

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(43) 국제공개일
2020 년 7 월 16 일 (16.07.2020) **WIPO | PCT**

(10) 국제공개번호
WO 2020/145692 A1

- (51) 국제특허분류: *C07D 491/14* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01) FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2020/000404
- (22) 국제출원일: 2020 년 1 월 9 일 (09.01.2020) 공개:
- (25) 출원언어: 한국어 — 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2019-0002610 2019 년 1 월 9 일 (09.01.2019) KR
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (**LG CHEM, LTD.**) [KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR). 성균관대학교산학협력단 (**RESEARCH BUSINESS FOUNDATION SUNGKYUNKWAN UNIVERSITY**) [KR/KR]; 16419 경기도 수원시 장안구 서부로 2066, Gyeonggi-do (KR).
- (72) 발명자: 윤홍식 (**YOON, Hongsik**); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이준엽 (**LEE, Jun Yeob**); 13613 경기도 성남시 분당구 정자일로 55 105동 304호, Gyeonggi-do (KR). 이호중 (**LEE, Ho Jung**); 16419 경기도 수원시 장안구 서부로 2066, Gyeonggi-do (KR). 홍완표 (**HONG, Wanpyo**); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김명곤 (**KIM, MounG Gon**); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 정순성 (**CHUNG, Soon-Sung**); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워837 빌딩, 6층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI,

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

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

4
3
2
1

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

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

WO 2020/145692 A1

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 출원은 2019년 1월 9일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2019-0002610호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 출원은 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [3] 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 전기 에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 억제층, 전자 수송층, 전자 주입층 등으로 이루어 질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 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. 이때, 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

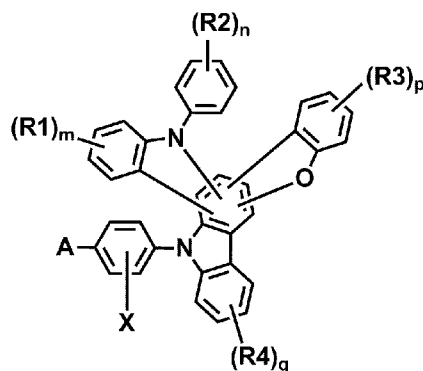
- [8] 본 출원은 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

과제 해결 수단

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

- [10] [화학식 1]

- [11]



- [12] 상기 화학식 1에 있어서,
 [13] A는 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기; 또는 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고,
 [14] X는 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알킬실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,
 [15] R1 내지 R4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 [16] m, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,
 [17] n은 0 내지 5의 정수이다.
 [18] 본 출원의 다른 실시상태는, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상이 전술한 화합물을 포함하는 유기 발광

소자를 제공한다.

발명의 효과

- [19] 본 출원의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다.
- [20] 본 출원의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하는 경우, 고효율, 저전압 및/또는 장수명 특성을 갖는 유기 발광 소자를 얻을 수 있다.
- [21] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 카바졸류를 포함하는 열활성 지연형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 물질에 카바졸류와 인접하게 벤젠을 도입하게 되면 벤젠이 donor/acceptor 중간에 linker로 작용하기 때문에 분자 내의 최고 점유 분자 궤도(HOMO)와 최저 공분자 궤도(LUMO)를 일부 혼재하여 안정성을 높이고, 양자 효율을 높이는 효과가 있다. 또한, 벤젠의 전환기를 조절하여 삼중항 에너지 준위 조절이 가능하며 이를 통해 삼중항 소광으로 인한 양자 효율 감소가 방지될 수 있고, 부가적으로 카바졸류와 벤젠과의 결합력을 조절하여 수명을 증가시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [22] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [23] 도 2는 기판(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 전자 저지층(7), 발광층(8), 정공 저지층(9), 전자 주입 및 수송층(10) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [24] 1: 기판
- [25] 2: 양극
- [26] 3: 발광층
- [27] 4: 음극
- [28] 5: 정공 주입층
- [29] 6: 정공 수송층
- [30] 7: 전자 저지층
- [31] 8: 발광층
- [32] 9: 정공 저지층
- [33] 10: 전자 주입 및 수송층

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [34] 이하 본 출원에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
- [35] 본 출원은 유기 발광 소자에 유리하게 사용될 수 있는 신규한 유기 화합물에 관한 것이다. 특히, 본 출원은 열활성 지연형광(TADF) 물질 및 이의 유기 발광 소자에서의 용도에 관한 것이다.
- [36] 삼중항 여기자로부터 일중항 여기자로의 역항간 교차(Reverse Intersystem

Crossing, RISC)를 이용한 현상(열 활성화형 지연형광 또는 열 여기형 지연형광, Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)을 이용한 형광 발광 재료와, 유기 발광 소자로의 이용 가능성이 보고되어 있다. 상기 TADF 재료에 의한 지연형광을 이용하면, 전계 여기에 의한 형광 발광에 있어서도, 이론적으로는 인광 발광과 동등한 100%의 내부 양자 효율이 가능하게 된다.

[37] TADF 현상을 발현시키기 위해서는, 실온 또는 유기 발광 소자 중의 발광층 온도에서 전계 여기에 의해 발생한 75%의 삼중항 여기자로부터 일중항 여기자로의 역항간 교차가 일어날 필요가 있다. 또한, 역항간 교차에 의해 발생한 일중항 여기자가, 직접 여기에 의해 발생한 25%의 일중항 여기자와 마찬가지로 형광 발광함으로써, 100%의 내부 양자 효율이 이론상 가능하게 된다. 상기 역항간 교차가 일어나기 위해서는, 최저 여기 일중항 에너지 준위(S1)와 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1)와의 차의 절대값(ΔE_{ST})이 작을 것이 요구된다.

[38] 예를 들어, TADF 현상을 발현시키기 위해서는 유기 화합물의 ΔE_{ST} 를 작게 하는 것이 유효하고, ΔE_{ST} 를 작게 하기 위해서는 분자 내의 최고 피점 분자 궤도(HOMO)와 최저 공분자 궤도(LUMO)를 혼재시키지 않고 국제화시키는 것(명확하게 분리하는 것)이 유효하다.

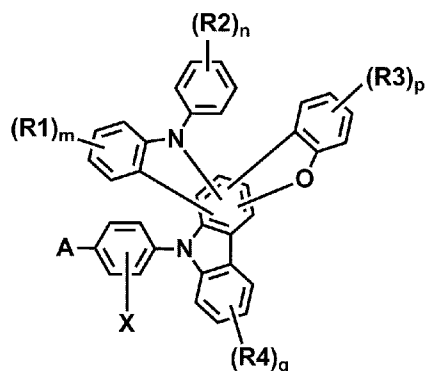
[39] 그러나, 분자 내의 최고 피점 분자 궤도(HOMO)와 최저 공분자 궤도(LUMO)를 혼재시키지 않고 국제화시키는 경우에는, 분자 내의 π 공액계가 축소 또는 절단되어 안정성과 양립시키는 것이 곤란해지고, 결과적으로는 유기 발광 소자의 수명을 단축시키게 된다.

[40] 따라서, 당 기술분야에서는 TADF 소자의 효율과 수명을 높이는 새로운 방법이 요구되고 있다.

[41] 본 출원의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[42] [화학식 1]

[43]



[44] 상기 화학식 1에 있어서,

[45] A는 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기; 또는 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고,

[46] X는 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알킬실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는

비치환된 헥테로아릴기이며,

[47] R1 내지 R4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헥테로아릴기이고,

[48] m, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[49] n은 0 내지 5의 정수이다.

[50] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 카바졸류를 포함하는 열활성 지연형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 물질에 카바졸류와 인접하게 벤젠이 도입된다. 이에 따라, 벤젠이 도너(donor)/억셉터(acceptor) 중간에 링커(linker)로 작용하기 때문에 분자 내의 최고 피점 분자 궤도(HOMO)와 최저 공분자 궤도(LUMO)를 일부 혼재하여 안정성을 높이고, 양자 효율을 높이는 효과를 나타낸다. 또한, 벤젠의 치환기(화학식 1의 X)를 조절하여 삼중항 에너지 준위 조절이 가능하며 이를 통해 삼중항 소광으로 인한 양자 효율 감소가 방지할 수 있고, 부가적으로 카바졸류와 벤젠과의 결합력을 조절하여 수명을 증가시킬 수 있다.

[51] 본 출원에 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.

[52] 본 출원에 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.

[53] 본 출원에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[54] 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.

[55] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소(-D); 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 실릴기; 붕소기; 알콕시기; 알킬기; 시클로알킬기; 아릴기; 및 헥테로고리기로 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.

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

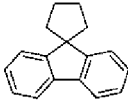
[57] 본 출원에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소(-F), 염소(-Cl), 브롬(-Br) 또는

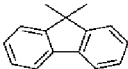
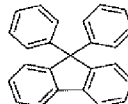
요오드(-I)가 있다.

- [58] 본 출원에 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.
- [59] 본 출원에 있어서, 알킬실릴기는 알킬기가 치환된 실릴기로서, 상기 실릴기에 대한 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [60] 본 출원에 있어서, 아릴실릴기는 아릴기가 치환된 실릴기로서, 상기 실릴기에 대한 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [61] 본 출원에 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 출원에 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 출원에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [64] 본 출원에 기재된 알킬기, 알콕시기 및 그 외 알킬기 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함한다.
- [65] 본 출원에 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.

[66] 본 출원에 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 39이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 퀴터페닐기 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.

[67] 본 출원에 있어서, 플루오렌기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

[68] 상기 플루오렌기가 치환되는 경우, ,  등의

스피로플루오렌기,  (9,9-디메틸플루오렌기), 및 

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

[69] 본 출원에 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 36이다. 헤테로고리기의 예로는 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 퀴놀린기, 피리다진기, 퓨란기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 카바졸기, 벤조카바졸기, 벤조나프토피란기, 벤조나프토티오펜기, 인데노카바졸기, 인돌로카바졸기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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

[71] 본 출원에 있어서, 아민기는 -NH₂; 모노알킬아민기; 모노아릴아민기; 디아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기; 모노헤테로아릴아민기 및 디헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 바이페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 디톨릴아민기, N-페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기, N-페닐바이페닐아민기; N-페닐나프틸아민기; N-바이페닐나프틸아민기; N-나프틸플루오레닐아민기; N-페닐페난트레닐아민기; N-바이페닐페난트레닐아민기; N-페닐플루오레닐아민기; N-페닐터페닐아민기; N-페난트레닐플루오레닐아민기; N-바이페닐플루오레닐아민기 등이 있으나,

이에 한정되는 것은 아니다.

[72] 본 출원에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기는 아민기의 N에 아릴기 및 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.

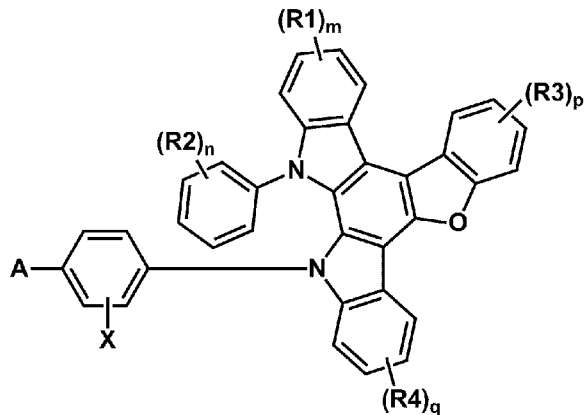
[73] 본 출원에 있어서, 모노아릴아민기; 디아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다.

[74] 본 출원에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기; 모노헤테로아릴아민기 및 디헤테로아릴아민기의 헤테로아릴기는 전술한 헤테로아릴기의 예시와 같다.

[75] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

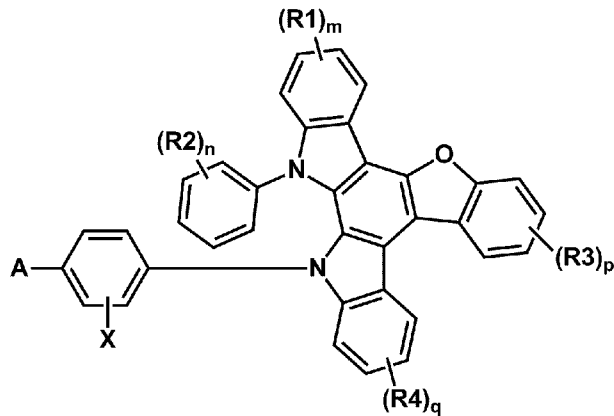
[76] [화학식 2]

[77]



[78] [화학식 3]

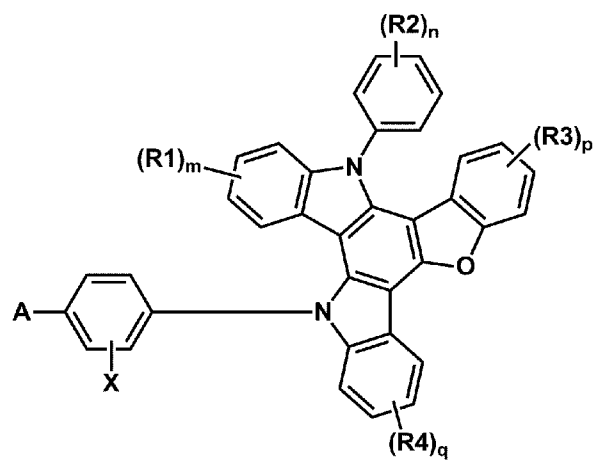
[79]



[80] [화학식 4]

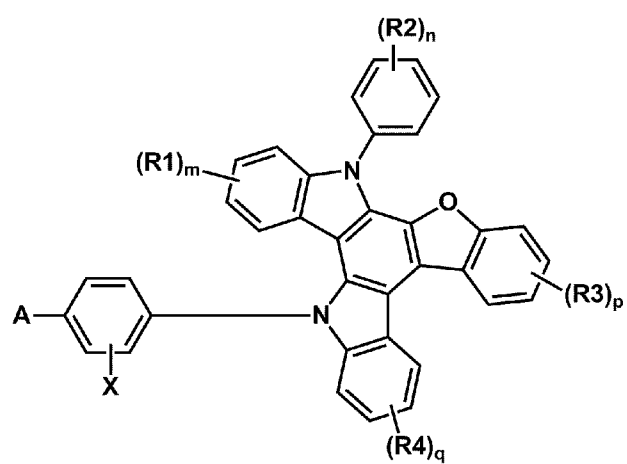
9

[81]



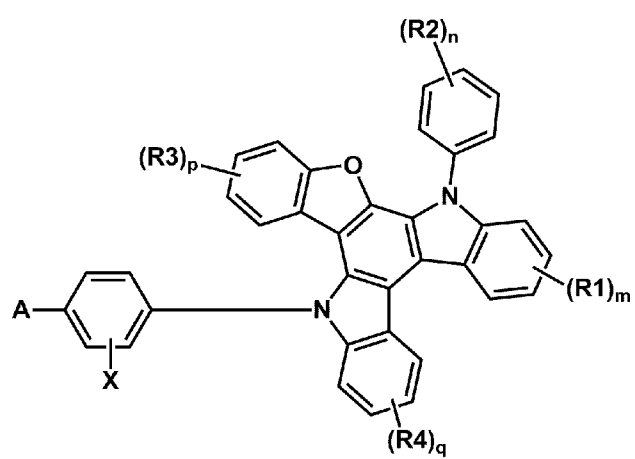
[82] [화학식 5]

[83]



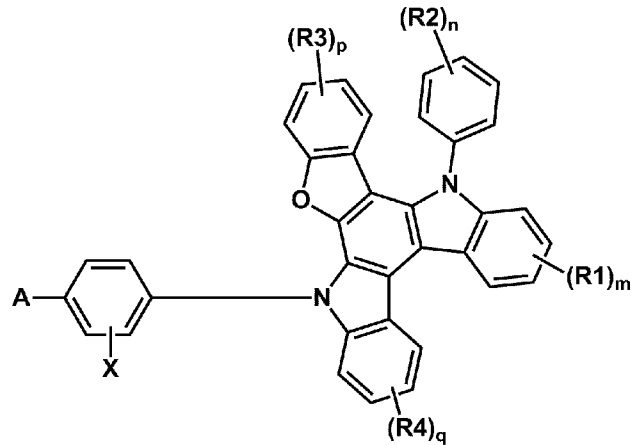
[84] [화학식 6]

[85]



[86] [화학식 7]

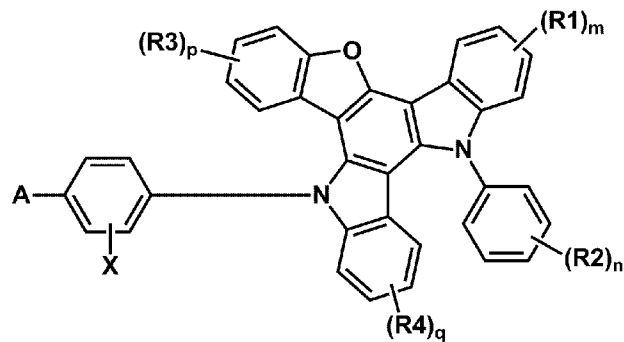
[87]



[88]

[화학식 8]

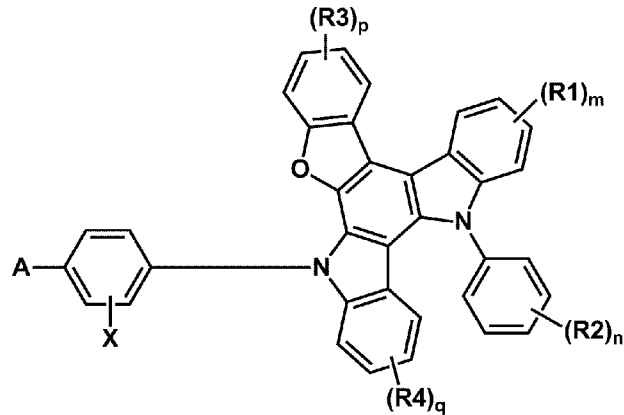
[89]



[90]

[화학식 9]

[91]



[92]

상기 화학식 2 내지 9에 있어서,

[93]

A, X, R1 내지 R4, m, n, p 및 q의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[94]

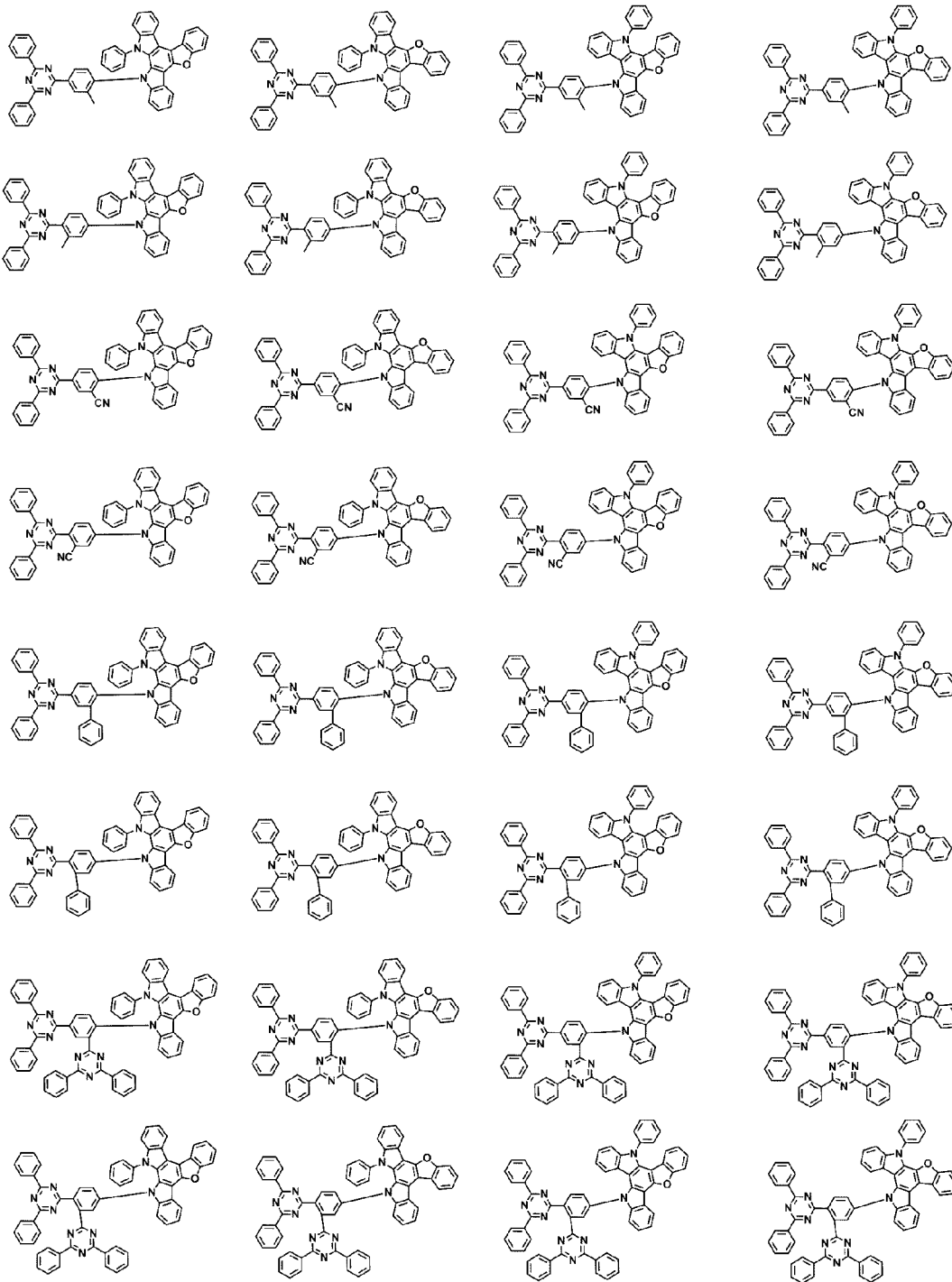
본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 A는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아진기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고, 이때, 상기 아릴기는 각각 독립적으로 중수소 또는 알킬기로 치환 또는 비치환될 수 있다.

