

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020년 1월 9일 (09.01.2020)



(10) 국제공개번호
WO 2020/009492 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 417/14 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 251/24 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 277/62 (2006.01)

PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/008191

(22) 국제출원일: 2019년 7월 4일 (04.07.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0078358 2018년 7월 5일 (05.07.2018) KR

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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(72) 발명자: 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이 동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 장분재 (JANG, Boonjae); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이정하 (LEE, Jungha); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한수진 (HAN, Su Jin); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 박של찬 (PARK, Seulchan); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 황성현 (HWANG, Sunghyun); 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,

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

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

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

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

| |
|---|
| 4 |
| 3 |
| 2 |
| 1 |



WO 2020/009492 A1

명세서

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

[1] 본 발명은 2018년 07월 05일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2018-0078358의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

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

배경기술

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

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

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

[6] 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로 구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도펀트를

발광층에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도펀트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도펀트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도펀트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

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

발명의 상세한 설명

기술적 과제

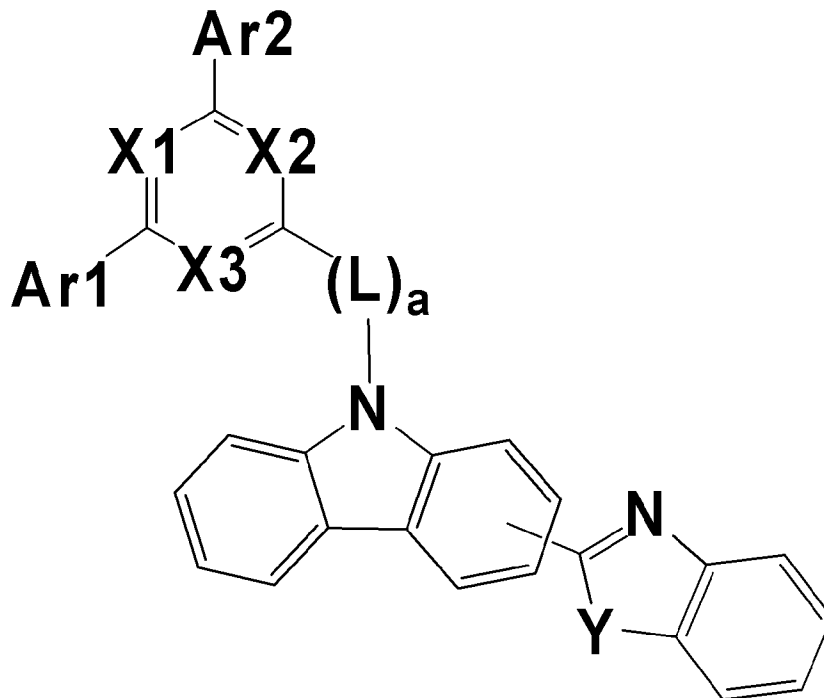
- [8] 본 명세서에는 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

과제 해결 수단

- [9] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 것인 화합물을 제공하고자 한다.

- [10] [화학식 1]

- [11]



- [12] 상기 화학식 1에 있어서,
 [13] X1 내지 X3 중 적어도 두 개는 N이며, 나머지는 CR이며,
 [14] R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
 [15] Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
 [16] Y는 O; 또는 S이고,
 [17] L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이며,

- [18] a는 1 또는 2이고,
 [19] a가 2인 경우, 괄호내 L은 서로 같거나 상이하다.
 [20] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

- [21] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자에서 또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 본 명세서에 기재된 화합물은 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등의 재료로 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [22] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
 [23] 도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
 [24] <부호의 설명>
 [25] 1: 기관
 [26] 2: 양극
 [27] 3: 발광층
 [28] 4: 음극
 [29] 5: 정공주입층
 [30] 6: 정공수송층
 [31] 7: 발광층
 [32] 8: 전자수송층

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [33] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
 [34] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 발광 소자의 유기물층에 사용하는 경우, 유기 발광 소자의 효율이 향상된다.
 [35] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
 [36] 본 명세서에 있어서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.
 [37] 본 명세서에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은

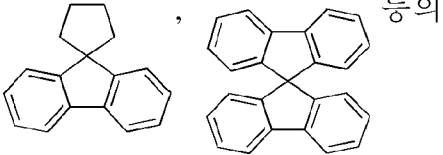
아니다.

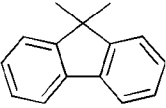
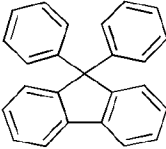
- [38] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [39] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.
- [40] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소(F), 염소(Cl), 브롬(Br) 또는 요오드(I)가 있다.
- [42] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [43] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [44] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 2 이상의 아릴기를 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.
- [45] 아릴아민기의 구체적인 예로는 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 3-메틸-페닐아민기, 4-메틸-나프틸아민기, 2-메틸-비페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸

아민기, 바이페닐 페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[46] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 트리페닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

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

[48] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,  등의

스피로플루오레닐기,  (9,9-디메틸플루오레닐기), 및 

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

[49] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 헤테로 고리기의 예로는 예로는 피리딜기, 피롤기, 피리미딜기, 피리다지닐기, 퓨라닐기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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

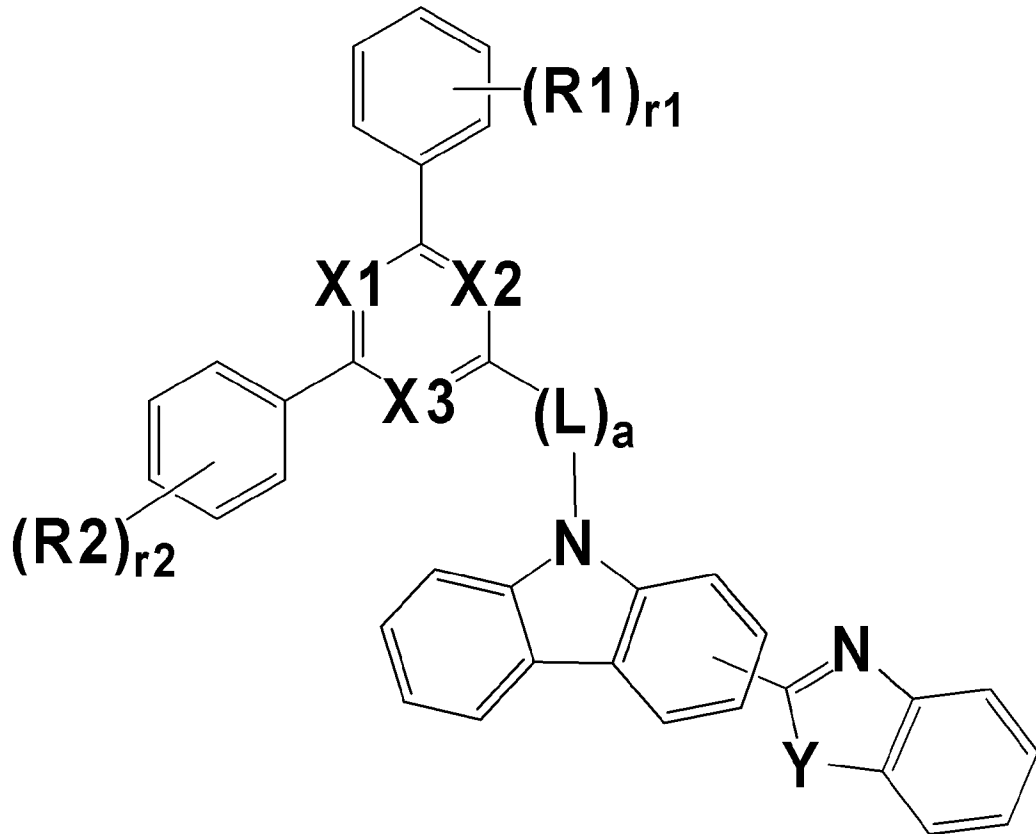
[51] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오쏘(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한"기로 해석될 수 있다.

[52] 본 명세서에 있어서, 인접한 기가 서로 결합하여 형성되는 치환 또는 비치환된 고리에서, "고리"는 탄화수소고리; 또는 헤테로고리를 의미한다.

[53] 본 명세서에 있어서, 탄화수소고리는 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의

- 축합고리일 수 있으며, 상기 1가가 아닌 것을 제외하고 상기 시클로알킬기 또는 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [54] 본 명세서에 있어서, 방향족 탄화수소고리는 1가인 것을 제외하고는 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [55] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 N, O, P, S, Si 및 Se 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 상기 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있으며, 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 방향족 헤테로고리는 1가가 아닌 것을 제외하고 상기 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [56] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, X1 내지 X3 중 적어도 두 개는 N이며, 나머지는 CR이다.
- [57] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, X1 및 X3은 N이다.
- [58] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, X1 및 X2는 N이다.
- [59] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, X2 및 X3은 N이다.
- [60] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, X1 내지 X3은 N이다.
- [61] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [62] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [63] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R은 수소; 또는 중수소이다.
- [64] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [65] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리기이다.
- [66] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [67] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 15의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 15의 헤테로고리기이다.
- [68] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.
- [69] [화학식 2]

[70]



[71] 상기 화학식 2에서, X1 내지 X3, L, a 및 Y는 화학식 1의 정의와 같고,

[72] R1 및 R2는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이거나, 또는 인접한 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

[73] r1 및 r2는 각각 독립적으로, 1 내지 5의 정수이고,

[74] r1 및 r2가 각각 2이상인 경우, 괄호 내 구조는 서로 동일하거나 상이하다.

[75] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R1 및 R2는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 페닐기; 또는 나프틸기이다.

[76] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R1 및 R2는 각각 독립적으로, 수소; 또는 페닐기이다.

[77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 인접한 R1은 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

[78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 인접한 R1은 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성한다.

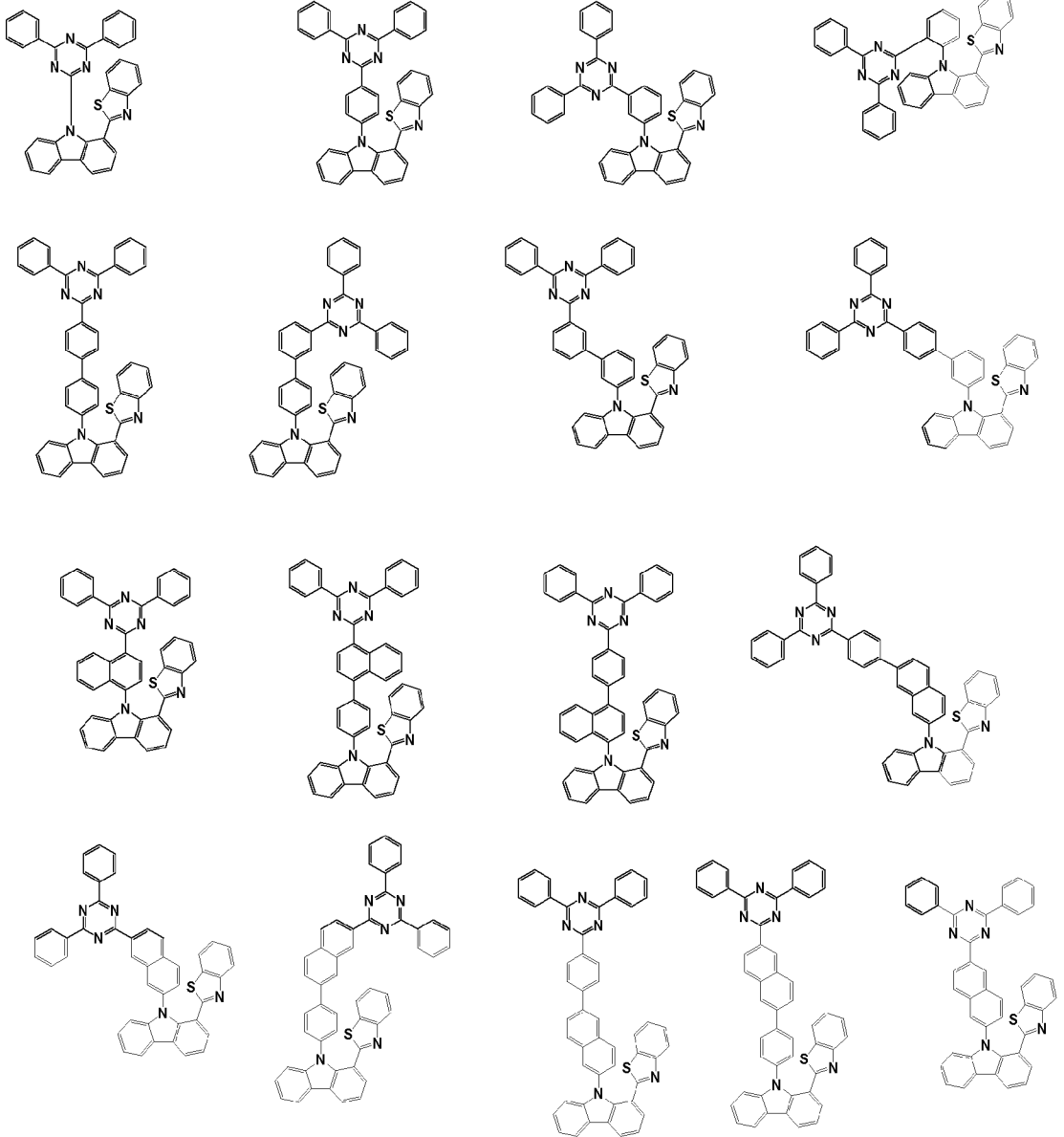
[79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 인접한 R1은 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 벤젠; 치환 또는 비치환된 나프탈렌; 치환 또는 비치환된 인덴(indene); 치환 또는 비치환된 디히드로인덴(dihydroindene); 치환 또는 비치환된 디히드로페난트렌(dihydrophenanthrene); 치환 또는 비치환된 벤조퓨란; 또는 치환 또는 비치환된 벤조티오펜을 형성한다.

[80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는

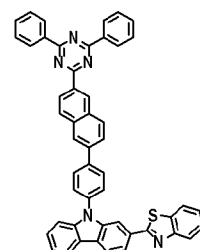
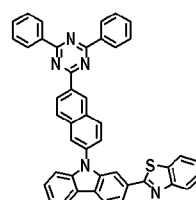
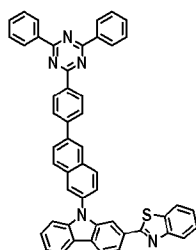
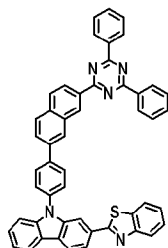
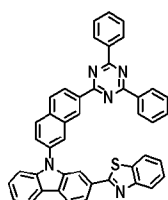
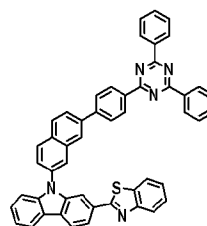
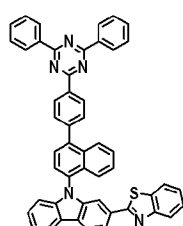
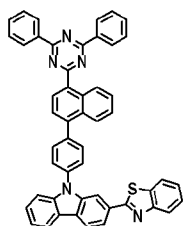
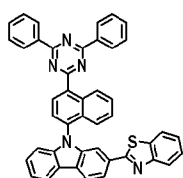
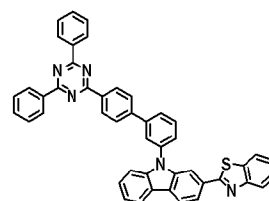
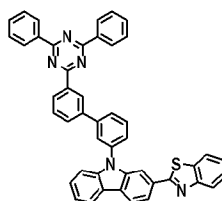
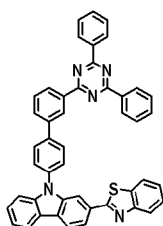
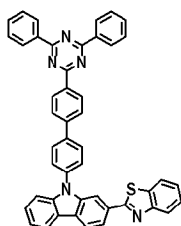
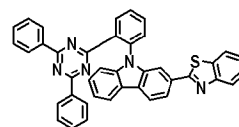
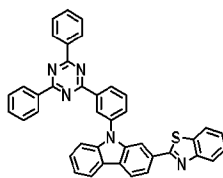
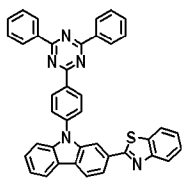
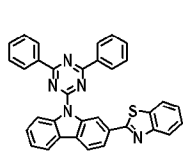
비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 치환 또는 비치환된 파이레닐기; 치환 또는 비치환된 페릴레닐기; 치환 또는 비치환된 트리페닐기; 치환 또는 비치환된 크라이세닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기이다.

- [81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 서로 동일하다.
- [82] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Ar1 및 Ar2는 서로 상이하다.
- [83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.
- [84] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 15의 아릴렌기이다.
- [85] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프탈렌기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기; 치환 또는 비치환된 2개의 페난트렌기; 치환 또는 비치환된 2개의 트리페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 2개의 플루오렌기이다.
- [86] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프탈렌기이다.
- [87] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, a는 1 또는 2이다.
- [88] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, a는 1이다.
- [89] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, a는 2이다.
- [90] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Y는 O; 또는 S이다.
- [91] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Y는 O이다.
- [92] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, Y는 S이다.
- [93] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 구조들 중 어느 하나로 표시된다.

