

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일

2020년 1월 9일 (09.01.2020)



(10) 국제공개번호

WO 2020/009363 A1

(51) 국제특허분류:
C07F 5/02 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)

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.

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/007704

(22) 국제출원일: 2019년 6월 26일 (26.06.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0077108 2018년 7월 3일 (03.07.2018) KR

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

(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))

(72) 발명자: 이기곤 (LEE, Ki Kon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 서상덕 (SUH, Sang Duk); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 금수정 (GEUM, Su-jeong); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김명곤 (KIM, MounG Gon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김경희 (KIM, Kyunghee); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 박태윤 (PARK, Tae Yoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김동현 (KIM, Dongheon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이우철 (LEE, Woochul); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

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

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

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

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

4
3
2
1

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

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



WO 2020/009363 A1

명세서

발명의 명칭: 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 기술분야

[1] 본 발명은 2018년 07월 03일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2018-0077108의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

[2] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[3] 본 명세서에서, 유기 발광 소자란 유기 반도체 물질을 이용한 발광 소자로서, 전극과 유기 반도체 물질 사이에서의 정공 및/또는 전자의 교류를 필요로 한다. 유기 발광 소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고, 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 발광 소자이다. 둘째는 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기 반도체 물질층에 정공 및/또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 작동하는 형태의 발광 소자이다.

[4] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자억제층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어 질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기 발광 소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[5] 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 전자 억제 물질, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료가 있다.

[6] 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로

구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도펀트를 발광층에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도펀트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도펀트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도펀트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

- [7] 전술한 유기 발광 소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 억제 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되므로 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

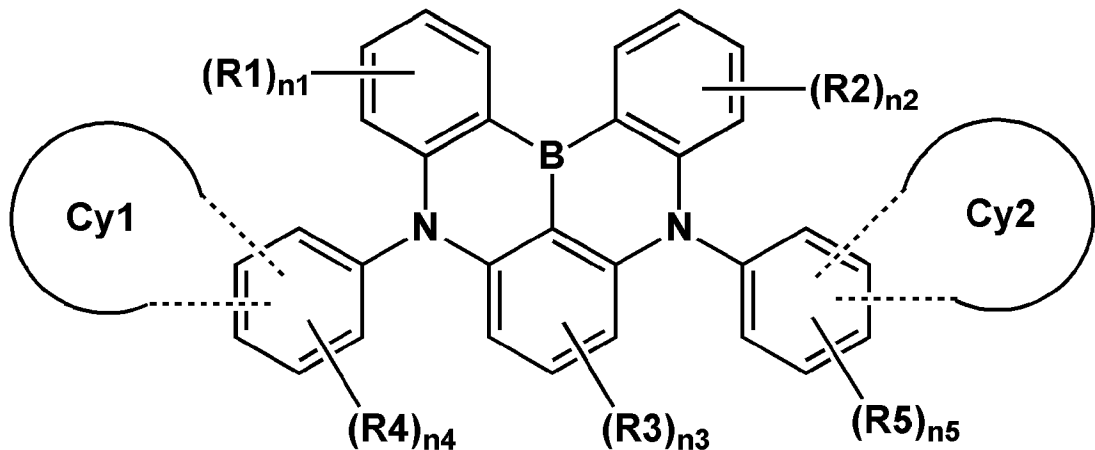
- [8] 본 명세서에는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

과제 해결 수단

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

[10] [화학식 1]

[11]



- [12] 상기 화학식 1에 있어서,

- [13] Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리이며,

- [14] R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

- [15] n1 및 n2는 각각 0 내지 4의 정수이며,

- [16] n3 내지 n5는 각각 0 내지 3의 정수이고,

- [17] n1 내지 n5가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

- [18] 또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을

포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 전술한 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

- [19] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제조하는 경우, 발광 효율이 우수하고, 낮은 구동전압, 고효율 및 장수명을 갖는 유기 발광 소자를 얻을 수 있다.

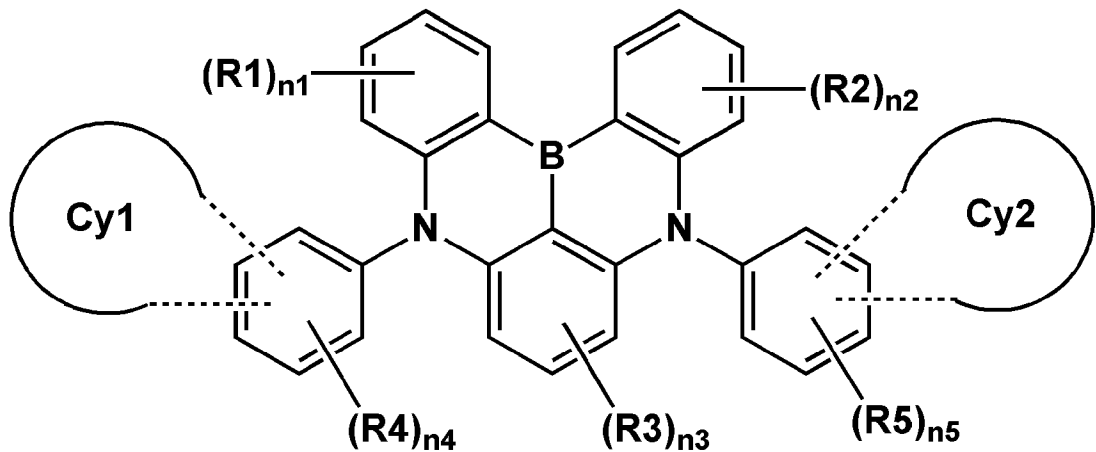
도면의 간단한 설명

- [20] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [21] 도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [22] 도 3은 화합물 A의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [23] 도 4는 화합물 B의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [24] 도 5는 화합물 1의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [25] 도 6은 화합물 5의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [26] 도 7은 화합물 6의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [27] 도 8은 화합물 7의 ¹H-NMR 측정 그래프를 도시한 것이다.
- [28] <부호의 설명>
- [29] 1: 기관
- [30] 2: 양극
- [31] 3: 발광층
- [32] 4: 음극
- [33] 5: 정공주입층
- [34] 6: 정공수송층
- [35] 7: 발광층
- [36] 8: 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [37] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
- [38] 본 명세서는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다. 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 발광 소자의 유기물층에 사용하는 경우, 유기 발광 소자의 효율 및 수명 특성이 향상된다.
- [39] [화학식 1]

[40]



[41] 상기 화학식 1에 있어서,

[42] Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리이며,

[43] R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

[44] n1 및 n2는 각각 0 내지 4의 정수이며,

[45] n3 내지 n5는 각각 0 내지 3의 정수이고,

[46] n1 내지 n5가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

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

[48] 본 명세서에 있어서, 어떤 부제가 다른 부제 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부제가 다른 부제에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부제 사이에 또 다른 부제가 존재하는 경우도 포함한다.

[49] 본 명세서에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[50] 상기 "치환" 이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[51] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된

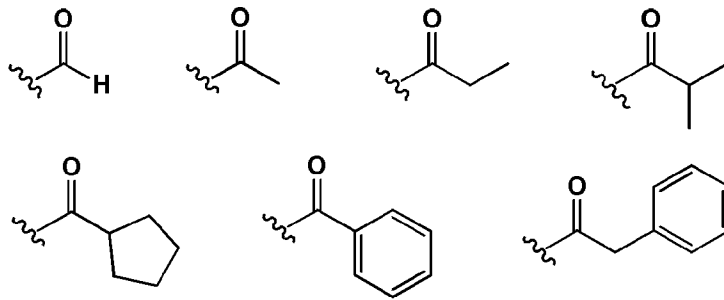
헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.

[52] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[53] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소(-F), 염소(-Cl), 브롬(-Br) 또는 요오드(-I)가 있다.

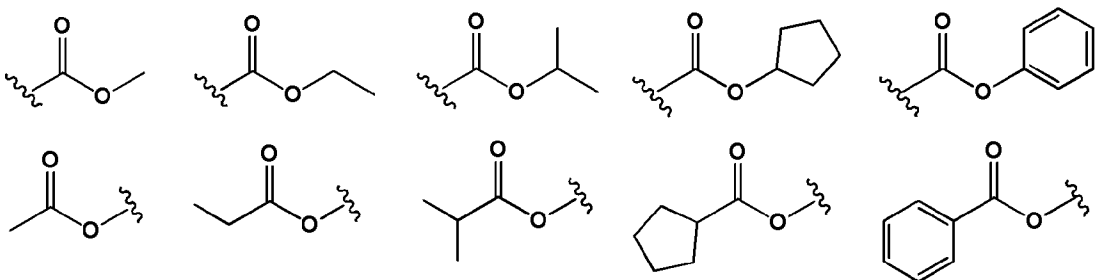
[54] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[55]



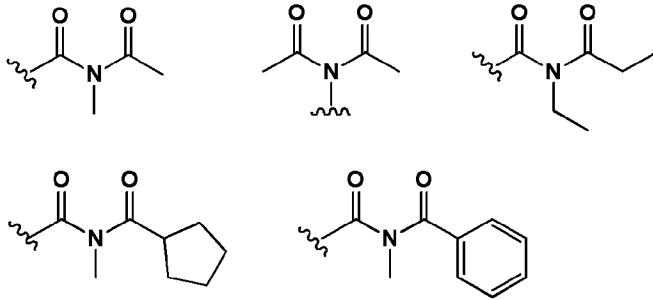
[56] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 20의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[57]



[58] 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.

[59]



[60] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 $-\text{SiY}_a\text{Y}_b\text{Y}_c$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 Y_a , Y_b 및 Y_c 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, tert-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[61] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 $-\text{BY}_d\text{Y}_e$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 Y_d 및 Y_e 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, tert-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[62] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 헵틸기, n-헵틸기, 옥틸기, n-옥틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

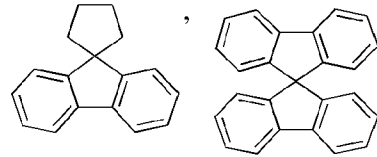
[63] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[64] 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, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 트리페닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기,

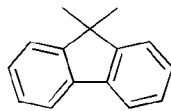
트리페닐레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[65] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

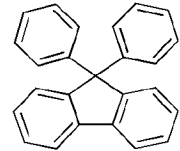
[66] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



스피로플루오레닐기,



(9,9-디메틸플루오레닐기), 및



(9,9-디페닐플루오레닐기) 등의 치환된 플루오레닐기가 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[67] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 헤테로고리기의 예로는 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 퀴놀린기, 피리다지닐기, 퓨란기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 카바졸기, 벤조카바졸기, 나프토벤조퓨란기, 벤조나프토티오펜기, 인데노카바졸기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[68] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 방향족인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[69] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[70] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[71] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리이다.

[72] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 이종원소로 O, S 및 N 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리이다.

[73] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 2환의 헤테로고리이다.

[74] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 2환의 헤테로고리이다.

[75] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 이종원소로 O, S 및 N

중 1개 이상을 포함하는 2환의 헤테로고리이다.

[76] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 헤테로고리이다.

[77] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리이다.

[78] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리이다.

[79] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리이다.

[80] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리이다.

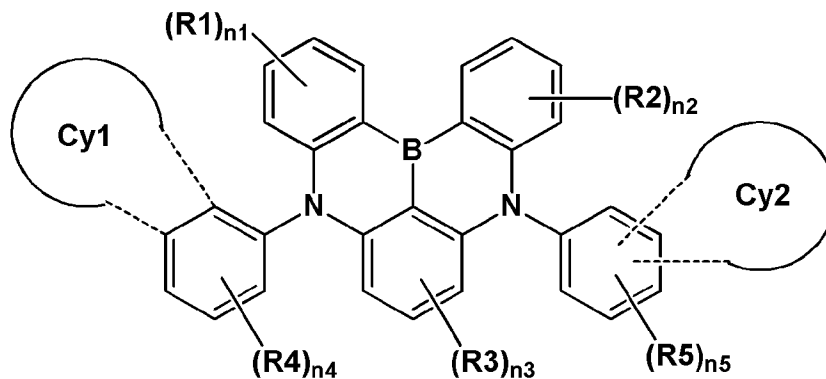
[81] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 2,3-다이하이드로벤조퓨란; 치환 또는 비치환된 벤조퓨란; 치환 또는 비치환된 2,3-다이하이드로벤조티오펜; 또는 치환 또는 비치환된 벤조티오펜이다.

[82] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 2,3-다이하이드로벤조퓨란; 벤조퓨란; 2,3-다이하이드로벤조티오펜; 또는 벤조티오펜이다.

[83] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-a 또는 1-b로 표시된다.

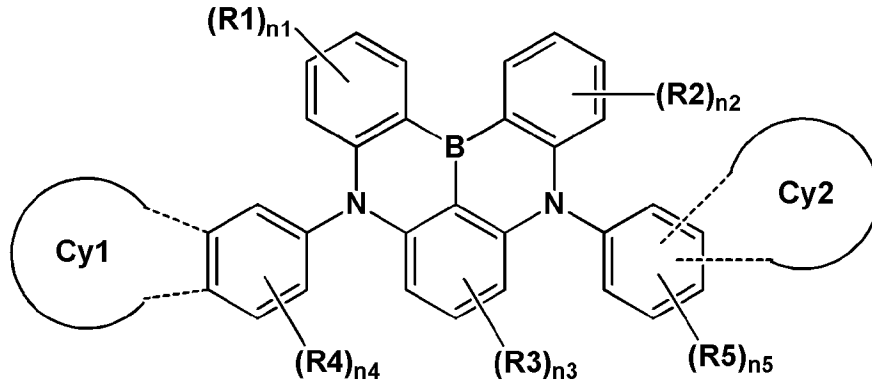
[84] [화학식 1-a]

[85]



[86] [화학식 1-b]

[87]



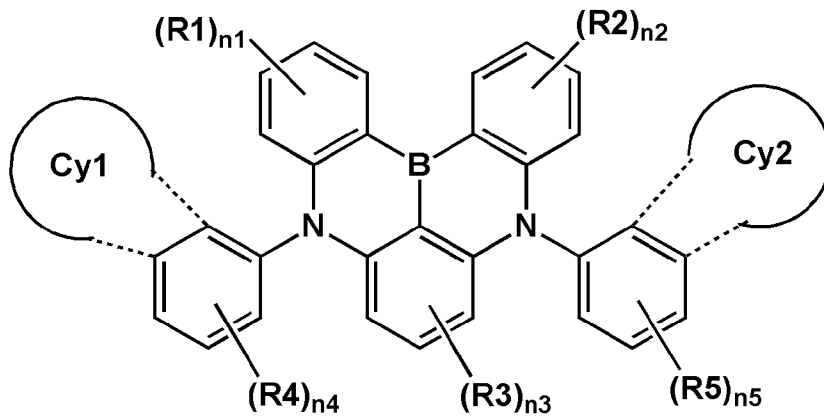
[88] 상기 화학식 1-a 및 1-b에 있어서,

[89] Cy1, Cy2, R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

[90] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4 중 어느 하나로 표시된다.

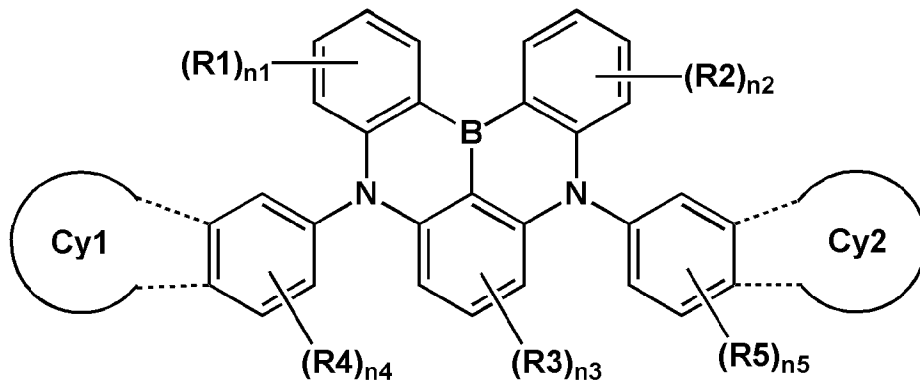
[91] [화학식 2]

[92]



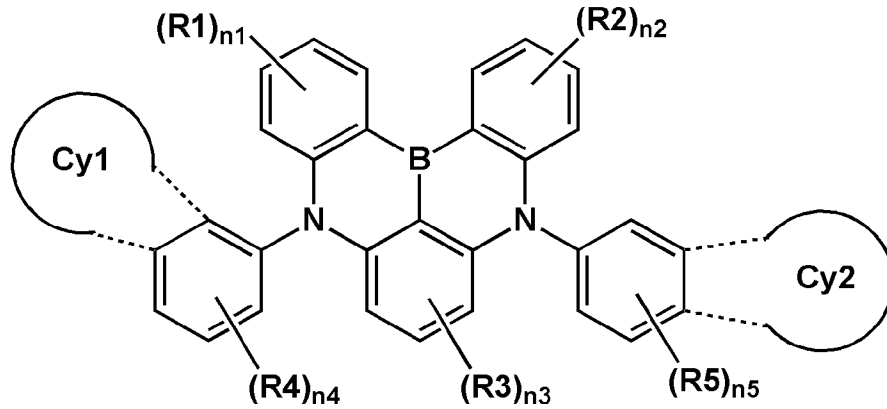
[93] [화학식 3]

[94]



[95] [화학식 4]

[96]



[97]

상기 화학식 2 내지 4에 있어서,

[98]

Cy1, Cy2, R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

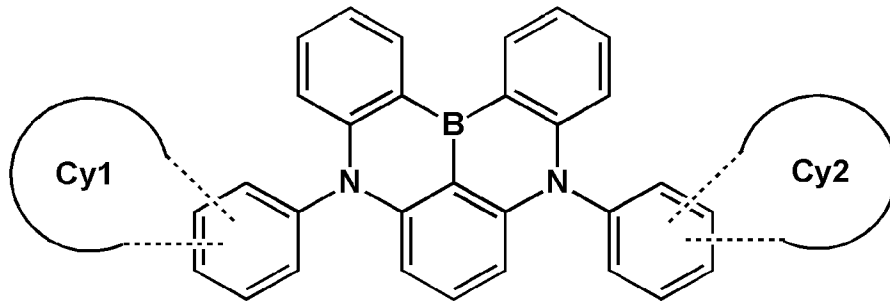
[99]

본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시된다.

