

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(10) 국제공개번호

(43) 국제공개일
2017 년 12 월 21 일 (21.12.2017) **WIPO | PCT**

WO 2017/217676 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 209/56 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 307/91 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01)

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(21) 국제출원번호: PCT/KR2017/005670

(22) 국제출원일: 2017 년 5 월 31 일 (31.05.2017)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:

10-2016-0073745 2016 년 6 월 14 일 (14.06.2016) KR

(71) 출원인: 주식회사 두산 (**DOOSAN CORPORATION**)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: 박우재 (**PARK, Woo Jae**); 16858 경기도 용인시
수지구 수지로112번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR).
김영배 (**KIM, Young Bae**); 16858 경기도 용인시 수지구
수지로112번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR). 김희문
(**KIM, Hoe Moon**); 16858 경기도 용인시 수지구 수지로
112번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 윤여광 등 (**YOON, Yu Kwang et al.**); 03737 서
울시 서대문구 충정로 7, 구세군빌딩 15층, 워너피플법
률사무소, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국
내 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, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA,
LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN,
MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE,
PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE,
SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT,
TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역
내 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), 유
럽 (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).

(54) Title: ORGANIC LUMINESCENT COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT INCLUDING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel compound having excellent thermal stability and luminescent ability, and an organic electroluminescent element having enhanced characteristics such as luminous efficiency, driving voltage, and lifespan by incorporating the novel compound into one organic layer or more.

(57) 요약서: 본 발명은 열안정성과 발광능이 우수한 신규 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광 효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2017/217676 A1

명세서

발명의 명칭: 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

기술분야

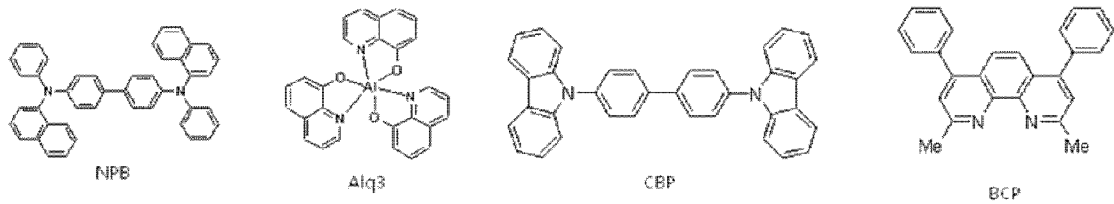
- [1] 본 발명은 신규한 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 사용되는 화합물에 관한 것이다.

배경기술

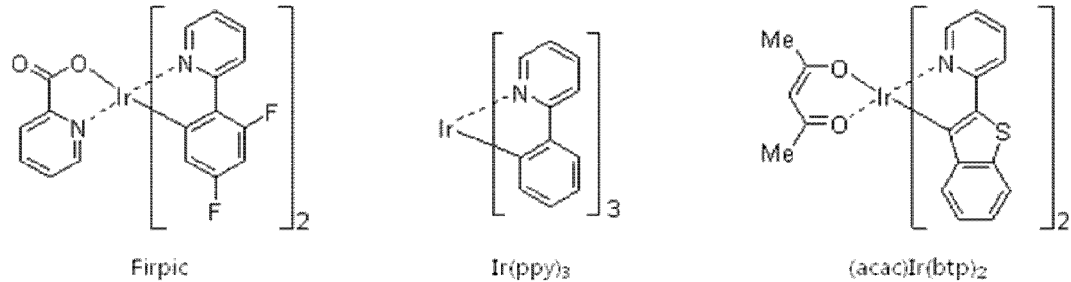
- [2] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 전계 발광 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광물질, 정공주입 물질, 정공수송 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 유기 전계 발광 소자의 발광층 형성 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그 밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광 재료로 노란색 및 주황색 발광 재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.
- [5] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층 재료로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색의 도펀트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP(4,4-dicarbazolylbiphenyl)가 인광

호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[6]



[7]



[8] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 좋지 않아 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[9] 상기한 문제점을 해결하기 위해, 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 열적 안정성 및 발광 특성 등이 우수한 신규 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

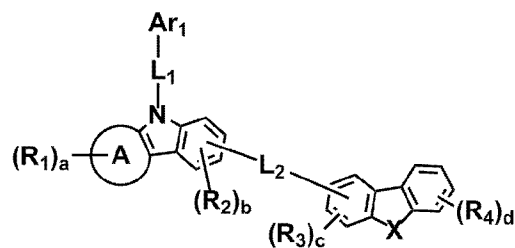
[10] 또한 본 발명은 상기 신규 화합물을 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율을 나타내며 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[11] 상기한 목적을 달성하기 위해 본 발명은, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[12] [화학식 1]

[13]



[14] 상기 화학식 1에서,

[15] A 고리는 단일환 또는 다환의 방향족 고리이고;

[16] X는 -O-, -S-, 또는 -C(R₅R₆)- 이며;

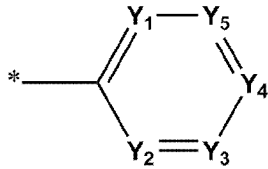
[17] L₁ 및 L₂는 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의

헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

[18] Ar₁은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시되고,

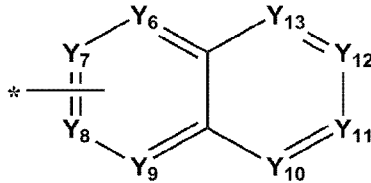
[19] [화학식 2]

[20]



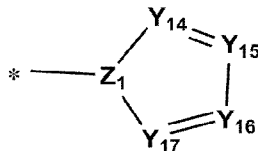
[21] [화학식 3]

[22]



[23] [화학식 4]

[24]



[25] 상기 화학식 2 내지 4에서, *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고,

[26] Y₁ 내지 Y₁₇은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₇)에서 선택되고, 이때 R₇이 복수인 경우, 복수의 R₇은 서로 같거나 또는 상이하며,

[27] 상기 화학식 3에서 L₁에 결합되는 Y₆ 내지 Y₉ 중 어느 하나는 C(R₇)이고,

[28] Z₁은 N 또는 C(R₇)이며,

[29] R₁ 내지 R₄ 및 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[30] R₅ 및 R₆는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 서로 결합하여 축합 고리를 형성하며,

[31] R₁ 내지 R₇의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각

독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며,

[32] a 내지 d는 각각 1 내지 4의 정수이다.

[33] 또한, 본 발명은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물 층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[34] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물 층의 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 열적 안정성, 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

[35] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[36] <신규 유기 화합물>

[37] 본 발명은 카바졸과 디벤조 모이어티가 결합되어 기본 골격을 형성하고, 상기 기본 골격에 전자 흡습성이 큰 전자 끌개기(electron-withdrawing group; EWG)가 도입된 화합물로, 상기 화학식 1로 표시된다.

[38] 구체적으로, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 카바졸의 질소(N)에 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기(예를 들어, 트리아진기, 피리딘기, 트라이졸로피리딘기 등)와 같은 전자 흡습성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 도입되어 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 이를 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 적용할 경우 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다.

[39] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 이동성이 우수할 뿐 아니라 높은 유리 전이온도(Tg) 및 열적 안정성이 우수하다. 이로 인해, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 수송 능력 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층인 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나의 재료로 사용될 수 있다. 바람직하게는 발광층, 전자 수송층 및 전자 수송층에 추가로 적층되는 전자수송 보조층 중

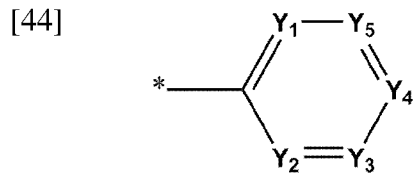
어느 하나의 재료로 사용될 수 있다.

- [40] 또한, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자수송층 또는 정공수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있고, 소자의 내구성 및 안정성이 향상되어 소자의 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 개발된 재료들이 대부분 저전압 구동이 가능하여 이로 인한 수명이 개선되는 물리적 특징들을 나타낸다.

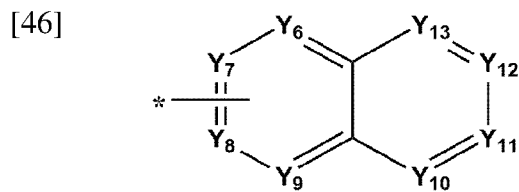
- [41] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, A 고리는 단일환 또는 다환의 방향족 고리이고, X는 -O-, -S-, 또는 -C(R₅R₆)- 이며, L₁ 및 L₂는 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.

- [42] 본 발명의 바람직한 일례를 들면, Ar₁은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시된다.

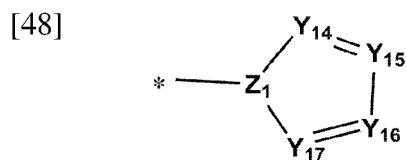
- [43] [화학식 2]



- [45] [화학식 3]



- [47] [화학식 4]



- [49] 상기 화학식 2 내지 4에서,

- [50] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고,

- [51] Y₁ 내지 Y₁₇은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₇)에서 선택되고, 이때 R₇이 복수인 경우, 복수의 R₇은 서로 같거나 또는 상이할 수 있다.

- [52] 상기 화학식 3에서, L₁에 결합되는 Y₆ 내지 Y₉ 중 어느 하나는 C(R₇)인 것이 바람직하다.

- [53] 상기 화학식 4에서, Z₁은 N 또는 C(R₇)일 수 있다.

- [54] R₁ 내지 R₄ 및 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀

의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다. 바람직하게는 상기 R_1 내지 R_4 는 모두 수소인 경우이다.