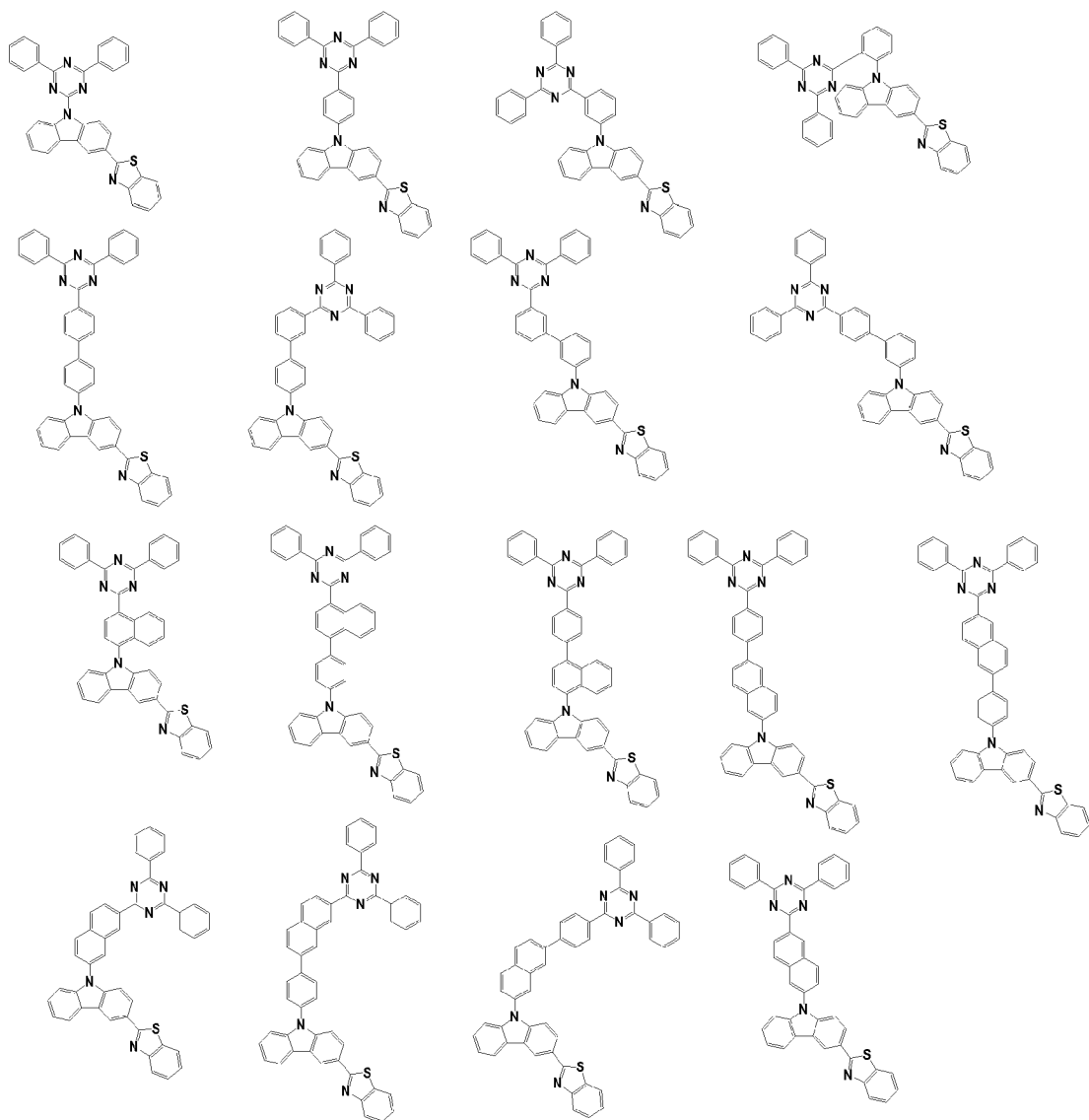
[94]



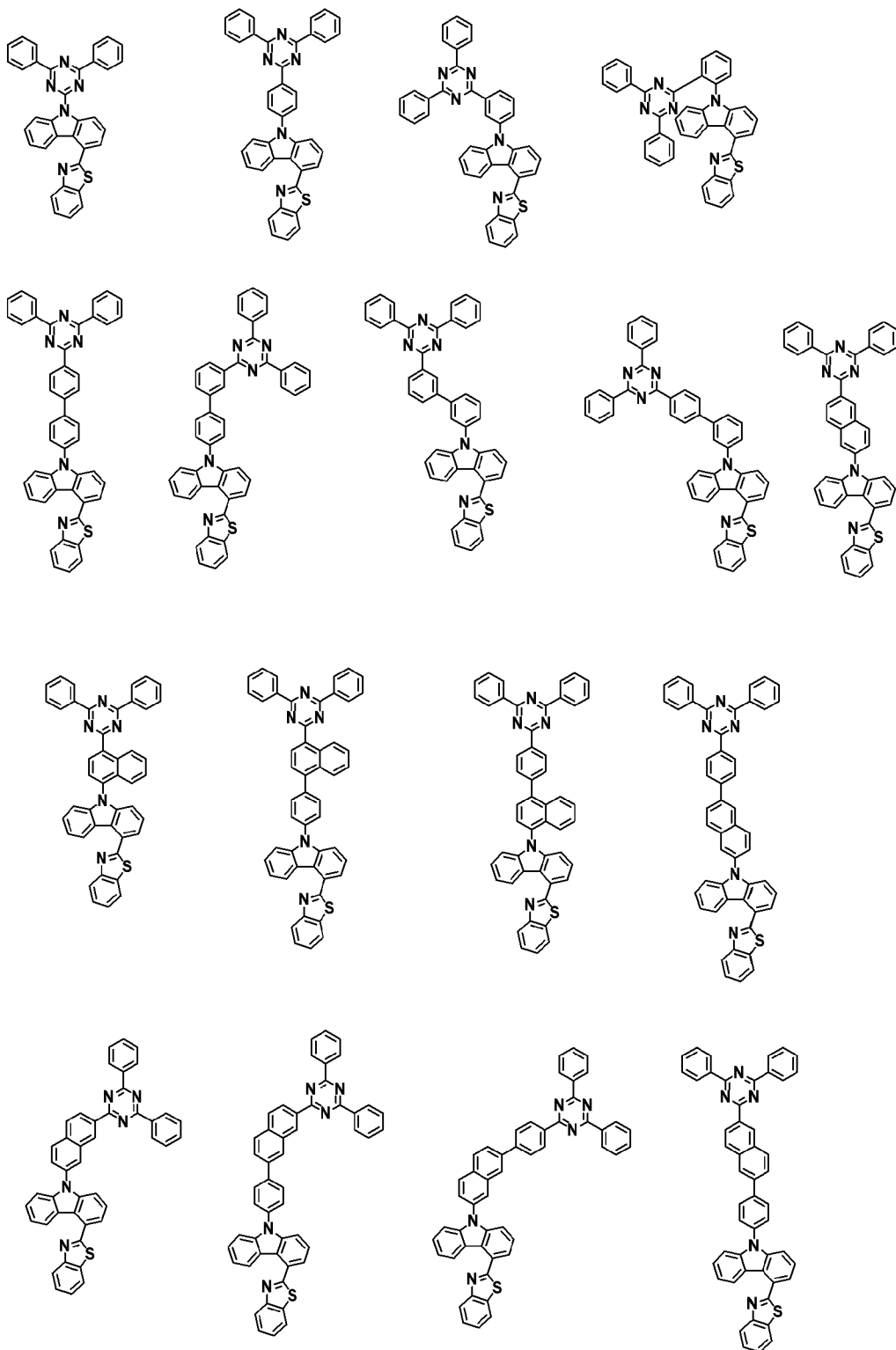
[95]



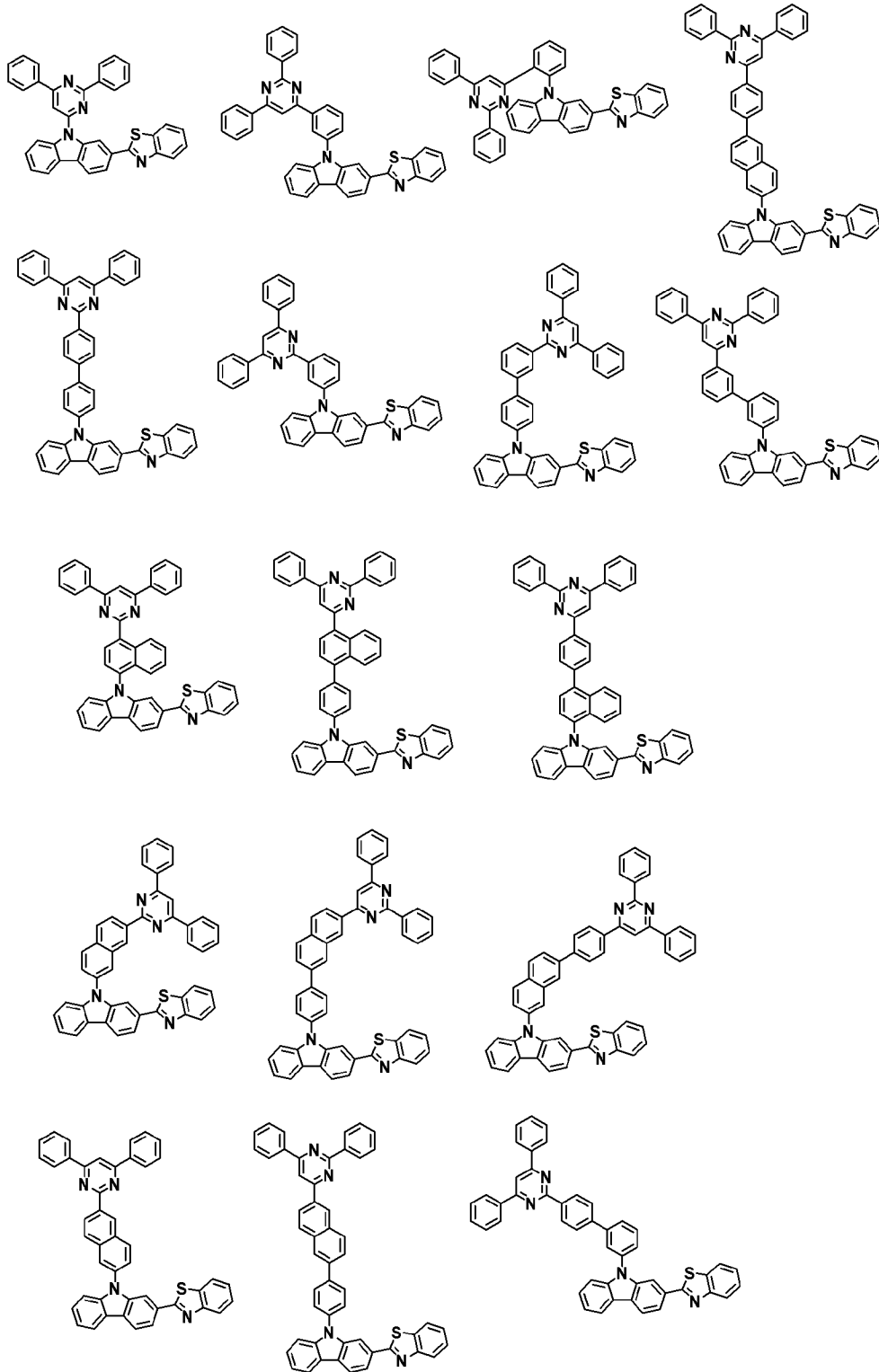
[96]



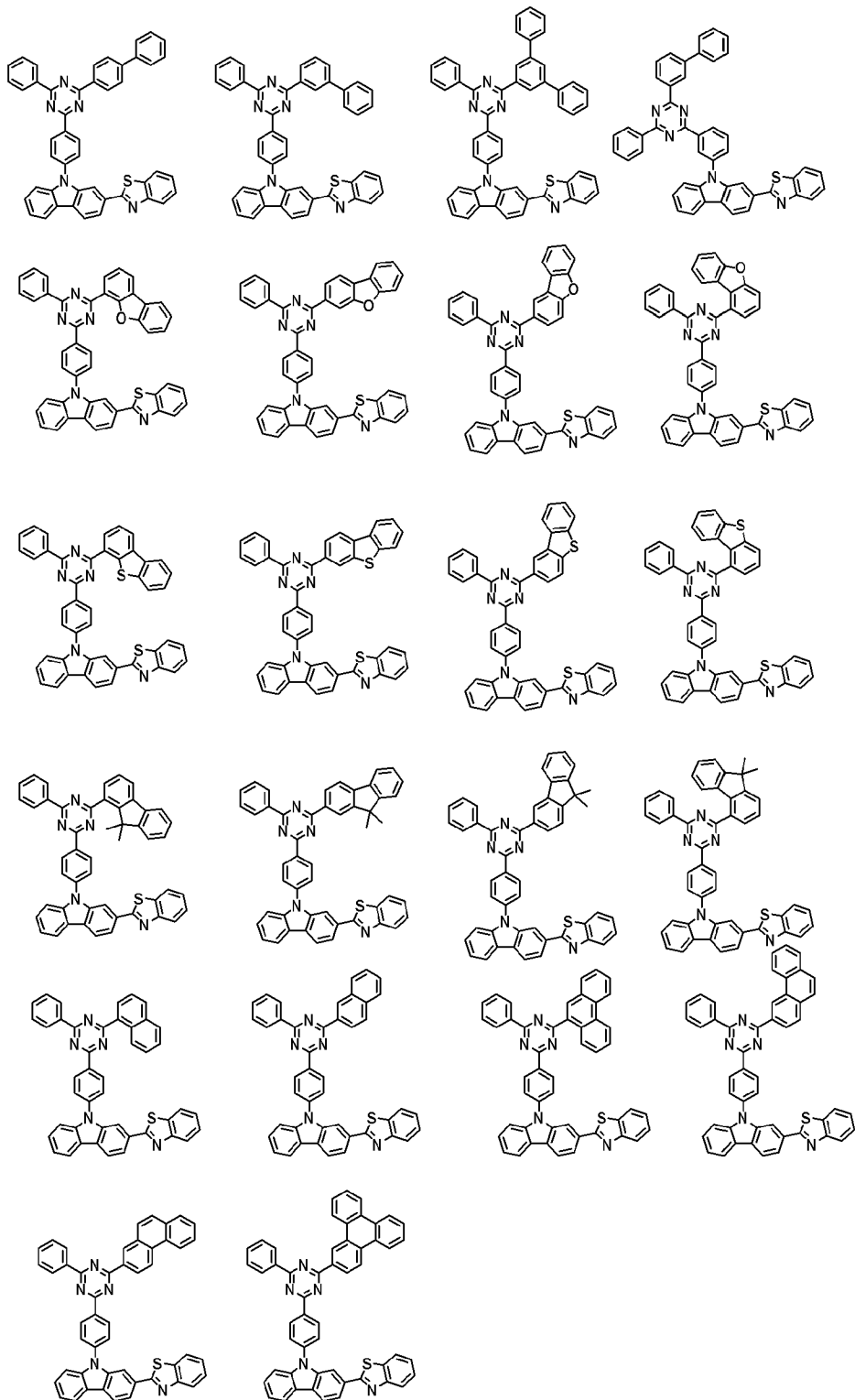
[97]



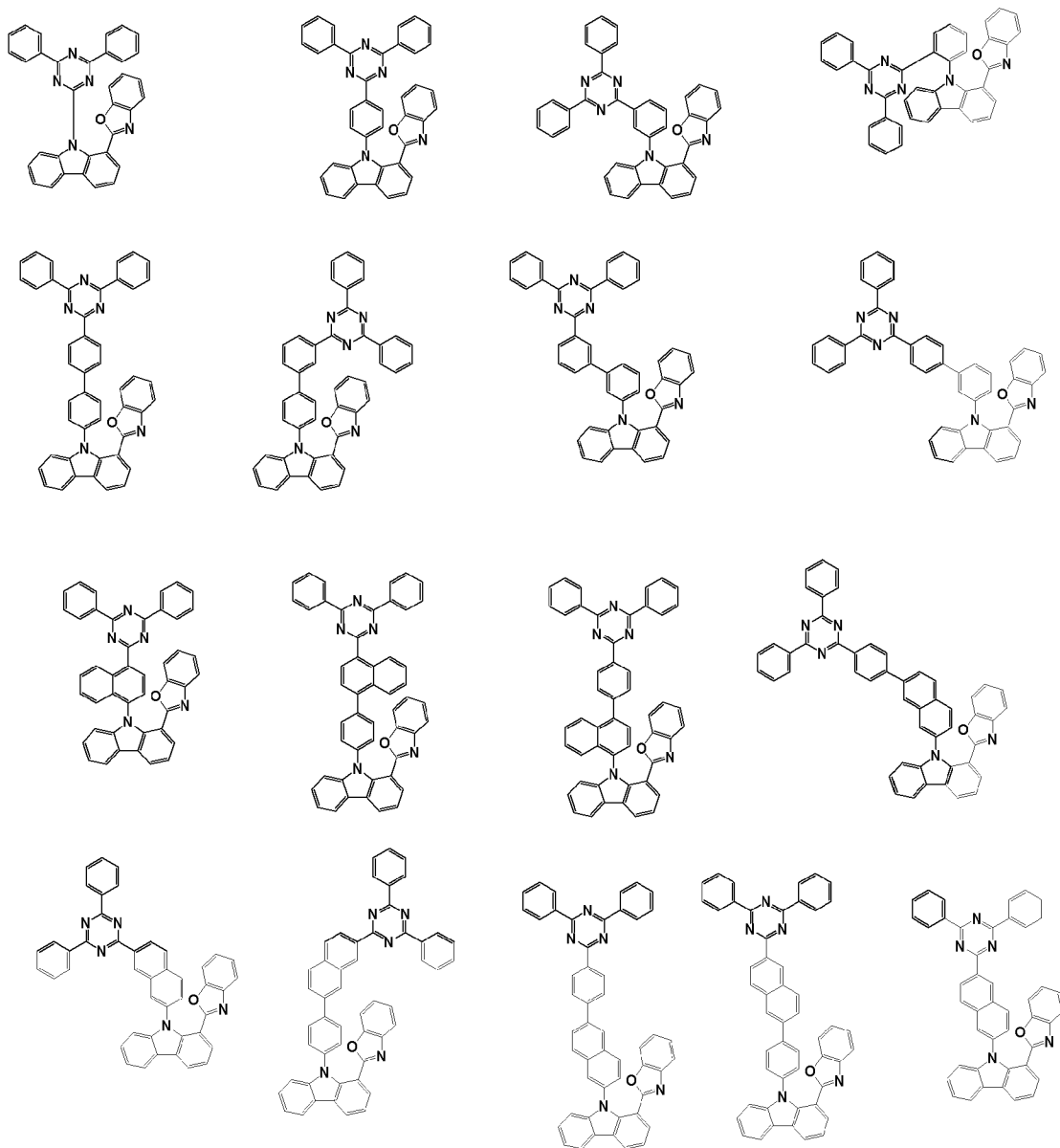
[98]