[95]

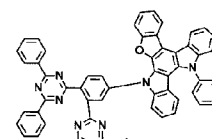
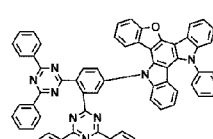
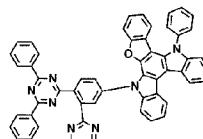
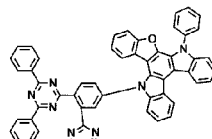
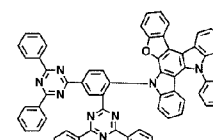
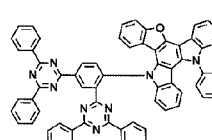
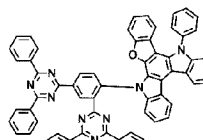
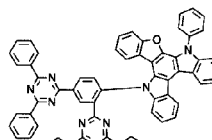
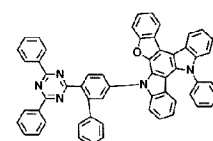
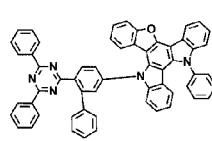
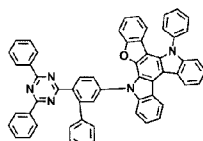
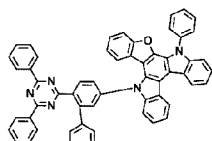
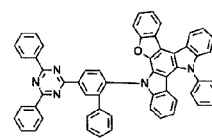
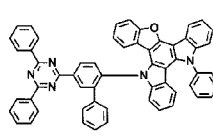
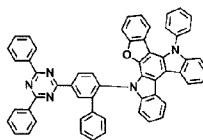
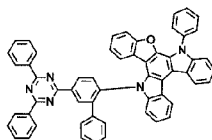
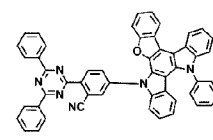
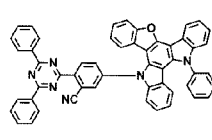
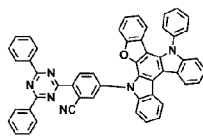
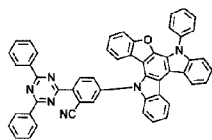
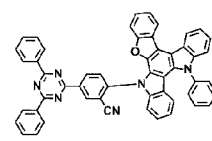
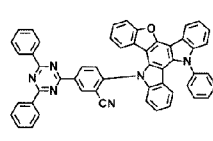
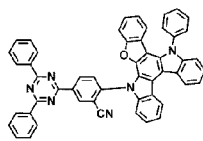
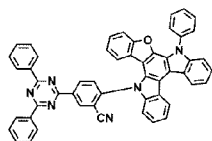
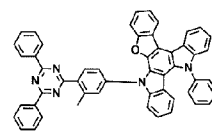
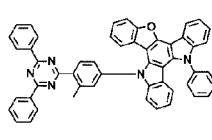
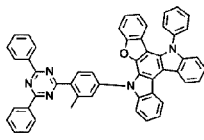
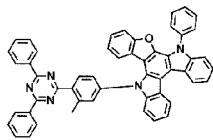
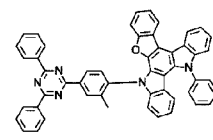
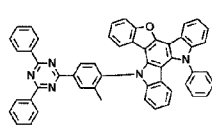
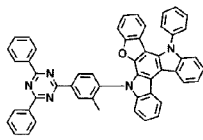
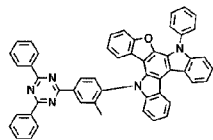
본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 A는 페닐기로 치환 또는 비치환된 트리아진기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고, 이때, 상기 페닐기는 각각 독립적으로 중수소 또는 메틸기로 치환 또는 비치환될 수 있다.

- [96] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 X는 시아노기; 알킬기; 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고, 이때 상기 아릴기는 각각 독립적으로 중수소 또는 알킬기로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [97] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 X는 시아노기; 메틸기; 페닐기; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 트리아진기이고, 이때 상기 페닐기는 각각 독립적으로 중수소 또는 메틸기로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [98] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R1 내지 R4는 각각 독립적으로 수소 또는 중수소일 수 있다.
- [99] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

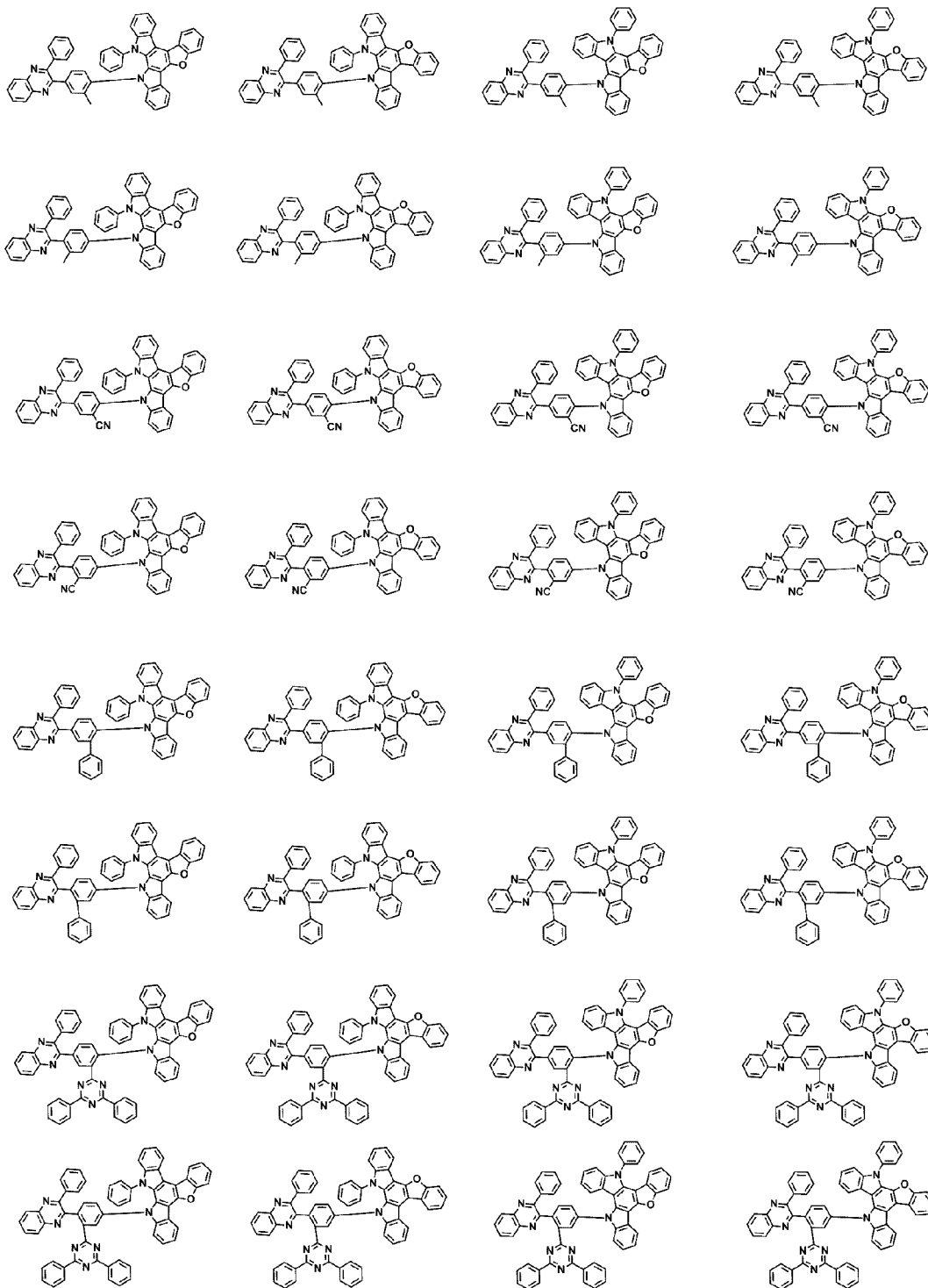
[100]



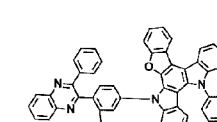
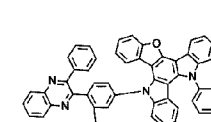
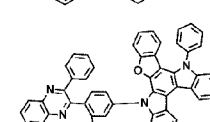
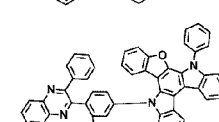
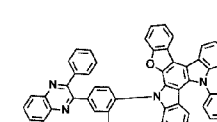
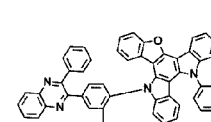
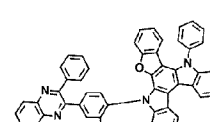
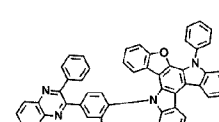
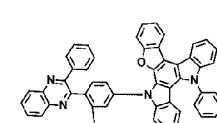
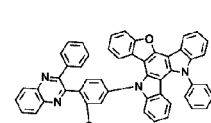
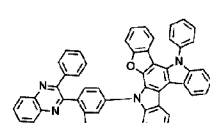
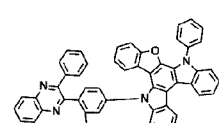
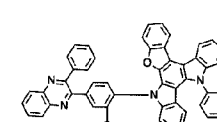
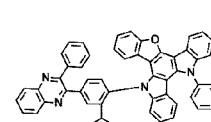
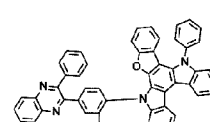
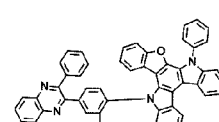
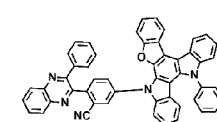
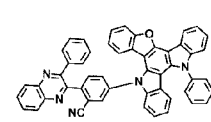
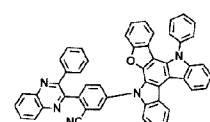
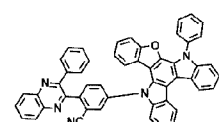
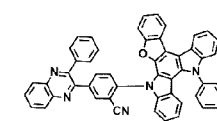
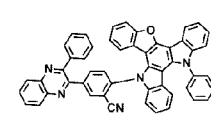
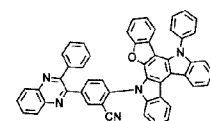
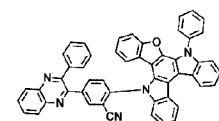
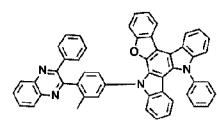
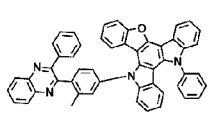
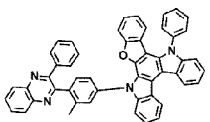
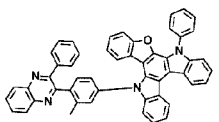
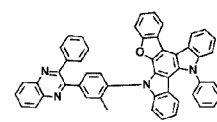
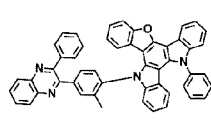
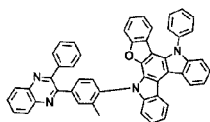
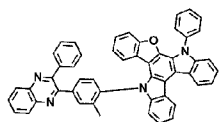
[101]



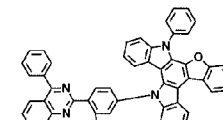
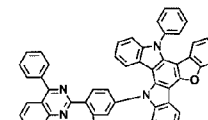
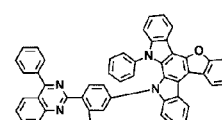
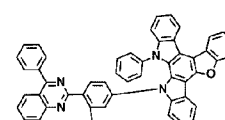
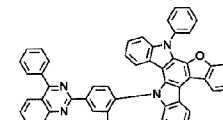
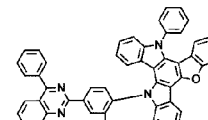
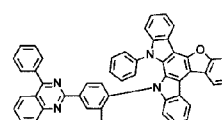
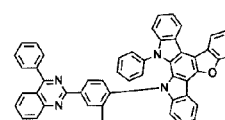
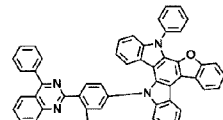
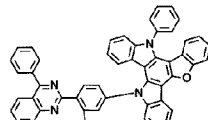
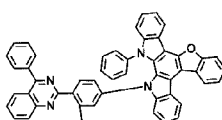
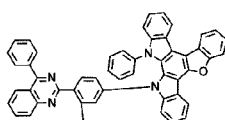
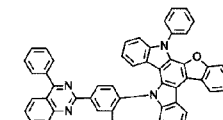
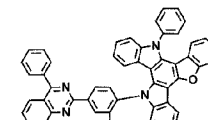
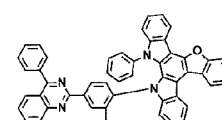
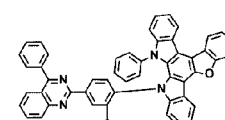
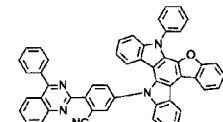
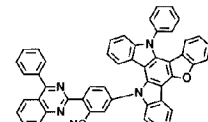
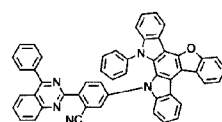
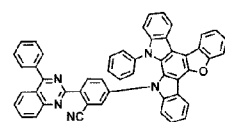
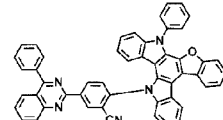
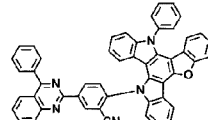
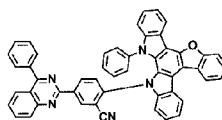
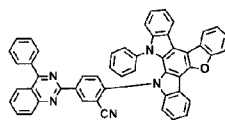
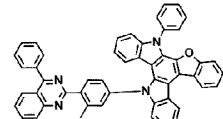
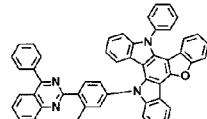
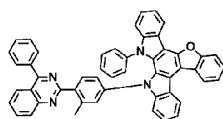
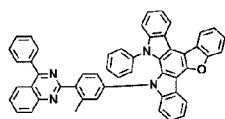
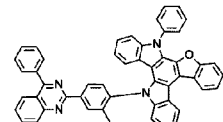
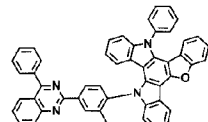
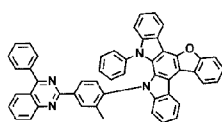
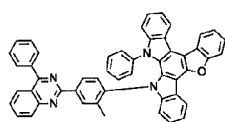
[102]



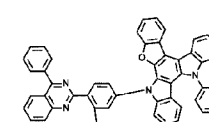
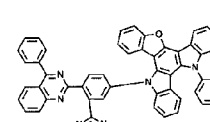
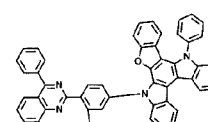
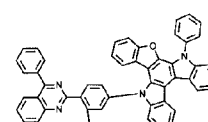
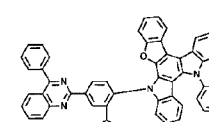
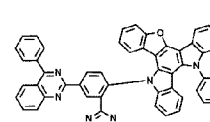
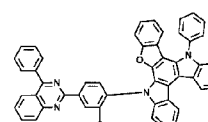
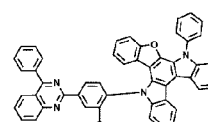
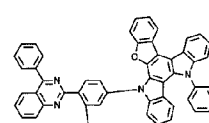
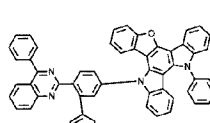
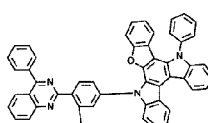
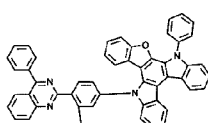
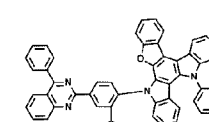
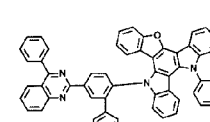
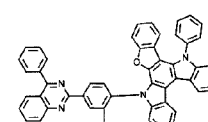
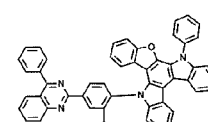
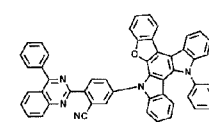
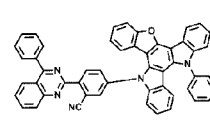
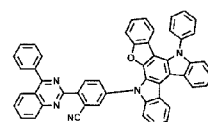
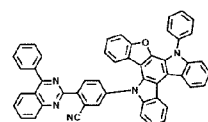
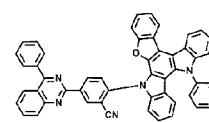
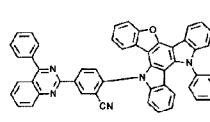
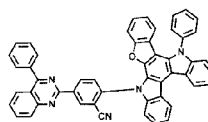
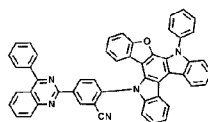
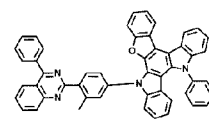
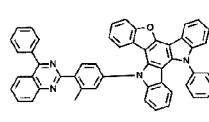
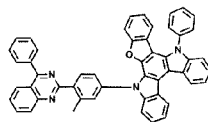
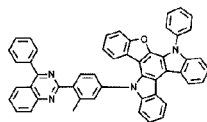
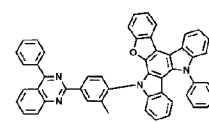
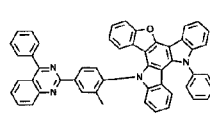
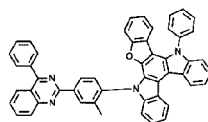
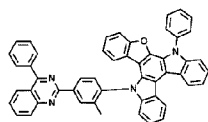
[103]



