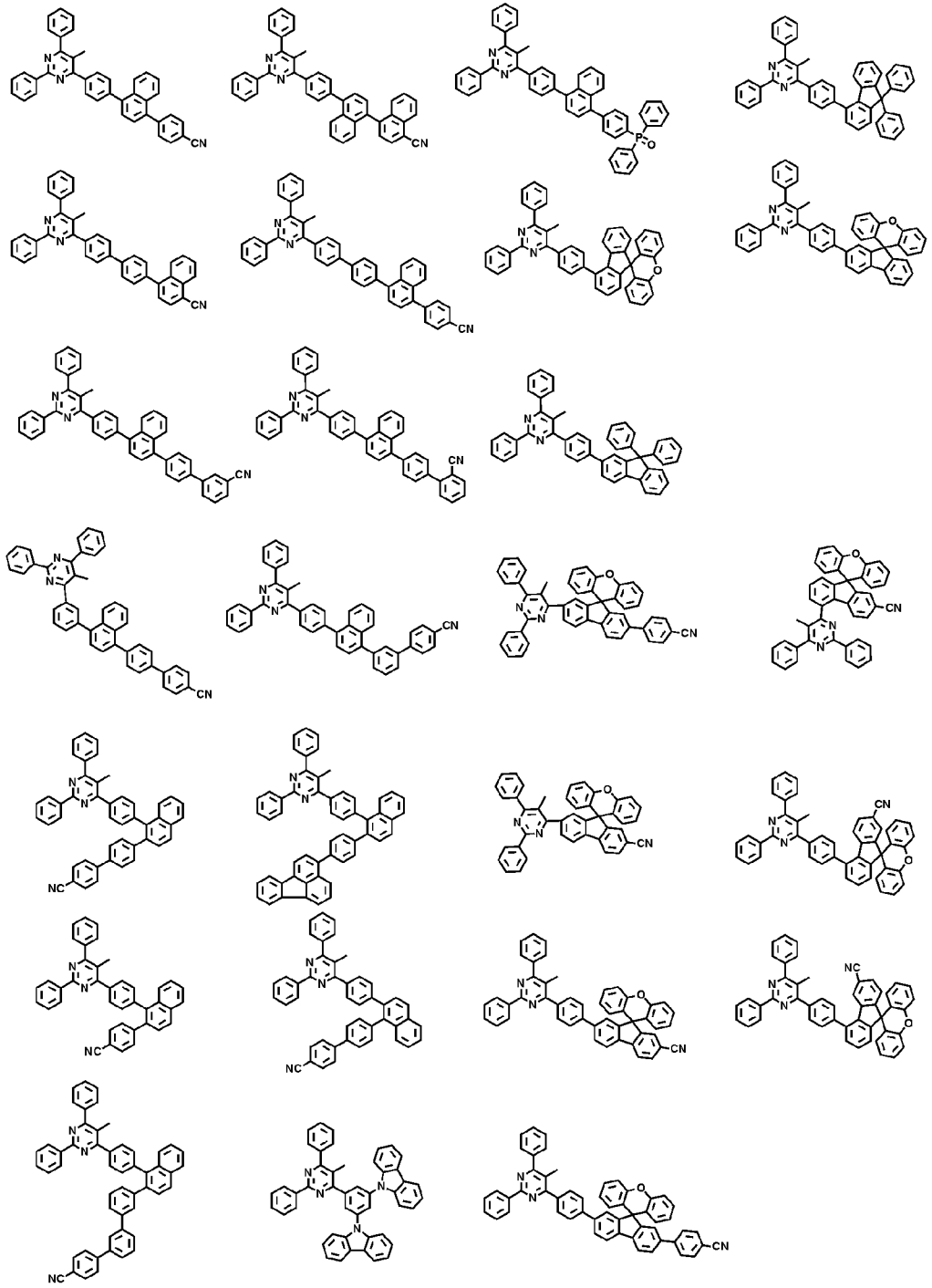
[청구항 5] 청구항 1에 있어서, R1 내지 R3 중 한 개는 페닐기이고, 나머지 두 개는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 시클로알킬기; 분지쇄의 알킬기; 메틸기; 또는 단환의 헤테로아릴기인 것인 화합물.