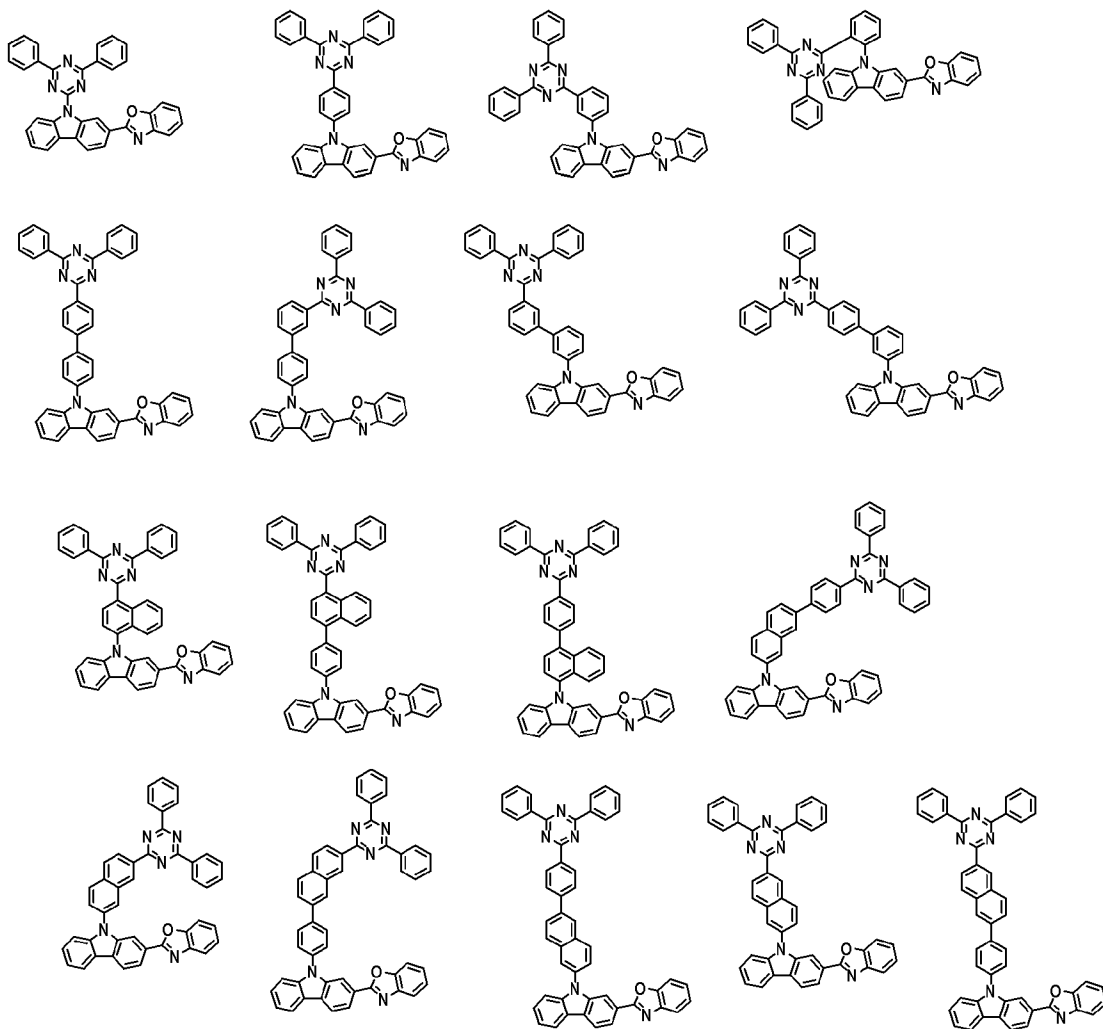
[99]



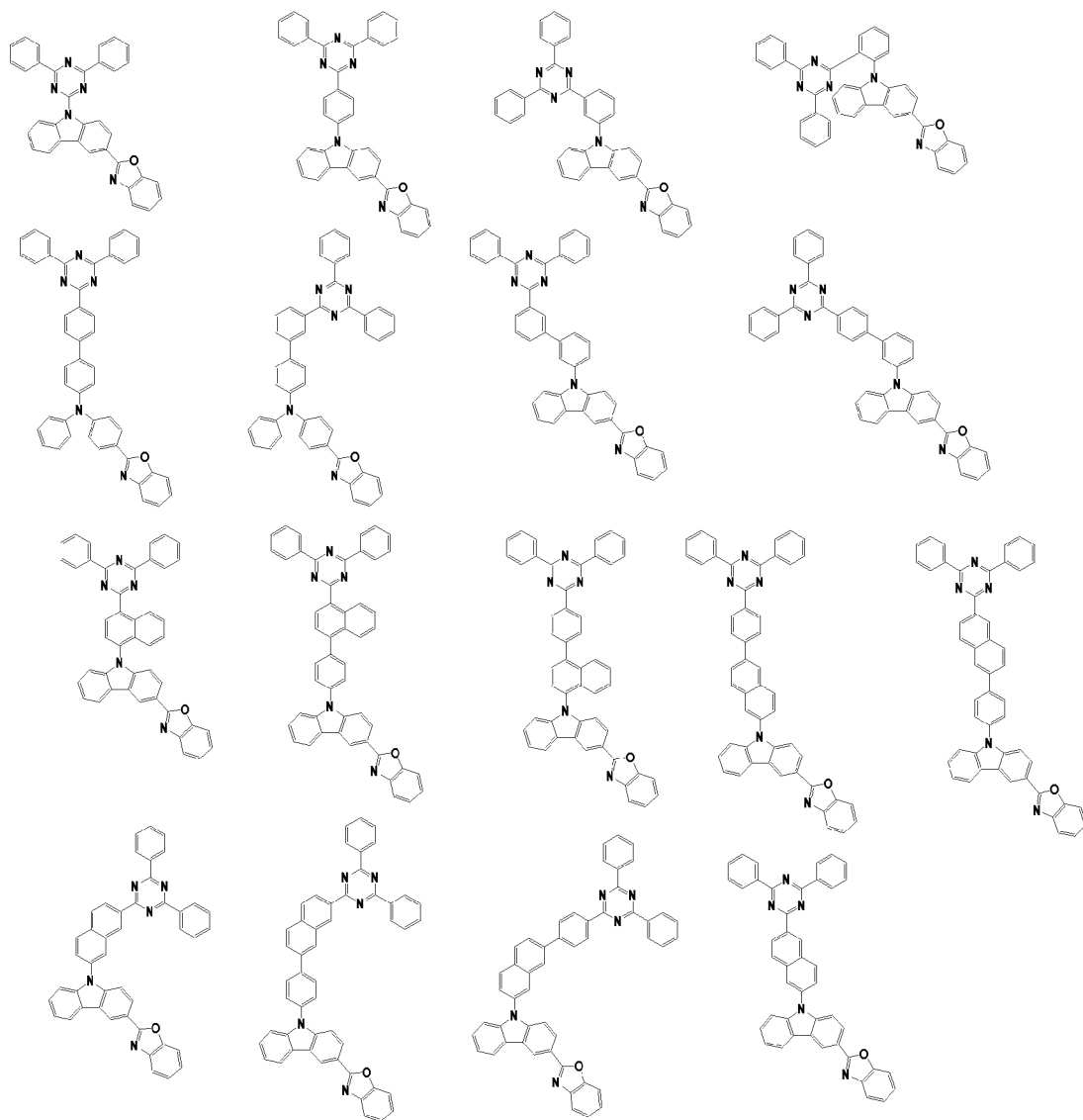
[100]



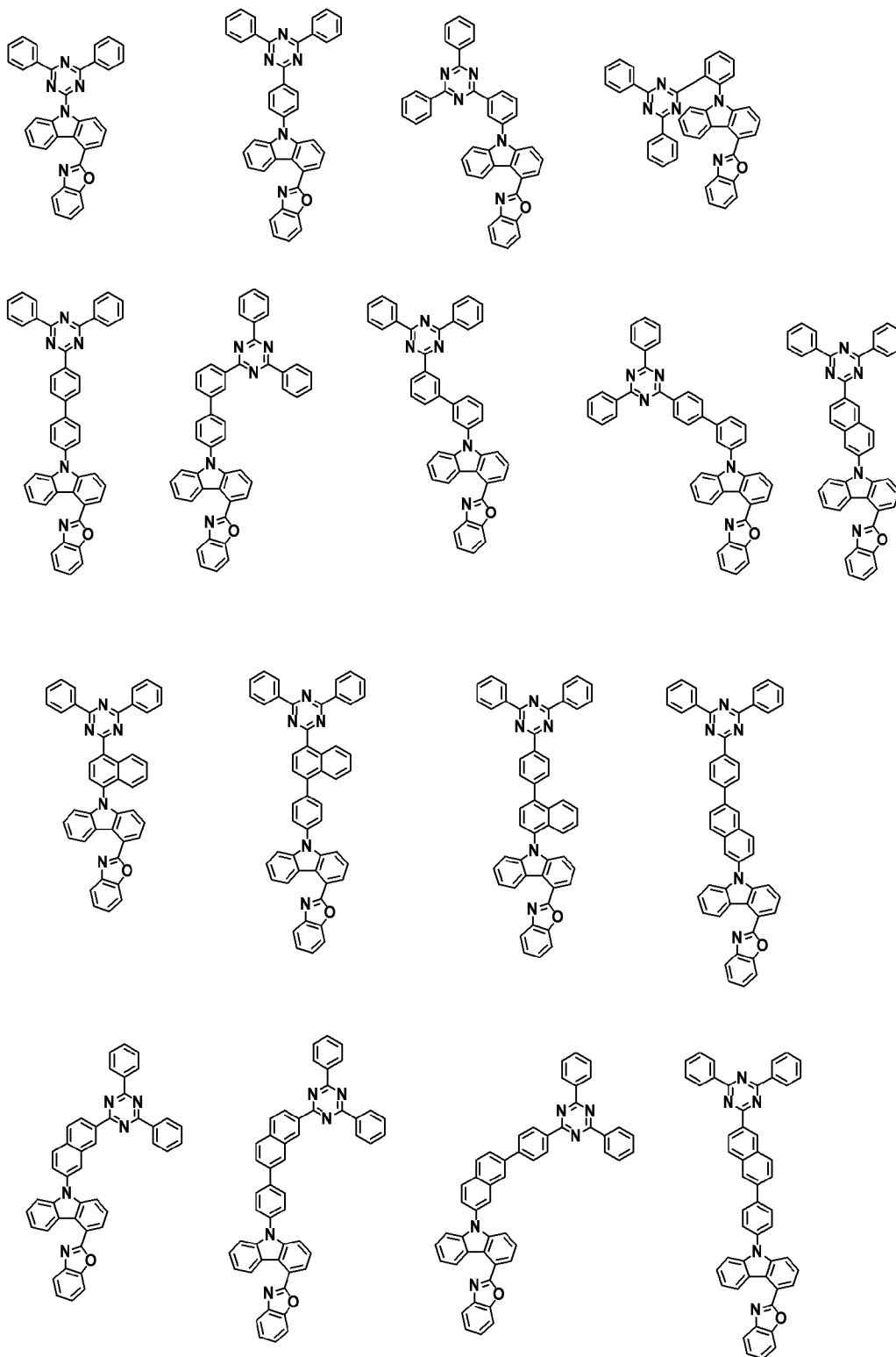
[101]



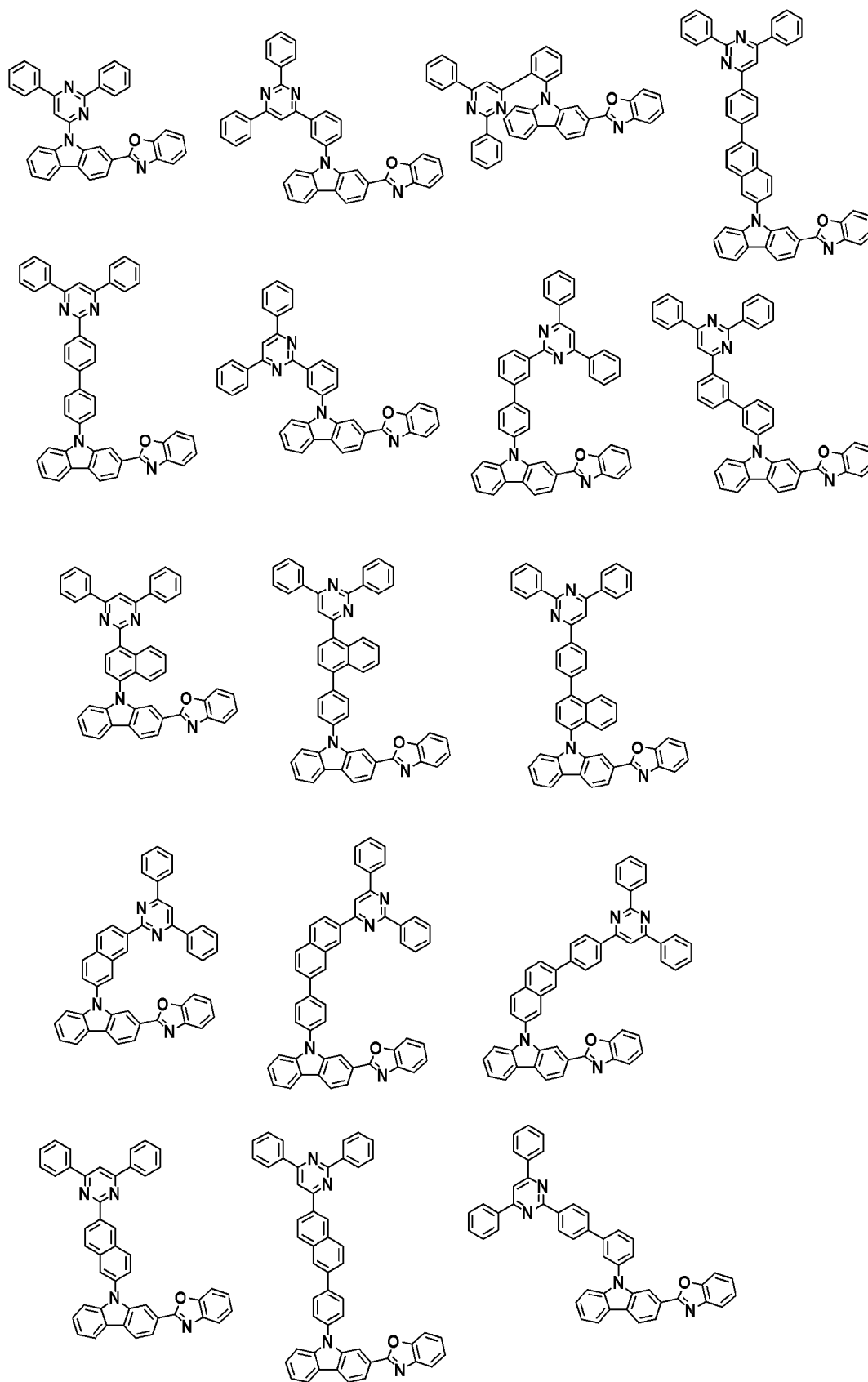
[102]



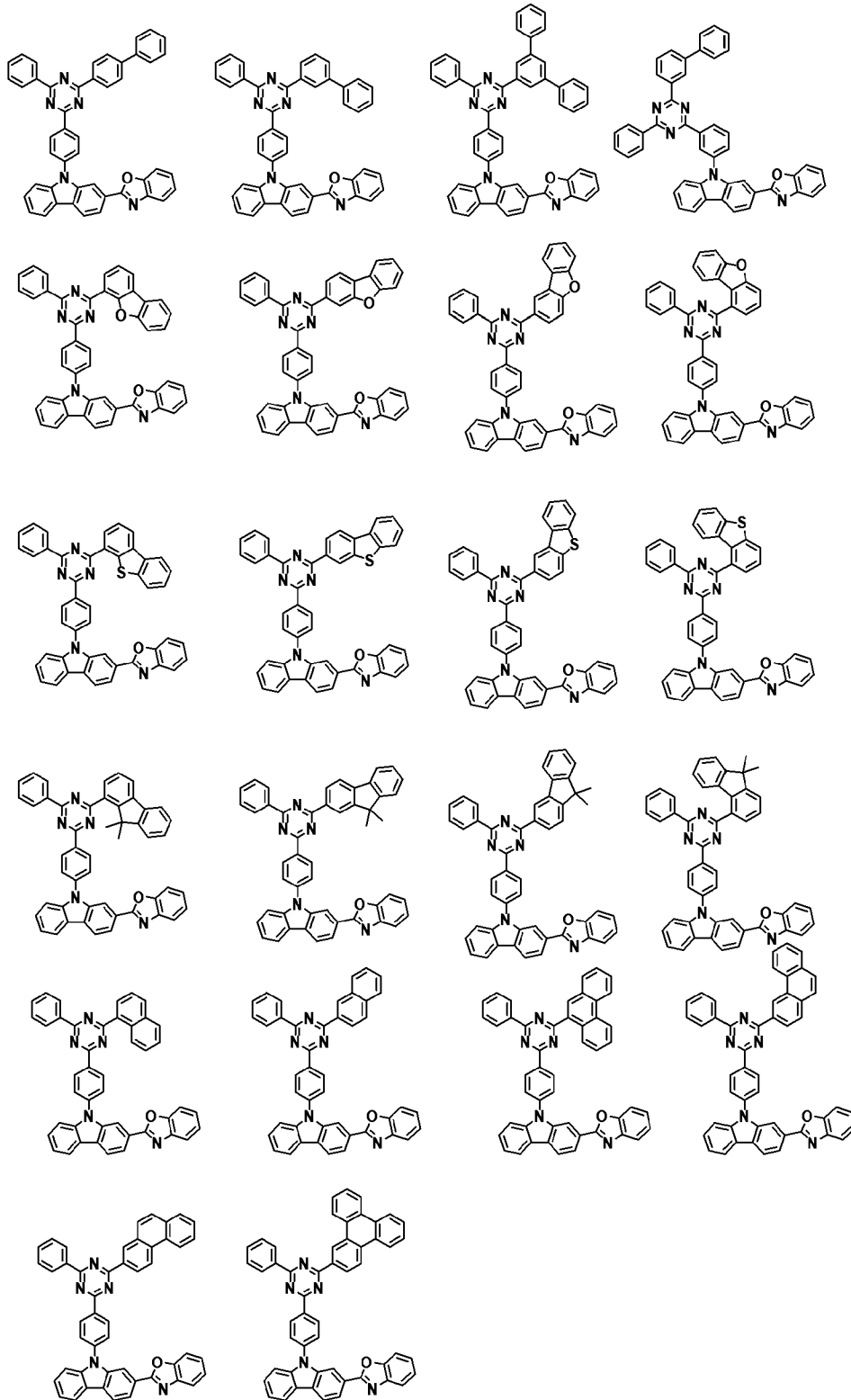
[103]



[104]



[105]



[106] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1의 화합물은 후술하는 제조방법으로 제조될 수 있다.