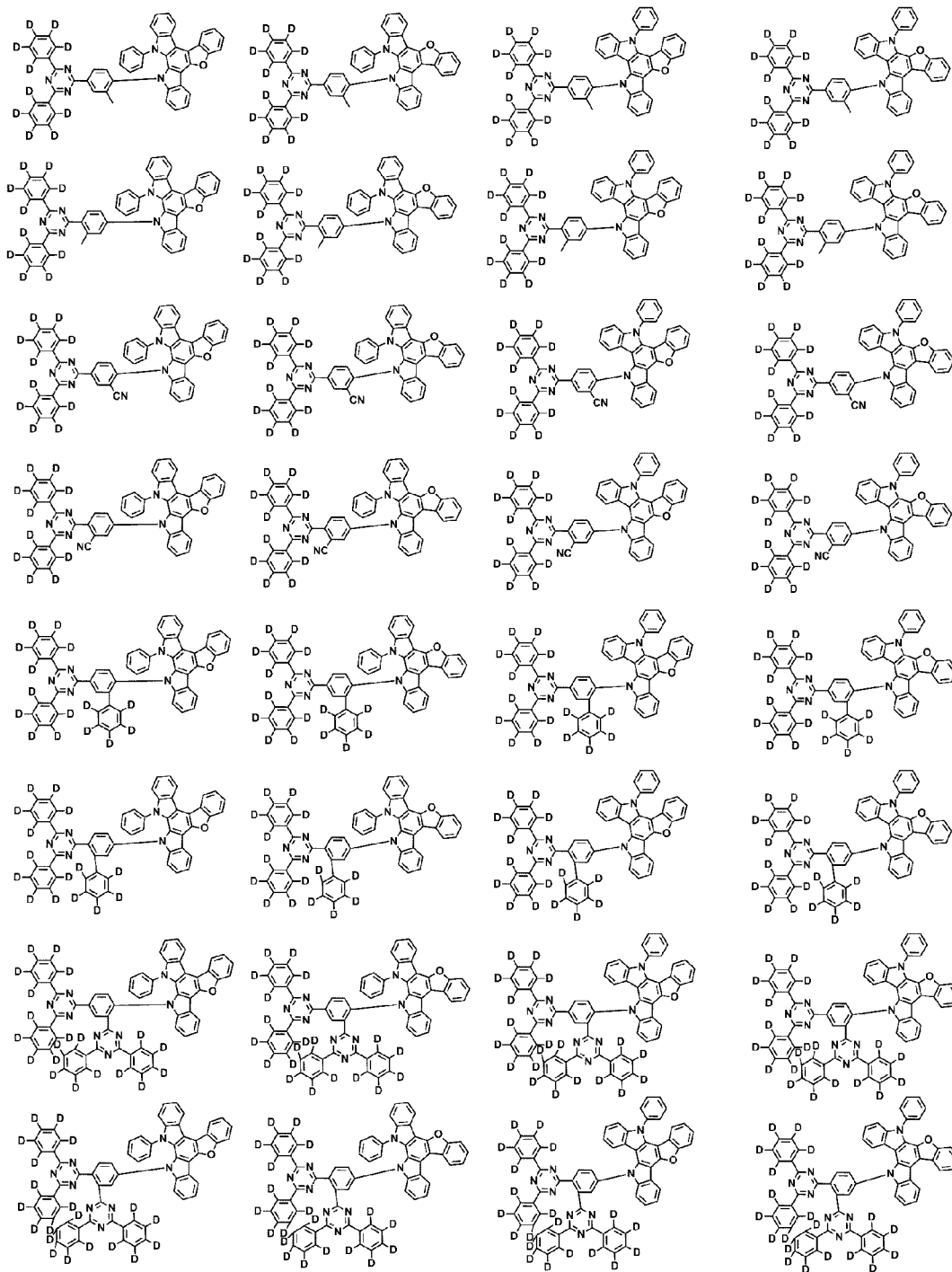
[104]



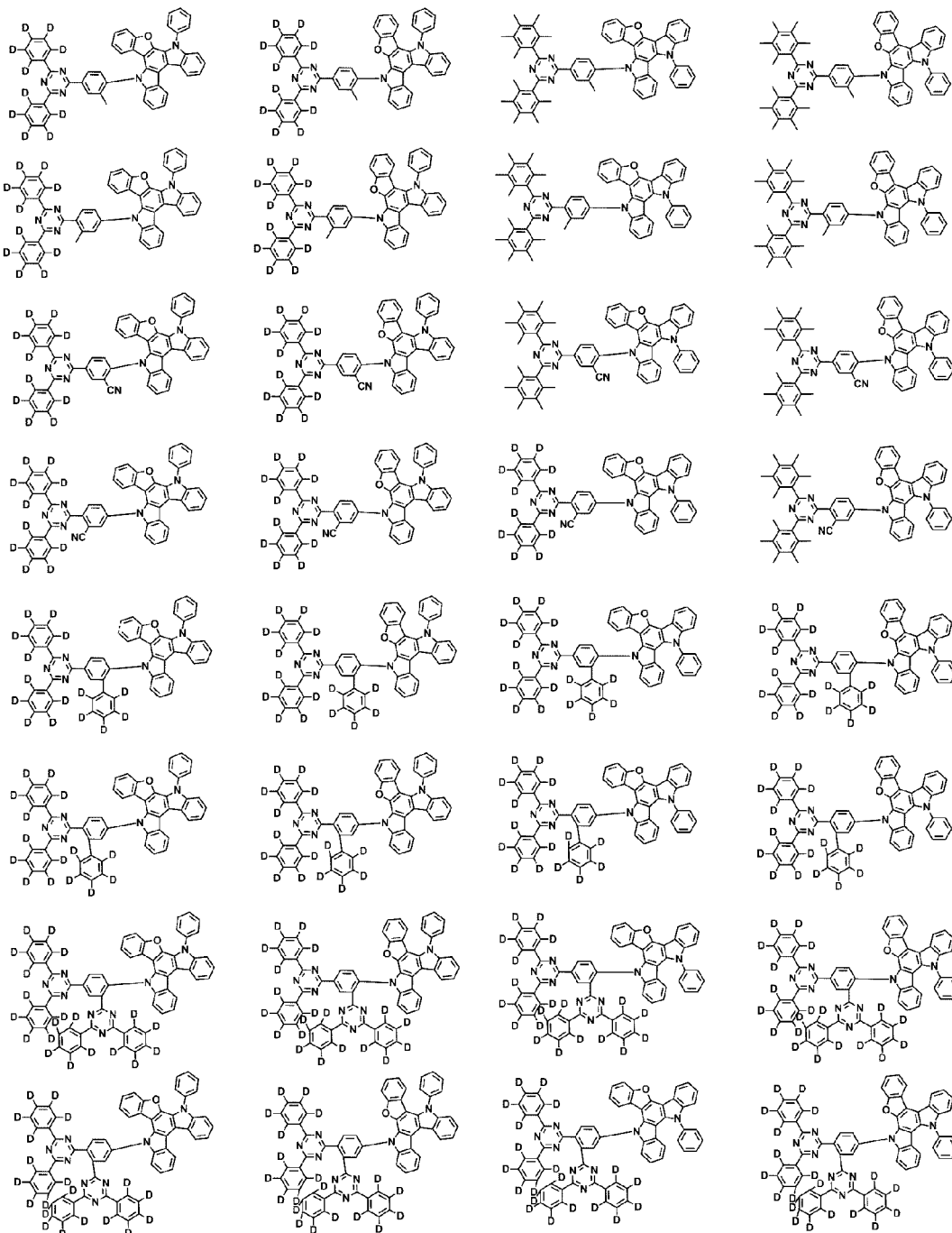
[105]



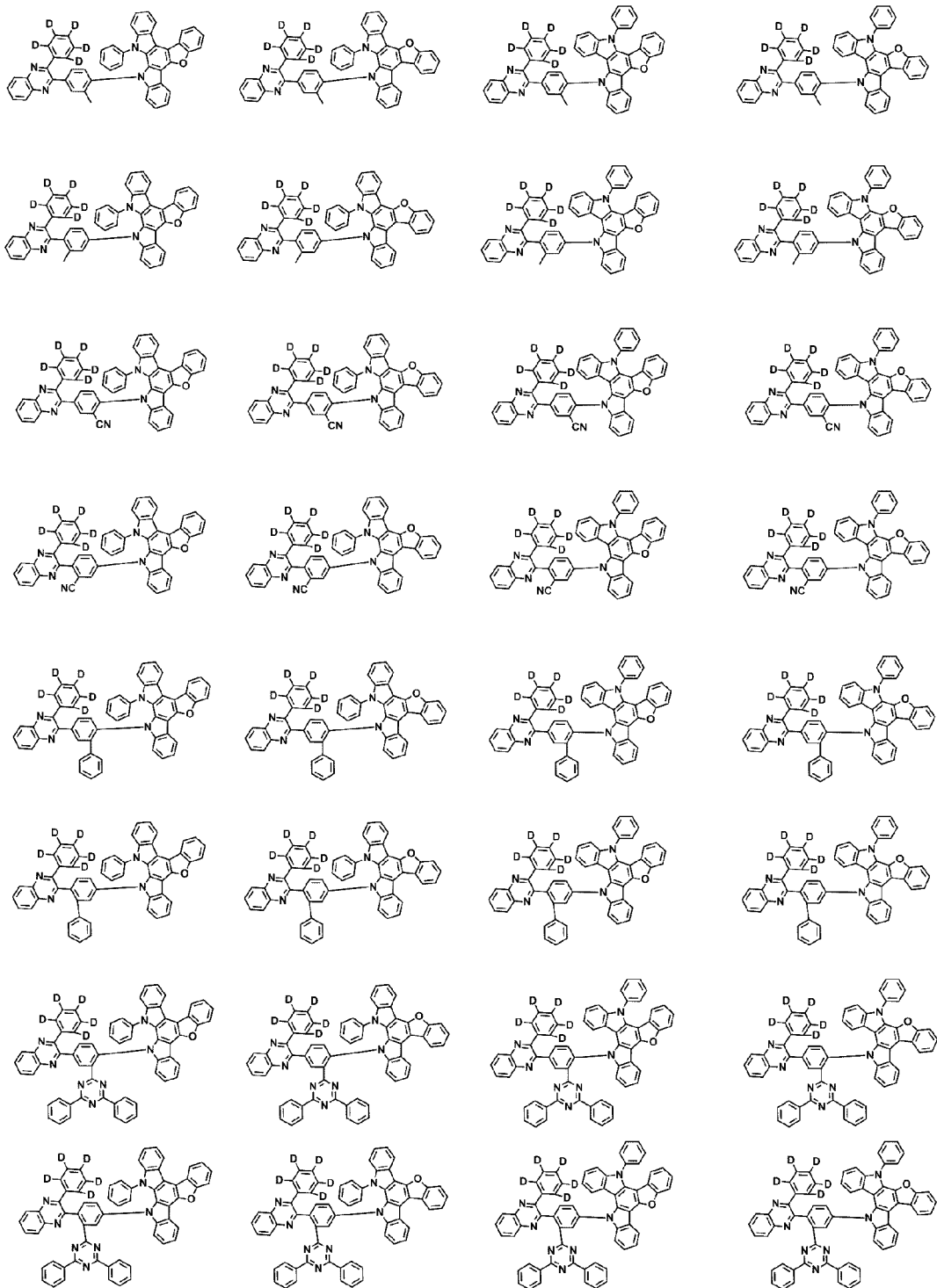
[106]



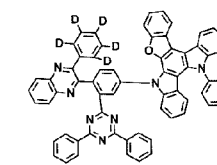
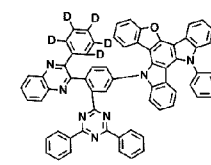
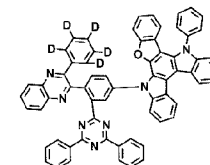
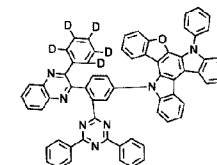
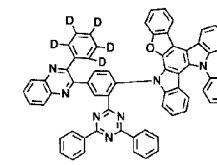
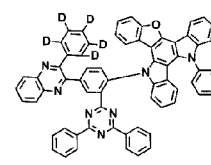
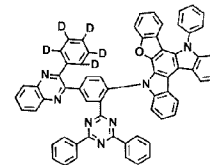
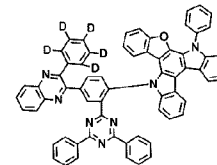
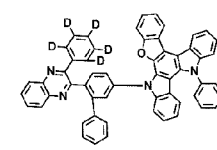
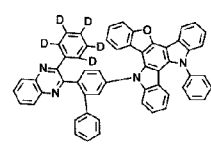
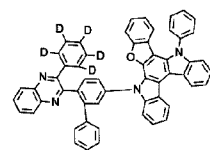
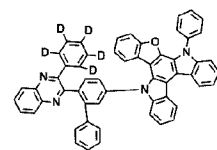
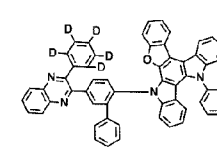
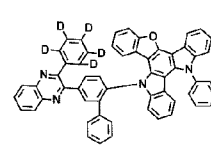
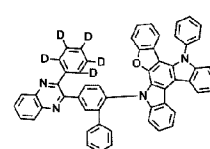
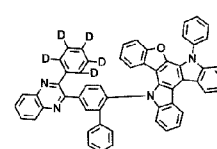
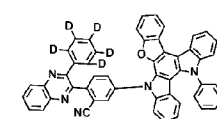
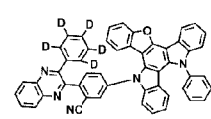
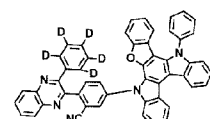
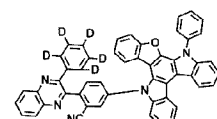
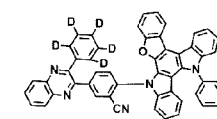
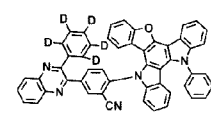
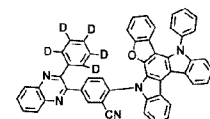
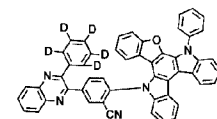
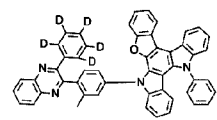
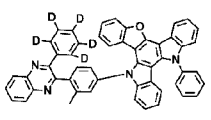
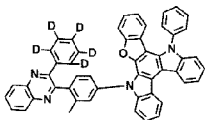
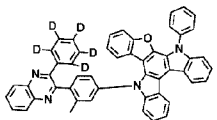
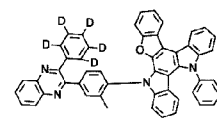
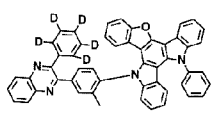
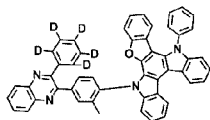
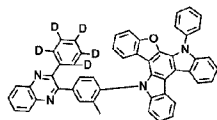
[107]



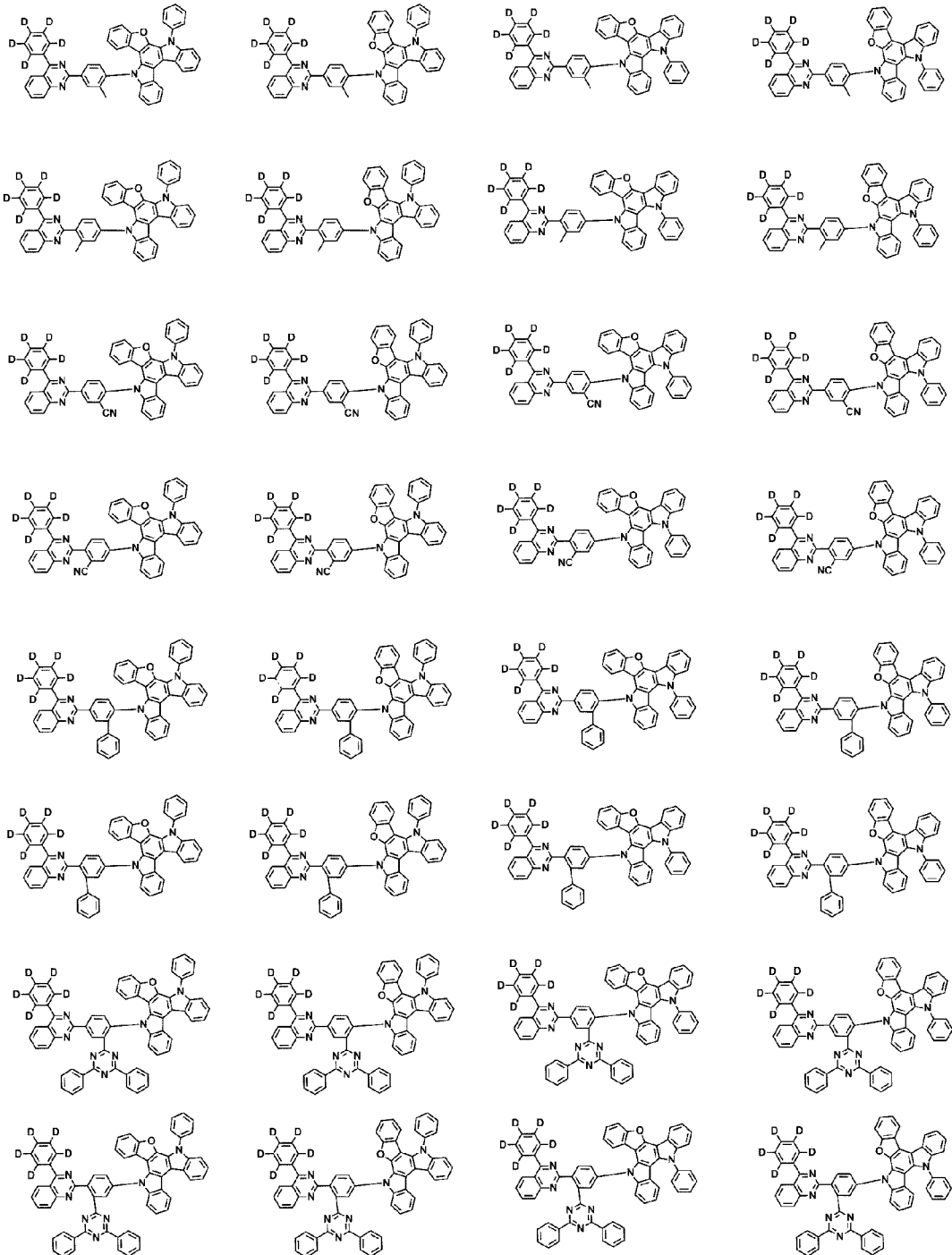
[108]



[109]



[111]



[112] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 삼중항(triplet) 에너지 준위는 2.1eV 이상이고, 바람직하게는 2.1eV 이상 3.0eV 이하, 2.2eV 이상 3.0eV 이하, 2.3eV 이상 2.9eV 이하일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 삼중항(triplet) 에너지 준위가 상기 범위를 만족하는 경우, 전자 주입이 용이하게 되어 엑시톤의 형성 비율이 높아지게 되므로, 발광 효율이 상승하는 이점이 있다.

[113] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일중항(singlet) 에너지 준위와 삼중항(triplet) 에너지 준위의 차는 0eV 이상 0.3eV

이하이고, 바람직하게는 0eV 이상 0.2eV 이하이다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일중항(singlet) 에너지 준위와 삼중항(triplet) 에너지 준위의 차가 상기 범위를 만족하는 경우, 삼중항에서 생성된 엑시톤이 역계간전이(RISC)에 의해 일중항으로 이동하는 비율 및 속도가 증가하여 삼중항에 엑시톤이 머무는 시간이 줄어들게 되므로 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 증가하는 이점이 있다.

- [114] 본 출원에 있어서, 삼중항 에너지는 형광과 인광 측정이 가능한 분광기기를 이용하여 측정 가능하고, 측정 조건의 경우 액화질소를 이용한 극저온 상태에서 톨루엔이나 티에치에프를 용매로 하여 10^{-6} M 농도로 용액을 제조하고 용액에 물질의 흡수 파장대의 광원을 조사하여 발광하는 스펙트럼으로부터 일중항 발광을 제외하고, 삼중항에서 발광하는 스펙트럼을 분석하여 확인한다. 광원으로부터 전자가 역이되면 전자가 삼중항에 머물게되는 시간이 일중항에 머물게 되는 시간보다 훨씬 길기 때문에 극저온 상태에서 두 성분의 분리가 가능하다.
- [115] 본 출원에 있어서, 일중항 에너지의 경우 형광기기를 이용하여 측정하며, 전술한 삼중항 에너지 측정방법과 달리 상온에서 광원을 조사한다.
- [116] 본 출원의 일 실시상태에서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 출원의 일 실시상태에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.
- [117] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 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 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [118] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [119] 상기 화합물 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층이 형성된 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법뿐만 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.
- [120] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 저지층, 정공 수송 및 정공 주입을 동시에 하는 층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 저지층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에

하는 층 중 1층 이상을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.

