(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020 년 5 월 22 일 (22.05.2020)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2020/101305 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 405/04 (2006.01) *C07D 251/24* (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 409/04 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 409/10 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/015274

(22) 국제출원일: 2019 년 11 월 11 일 (11.11.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0139107 2018 년 11 월 13 일 (13.11.2018) KR
10-2019-0142731 2019 년 11 월 8 일 (08.11.2019) KR

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

(72) 발명자: 허동욱 **(HEO, Dong Uk)**; 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 홍성길 **(HONG, Sung Kil)**; 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 허정오 **(HUH, Jungoh)**; 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).

(74) 대리인: 유미특허법인 **(YOU ME PATENT AND LAW FIRM)**; 06134 서울시 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, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

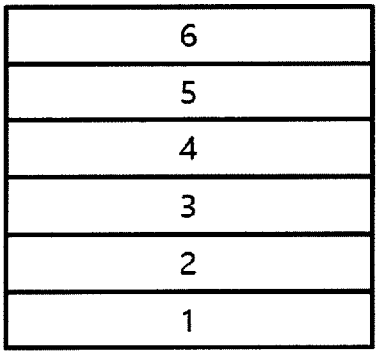
(54) Title: NOVEL COMPOUND AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE USING SAME

(54) 발명의 명칭: 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자

(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 유기발광 소자를 제공한다.

【도 1】



WO 2020/101305 A1

【발명의 명칭】

신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자

【기술분야】

관련 출원(들)과의 상호 인용

본 출원은 2018년 11월 13일자 한국 특허 출원 제10-2018-0139107호 및 2019년 11월 8일자 한국 특허 출원 제10-2019-0142731호에 기초한 우선권의 이익을 주장하며, 해당 한국 특허 출원들의 문헌에 개시된 모든 내용은 본 명세서의 일부로서 포함된다.

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

【배경기술】

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.

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.

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

【선행기술문헌】

【특허문헌】

(특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호

【발명의 상세한 설명】

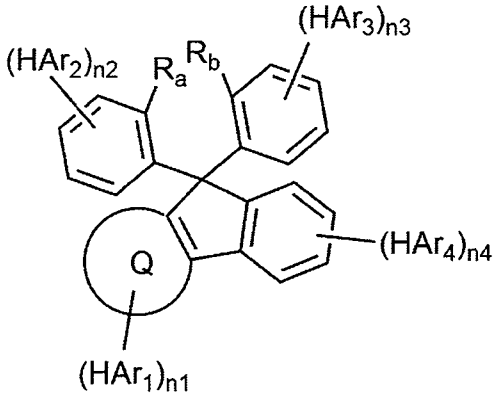
【기술적 과제】

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

【기술적 해결방법】

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

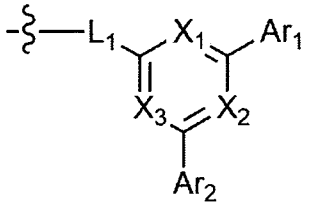
Q는 나프탈렌이고,

R_a 및 R_b는 각각 수소이거나, 또는 함께 결합하여 Y를 형성하고,

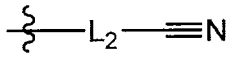
Y는 단일 결합, O, 또는 S이고,

HAr_1 내지 HAr_4 중 하나는 하기 화학식 2로 표시되고, 나머지 중 하나는 하기 화학식 3으로 표시되고, 그 외는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되고,

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

L_1 및 L_2는 각각 독립적으로, 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴렌이고,

X_1 내지 X_3는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되, X_1 내지 X_3 중 적어도 둘은 N이고,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 헤테로원자를 1개 이상 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 C_{1-60} 알킬; 치환 또는 비치환된 C_{3-60} 사이클로알킬; 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 헤테로원자를 1개 이상 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

n1 내지 n4는 각각 0 내지 2의 정수이고,

n1+n2+n3+n4는 2 내지 8의 정수이고,

n1 내지 n4가 2 이상일 경우 괄호 안의 구조는 각각 동일하거나 상이하다.

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

【발명의 효과】

상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

【도면의 간단한 설명】

도 1은 기판(1), 양극(2), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자 주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(7), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자 주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

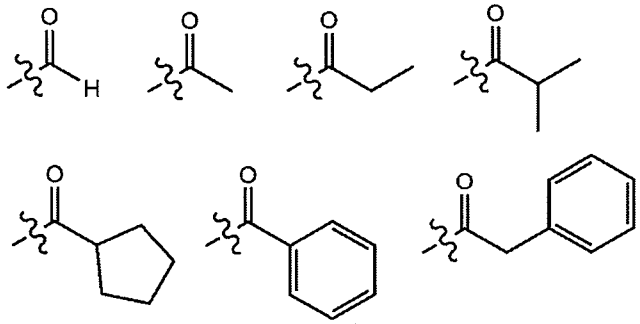
【발명의 실시를 위한 형태】

이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

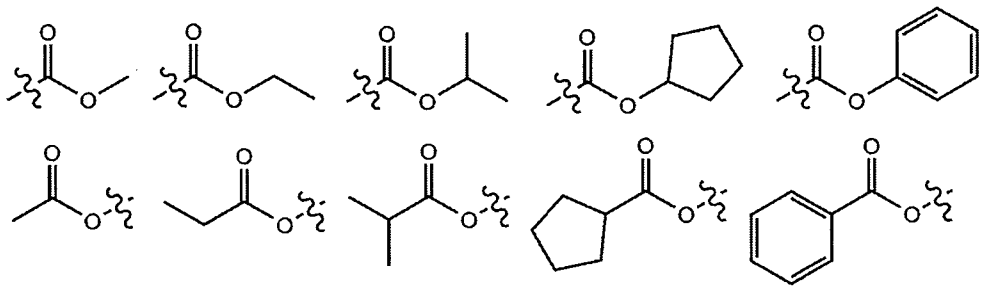
본 명세서에서, 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로겐기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폭시기; 아릴술폭시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐이기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.

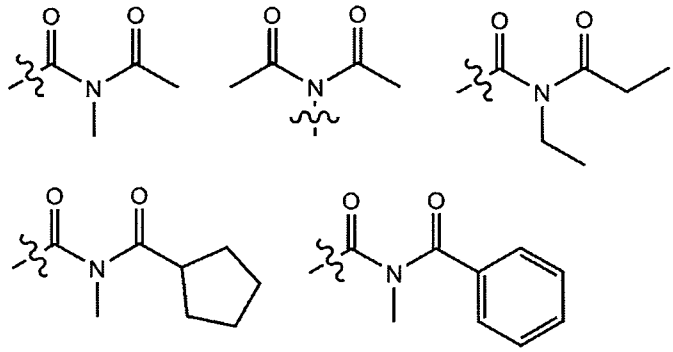
본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



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 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



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



본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 사이클로펜틸메틸, 사이클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

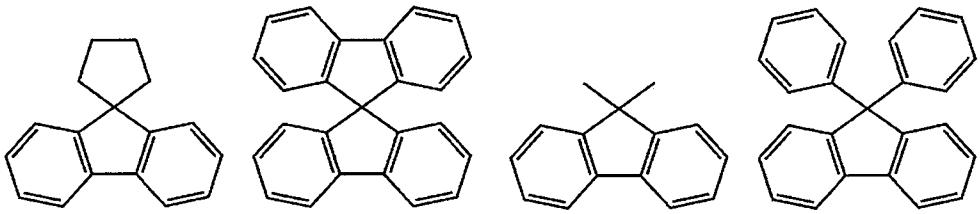
본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의

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 이들에 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 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 한정되지 않는다.

본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐이기, 터페닐기 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.

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.

본 명세서에 있어서, 헤테로아릴은 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로아릴의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기 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 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가기인 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

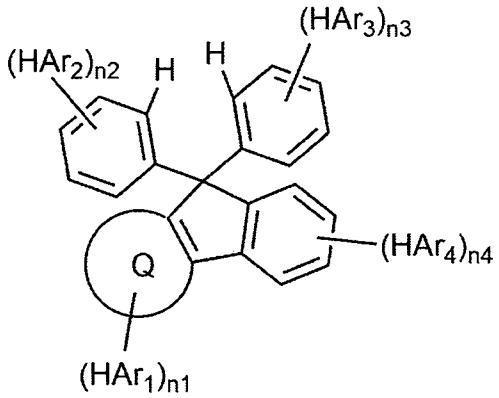
수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다.

한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 화학식 2로 표시되는 치환기 및 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기를 동시에 포함한다. 다시 말하여, 상기 화학식 1에서 치환기 HAr_1 내지 HAr_4 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되고, 적어도 하나는 상기 화학식 3으로 표시된다. 따라서, n1+n2+n3+n4는 2 이상의 값을 갖는데, 이때 n1+n2+n3+n4가 2인 경우에는, HAr_1 내지 HAr_4 중 하나는 화학식 2로 표시되는 치환기이고, 나머지 하나는 화학식 3으로 표시되는 치환기임을 의미한다.

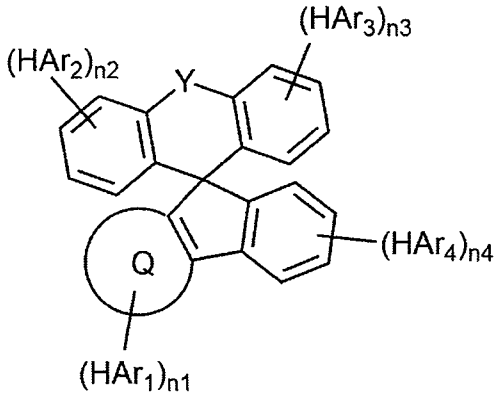
상기와 같이, 화학식 2로 표시되는 N 함유 6원-헤테로아릴기 및 화학식 3으로 표시되는 시아노기 모두를 포함하는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 높은 전자이동도를 나타내면서 동시에 전자이동속도의 제어가 가능하다. 따라서, 상기 화합물을 사용한 유기 발광 소자는 이러한 치환기를 포함하지 않거나 또는 이 중 하나의 치환기만을 포함하는 화합물을 사용한 유기 발광 소자에 비해 효율 및/또는 수명 측면에서 우수한 특성을 나타낸다.

구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 R_a 및 R_b의 정의에 따라 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시된다:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]

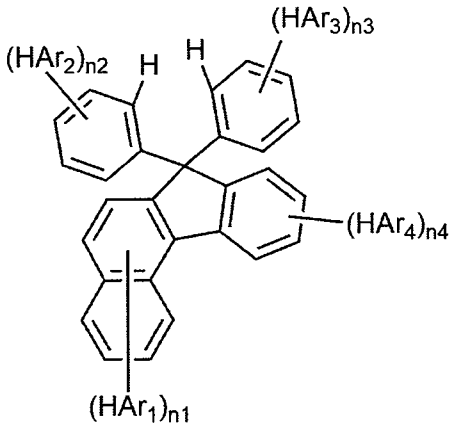


상기 화학식 1-1 및 1-2에서,

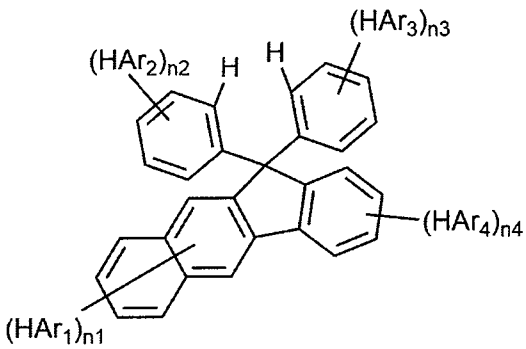
Q, Y, HAr_1 내지 HAr_4 및 n1 내지 n4에 대한 설명은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 R_a 및 R_b의 정의 및 나프탈렌의 결합 위치에 따라 하기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3 및 1-2-1 내지 1-2-3으로 표시될 수 있다:

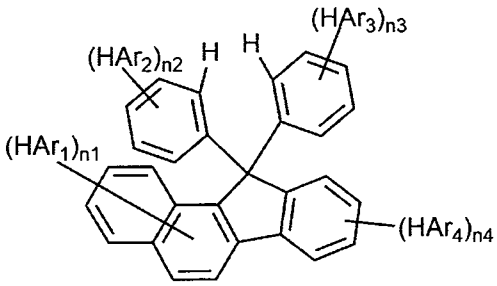
[화학식 1-1-1] [화학식 1-1-2]



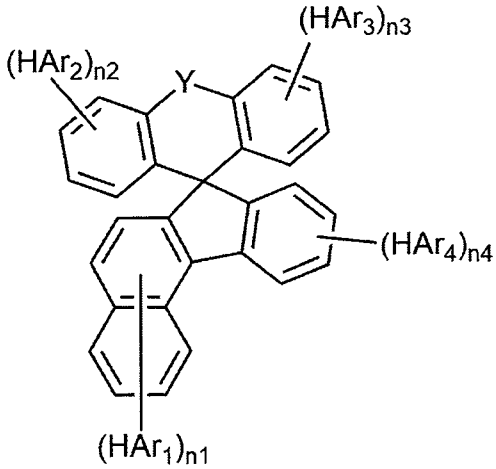
[화학식 1-1-3]



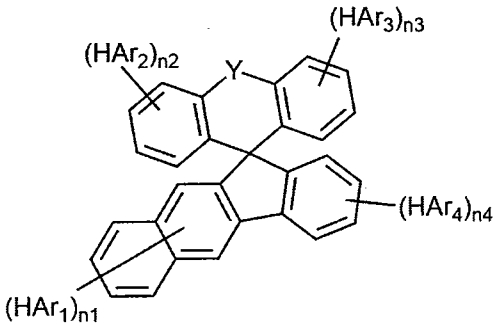
[화학식 1-2-1]

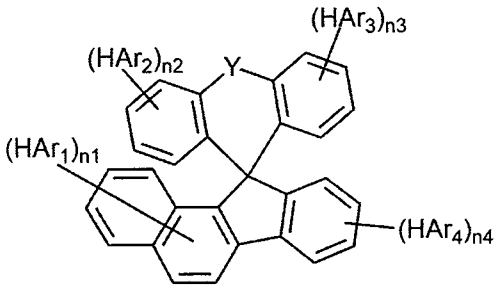


[화학식 1-2-2]



[화학식 1-2-3]





상기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3 및 1-2-1 내지 1-2-3에서,

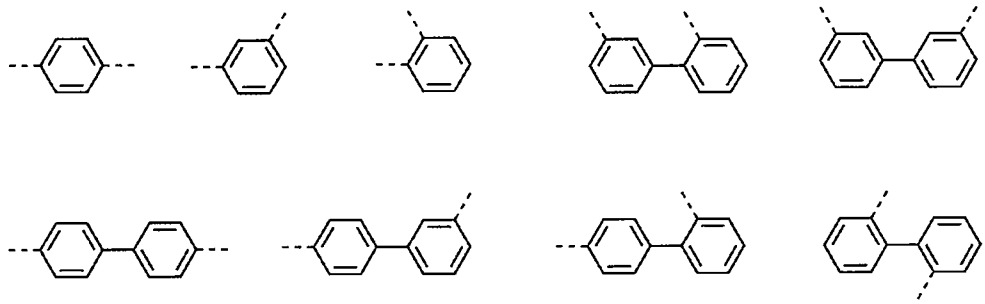
Y는 단일 결합, O, 또는 S이고,

HAr_1 내지 HAr_4 및 n1 내지 n4에 대한 설명은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

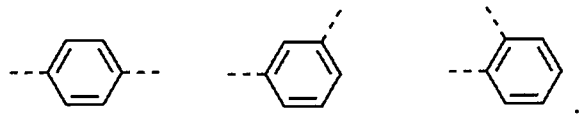
바람직하게는, L_1 및 L_2는 각각 독립적으로, 단일 결합, 또는 C_{6-20} 아릴렌일 수 있다.