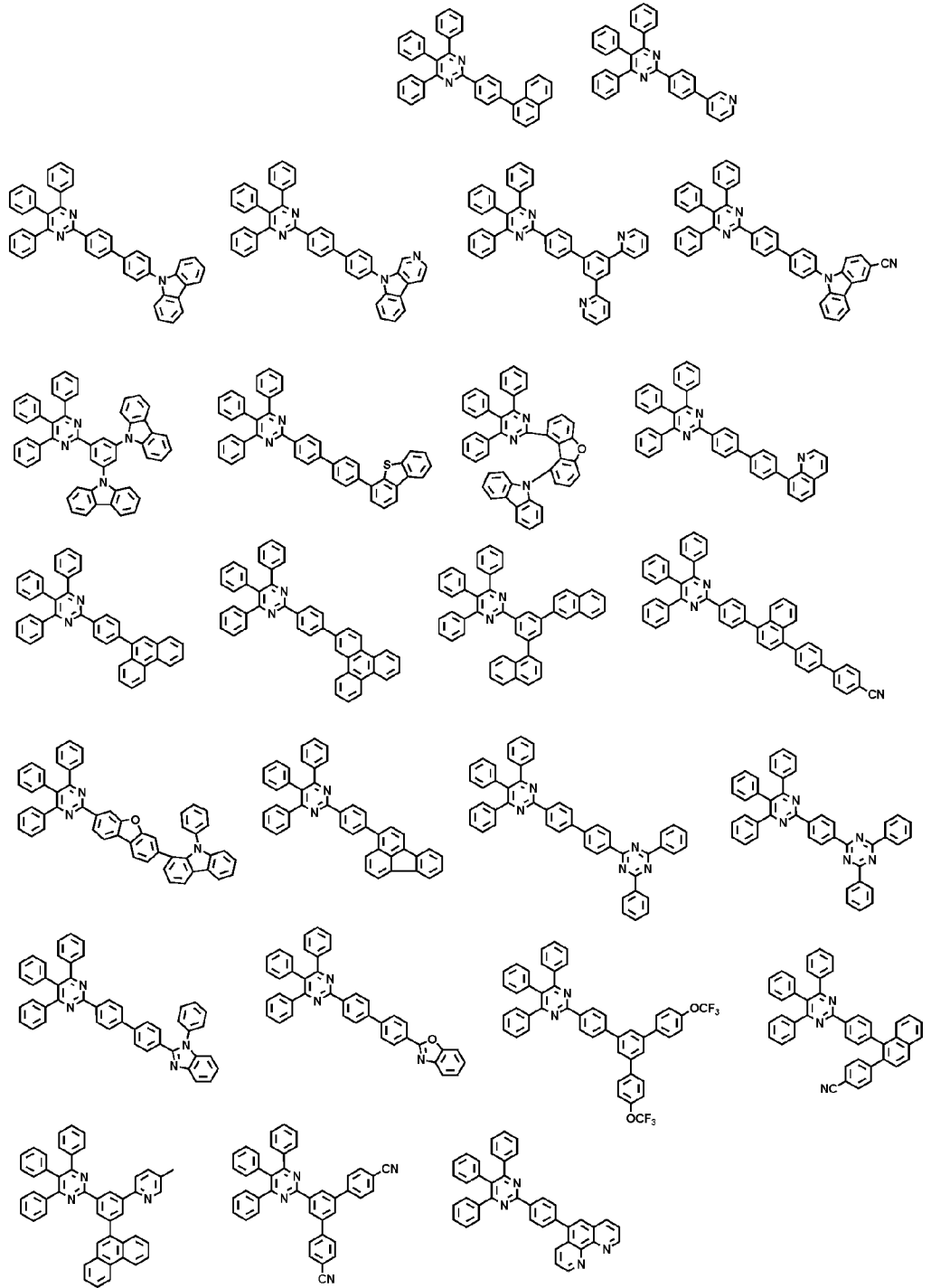
[청구항 6] 청구항 1에 있어서, R1 내지 R3 중 인접한 기는 서로 결합하여, 헤테로고리를 형성하는 것인 화합물.