[100]

[화학식 1-1]

[101]



[102]

상기 화학식 1-1에 있어서,

[103]

Cy1 및 Cy2의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

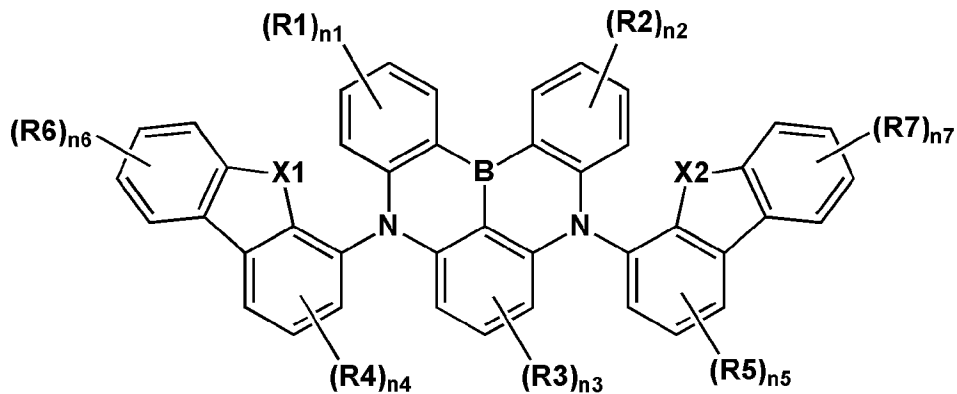
[104]

본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 5 내지 12 중 어느 하나로 표시된다.

[105]

[화학식 5]

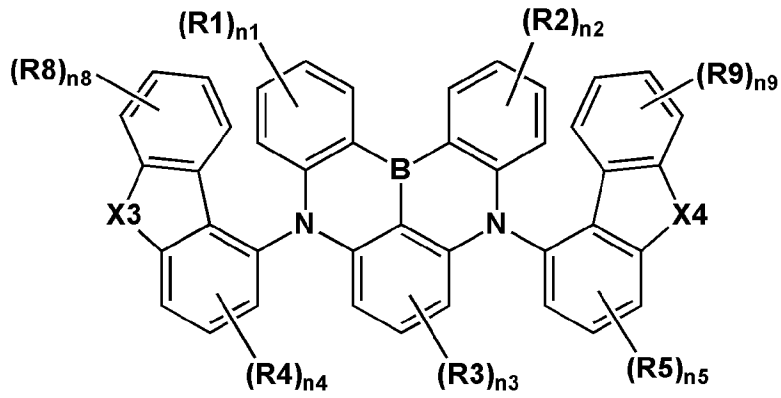
[106]



[107]

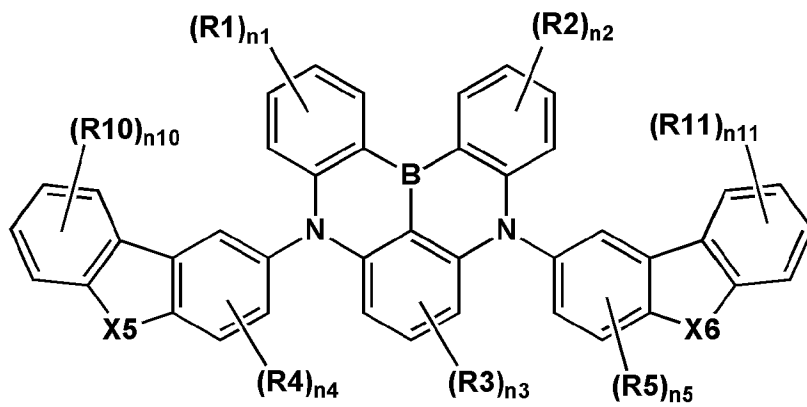
[화학식 6]

[108]



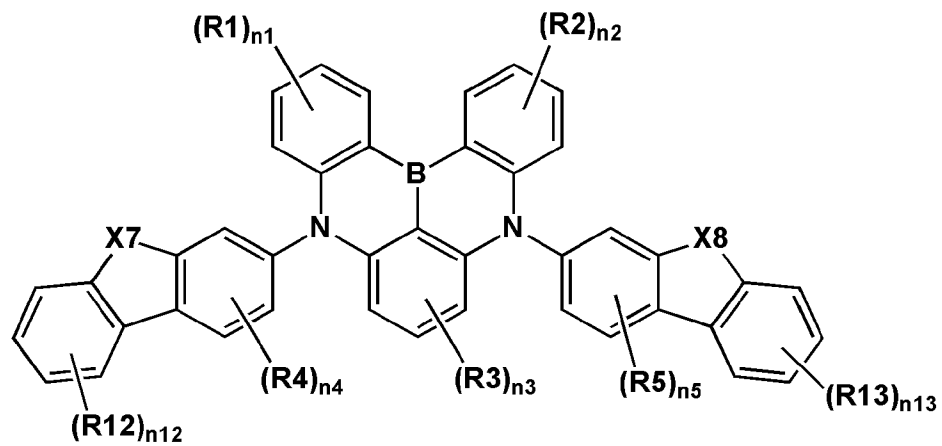
[109] [화학식 7]

[110]



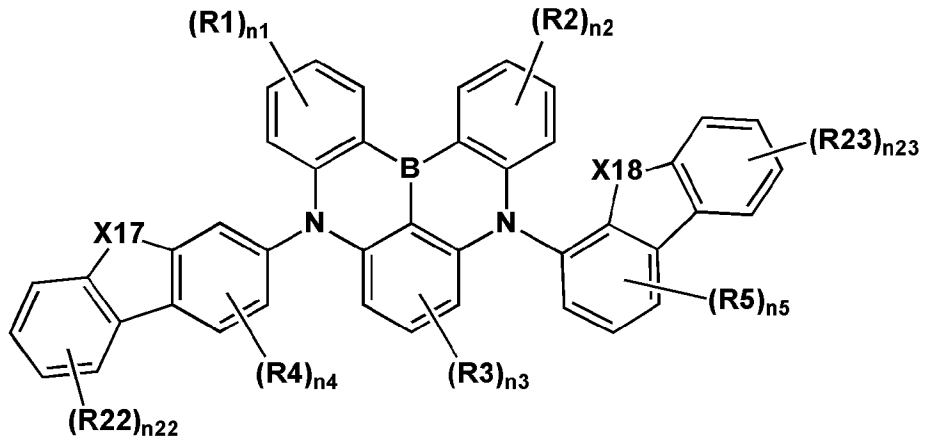
[111] [화학식 8]

[112]



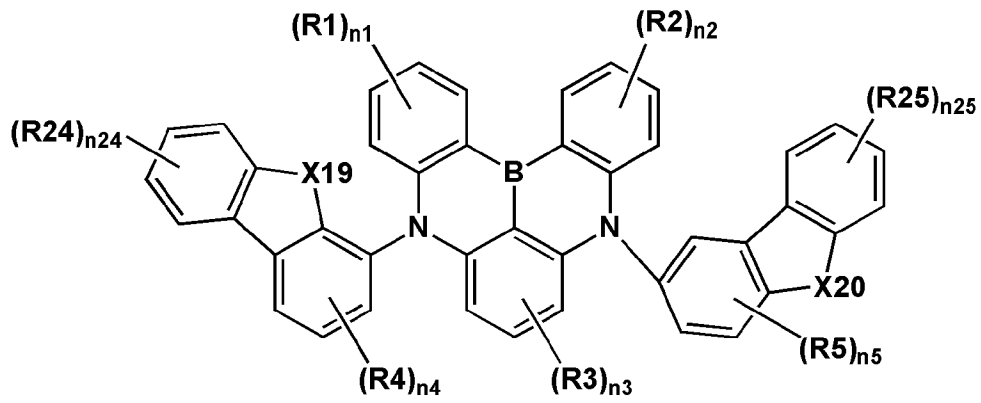
[113] [화학식 9]

[114]



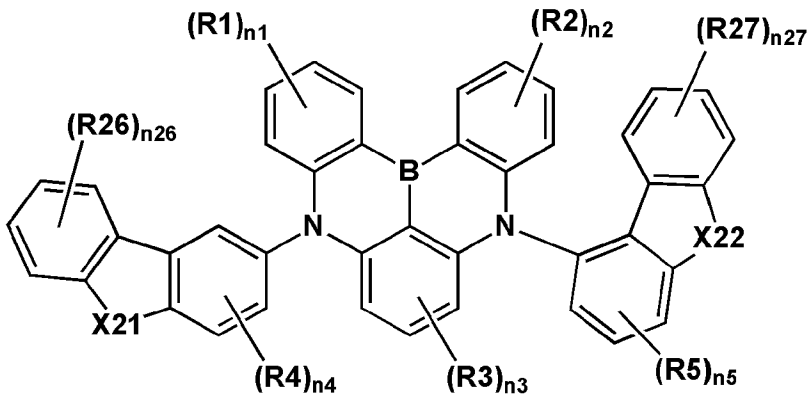
[115] [화학식 10]

[116]



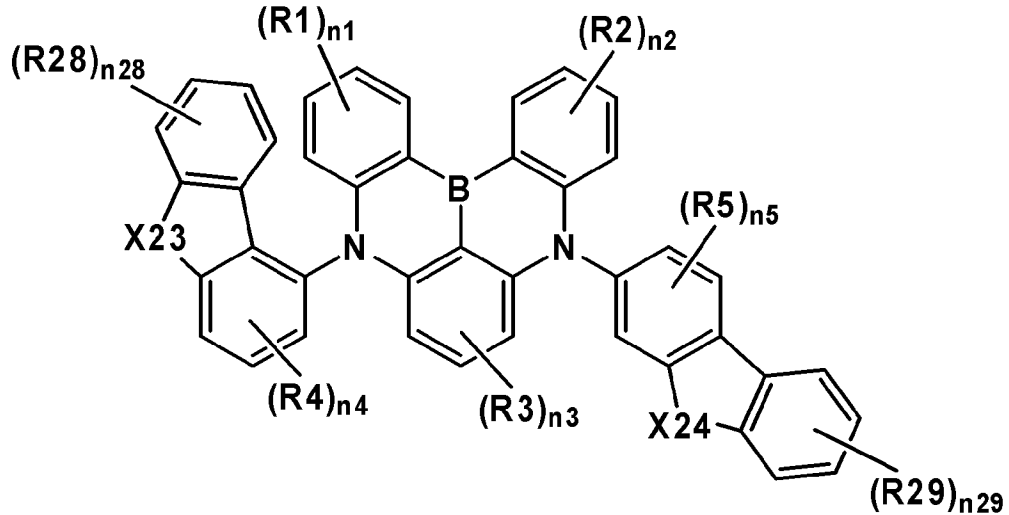
[117] [화학식 11]

[118]



[119] [화학식 12]

[120]



[121] 상기 화학식 5 내지 12에 있어서,

[122] R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같고,

[123] X1 내지 X8 및 X17 내지 X24는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S 또는 NR이며,

[124] R, R6 내지 R13 및 R22 내지 R29는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

[125] n6 내지 n13 및 n22 내지 n29는 각각 0 내지 4의 정수이며, n6 내지 n13 및 n22 내지 n29가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[126] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 내지 X8 및 X17 내지 X24는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O 또는 S이다.

[127] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 내지 X8 및 X17 내지 X24는 각각 O이다.

[128] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 내지 X8 및 X17 내지 X24는 각각 S이다.

[129] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

[130] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.

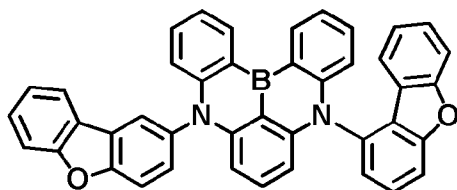
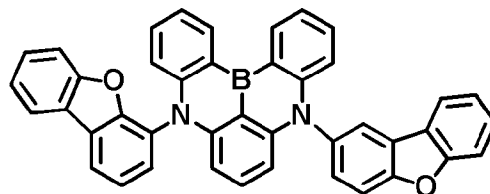
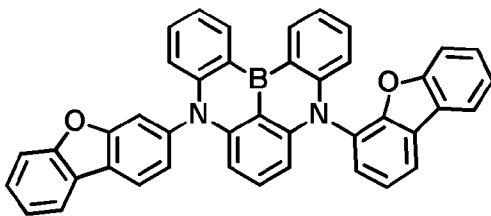
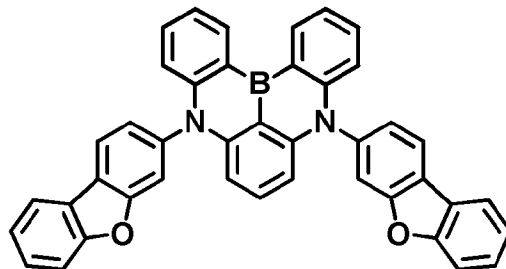
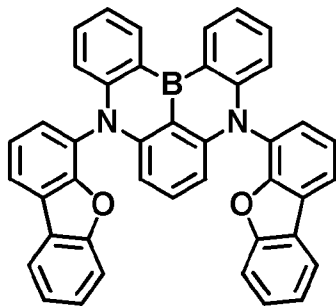
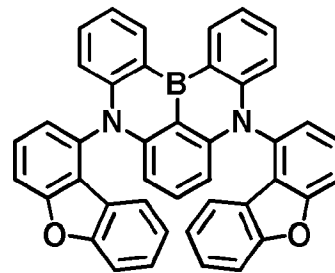
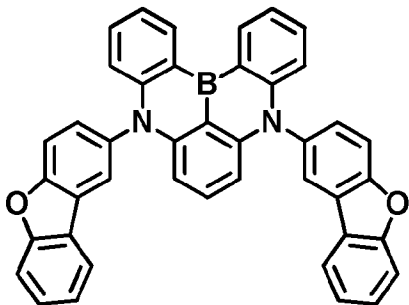
[131] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 페닐기; 바이페닐기; 또는 나프틸기이다.

[132] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n1 내지 n5는 각각 0 내지 2의 정수이다.

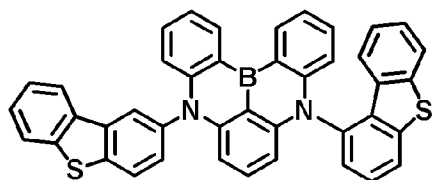
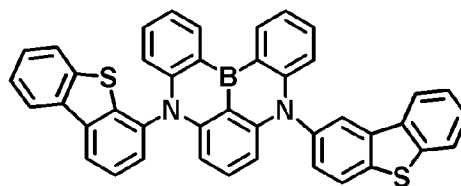
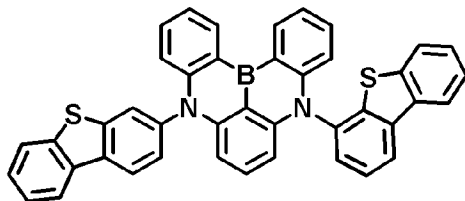
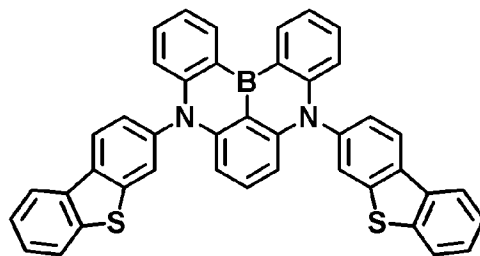
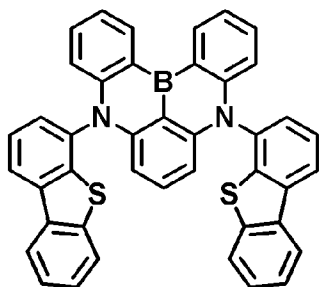
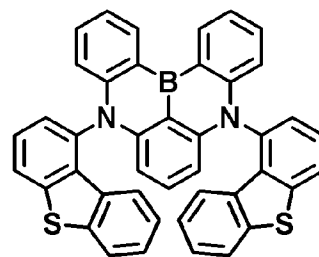
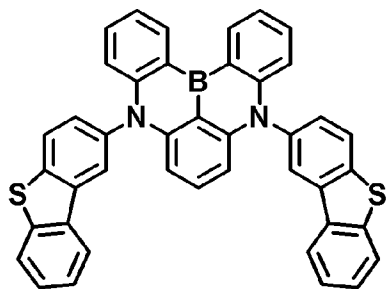
[133] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 n1 내지 n5는 각각 0 또는 1이다.