구체적으로, L_1 및 L_2는 각각 독립적으로, 단일 결합, 페닐렌, 또는 비페닐릴렌일 수 있다.

보다 구체적으로, L_1은 단일결합, 또는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나이고,



L_2는 단일결합, 또는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나이다:



바람직하게는, X_1 내지 X_3는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되, 여기서 R은 수소이다. 보다 바람직하게는, X_1 내지 X_3는 모두 N이다.

바람직하게는, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로, 비치환되거나, 또는 피리디닐로 치환된 C_{6-20} 아릴일 수 있다.

구체적으로, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로, 페닐 또는 피리디닐페닐일 수 있다.

예를 들어, Ar_1 및 Ar_2는 모두 페닐이거나; 또는 Ar_1은 페닐이고, Ar_2는 피리디닐페닐일 수 있다.

바람직하게는, n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고, n1+n2+n3+n4는 2이다.

예를 들어, 상기 화합물은 상기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

이때, Q는 나프탈렌이고,

HAr_1 및 HAr_2는 각각 독립적으로, 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되되, HAr_1 및 HAr_2 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되고,

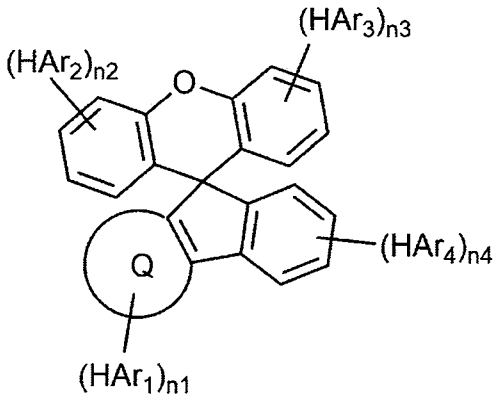
HAr_3 및 HAr_4는 각각 독립적으로, 상기 화학식 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이다.

또는, 상기 화합물은 하기 화학식 1-2A로 표시될 수 있다:

[화학식 1-2A]



상기 화학식 1-2A에서,

Q는 나프탈렌이고,

HAr_1 내지 HAr_3는 각각 독립적으로, 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되되, HAr_1 내지 HAr_3 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되고,

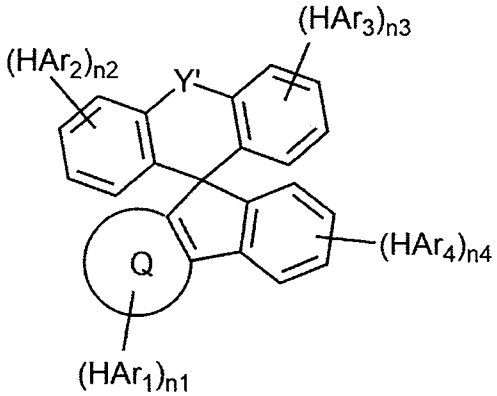
HAr_4는 상기 화학식 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이다.

또는, 상기 화합물은 하기 화학식 1-2B로 표시될 수 있다:

[화학식 1-2B]



상기 화학식 1-2B에서,

Q는 나프탈렌이고,

Y'는 단일 결합, 또는 S이고,

HAr_1 내지 HAr_4 중 하나는 하기 화학식 2로 표시되고, 나머지 중 하나는 하기 화학식 3으로 표시되고, 그 외는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이다.

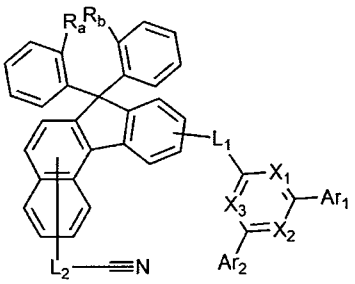
보다 바람직하게는, n1+n2+n3+n4가 2인 경우,

n1 및 n3는 1이고, n2 및 n4는 0이거나;

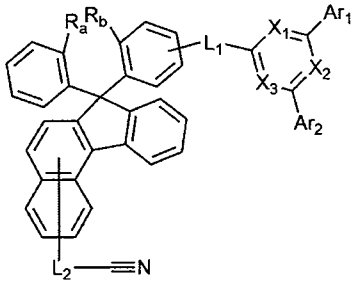
n1 및 n4는 1이고, n2 및 n3는 0이거나; 또는

n2 및 n3는 1이고, n1 및 n4는 0이다.

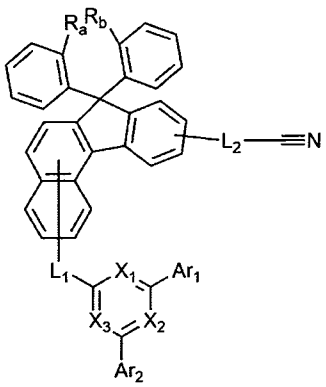
예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 4-1 내지 4-7 중 어느 하나로 표시되는 화합물일 수 있다:



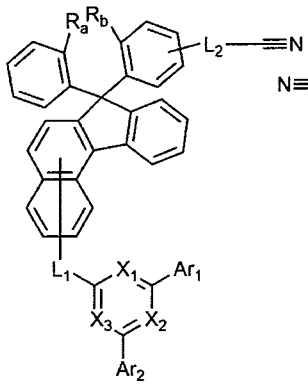
4-1



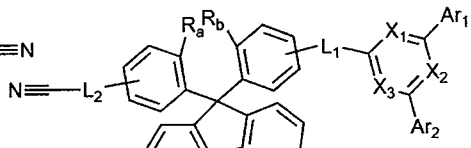
4-2



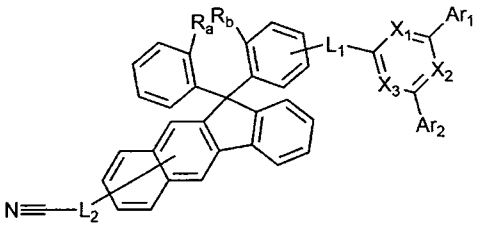
4-3



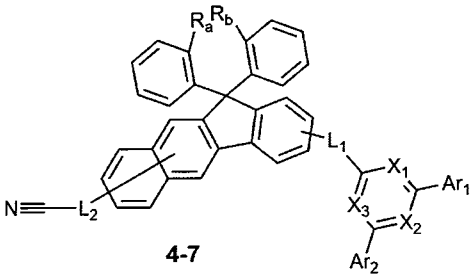
4-4



4-5



4-6



4-7

상기 화학식 4-1 내지 4-7에서,

R_a, R_b, L_1, L_2, X_1 내지 X_3, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

바람직하게는, 상기 화학식 4-1 및 4-7에서,

R_a 및 R_b는 함께 결합하여 단일 결합, 또는 S를 형성하고,

상기 화학식 4-2, 4-5 및 4-6에서,

R_a 및 R_b는 함께 결합하여 단일결합, O, 또는 S를 형성하고,

상기 화학식 4-3 및 4-4에서,

R_a 및 R_b는 각각 수소이거나, 또는 함께 결합하여 단일 결합, O, 또는 S를 형성할 수 있다.

또한 바람직하게는, n1 내지 n4는 각각 0, 1, 또는 2이고, n1+n2+n3+n4는 3일 수 있다.

예를 들어, 상기 화학식 1에서,

HAr_1 내지 HAr_4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되고, 나머지 중 두 개가 상기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

보다 바람직하게는, n1+n2+n3+n4가 3인 경우,

n1, n2 및 n4는 1이고, n3는 0이거나;

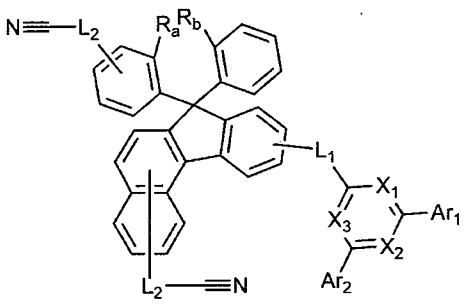
n1, n3 및 n4는 1이고, n2는 0이거나;

n1은 2이고, n3는 1이고, n2 및 n4는 0이거나;

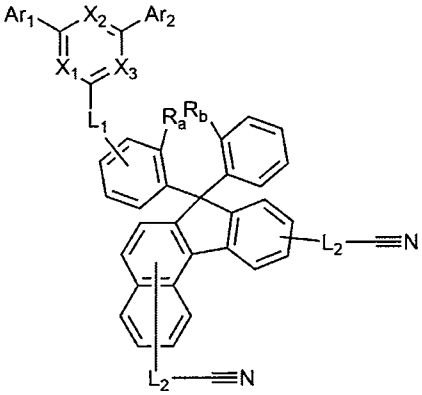
n3는 2이고, n1은 1이고, n2 및 n4는 0이거나; 또는

n4는 2이고, n1은 1이고, n2 및 n3는 0일 수 있다.

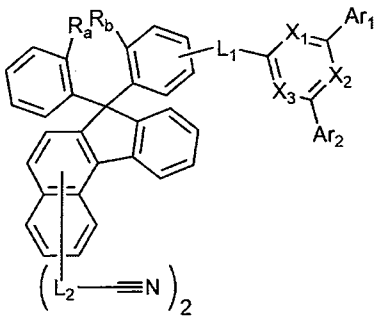
보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 5-1 내지 5-7 중 어느 하나로 표시되는 화합물일 수 있다:



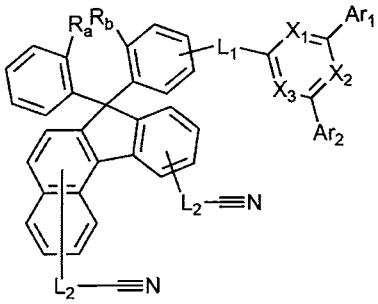
5-1



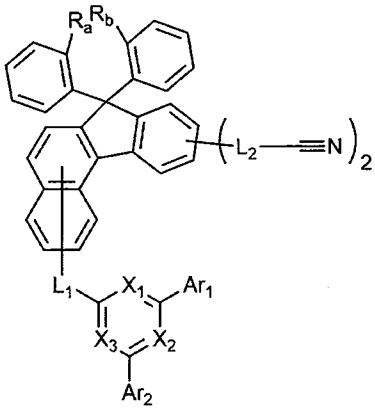
5-2



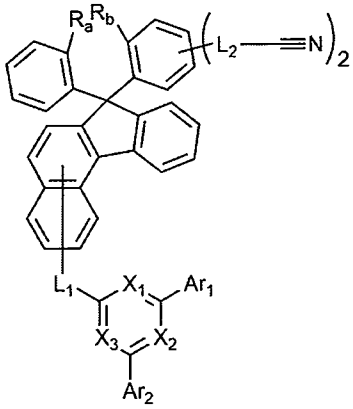
5-3



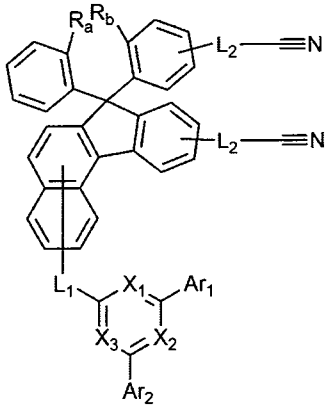
5-4



5-5



5-6



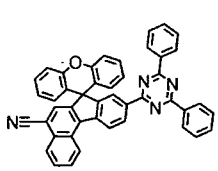
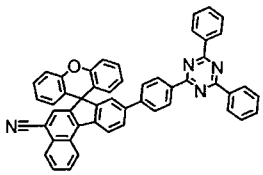
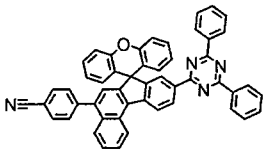
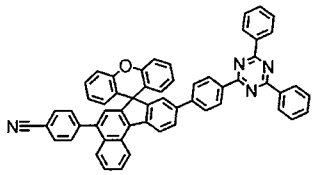
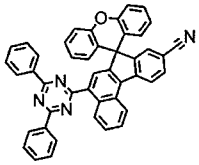
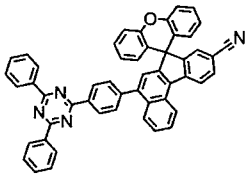
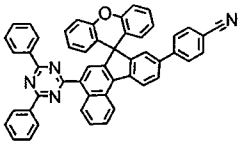
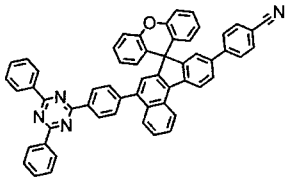
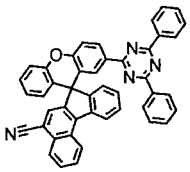
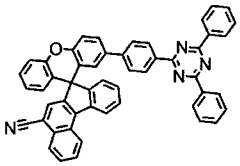
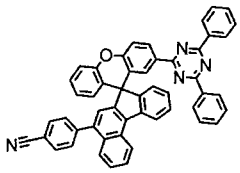
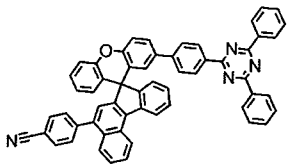
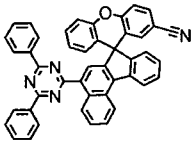
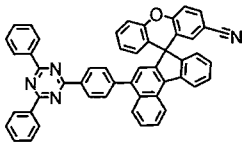
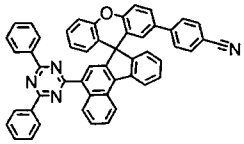
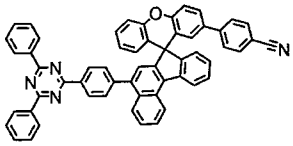
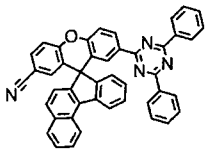
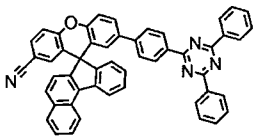
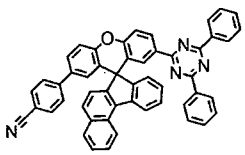
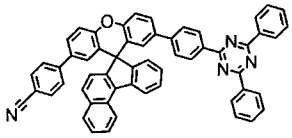
5-7

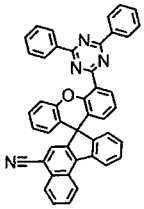
상기 화학식 5-1 내지 5-7에서,

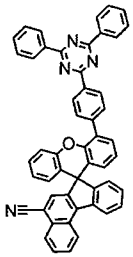
R_a, R_b, L_1, L_2, X_1 내지 X_3, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

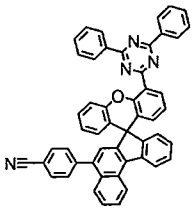
예를 들어, 상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터

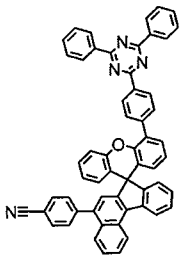
선택되는 어느 하나일 수 있다:

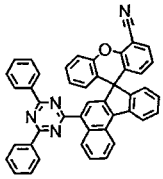





















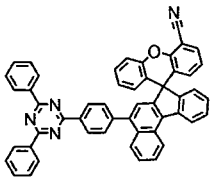


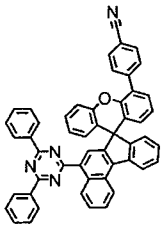


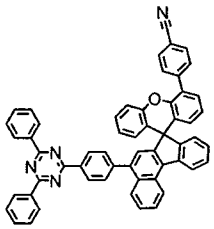


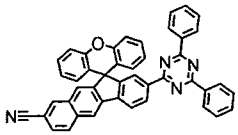


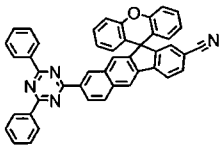


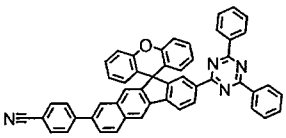


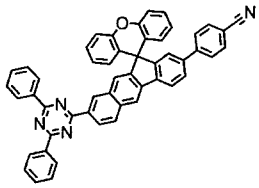


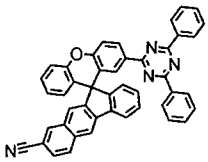


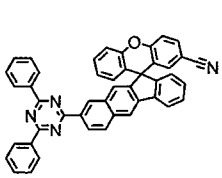


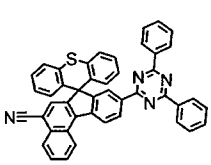
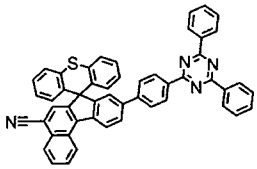
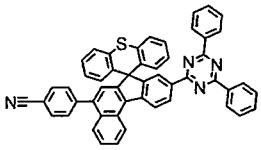
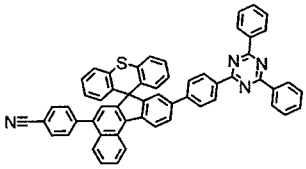
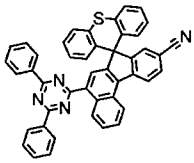
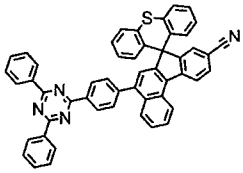
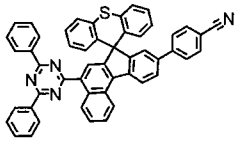
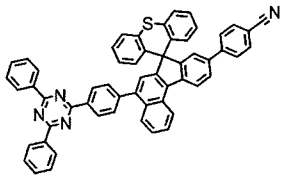
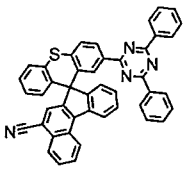
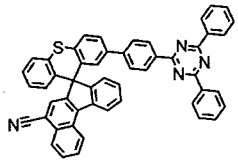
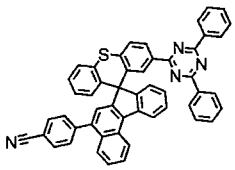
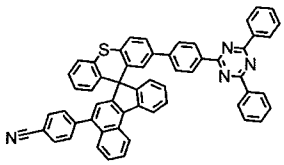
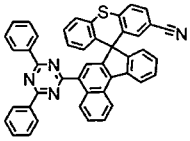
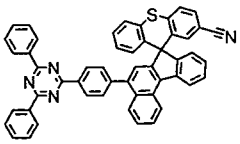
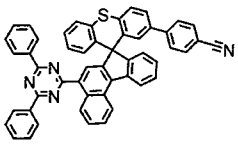
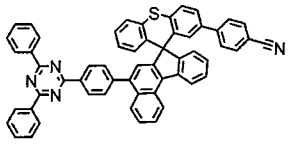
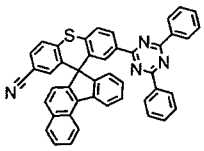
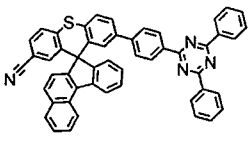
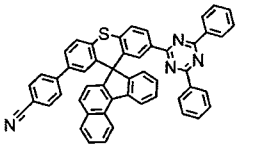
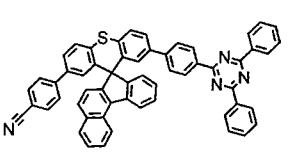


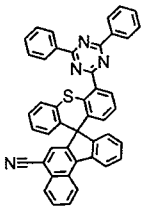


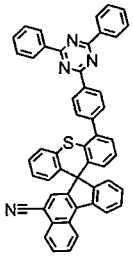


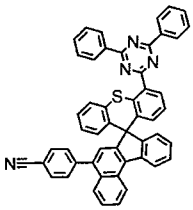


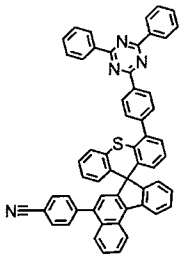


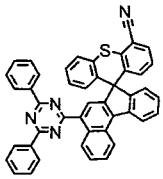





















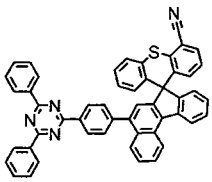


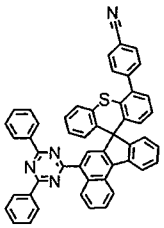


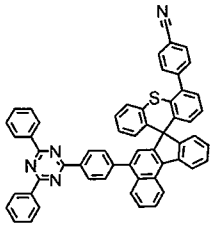


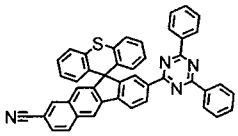


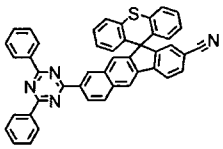


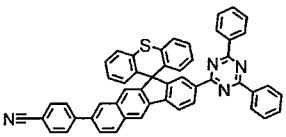


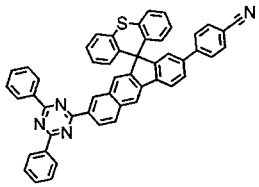


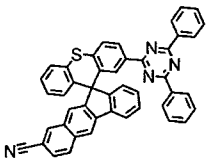


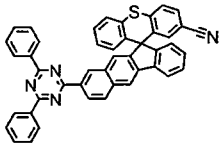


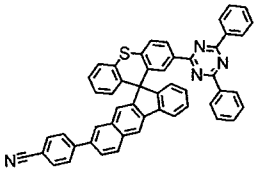


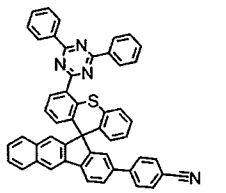


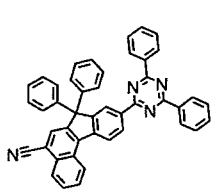
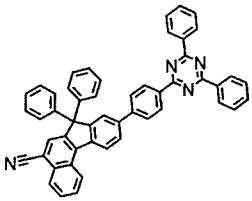
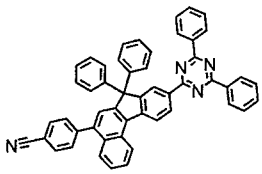
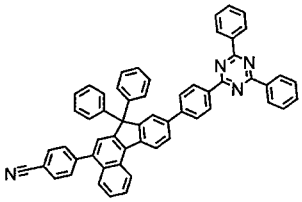
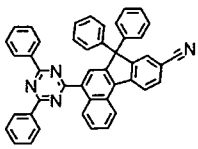
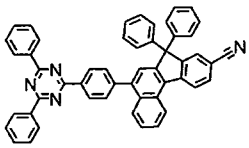
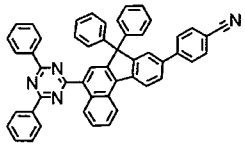
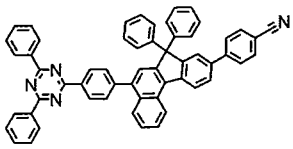
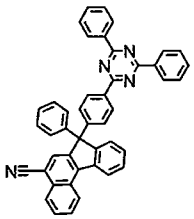
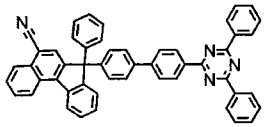
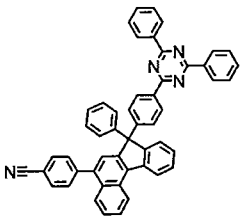
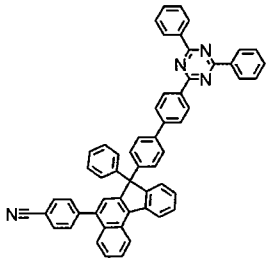
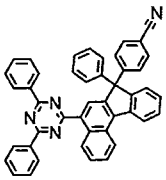
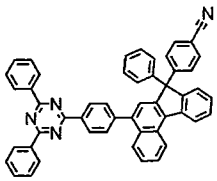
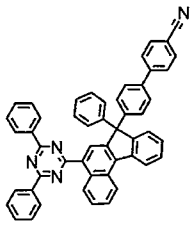
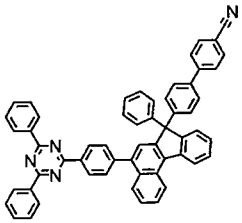
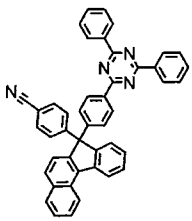
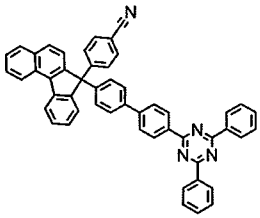
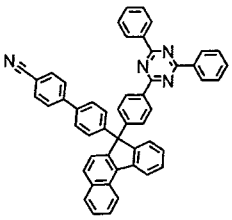
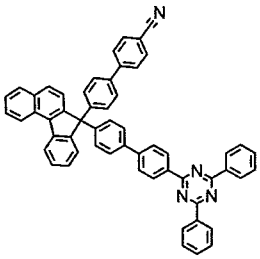


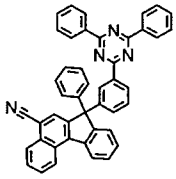


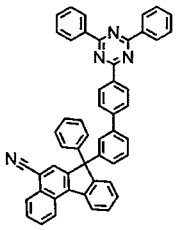


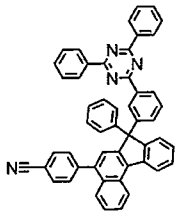


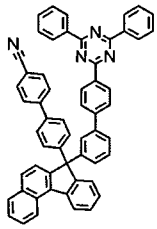


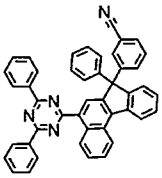





















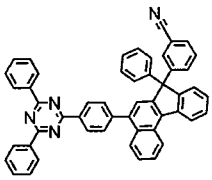


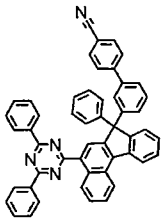


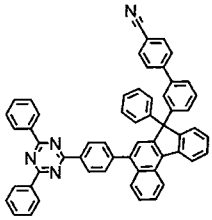


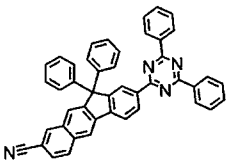


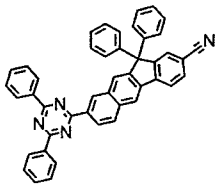


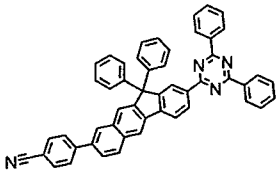


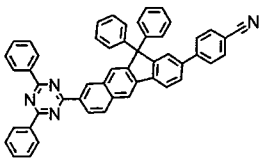


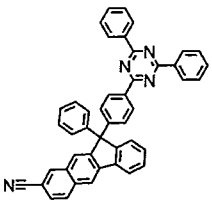


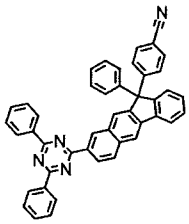


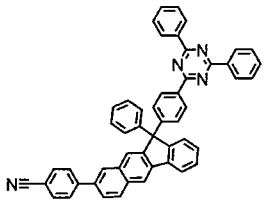


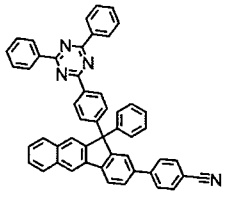


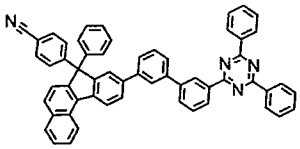


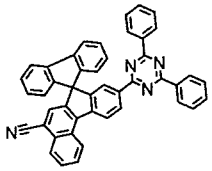


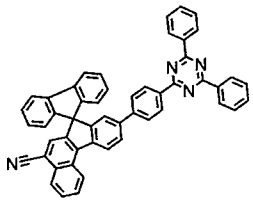


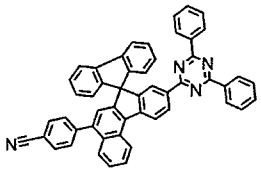


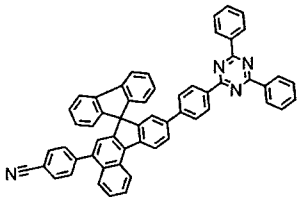


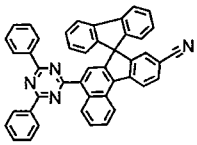


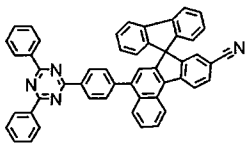


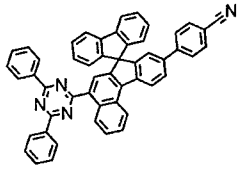


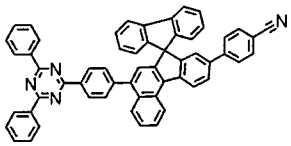


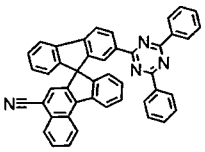


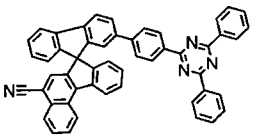


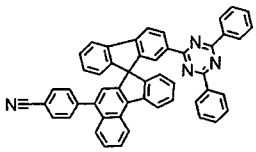


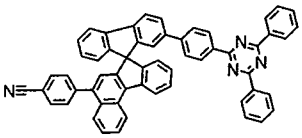


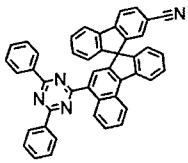


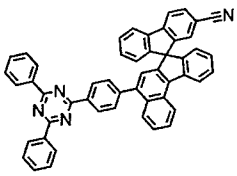


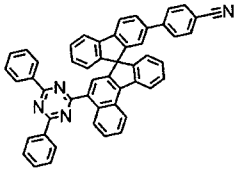


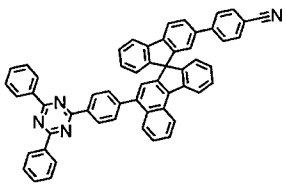


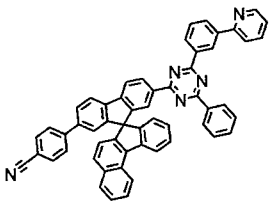


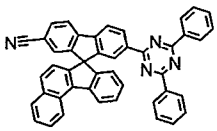
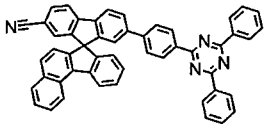
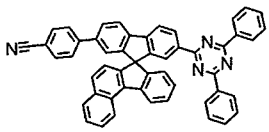
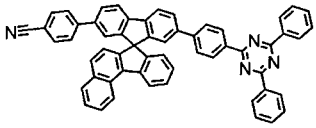
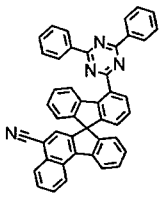
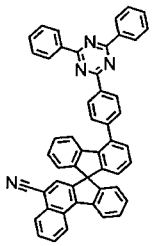
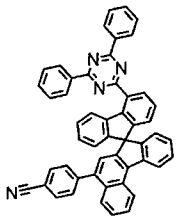
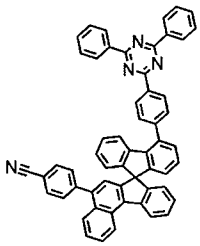
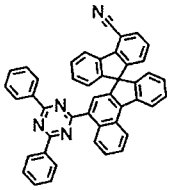
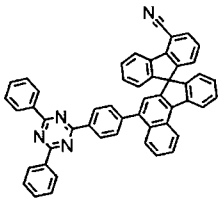
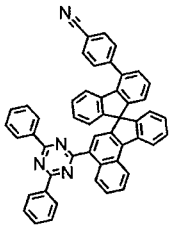
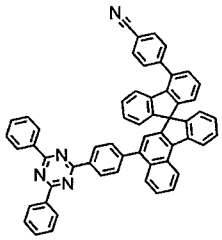