- [121] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공 수송층 또는 정공 주입층을 포함하고, 상기 정공 수송층 또는 정공 주입층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [122] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자 수송층 또는 전자 주입층을 포함하고, 상기 전자 수송층 또는 전자 주입층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [123] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [124] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층 내에 10 중량부 내지 100 중량부로 포함할 수 있다.
- [125] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 호스트로 포함할 수 있다.
- [126] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 도펀트로 포함할 수 있다.
- [127] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 도펀트로 포함하며, 호스트를 더 포함할 수 있다. 이때, 상기 도펀트의 함량은 호스트 100 중량부를 기준으로 10 중량부 내지 99 중량부로 포함될 수 있으며, 바람직하게는 30 중량부 내지 50 중량부로 포함된다.
- [128] 상기와 같이, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 도펀트로 사용되는 경우, 소자의 수명 및 효율이 향상된다. 보다 구체적으로, 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 카바졸류를 포함하는 열활성 지연형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 물질에 카바졸류와 인접하게 벤젠을 도입하게 되면 벤젠이 donor/acceptor 중간에 linker로 작용하기 때문에 분자 내의 최고 피점 분자 궤도(HOMO)와 최저 공분자 궤도(LUMO)를 일부 혼재하여 안정성을 높이고, 양자 효율을 높이는 효과가 있다. 또한, 벤젠의 친환기를 조절하여 삼중항 에너지 준위 조절이 가능하며 이를 통해 삼중항 소광으로 인한 양자 효율 감소가 방지될 수 있고, 부가적으로 카바졸류와 벤젠과의 결합력을 조절하여 수명을 증가시킬 수 있다.
- [129] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 보조 도펀트 또는 증감제로 포함할 수 있다
- [130] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하며, 호스트 및 형광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 이때, 상기 화합물은 보조 도펀트(assistant dopant), 또는 증감제(sensitizer)로

역할하게 되며, 구체적으로 상기 화합물은 호스트로부터 정공(hole)과 전자(electron)을 전달받아 엑시톤(exciton)을 형성하며, 생성된 엑시톤을 형광 도펀트로 전달해주는 역할을 하게 된다.

- [131] 일반적인 유기 발광 소자에서 일중항과 삼중항에서 생성되는 엑시톤의 수가 25 : 75(일중항 : 삼중항)의 비율로 생성되며, 엑시톤 이동에 따른 발광 형태에 따라 형광 발광, 인광 발광 및 열활성화 지연형광 발광으로 나눌 수 있다. 상기 인광 발광의 경우 삼중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤이 바닥 상태(ground state)로 이동하여 발광하는 것을 의미하고, 상기 형광 발광의 경우 일중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤이 바닥 상태(ground state)로 이동하여 발광하게 되는 것을 의미하며, 상기 열활성화 지연형광 발광은 삼중항 여기 상태(excited state)로부터 일중항 여기 상태(excited state)로 역계간전이가 유도되고, 일중항 여기 상태의 엑시톤이 바닥 상태(Ground State)로 이동하여 형광 발광을 일으키는 것을 의미한다.
- [132] 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물이 지연 형광 특성을 가짐으로써, 일반적으로 삼중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤들이 일중항 여기 상태(excited state)로 역계간전이하어 그 에너지를 도펀트로 전달하여 고효율을 갖는 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.
- [133] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 제2 전극은 음극이다.
- [134] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 제2 전극은 양극이다.
- [135] 상기 유기 발광 소자는 예컨대 하기와 같은 적층 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [136] (1) 양극/정공 수송층/발광층/음극
- [137] (2) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/음극
- [138] (3) 양극/정공 수송층/발광층/전자 수송층/음극
- [139] (4) 양극/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [140] (5) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/음극
- [141] (6) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [142] (7) 양극/정공 수송층/전자 저지층/발광층/전자 수송층/음극
- [143] (8) 양극/정공 수송층/전자 저지층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [144] (9) 양극/정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/발광층/전자 수송층/음극
- [145] (10) 양극/정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [146] (11) 양극/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/음극
- [147] (12) 양극/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [148] (13) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/음극
- [149] (14) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/전자

주입층/음극

- [150] (15) 양극/정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층/음극
- [151] (16) 양극/정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/발광층/정공 저지층/전자주입 및 수송층/음극
- [152] 상기 구조에 있어서, "전자 수송층/전자 주입층"은 "전자 주입 및 수송층"으로 대체될 수 있다.
- [153] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [154] 도 1에는 기판(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.
- [155] 도 2에는 기판(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 전자 저지층(7), 발광층(8), 정공 저지층(9), 전자 주입 및 수송층(10) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [156] 예컨대, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(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, 전자 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.
- [157] 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입 및 전자 수송을 동시에 하는 층, 전자 저지층, 발광층 및 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 주입 및 전자 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.
- [158] 상기 양극은 정공을 주입하는 전극으로, 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 출원에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐 주석 산화물(ITO, Indium Tin Oxide), 인듐 아연 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.

- [159] 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 LiO_2/Al 과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [160] 상기 정공 주입층은 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 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. 구체적으로, 상기 정공 주입 물질은 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 정공 주입 물질은 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌-헥사니트릴(HAT-CN)일 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [161] 정공 주입층의 두께는 1nm 내지 150nm일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 1nm 이상이면, 정공 주입 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 150nm 이하이면, 정공 주입층의 두께가 너무 두꺼워 정공의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.
- [162] 상기 정공 수송층은 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. 정공 수송 물질의 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 구체적으로, 상기 정공 수송 물질은 아릴아민 계열의 유기물일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 정공 수송 물질은 N4,N4'-di(naphthalen-1-yl)-N4,N4'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine(NPB)일 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [163] 상기 정공 수송층과 발광층 사이에 전자 저지층이 구비될 수 있다. 상기 전자 저지층은 당 기술분야에 알려져 있는 재료, 예컨대 헤테로아릴아민계 화합물이 사용될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [164] 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(Alq_3); 카르바졸

계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조퀴놀린-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.

- [165] 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. 보다 구체적으로, 발광층의 호스트 재료로는 카바졸 유도체가 사용될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [166] 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), 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 보론계 화합물 등과 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 고분자, 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 보론계 화합물 등과 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다.

- [167] 상기 전자 수송층은 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 1nm 내지 50nm일 수 있다. 전자 수송층의 두께가 1nm 이상이면, 전자 수송 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 50nm 이하이면, 전자 수송층의 두께가 너무 두꺼워 전자의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.

- [168] 상기 전자 주입층은 전자의 주입을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 전자 주입 물질로는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자 주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막 형성능력이 우수한

화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이하졸, 트리아졸, 벤조이미다졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리텐 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 함질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [169] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬(Liq), 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.

- [170] 상기 전자 주입 및 수송층은 전자 주입과 수송을 동시에 하는 층이다. 전자 주입 및 수송층 물질로는 전자 주입층 및 전자 수송층에 적용 가능한 물질이라면 제한 없이 사용 가능하다. 예컨대, 벤조이미다졸 유도체 및 금속 착체 화합물이 동시에 사용될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [171] 상기 정공 저지층은 정공의 음극 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 정공 주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 정공 저지 물질로는 예컨대, 옥사다이하졸 유도체, 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP, 알루미늄 착물(aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 구체적으로, 상기 정공 저지 물질은 페난트롤린 유도체일 수 있으나 이에 한정되지 않는다.

- [172] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [173] 이하, 본 출원을 구체적으로 설명하기 위해 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 그러나, 본 출원에 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.

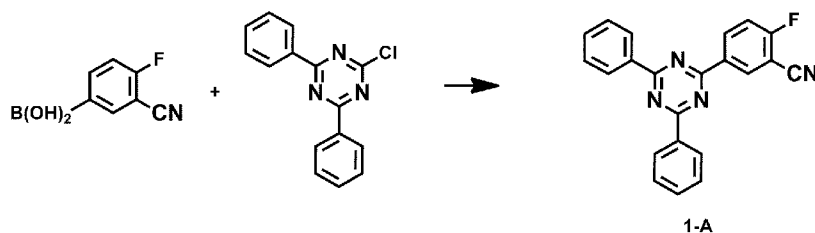
- [174] 제조예.

- [175] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기와 같이 치환된 플루오로페닐보로닉엑시드에 다양한 종류의 함질소 헤테로기를 도입하여

형성할 수 있다. 함질소 헤테로기를 도입한 후 최종적으로 확장된 형태의 인돌로카바졸을 도입하여 화합물들을 합성하였다.

[176] 제조예 1-1. 화합물 1-A의 합성

[177]

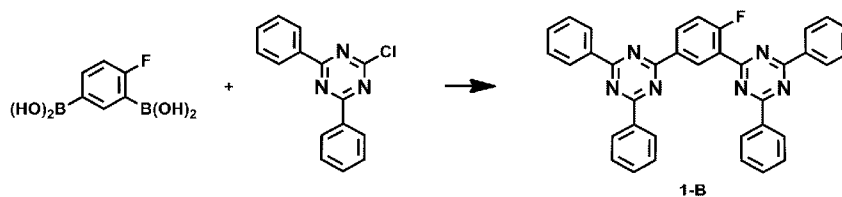


[178] (3-시아노-4-플루오로페닐)보로닉엑시드 20g(121.3mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-A 38.9g을 얻었다(수율 91%).

[179] MS[M+H]⁺ = 353

[180] 제조예 1-2. 화합물 1-B의 합성

[181]

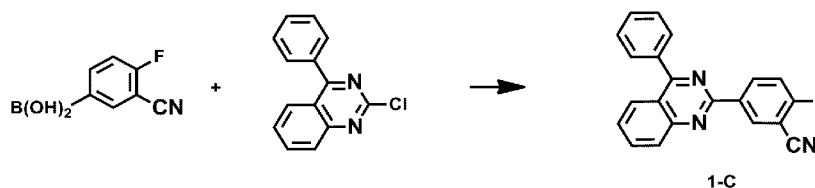


[182] (4-플루오로-1,3-페닐렌)다이보로닉엑시드 22.3g(121.3mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 242.6mmol, 테트라하이드로퓨란 300mL 및 물 150mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(606.5mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-B 62.3g을 얻었다(수율 92%).

[183] MS[M+H]⁺ = 559

[184] 제조예 1-3. 화합물 1-C의 합성

[185]



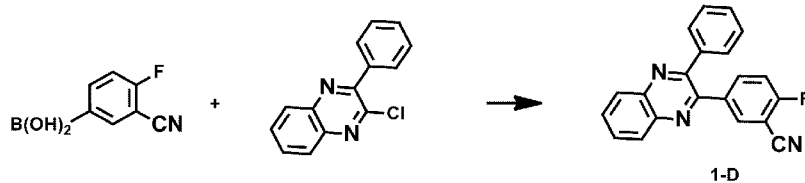
[186] (3-시아노-4-플루오로페닐)보로닉엑시드 20g(121.3mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및

테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-C 33.2g을 얻었다(수율 84%).

[187] MS[M+H]⁺ = 326

[188] 제조예 1-4. 화합물 1-D의 합성

[189]

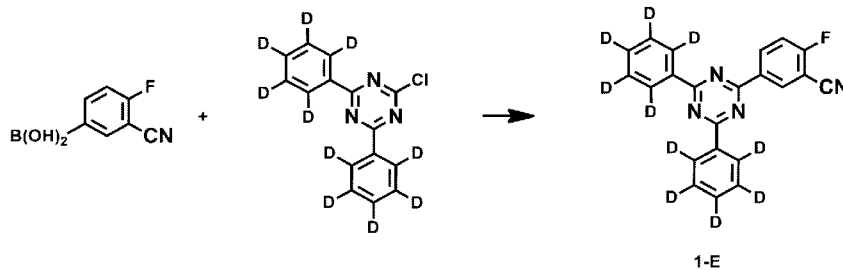


[190] (3-시아노-4-플루오로페닐)보로닉엑시드 20g(121.3mmol), 2-클로로-3-페닐퀴녹살린 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-D 32g을 얻었다(수율 81%).

[191] MS[M+H]⁺ = 326

[192] 제조예 1-5. 화합물 1-E의 합성

[193]

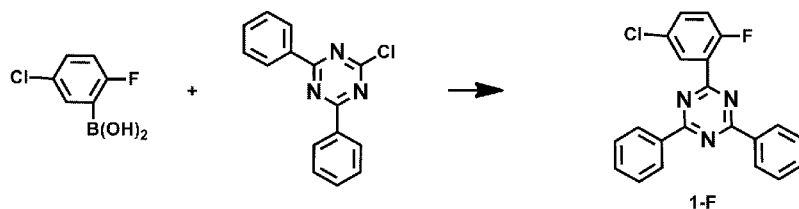


[194] (3-시아노-4-플루오로페닐)보로닉엑시드 20g(121.3mmol), 2-클로로-4,6-비스(페닐-d5)-1,3,5-트리아진 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-E 39.6g을 얻었다(수율 90%).

[195] MS[M+H]⁺ = 363

[196] 제조예 1-6. 화합물 1-F의 합성

[197]

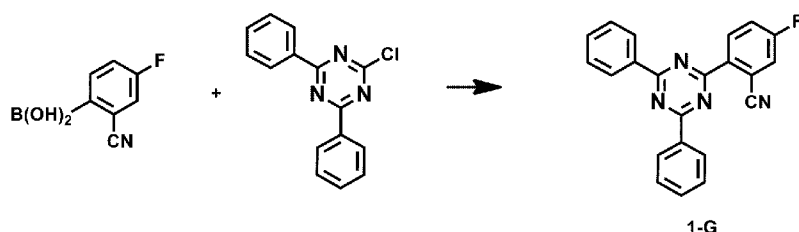


[198] (5-클로로-2-플루오로페닐)보로닉엑시드 21.1g(121.3mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플렉스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-F 39.5g을 얻었다(수율 90%).

[199] MS[M+H]⁺ = 362

[200] 제조예 1-7. 화합물 1-G의 합성

[201]

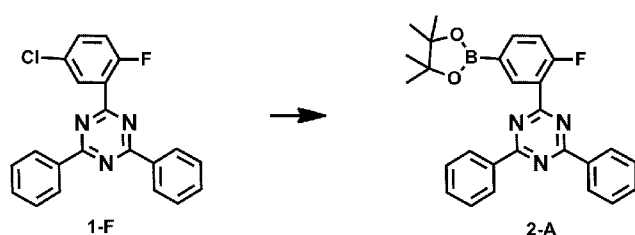


[202] (2-시아노-4-플루오로페닐)보로닉엑시드 20g(121.3mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 121.3mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(363.9mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플렉스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1-G 35g을 얻었다(수율 82%).

[203] MS[M+H]⁺ = 353

[204] 제조예 2-1. 화합물 2-A의 합성

[205]



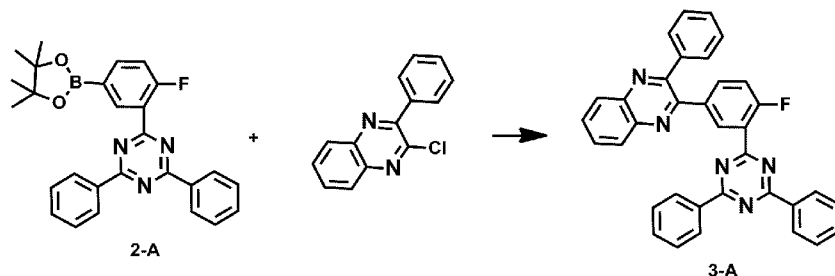
[206] 화합물 1-F 35.1g(97mmol), 1,4-다이옥산 350 mL, 포타슘아세테이트 291 mmol, 피나코락토다이보레이트인 106.7 mmol, 팔라듐아세테이트 2 mmol 및 트라이사이클로헥실포스핀 4 mmol 혼합하여 리플렉스 상태로 20시간 교반하였다. 반응 후, 실온으로 되돌린 반응액에 물을 첨가하고, 석출물을 순수,

에탄올로 순차 세정하였다. 이 고체를 클로로포름/헥산(1:1)로 재결정을 실시함으로써 정제하여, 화합물 2-A를 38.2 g 얻었다(수율 87%).

[207] MS[M+H]⁺ = 454

[208] 제조예 3-1. 화합물 3-A의 합성

[209]

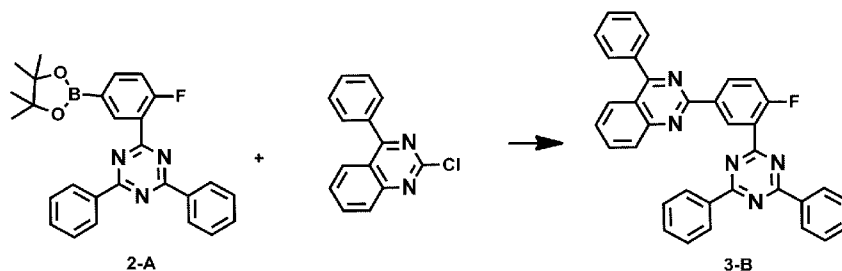


[210] 화합물 2-A 34.9g(77mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀린 77mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(231mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플럭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 3-A 32.7g을 얻었다(수율 80%).

[211] MS[M+H]⁺ = 532

[212] 제조예 3-2. 화합물 3-B의 합성

[213]

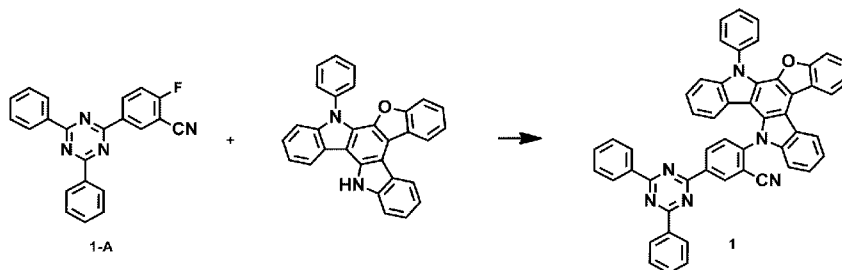


[214] 화합물 2-A 34.9g(77mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 77mmol, 테트라하이드로퓨란 200mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열하였다. 포타슘카보네이트(231mmol) 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(2mmol)을 첨가하여 리플럭스 상태로 3시간 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 3-B 33.1g을 얻었다(수율 81%).

[215] MS[M+H]⁺ = 532

[216] 제조예 4-1. 화합물 1의 합성

[217]



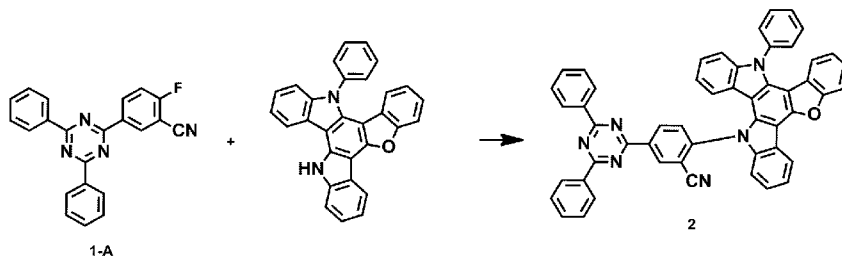
[218] 화합물 1-A 10.6g(30mmol) 및

6-페닐-6,11-다이하이드로벤조퓨로[2,3-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 1 18.3g을 얻었다(수율 81%).

[219] MS[M+H]⁺ = 755

[220] 제조예 4-2. 화합물 2의 합성

[221]



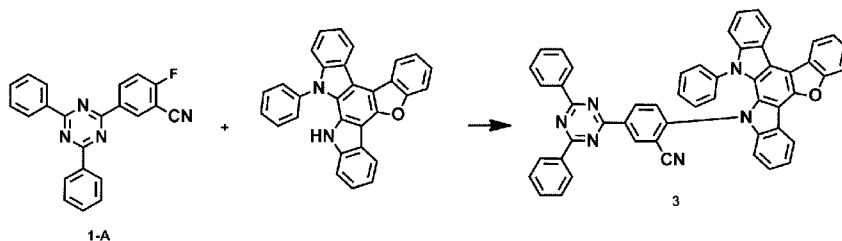
[222] 화합물 1-A 10.6g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 2 18.8g을 얻었다(수율 83%).

[223] MS[M+H]⁺ = 755

[224] 제조예 4-3. 화합물 3의 합성

[225]



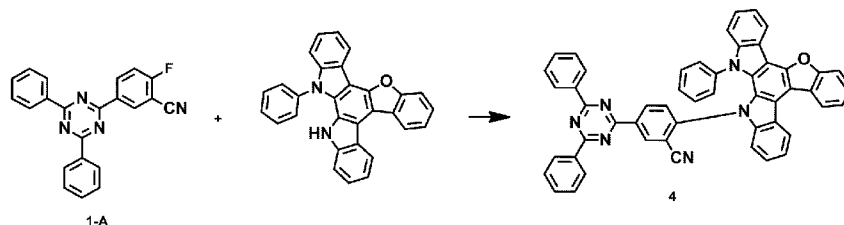
[226] 화합물 1-A 10.6g(30mmol) 및

5-페닐-5,6-다이하이드로벤조퓨로[2,3-c]인돌로[2,3-a]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 3 16.3g을 얻었다(수율 72%).