[107] 화합물의 컨จู게이션 길이와 에너지 밴드갭은 밀접한 관계가 있다. 구체적으로, 화합물의 컨จู게이션 길이가 길수록 에너지 밴드갭이 작아진다.

[108] 본 발명에서는 상기와 같이 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한

에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 발명에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.

- [109] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송용 물질, 발광층 물질 및 전자 수송층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.
- [110] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [111] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [112] 상기 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [113] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 전자저지층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [114] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [115] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [116] 또 하나의 실시 상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 호스트로서 포함할 수 있다.
- [117] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함하며, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도펀트로 포함할 수 있다.
- [118] 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은

상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함하며, 이리듐계(Ir) 도펀트와 함께 사용할 수 있다.

- [119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 제2 전극은 음극이다.
- [120] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 제2 전극은 양극이다.
- [121] 상기 유기 발광 소자는 예컨대 하기와 같은 적층 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [122] (1) 양극/정공수송층/발광층/음극
- [123] (2) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/음극
- [124] (3) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/음극
- [125] (4) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [126] (5) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [127] (6) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [128] (7) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [129] (8) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [130] (9) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [131] (10) 양극/정공수송층/전자저지층/발광층/전자수송층/음극
- [132] (11) 양극/정공수송층/전자저지층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [133] (12) 양극/정공주입층/정공수송층/전자저지층/발광층/전자수송층/음극
- [134] (13) 양극/정공주입층/정공수송층/전자저지층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [135] (14) 양극/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/음극
- [136] (15) 양극/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/음극
- [137] (16) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/음극
- [138] (17) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/음극
- [139] (18) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자주입 및 수송을 동시에 하는 층/음극
- [140] 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [141] 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.
- [142] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층(7) 또는 전자

수송층(8)에 포함될 수 있다.

- [143] 예컨대, 본 발명에 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, 전자저지층, 발광층 및 전자 수송층을 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.
- [144] 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자저지층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수도 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.
- [145] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO : Al 또는 SnO₂ : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [146] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [147] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [148] 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과

비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

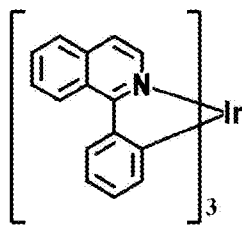
[149] 정공수송층과 발광층 사이에 전자저지층이 구비될 수 있다. 상기 전자저지층은 전술한 화합물 또는 당 기술분야에 알려져 있는 재료가 사용될 수 있다.

[150] 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.

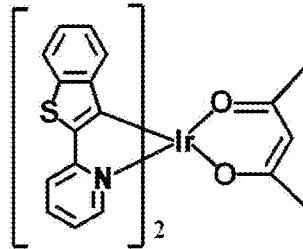
[151] 발광층의 호스트 재료로는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[152] 발광층의 도펀트로 사용되는 이리듐계 착물은 하기와 같으나, 이에 한정되지 않는다.

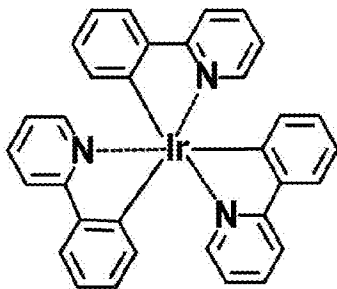
[153] $[\text{Ir}(\text{piq})_3]$



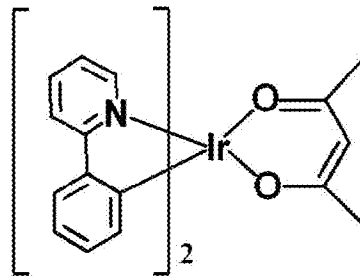
$[\text{Btp}_2\text{Ir}(\text{acac})]$



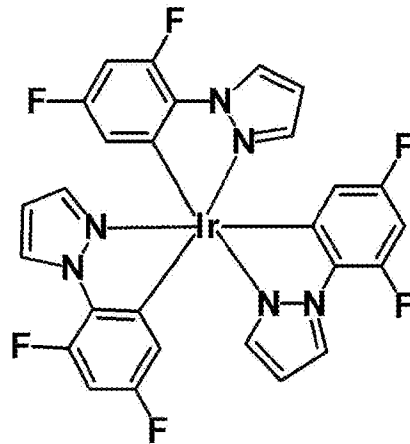
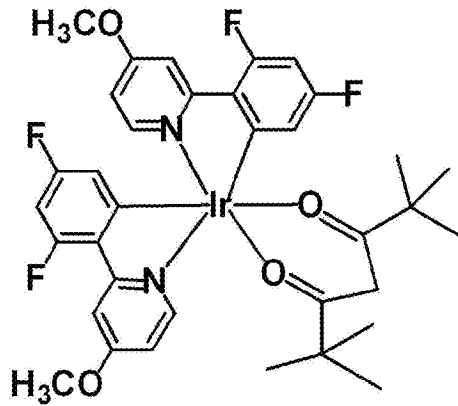
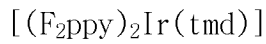
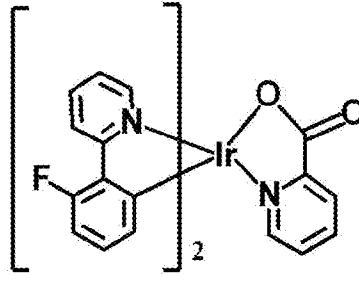
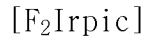
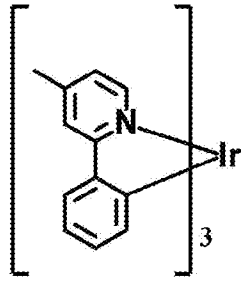
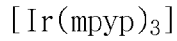
$[\text{Ir}(\text{ppy})_3]$



$[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})]$



[154]



[155] 상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입받아 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.

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

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

[158] 본 명세서의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식과 같이 코어구조가 제조될 수 있다. 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 및 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[159] 이하에서, 실시예를 통하여 본 명세서를 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이하의 실시예는 본 명세서를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 명세서를 한정하기

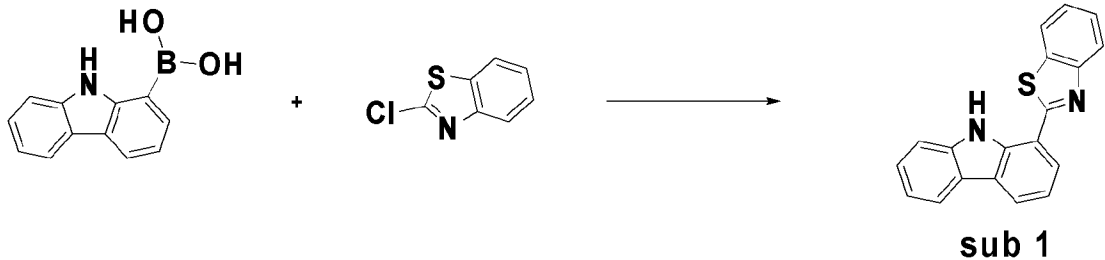
위한 것은 아니다.

[160] [제조예]

[161] [제조예 1] 중간체 1 내지 5의 제조

[162] 1) 중간체 1(sub 1)의 제조

[163]

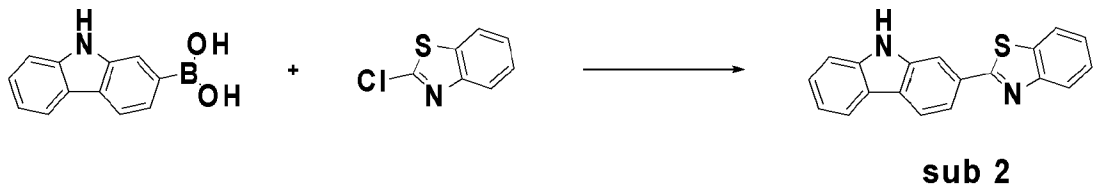


[164] 질소 분위기에서 (9H-카바졸-1-일)보로닉산 ((9H-carbazol-1-yl)boronic acid) (50.0 g, 236.9mmol)와 2-클로로벤조[d]티아졸 (2-chlorobenzo[d]thiazole) (40.0 g, 236.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 500 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘카보네이트(98.2 g, 710.6 mmol)를 물 200 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(8.2 g, 3 mol%)을 투입하였다. 12시간 동안 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 유기층과 물층을 분리한 후 유기층을 감압 증류하였다. 증류물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 건조한 후 에탄올 재결정을 통해 sub 1(45.5 g, 64%)을 제조하였다.

[165] MS: [M+H]⁺ = 301

[166] 2) 중간체 2(sub 2)의 제조

[167]

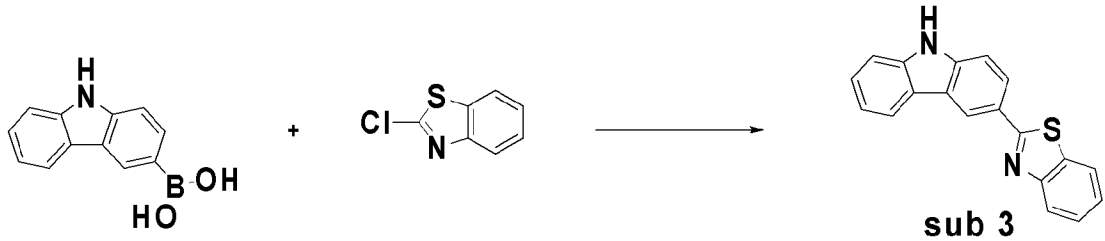


[168] 질소 분위기에서 (9H-카바졸-2-일)보로닉산 ((9H-carbazol-2-yl)boronic acid) (50.0 g, 236.9mmol)와 2-클로로벤조[d]티아졸 (2-chlorobenzo[d]thiazole) (40.0 g, 236.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 500 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘카보네이트(98.2 g, 710.6 mmol)를 물 200 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(8.2 g, 3 mol%)을 투입하였다. 12시간 동안 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 유기층과 물층을 분리한 후 유기층을 감압 증류하였다. 증류물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 건조한 후 에탄올 재결정을 통해 sub 2(51.2 g, 72%)을 제조하였다.

[169] MS: [M+H]⁺ = 301

[170] 3) 중간체 3(sub 3)의 제조

[171]

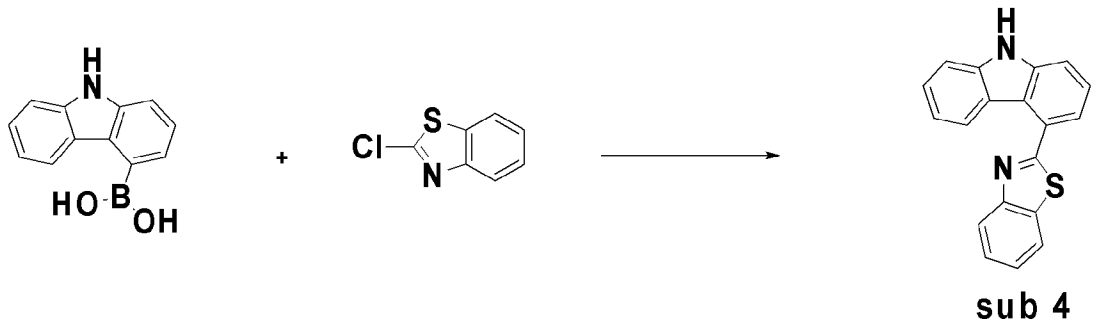


[172] 질소 분위기에서 (9H- 카바졸-3-일)보로닉산 ((9H-carbazol-3-yl)boronic acid) (50.0 g, 236.9mmol)와 2-클로로벤조[d]티아졸 (2-chlorobenzo[d]thiazole) (40.0 g, 236.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 500 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘카보네이트(98.2 g, 710.6 mmol)를 물 200 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(8.2 g, 3 mol%)을 투입하였다. 12시간 동안 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 유기층과 물층을 분리한 후 유기층을 감압 증류하였다. 증류물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 건조한 후 에탄올 재결정을 통해 sub 3(40.5 g, 57%)을 제조하였다.

[173] MS: [M+H]⁺ = 301

[174] 4) 중간체 4(sub 4)의 제조

[175]

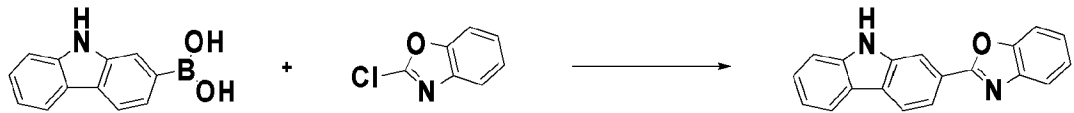


[176] 질소 분위기에서 (9H- 카바졸-4-일)보로닉산 ((9H-carbazol-4-yl)boronic acid) (50.0 g, 236.9mmol)와 2-클로로벤조[d]티아졸 (2-chlorobenzo[d]thiazole) (40.0 g, 236.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 500 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘카보네이트(98.2 g, 710.6 mmol)를 물 200 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(8.2 g, 3 mol%)을 투입하였다. 12시간 동안 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 유기층과 물층을 분리한 후 유기층을 감압 증류하였다. 증류물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 건조한 후 에탄올 재결정을 통해 sub 4(44.8 g, 63%)을 제조하였다.

[177] MS: [M+H]⁺ = 301

[178] 5) 중간체 5(sub 5)의 제조

[179]

**sub 5**

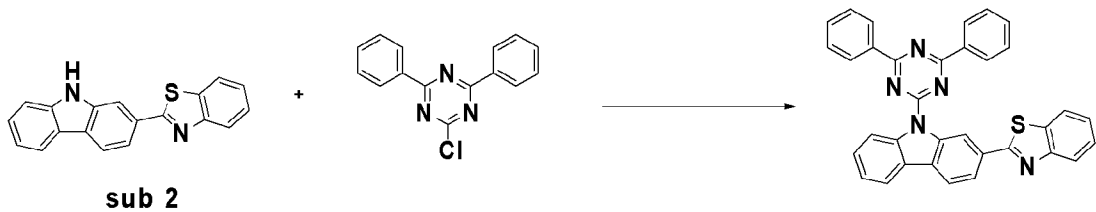
[180] 질소 분위기에서 (9H- 카바졸-2-일)보로닉산 ((9H-carbazol-2-yl)boronic acid) (50.0 g, 236.9mmol)와 2-클로로벤조[d]옥사졸 (2-chlorobenzo[d]oxazole) (36.2 g, 236.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 500 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(98.2 g, 710.6 mmol)를 물 200 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(8.2 g, 3 mol%)을 투입하였다. 12시간 동안 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 유기층과 물층을 분리한 후 유기층을 감압 증류하였다. 증류물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 건조한 후 에탄올 재결정을 통해 sub 5(31.6 g, 47%)을 제조하였다.

[181] MS: [M+H]⁺ = 285

[182] [제조예 2] 화합물 1 내지 13의 제조

[183] 1) 화합물 1(compound 1)의 제조

[184]

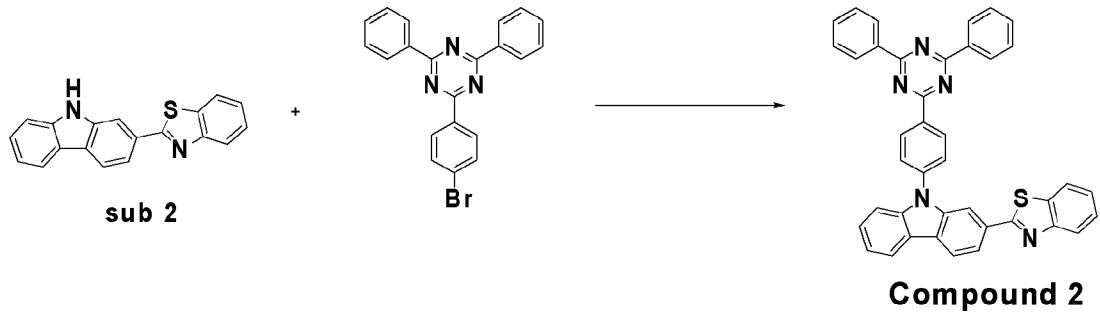
**sub 2****Compound 1**

[185] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine)(17.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 1 (7.4 g, 21%)을 제조하였다.