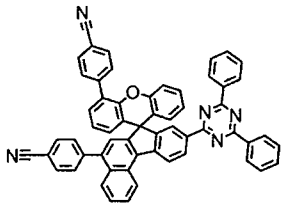
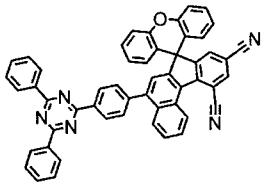
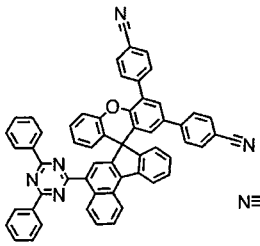
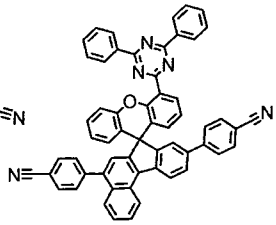
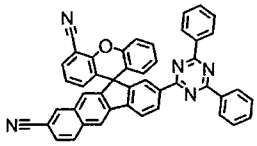
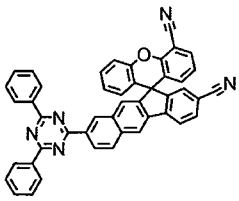
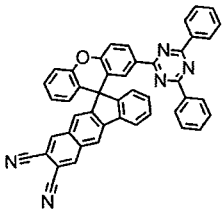
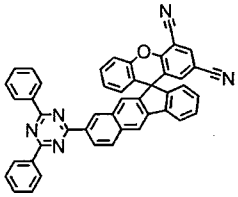
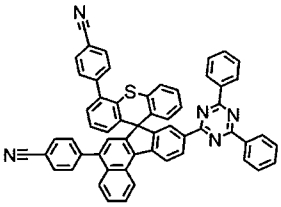
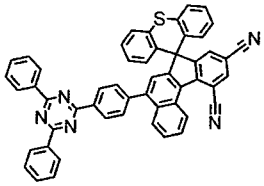
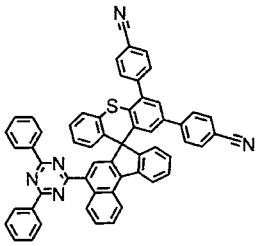
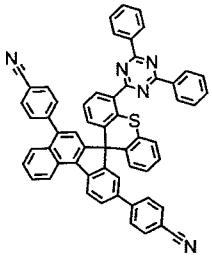
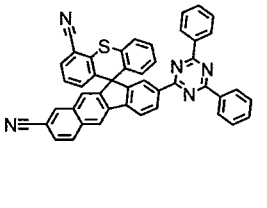
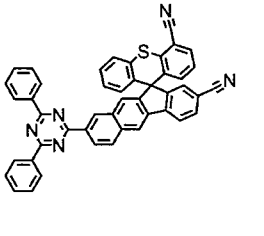
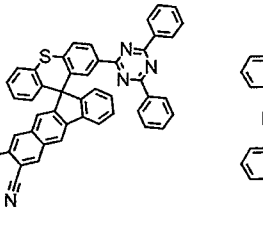
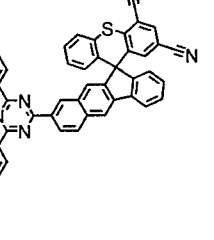


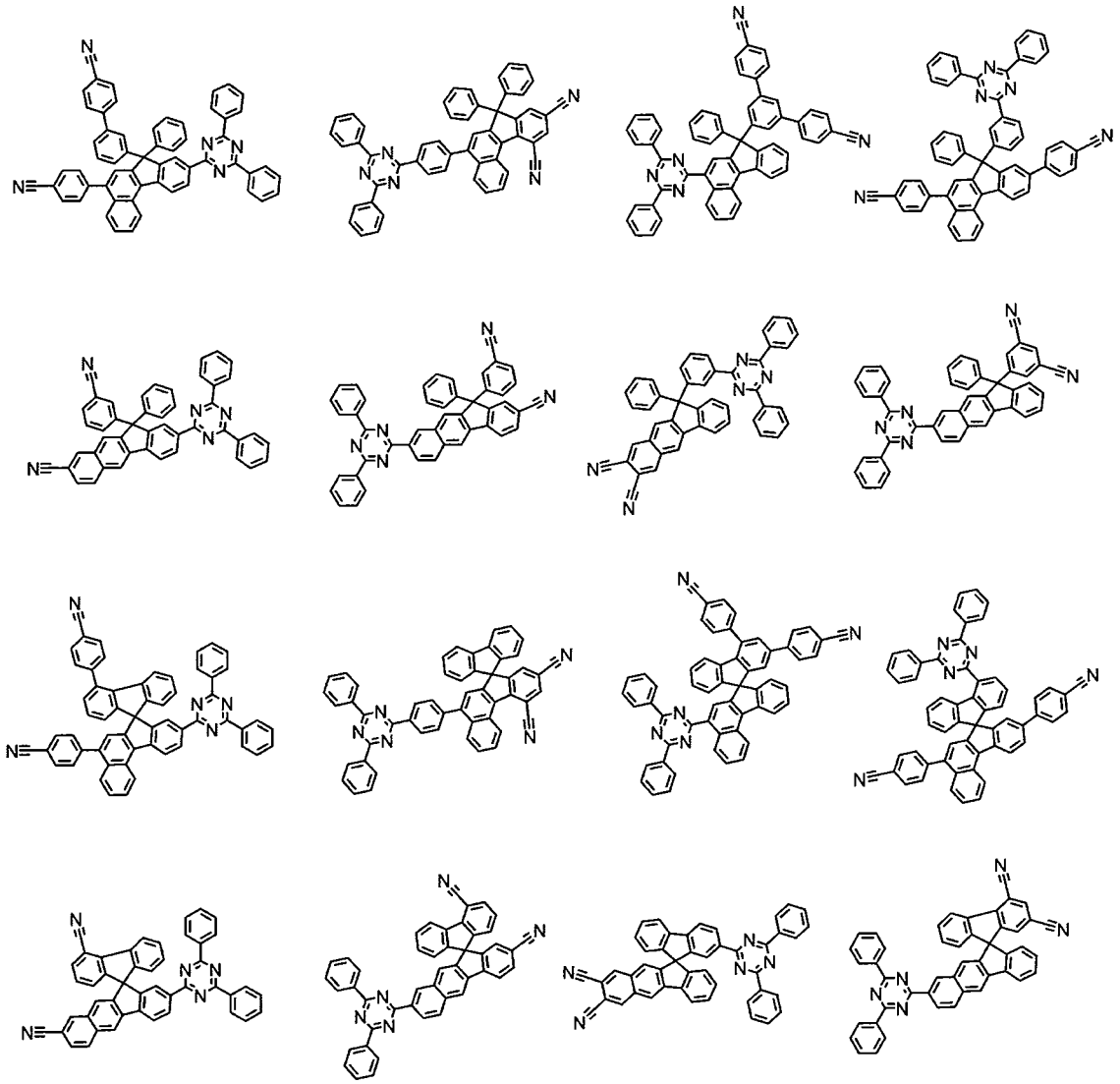






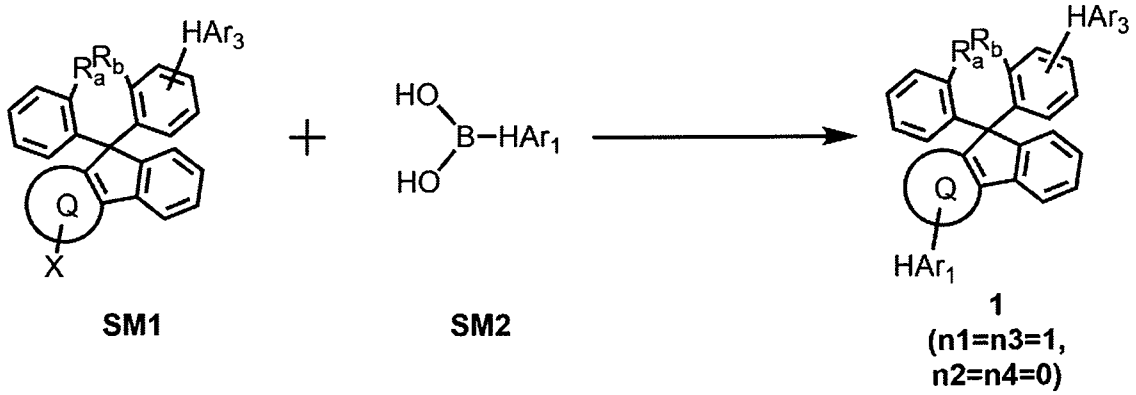















한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 n1 및 n3는 1이고, n2 및 n4는 0인 화합물은, 일례로 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조할 수 있다:

[반응식 1]



상기 반응식 1에서, X는 할로겐이고, 바람직하게는 브로모, 또는 클로로이고, 다른 치환기에 대한 정의는 앞서 설명한 바와 같다.

구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 스즈키 커플링 반응을 통해 출발물질 SM1 및 SM2가 결합하여 제조된다. 이러한 스즈키 커플링 반응은 팔라듐 촉매와 염기 존재 하에 수행하는 것이 바람직하며, 스즈키 커플링 반응을 위한 반응기는 당업계에 알려진 바에 따라 변경이 가능하다. 상기 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.

한편, 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 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 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.

바람직하게는, 상기 유기물층은 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

또한 바람직하게는, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

또한 바람직하게는, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자 주입 및 수송층을 포함할 수 있고, 상기 전자 주입 및 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

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 발광층 이외에, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이의 정공주입층 및 정공수송층, 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이의 전자수송층 및 전자주입층을 더 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 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 유기물층 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 및 2에 예시되어 있다.

도 1은 기판(1), 양극(2), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자 주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 전자

주입 및 수송층(5)에 포함될 수 있다.

도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(7), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자 주입 및 수송층(5), 전자주입층(8) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 전자 주입 및 수송층(5)에 포함될 수 있다.

본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 유기물층 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.

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 전자수송층을 포함하는 유기물층을 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.

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

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.

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

상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 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 SnO_2: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.

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 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 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.

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.

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(Alq_3); 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.

상기 발광층은 상술한 바와 같이 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등을 더 포함할 수 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.

도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스트릴아민 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, 스티릴아민 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 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

상기 전자 주입 및 수송층은 전극으로부터 전자를 주입하고, 수취된 전자를 발광층까지 수송하는 전자수송층 및 전자주입층의 역할을 동시에 수행하는 층으로, 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성된다. 이러한 전자 주입 및 수송물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질인, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 적합하다. 또한, 상기 전자 주입 및 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 이외에 금속 착체 화합물을 더 포함할 수 있다.

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 한정되는 것은 아니다.

이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 상기 금속 착체 화합물은 1: 9 내지 9:1의 중량비로 사용될 수 있다.

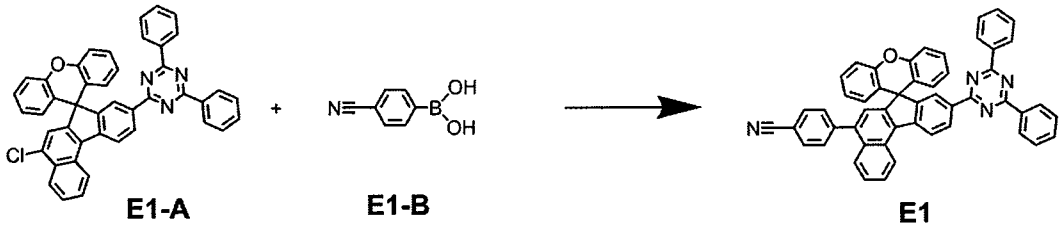
또한, 상기 전자 주입 및 수송층은 전자주입층 및 전자수송층과 같은 별개의 층으로도 형성될 수 있다. 이와 같은 경우, 전자 수송층은 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성되고, 상기 전자 수송층에 포함되는 전자 수송 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 사용될 수 있다. 또한, 전자 주입층은 상기 전자 수송층 상에 형성되고, 상기 전자 주입층에 포함되는 전자 주입 물질로는 LiF, NaCl, CsF, Li_2O, BaO, 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 사용될 수 있다.

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

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

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.