[227] MS[M+H]⁺ = 755

[228] 제조예 4-4. 화합물 4의 합성

[229]



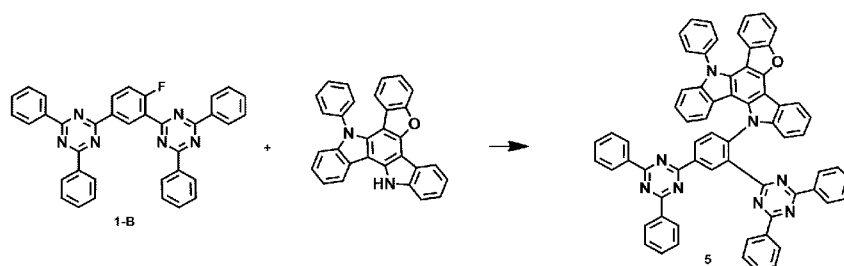
[230] 화합물 1-A 10.6g(30mmol) 및

6-페닐-5,6-다이하이드로벤조퓨로[2,3-c]인돌로[2,3-a]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 4 15.8g을 얻었다(수율 70%).

[231] MS[M+H]⁺ = 755

[232] 제조예 4-5. 화합물 5의 합성

[233]



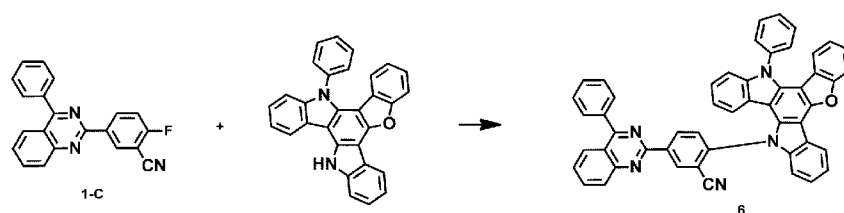
[234] 화합물 1-B 16.7g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 5 22.7g을 얻었다(수율 79%).

[235] MS[M+H]⁺ = 961

[236] 제조예 4-6. 화합물 6의 합성

[237]



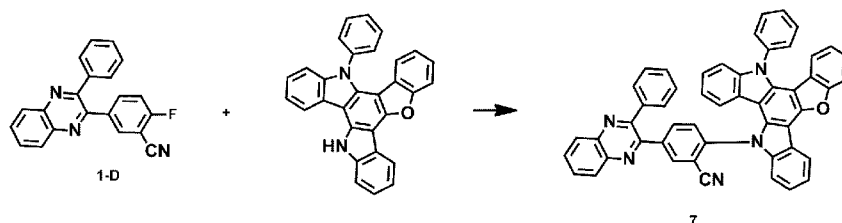
[238] 화합물 1-C 9.8g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 6 15.9g을 얻었다(수율 73%).

[239] MS[M+H]⁺ = 728

[240] 제조예 4-7. 화합물 7의 합성

[241]



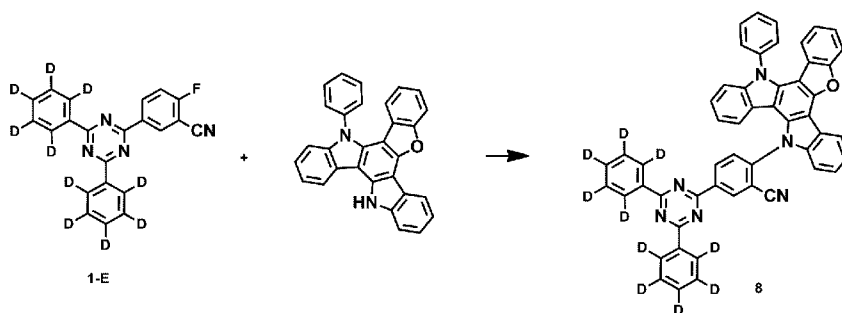
[242] 화합물 1-D 9.8g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 7 16.4g을 얻었다(수율 75%).

[243] MS[M+H]⁺ = 728

[244] 제조예 4-8. 화합물 8의 합성

[245]



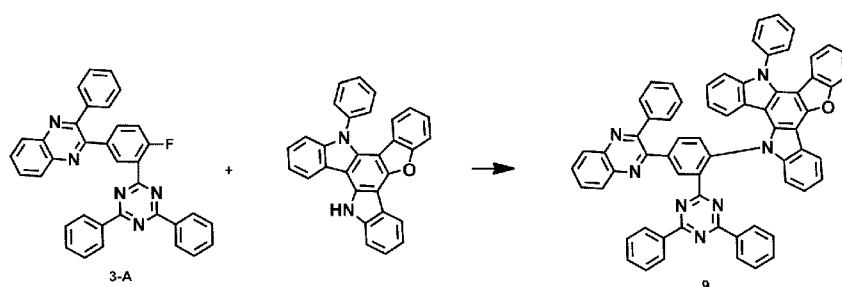
[246] 화합물 1-E 10.9g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 8 18.8g을 얻었다(수율 82%).

[247] MS[M+H]⁺ = 765

[248] 제조예 4-9. 화합물 9의 합성

[249]



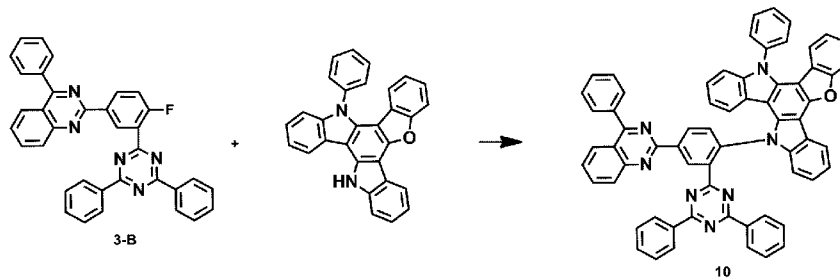
[250] 화합물 3-A 15.9g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 9 19.6g을 얻었다(수율 70%).

[251] MS[M+H]⁺ = 934

[252] 제조예 4-10. 화합물 10의 합성

[253]



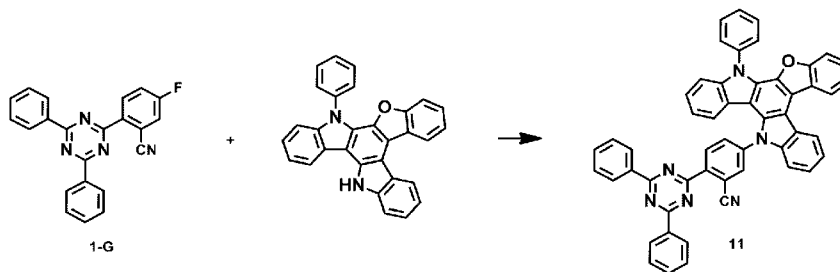
[254] 화합물 3-B 15.9g(30mmol) 및

10-페닐-10,15-다이하이드로벤조퓨로[3,2-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 10 20.4g을 얻었다(수율 73%).

[255] MS[M+H]⁺ = 934

[256] 제조예 4-11. 화합물 11의 합성

[257]



[258] 화합물 1-G 10.6g(30mmol) 및

6-페닐-6,11-다이하이드로벤조퓨로[2,3-a]인돌로[3,2-c]카바졸 (30mmol)을 디메틸포름아마이드 100mL에 완전히 녹인 후 소듐-*tert*-부톡사이드(60mmol)를 첨가하고, 6시간 동안 80°C로 가열 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응 용액을 필터하여 고체를 얻은 후, 이 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올으로 2회 재결정을 실시하여, 화합물 11 16.1g을 얻었다(수율 71%).

[259] MS[M+H]⁺ = 755

[260] 상기 반응식과 동일한 합성 과정을 통해 치환기를 다양하게 도입하여 구체예 상의 물질들을 합성하였다.

[261] 실험예 1. 삼중항 에너지 준위의 측정

- [262] 삼중항 에너지 준위(T1)는 수명이 긴 삼중항 엑시톤의 특성을 이용해 극저온 상태에서 측정하였다. 구체적으로, 화합물을 톨루엔 용매에 용해하여 10^{-5}M 의 농도의 시료를 제조한 후, 상기 시료를 석영 키트에 담아 77K로 냉각시키고, 300nm 광원을 인광 측정용 시료에 조사하여 파장을 변경하면서 인광 스펙트럼을 측정하였다. 스펙트럼의 측정에는 분광광도계(FP-8600 spectrophotometer, JASCO사)를 이용하였다.
- [263] 인광 스펙트럼의 세로축은 인광 강도로, 가로축은 파장으로 하였다. 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대해 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값($\lambda_{\text{edge1}}(\text{nm})$)을 구한 후, 이 파장값을 하기 환산식 1에 대입하여 삼중항 에너지를 산출하였다.
- [264] 환산식 (F1): $T1(\text{eV}) = 1239.85/\lambda_{\text{edge1}}$
- [265] 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 그었다. 우선, 스펙트럼의 극대값 중 가장 단파장측의 극대값을 확인하였다. 이 때, 스펙트럼의 극대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상기 서술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않았다. 인광 스펙트럼의 단파장측으로부터 상기 극대값까지의 스펙트럼 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각하였다. 이 접선 중 기울기 값이 제일 큰 접선(즉, 변곡점에 있어서의 접선)을 당해 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 하였다.
- [266] **실험예 2. 일중항 에너지 준위의 측정**
- [267] 일중항 에너지 준위(S1)는 다음의 방법으로 측정하였다.
- [268] 측정 대상이 되는 화합물의 10^{-5}M 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300K)에서 시료의 300nm 광원의 발광 스펙트럼(세로축: 발광 강도, 가로축: 파장)을 측정하였다. 이 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대해 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값($\lambda_{\text{edge2}}(\text{nm})$)을 하기 환산식 2에 대입하여 일중항 에너지를 산출하였다. 상기 발광 스펙트럼은 JASCO사의 분광 광도계(FP-8600 spectrophotometer)를 이용하여 측정하였다.
- [269] 환산식 2: $S1(\text{eV}) = 1239.85/\lambda_{\text{edge2}}$
- [270] 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 그었다. 우선, 스펙트럼의 극대값 중 가장 단파장측의 극대값을 확인하였다. 발광 스펙트럼의 단파장측으로부터 상기 극대값까지의 스펙트럼 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각하였다. 이 접선 중 기울기 값이 제일 큰 접선(즉, 변곡점에 있어서의 접선)을 당해 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 하였다. 스펙트럼의 극대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상기 서술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않았다.
- [271] 상기와 같은 방법으로 측정된 삼중항 에너지 준위(T1), 일중항 에너지 준위(S1) 및 일중항 에너지 준위와 삼중항 에너지 준위의 차이(ΔEST) 값을 하기 표 1에 나타내었다.

[272] [표1]

화합물	S1(eV)	T1(eV)	Δ EST(eV)
1	2.40	2.37	0.03
2	2.41	2.37	0.04
3	2.41	2.38	0.03
4	2.42	2.37	0.05
5	2.40	2.37	0.03
6	2.41	2.38	0.03
7	2.42	2.37	0.05
8	2.41	2.37	0.04
9	2.40	2.37	0.03
10	2.40	2.38	0.02
11	2.41	2.37	0.04

[273] 상기 표 1을 통해, 제조예에서 제조된 화합물 1 내지 11은 모두 Δ EST가 0.3eV 이하로 지연 형광 물질로 적합한 것을 알 수 있다.

[274] 실험예 3. 유기 발광 소자의 제조

[275] 비교예 1-1.

[276] ITO(Indium Tin Oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤 및 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 각 박막을 진공 증착법으로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 헥사아자트리페닐렌-헥사니트릴(HAT-CN)을 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.

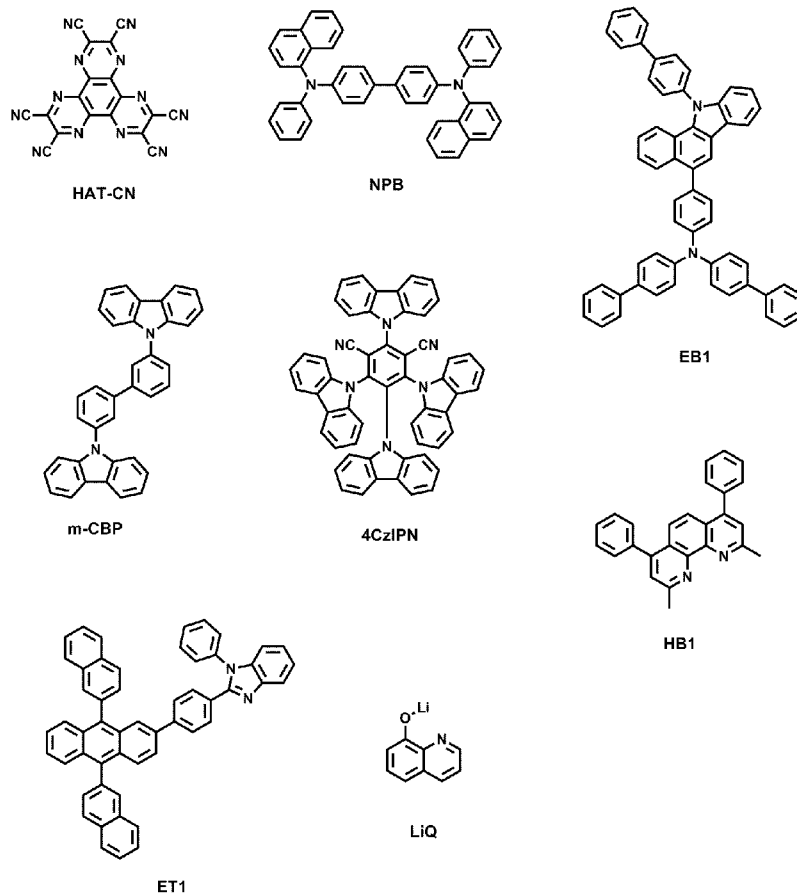
[277] 상기 정공 주입층 위에 하기 화합물 NPB를 진공 증착하여 정공 수송층(300Å)을 형성하였다.

[278] 상기 정공 수송층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 EB1를 진공 증착하여 전자 저지층을 형성하였다.

[279] 이어서, 상기 전자 저지층 위에 막 두께 300Å으로 하기 화합물 m-CBP와 4CzIPN을 70:30의 중량비로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

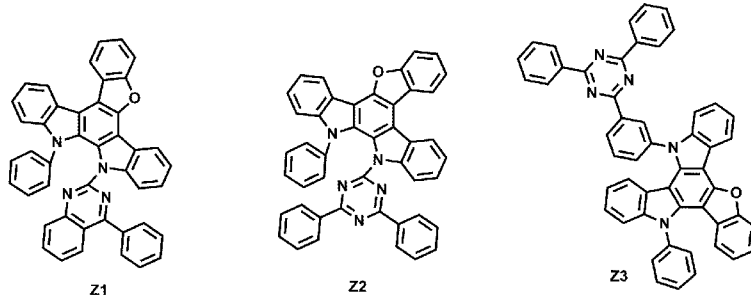
- [280] 상기 발광층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 HB1을 진공 증착하여 정공 저지층을 형성하였다.
- [281] 상기 정공 저지층 위에 하기 화합물 ET1과 화합물 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.
- [282] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4Å/sec내지 0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10^{-7} torr 내지 5×10^{-6} torr를 유지하여, 유기 발광소자를 제작하였다.

[283]



- [284] 실험예 1-1 내지 1-11.
- [285] 상기 비교예 1-1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 표 2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [286] 비교예 1-2 내지 1-4.
- [287] 상기 비교예 1-1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 Z1 내지 Z3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[288]



[289] 실험예 1-1 내지 1-11 및 비교예 1-1 내지 1-4의 유기 발광 소자에 대하여 10mA/cm²의 전류밀도에서 측정된 구동 전압(V)과 전류효율(cd/A), 3000cd/m²의 휘도에서 측정된 CIE 색좌표 및 3000cd/m²에서 밝기가 95%로 감소될 때까지의 시간(T95)을 측정하여, 하기 표 2에 나타내었다.

[290] [표2]

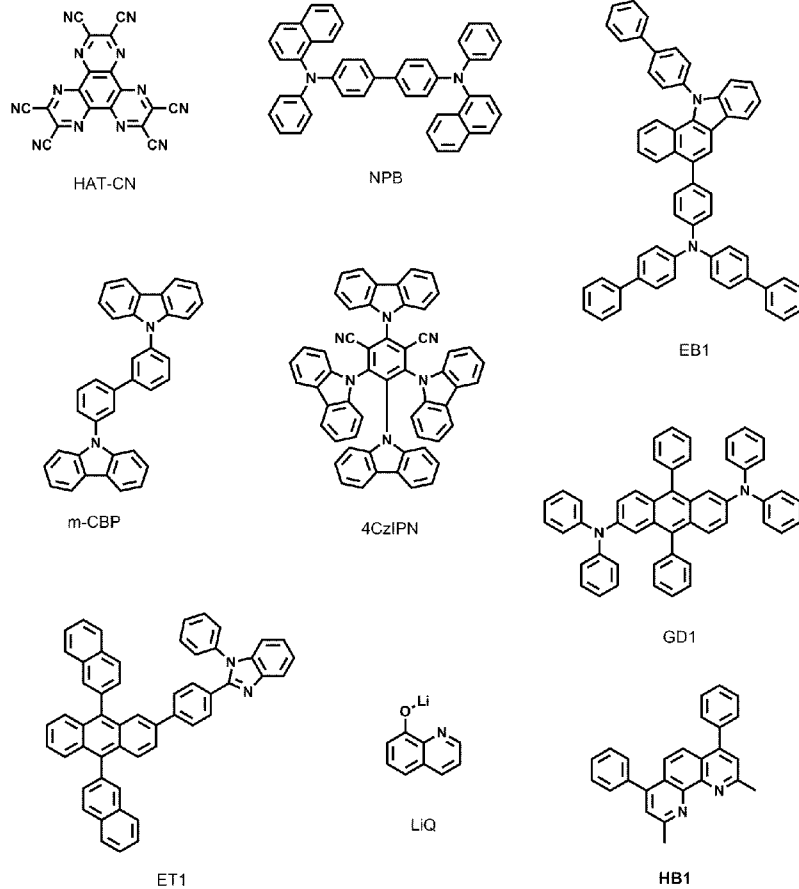
구분	화합물(발광층)	전압(V)	효율(cd/A)	CIE 색좌표(x,y)	T95(hr)
실험예 1-1	1	4.1	21	(0.22, 0.65)	91
실험예 1-2	2	4.1	20	(0.23, 0.64)	90
실험예 1-3	3	4.0	20	(0.23, 0.64)	92
실험예 1-4	4	4.1	22	(0.23, 0.65)	92
실험예 1-5	5	4.1	21	(0.22, 0.64)	90
실험예 1-6	6	4.2	22	(0.22, 0.65)	93
실험예 1-7	7	4.1	21	(0.22, 0.64)	91
실험예 1-8	8	4.1	21	(0.23, 0.65)	90
실험예 1-9	9	4.2	21	(0.23, 0.64)	91
실험예 1-10	10	4.1	20	(0.22, 0.64)	93
실험예 1-11	11	4.1	22	(0.22, 0.65)	91
비교예 1-1	4CzIPN	4.7	15	(0.21, 0.61)	51
비교예 1-2	Z1	4.7	11	(0.24, 0.61)	7
비교예 1-3	Z2	4.9	10	(0.23, 0.60)	5
비교예 1-4	Z3	4.8	12	(0.19, 0.52)	9

[291] CIE 색좌표는 BT2020을 기준으로 (x, y)의 값이 (0.170, 0.797)에 가까워질수록 색순도가 높다고 판단하였다.

[292] 상기 표 2에서 보는 바와 같이, 상기 화학식 1의 화합물을 사용한 실험예 1-1 내지 1-11의 소자는 비교예 1-1에서 화합물 4CzIPN의 물질을 사용한 소자보다 전압이 낮아지고, 효율 및 수명이 향상되었다.

- [293] 또한, 비교예 1-2 내지 1-4보다 상기 화학식 1의 화합물을 사용한 소자가 전압, 효율, 색순도 및 안정성(수명) 면에서 특성이 모두 향상됨을 알 수 있었다.
- [294] 따라서, 본 발명에 따른 화합물은 발광 능력이 우수하고 색순도가 높아 지연형광 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.
- [295] 비교예 2-1.
- [296] ITO(Indium Tin Oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤 및 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 각 박막을 진공 증착법으로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 헥사아자트리페닐렌-헥사니트릴(HAT-CN)을 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.
- [297] 상기 정공 주입층 위에 하기 화합물 NPB를 진공 증착하여 정공 수송층(300Å)을 형성하였다.
- [298] 상기 정공 수송층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 EB1를 진공 증착하여 전자 저지층을 형성하였다.
- [299] 이어서, 상기 전자 저지층 위에 막 두께 300Å으로 하기 화합물 m-CBP, 4CzIPN 및 GD1을 68:30:2의 중량비로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.
- [300] 상기 발광층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 HB1을 진공 증착하여 정공 저지층을 형성하였다.
- [301] 상기 정공 저지층 위에 하기 화합물 ET1과 화합물 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.
- [302] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4Å/sec 내지 0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10^{-7} torr 내지 5×10^{-6} torr를 유지하여, 유기 발광소자를 제작하였다.