[55] R_5 및 R_6 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다. 바람직하게는, 상기 R_5 및 R_6 는 각각 독립적으로, 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

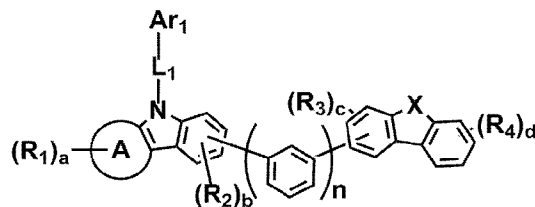
[56] R_1 내지 R_7 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환될 수 있다.

[57] a 내지 d는 각각 1 내지 4의 정수이다.

[58] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은, L_2 가 페닐 또는 비페닐 등을 포함하는 아릴기인 경우에 하기 화학식 5의 화합물로 보다 구체화될 수 있다.

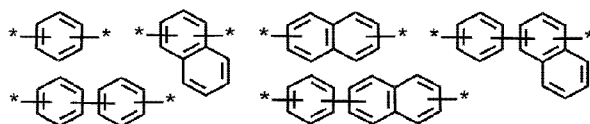
[59] [화학식 5]

[60]



[61] 상기 화학식 5에서, L_1 은 단일결합 또는 하기 구조에서 선택되는 아릴렌일 수 있으며, n은 0 내지 2의 정수이다.

[62]

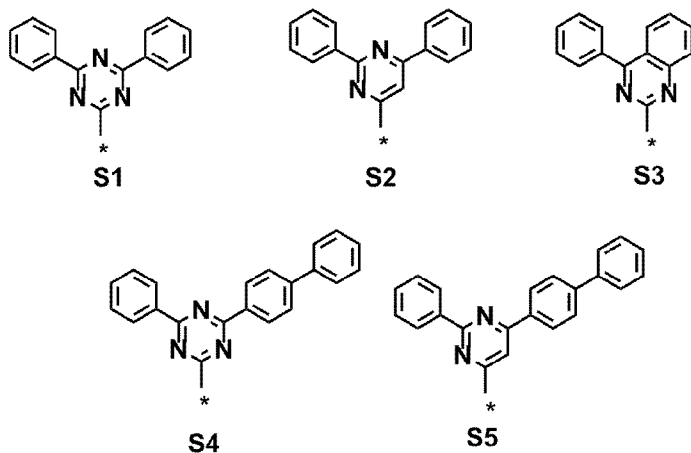


[63] 한편 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, L_1 은 단일결합이고, Ar_1 은 화학식 2 또는 3으로 표시되며, 여기서 Y_1 내지 Y_5 , 및 Y_6 내지 Y_9 중에서 2

이상은 N이고, 상기 L₂는 C₆~C₁₈의 아릴렌기인 것이 바람직하다.

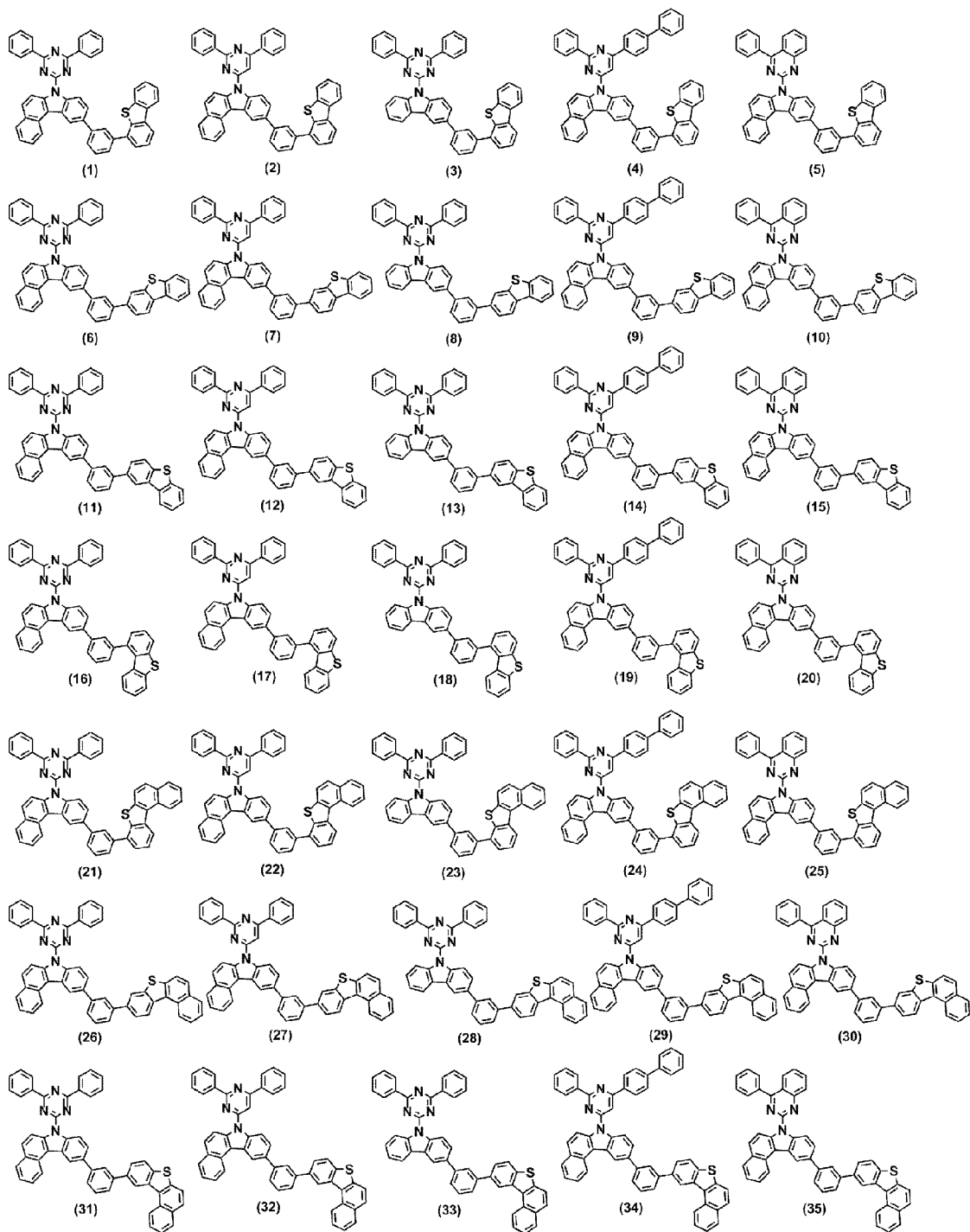
[64] 구체적으로, 상기 화학식 2 및 3으로 표시되는 치환체는 하기 화학식 S1 내지 S5로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[65]

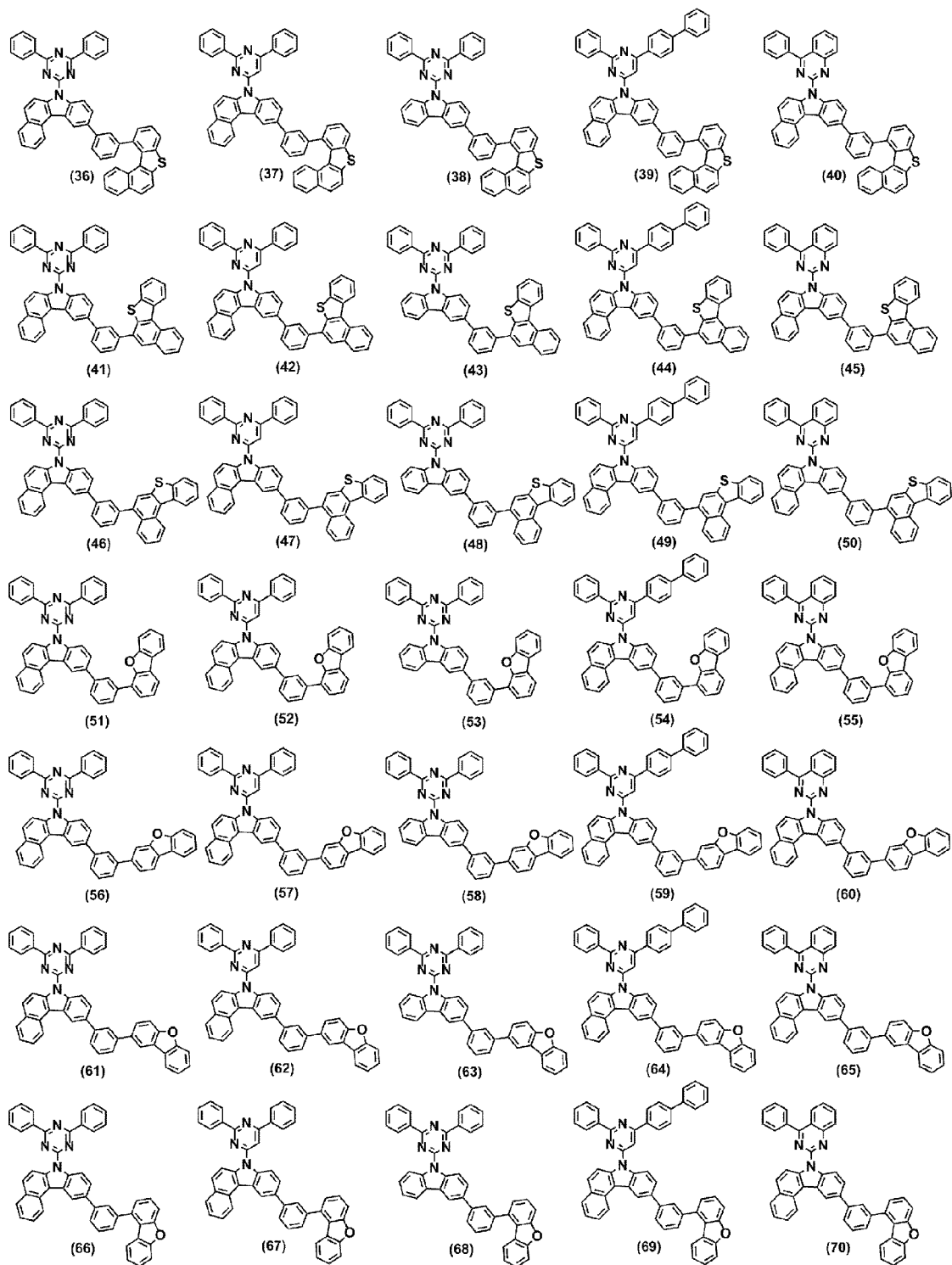


[66] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1 내지 330으로 구체화될 수 있으나, 이들로 한정되는 것은 아니다.