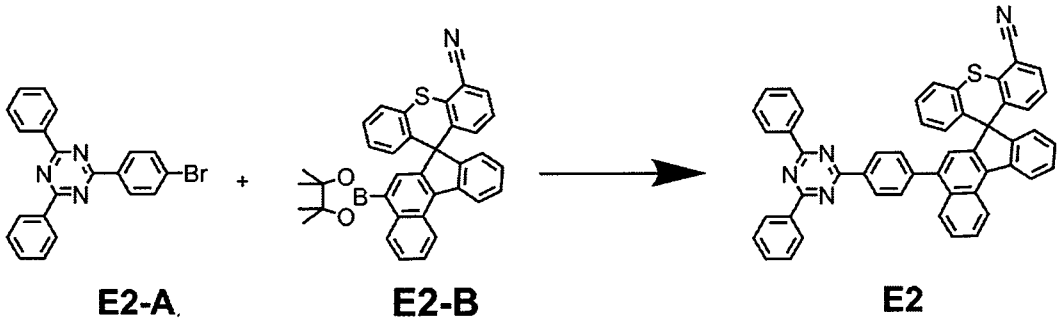
제조예 1: 화합물 E1의 제조



상기 화합물 E1-A(20 g, 15.4 mmol)과 상기 화합물 E1-B(2.3 g, 15.4 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후, 탄산칼륨(6.4 g, 46.2 mmol)을 물 50 mL에 용해시켜 첨가하였다. 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐 (0.53g, 0.463 mmol)을 넣은 후, 8 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후, 탄산칼륨 용액을 제거하여 흰색 고체를 여과하였다. 여과된 흰색 고체를 테트라하이드로퓨란 및 에틸아세테이트로 각각 2 번씩 세척하여 화합물 E1 (17.0 g, 수율 77 %)을 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 715

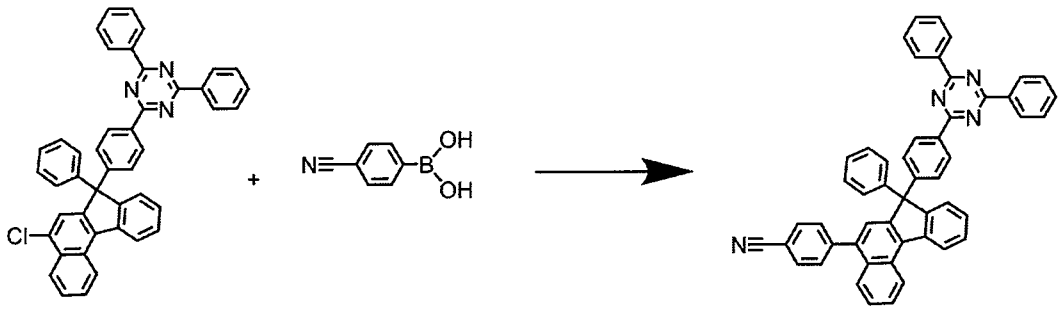
제조예 2: 화합물 E2의 제조



상기 제조예 1에서 출발물질 E1-A 대신 E2-A를 사용하고, 출발물질 E1-B 대신 E2-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1과 동일한 방법을 사용하여 화합물 E2를 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 731

제조예 3: 화합물 E3의 제조

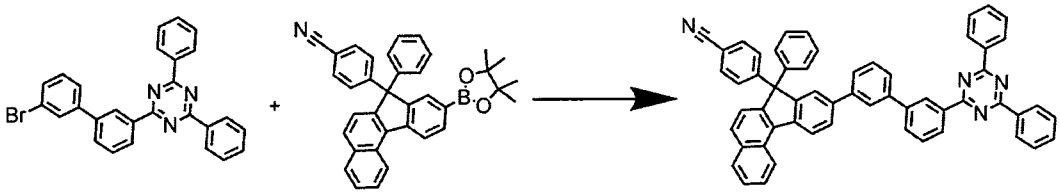


E3-A E3-B E3

상기 제조예 1에서 출발물질 E1-A 대신 E3-A를 사용하고, 출발물질 E1-B 대신 E3-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1과 동일한 방법을 사용하여 화합물 E3을 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 701

제조예 4: 화합물 E4의 제조

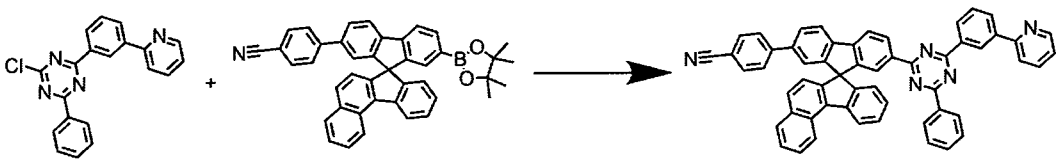


E4-A E4-B E4

상기 제조예 1에서 출발물질 E1-A 대신 E4-A를 사용하고, 출발물질 E1-B 대신 E4-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1과 동일한 방법을 사용하여 화합물 E4를 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 777

제조예 5: 화합물 E5의 제조

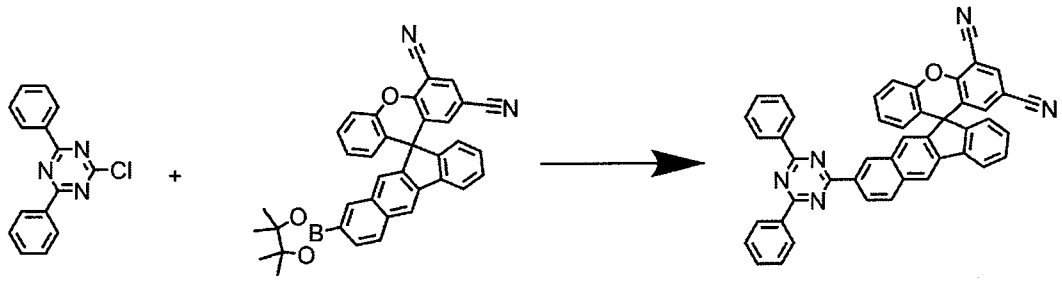


E5-A E5-B E5

상기 제조예 1에서 출발물질 E1-A 대신 E5-A를 사용하고, 출발물질 E1-B 대신 E5-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1과 동일한 방법을 사용하여 화합물 E5를 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 776

제조예 6: 화합물 E6의 제조



상기 제조예 1에서 출발물질 E1-A 대신 E6-A를 사용하고, 출발물질 E1-B 대신 E6-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 제조예 1과 동일한 방법을 사용하여 화합물 E6을 제조하였다.

MS $[M+H]^+$ = 664

실시예 1

ITO (indium tin oxide)가 1000 Å의 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 30 분간 세척한 후 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

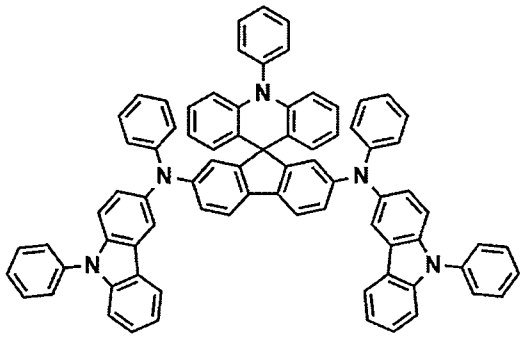
이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-A 화합물을 600 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상에

하기 HAT 화합물 50 Å 및 하기 HT-A 화합물 60 Å를 순차적으로 진공 증착하여 제1 정공수송층 및 제2 정공수송층을 형성하였다.

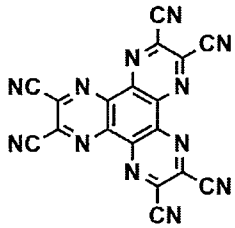
이어서, 상기 정공수송층 상에 막 두께 200 Å로 하기 BH 화합물 및 BD 화합물을 25:1의 중량비로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

상기 발광층 상에 상기 제조예 1에서 제조한 화합물 E1과 하기 LiQ 화합물을 1:1의 중량비로 진공 증착하여 350Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 상에 순차적으로 10Å의 두께로 리튬 플루오라이드(LiF)와 1000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

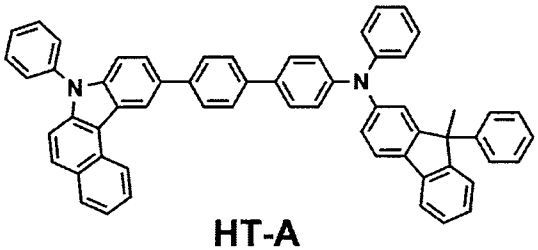
상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 0.4 내지 0.9 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬 플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 1×10^{-7} 내지 5×10^{-5} torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.



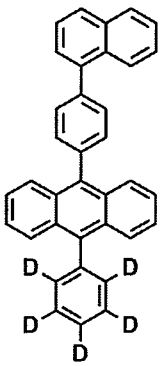
HI-A



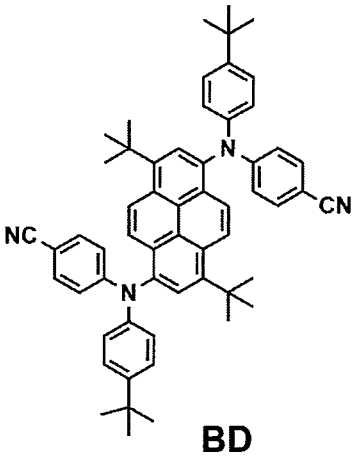
HAT



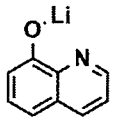
HT-A



BH



BD

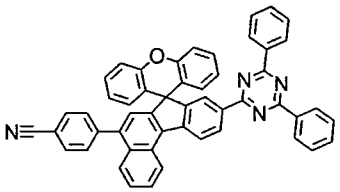


LiQ

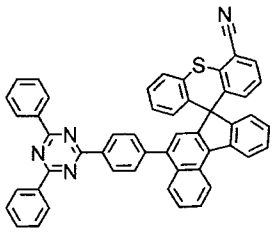
실시예 2 내지 6

화합물 E1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물 E2 내지 E6을 각각 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

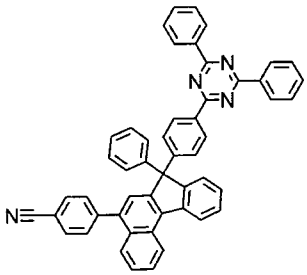
이때, 실시예 1 내지 6에 사용된 화합물의 구조는 하기와 같다:



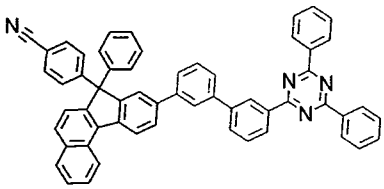
E1



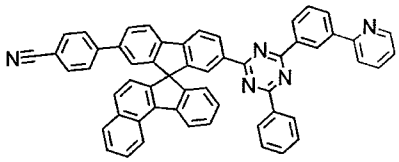
E2



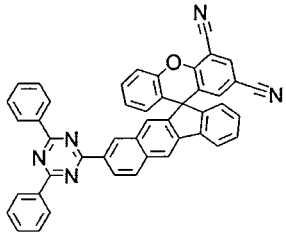
E3



E4



E5

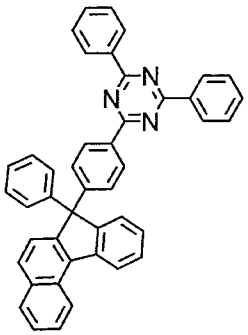


E6

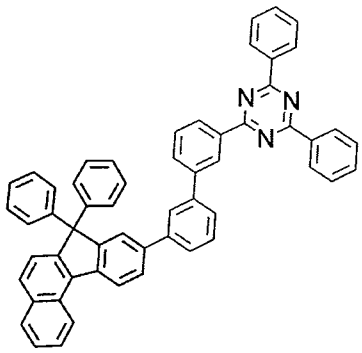
비교예 1 내지 5

화합물 E1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물 ET-A 내지 ET-E을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

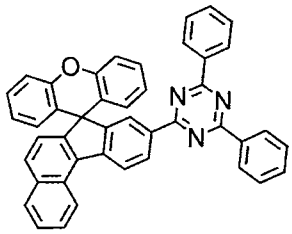
이때, 비교예 1 내지 5에 사용된 화합물 ET-A 내지 ET-E는 하기와 같다:



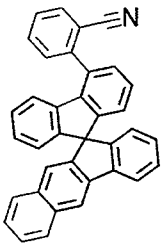
ET-A



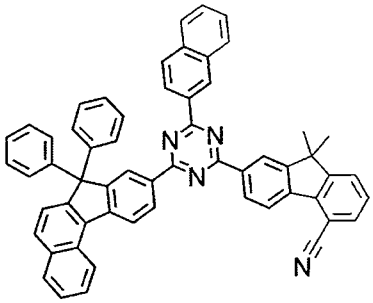
ET-B



ET-C



ET-D



ET-E

실험예

상기 실시예 1 내지 6 및 비교예 1 내지 5에서 제조한 유기 발광 소자에 대하여 10 mA/cm^{2}의 전류 밀도에서 구동 전압과 발광 효율을 측정하였고, 20 mA/cm^{2}의 전류 밀도에서 초기 휘도 대비 90%가 되는 시간(T90)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

【표 1】

	화합물 (전자 주입 및 수송층	전압 (V @10 mA/cm^2)	효율 (cd/A @10 mA/cm^2)	색좌표 (x, y)	수명(T90) (hr @20 mA/cm^2)
실시예 1	E1	4.54	5.14	(0.142, 0.096)	275
실시예 2	E2	4.40	5.45	(0.142, 0.096)	204
실시예 3	E3	4.38	5.51	(0.142, 0.096)	193

실시예 4	E4	4.45	5.55	(0.142, 0.096)	176
실시예 5	E5	4.59	5.06	(0.142, 0.096)	281
실시예 6	E6	4.68	4.92	(0.142, 0.097)	322
비교예 1	ET-A	4.34	5.45	(0.142, 0.096)	33
비교예 2	ET-B	4.40	5.50	(0.142, 0.096)	39
비교예 3	ET-C	4.49	5.06	(0.142, 0.096)	69
비교예 4	ET-D	5.04	3.75	(0.142, 0.096)	154
비교예 5	ET-E	4.60	4.46	(0.142, 0.096)	169

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물을 전자 주입 및 전자 수송을 동시에 할 수 있는 층의 물질로 사용한 실시예의 유기 발광 소자는, 상기 화학식 1에 포함되지 않는 화합물을 채용한 비교예의 유기 발광 소자에 비하여, 우수한 소자 특성을 나타냄을 알 수 있다.

구체적으로, 실시예의 유기 발광 소자는 시아노기를 갖지 않는 화합물을 채용한 비교예 1 내지 3의 유기 발광 소자에 비하여 현저히 우수한 수명 특성을 나타냄을 확인할 수 있고, 트리아지닐기를 갖지 않는 화합물을 채용한 비교예 4의 유기 발광 소자에 비하여 효율이 현저히 높음을 확인할 수 있다.

또한, 실시예의 유기 발광 소자는 트리아지닐기 및 시아노기를 갖지만 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과는 그 치환 위치가 상이한 화합물을 채용한 비교예 5의 유기 발광 소자에 비해서는 효율 및 수명 특성 모두가 우수함을 확인할 수 있다. 이는 일반적으로 유기 발광 소자의 발광 효율 및 수명 특성은 서로 트레이드-오프(Trade-off) 관계를 갖는 점을 고려할 때 본 발명의 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 비교예 소자 대비 현저히 향상된 소자 특성을 나타냄을 의미한다.

【부호의 설명】

1: 기판 2: 양극

3: 정공수송층 4: 발광층

5: 전자 주입 및 수송층 6: 음극

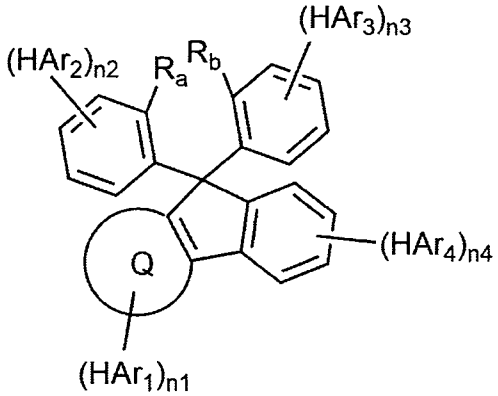
7: 정공주입층

【청구의 범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

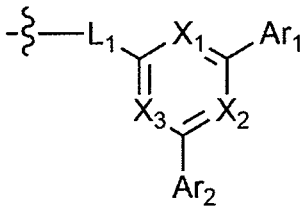
Q는 나프탈렌이고,

R_a 및 R_b는 각각 수소이거나, 또는 함께 결합하여 Y를 형성하고,

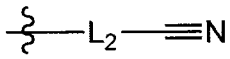
Y는 단일 결합, O, 또는 S이고,

HAr_1 내지 HAr_4 중 하나는 하기 화학식 2로 표시되고, 나머지 중 하나는 하기 화학식 3으로 표시되고, 그 외는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되고,

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

L_1 및 L_2는 각각 독립적으로, 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴렌이고,

X_1 내지 X_3는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되, X_1 내지 X_3 중 적어도

둘은 N이고,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 헤테로원자를 1개 이상 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 C_{1-60} 알킬; 치환 또는 비치환된 C_{3-60} 사이클로알킬; 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 헤테로원자를 1개 이상 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

n1 내지 n4는 각각 0 내지 2의 정수이고,

n1+n2+n3+n4는 2 내지 8의 정수이다.