[303]



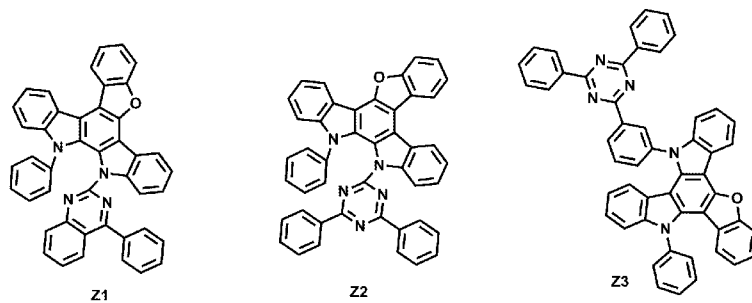
[304] 실험예 2-1 내지 2-11.

[305] 상기 비교예 2-1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 표 3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 2-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[306] 비교예 2-2 내지 2-4.

[307] 상기 비교예 2-1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 표 3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 2-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[308]

[309] 실험예 2-1 내지 2-11 및 비교예 2-1 내지 2-4의 유기 발광 소자에 대하여 10mA/cm²의 전류밀도에서 측정한 구동 전압(V)과 전류효율(cd/A), 3000cd/m²의 휘도에서 측정한 CIE 색좌표를 측정하여, 하기 표 3에 나타내었다.

[310] [표3]

구분	화합물(발광층)	전압(V)	효율(cd/A)	CIE 색좌표(x,y)
실험예 2-1	1	4.1	21	(0.19, 0.68)
실험예 2-2	2	4.2	22	(0.19, 0.67)
실험예 2-3	3	4.1	22	(0.20, 0.68)
실험예 2-4	4	4.1	21	(0.19, 0.67)
실험예 2-5	5	4.2	21	(0.20, 0.68)
실험예 2-6	6	4.2	22	(0.18, 0.69)
실험예 2-7	7	4.1	21	(0.19, 0.68)
실험예 2-8	8	4.2	21	(0.20, 0.67)
실험예 2-9	9	4.1	22	(0.19, 0.68)
실험예 2-10	10	4.1	22	(0.18, 0.68)
실험예 2-11	11	4.2	21	(0.18, 0.69)
비교예 2-1	4CzIPN	4.7	16	(0.16, 0.67)
비교예 2-2	Z1	4.8	12	(0.19, 0.65)
비교예 2-3	Z2	4.8	11	(0.19, 0.64)
비교예 2-4	Z3	4.7	13	(0.18, 0.67)

[311] 상기 표 3에서 보는 바와 같이, 상기 화학식 1의 화합물을 사용한 실험예 2-1 내지 2-11의 소자는 비교예 2-1의 화합물 4CzIPN의 물질을 사용한 소자보다 전압이 낮아지고, 효율이 향상되었다.

[312] 또한, 비교예 2-1 내지 2-4 보다, 상기 화학식 1의 화합물을 사용한 소자가 전압, 효율 면에서 특성이 모두 향상됨을 알 수 있었다.

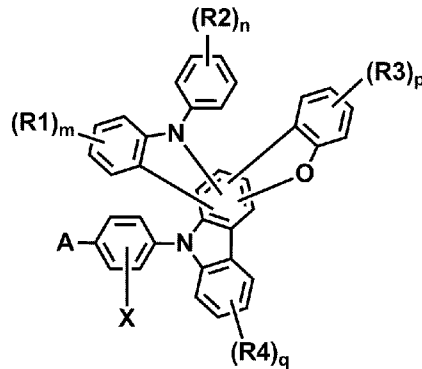
[313] 따라서, 본 발명에 따른 화합물은 발광 능력이 우수하고 발광 파장 튜닝이 가능하여 높은 색순도의 유기 발광 소자 구현이 가능함을 확인할 수 있었다.

[314] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실험예에 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,

A는 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기;

또는 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고,

X는 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된

알킬실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기;

또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

R1 내지 R4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소;

할로젠기; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된

알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기;

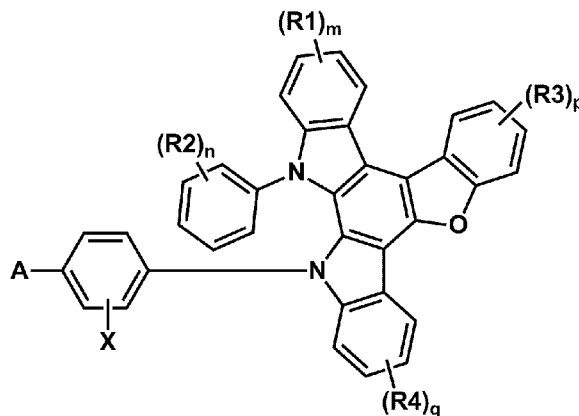
또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

m, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

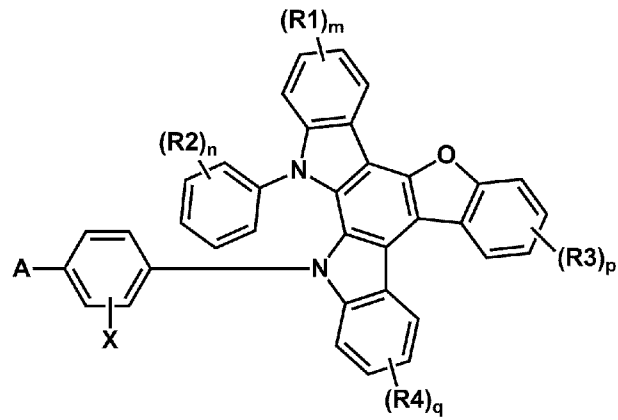
n은 0 내지 5의 정수이다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

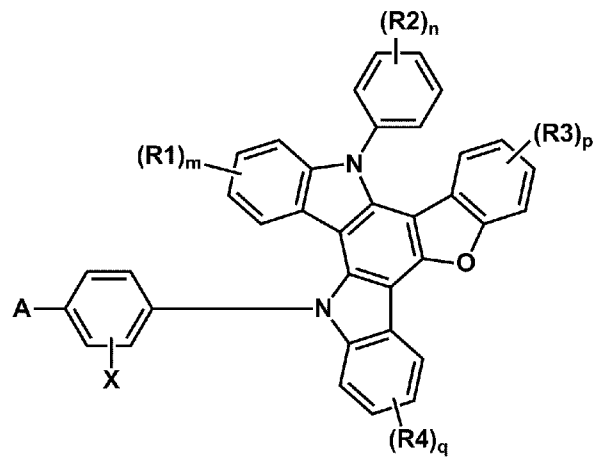
[화학식 2]



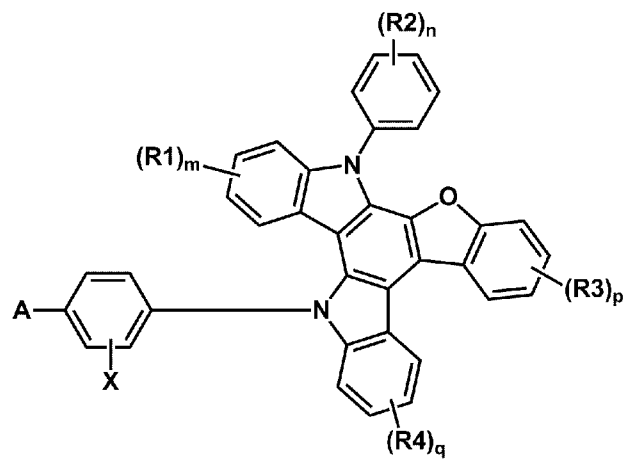
[화학식 3]



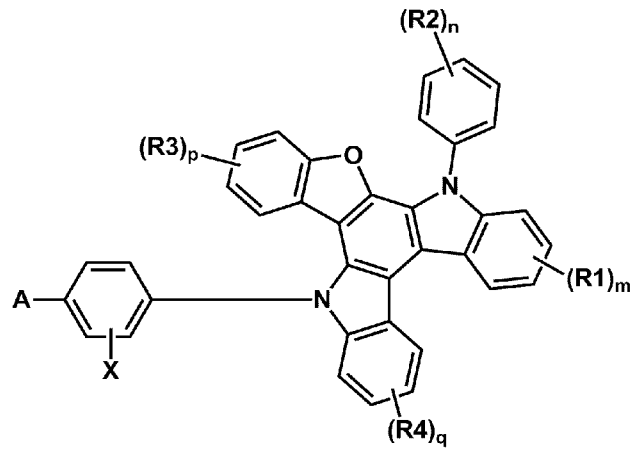
[화학식 4]



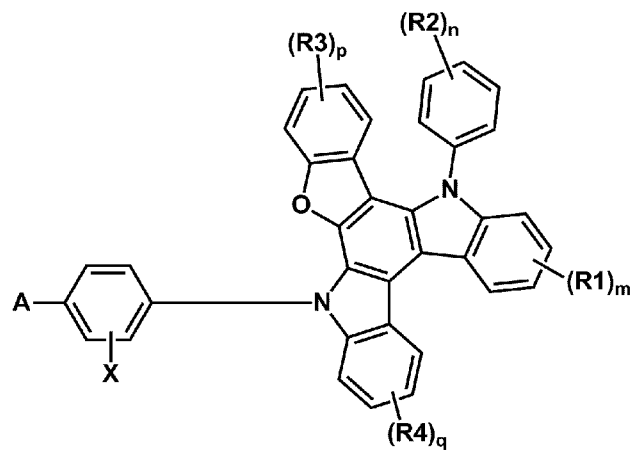
[화학식 5]



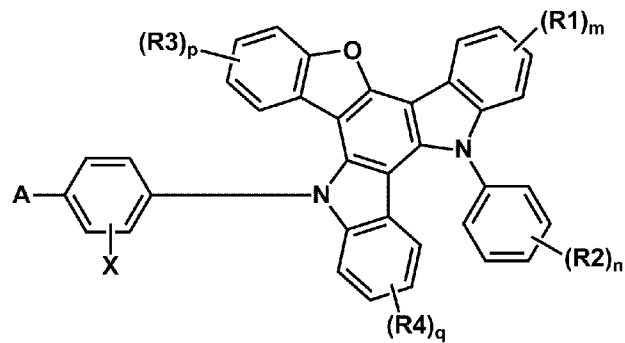
[화학식 6]



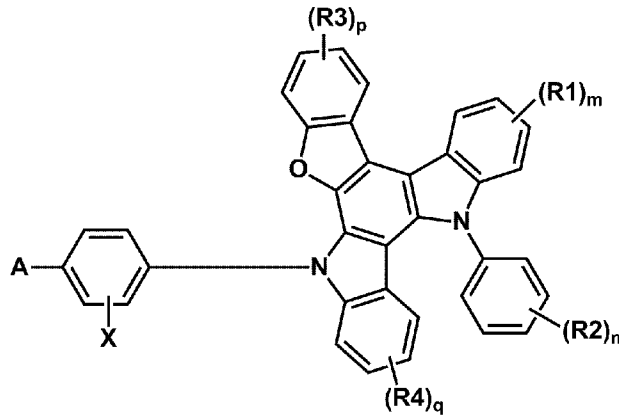
[화]학식 7]



[화]학식 8]



[화]학식 9]



상기 화학식 2 내지 9에 있어서,

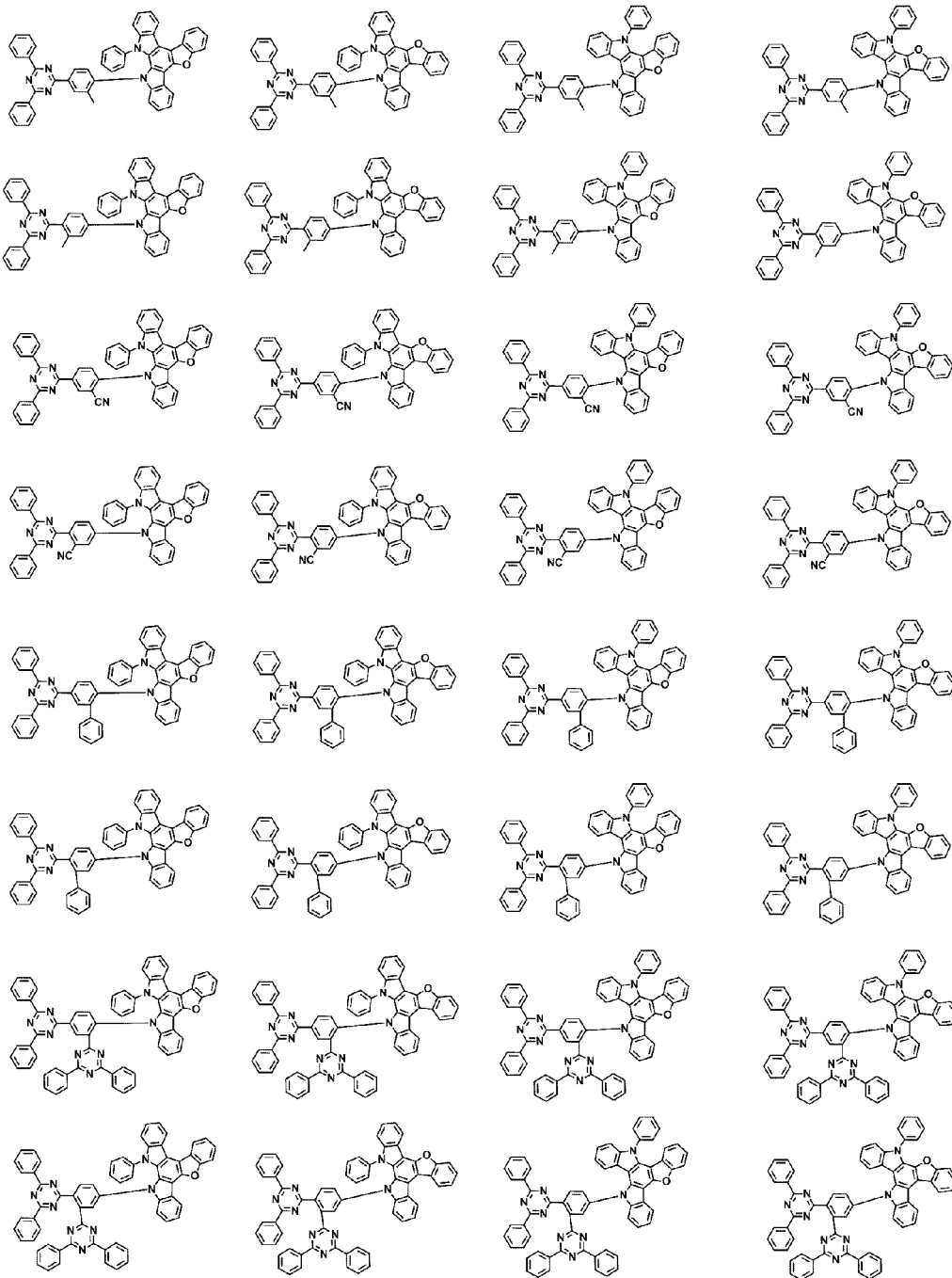
A, X, R1 내지 R4, m, n, p 및 q의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

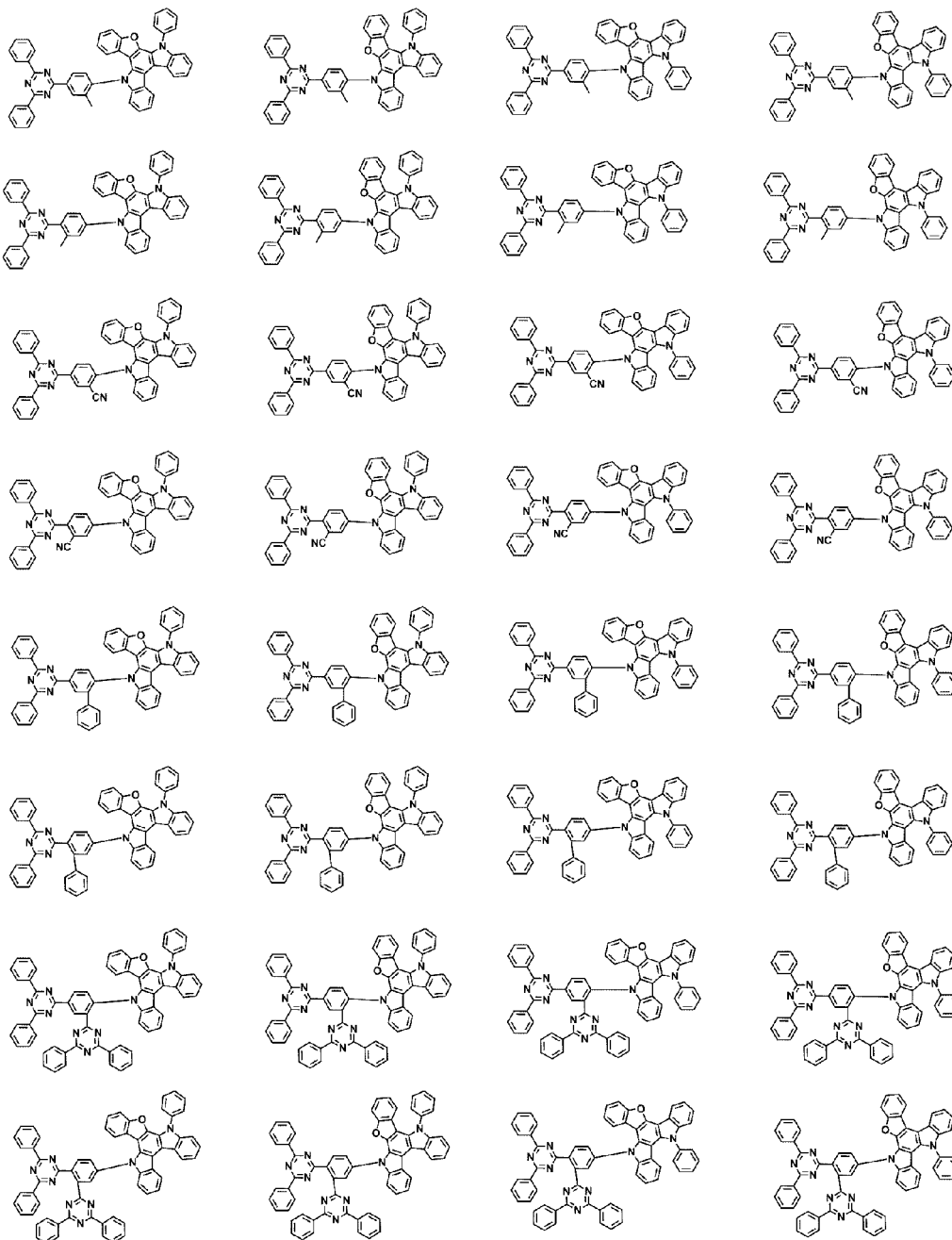
[청구항 3] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 A는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아진기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴녹살린기이고, 상기 아릴기는 각각 독립적으로 중수소 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 것인 화합물.