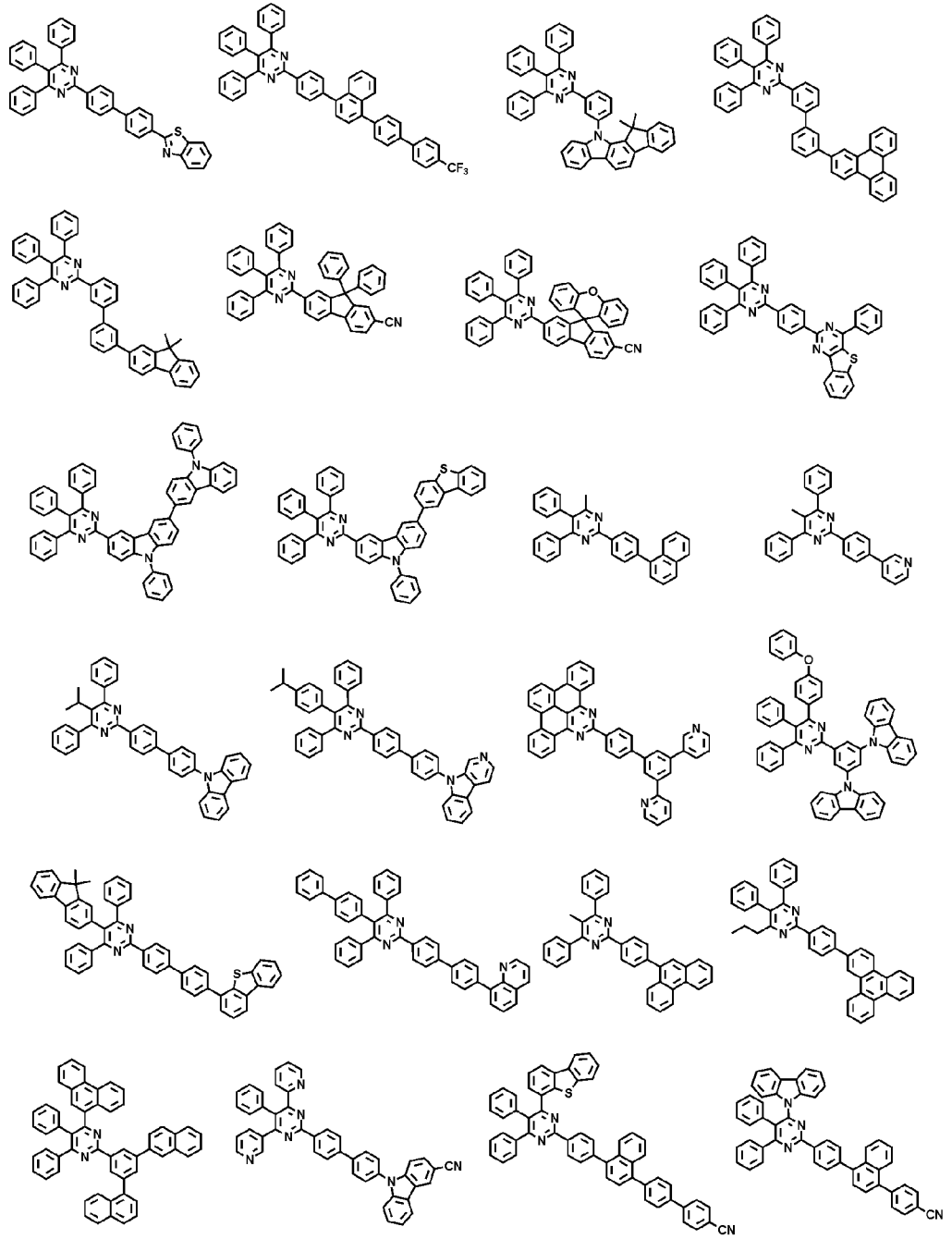
[청구항 7] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