- [134] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 R, R6 내지 R13 및 R22 내지 R29는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.
- [135] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R, R6 내지 R13 및 R22 내지 R29는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [136] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R은 페닐기; 바이페닐기; 또는 나프틸기이다.
- [137] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R6 내지 R13 및 R22 내지 R29는 수소이다.
- [138] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n6 내지 n13 및 n22 내지 n29는 각각 0 내지 2의 정수이고, 상기 n6 내지 n13 및 n22 내지 n29가 각각 2인 경우, 2개의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.
- [139] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 n6 내지 n13 및 n22 내지 n29는 각각 0 또는 1이다.
- [140] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

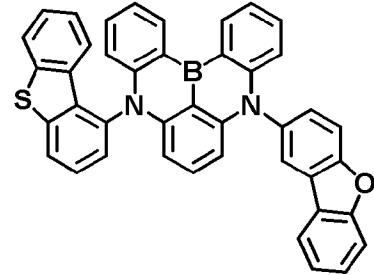
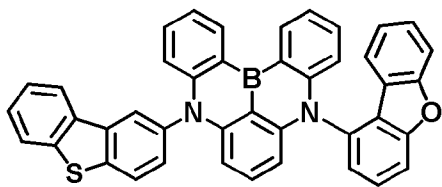
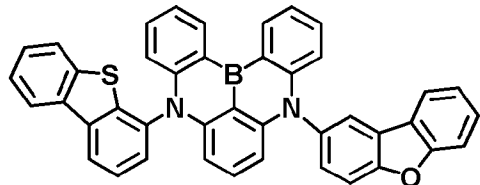
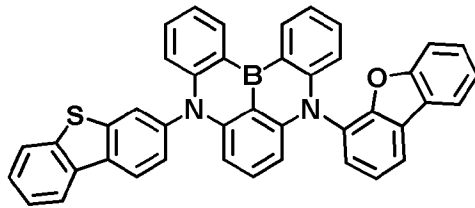
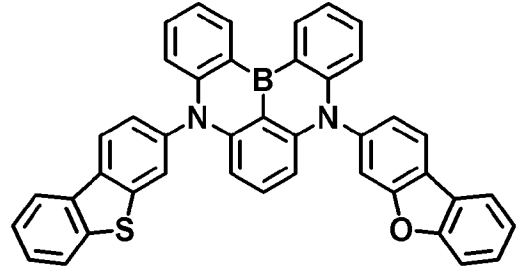
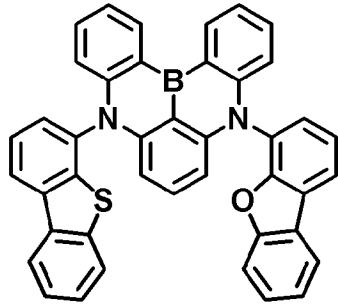
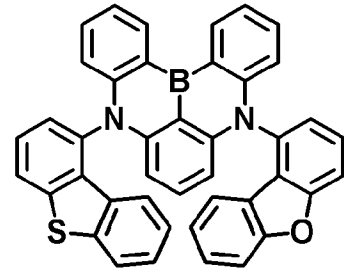
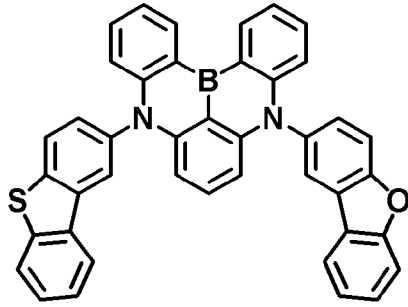
[141]



[142]



[143]



[144] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물은 후술하는 화합물의 제조방법에 의하여 제조될 수 있다. 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 및 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

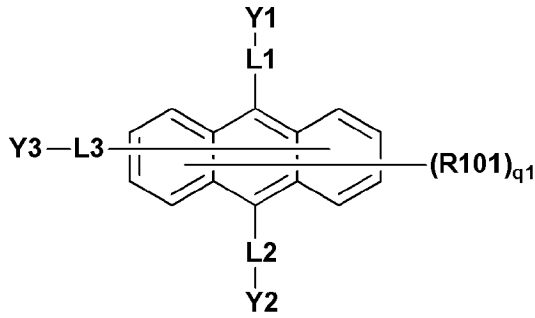
[145] 본 발명에서는 상기 화학식 1의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 발명에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.

[146] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송용 물질, 전자 억제용 물질, 발광층

물질 및 전자 수송층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.

- [147] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [148] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [149] 상기 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [150] 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, 정공 수송 및 주입을 동시에 하는 층, 전자억제층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층, 전자 수송 및 주입을 동시에 하는 층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [151] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 전술한 화합물을 포함할 수 있다.
- [152] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함할 수 있고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층은 상기 전술한 화합물을 포함할 수 있다.
- [153] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 전술한 화합물을 포함한다.
- [154] 또 하나의 실시 상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함할 수 있다.
- [155] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함하고, 호스트를 더 포함할 수 있다.
- [156] 본 발명의 일 실시 상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함하고, 하기 화학식 1-A로 표시되는 화합물을 호스트로서 더 포함할 수 있다.
- [157] [화학식 1-A]

[158]



- [159] 상기 화학식 1-A에 있어서,
- [160] Y1 내지 Y3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
- [161] L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,
- [162] R101은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
- [163] q1은 0 내지 7의 정수이며, q1이 2 이상인 경우 2 이상의 R101은 서로 같거나 상이하다.
- [164] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y1 내지 Y3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [165] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y1 내지 Y3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리기이다.
- [166] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y1 내지 Y3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [167] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y3는 수소이다.
- [168] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y1은 수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 나프토벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸기이다.
- [169] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y1은 수소; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기

또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프토벤조퓨란기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 티오펜기; 또는 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸기이다.

- [170] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y1은 수소; 중수소로 치환 또는 비치환된 페닐기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 디벤조퓨란기; 나프토벤조퓨란기; 페닐기로 치환된 티오펜기; 또는 인돌로카바졸기이다.
- [171] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y2는 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [172] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y2는 수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [173] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y2는 수소; 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [174] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y2는 수소; 시클로헥실기, 페닐기 또는 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 중수소, 불소, 시아노기, 또는 트리메틸실릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 메틸기, 페닐기, 또는 나프틸기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [175] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헥테로아릴렌기이다.
- [176] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헥테로아릴렌기이다.
- [177] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헥테로아릴렌기이다.
- [178] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.
- [179] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.

[180] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 페닐렌기; 또는 나프틸렌기이다.

[181] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 R101은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[182] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R101은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.

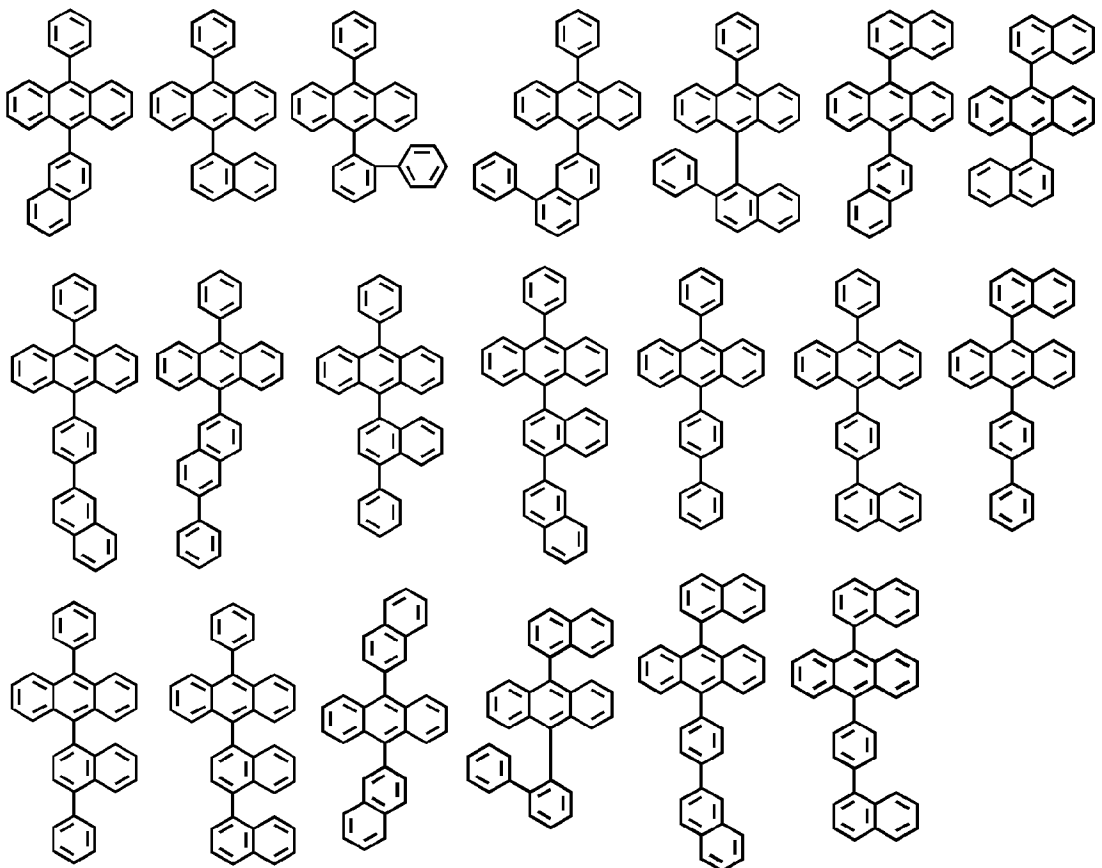
[183] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R101은 수소이다.

[184] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 q1은 0 내지 2의 정수이다.

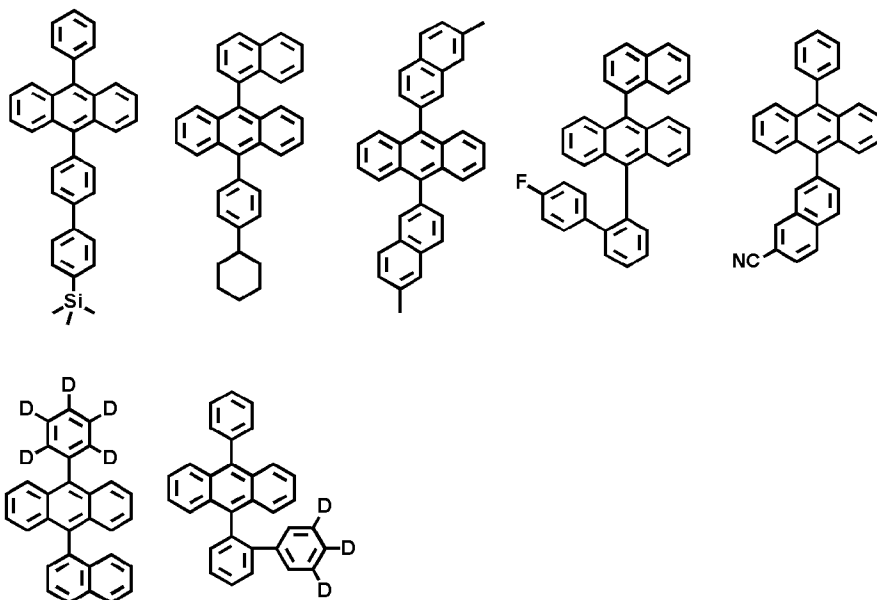
[185] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 q1은 0 또는 1이다.

[186] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-A는 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

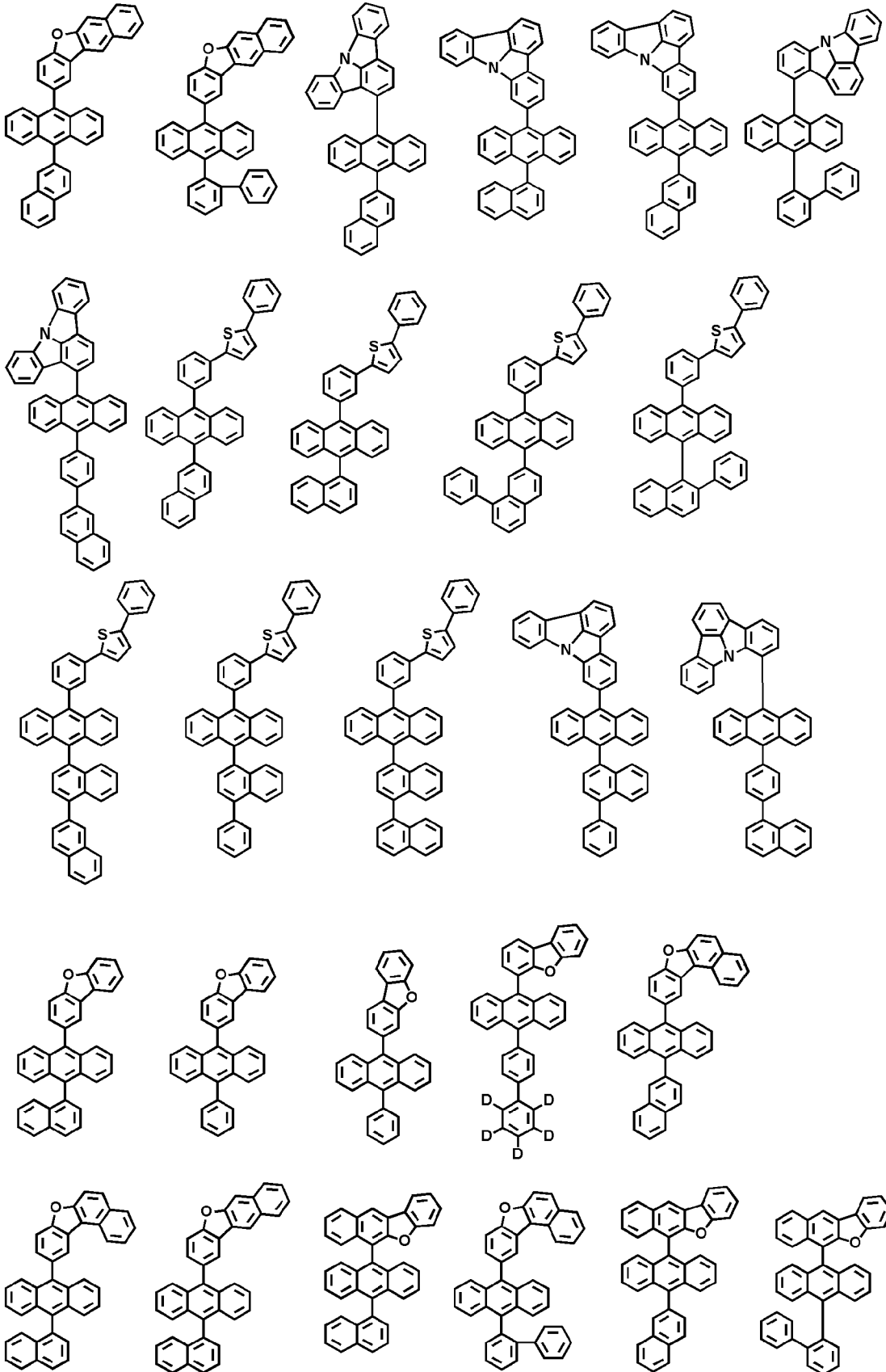
[187]



[188]



[189]



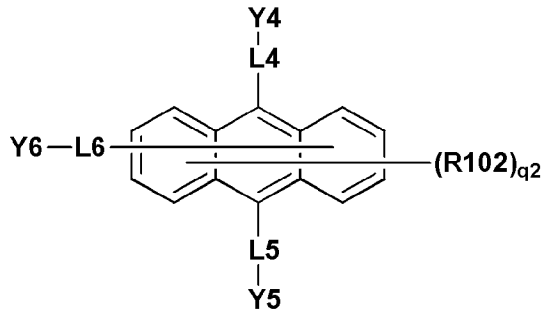
[190] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기

발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로 포함하고, 상기 화학식 1-A를 호스트로서 포함하는 경우, 도펀트의 함량은 호스트 100 중량부를 기준으로 1 중량부 내지 10 중량부일 수 있다.

[191] 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함하고, 상기 화학식 1-B 및 화학식 1-C로 표시되는 화합물 중 2 이상을 호스트로서 더 포함할 수 있다.