【청구항 2】

제1항에 있어서,

L_1 및 L_2는 각각 독립적으로, 단일 결합, 페닐렌, 또는 비페닐릴렌인,

화합물.

【청구항 3】

제1항에 있어서,

X_1 내지 X_3는 모두 N인,

화합물.

【청구항 4】

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로, 페닐 또는 피리디닐페닐인,

화합물.

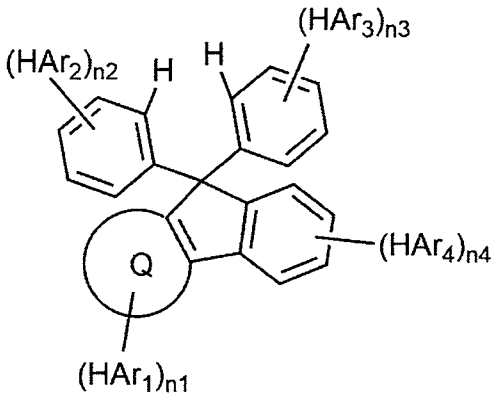
【청구항 5】

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1-1로 표시되는,

화합물:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

Q는 나프탈렌이고,

HAr_1 및 HAr_2는 각각 독립적으로, 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되되, HAr_1 및 HAr_2 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되고,

HAr_3 및 HAr_4는 각각 독립적으로, 상기 화학식 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이다.

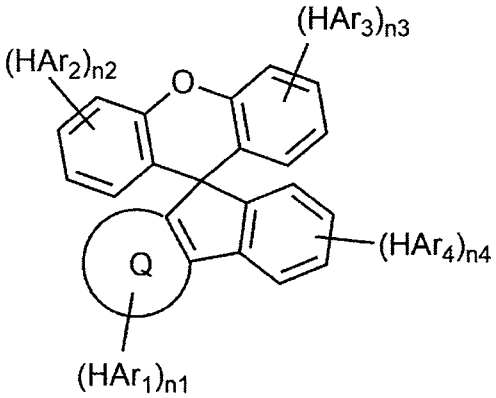
【청구항 6】

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1-2A로 표시되는,

화합물:

[화학식 1-2A]



상기 화학식 1-2A에서,

Q는 나프탈렌이고,

HAr_1 내지 HAr_3는 각각 독립적으로, 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되되, HAr_1 내지 HAr_3 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되고,

HAr_4는 상기 화학식 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이다.

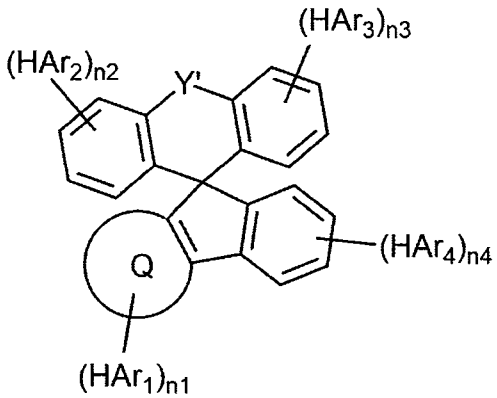
【청구항 7】

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1-2B로 표시되는,

화합물:

[화학식 1-2B]



상기 화학식 1-2B에서,

Q는 나프탈렌이고,

Y'는 단일 결합, 또는 S이고,

n1 내지 n4는 각각 0 또는 1이고,

n1+n2+n3+n4는 2이고,

HAr_1 내지 HAr_4에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 8】

제1항에 있어서,

n1 및 n3는 1이고, n2 및 n4는 0이거나;

n1 및 n4는 1이고, n2 및 n3는 0이거나; 또는

n2 및 n3는 1이고, n1 및 n4는 0인,

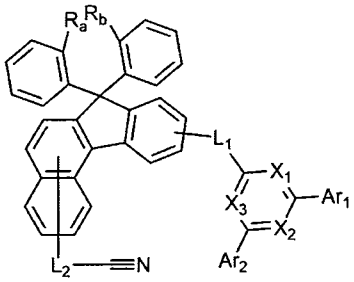
화합물.

【청구항 9】

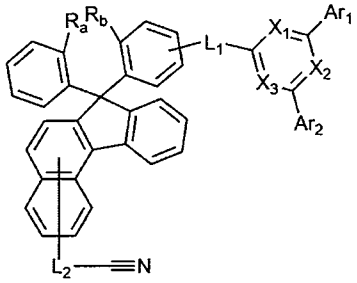
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 4-1 내지 4-7 중 어느 하나로 표시되는,

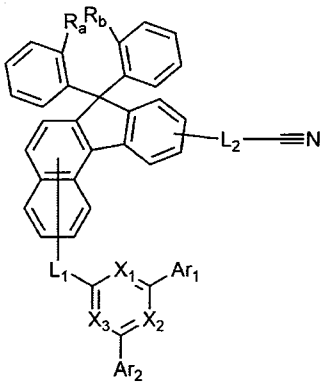
화합물:



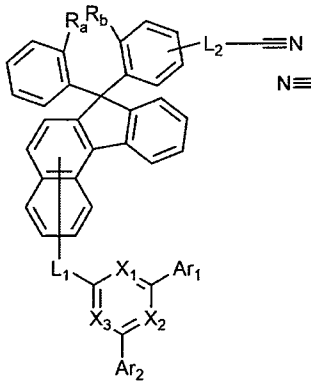
4-1



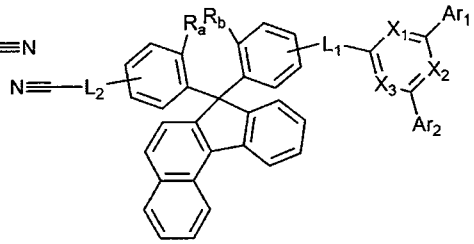
4-2



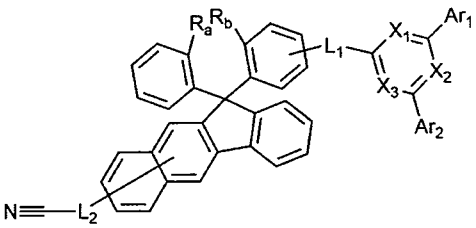
4-3



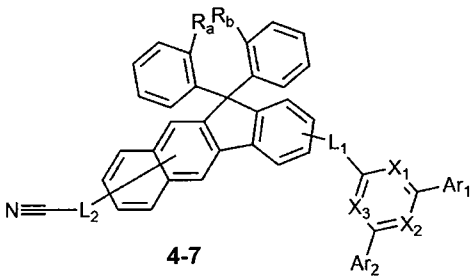
4-4



4-5



4-6



4-7

상기 화학식 4-1 내지 4-7에서,

R_a, R_b, L_1, L_2, X_1 내지 X_3, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 10】

제1항에 있어서,

HAr_1 내지 HAr_4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되고, 나머지 중 두

개가 상기 화학식 3으로 표시되고,

n1 내지 n4는 각각 0, 1, 또는 2이고,

n1+n2+n3+n4는 3인,

화합물.

【청구항 11】

제1항에 있어서,

n1, n2 및 n4는 1이고, n3는 0이거나;

n1, n3 및 n4는 1이고, n2는 0이거나;

n1은 2이고, n3는 1이고, n2 및 n4는 0이거나;

n3는 2이고, n1은 1이고, n2 및 n4는 0이거나; 또는

n4는 2이고, n1은 1이고, n2 및 n3는 0인,

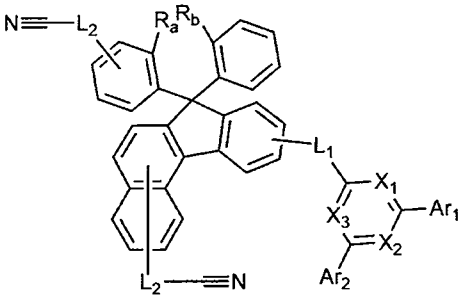
화합물.

【청구항 12】

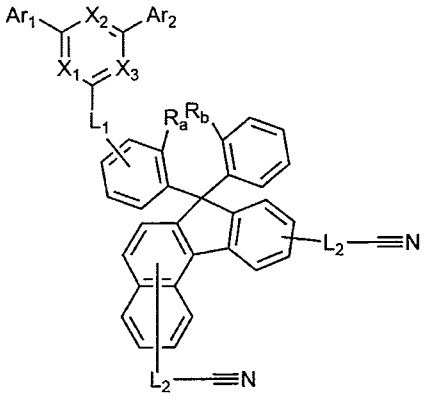
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 5-1 내지 5-7 중 어느 하나로 표시되는,

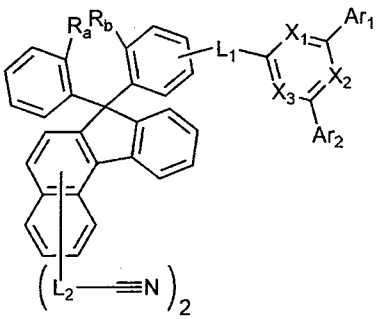
화합물:



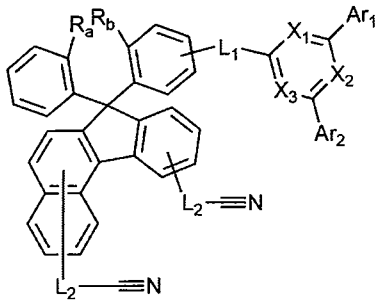
5-1



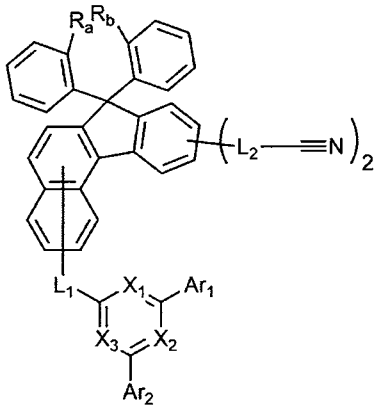
5-2



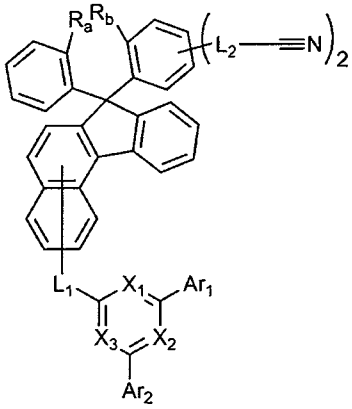
5-3



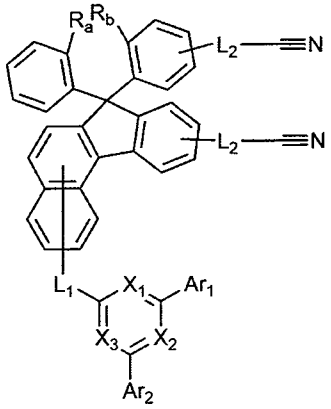
5-4



5-5



5-6



5-7

상기 화학식 5-1 내지 5-7에서,

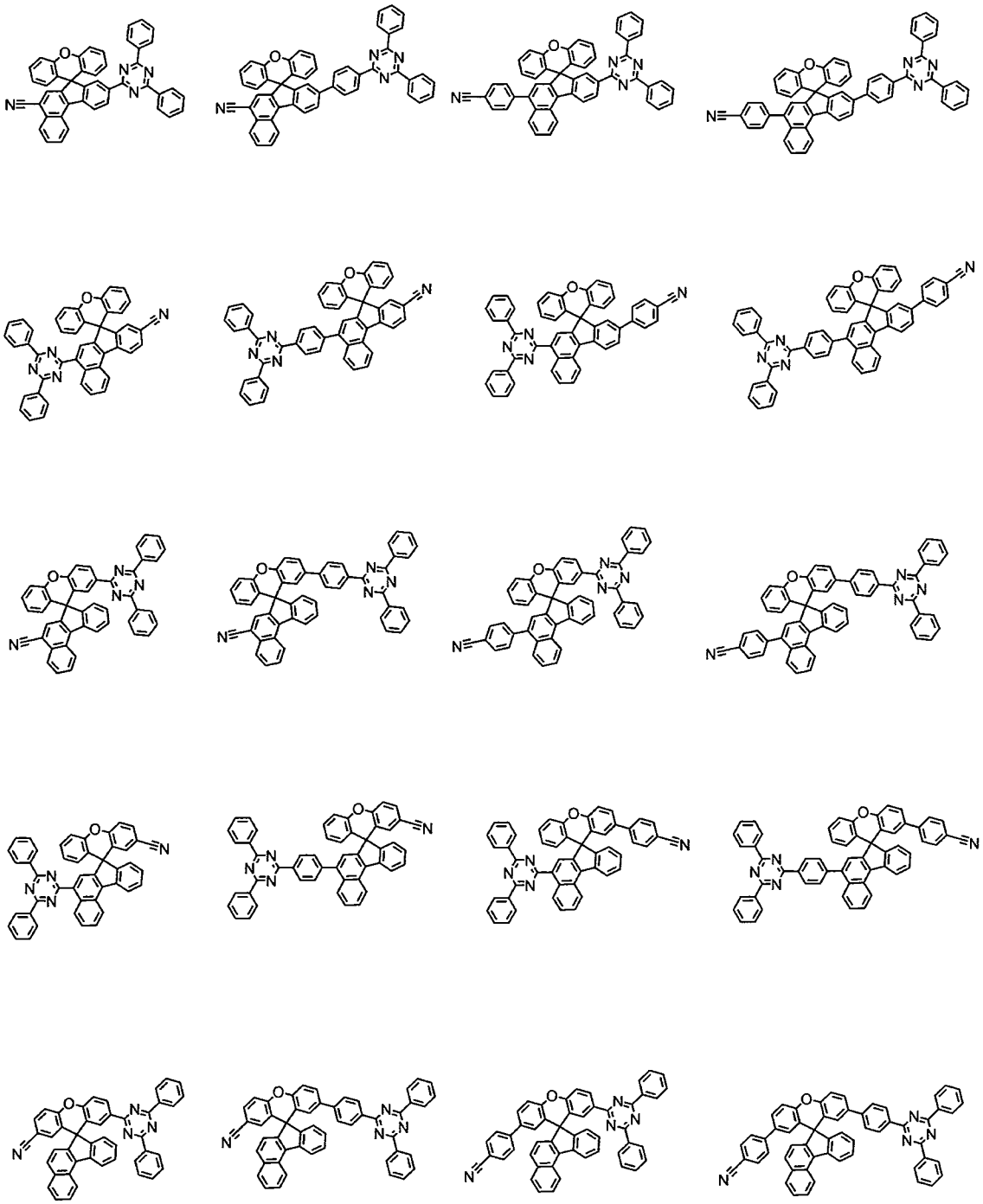
R_a, R_b, L_1, L_2, X_1 내지 X_3, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

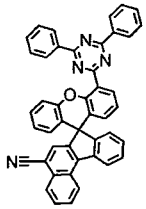
【청구항 13】

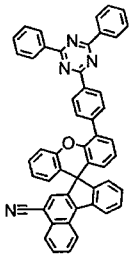
제1항에 있어서,

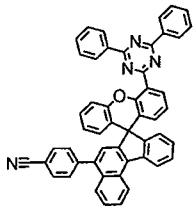
상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