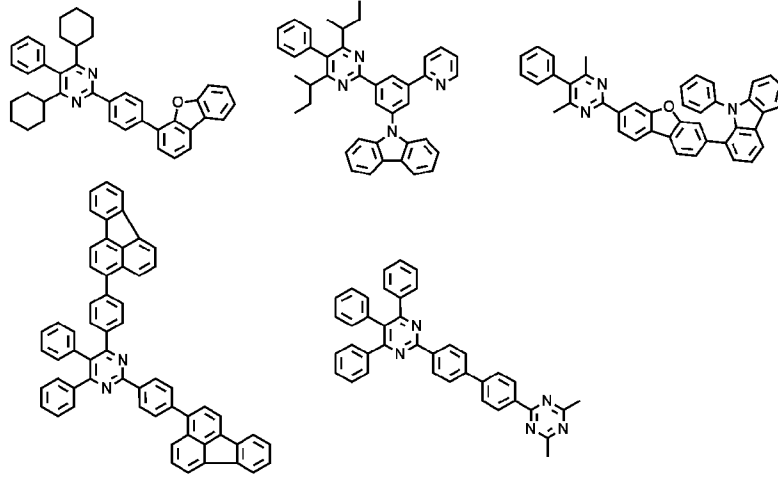












- [청구항 8] 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층은 청구항 1 내지 7 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 9] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 전자수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 전자수송을 동시에 하는 층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 10] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 정공차단층을 포함하고, 상기 정공차단층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[도1]

11
8
7
6
4
3
2
1

[도2]

11
8
6
5
4
3
2
1

[도3]

11
8
6b
4b
13
12
9a
6a
5
4a
3
2
1

[도4]

11
9c
6c
4c
13b
12b
9b
6b
4b
13a
12a
9a
6a
5
4a
3
2
1

[도5]

14
11
10
9c
6BFb
4e
4d
13b
12b
9b
6GP
6YGP
6RP
4c
13a
12a
9a
6BFa
4b
4a
3
2
1

[도6]

14
11
10
9c
6BFb
4e
4d
13b
12b
9b
6GP
6RP
4c
13a
12a
9a
6BFa
4b
4a
3
2
1

[도7]

14
11
10
9c
6BFc
4f
4e
13b
12b
9b
6BFb
4d
4c
13a
12a
9a
6BFa
4b
4a
4pa
2
1

[도8]

14		
11		
10		
9b		
9a		
6RP	6GP	6BF
4R	4G	4B
4p		
2		
1		

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/003363

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 239/26(2006.01)i, C07D 401/10(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 403/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/52(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 239/26; C07D 209/82; C07D 249/18; C07D 251/12; C07D 251/24; C07D 401/10; C07D 403/10; C07D 409/14; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 401/14; C07D 403/14; H01L 51/52

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: 2,5,6-substituted-pyrimidine, 4,5,6-substituted-pyrimidine, electron injection, electron transport layer, organic light-emitting element

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2017-099430 A1 (DOOSAN CORPORATION) 15 June 2017 See claims 1, 5, 7, 8; and paragraphs [386], [387].	1-10
X	WO 2018-016898 A1 (LG CHEM, LTD.) 25 January 2018 See claims 1, 6, 9, 10; pages 58, 64, 65.	1-10
X	WO 2017-131380 A1 (LG CHEM, LTD.) 03 August 2017 See claims 1-9.	1-10
X	KR 10-2017-0093023 A (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 14 August 2017 See claim 9, compounds 1-32.	1-10
X	JP 2018-035129 A (YAMAGATA UNIV.) 08 March 2018 See claims 1, 4.	1-10
PX	KR 10-2018-0093354 A (PNH TECH) 22 August 2018 See claims 4-6; and page 11, compound 90.	1-10
PX	CN 107827826 A (SHANGHAI TAOE CHEMICAL TECHNOLOGY CO., LTD.) 23 March 2018 See claims 1, 3.	1-10

Further documents are listed in the continuation of Box C.