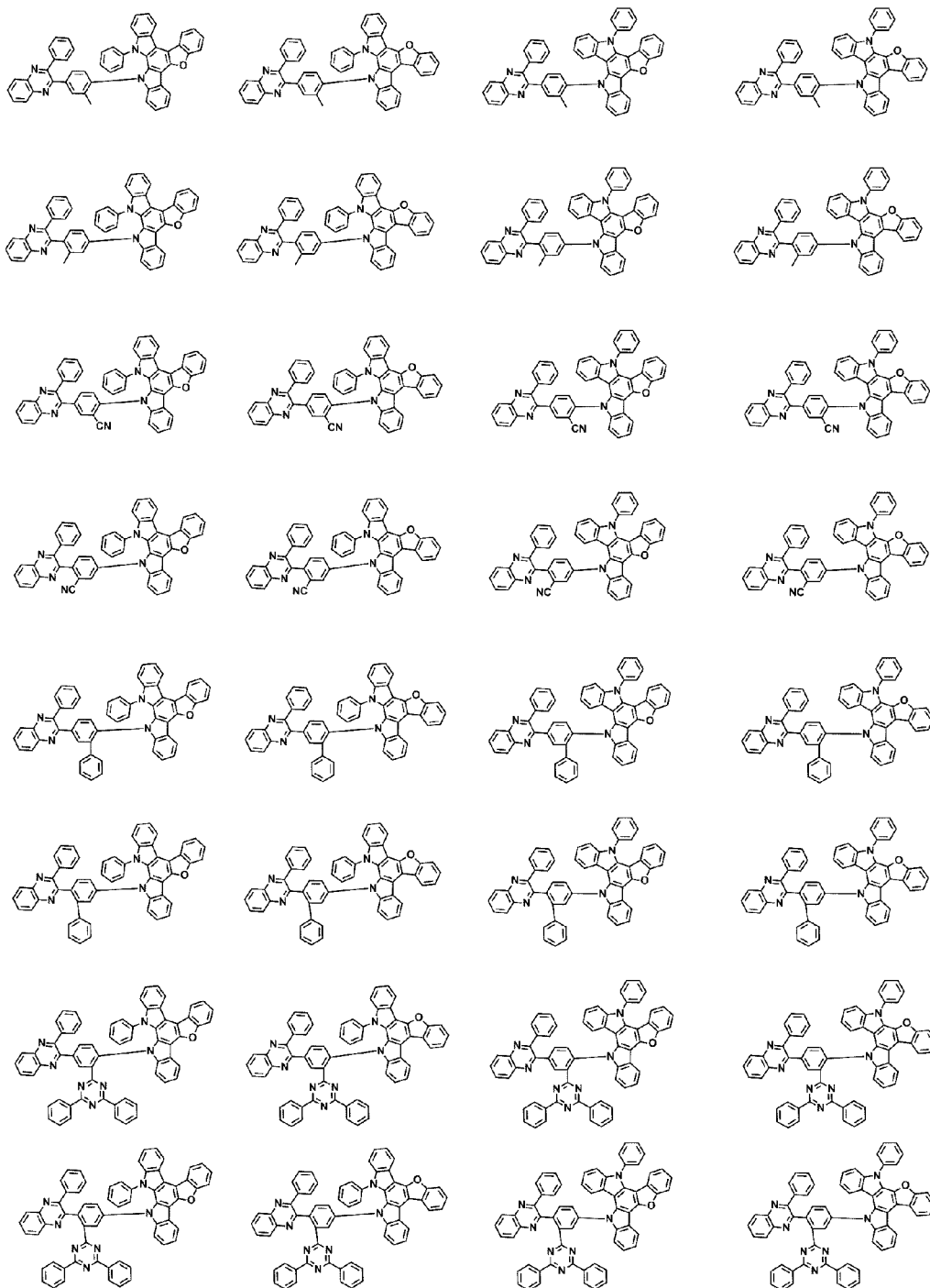
[청구항 4] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 X는 시아노기; 알킬기; 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고, 상기 아릴기는 각각 독립적으로 중수소 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 것인 화합물.

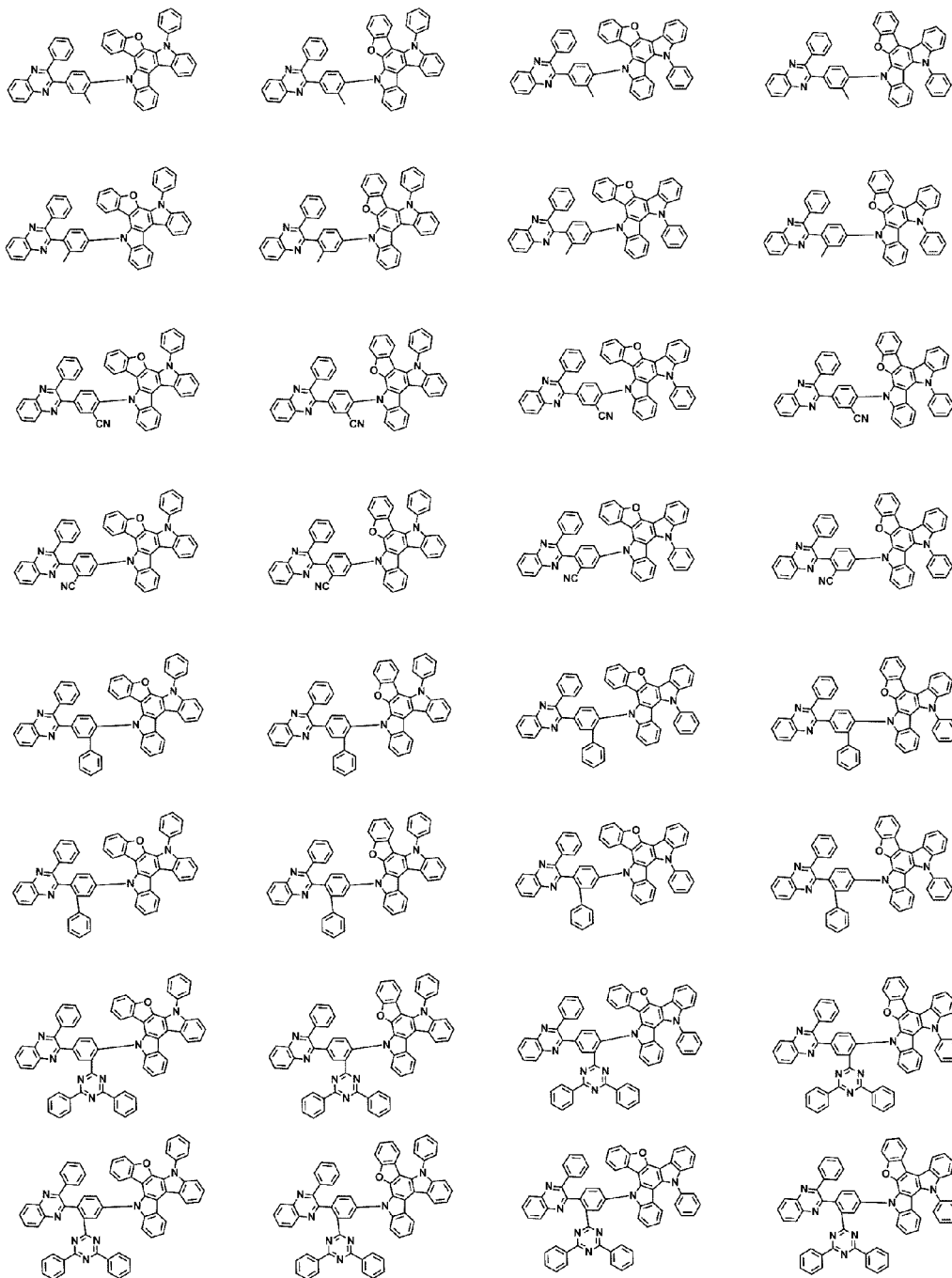
[청구항 5] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일중항(singlet) 에너지 준위와 삼중항(triplet) 에너지 준위의 차는 0.3 eV 이하인 것인 화합물.

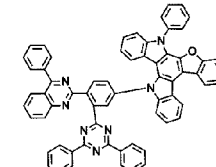
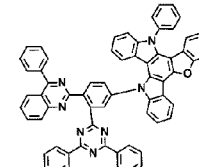
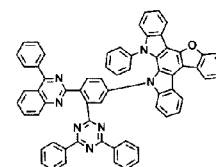
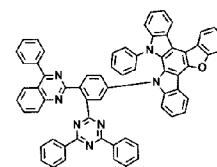
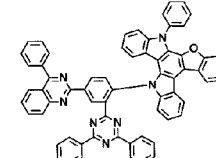
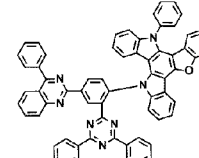
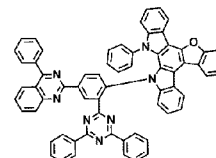
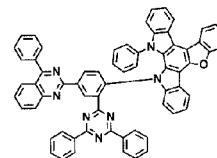
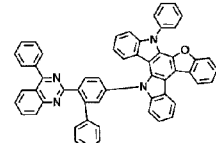
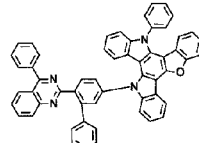
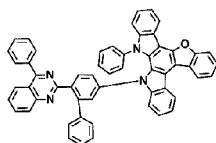
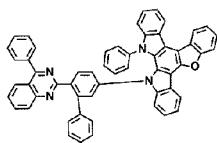
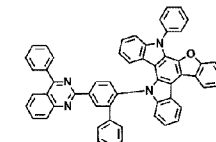
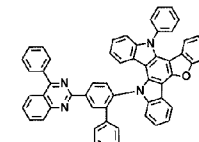
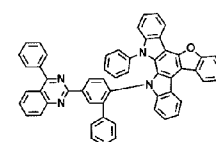
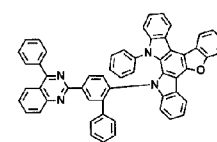
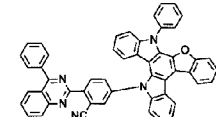
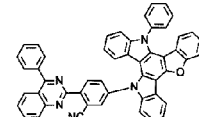
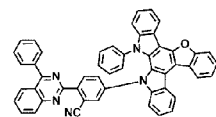
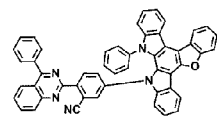
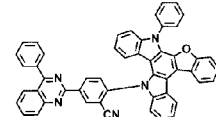
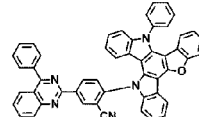
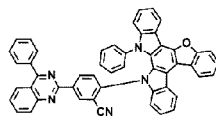
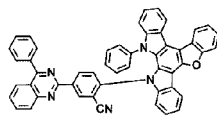
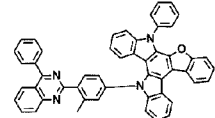
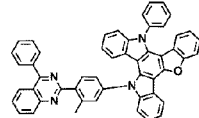
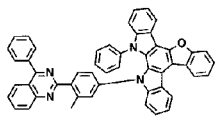
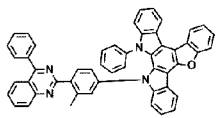
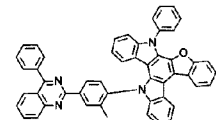
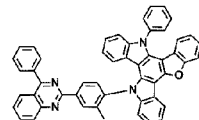
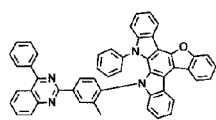
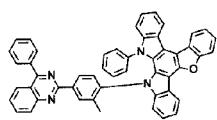
[청구항 6] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

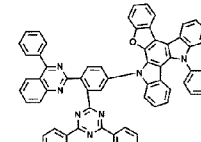
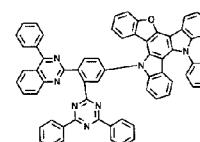
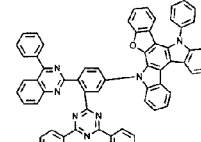
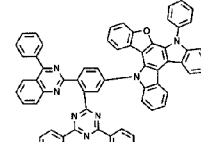
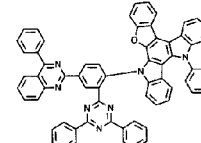
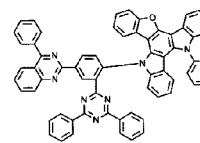
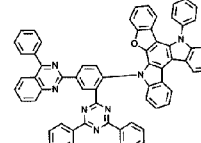
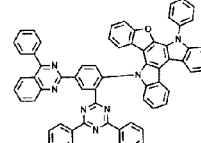
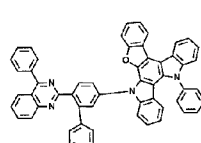
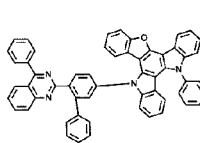
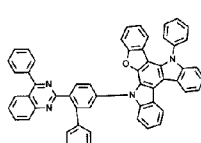
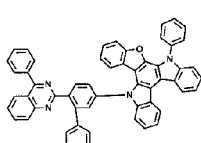
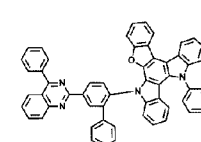
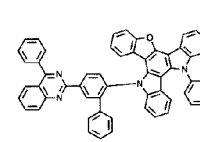
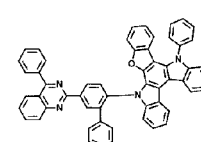
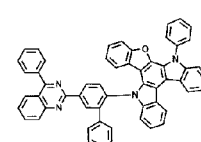
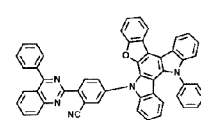
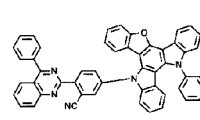
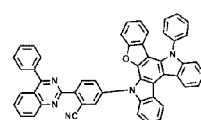
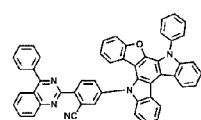
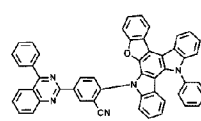
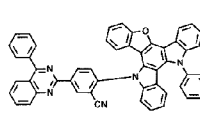
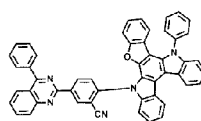
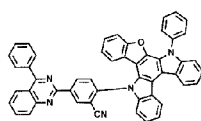
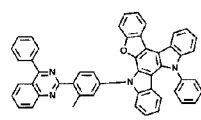
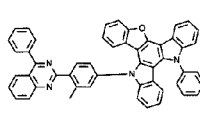
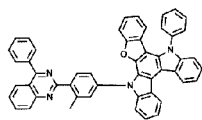
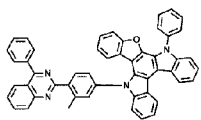
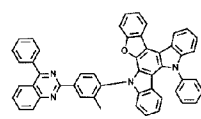
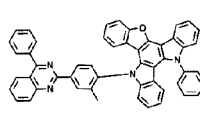
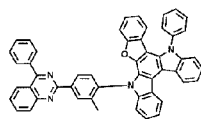
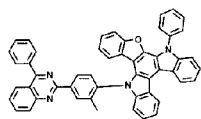