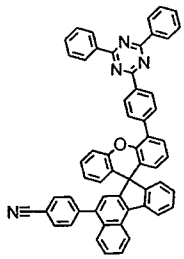
화합물:

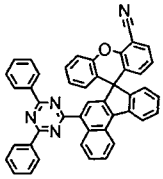


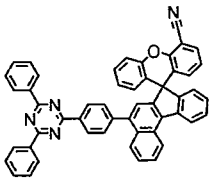


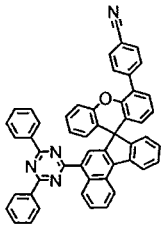


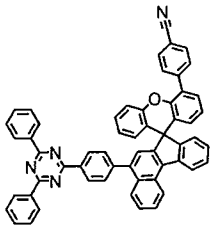


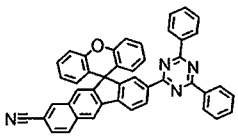


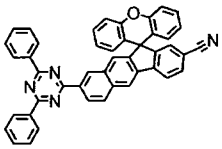


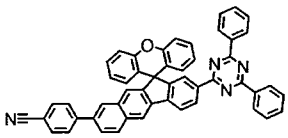


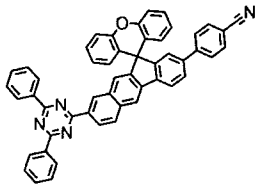


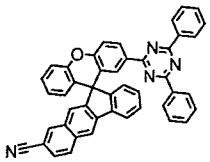


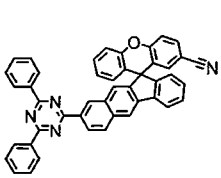


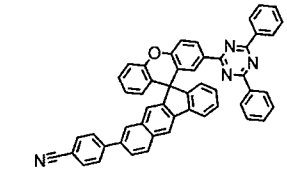


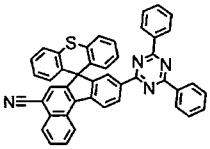
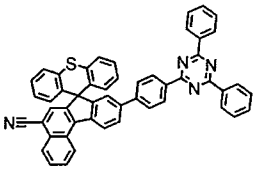
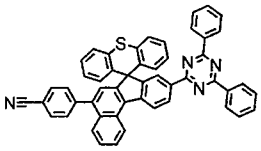
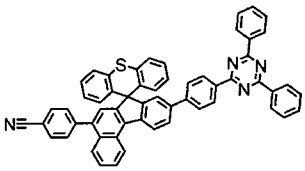
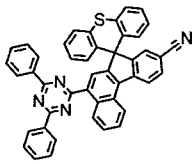
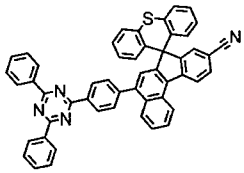
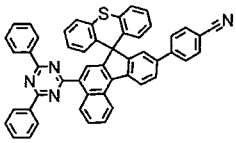
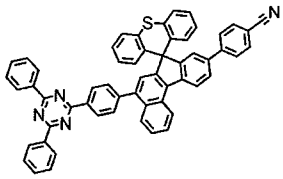
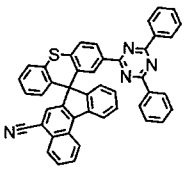
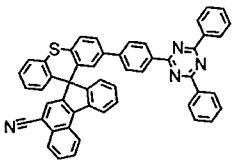
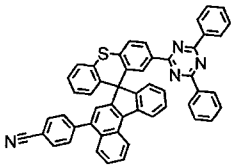
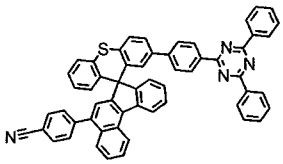
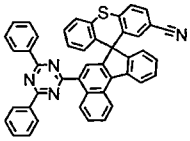
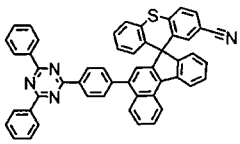
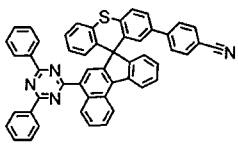
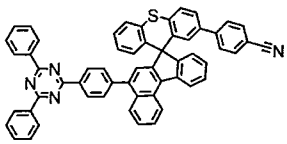
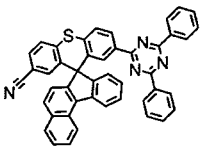
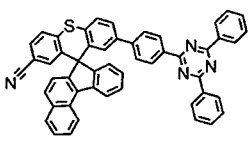
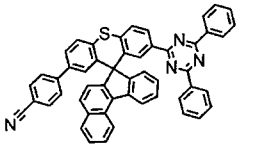
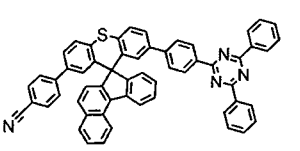


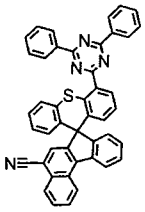


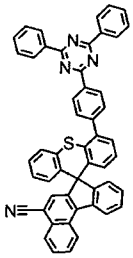


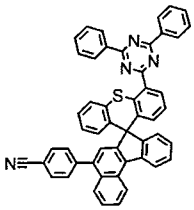


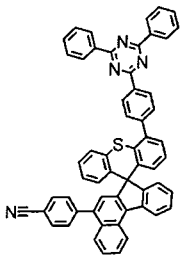


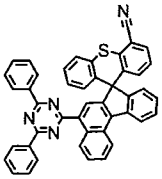





















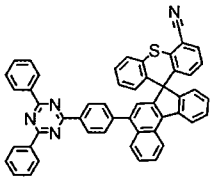


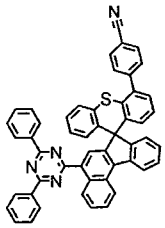


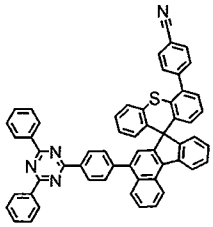


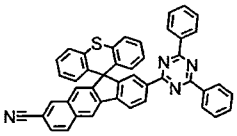


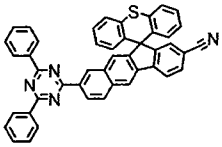


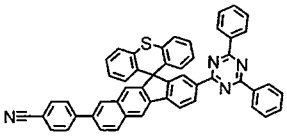


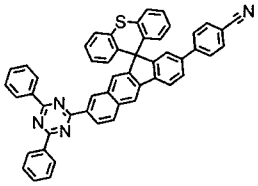


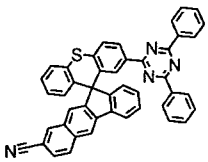


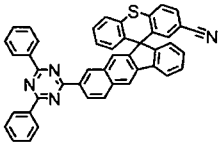


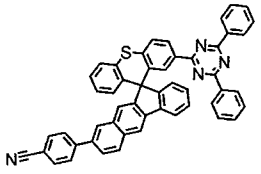


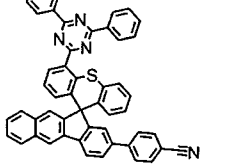


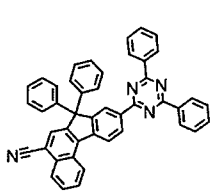
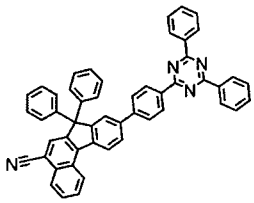
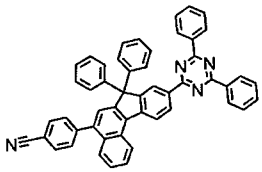
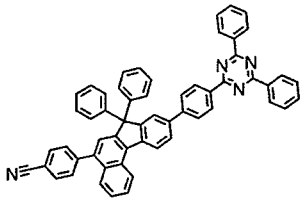
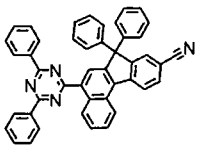
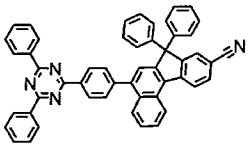
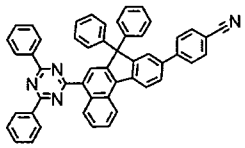
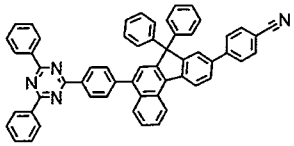
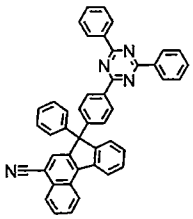
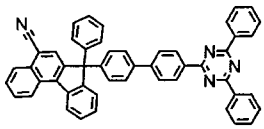
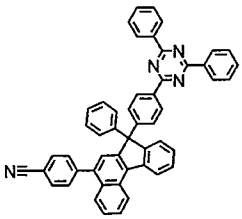
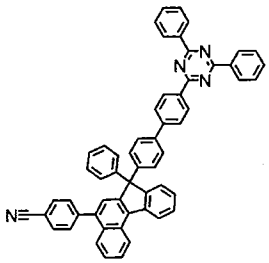
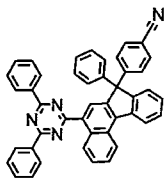
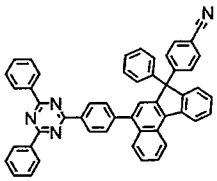
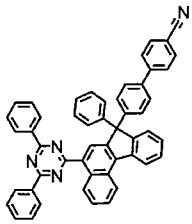
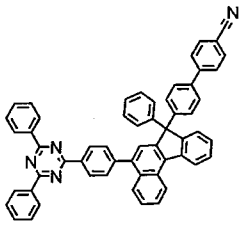
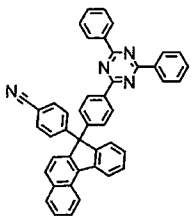
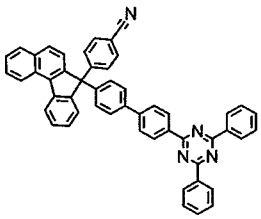
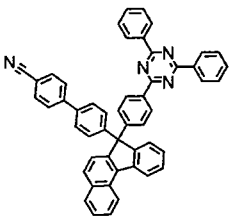
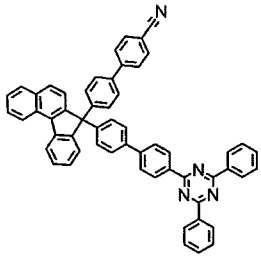


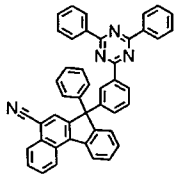


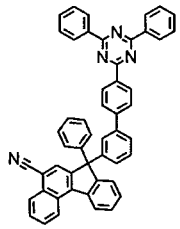


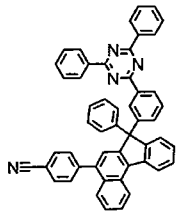


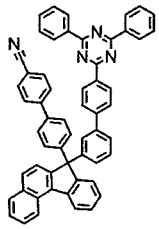


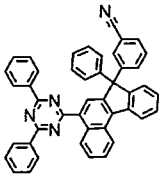





















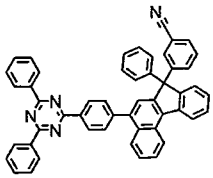


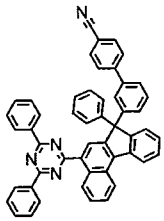


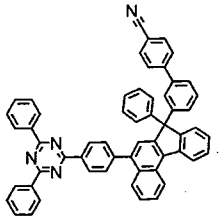


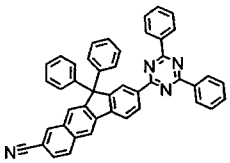


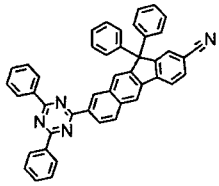


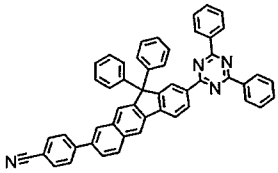


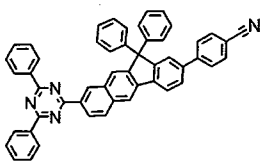


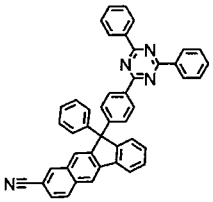


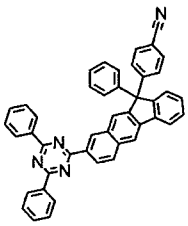


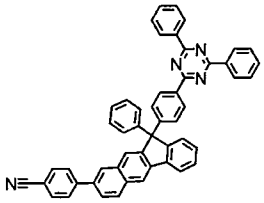


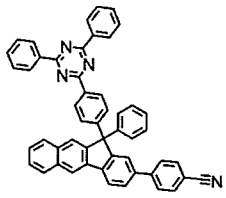


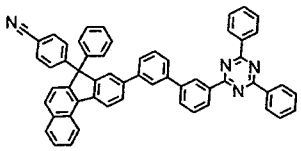


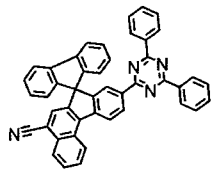


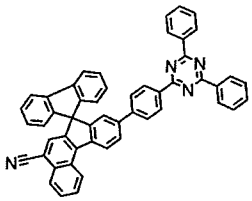


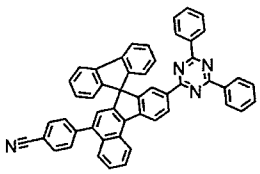


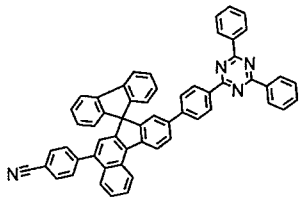


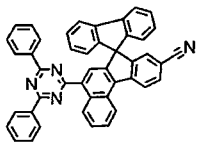


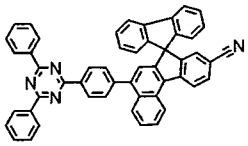


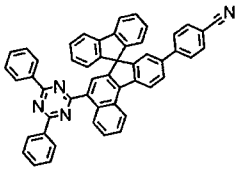


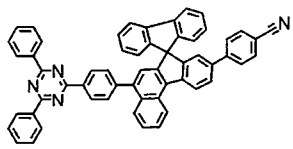


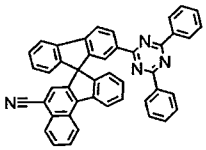


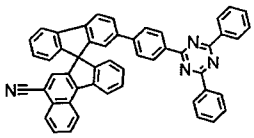


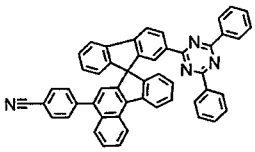


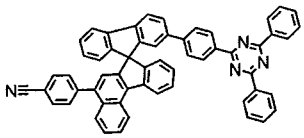


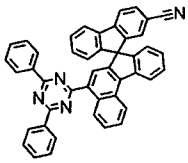


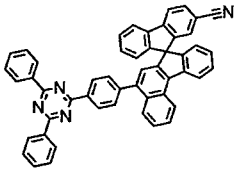


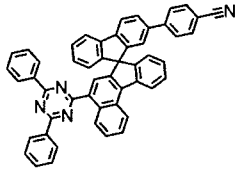


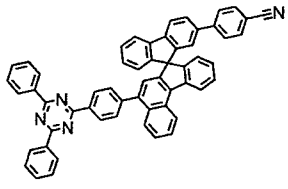


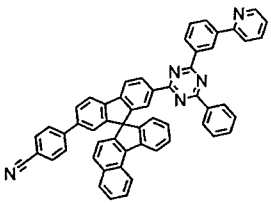


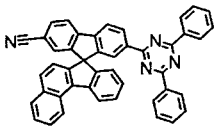
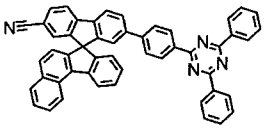
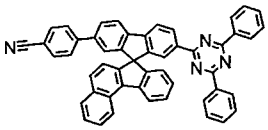
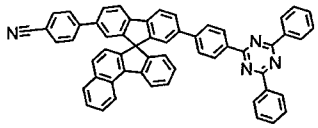
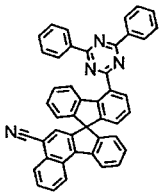
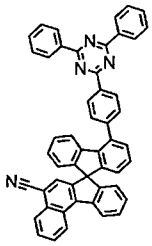
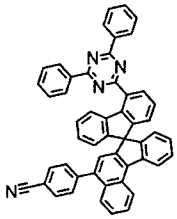
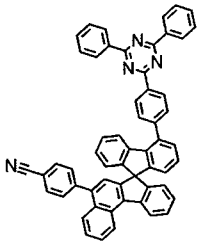
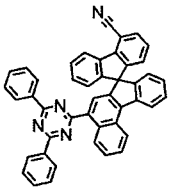
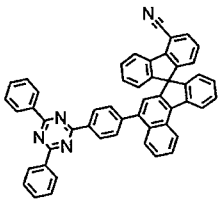
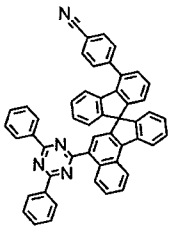
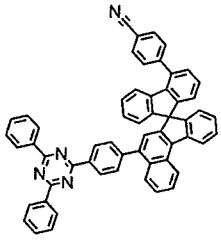