[186] MS: [M+H]⁺ = 532

[187] 2) 화합물 2(compound 2)의 제조

[188]

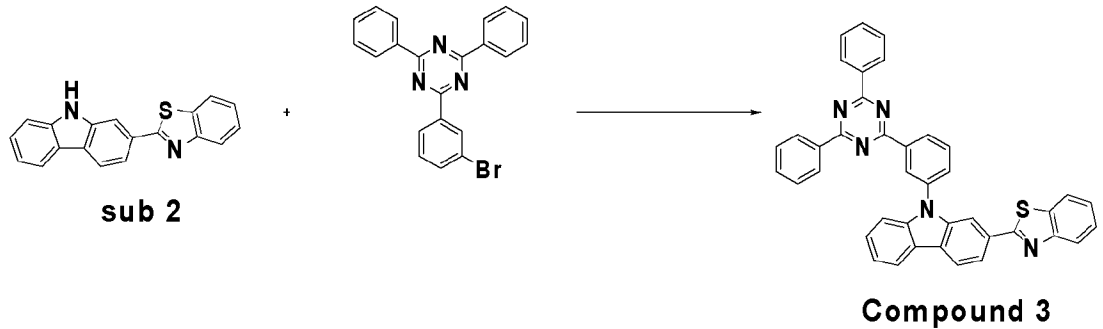


[189] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 2 (31.2 g, 77%)을 제조하였다.

[190] MS: $[M+H]^+ = 608$

[191] 3) 화합물 3(compound 3)의 제조

[192]

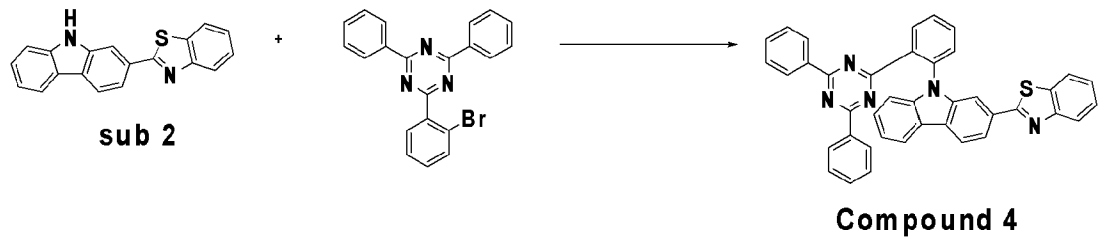


[193] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 3 (19.8 g, 49%)을 제조하였다.

[194] MS: $[M+H]^+ = 608$

[195] 4) 화합물 4(compound 4)의 제조

[196]

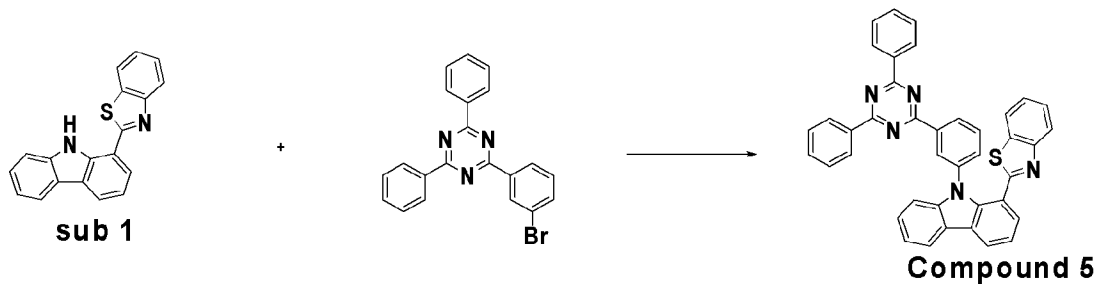


[197] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(2-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(2-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 4 (8.9 g, 22%)을 제조하였다.

[198] MS: [M+H]⁺ = 608

[199] 5) 화합물 5(compound 5)의 제조

[200]

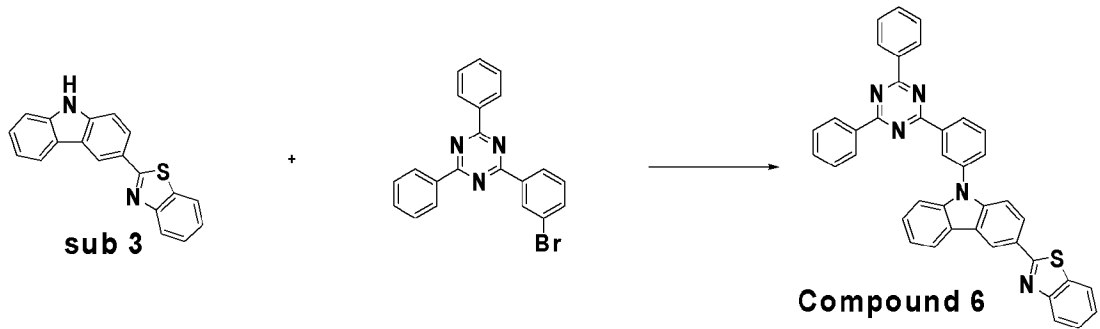


[201] 화합물 sub 1(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 5 (17.8 g, 44%)을 제조하였다.

[202] MS: [M+H]⁺ = 608

[203] 6) 화합물 6(compound 6)의 제조

[204]

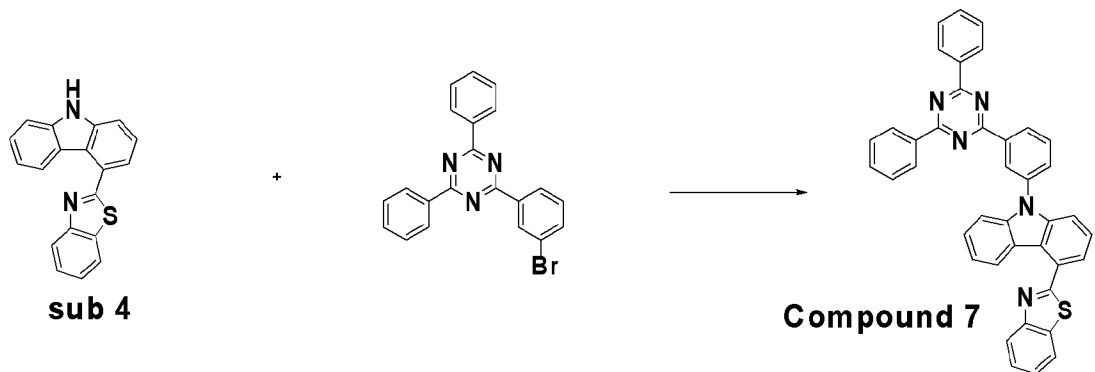


[205] 화합물 sub 3(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 6 (21.4 g, 53%)을 제조하였다.

[206] MS: [M+H]⁺ = 608

[207] 7) 화합물 7(compound 7)의 제조

[208]

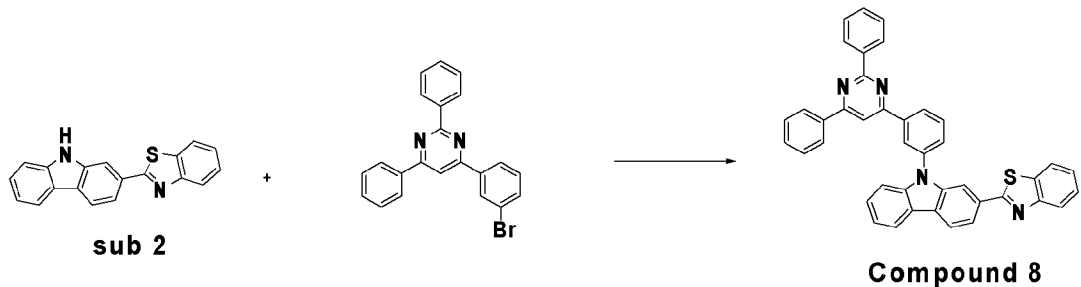


[209] 화합물 sub 4(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 7 (24.3 g, 60%)을 제조하였다.

[210] MS: [M+H]⁺ = 608

[211] 8) 화합물 8(compound 8)의 제조

[212]

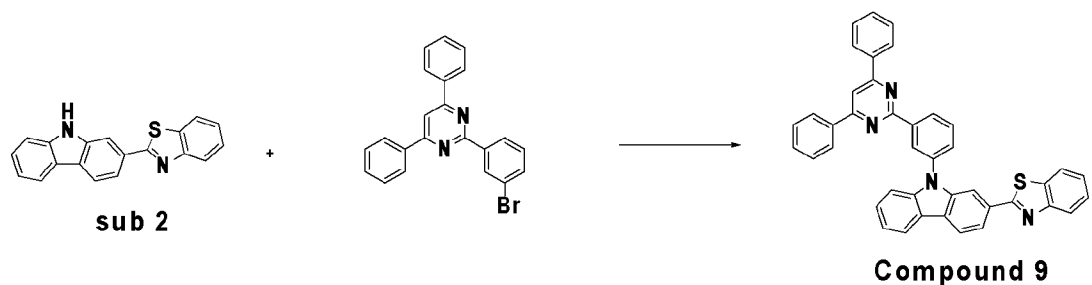


[213] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 4-(3-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (4-(3-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 8 (20.2 g, 50%)을 제조하였다.

[214] MS: [M+H]⁺ = 607

[215] 9) 화합물 9(compound 9)의 제조

[216]

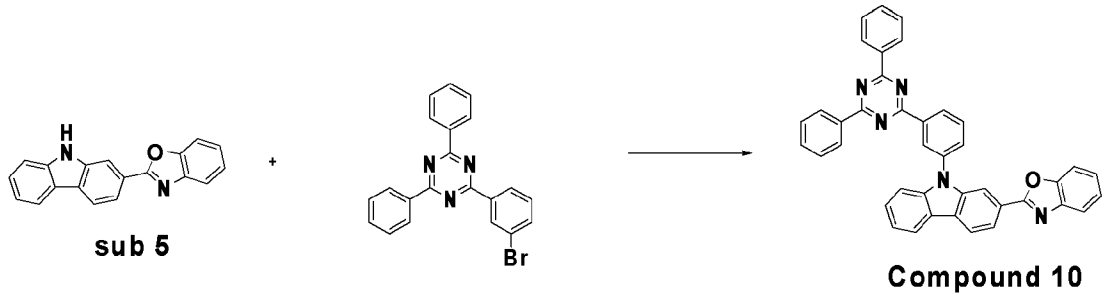


[217] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine) (25.8 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 9 (14.9 g, 37%)을 제조하였다.

[218] MS: [M+H]⁺ = 607

[219] 10) 화합물 10(compound 10)의 제조

[220]

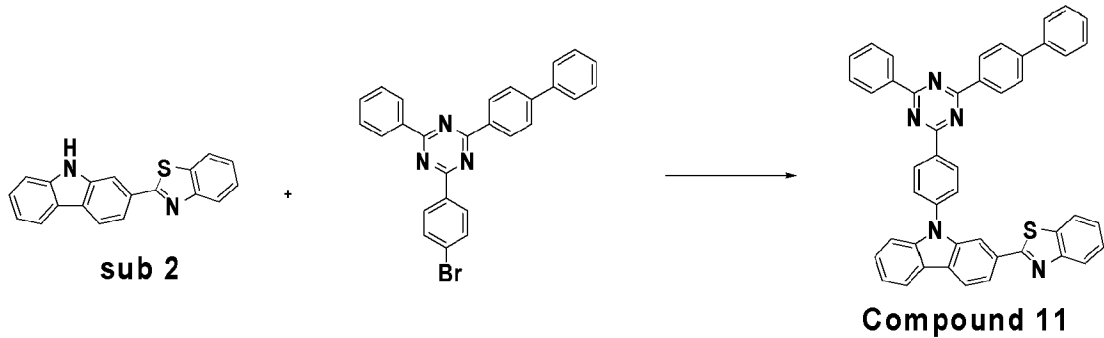


[221] 화합물 sub 5(20.0 g, 70.4 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (27.2g, 70.4 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (19.5g, 140.8 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.1g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 800mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 10 (18.3 g, 44%)을 제조하였다.

[222] MS: $[M+H]^+ = 592$

[223] 11) 화합물 11(compound 11)의 제조

[224]

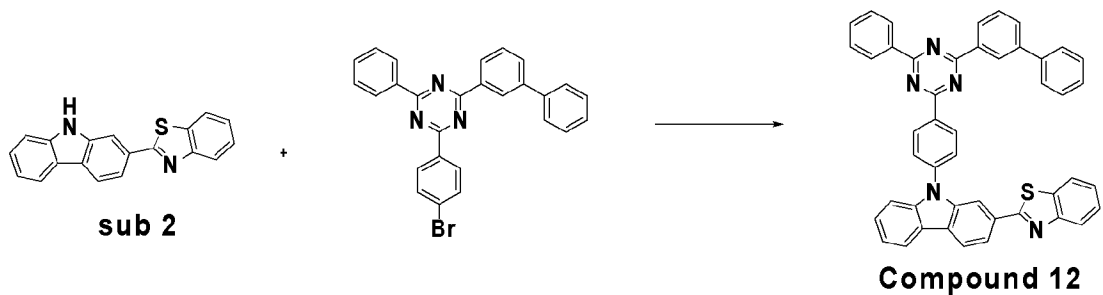


[225] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과 2-([1,1'-비페닐]-4-일)-4-(4-브로모페닐)-6-페닐-1,3,5-트리아진 (2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(4-bromophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine)(30.9 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 11 (27.8 g, 61%)을 제조하였다.

[226] MS: [M+H]⁺ = 684

[227] 12) 화합물 12(compound 12)의 제조

[228]



[229] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과

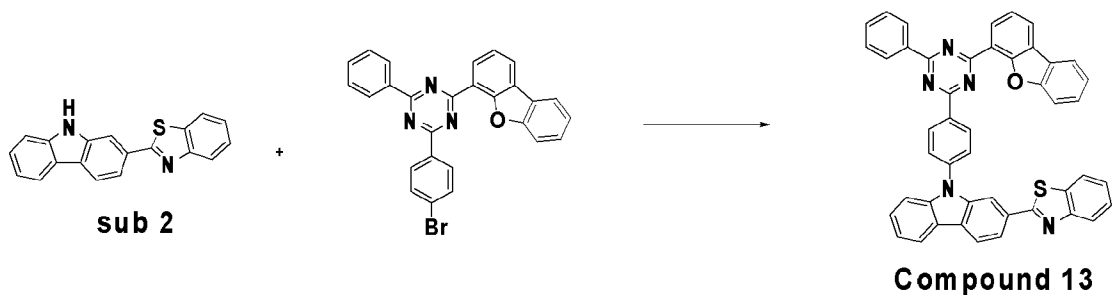
2-((1,1'-비페닐)-3-일)-4-(4-브로모페닐)-6-페닐-1,3,5-트리아진

(2-((1,1'-biphenyl)-3-yl)-4-(4-bromophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine) (30.9 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 12 (26.4 g, 68%)을 제조하였다.

[230] MS: [M+H]⁺ = 684

[231] 13) 화합물 13(compound 13)의 제조

[232]



[233] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과

2-(4-브로모페닐)-4-(디벤조[b,d]퓨란-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진

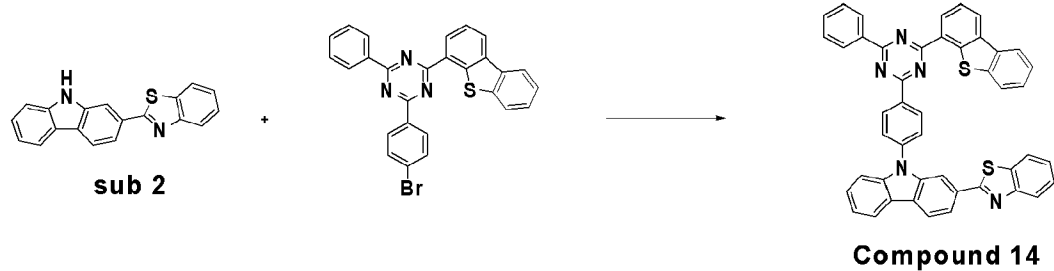
(2-(4-bromophenyl)-4-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine) (30.9 g, 66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가운한다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과

에틸아세테이트를 이용하여 재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 13 (28.8g, 62%)을 제조하였다.

[234] MS: [M+H]⁺ = 698

[235] 14) 화합물 14(compound 14)의 제조

[236]



[237] 화합물 sub 2(20.0 g, 66.7 mmol)과

2-(4-브로모페닐)-4-(디벤조[b,d]티오펜-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진

(2-(4-bromophenyl)-4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine) (30.9 g,

66.7 mmol)을 자일렌 200mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드

(18.4g, 133.3 mmol)를 첨가하여 가온한다. 비스(트리

터셔리-부틸포스핀)팔라듐(1.0g, 3mol%)을 투입하여 12시간 동안 환류

교반시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를

여과하였다. 고체를 클로로포름 700mL에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을

분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압

증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여

재결정을 통해 정제하여 옅은 녹색의 고체 화합물 14 (15.2g, 32%)을 제조하였다.