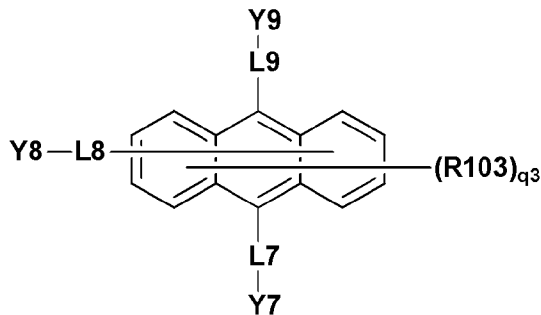
[192] [화학식 1-B]

[193]



[194] [화학식 1-C]

[195]



[196] 상기 화학식 1-B 및 1-C에 있어서,

[197] Y4 내지 Y8은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이고,

[198] Y9는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[199] L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

[200] R102 및 R103은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[201] q2 및 q3은 각각 0 내지 7의 정수이고, q2 및 q3가 각각 2 이상인 경우 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[202] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y4 내지 Y8은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

[203] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y4 내지 Y8은 서로 같거나 상이하고,

- 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [204] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y6 및 Y8은 수소이다.
- [205] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y5 및 Y7은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [206] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y5 및 Y7은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 중수소(D), 할로젠기, 시아노기, 실릴기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [207] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y5 및 Y7은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 시클로헥실기, 페닐기 또는 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 중수소, 불소, 시아노기, 또는 트리메틸실릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 메틸기, 페닐기, 또는 나프틸기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [208] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y4는 수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [209] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y4는 수소; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [210] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y4는 수소; 중수소로 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 메틸기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [211] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y9는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헥테로고리기이다.
- [212] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y9는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헥테로고리기이다.
- [213] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y9는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 나프토펜조퓨란기; 치환 또는 비치환된 티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸기이다.
- [214] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y9는 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프토펜조퓨란기; 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 티오펜기; 또는 중수소, 탄소수 1 내지 10의 알킬기

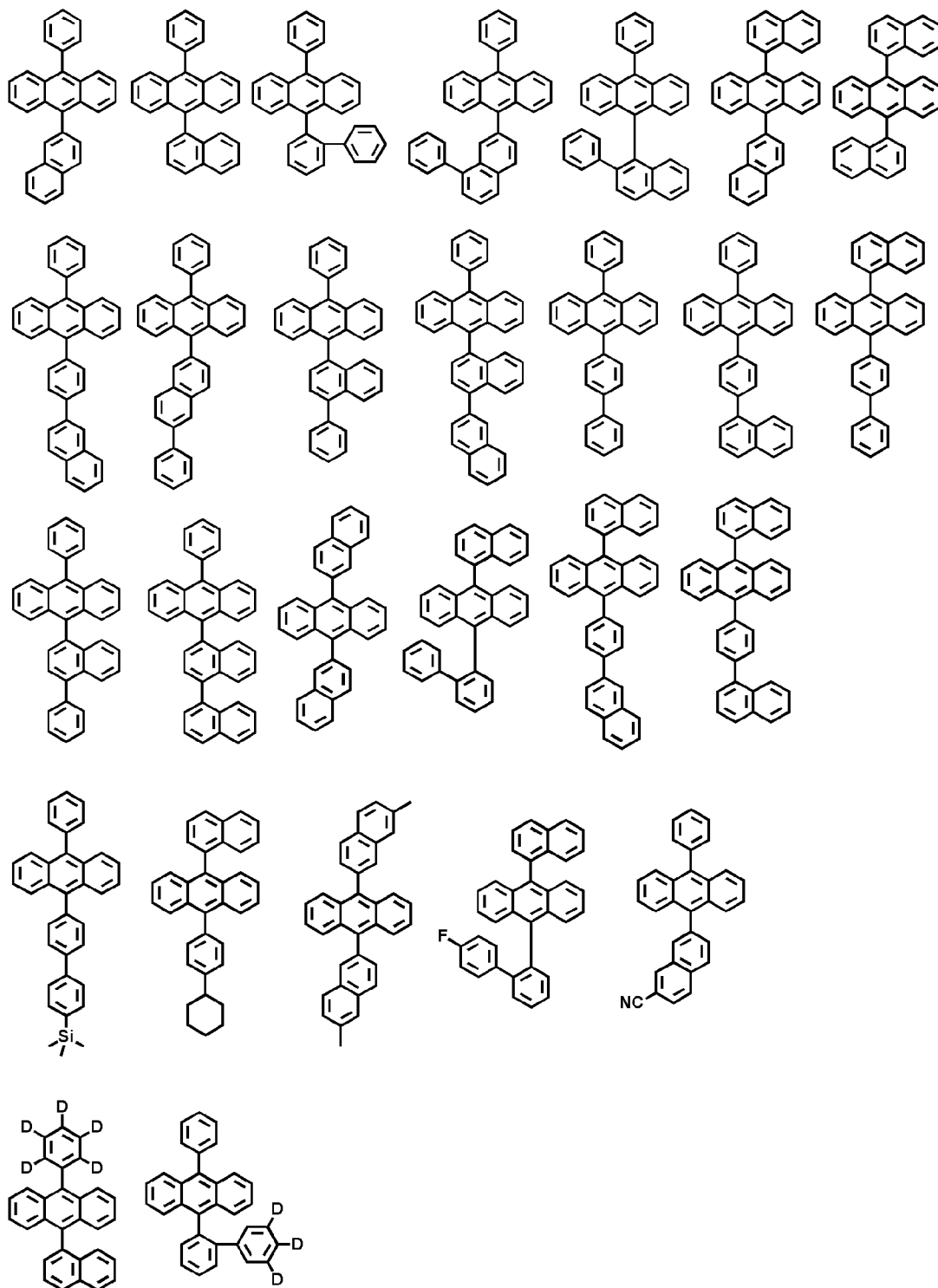
- 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸기이다.
- [215] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y9는 디벤조퓨란기; 나프토벤조퓨란기; 페닐기로 치환된 티오펜기; 또는 인돌로카바졸기이다.
- [216] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.
- [217] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기이다.
- [218] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기이다.
- [219] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.
- [220] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.
- [221] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 페닐렌기; 또는 나프틸렌기이다.
- [222] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 R102 및 R103은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [223] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R102 및 R103은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [224] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R102 및 R103은 수소이다.
- [225] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 q2는 0 내지 7의 정수이고, q2가 2 이상인 경우 2 이상의 R102는 서로 같거나 상이하다.
- [226] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 q2는 0 내지 2의 정수이다.
- [227] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 q2는 0 또는 1이다.
- [228] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 q3은 0 내지 7의 정수이고, q3이 2 이상인 경우 2 이상의 R103은 서로 같거나 상이하다.

[229] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 q3은 0 내지 2의 정수이다.

[230] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 q3은 0 또는 1이다.

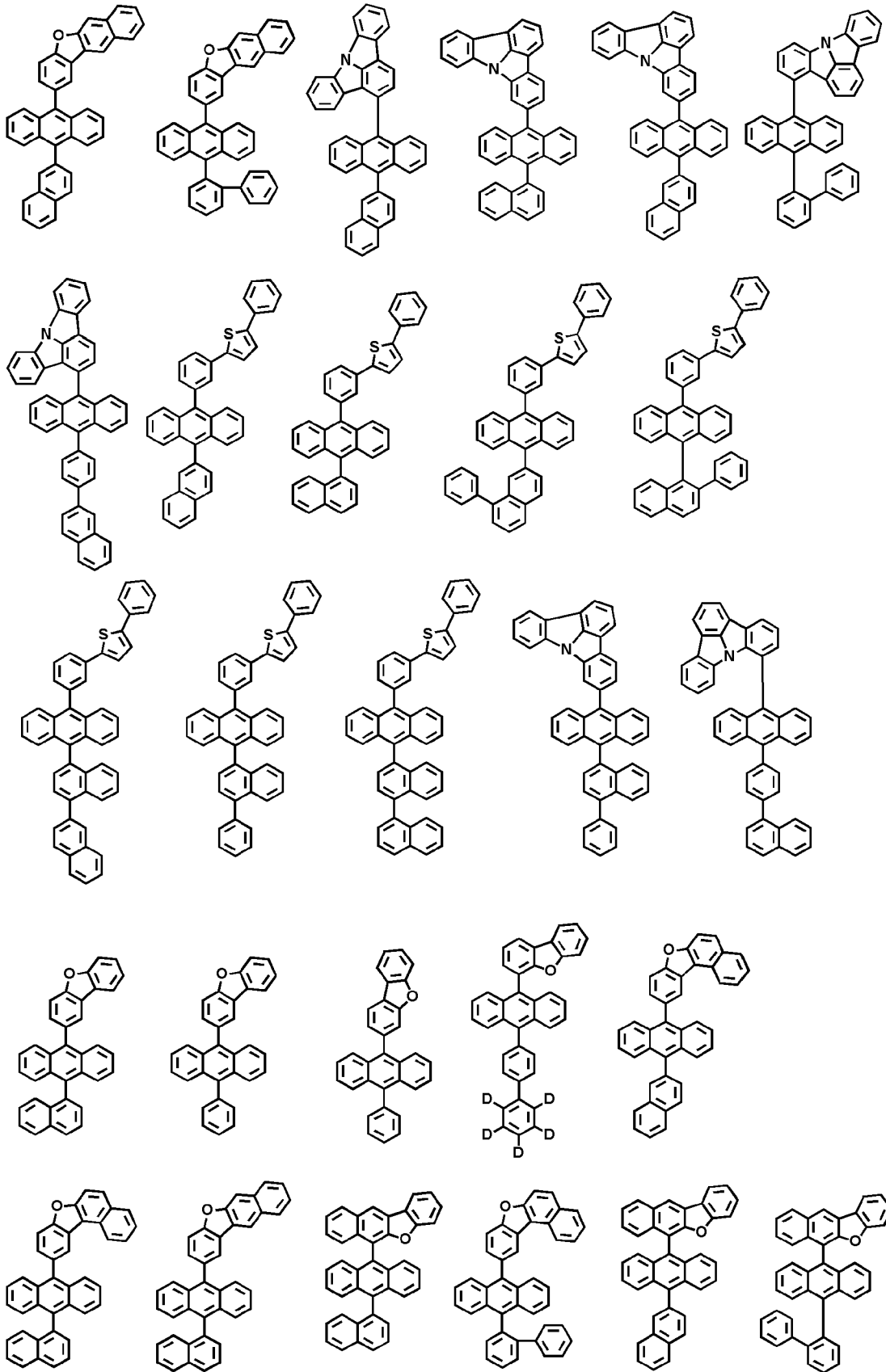
[231] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-B는 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[232]



[233] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-C는 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[234]



[235] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로 포함하고, 상기 화학식 1-B 및

- 화학식 1-C로 표시되는 화합물 중 2 이상을 호스트로서 포함하는 경우, 도펀트의 함량은 호스트 100 중량부를 기준으로 1 중량부 내지 10 중량부일 수 있다.
- [236] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 화합물을 발광층의 도펀트로 포함하고, 상기 화학식 1-B로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 1-C로 표시되는 화합물을 발광층의 호스트로서 포함할 수 있으며, 상기 호스트의 혼합 중량비(1-B:1-C)는 95:5 내지 5:95일 수 있다.
- [237] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 포함하며, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도펀트로 포함할 수 있다.
- [238] 또 하나의 예로서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 포함하며, 이리듐계(Ir) 도펀트와 함께 사용할 수 있다.
- [239] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 호스트로서 포함할 수 있다.
- [240] 또 하나의 예로서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화합물을 발광층의 호스트로서 포함하고, 도펀트를 더 포함할 수 있다.
- [241] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자억제층을 포함하고, 상기 전자억제층은 전술한 화합물을 포함할 수 있다.
- [242] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 제2 전극은 음극이다.
- [243] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 제2 전극은 양극이다.
- [244] 상기 유기 발광 소자는 예컨대 하기와 같은 적층 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [245] (1) 양극/정공수송층/발광층/음극
- [246] (2) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/음극
- [247] (3) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/음극
- [248] (4) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [249] (5) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [250] (6) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [251] (7) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [252] (8) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [253] (9) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [254] (10) 양극/ 정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/음극
- [255] (11) 양극/ 정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [256] (12) 양극/정공주입층/정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/음극

- [257] (13) 양극/정공주입층/정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [258] (14) 양극/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/음극
- [259] (15) 양극/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/전자주입층/음극
- [260] (16) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/음극
- [261] (17) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/전자주입층/음극
- [262] (18) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층/음극
- [263] 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [264] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.
- [265] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층(8) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7) 또는 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층(8)에 포함될 수 있다.
- [266] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자억제층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.
- [267] 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층, 전자억제층, 발광층 및 전자수송층, 전자주입층, 정공 주입 및 수송을 동시에 하는 층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [268] 상기 양극은 정공을 주입하는 전극으로, 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO,

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

- [269] 상기 음극은 전자를 주입하는 전극으로, 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [270] 상기 정공주입층은 양극으로부터 발광층으로 정공의 주입을 원활하게 하는 역할을 하는 층이며, 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 정공주입층의 두께는 1 내지 150nm일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 1nm 이상이면, 정공 주입 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 150nm 이하이면, 정공주입층의 두께가 너무 두꺼워 정공의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.
- [271] 상기 정공수송층은 정공의 수송을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 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.
- [272] 정공주입층과 정공수송층 사이에 추가로 정공버퍼층이 구비될 있으며, 당 기술분야에 알려져 있는 정공주입 또는 수송재료를 포함할 수 있다.
- [273] 정공수송층과 발광층 사이에 전자억제층이 구비될 수 있다. 상기 전자억제층은 전술한 화합물 또는 당 기술분야에 알려져 있는 재료가 사용될 수 있다.
- [274] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색을 발광할 수 있으며, 인광 물질 또는 형광 물질로 이루어질 수 있다. 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BALq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물;

폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

- [275] 발광층의 호스트 재료로는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [276] 발광층이 적색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 PIQIr(acac)(bis(1-phenylisoquinoline)acetylacetonateiridium), PQIr(acac)(bis(1-phenylquinoline)acetylacetonate iridium), PQIr(tris(1-phenylquinoline)iridium), PtOEP(octaethylporphyrin platinum)와 같은 인광 물질이나, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum)와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다. 발광층이 녹색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 Ir(ppy)₃(fac tris(2-phenylpyridine)iridium)와 같은 인광물질이나, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum)와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다. 발광층이 청색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 (4,6-F2ppy)₂Irpic와 같은 인광 물질이나, spiro-DPVBi, spiro-6P, 디스틸벤젠(DSB), 디스트릴아릴렌(DSA), PFO계 고분자, PPV계 고분자와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다.
- [277] 전자수송층과 발광층 사이에 정공억제층이 구비될 수 있으며, 당 기술분야에 알려져 있는 재료가 사용될 수 있다.
- [278] 상기 전자수송층은 전자의 수송을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자수송층의 두께는 1 내지 50nm일 수 있다. 전자수송층의 두께가 1nm 이상이면, 전자 수송 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 50nm 이하이면, 전자수송층의 두께가 너무 두꺼워 전자의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.
- [279] 상기 전자주입층은 전자의 주입을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 전자 주입 물질로는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지

않는다.

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

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

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

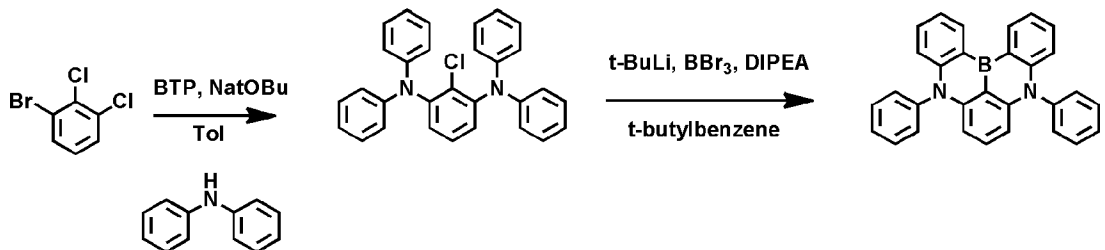
발명의 실시를 위한 형태

- [283] 이하, 본 명세서를 구체적으로 설명하기 위해 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 그러나, 본 명세서에 따른 실시예들은 여러가지 다른 형태로 변형될 수 있으며, 본 출원의 범위가 아래에서 상술하는 실시예들에 한정되는 것으로 해석되지 않는다. 본 출원의 실시예들은 당업계에서 평균적인 지식을 가진 자에게 본 명세서를 보다 완전하게 설명하기 위해 제공되는 것이다.

- [284] <합성예>

- [285] 합성예 1.

- [286]



[중간체 1]

[중간체 2]

[화합물 A]

- [287] 1) 중간체 2의 합성

- [288] 1-브로모-2,3-디클로로벤젠[1-bromo-2,3-dichlorobenzene] 10g(44mmol)을 톨루엔 100mL에 용해 후, 디페닐아민[diphenylamine] (2.1eq, 92mmol), 소듐

t-부톡사이드[sodium t-butoxide] (2.7eq, 120mmol),
BTP(Bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0)) (10mol%)를 넣고 3시간 동안 환류
교반하여 중간체 2(2-chloro-N1,N1,N3,N3-tetraphenylbenzene-1,3-diamine)를
합성하였다. 얻어진 중간체 2는 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 정제하였다.