See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

“&” document member of the same patent family


Date of the actual completion of the international search

02 JULY 2019 (02.07.2019)

Date of mailing of the international search report

02 JULY 2019 (02.07.2019)

Name and mailing address of the ISA/KR

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

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2019/003363

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2017-099430 A1	15/06/2017	KR 10-2017-0067424 A	16/06/2017
WO 2018-016898 A1	25/01/2018	CN 107848989 A	27/03/2018
		EP 3392242 A1	24/10/2018
		JP 2018-532688 A	08/11/2018
		KR 10-1885900 B1	06/08/2018
		KR 10-2018-0010168 A	30/01/2018
		TW 201825459 A	16/07/2018
		TW 1648262 B	21/01/2019
		US 2018-0354913 A1	13/12/2018
WO 2017-131360 A1	03/08/2017	CN 107635978 A	26/01/2018
		KR 10-1832084 B1	23/02/2018
		KR 10-2017-0089408 A	03/08/2017
		TW 201728573 A	16/08/2017
		TW 1636977 B	01/10/2018
KR 10-2017-0093023 A	14/08/2017	CN 108713051 A	26/10/2018
		EP 3412751 A1	12/12/2018
		JP 2019-511464 A	25/04/2019
		KR 10-1940169 B1	18/01/2019
		TW 201728574 A	16/08/2017
		TW 1624462 B	21/05/2018
		US 2018-0339967 A1	29/11/2018
		WO 2017-135510 A1	10/08/2017
JP 2018-035129 A	08/03/2018	None	
KR 10-2018-0093354 A	22/08/2018	None	
CN 107827826 A	23/03/2018	None	

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 239/26(2006.01)i, C07D 401/10(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 403/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/52(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 239/26; C07D 209/82; C07D 249/18; C07D 251/12; C07D 251/24; C07D 401/10; C07D 403/10; C07D 409/14; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 401/14; C07D 403/14; H01L 51/52

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN (Registry, Caplus), Google & 키워드:2,5,6-치환-피리미딘, 4,5,6-치환-피리미딘, 전자주입, 전자수송층, 유기발광소자

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2017-099430 A1 (DOOSAN CORPORATION) 2017.06.15 청구항 1, 5, 7, 8; 및 단락 [386], [387] 참조.	1-10
X	WO 2018-016898 A1 (LG CHEM, LTD.) 2018.01.25 청구항 1, 6, 9, 10; 페이지 58, 64, 65 참조.	1-10
X	WO 2017-131380 A1 (LG CHEM, LTD.) 2017.08.03 청구항 1-9 참조.	1-10
X	KR 10-2017-0093023 A (삼성에스디아이 주식회사) 2017.08.14 청구항 9, 화합물 1-32 참조.	1-10
X	JP 2018-035129 A (YAMAGATA UNIV.) 2018.03.08 청구항 1, 4 참조.	1-10
PX	KR 10-2018-0093354 A ((주)피엔에이치테크) 2018.08.22 청구항 4-6; 및 페이지 11, 화합물 90 참조.	1-10
PX	CN 107827826 A (SHANGHAI ROAD ALSO CHEMICAL INDUSTRY SCIENCE CO., LTD) 2018.03.23 청구항 1, 3 참조.	1-10

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일
2019년 07월 02일 (02.07.2019)

국제조사보고서 발송일
2019년 07월 02일 (02.07.2019)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관
이기철
전화번호 +82-42-481-3353



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2017-099430 A1	2017/06/15	KR 10-2017-0067424 A	2017/06/16
WO 2018-016898 A1	2018/01/25	CN 107848989 A EP 3392242 A1 JP 2018-532688 A KR 10-1885900 B1 KR 10-2018-0010168 A TW 201825459 A TW I648262 B US 2018-0354913 A1	2018/03/27 2018/10/24 2018/11/08 2018/08/06 2018/01/30 2018/07/16 2019/01/21 2018/12/13
WO 2017-131380 A1	2017/08/03	CN 107635978 A KR 10-1832084 B1 KR 10-2017-0089408 A TW 201728573 A TW I636977 B	2018/01/26 2018/02/23 2017/08/03 2017/08/16 2018/10/01
KR 10-2017-0093023 A	2017/08/14	CN 108713051 A EP 3412751 A1 JP 2019-511464 A KR 10-1940169 B1 TW 201728574 A TW I624462 B US 2018-0339967 A1 WO 2017-135510 A1	2018/10/26 2018/12/12 2019/04/25 2019/01/18 2017/08/16 2018/05/21 2018/11/29 2017/08/10
JP 2018-035129 A	2018/03/08	없음	
KR 10-2018-0093354 A	2018/08/22	없음	
CN 107827826 A	2018/03/23	없음	