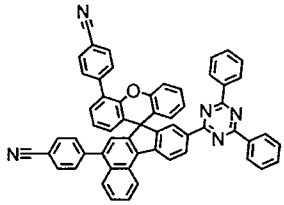


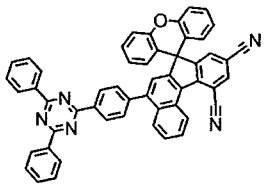


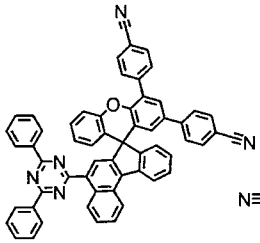


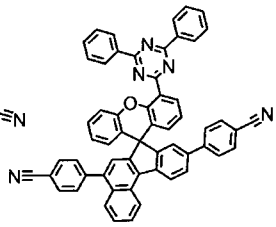


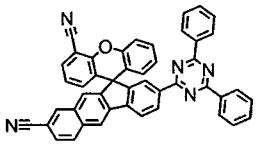













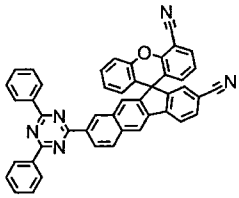


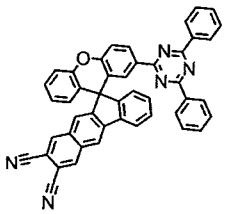


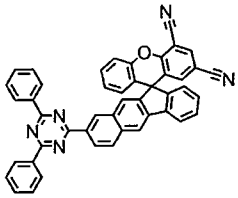


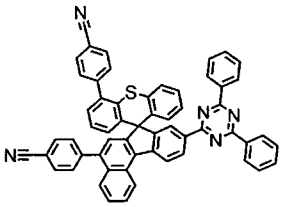


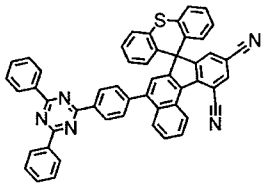


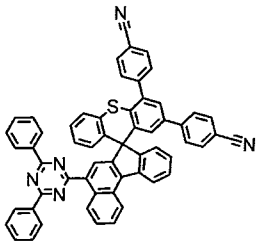


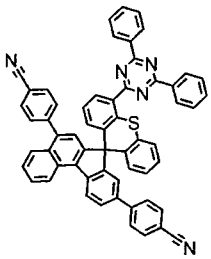


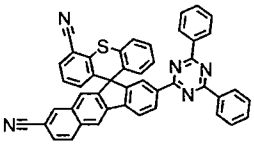


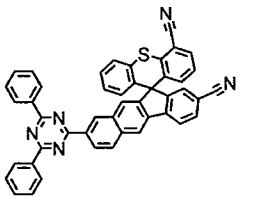


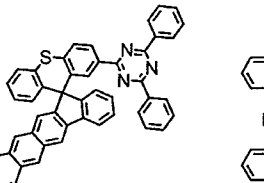


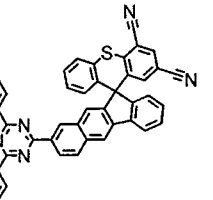


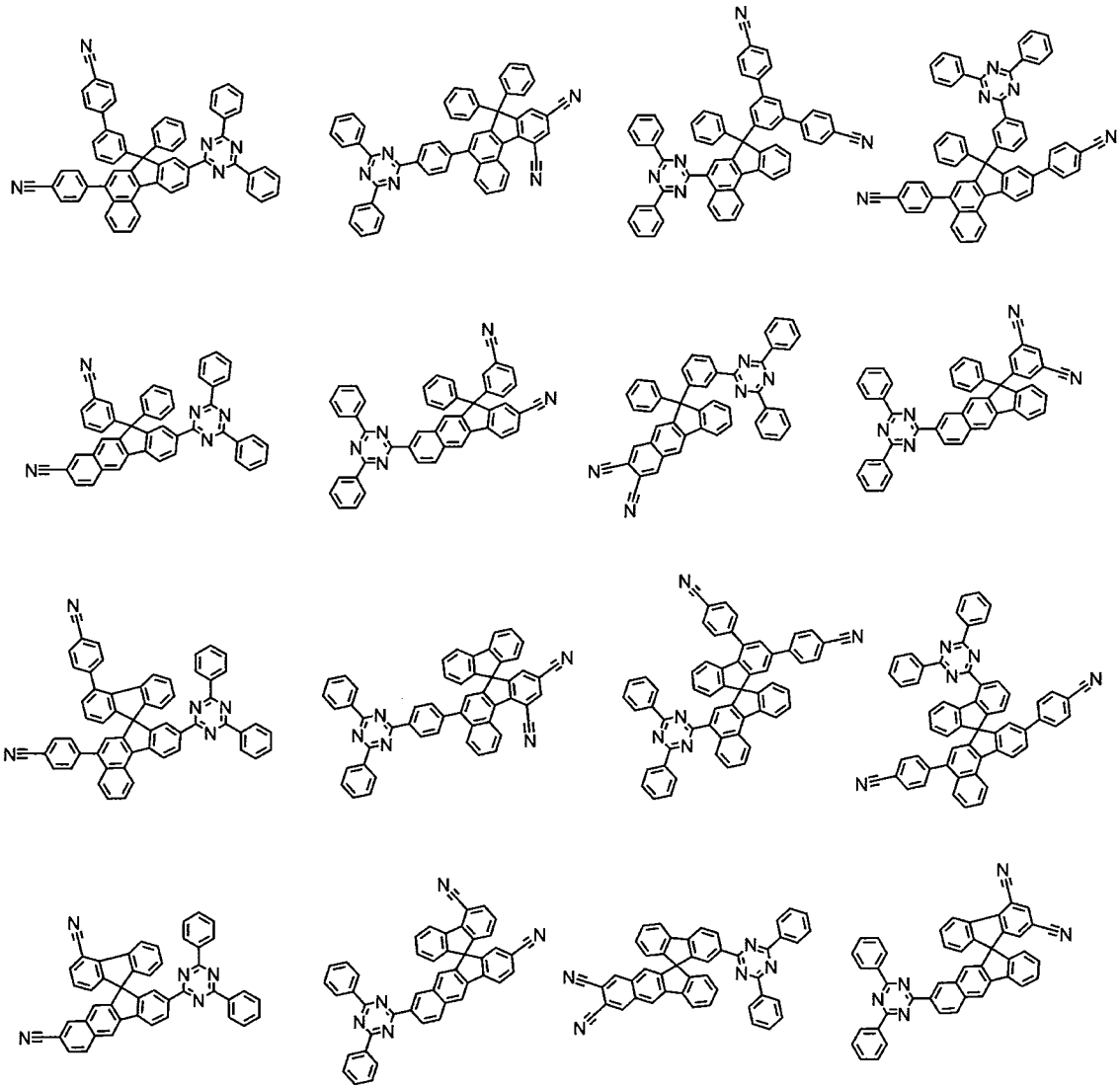










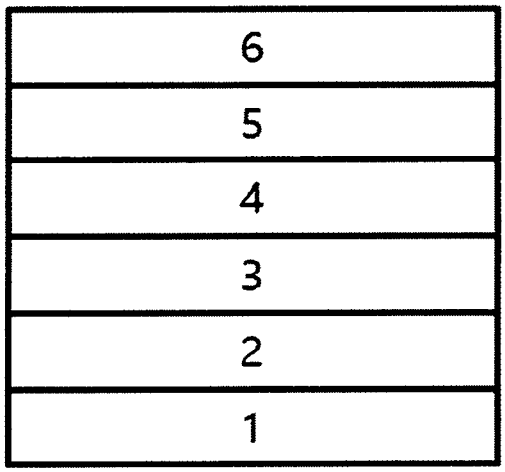


【청구항 14】

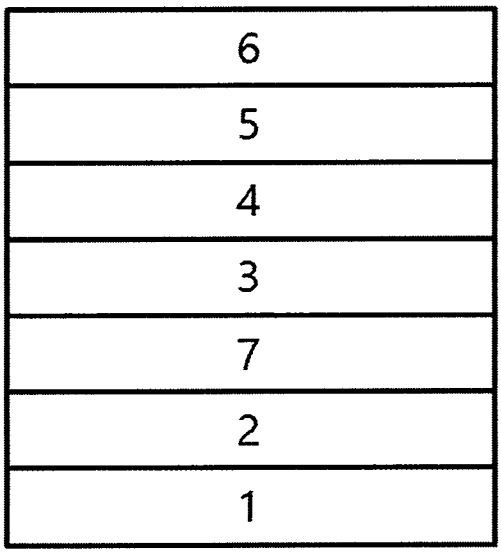
제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 제1항 내지 제13항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

【도면】

【도 1】



【도 2】



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2019/015274

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07D 405/04(2006.01)i, C07D 405/10(2006.01)i, C07D 409/04(2006.01)i, C07D 409/10(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07D 405/04; C07C 13/567; C07C 13/72; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 403/10; C07D 405/10; C07D 409/04; C07D 409/10; H01L 51/00; H01L 51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean utility models and applications for utility models: IPC as above
Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus) & Keywords: organic light emitting device, triazinyl, cyano

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0136032 A (LG CHEM, LTD.) 04 December 2015 See claims 1, 7, 8; page 30.	1-14
X	KR 10-2017-0113342 A (LG CHEM, LTD.) 12 October 2017 See claims 1, 3(second line, second compound), 4.	1-14
X	KR 10-2017-0126691 A (LG CHEM, LTD.) 20 November 2017 See claims 1, 10, 11; page 23(fourth line, third compound).	1-14
A	KR 10-2018-0043744 A (LG CHEM, LTD.) 30 April 2018 See the entire document.	1-14
A	KR 10-2017-0116992 A (LG CHEM, LTD.) 20 October 2017 See the entire document.	1-14

☐ 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	Date of mailing of the international search report
05 MARCH 2020 (05.03.2020)	**05 MARCH 2020 (05.03.2020)**
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/KR2019/015274

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0136032 A	04/12/2015	KR 10-1964606 B1	02/04/2019
KR 10-2017-0113342 A	12/10/2017	CN 109071465 A	21/12/2018
		JP 2019-515877 A	13/06/2019
		KR 10-1850243 B1	23/04/2018
		WO 2017-171376 A1	05/10/2017
KR 10-2017-0126691 A	20/11/2017	CN 107353281 A	17/11/2017
KR 10-2018-0043744 A	30/04/2018	CN 109071510 A	21/12/2018
		EP 3428163 A1	16/01/2019
		EP 3428163 A4	25/09/2019
		JP 2019-515879 A	13/06/2019
		KR 10-1956790 B1	13/03/2019
		TW 201823234 A	01/07/2018
		TW I640517 B	11/11/2018
		WO 2018-074881 A1	26/04/2018
KR 10-2017-0116992 A	20/10/2017	CN 107438596 A	05/12/2017
		KR 10-1934469 B1	02/01/2019
		WO 2017-179911 A1	19/10/2017

국제조사보고서

국제출원번호
PCT/KR2019/015274

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 405/04(2006.01)i, C07D 405/10(2006.01)i, C07D 409/04(2006.01)i, C07D 409/10(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 405/04; C07C 13/567; C07C 13/72; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 403/10; C07D 405/10; C07D 409/04; C07D 409/10; H01L 51/00; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus) & 키워드: 유기발광소자(organic light emitting device), 트리아지닐(triazinyl), 시아노(cyano)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0136032 A (주식회사 엘지화학) 2015.12.04 청구항 1, 7, 8; 페이지 30	1-14
X	KR 10-2017-0113342 A (주식회사 엘지화학) 2017.10.12 청구항 1, 3(두 번째 줄, 두 번째 화합물), 4	1-14
X	KR 10-2017-0126691 A (주식회사 엘지화학) 2017.11.20 청구항 1, 10, 11; 페이지 23(네 번째 줄, 세 번째 화합물)	1-14
A	KR 10-2018-0043744 A (주식회사 엘지화학) 2018.04.30 전문	1-14
A	KR 10-2017-0116992 A (주식회사 엘지화학) 2017.10.20 전문	1-14

☐ 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	국제조사보고서 발송일
2020년 03월 05일 (05.03.2020)	2020년 03월 05일 (05.03.2020)

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

심사관
허주형
전화번호 +82-42-481-8150

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2019/015274

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0136032 A	2015/12/04	KR 10-1964606 B1	2019/04/02
KR 10-2017-0113342 A	2017/10/12	CN 109071465 A	2018/12/21
		JP 2019-515877 A	2019/06/13
		KR 10-1850243 B1	2018/04/23
		WO 2017-171376 A1	2017/10/05
KR 10-2017-0126691 A	2017/11/20	CN 107353281 A	2017/11/17
KR 10-2018-0043744 A	2018/04/30	CN 109071510 A	2018/12/21
		EP 3428163 A1	2019/01/16
		EP 3428163 A4	2019/09/25
		JP 2019-515879 A	2019/06/13
		KR 10-1956790 B1	2019/03/13
		TW 201823234 A	2018/07/01
		TW I640517 B	2018/11/11
		WO 2018-074881 A1	2018/04/26
KR 10-2017-0116992 A	2017/10/20	CN 107438596 A	2017/12/05
		KR 10-1934469 B1	2019/01/02
		WO 2017-179911 A1	2017/10/19