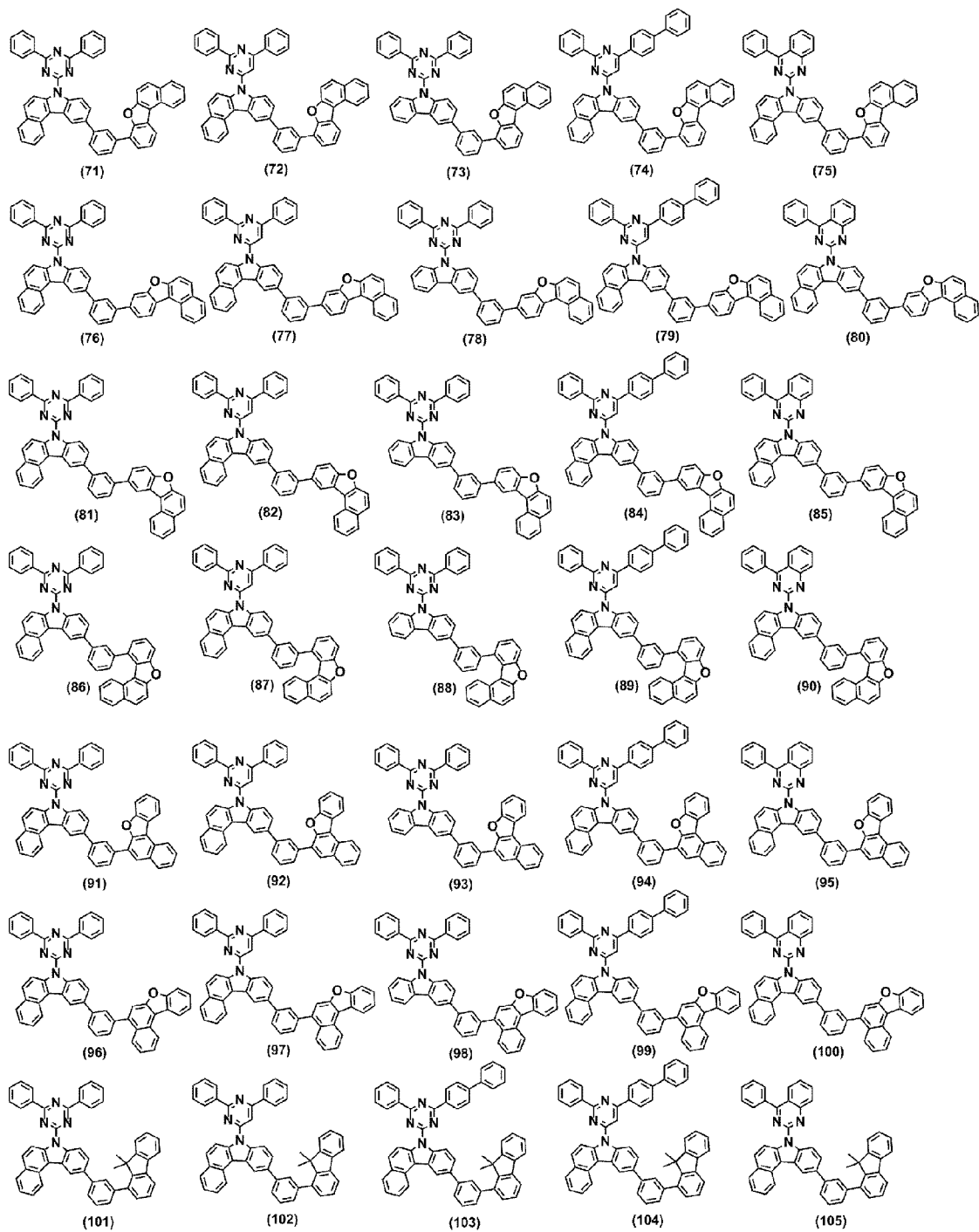
[67]



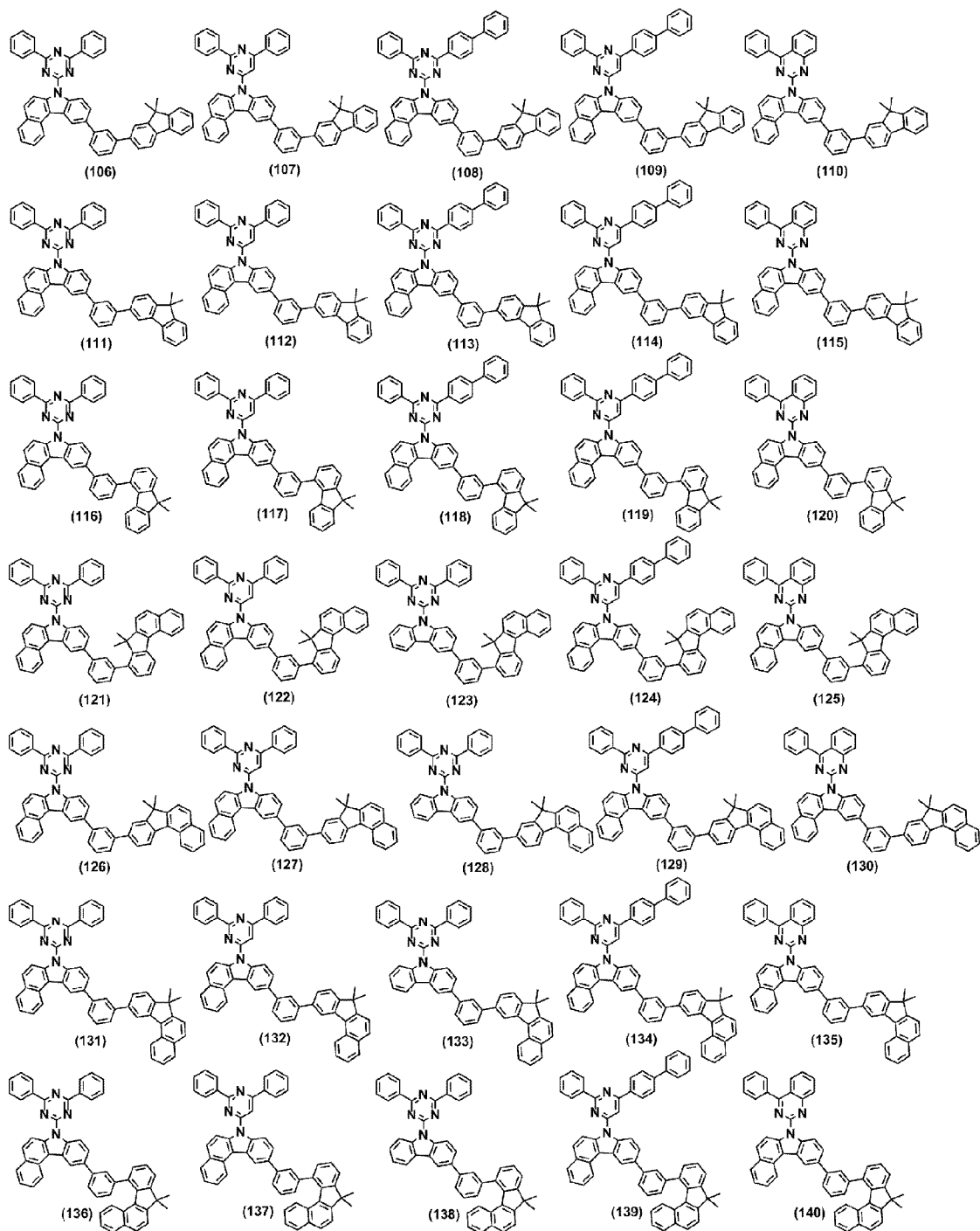
[68]