[238] MS: [M+H]⁺ = 714

[239] [실험예]

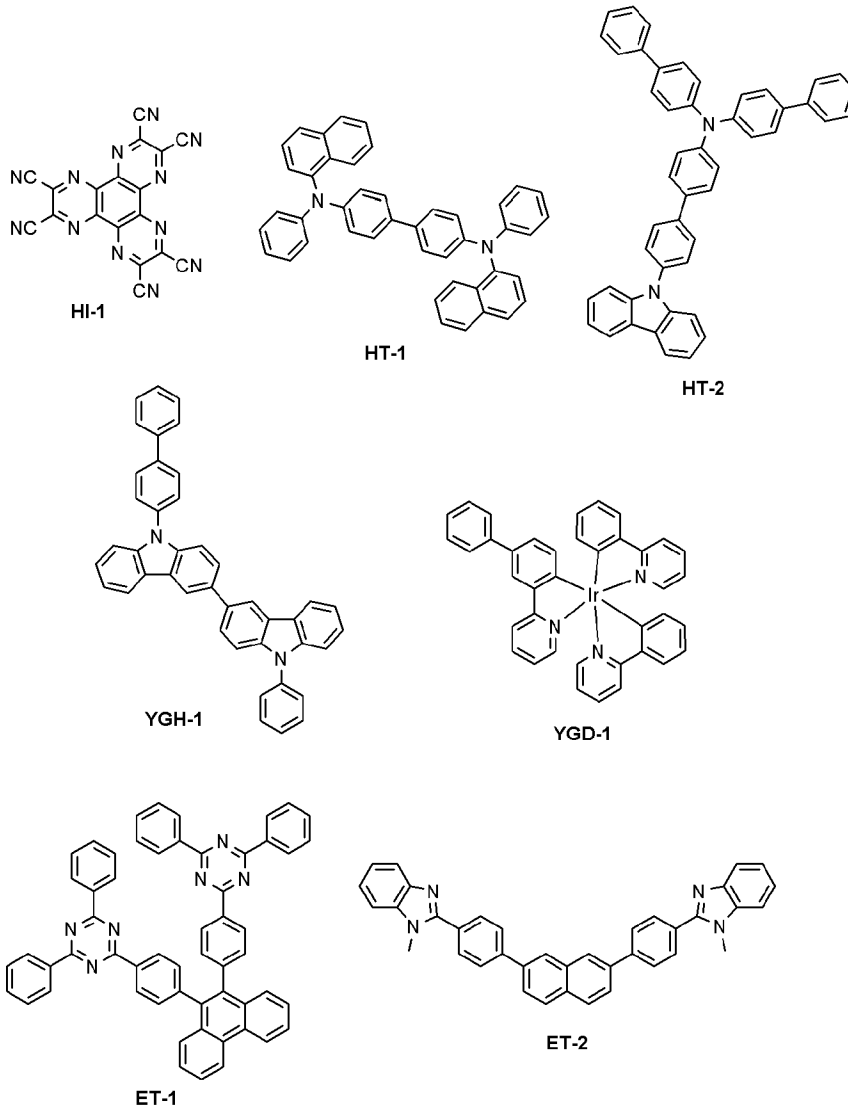
[240] <실험예 1>

[241] ITO(indium tin oxide)가 1,300Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[242] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-1 화합물을 50Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 250Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공수송층을 형성하고, HT-1 증착막 위에 하기 HT-2 화합물을 50Å 두께로 진공 증착하여 전자저지층을 형성하였다. 상기 HT-2 증착막 위에 발광층으로서 앞서 제조에 1에서 제조한 화합물 1, 하기

YGH-1 화합물, 및 인광도펀트 YGD-1을 44:44:12의 중량비로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 위에 하기 ET-1 화합물을 250Å의 두께로 진공 증착하여 전자수송층을 형성하고, 상기 전자수송층 위에 하기 ET-2 화합물 및 Li를 98:2의 중량비로 진공 증착하여 100Å 두께의 전자주입층을 형성하였다. 상기 전자주입층 위에 1000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[243]



[244] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지하였고, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $5 \times 10^{-8} \sim 1 \times 10^{-7}$ torr를 유지하였다.

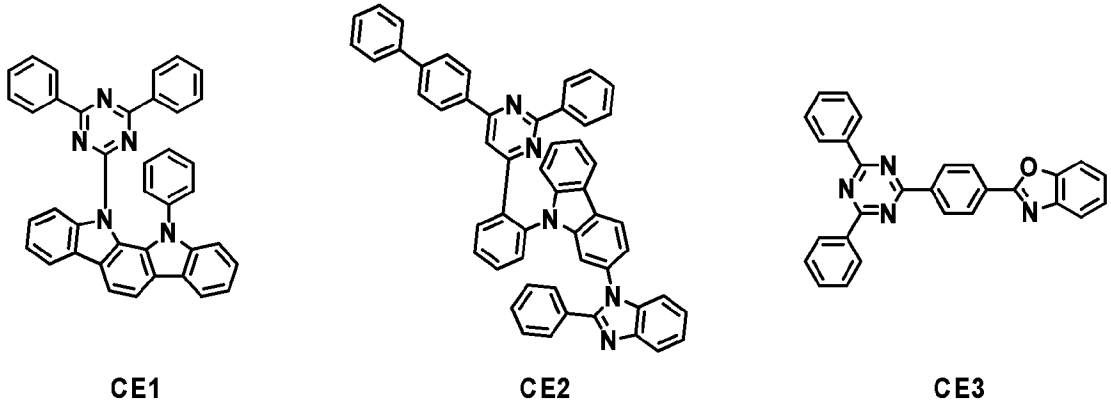
[245] <실험예 2 내지 14>

[246] 상기 실험예 1에서 합성에 1의 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[247] <비교 실험예 1 내지 3>

[248] 상기 실험예 1에서 합성예 1의 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다. 하기 표 1의 CE1 내지 CE3의 화합물은 하기와 같다.

[249]



[250] 상기 실험예 및 비교실험예에서 유기 발광 소자를 10mA/cm²의 전류 밀도에서 전압과 효율을 측정하였고, 50mA/cm²의 전류 밀도에서 수명을 측정하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, LT₉₅는 초기 휘도 대비 95%가 되는 시간을 의미한다.

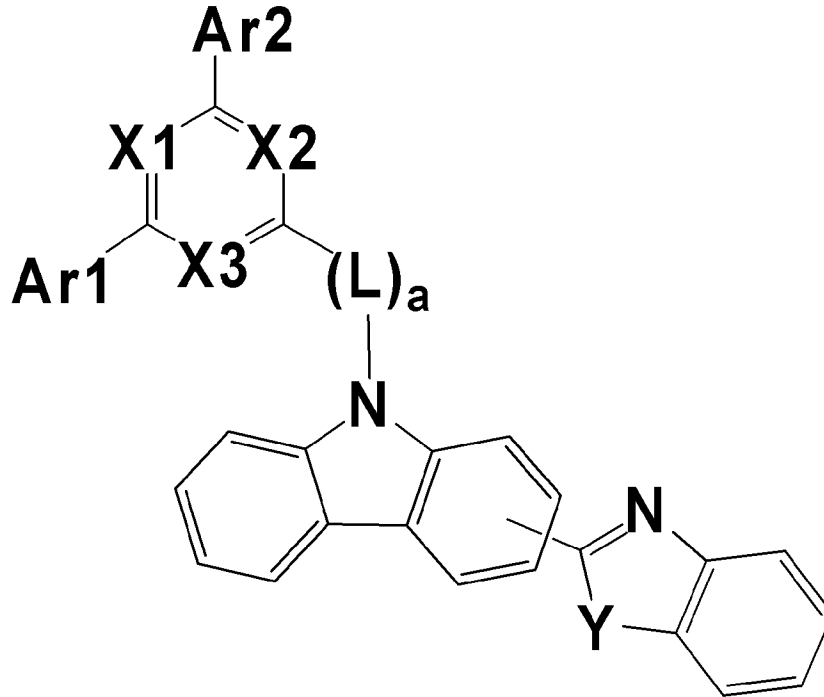
[251] [표1]

| | 화합물 | 전압(V)(@10mA/cm ²) | 효율(Cd/A)(@10mA/cm ²) | 색좌표(x,y) | 수명(h)(LT ₉₅ at 50mA/cm ²) |
|--------|--------|-------------------------------|----------------------------------|------------|--|
| 실험예 1 | 화합물 1 | 4.4 | 79 | 0.44, 0.54 | 140 |
| 실험예 2 | 화합물 2 | 4.1 | 82 | 0.46, 0.54 | 135 |
| 실험예 3 | 화합물 3 | 4.0 | 83 | 0.46, 0.55 | 150 |
| 실험예 4 | 화합물 4 | 4.1 | 81 | 0.46, 0.54 | 125 |
| 실험예 5 | 화합물 5 | 4.1 | 81 | 0.46, 0.54 | 115 |
| 실험예 6 | 화합물 6 | 4.1 | 81 | 0.46, 0.55 | 145 |
| 실험예 7 | 화합물 7 | 4.0 | 83 | 0.46, 0.54 | 170 |
| 실험예 8 | 화합물 8 | 4.2 | 83 | 0.46, 0.54 | 120 |
| 실험예 9 | 화합물 9 | 4.2 | 82 | 0.46, 0.53 | 115 |
| 실험예 10 | 화합물 10 | 4.1 | 79 | 0.46, 0.54 | 100 |
| 실험예 11 | 화합물 11 | 4.2 | 82 | 0.46, 0.54 | 162 |
| 실험예 12 | 화합물 12 | 4.2 | 82 | 0.46, 0.54 | 175 |
| 실험예 13 | 화합물 13 | 4.3 | 81 | 0.46, 0.53 | 185 |
| 실험예 14 | 화합물 14 | 4.2 | 81 | 0.46, 0.54 | 190 |
| 비교실험예1 | CE1 | 4.5 | 75 | 0.46, 0.54 | 85 |
| 비교실험예2 | CE2 | 4.4 | 70 | 0.47, 0.54 | 12 |
| 비교실험예3 | CE3 | 4.6 | 55 | 0.48, 0.59 | 10 |

[252] 상기 표 1에서 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물을 발광층 물질로 사용할 경우, 비교 실험예에 비하여 효율 및 수명이 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 이는 카바조일 치환기에 벤조옥사디아아졸 혹은 벤조싸이아디아아졸이 추가로 치환됨에 따라 전자안정성이 증가된 것으로 보여진다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 것인 화합물:
[화학식 1]



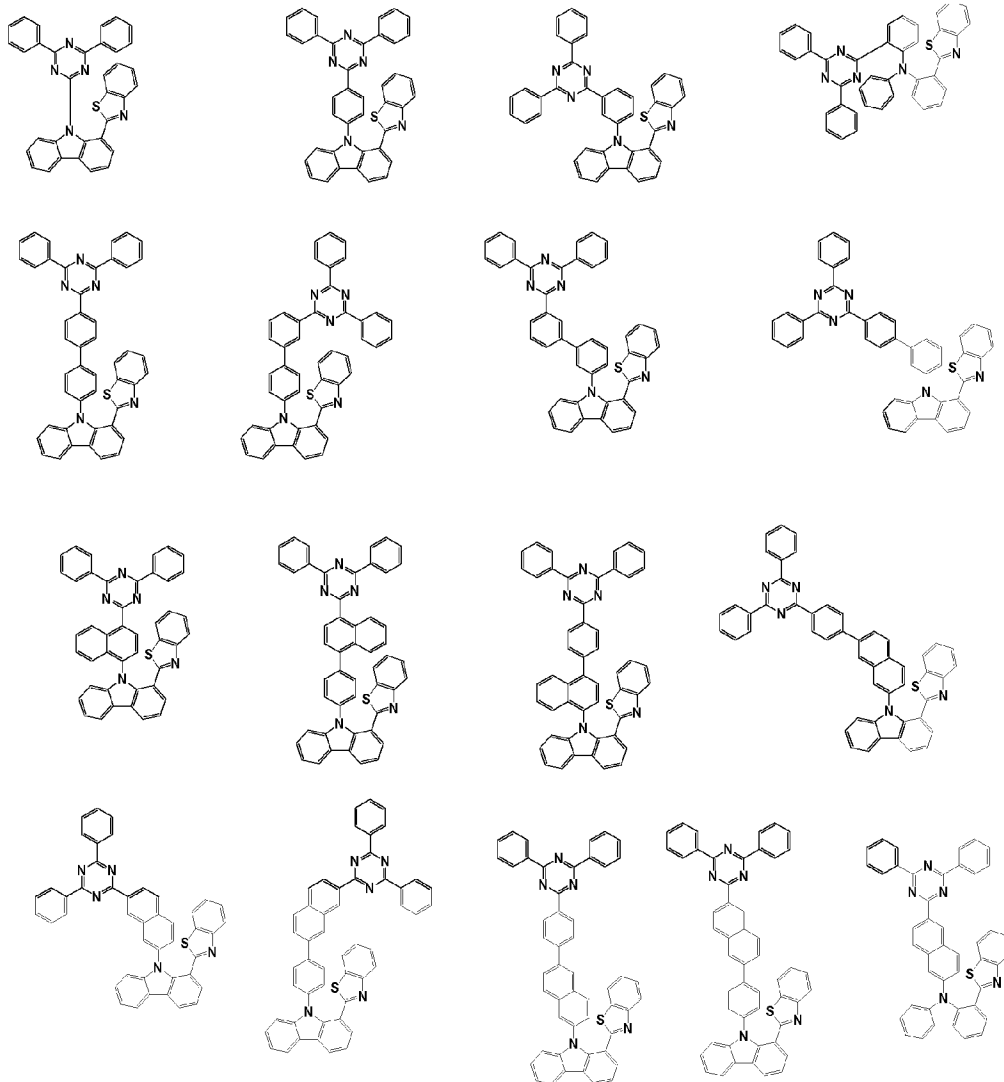
상기 화학식 1에 있어서,
X1 내지 X3 중 적어도 두 개는 N이며, 나머지는 CR이며,
R은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
Y는 O; 또는 S이고,
L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이며,
a는 1 또는 2이고,
a가 2인 경우, 괄호 내 L은 서로 같거나 상이하다.

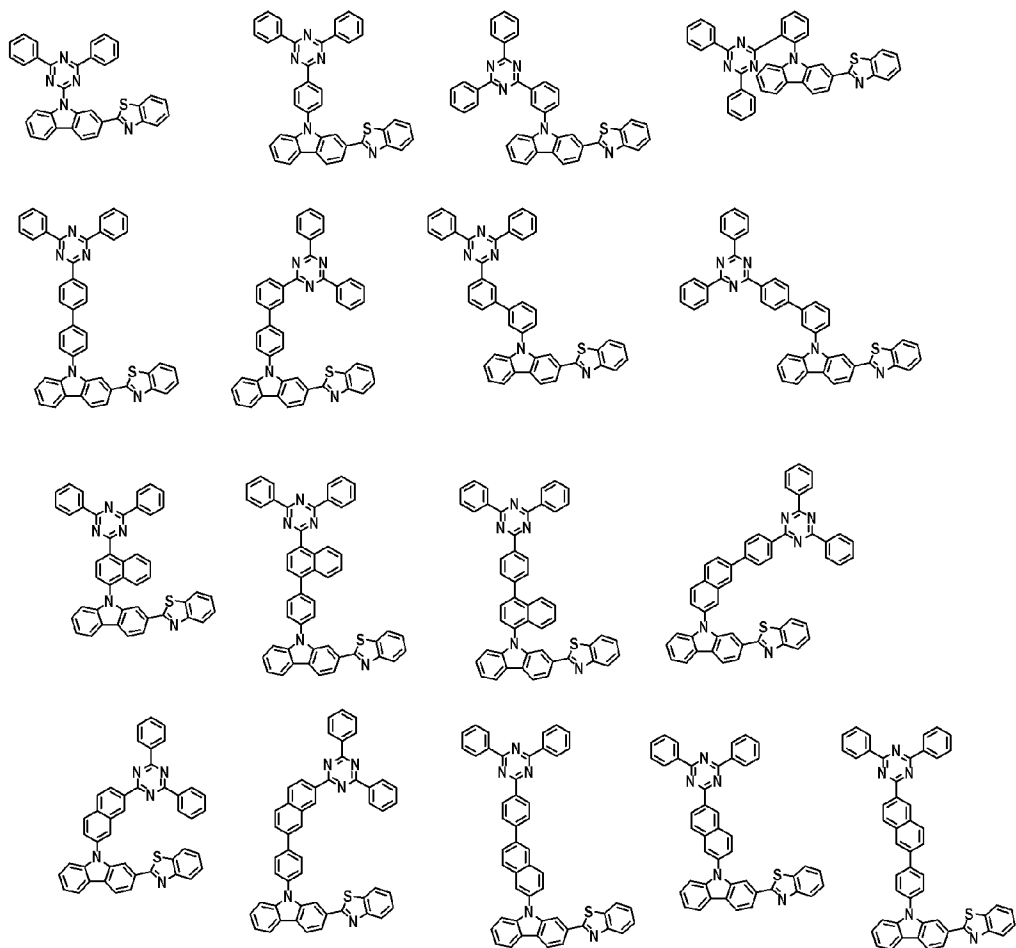
[청구항 2] 청구항 1에 있어서,
상기 Ar1 및 Ar2는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 치환 또는 비치환된 파이레닐기; 치환 또는 비치환된 페릴레닐기; 치환 또는 비치환된 트리페닐기; 치환 또는 비치환된 크라이세닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기인 것인 화합물.