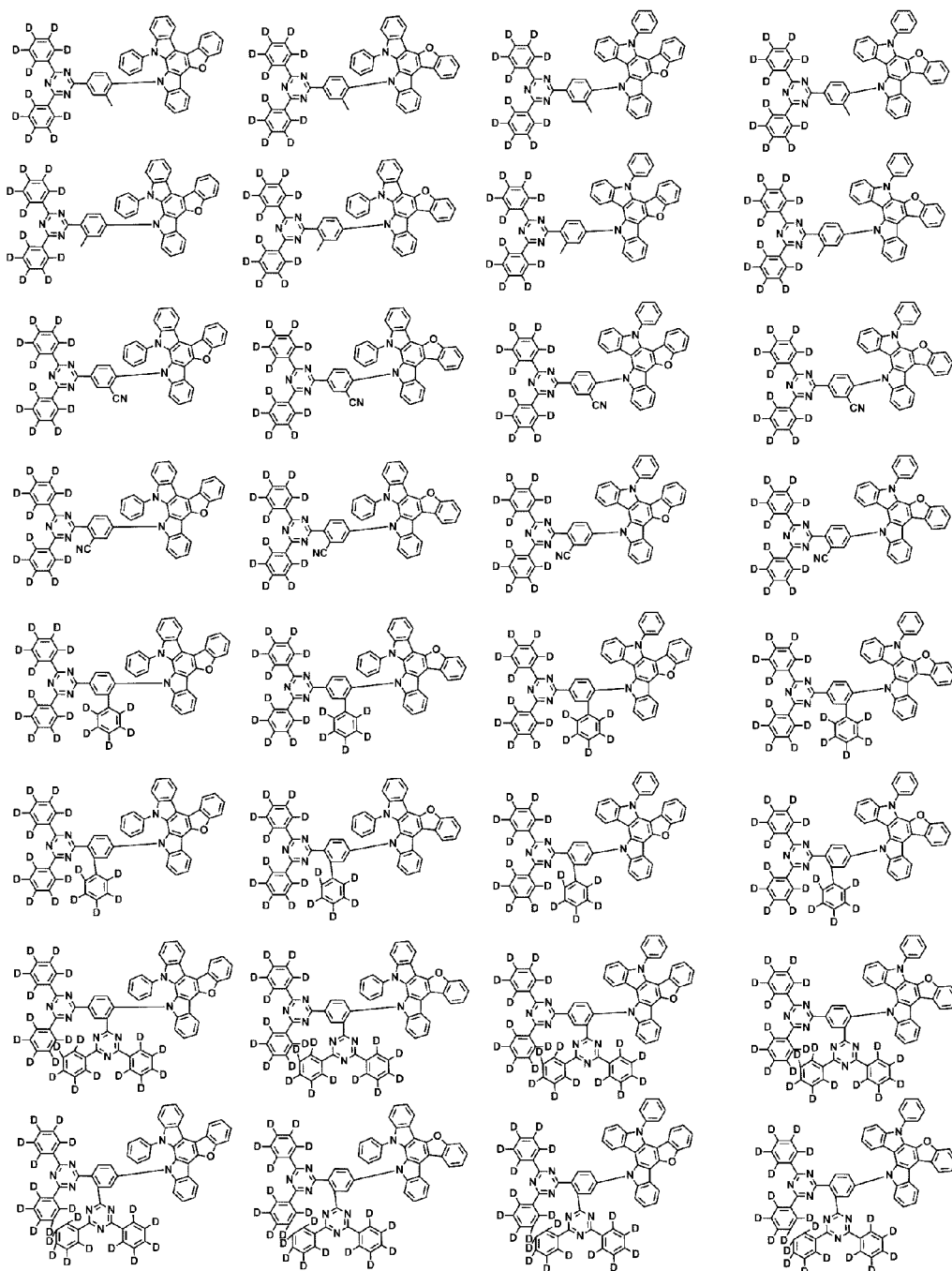


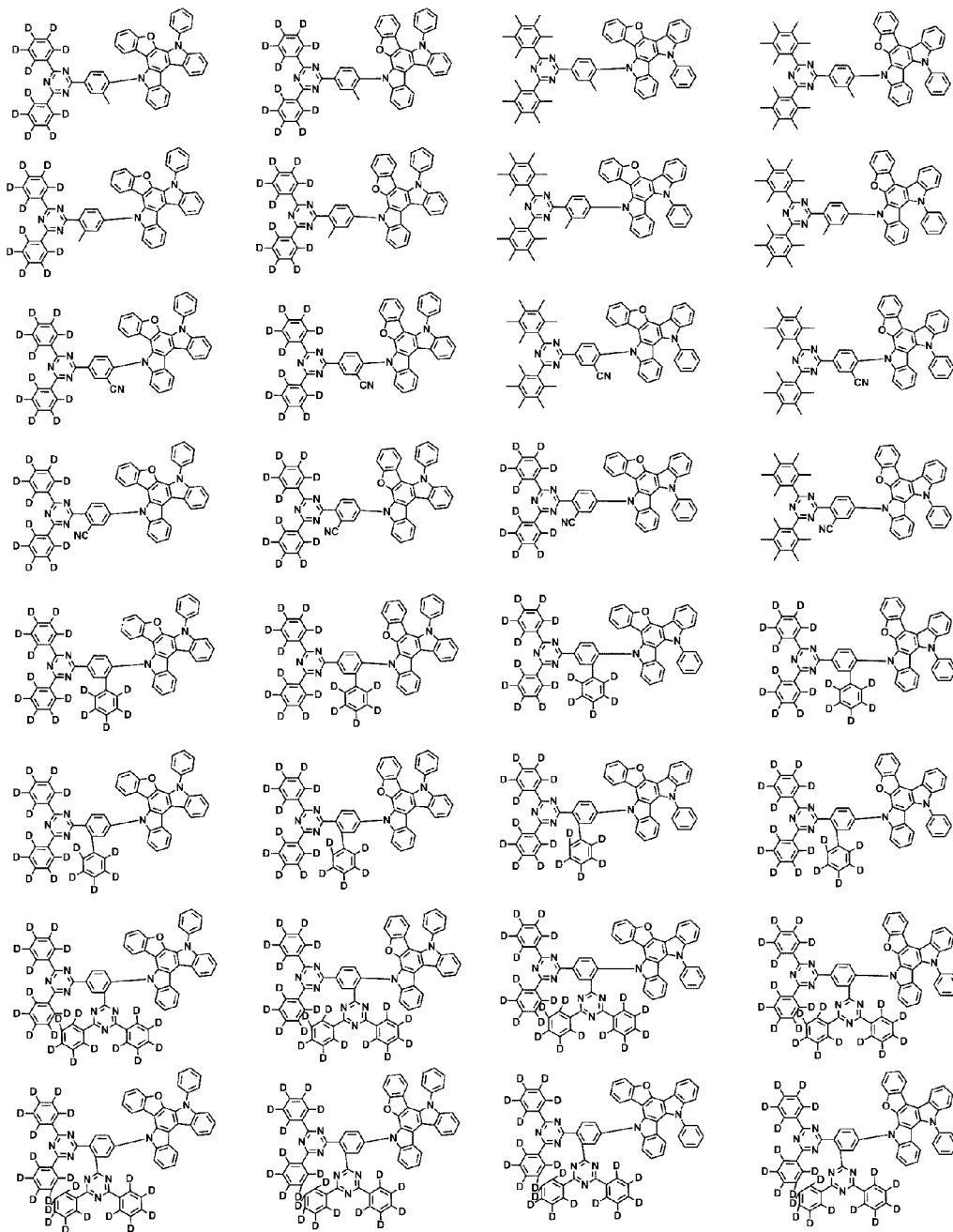


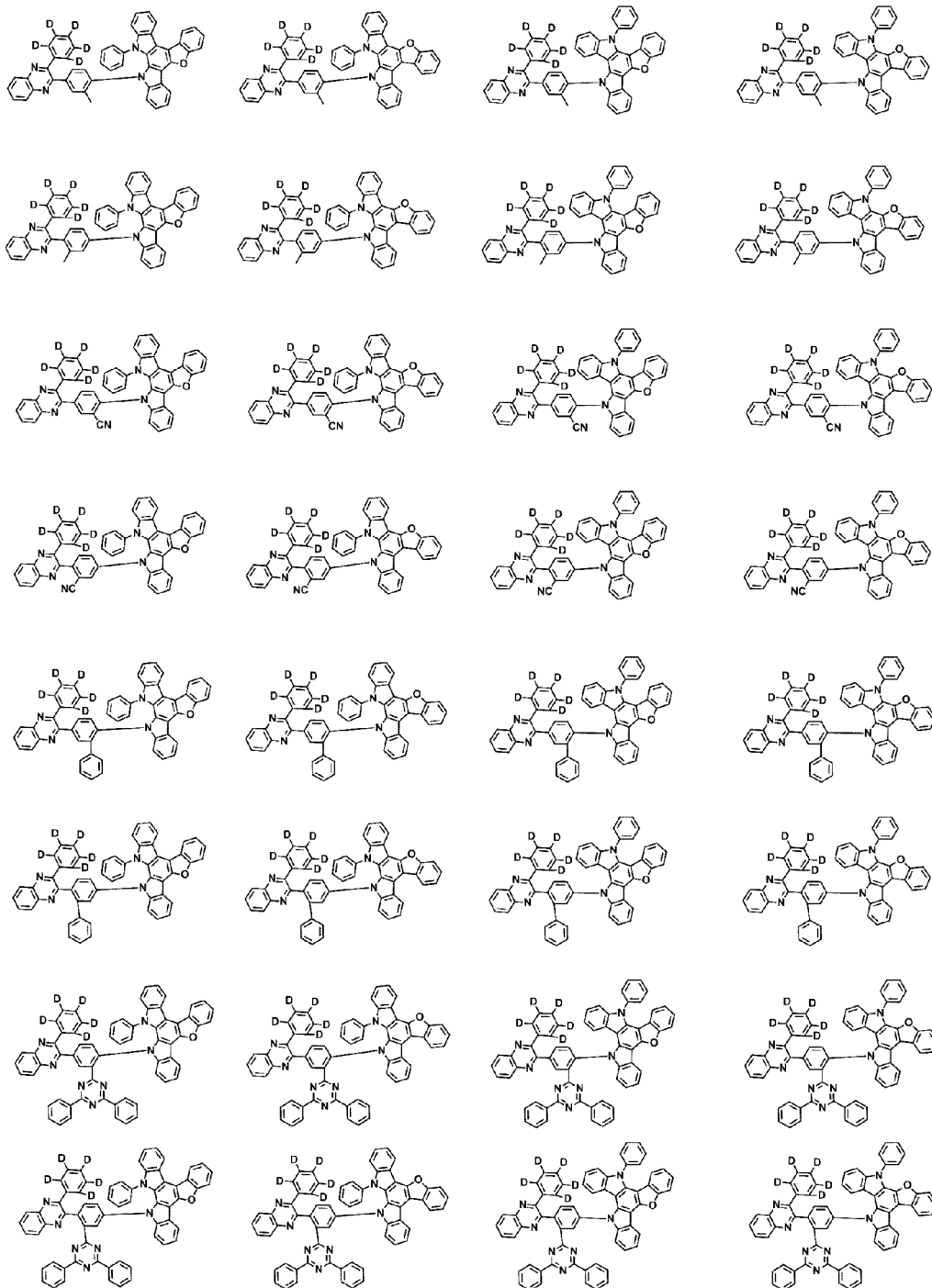


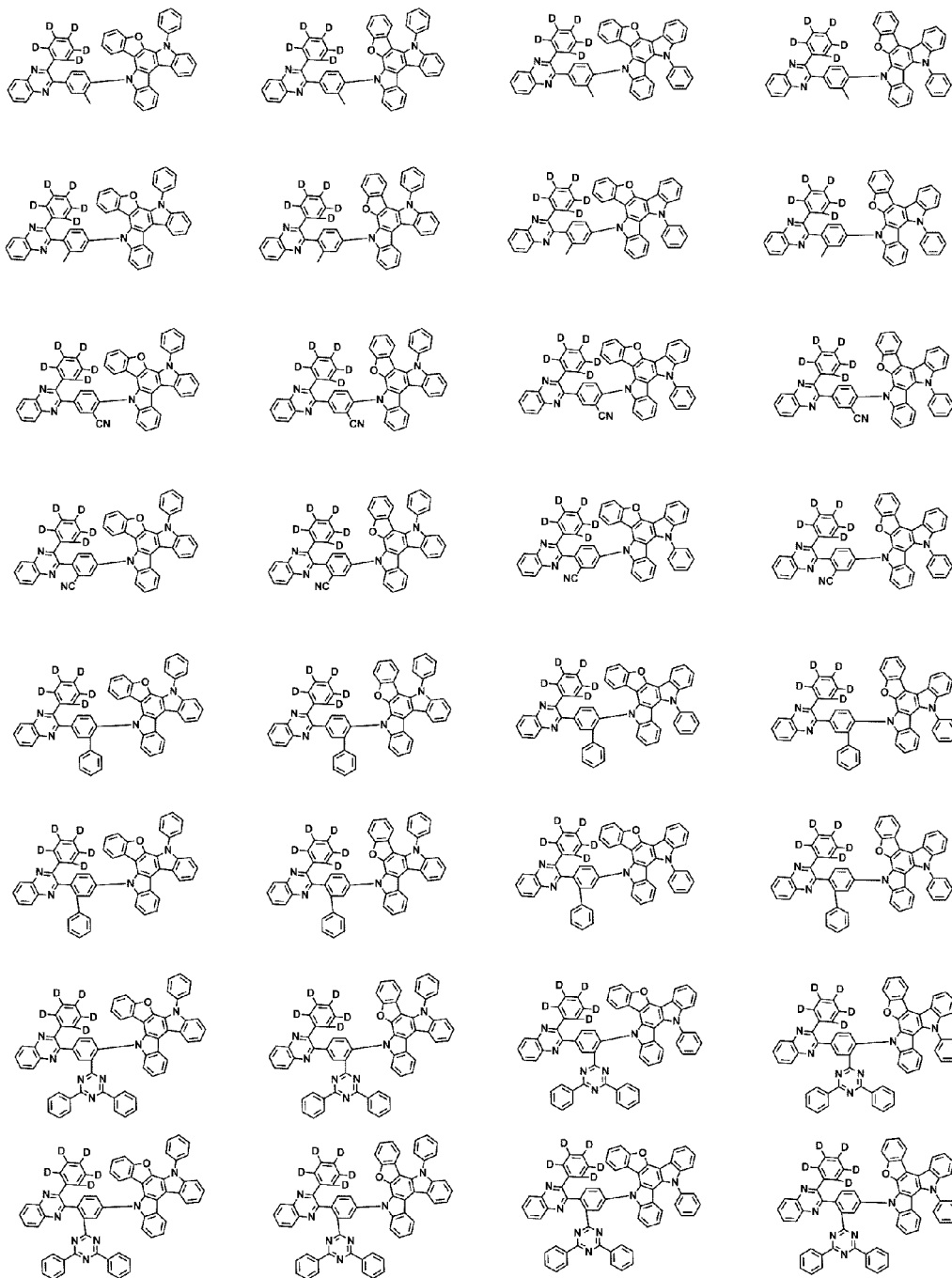


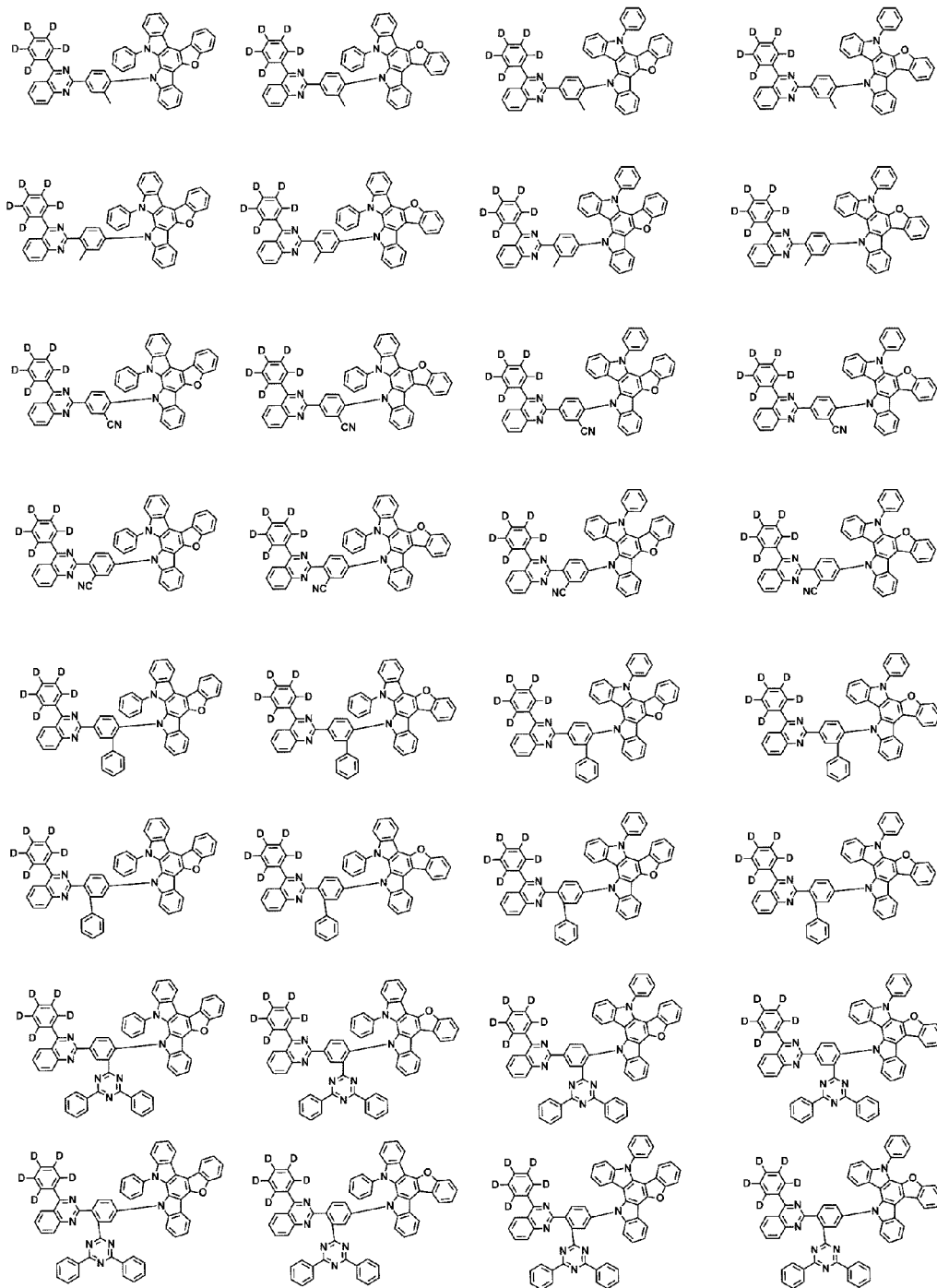


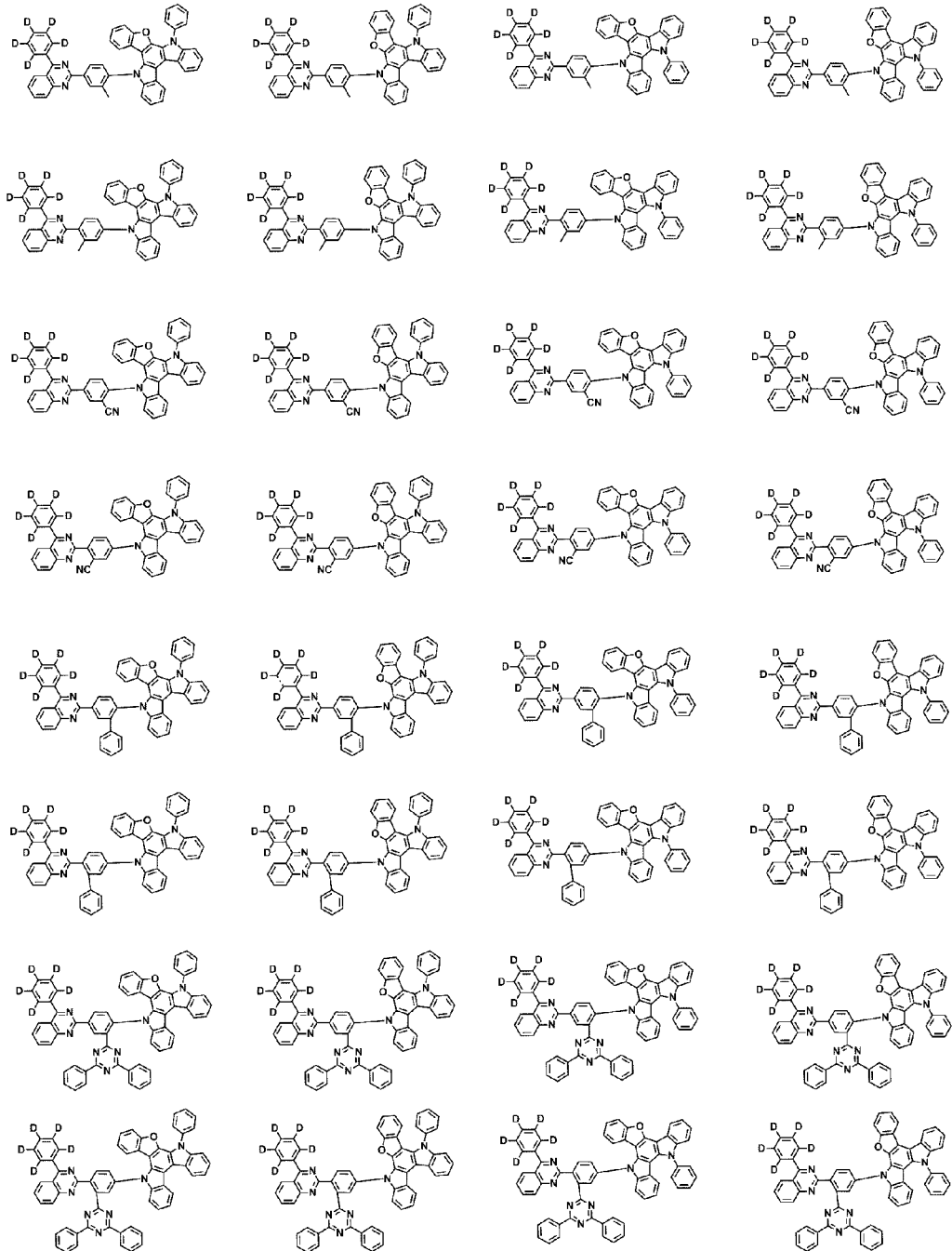












- [청구항 7] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상이 청구항 1 내지 6 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.
- [청구항 8] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층 또는 정공 주입층을 포함하고, 상기 정공 수송층 또는 정공 주입층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 9] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 전자 수송층 또는 전자 주입층을 포함하고, 상기 전자 수송층 또는 전자 주입층은 상기 화합물을 포함하는

- 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 10] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
10
9
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2020/000404

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 491/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 491/14; C07D 251/12; C07D 403/04; C07D 471/04; C07D 491/052; C07D 491/147; C07D 495/14; C09K 11/06; 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), Google & Keywords: organic light emitting diode (OLED), lifetime, driving voltage, electrode, carbazole, benzene

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0135220 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 02 December 2015 See claims 3, 14, 15; paragraph [0131].	1-10
X	US 2014-0353640 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 04 December 2014 See claims 3-22; pages 11, 38; the compounds; paragraph [0125].	1-10
A	KR 10-2014-0039622 A (DOOSAN CORPORATION) 02 April 2014 See the entire document.	1-10
A	KR 10-2015-0115033 A (SFC CO., LTD.) 14 October 2015 See the entire document.	1-10
A	KR 10-2018-0095916 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 28 August 2018 See the entire document.	1-10



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

20 APRIL 2020 (20.04.2020)

Date of mailing of the international search report

20 APRIL 2020 (20.04.2020)

Name and mailing address of the ISA/KR

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

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2020/000404

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0135220 A	02/12/2015	CN 104995195 A	21/10/2015
		CN 104995195 B	30/03/2018
		JP 5877273 B2	02/03/2016
		KR 10-1709031 B1	21/02/2017
		KR 10-2016-0129917 A	09/11/2016
		US 2016-0005977 A1	07/01/2016
		US 9887367 B2	06/02/2018
		WO 2014-157708 A1	02/10/2014
US 2014-0353640 A1	04/12/2014	JP 2015-007036 A	15/01/2015
		JP 6114232 B2	12/04/2017
		US 9991445 B2	05/06/2018
KR 10-2014-0039622 A	02/04/2014	KR 10-1553737 B1	16/09/2015
KR 10-2015-0115033 A	14/10/2015	None	
KR 10-2018-0095916 A	28/08/2018	CN 108699058 A	23/10/2018
		EP 3394062 A1	31/10/2018
		EP 3394062 B1	02/10/2019
		JP 2018-516850 A	28/06/2018
		JP 6375069 B2	15/08/2018
		US 2018-0370981 A1	27/12/2018
		US 2019-0006601 A1	03/01/2019
		WO 2017-109722 A1	29/06/2017
		WO 2017-109727 A1	29/06/2017

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 491/14(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 491/14; C07D 251/12; C07D 403/04; C07D 471/04; C07D 491/052; C07D 491/147; C07D 495/14; C09K 11/06; 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), 구글 & 키워드: 유기발광소자(OLED, Organic Light Emitting Diode), 수명(lifetime), 구동전압(driving voltage), 전극(electrode), 카바졸(carbazole), 벤젠(benzene)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0135220 A (이데미쓰 고산 가부시기가이샤) 2015.12.02 청구항 3, 14, 15; 단락 [0131]	1-10
X	US 2014-0353640 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 2014.12.04 청구항 3-22; 페이지 11, 38 화합물; 단락 [0125]	1-10
A	KR 10-2014-0039622 A (주식회사 두산) 2014.04.02 전체 문헌	1-10
A	KR 10-2015-0115033 A (에스에프씨 주식회사) 2015.10.14 전체 문헌	1-10
A	KR 10-2018-0095916 A (이데미쓰 고산 가부시기가이샤) 2018.08.28 전체 문헌	1-10

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

- “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
- “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌
- “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가진 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

2020년 04월 20일 (20.04.2020)

국제조사보고서 발송일

2020년 04월 20일 (20.04.2020)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



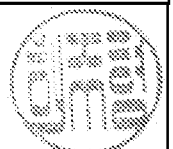
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-8150



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0135220 A	2015/12/02	CN 104995195 A CN 104995195 B JP 5877273 B2 KR 10-1709031 B1 KR 10-2016-0129917 A US 2016-0005977 A1 US 9887367 B2 WO 2014-157708 A1	2015/10/21 2018/03/30 2016/03/02 2017/02/21 2016/11/09 2016/01/07 2018/02/06 2014/10/02
US 2014-0353640 A1	2014/12/04	JP 2015-007036 A JP 6114232 B2 US 9991445 B2	2015/01/15 2017/04/12 2018/06/05
KR 10-2014-0039622 A	2014/04/02	KR 10-1553737 B1	2015/09/16
KR 10-2015-0115033 A	2015/10/14	없음	
KR 10-2018-0095916 A	2018/08/28	CN 108699058 A EP 3394062 A1 EP 3394062 B1 JP 2018-516850 A JP 6375069 B2 US 2018-0370981 A1 US 2019-0006601 A1 WO 2017-109722 A1 WO 2017-109727 A1	2018/10/23 2018/10/31 2019/10/02 2018/06/28 2018/08/15 2018/12/27 2019/01/03 2017/06/29 2017/06/29