[289] 중간체 2: m/z=446.15 (C₃₀H₂₃ClN₂)

[290] 수율=15g(75.8%), 순도=99.5%

[291] 2) 화합물 A의 합성

[292] 중간체 2 10g(22mmol)을 t-부틸벤젠[t-butylbenzene] 100mL에 용해 후, -78°C로
냉각한다. t-부틸리튬[t-butyllithium] (2.0eq, 44mmol)을 주입하고 6시간 동안
교반하였다. BBr₃ (2.0eq, 44mmol)을 주입하고 1시간 교반 후 상온으로
승온하였다. 상온에서 디이소프로필에틸아민[diisopropylethylamine] (2.0eq,
44mmol)을 천천히 적가 후 2시간동안 환류 교반하였다. 반응 완료 후,
KOAc수용액으로 세척하고 유기층을 감압증류한다. 얻어진 고체는 재결정으로
정제하여 화합물 A를 얻었다. 화합물 A의 1H-NMR 측정 그래프(in DMSO,
400MHz)를 도 3에 나타내었다.

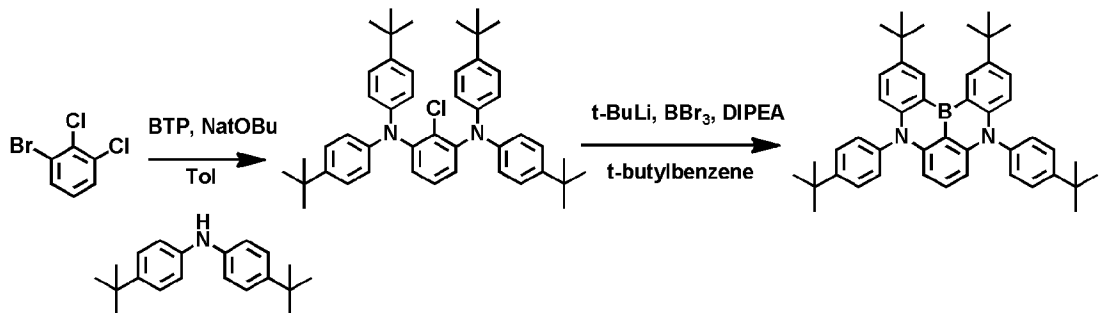
[293] 화합물 A: m/z=420.18 (C₃₀H₂₁BN₂)

[294] 수율=7.5g(79.8%), 순도=99.3%

[295] 합성예 2.

[296] 1) 화합물 B의 합성

[297]



[중간체 1]

[중간체 3]

[화합물 B]

[298] 상기 합성예 1에서 디페닐아민 대신 상기 비스(4-(t-부틸)페닐)아민
[bis(4-(tert-butyl)phenyl)amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한
방법으로 화합물 B를 합성하였다. 화합물 B의 1H-NMR 측정 그래프(in DMSO,
400MHz)를 도 4에 나타내었다.

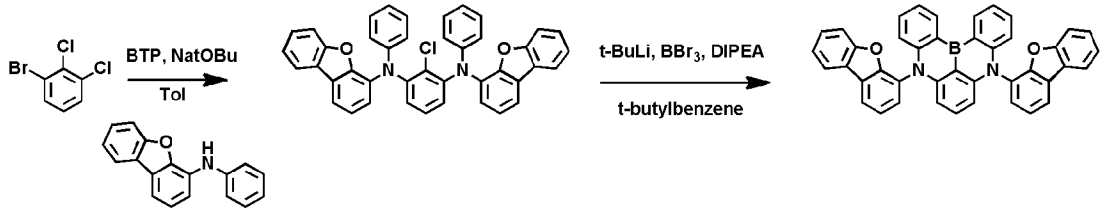
[299] 화합물 B: m/z=644.43 (C₄₆H₅₃BN₂)

[300] 수율=7.2g(75%), 순도=99.6%

[301] 합성예 3.

[302] 1) 화합물 1의 합성

[303]



[중간체 1]

[중간체 4]

[화합물 1]

[304]

상기 합성에 1에서 디페닐아민 대신 상기 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-4-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-4-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 방법으로 화합물 1을 합성하였다. 화합물 1의 ¹H-NMR 측정 그래프(in DMSO, 400MHz)를 도 5에 나타내었다.

[305]

화합물 1: m/z=600.20 (C₄₂H₂₅BN₂O₂)

[306]

수율=6.8g(71.1%), 순도=99.3%

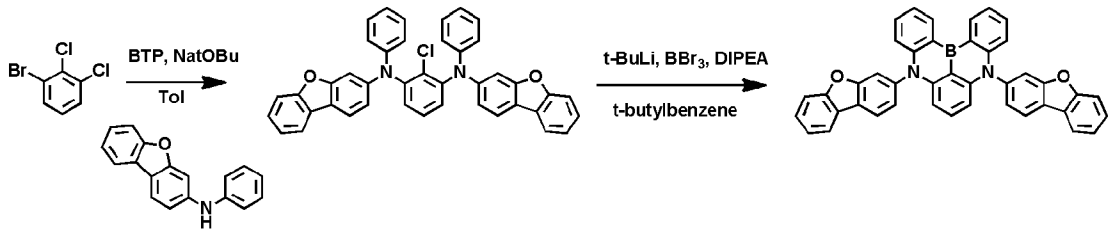
[307]

합성예 4.

[308]

1) 화합물 2의 합성

[309]



[중간체 1]

[중간체 5]

[화합물 2]

[310]

상기 합성에 1에서 디페닐아민 대신 상기 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-3-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-3-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 방법으로 화합물 2를 합성하였다.

[311]

화합물 2: m/z=600.20 (C₄₂H₂₅BN₂O₂)

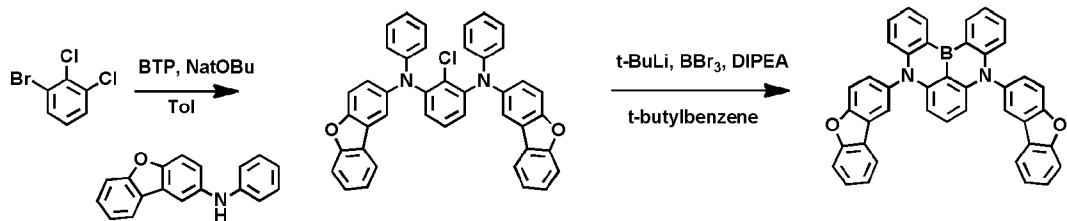
[312]

수율=8.2g(85.7%), 순도=99.5%

[313]

합성예 5.

[314]



[중간체 1]

[중간체 6]

[화합물 3]

[315]

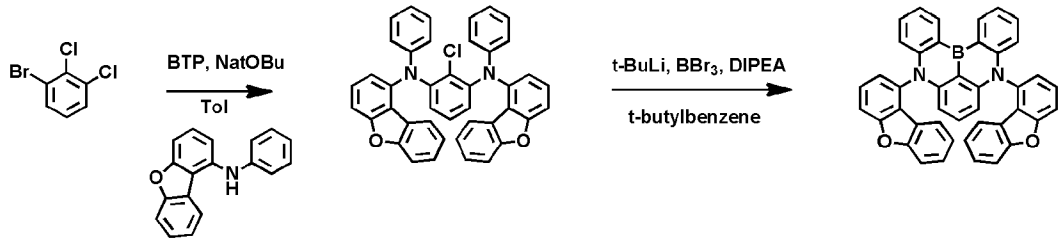
상기 합성에 1에서 디페닐아민 대신 상기 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-2-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-2-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 방법으로 화합물 3을 합성하였다.

[316] 화합물 3: $m/z=600.20$ ($C_{42}H_{25}BN_2O_2$)

[317] 수율=8.8g(92%), 순도=99.1%

[318] 합성예 6.

[319]



[중간체 1]

[중간체 7]

[화합물 4]

[320] 상기 합성예 1에서 디페닐아민 대신 상기

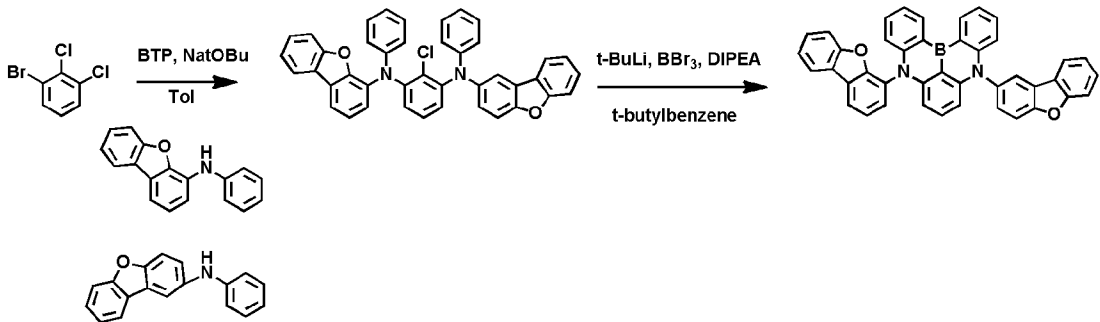
N-페닐디벤조[b,d]퓨란-1-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-1-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 방법으로 화합물 4를 합성하였다.

[321] 화합물 4: $m/z=600.20$ ($C_{42}H_{25}BN_2O_2$)

[322] 수율=7.7g(80.5%), 순도=99.4%

[323] 합성예 7.

[324]



[중간체 1]

[중간체 8]

[화합물 5]

[325] 상기 합성예 1에서 디페닐아민 대신 상기

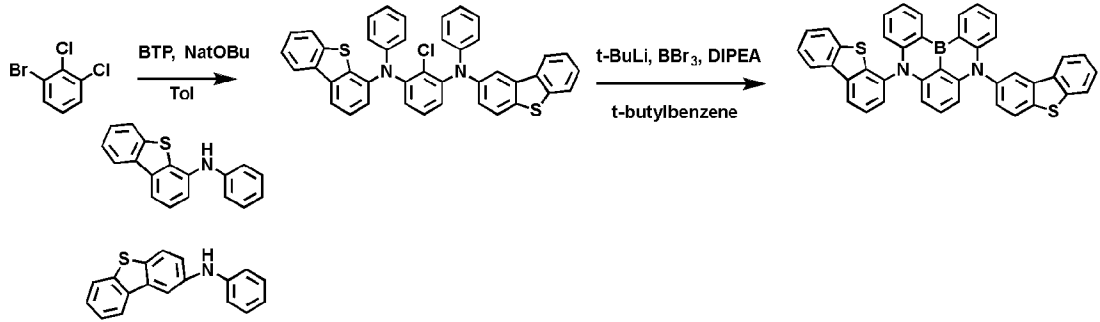
N-페닐디벤조[b,d]퓨란-4-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-4-amine]과 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-2-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-2-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 방법으로 화합물 5를 합성하였다. 화합물 5의 1H -NMR 측정 그래프(in DMSO, 400MHz)를 도 6에 나타내었다.

[326] 화합물 5: $m/z=600.20$ ($C_{42}H_{25}BN_2O_2$)

[327] 수율=7.1g(74.3%), 순도=99.2%

[328] 합성예 8.

[329]



[중간체 1]

[중간체 9]

[화합물 6]

[330]

상기 합성에 1에서 디페닐아민 대신 상기 N-페닐디벤조[b,d]티오펜-4-아민[N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-4-amine]과 N-페닐디벤조[b,d]티오펜-2-아민[N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-2-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 방법으로 화합물 6을 합성하였다. 화합물 6의 ¹H-NMR 측정 그래프(in DMSO, 400MHz)를 도 7에 나타내었다.

[331]

화합물 6: m/z=632.16 (C₄₂H₂₅BN₂S₂)

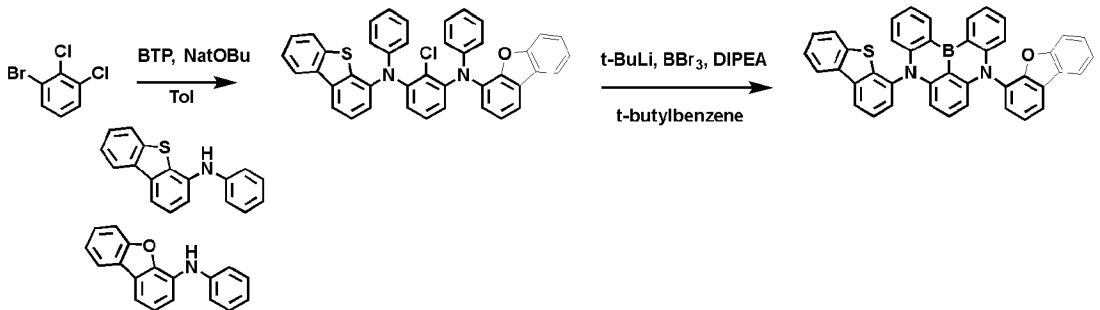
[332]

수율=7.1g(78.3%), 순도=99.4%

[333]

합성에 9.

[334]



[중간체 1]

[중간체 10]

[화합물 7]

[335]

상기 합성에 1에서 디페닐아민 대신 상기 N-페닐디벤조[b,d]티오펜-4-아민[N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-4-amine]과 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-4-아민[N-phenyldibenzo[b,d]furan-4-amine]을 사용한 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 방법으로 화합물 7을 합성하였다. 화합물 7의 ¹H-NMR 측정 그래프(in DMSO, 400MHz)를 도 8에 나타내었다.

[336]

화합물 7: m/z=616.18 (C₄₂H₂₅BN₂OS)

[337]

수율=7.1g(76.3%), 순도=99.2%

[338]

<실시예>

[339]

실시예 1.

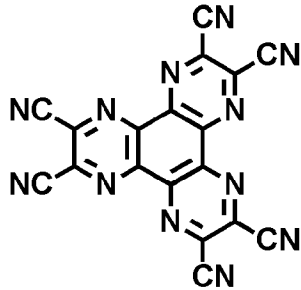
[340]

ITO(indium tin oxide)가 1,500Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로

걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알코올, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[341] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(HAT)을 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다.

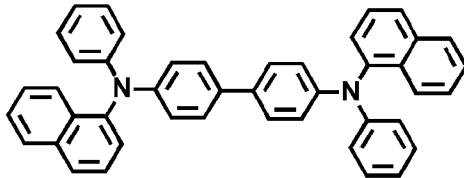
[342]



HAT

[343] 상기 정공주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400Å)를 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다.

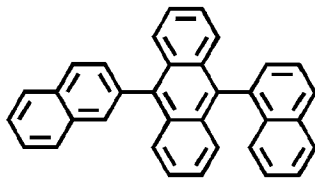
[344]



NPB

[345] 이어서, 상기 정공수송층 위에 발광층 호스트로 하기 화학식 BH1의 9-(나프탈렌-1-일)-10-(나프탈렌-2-일)안트라센(BH1)을 300Å의 두께로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

[346]

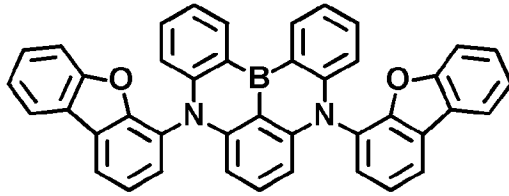


BH1

[347] 이때, 상기 발광층을 증착하면서 청색 발광 도판트로 하기 화합물 1을 발광층의 호스트 중량 대비 4중량% 사용하였다.

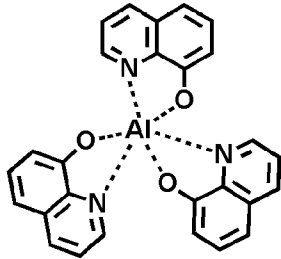
[348] [화합물 1]

[349]



[350] 상기 발광층 위에 하기 화학식의 Alq₃(알루미늄 트리스(8-히드록시퀴놀린))를 200Å의 두께로 진공 증착하여 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층을 형성하였다.

[351]

Alq₃

[352] 상기 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬 플루오라이드(LiF)와 2,000Å두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

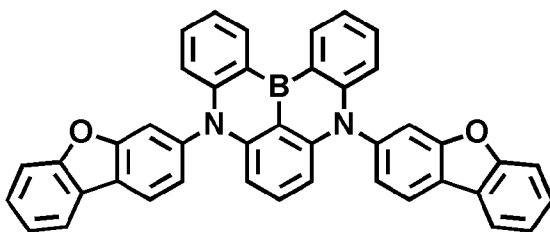
[353] 상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10⁻⁸ ~ 5×10⁻⁷ torr를 유지하였다.

[354] 실시예 2.

[355] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[356] [화합물 2]

[357]

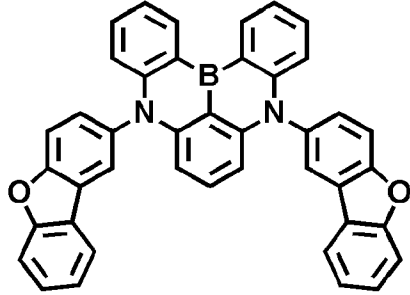


[358] 실시예 3.