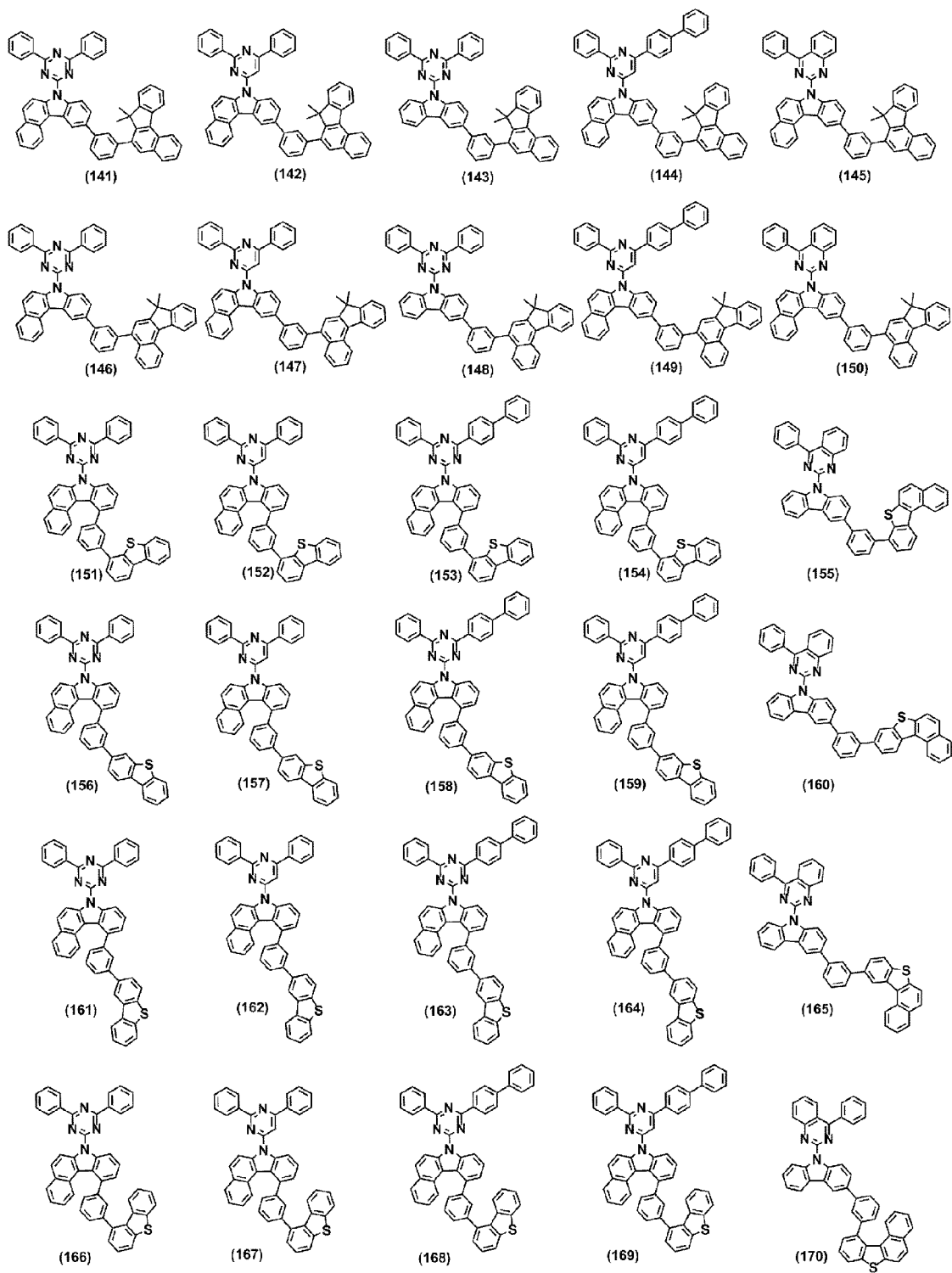
[69]



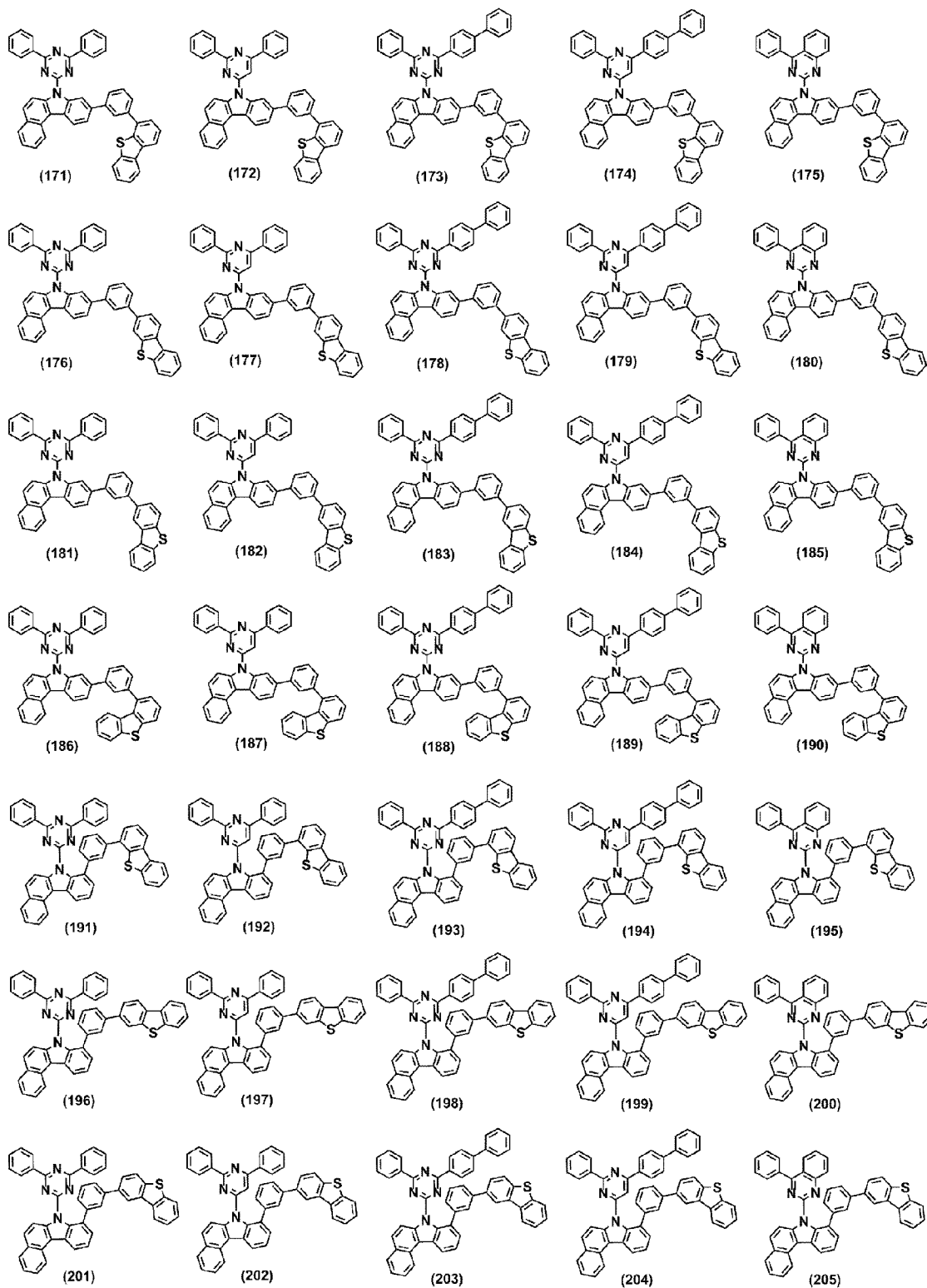
[70]



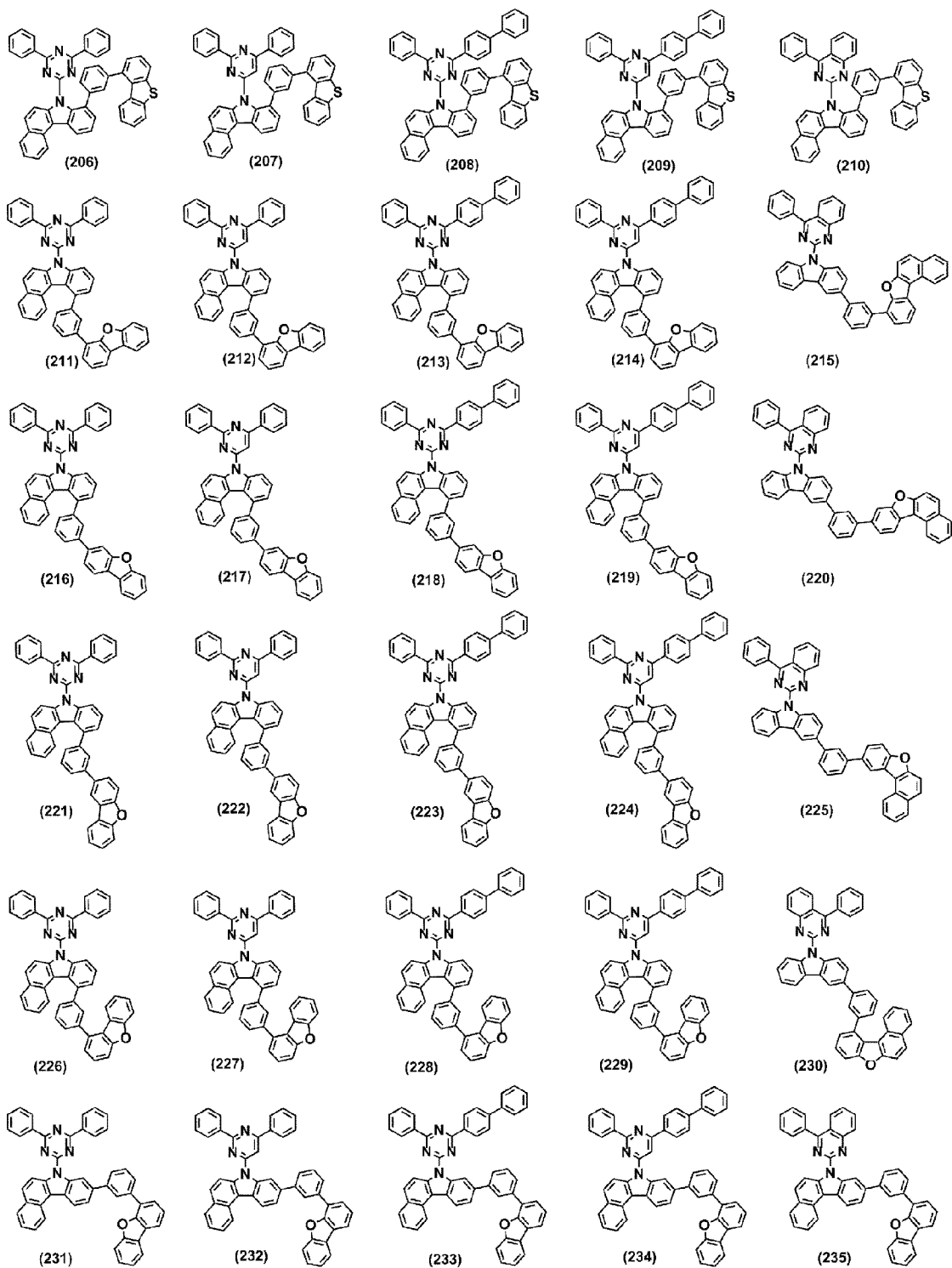
[71]