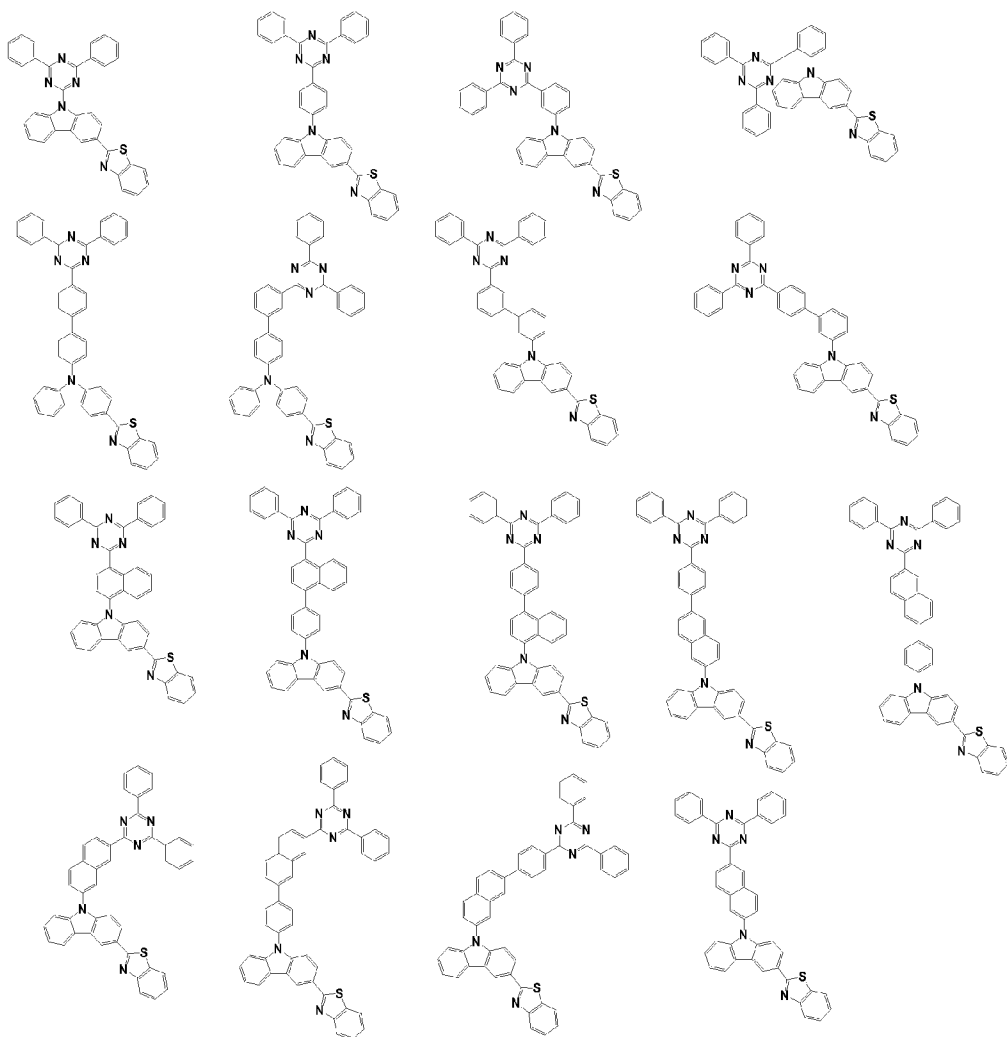
[청구항 3]

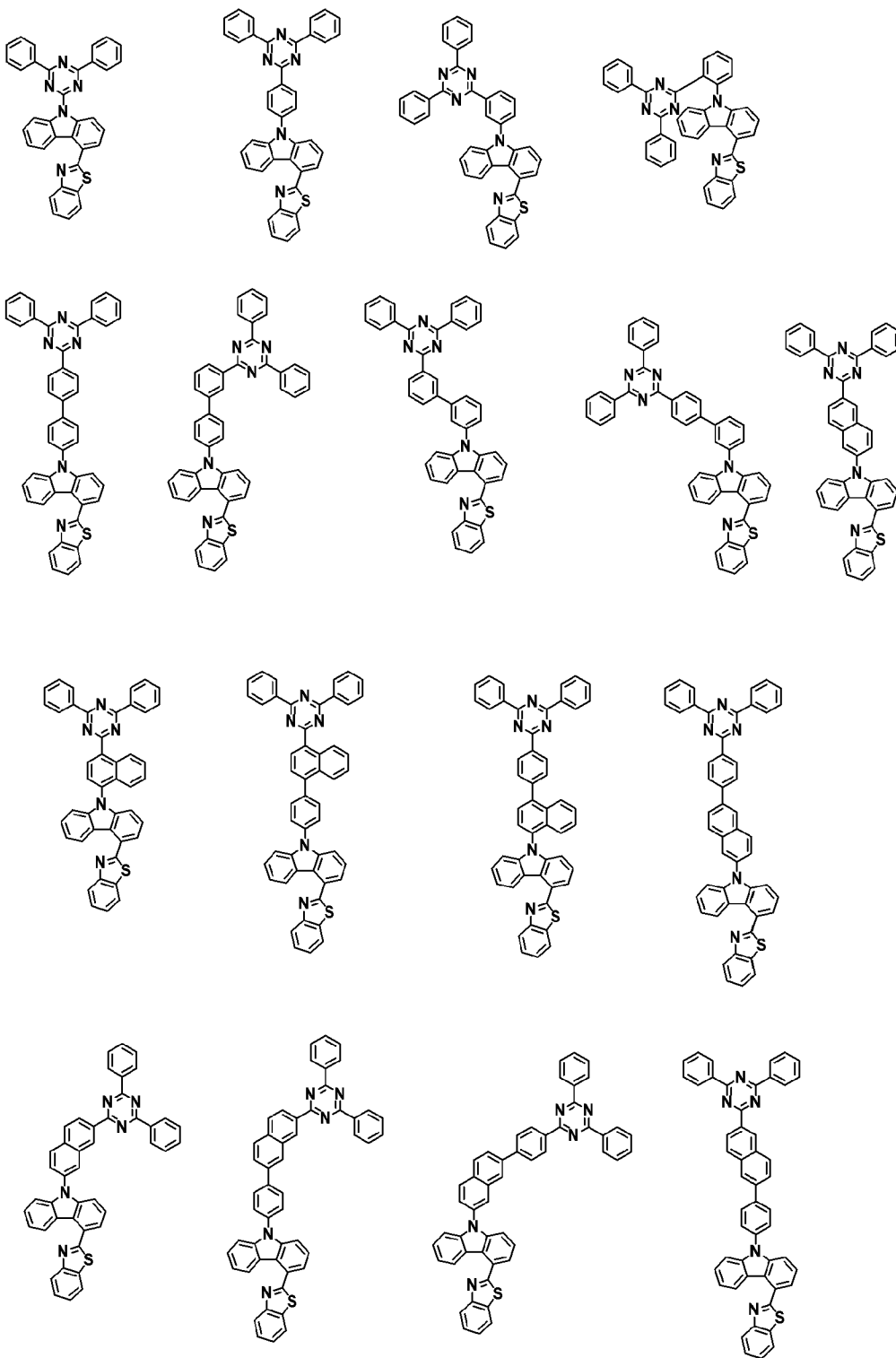
청구항 1에 있어서,

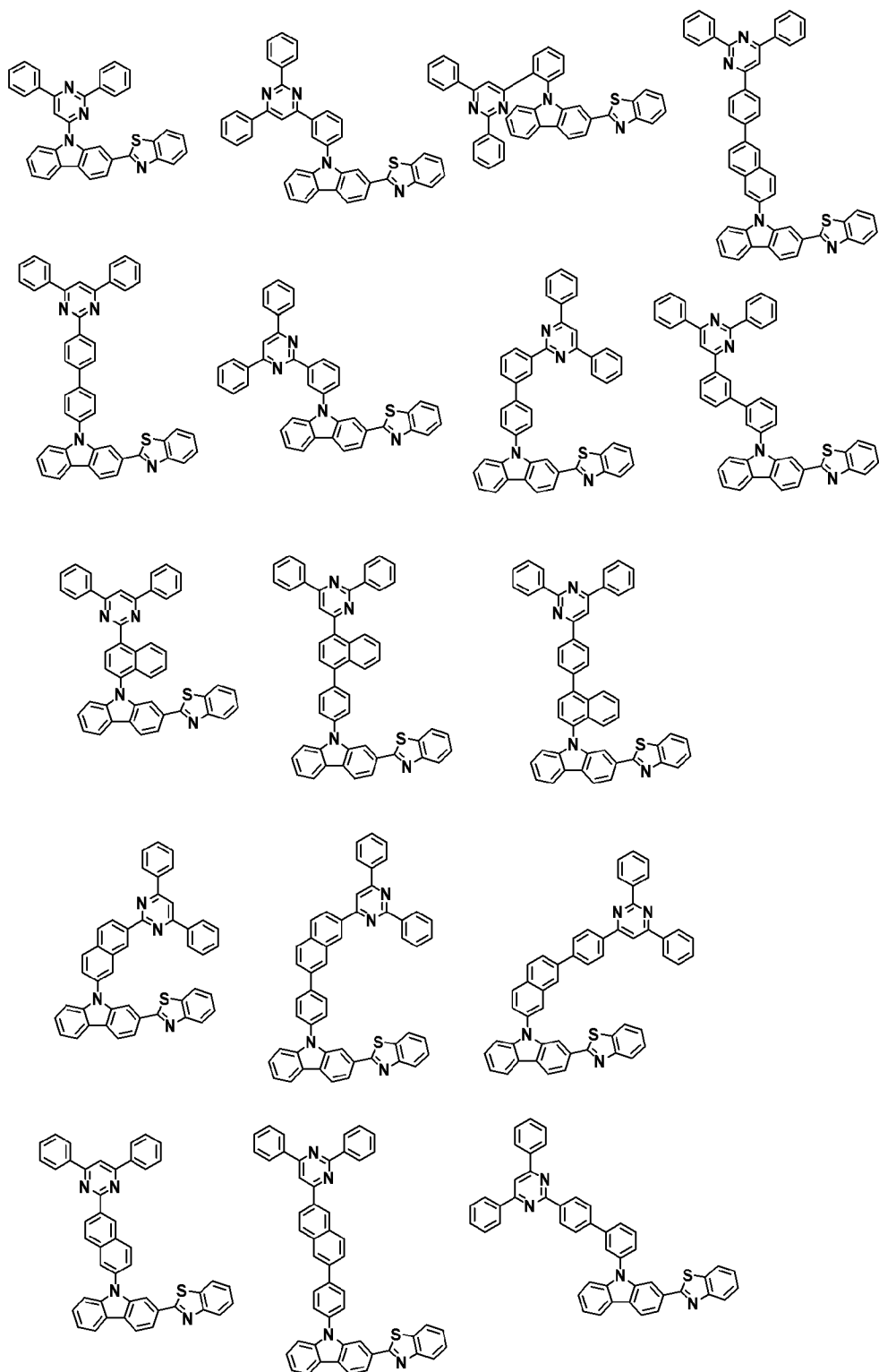
상기 화학식 1은 하기 구조들 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

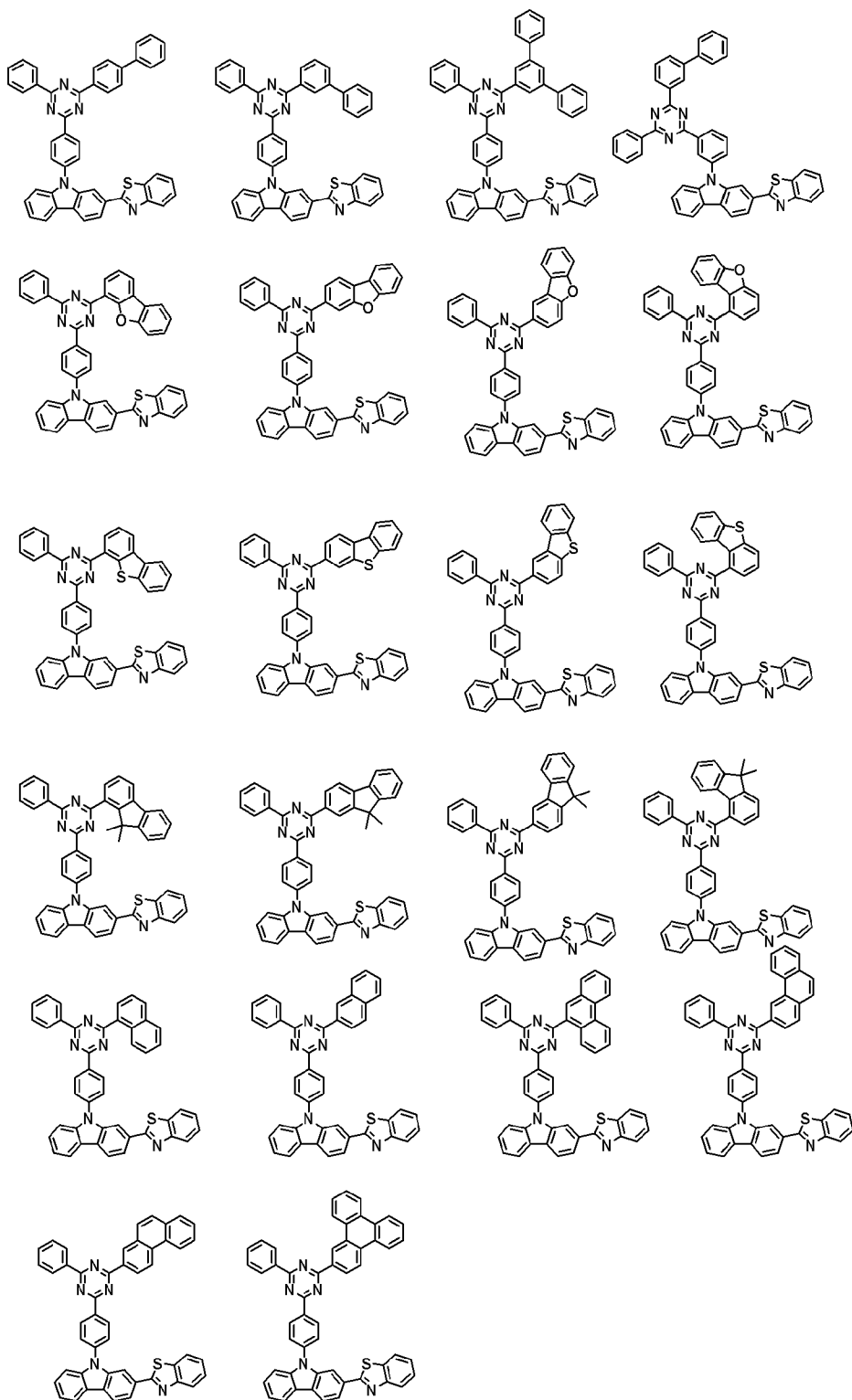


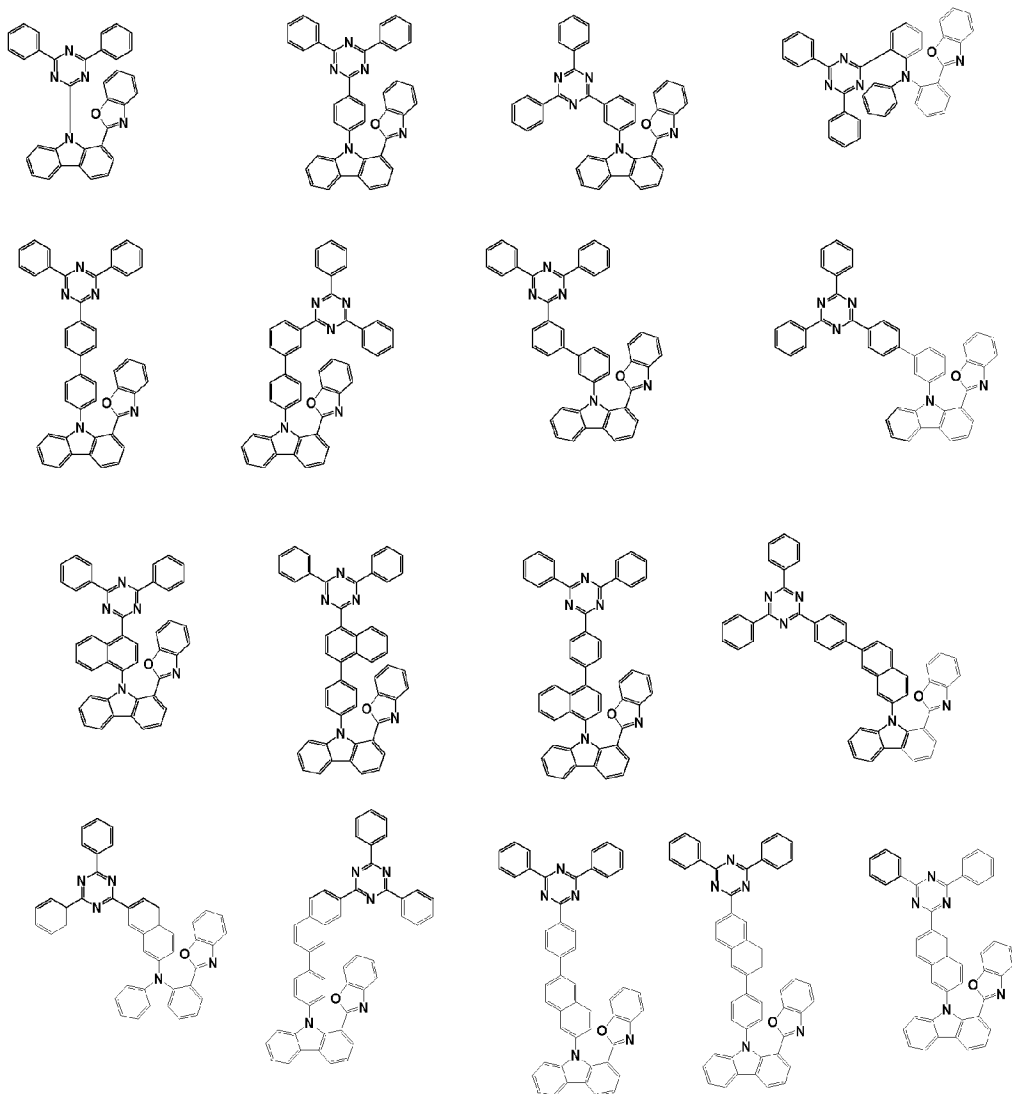


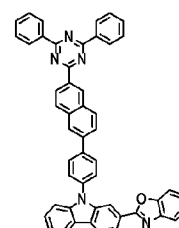
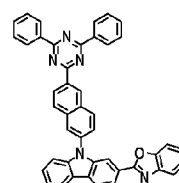
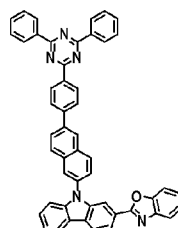
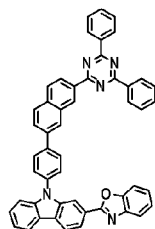
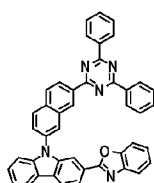
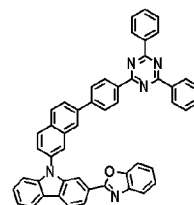
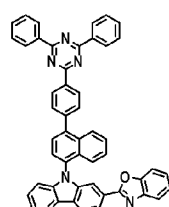
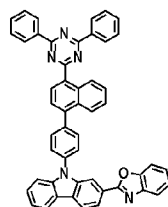
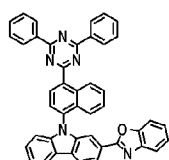
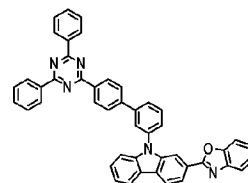
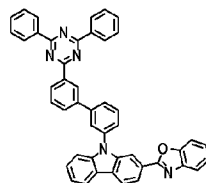
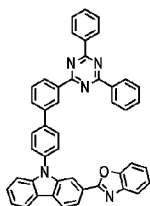
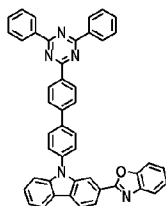
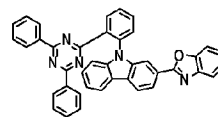
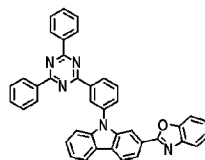
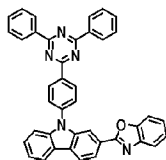
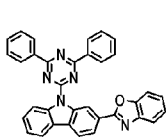