[359] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 3을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[360] [화합물 3]

[361]

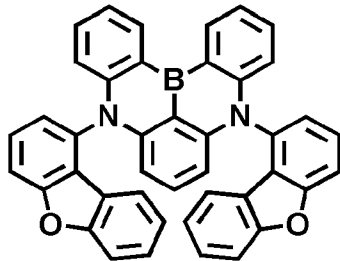


[362] 실시예 4.

[363] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[364] [화합물 4]

[365]

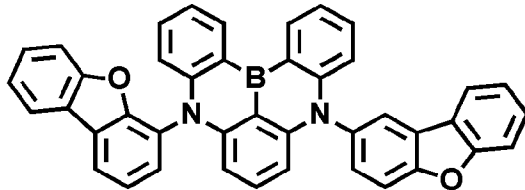


[366] 실시예 5.

[367] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[368] [화합물 5]

[369]

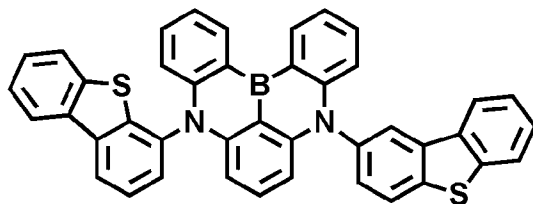


[370] 실시예 6.

[371] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 6을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[372] [화합물 6]

[373]

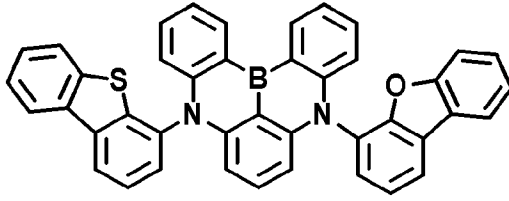


[374] 실시예 7.

[375] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 7을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[376] [화합물 7]

[377]

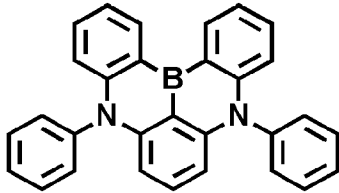


[378] **비교예 1.**

[379] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 A를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[380] [화합물 A]

[381]

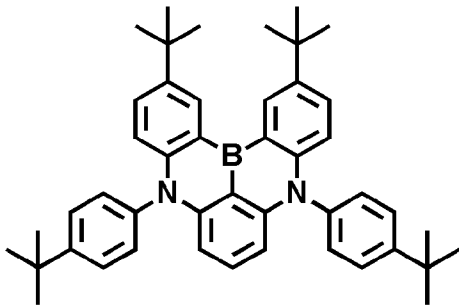


[382] **비교예 2.**

[383] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[384] [화합물 B]

[385]

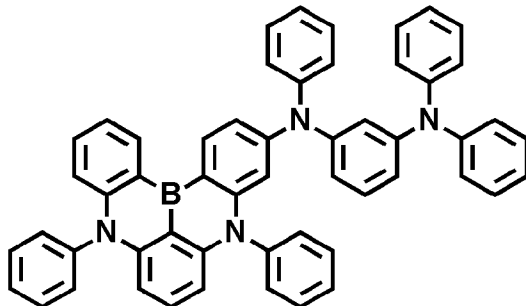


[386] **비교예 3.**

[387] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[388] [화합물 C]

[389]

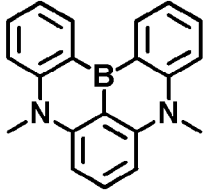


[390] **비교예 4.**

[391] 상기 실시예 1에서, 청색 발광 도펀트로서, 화합물 1 대신 하기 화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 소자를 제조하였다.

[392] [화합물 D]

[393]



[394] 상기 실시예 1 내지 7 및 비교예 1 내지 4에서 제조한 유기발광소자의 소자 성능을 측정한 결과를 하기 표 1에 나타내었다. T97은 휘도가 초기 휘도에서 97%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

[395] [표1]

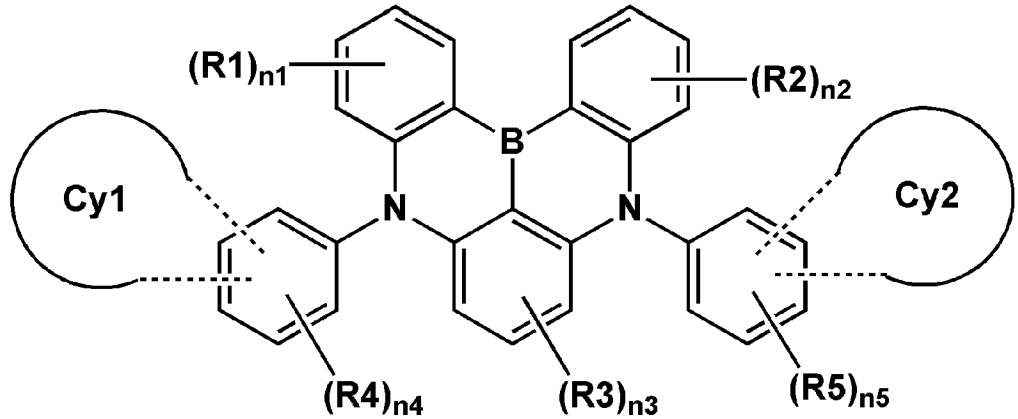
구분	Dopant	전압(eV)	효율(Cd/A)	수명(T97)
비교예 1	화합물 A	7.22	4.21	80
비교예 2	화합물 B	7.29	4.32	85
비교예 3	화합물 C	7.25	4.44	60
비교예 4	화합물 D	7.19	4.15	90
실시예 1	화합물 1	7.24	4.88	100
실시예 2	화합물 2	7.26	4.52	110
실시예 3	화합물 3	7.26	4.66	110
실시예 4	화합물 4	7.24	4.98	120
실시예 5	화합물 5	7.25	4.71	115
실시예 6	화합물 6	7.27	4.88	105
실시예 7	화합물 7	7.26	4.93	125

[396] 상기 표 1로부터, 본원 화합물을 사용한 실시예 1 내지 7이 비교예 1 내지 4 보다 전류효율 및 소자의 수명 특성이 우수한 것을 확인할 수 있다.

[397] 구체적으로, 본원 화학식 1과 같이, 질소원자에 결합된 페닐기에 헤테로고리인 Cy1와 Cy2가 축합되어 있는 화합물을 사용한 실시예 1 내지 7의 전류효율 및 수명 특성이, Cy1 및 Cy2가 축합되어 있지 않은 화합물을 사용한 비교예 1 내지 3과 코어구조의 질소원자에 메틸기가 결합되어 있는 화합물을 사용한 비교예 4의 전류효율 및 수명 특성보다 우수하다. 이상을 통해, 본 명세서의 바람직한 실시예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속한다.

청구범위

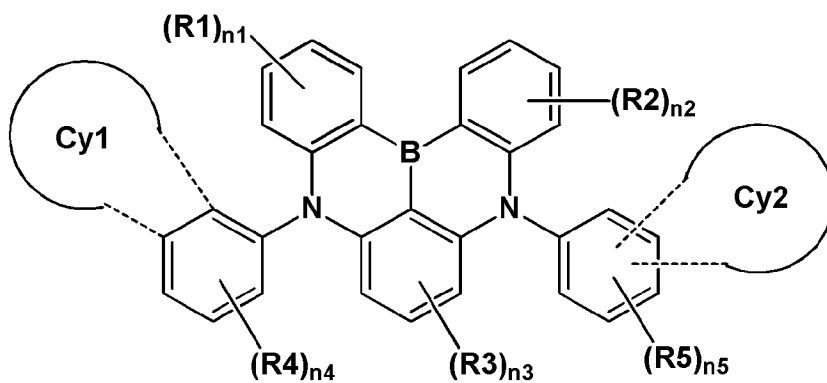
[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:
[화학식 1]



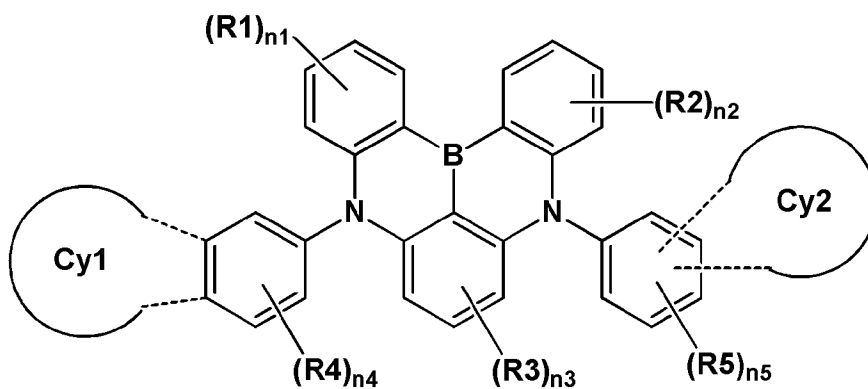
상기 화학식 1에 있어서,
Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리이며,
R1 내지 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
n1 및 n2는 각각 0 내지 4의 정수이며,
n3 내지 n5는 각각 0 내지 3의 정수이고,
n1 내지 n5가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서,
Cy1 및 Cy2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 2환의 헤테로고리인 화합물.

[청구항 3] 청구항 1에 있어서,
상기 화학식 1은 하기 화학식 1-a 또는 1-b로 표시되는 화합물:
[화학식 1-a]



[화학식 1-b]



상기 화학식 1-a 및 1-b에 있어서,

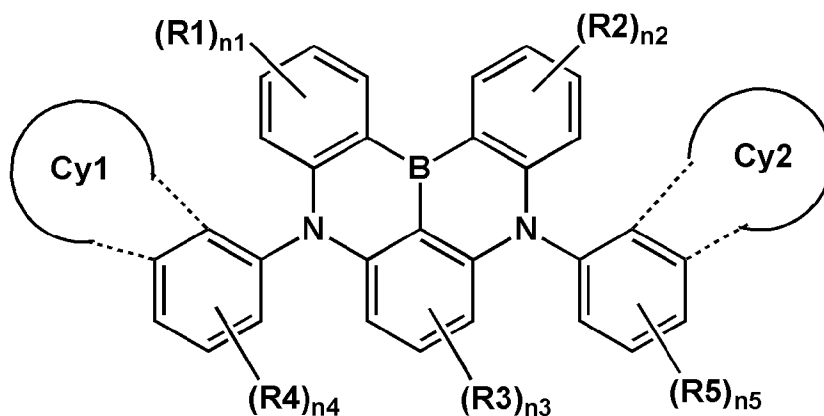
Cy1, Cy2, R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

[청구항 4]

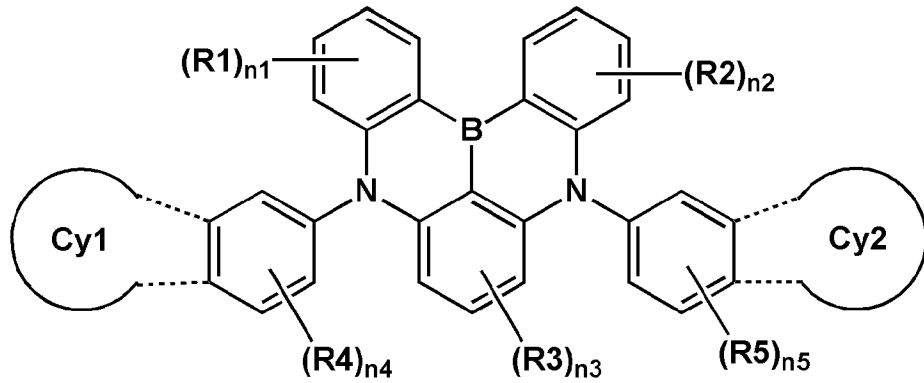
청구항 1에 있어서,

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

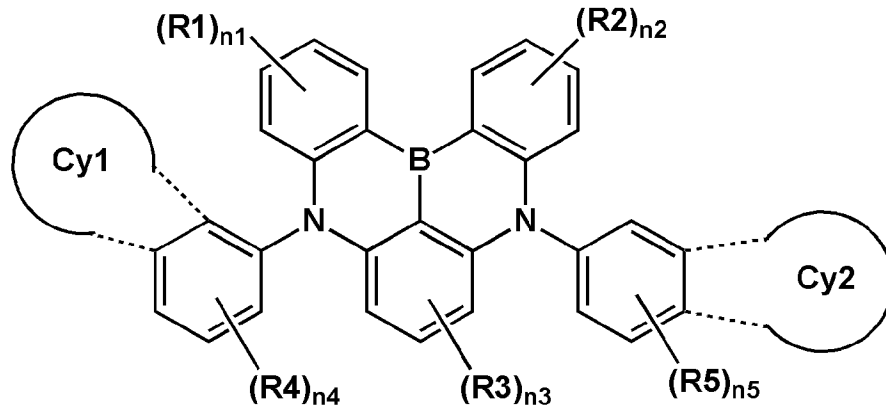
[화학식 2]



[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 2 내지 4에 있어서,

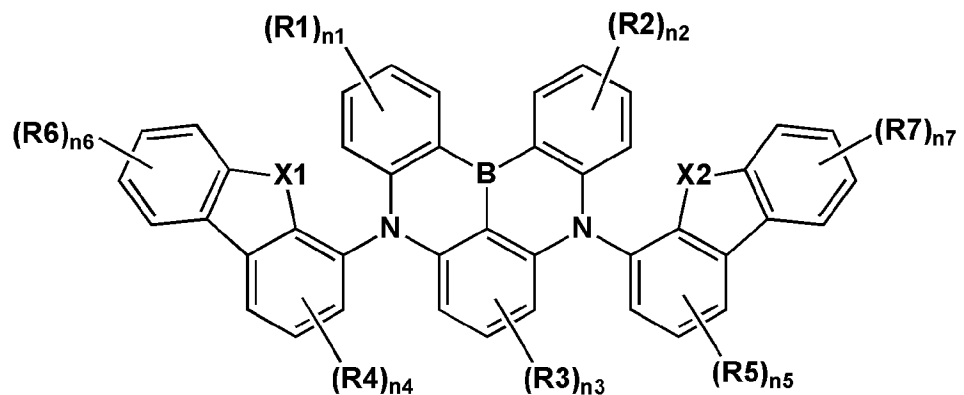
Cy1, Cy2, R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

[청구항 5]

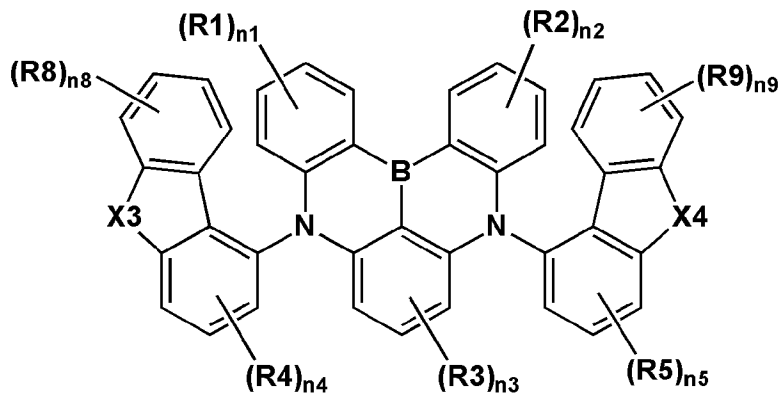
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 5 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

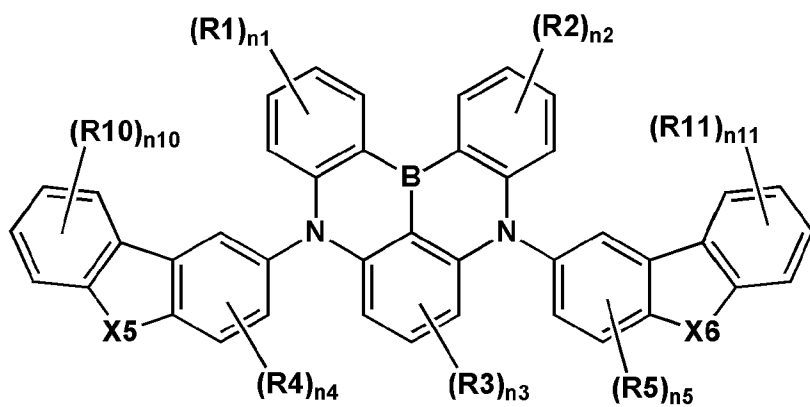
[화학식 5]



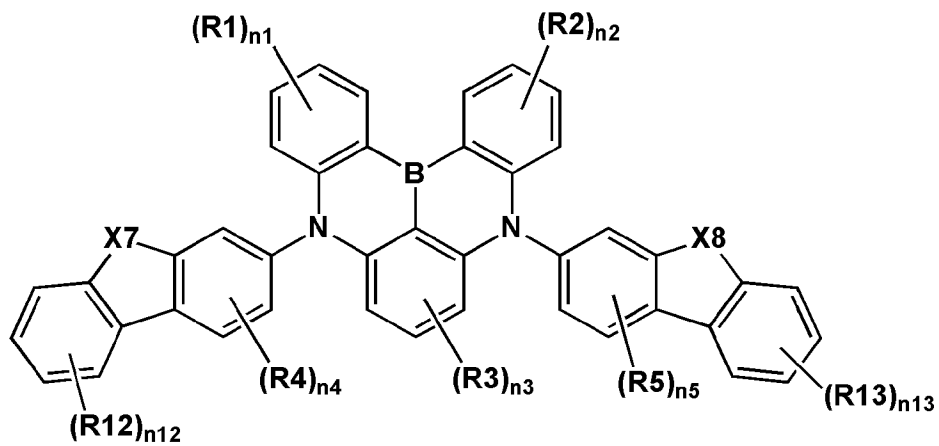
[화학식 6]