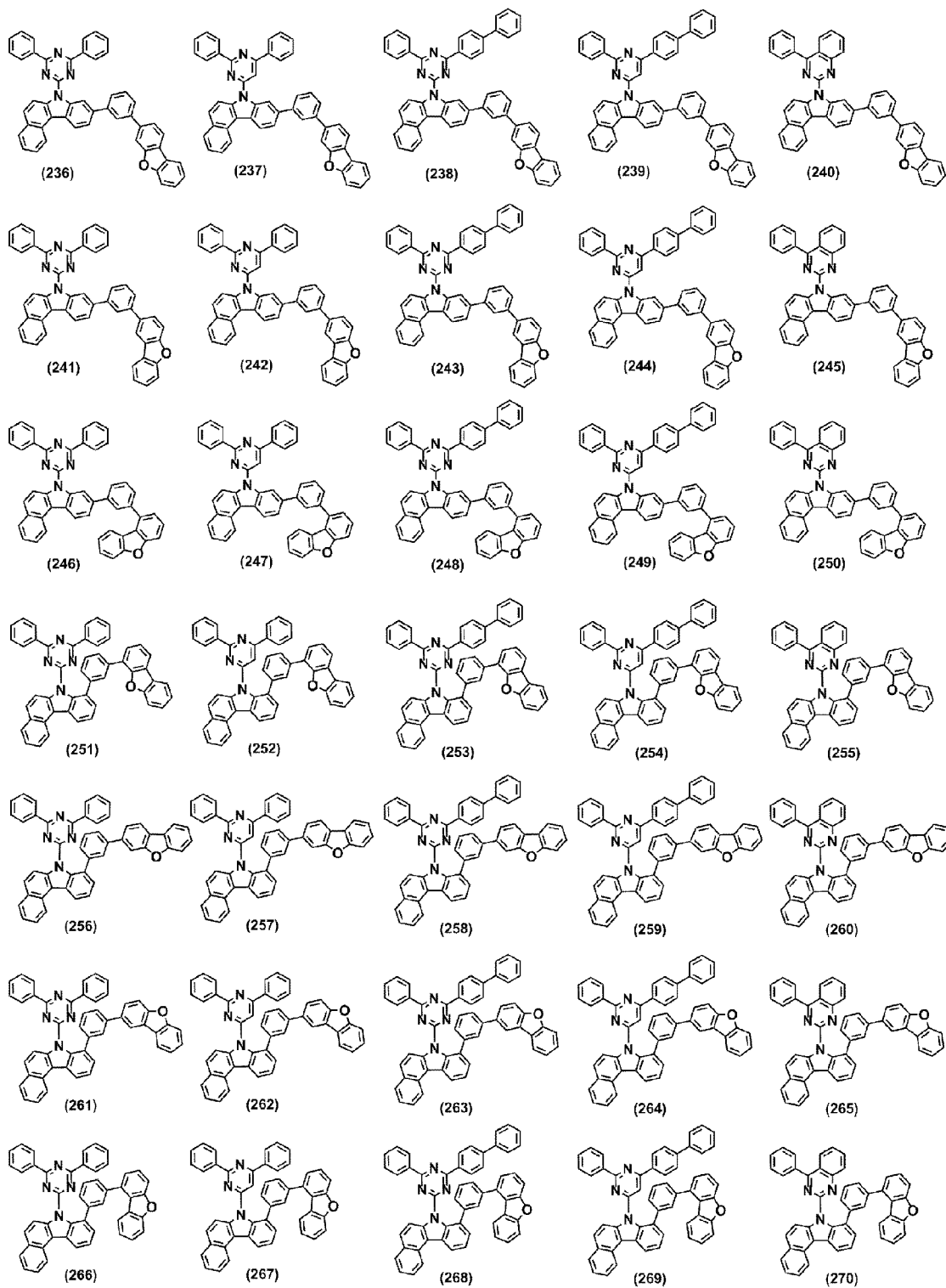
[72]



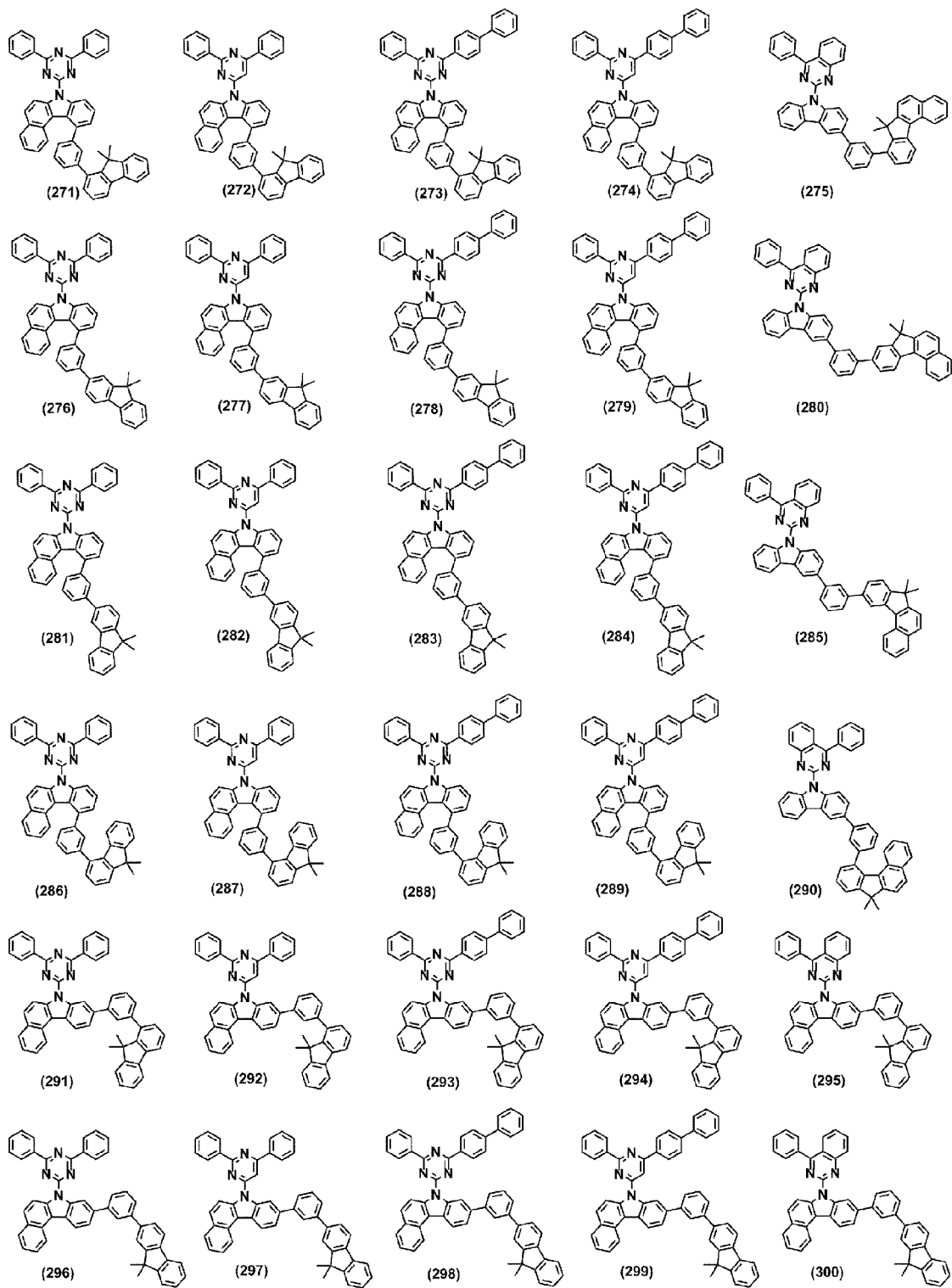
[73]