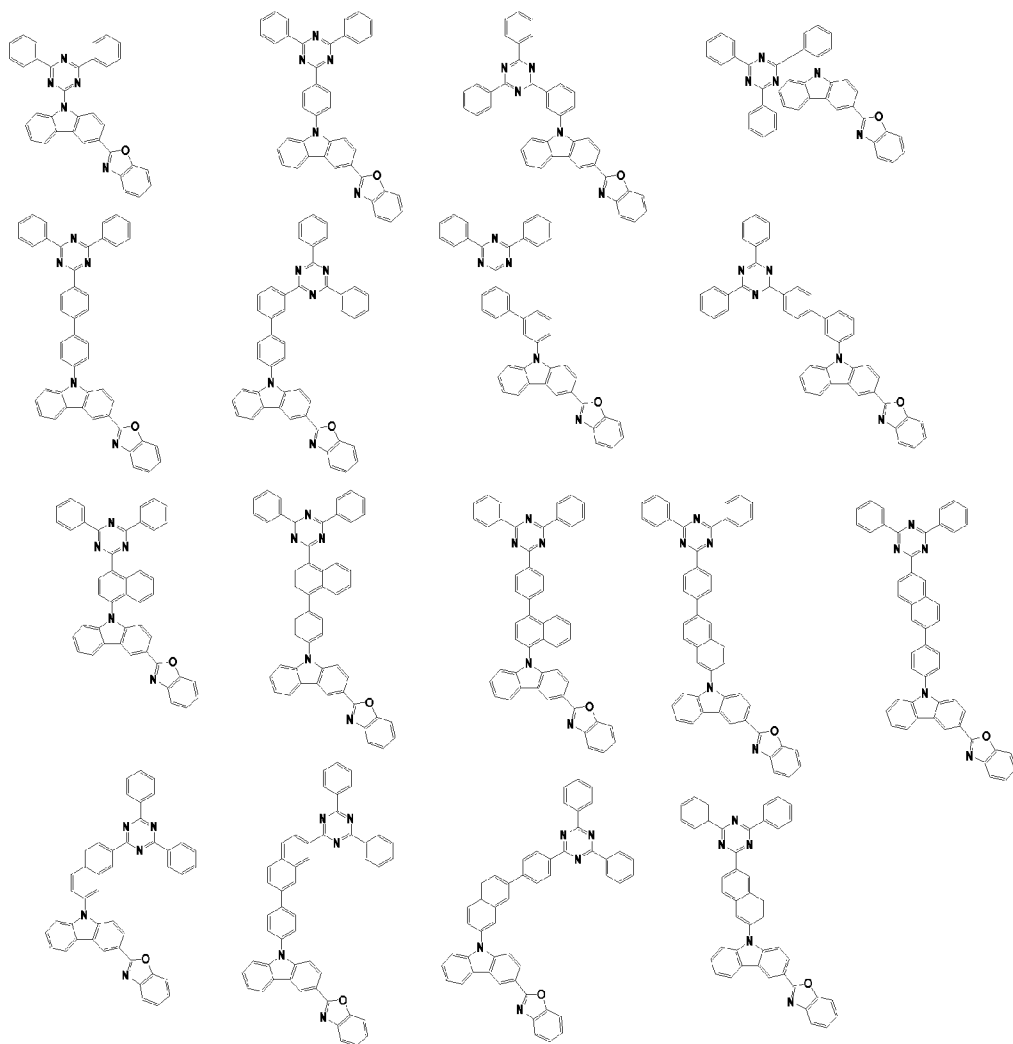


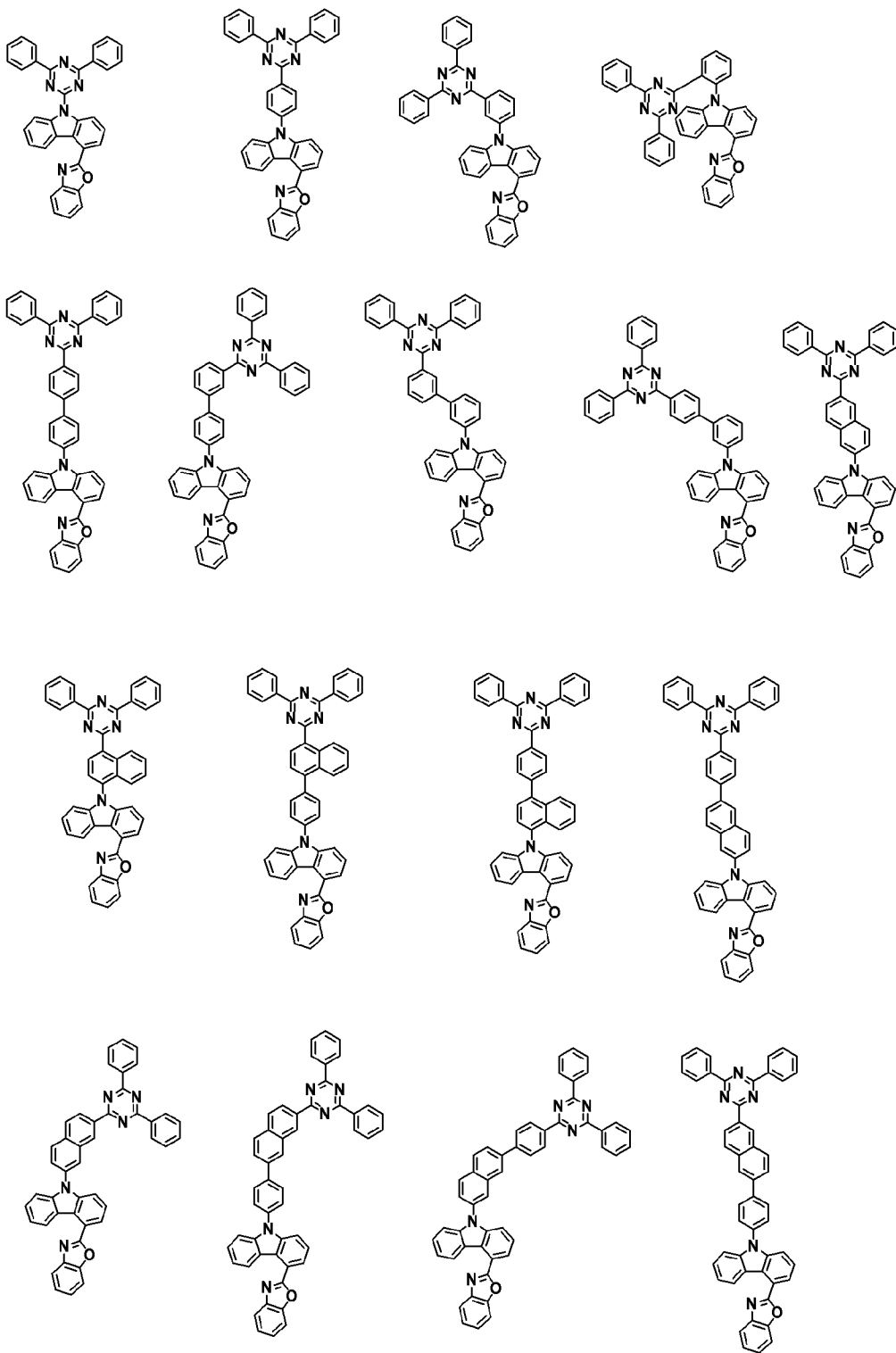


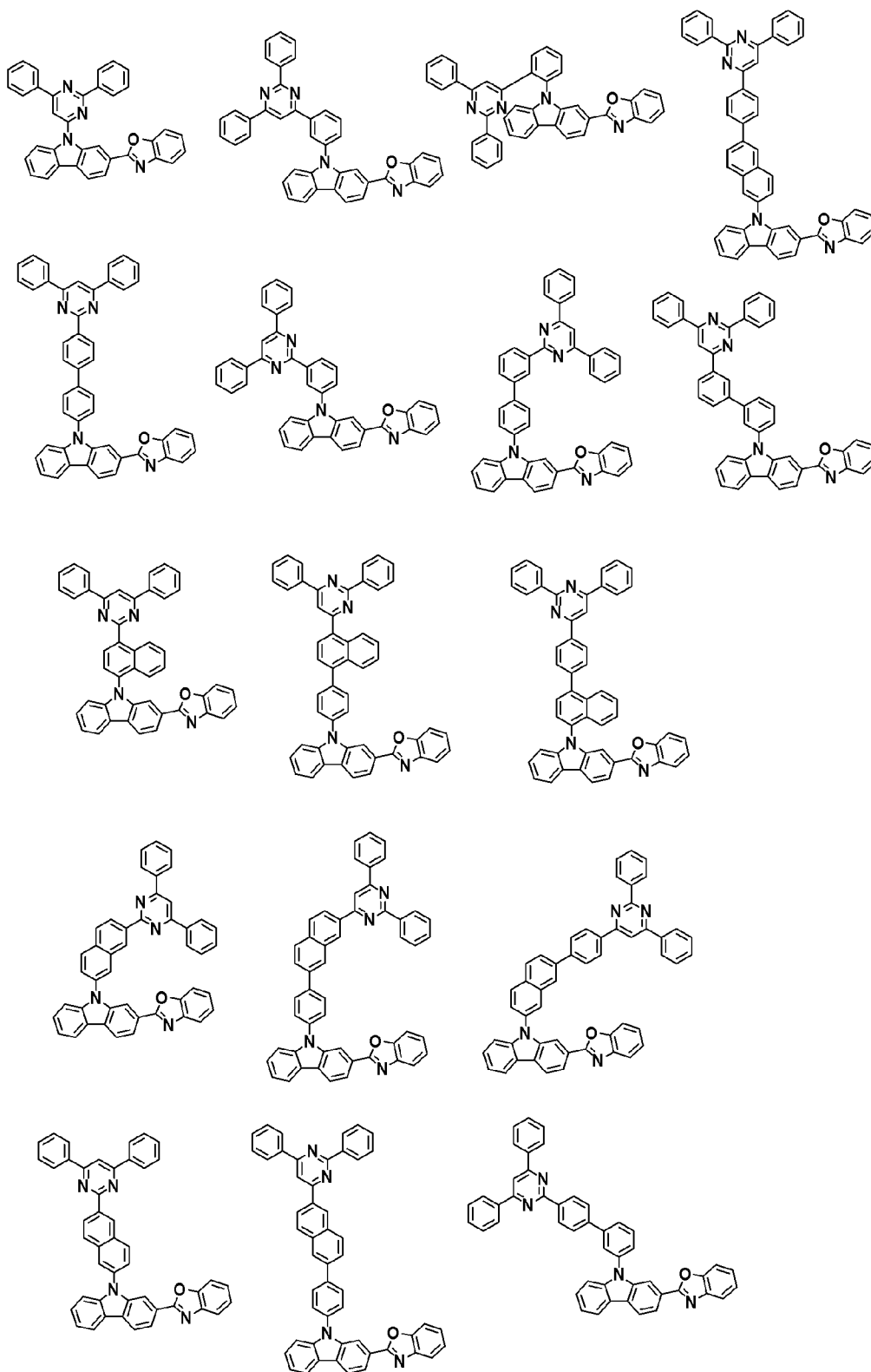












상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 6]

청구항 4에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[도1]

| |
|---|
| 4 |
| 3 |
| 2 |
| 1 |


[도2]

| |
|---|
| 4 |
| 8 |
| 7 |
| 6 |
| 5 |
| 2 |
| 1 |

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/008191

| A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07D 417/14(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, C07D 277/62(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i</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 417/14; C07D 401/14; C07D 409/14; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 277/62; H01L 51/00 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models: IPC as above Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus) & Keywords: organic light emitting device, carbazole, benzothiazole, benzooxazole, light emitting layers | | |
| C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT | | |
| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
| X | KR 10-2017-0003502 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 09 January 2017 See claims 1, 2, 4; paragraph [0001]; page 11; compound 57. | 1-6 |
| A | KR 10-2013-0022391 A (E-RAY OPTOELECTRONICS TECHNOLOGY CO., LTD.) 06 March 2013 See claims 1, 4; paragraphs [0055]-[0061]; table 1; compounds 1-21. | 1-6 |
| A | KR 10-2010-0075079 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 02 July 2010 See claims 1, 5, 6, 9-11; chemical formula 49. | 1-6 |
| A | KR 10-2013-0118269 A (SFC CO., LTD.) 29 October 2013 See claims 1, 7-10; chemical formula 19. | 1-6 |
| A | KR 10-2014-0004005 A (SFC CO., LTD.) 10 January 2014 See the entire document. | 1-6 |
| <input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> 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 17 OCTOBER 2019 (17.10.2019) | | Date of mailing of the international search report 17 OCTOBER 2019 (17.10.2019) |
| Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon, 35208, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578 | | Authorized officer Telephone No. |

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2019/008191

| Patent document cited in search report | Publication date | Patent family member | Publication date |
|--|------------------|--|--|
| KR 10-2017-0003502 A | 09/01/2017 | KR 10-1741415 B1 TW 201100522 A WO 2010-126270 A1 | 30/05/2017 01/01/2011 04/11/2010 |
| KR 10-2013-0022391 A | 06/03/2013 | CN 102952120 A CN 102952120 B JP 2013-046067 A JP 5600709 B2 TW 201309675 A TW 1454469 B US 2013-0048956 A1 US 9353085 B2 | 06/03/2013 20/08/2014 04/03/2013 01/10/2014 01/03/2013 01/10/2014 28/02/2013 31/05/2016 |
| KR 10-2010-0075079 A | 02/07/2010 | KR 10-1257695 B1 | 24/04/2013 |
| KR 10-2013-0118269 A | 29/10/2013 | None | |
| KR 10-2014-0004005 A | 10/01/2014 | None | |

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07D 417/14(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, C07D 277/62(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야
 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
 C07D 417/14; C07D 401/14; C07D 409/14; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 277/62; H01L 51/00

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

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
 eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus) & 키워드: 유기발광소자(organic light emitting device), 카바졸(carbazole), 벤조싸이아졸(benzothiazole), 벤조옥사졸(benzooxazole), 발광층(light emitting layers)


C. 관련 문헌

| 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재 | 관련 청구항 |
|-------|--|--------|
| X | KR 10-2017-0003502 A (롭엔드하스전자재료코리아유한회사) 2017.01.09 청구항 1, 2, 4; 단락 [0001]; 페이지 11; 화합물 57 참조. | 1-6 |
| A | KR 10-2013-0022391 A (이-레이 오토일렉트로닉스 테크놀로지 컴퍼니 리미티드) 2013.03.06 청구항 1, 4; 단락 [0055]-[0061]; 표 1; 화합물 1-21 참조. | 1-6 |
| A | KR 10-2010-0075079 A (제일모직주식회사) 2010.07.02 청구항 1, 5, 6, 9-11; 화학식 49 참조. | 1-6 |
| A | KR 10-2013-0118269 A (에스에프씨 주식회사) 2013.10.29 청구항 1, 7-10; 화학식 19 참조. | 1-6 |
| A | KR 10-2014-0004005 A (에스에프씨 주식회사) 2014.01.10 전체 문헌 참조. | 1-6 |

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

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌
 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌
 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 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 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
 “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

| | |
|--|---|
| 국제조사의 실제 완료일 2019년 10월 17일 (17.10.2019) | 국제조사보고서 발송일 2019년 10월 17일 (17.10.2019) |
|--|---|

| | |
|--|------------------------------------|
| ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578 | 심사관 이기철 전화번호 +82-42-481-3353 |
|--|------------------------------------|



| 국제조사보고서에서 인용된 특허문헌 | 공개일 | 대응특허문헌 | 공개일 |
|-----------------------|------------|--|--|
| KR 10-2017-0003502 A | 2017/01/09 | KR 10-1741415 B1 TW 201100522 A WO 2010-126270 A1 | 2017/05/30 2011/01/01 2010/11/04 |
| KR 10-2013-0022391 A | 2013/03/06 | CN 102952120 A CN 102952120 B JP 2013-046067 A JP 5600709 B2 TW 201309675 A TW I454469 B US 2013-0048956 A1 US 9353085 B2 | 2013/03/06 2014/08/20 2013/03/04 2014/10/01 2013/03/01 2014/10/01 2013/02/28 2016/05/31 |
| KR 10-2010-0075079 A | 2010/07/02 | KR 10-1257695 B1 | 2013/04/24 |
| KR 10-2013-0118269 A | 2013/10/29 | 없음 | |
| KR 10-2014-0004005 A | 2014/01/10 | 없음 | |