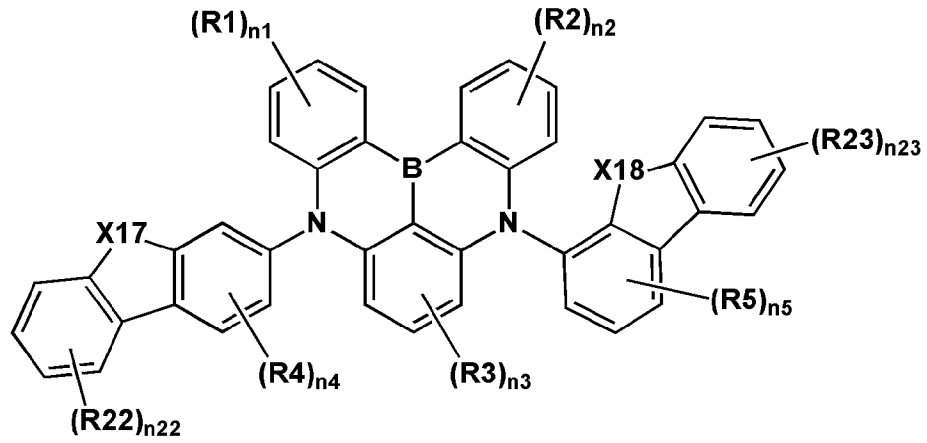
[화학식 7]



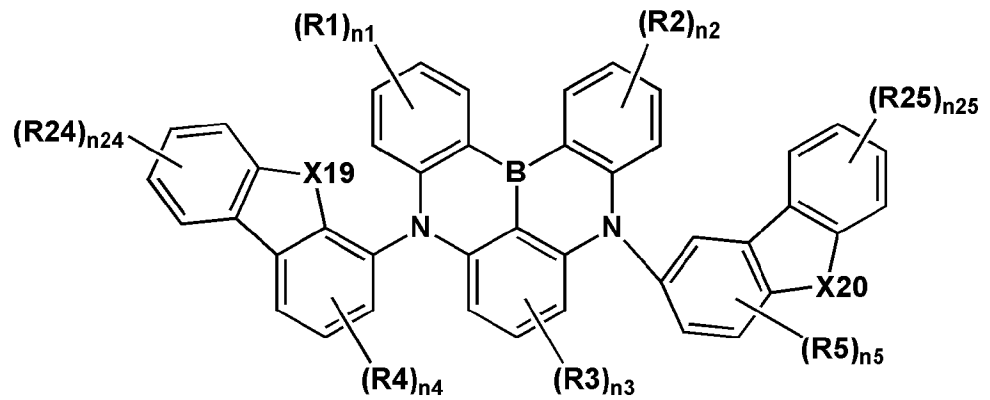
[화학식 8]



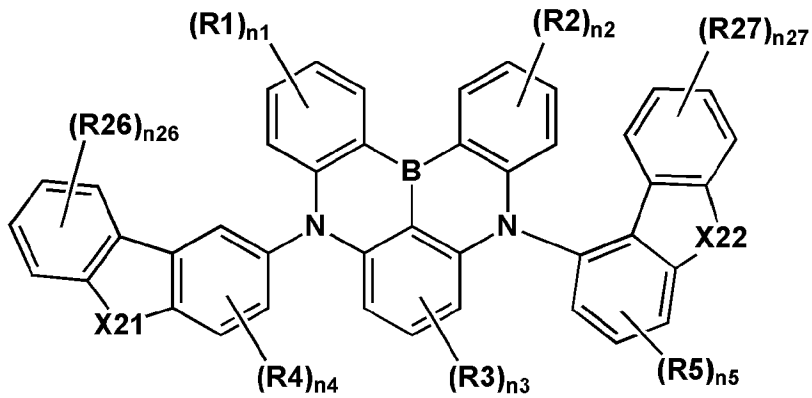
[화학식 9]



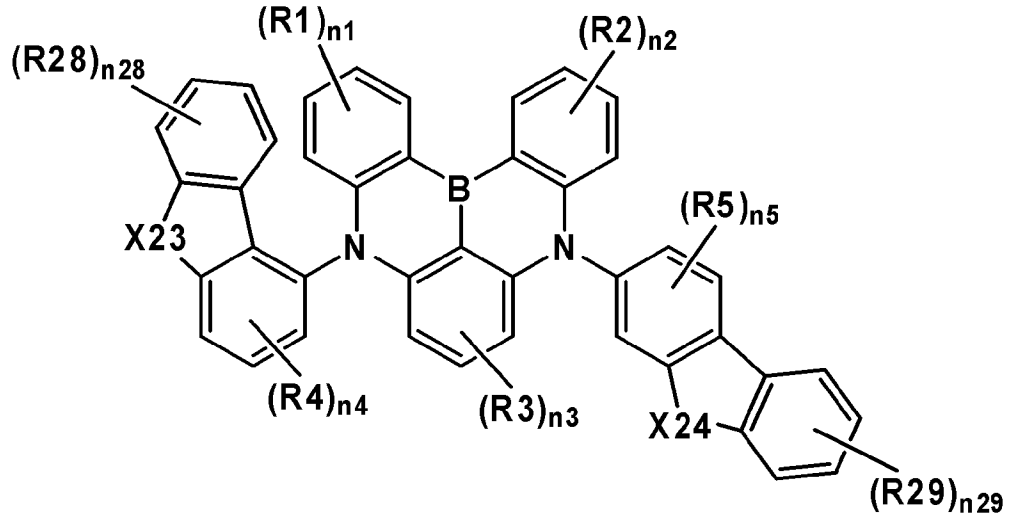
[화학식 10]



[화학식 11]



[화학식 12]



상기 화학식 5 내지 12에 있어서,

R1 내지 R5 및 n1 내지 n5의 정의는 상기 화학식 1에서와 같고,
X1 내지 X8 및 X17 내지 X24는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S 또는 NR이며,

R, R6 내지 R13 및 R22 내지 R29는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미르기; 아미노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

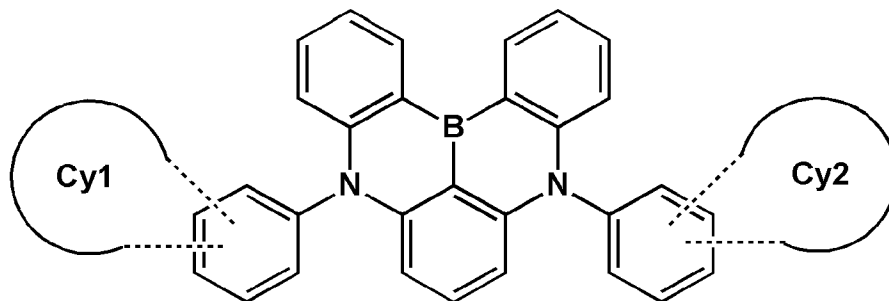
n6 내지 n13 및 n22 내지 n29는 각각 0 내지 4의 정수이며, n6 내지 n13 및 n22 내지 n29가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 6]

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 화합물:

[화학식 1-1]



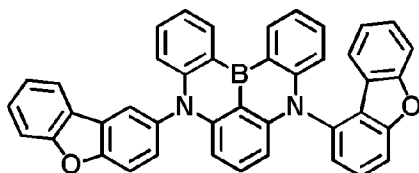
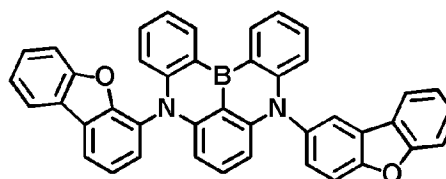
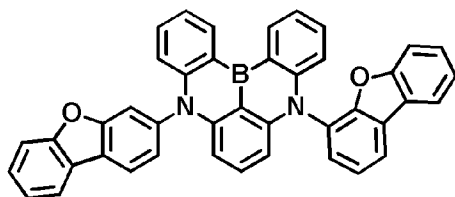
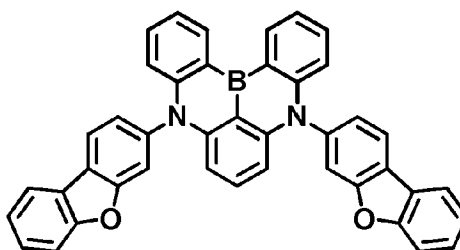
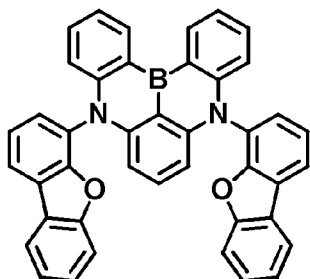
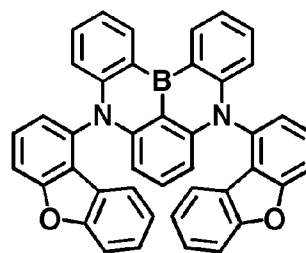
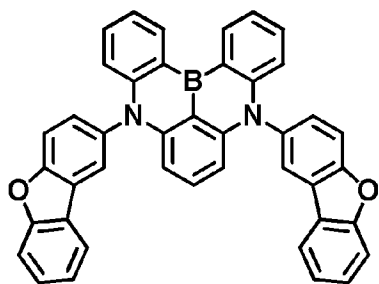
상기 화학식 1-1에 있어서,

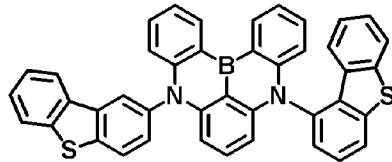
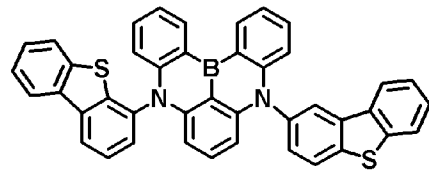
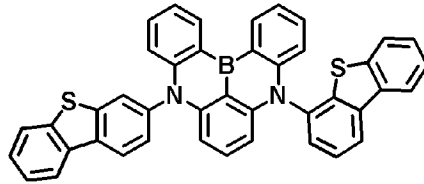
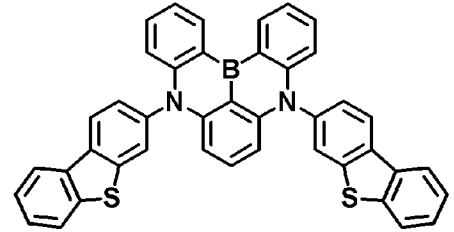
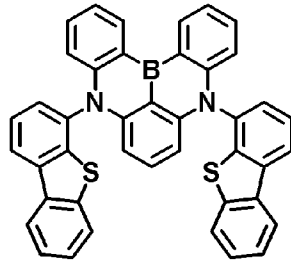
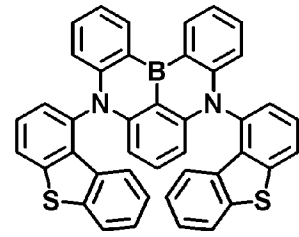
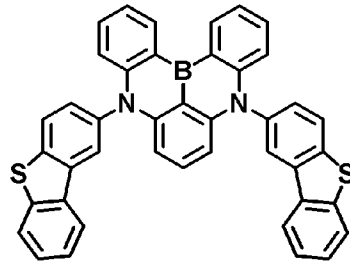
Cy1 및 Cy2의 정의는 상기 화학식 1에서와 같다.

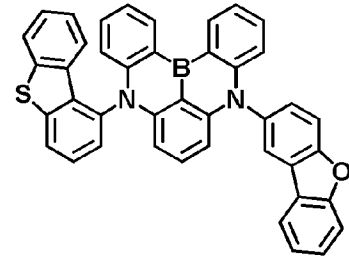
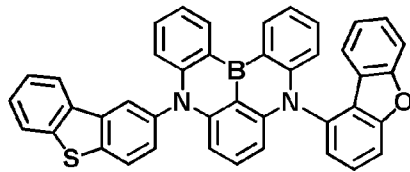
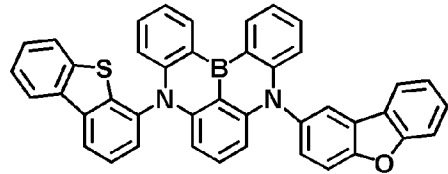
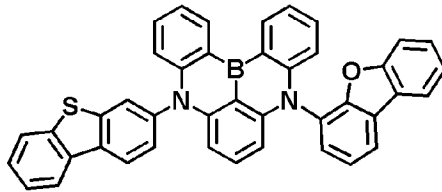
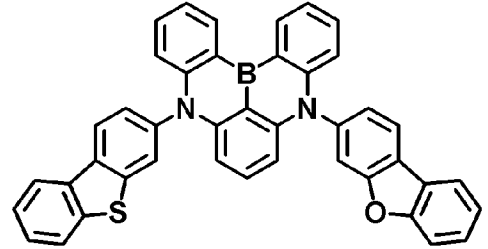
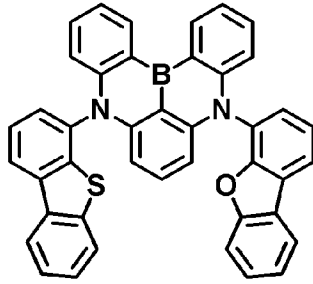
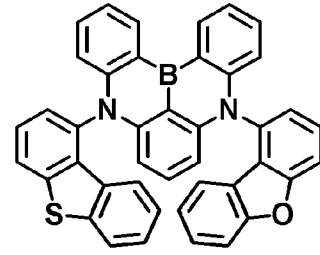
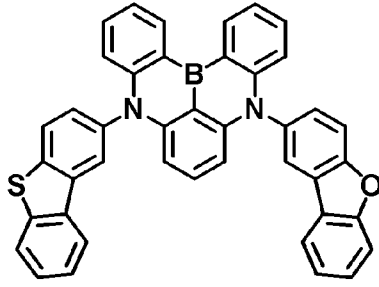
[청구항 7]

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 화합물:







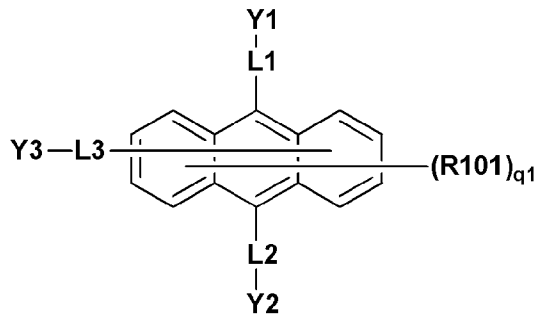
- [청구항 8] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 청구항 1 내지 7 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.
- [청구항 9] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층은 상기 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.
- [청구항 10] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.
- [청구항 11] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을

포함하는 유기 발광 소자.

[청구항 12] 청구항 8에 있어서,
상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 도펀트로 포함하는 유기 발광 소자.

[청구항 13] 청구항 12에 있어서,
상기 발광층은 호스트로서 하기 화학식 1-A로 표시되는 화합물을 더 포함하는 유기 발광 소자:

[화학식 1-A]



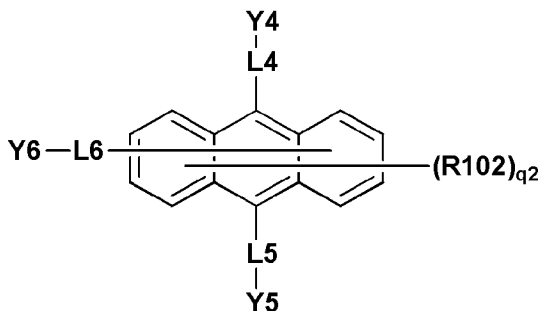
상기 화학식 1-A에 있어서,

Y1 내지 Y3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
L1 내지 L3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,
R101은 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

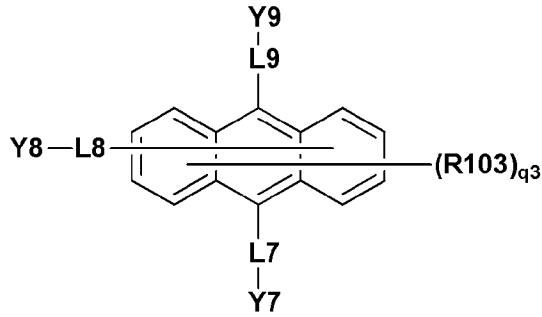
q1은 0 내지 7의 정수이며, q1이 2 이상인 경우 2 이상의 R101은 서로 같거나 상이하다.