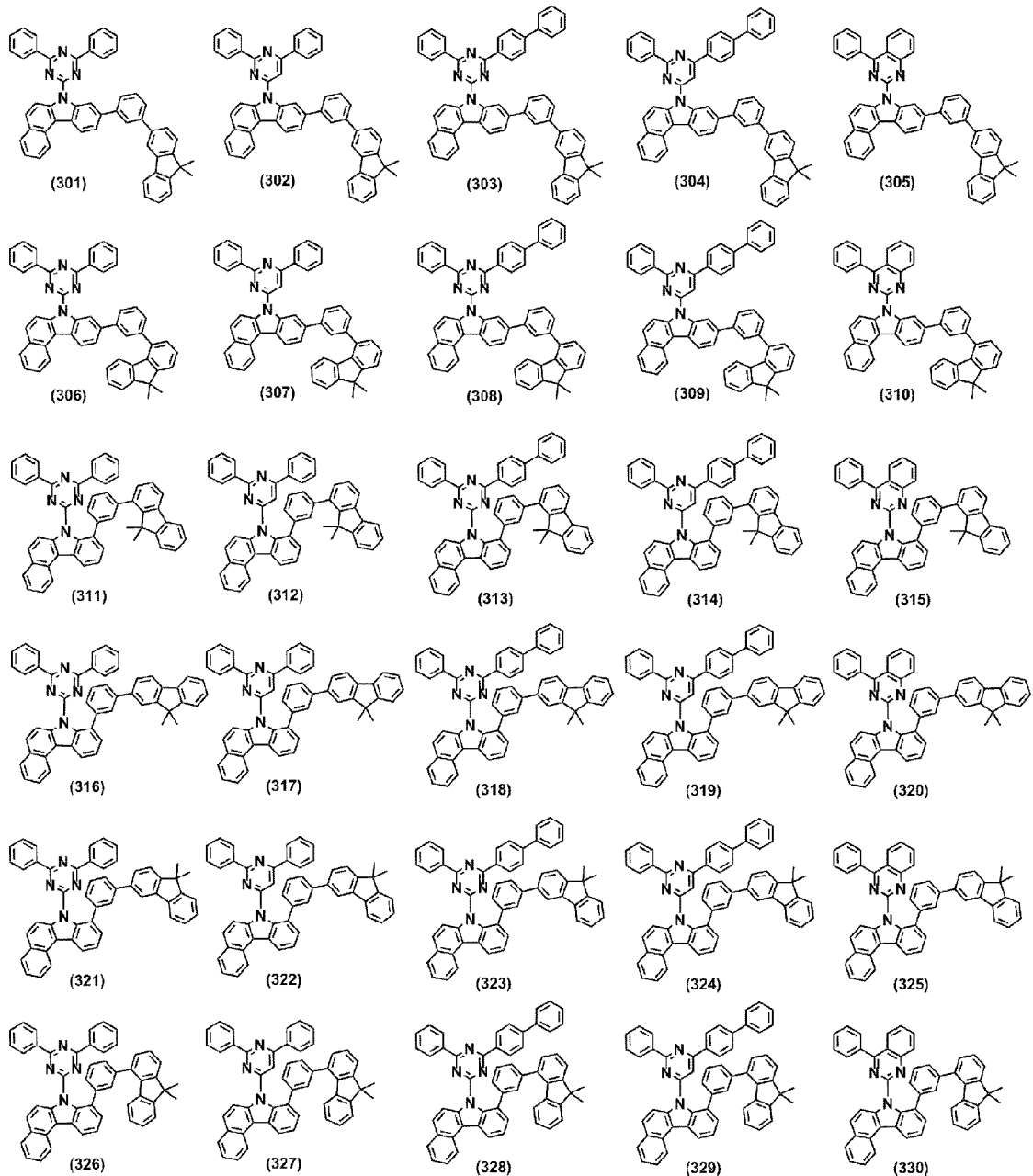
[74]



[75]



[76]



[77] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[78] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[79] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [80] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [81] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indoly), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazoly)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [82] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [83] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [84] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [85] 본 발명에서 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [86] 본 발명에서 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [87] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

- [88] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.
- [89]
- [90] <유기 전계 발광 소자>
- [91] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)를 제공한다.
- [92] 보다 구체적으로, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 양극(anode), 음극(cathode) 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.
- [93] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 수명 개선층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자수송층 및 전자 수송층에 추가로 적층되는 전자수송 보조층으로 구성된 군에서 선택될 수 있으며, 발광층인 것이 바람직하다.
- [94] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트를 포함할 수 있는데, 이때 호스트로서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 단독으로 포함하거나 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 함께 다른 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.
- [95] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 청색, 녹색, 적색의 인광 호스트 재료로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등을 향상시킬 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 도펀트 재료로서 유기 전계 발광 소자에 포함되는 것이 바람직하다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트, 형광 호스트 또는 도펀트 재료인 것이 바람직하며, 발광층의 적색 인광 호스트인 것이 더욱 바람직하다.
- [96] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 발광층, 전자수송층 및 전자 수송층에 추가로 적층되는 전자수송 보조층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [97] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극(음극, 또는 양극)과 유기물층의

계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

- [98] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [99] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [100] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.
- [101] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [102] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [103] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

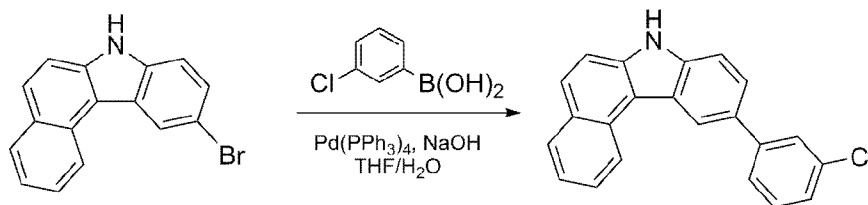
발명의 실시를 위한 형태

- [104] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[105] [준비에 1] CD1의 합성

[106] <단계 1> 10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸의 합성

[107]



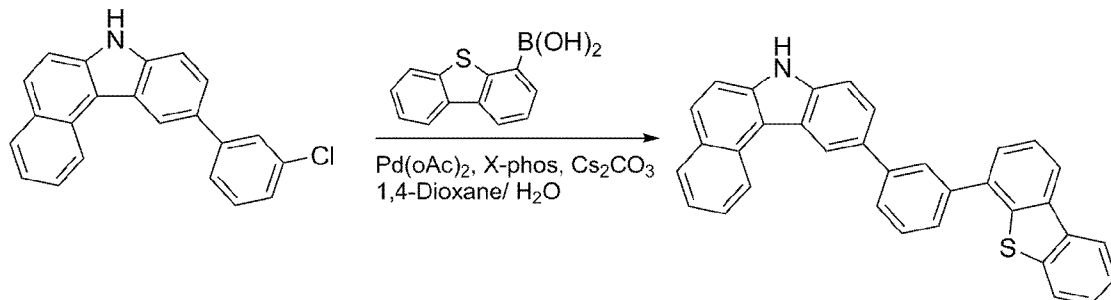
- [108] 질소 기류 하에서 10-브로모-7H-벤조[c]카바졸 (20 g, 81.3 mmol), (3-클로로페닐)보로닉산 (15.3 g, 97.5 mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.7 g, 5 mol%), NaOH (9.8 g, 243.8 mmol)에 400 ml/100 ml의 THF/H₂O를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다.
- [109] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인

10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (19.4 g, 수율 86 %)을 얻었다.

[110] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.38 (d, 1H), 7.46 (m, 6H), 7.61 (m, 2H), 7.77 (d, 1H), 8.03 (s, 1H), 8.15 (d, 2H), 10.30 (s, 1H)

[111] <단계 2> CD1의 합성

[112]



[113] 질소 기류 하에서 10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol), 디벤조[b,d]싸이오페-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.8 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[114] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD1 (18.4 g, 수율 78%)을 얻었다.

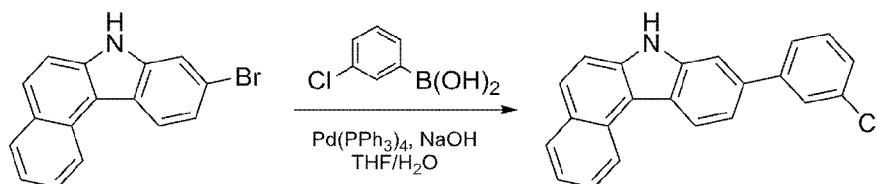
[115] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.88 (d, 3H), 8.13 (d, 1H), 10.3 (s, 1H)

[116]

[117] [준비예 2] CD2의 합성

[118] <단계 1> 9-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸의 합성

[119]



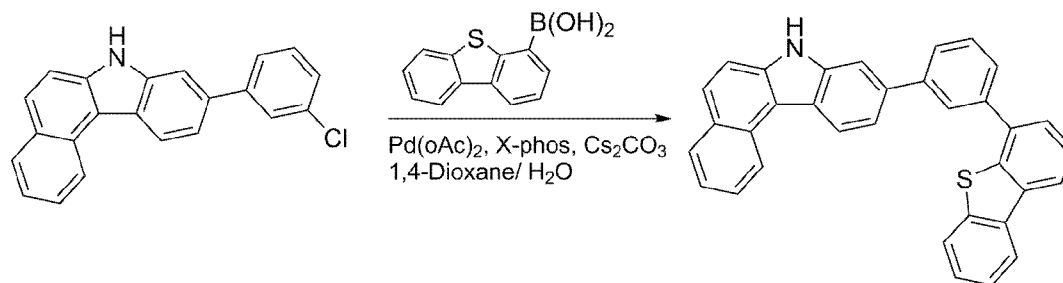
[120] 질소 기류 하에서 9-브로모-7H-벤조[c]카바졸 (20 g, 81.3 mmol), (3-클로로페닐)보로닉산 (15.3 g, 97.5 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (4.7 g, 5 mol%), NaOH (9.8 g, 243.8 mmol)에 400 ml/100 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 80°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[121] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 이용하여 목적 화합물인 9-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (18.4 g, 수율 82 %)을 얻었다.

[122] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.40 (d, 1H), 7.44 (m, 5H), 7.48 (d, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.74 (d, 1H), 8.01 (s, 1H), 8.12 (d, 2H), 10.11 (s, 1H)

[123] <단계 2> CD2의 합성

[124]



[125] 질소 기류 하에서 9-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol), 디벤조[b,d]싸이오페-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.8 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[126] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD2 (17.8 g, 수율 76%)을 얻었다.

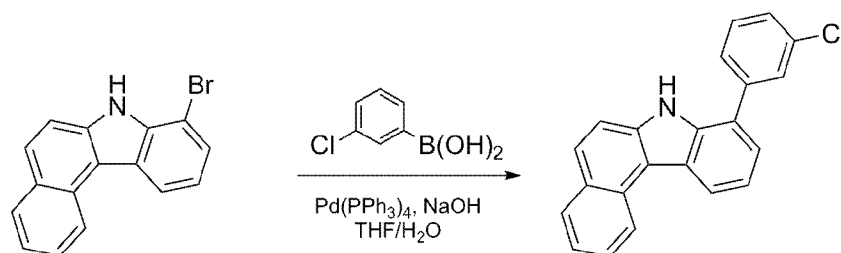
[127] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.01 (t, 3H), 7.44 (d, 2H), 7.60 (m, 10H), 7.75 (s, 1H), 7.88 (d, 3H), 8.13 (d, 1H), 10.22 (s, 1H)

[128]

[129] [준비예 3] CD3의 합성

[130] <단계 1> 8-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸의 합성

[131]



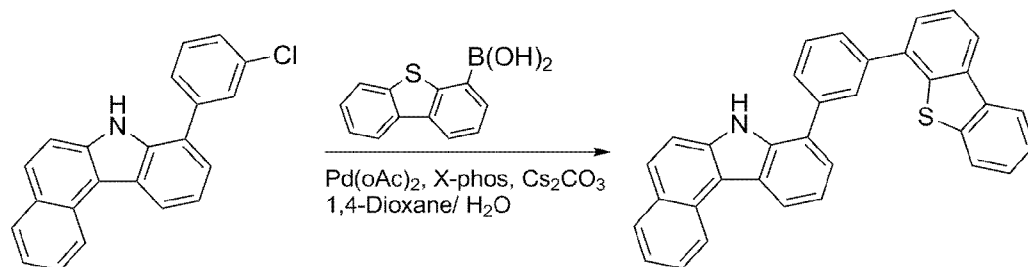
[132] 질소 기류 하에서 8-브로모-7H-벤조[c]카바졸 (20 g, 81.3 mmol), (3-클로로페닐)보로닉산 (15.3 g, 97.5 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (4.7 g, 5 mol%), NaOH (9.8 g, 243.8 mmol)에 400 ml/100 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 80°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[133] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 8-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15.3 g, 수율 71 %)을 얻었다.

[134] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.33 (d, 1H), 7.41 (m, 5H), 7.48 (d, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.74 (d, 1H), 8.01 (s, 1H), 8.31 (d, 1H), 8.42 (d, 1H), 10.76 (s, 1H)

[135] <단계 2> CD3의 합성

[136]



[137] 질소 기류 하에서 8-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol), 디벤조[b,d]싸이오페-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.8 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

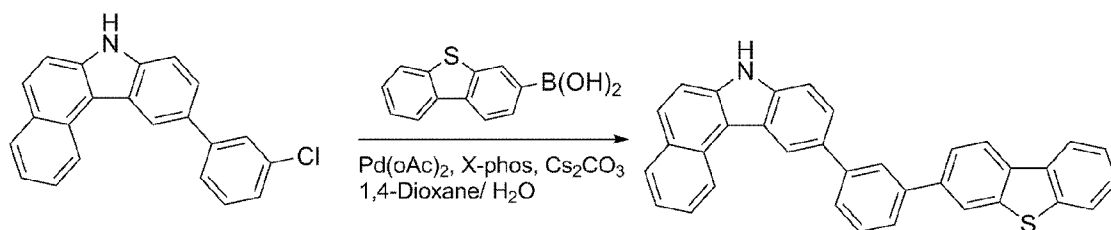
[138] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD3 (15.8 g, 수율 70%)을 얻었다.

[139] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.11 (t, 3H), 7.48 (d, 2H), 7.63 (m, 10H), 7.75 (d, 1H), 7.88 (d, 3H), 8.19 (d, 1H), 10.83 (s, 1H)

[140]

[141] [준비예 4] CD4의 합성

[142]



[143] 질소 기류 하에서 [준비예 1] <단계 1>에서 합성한, 10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol), 디벤조[b,d]싸이오페-3-닐보로닉산 (15.4 g, 64.8 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

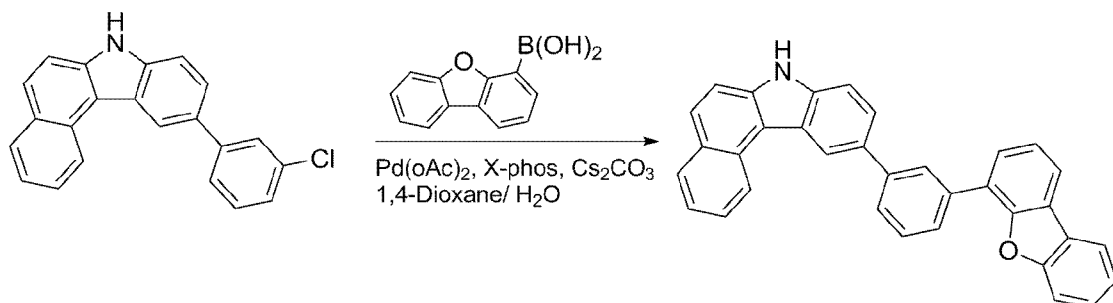
[144] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD4 (17.2 g, 수율 75%)을 얻었다.

[145] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[146]

[147] [준비예 5] CD5의 합성

[148]



[149]

질소 기류 하에서 [준비에 1] <단계 1>에서 합성한,
10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
디벤조[b,d]퓨란-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol),
X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400
ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[150]

반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여
CD5 (17.2 g, 수율 75%)을 얻었다.

[151]

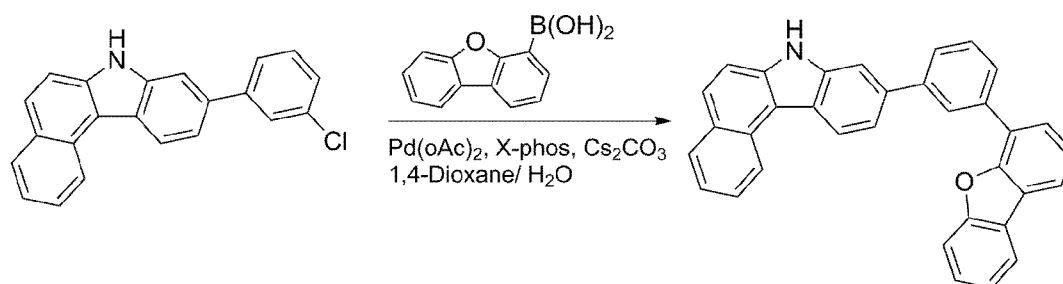
$^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09
(d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[152]

[153]

[준비에 6] CD6의 합성

[154]



[155]

질소 기류 하에서 [준비에 2] <단계 1>에서 합성한,
9-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
디벤조[b,d]퓨란-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol),
X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400
ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[156]

반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여
CD6 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[157]

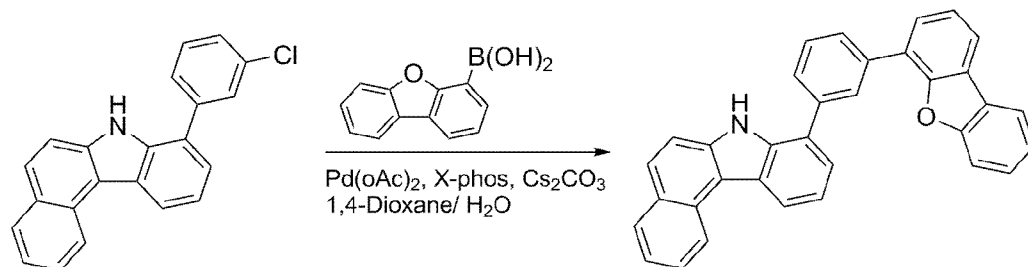
$^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09
(d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[158]

[159]

[준비에 7] CD7의 합성

[160]



[161] 질소 기류 하에서 [준비예 3] <단계 1>에서 합성한,
8-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
디벤조[b,d]푸란-4-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol),
X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400
ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

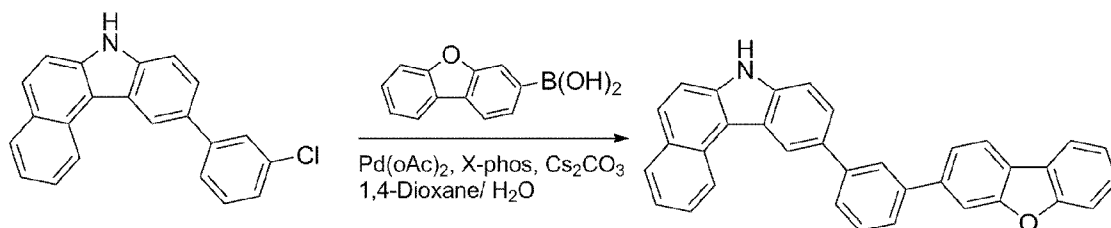
[162] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여
CD7 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[163] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09
(d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[164]

[165] [준비예 8] CD8의 합성

[166]



[167] 질소 기류 하에서 [준비예 1] <단계 1>에서 합성한,
10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
디벤조[b,d]푸란-3-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol),
X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100
ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

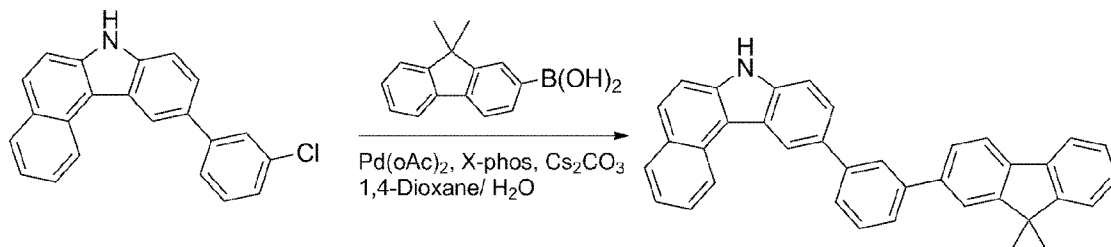
[168] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여
CD8 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[169] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09
(d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[170]

[171] [준비예 9] CD9의 합성

[172]



[173]

질소 기류 하에서 [준비예 1] <단계 1>에서 합성한,
10-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
(9,9-디메틸-플루오렌-2-일)보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[174]