[청구항 14] 청구항 12에 있어서,
상기 발광층은 호스트로서 하기 화학식 1-B 및 화학식 1-C로 표시되는 화합물 중 2 이상을 더 포함하는 유기 발광 소자:

[화학식 1-B]



[화학식 1-C]



상기 화학식 1-B 및 1-C에 있어서,
 Y4 내지 Y8은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이고,
 Y9는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
 L4 내지 L9는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,
 R102 및 R103은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
 q2 및 q3은 각각 0 내지 7의 정수이고, q2 및 q3가 각각 2 이상인 경우 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

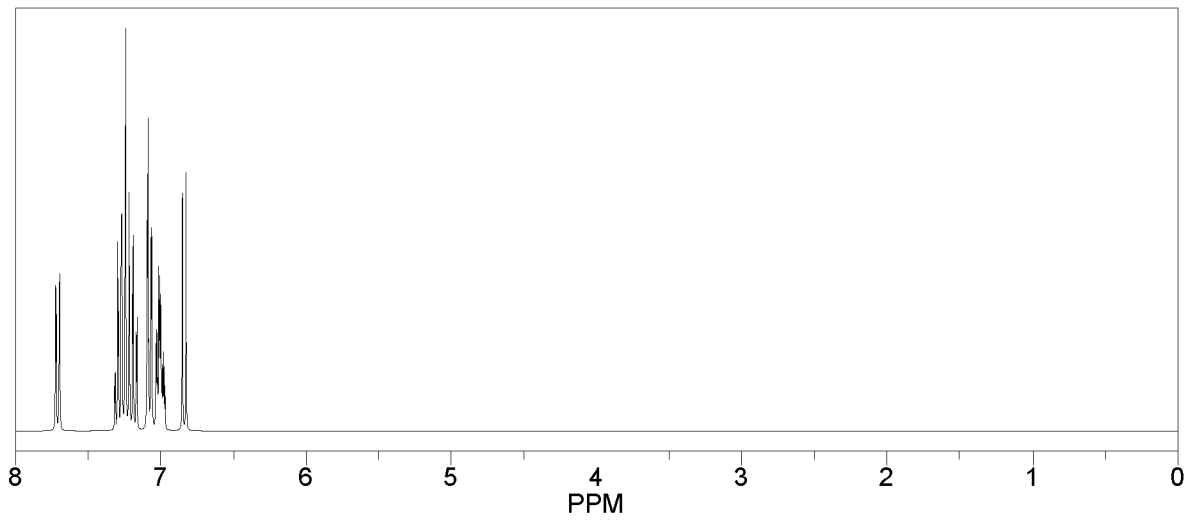
[도1]

4
3
2
1

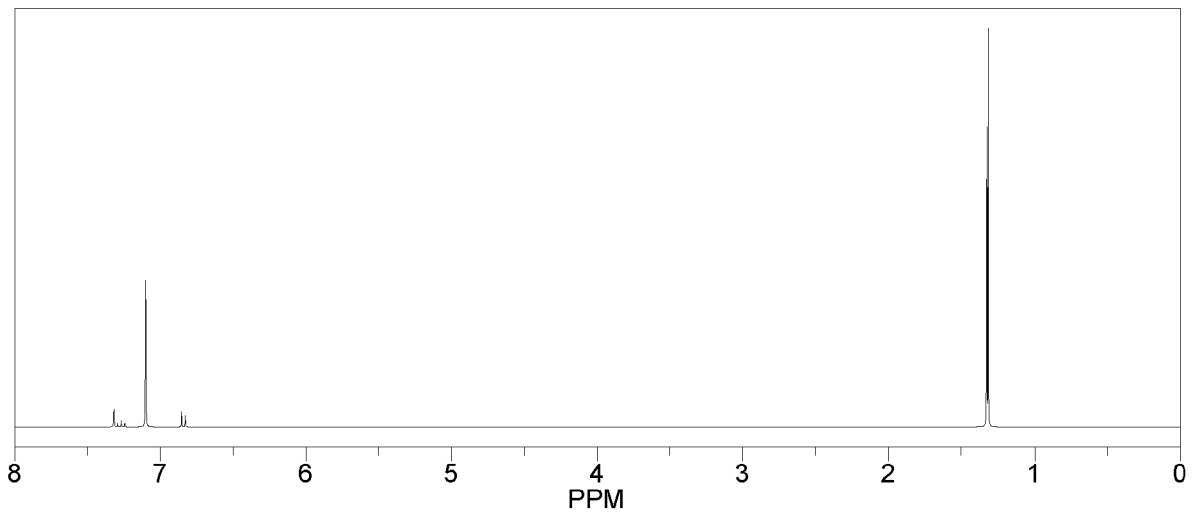
[도2]

4
8
7
6
5
2
1

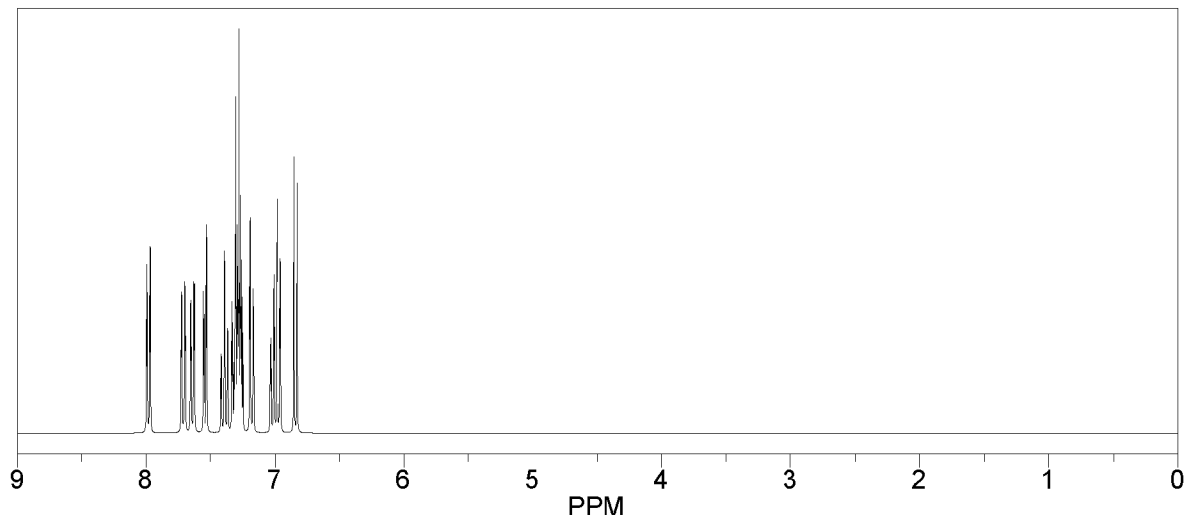
[도3]



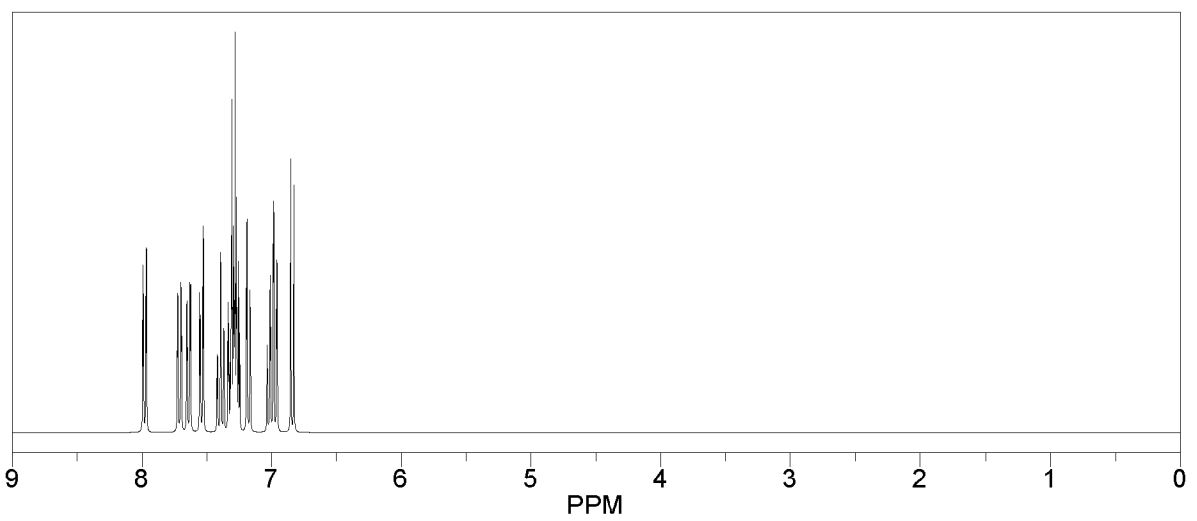
[도4]



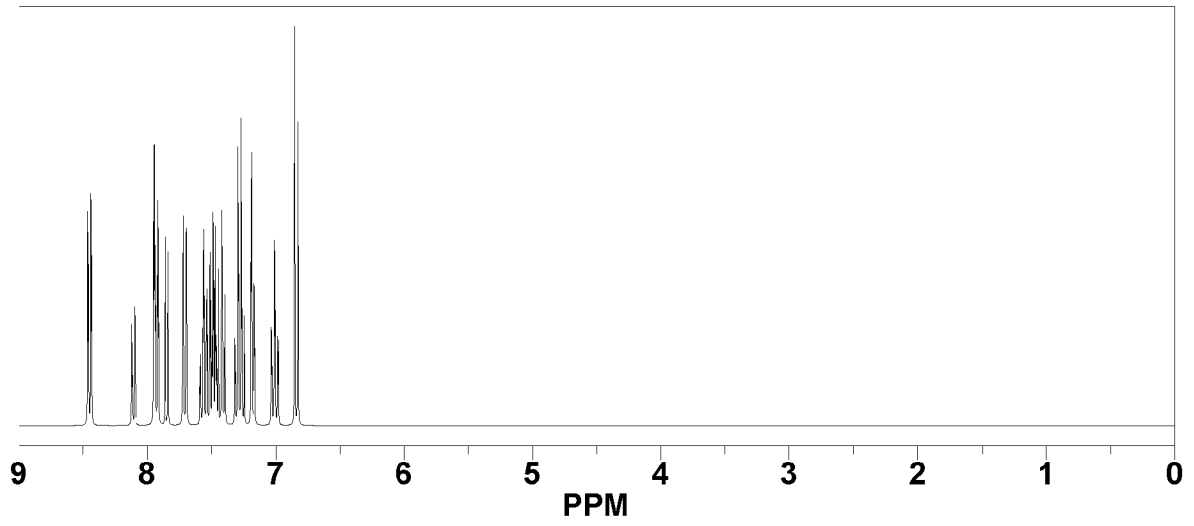
[도5]



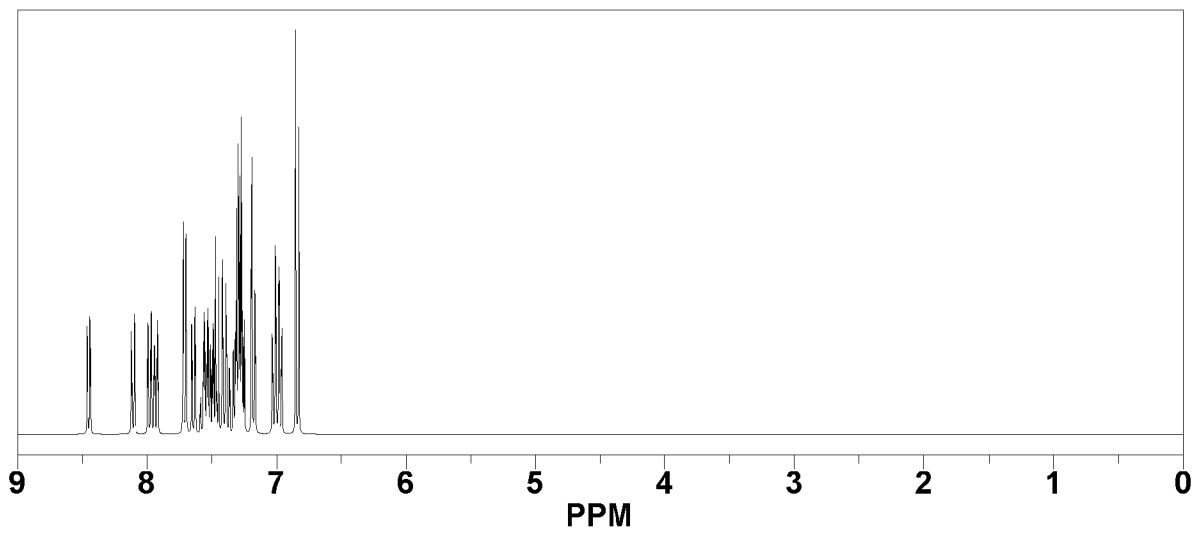
[도6]



[도7]



[도8]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/007704

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

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

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

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

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: OLED, boron

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2017-0130434 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 28 November 2017 See abstract; paragraph [0233]; pages 21, 35; and claims 1-9.	1-14
X	WO 2016-152418 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION et al.) 29 September 2016 See abstract; and claims 1-32.	1-12
A	GAO, Y. et al. Realizing performance improvement of blue thermally activated delayed fluorescence molecule DABNA by introducing substituents on the para-position of boron atom. Chemical Physics Letters. 2018, vol. 70, pages 98-102, [electronic publication] 17 April 2018 See the entire document.	1-14
PX	KR 10-1876763 B1 (MATERIAL SCIENCE CO., LTD.) 11 July 2018 See abstract; compound 279; and claims 1-9.	1-12



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

27 SEPTEMBER 2019 (27.09.2019)

Date of mailing of the international search report

01 OCTOBER 2019 (01.10.2019)

Name and mailing address of the ISA/KR

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

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2019/007704

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2017-0130434 A	28/11/2017	CN 107851724 A	27/03/2018
		JP 2019-110305 A	04/07/2019
		JP 6526793 B2	05/06/2019
		JP W02016-152544 A1	15/02/2018
		TW 201703305 A	16/01/2017
		US 2018-0301629 A1	18/10/2018
		WO 2016-152544 A1	29/09/2016
KR 10-2017-0130435 A	28/11/2017	CN 107735879 A	23/02/2018
		JP W02016-152418 A1	22/02/2018
		TW 201638096 A	01/11/2016
		US 2018-0094000 A1	05/04/2018
		WO 2016-152418 A1	29/09/2016
WO 2016-152418 A1	29/09/2016	CN 107735879 A	23/02/2018
		JP W02016-152418 A1	22/02/2018
		KR 10-2017-0130435 A	28/11/2017
		TW 201638096 A	01/11/2016
		US 2018-0094000 A1	05/04/2018
KR 10-1876763 B1	11/07/2018	KR 10-1976556 B1	09/05/2019
		KR 10-2018-0127918 A	30/11/2018
		WO 2018-216990 A1	29/11/2018

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07F 5/02(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07F 5/02; C09K 11/06; F21Y 115/15; H01L 51/50; H01L 51/00

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

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부검색 시스템), STN (Registry, Caplus) & 키워드: 유기광소자 (OLED, luminescent), 보론 (boron)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2017-0130434 A (가코우 호정 관세이 가쿠잉 등) 2017.11.28 요약; 단락 [0233]; 페이지 21, 35; 및 청구항 1-9 참조.	1-14
X	WO 2016-152418 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION 등) 2016.09.29 요약; 및 청구항 1-32 참조.	1-12
A	GAO, Y. 등, "Realizing performance improvement of blue thermally activated delayed fluorescence molecule DABNA by introducing substituents on the para-position of boron atom", Chemical Physics Letters, 2018, 70권, 페이지 98-102, [전자공개] 2018.04.17 전문 참조.	1-14
PX	KR 10-1876763 B1 (머티어리얼사이언스 주식회사) 2018.07.11 요약; 화합물 279; 및 청구항 1-9 참조.	1-12

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 "A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 "T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 "D" 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌
 "E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후 "X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 "L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 "Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 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 " & " 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일 2019년 09월 27일 (27.09.2019)	국제조사보고서 발송일 2019년 10월 01일 (01.10.2019)
--	---

ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 권용경 전화번호 +82-42-481-3371
---	------------------------------------

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2017-0130434 A	2017/11/28	CN 107851724 A JP 2019-110305 A JP 6526793 B2 JP WO2016-152544 A1 TW 201703305 A US 2018-0301629 A1 WO 2016-152544 A1	2018/03/27 2019/07/04 2019/06/05 2018/02/15 2017/01/16 2018/10/18 2016/09/29
KR 10-2017-0130435 A	2017/11/28	CN 107735879 A JP WO2016-152418 A1 TW 201638096 A US 2018-0094000 A1 WO 2016-152418 A1	2018/02/23 2018/02/22 2016/11/01 2018/04/05 2016/09/29
WO 2016-152418 A1	2016/09/29	CN 107735879 A JP WO2016-152418 A1 KR 10-2017-0130435 A TW 201638096 A US 2018-0094000 A1	2018/02/23 2018/02/22 2017/11/28 2016/11/01 2018/04/05
KR 10-1876763 B1	2018/07/11	KR 10-1976556 B1 KR 10-2018-0127918 A WO 2018-216990 A1	2019/05/09 2018/11/30 2018/11/29