반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD9 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[175]

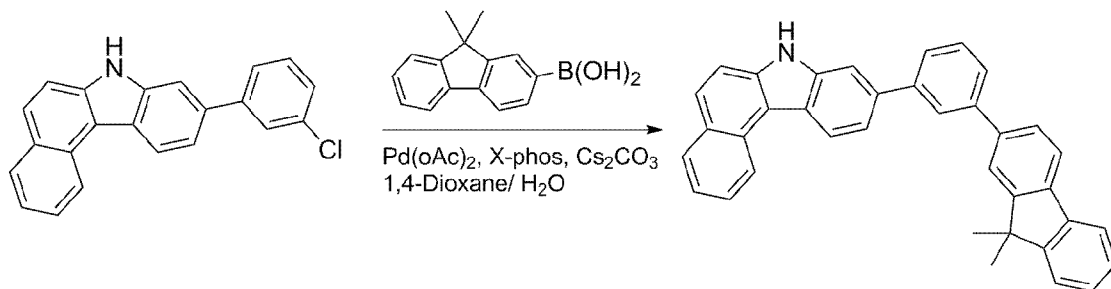
$^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[176]

[177]

[준비예 10] CD10의 합성

[178]



[179]

질소 기류 하에서 [준비예 2] <단계 1>에서 합성한,
9-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol),
디벤조[b,d]푸란-3-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol),
X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

[180]

반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다.
여과하여 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD10 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[181]

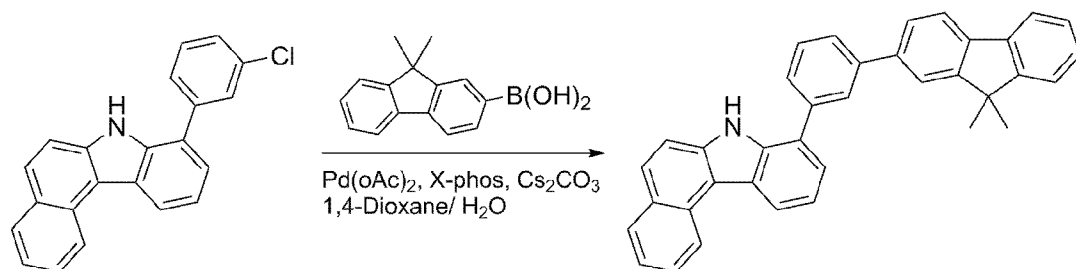
$^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[182]

[183]

[준비예 11] CD11의 합성

[184]



[185] 질소 기류 하에서 [준비예 3] <단계 1>에서 합성한, 8-(3-클로로페닐)-7H-벤조[c]카바졸 (15 g, 54.01 mmol), 디벤조[b,d]푸란-3-닐보로닉산 (15.4 g, 64.6 mmol), Cs_2CO_3 (35.19 g, 108.01 mmol), X-phos (5.2 g, 10.8 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.6 g, 5 mol%) 및 1,4-디옥산/ H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음 120°C 에서 12시간 동안 교반하였다.

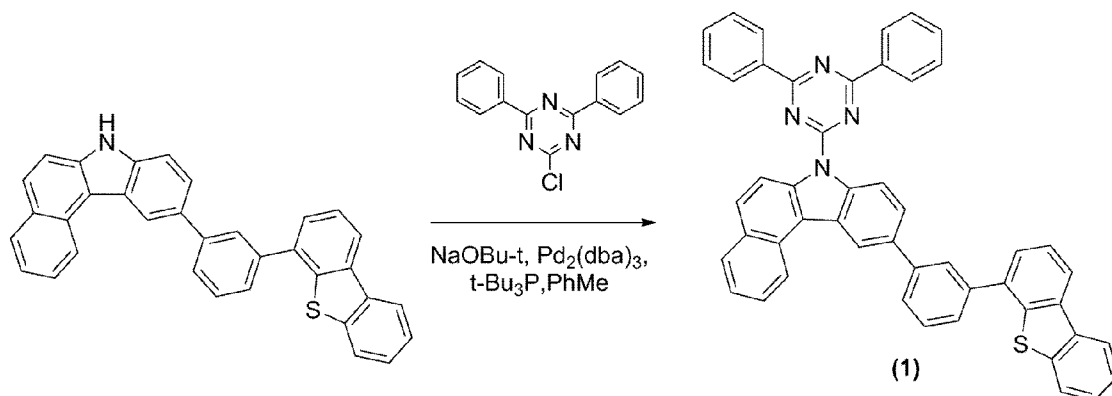
[186] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 CD11 (18.7 g, 수율 79%)을 얻었다.

[187] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 3H), 7.58 (m, 11H), 7.75 (s, 2H), 7.86 (d, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 10.31 (s, 1H)

[188]

[189] [합성예 1] 화합물 1의 합성

[190]



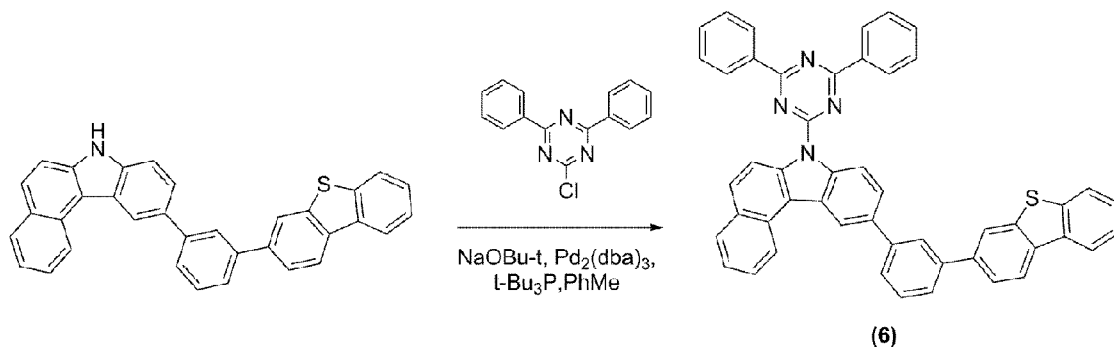
[191] CD1 (10 g, 22.9 mmol)와 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (6.8 g, 22.9 mmol) 및 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.1 g, 1.15 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.9 g, 4.6 mmol), 나트륨 *tert*-부톡사이드 (4.4 g, 45.9 mmol)을 150 ml 톨루엔에 넣고 110°C 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 1 (11.6 g, 수율 75%)을 얻었다.

[192] Mass: $[(\text{M}+\text{H})^+]$: 707

[193]

[194] [합성예 2] 화합물 6의 합성

[195]



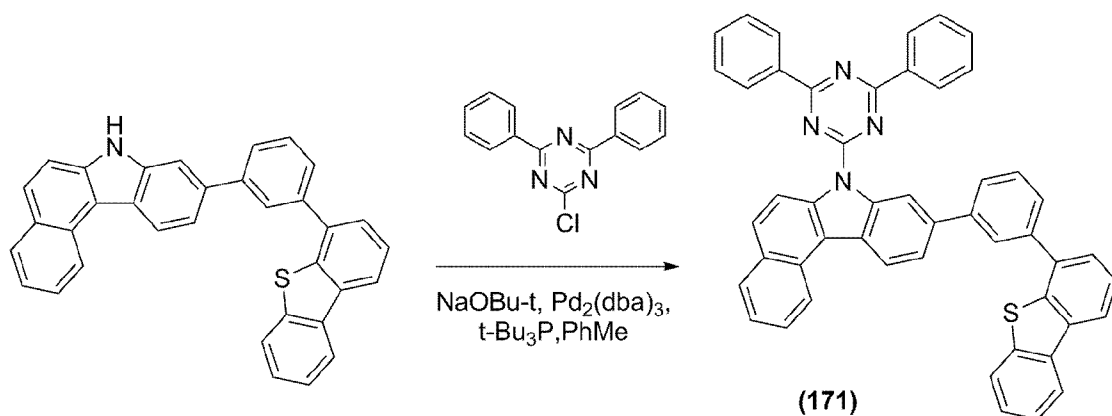
[196] CD1 대신 CD4(10 g, 22.9 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[197] Mass: [(M+H)⁺] : 707

[198]

[199] [합성예 3] 화합물 171의 합성

[200]



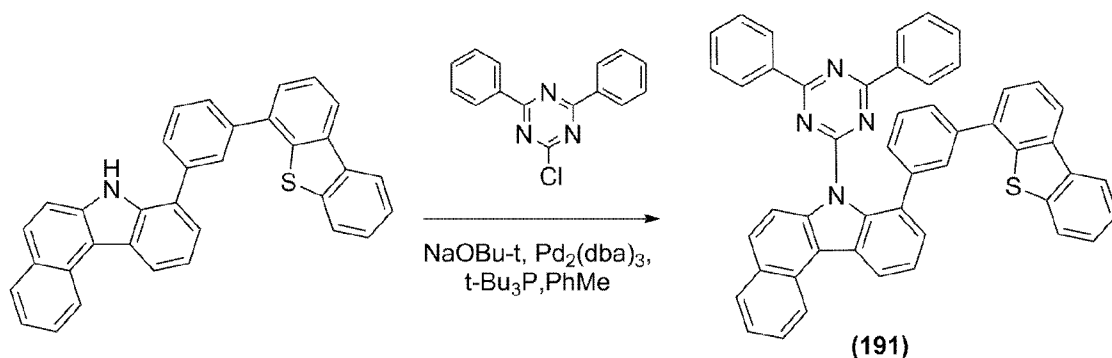
[201] CD1 대신 CD2(10 g, 22.9 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 171 (10.8 g, 수율 72%)를 얻었다.

[202] Mass: [(M+H)⁺] : 707

[203]

[204] [합성예 4] 화합물 191의 합성

[205]



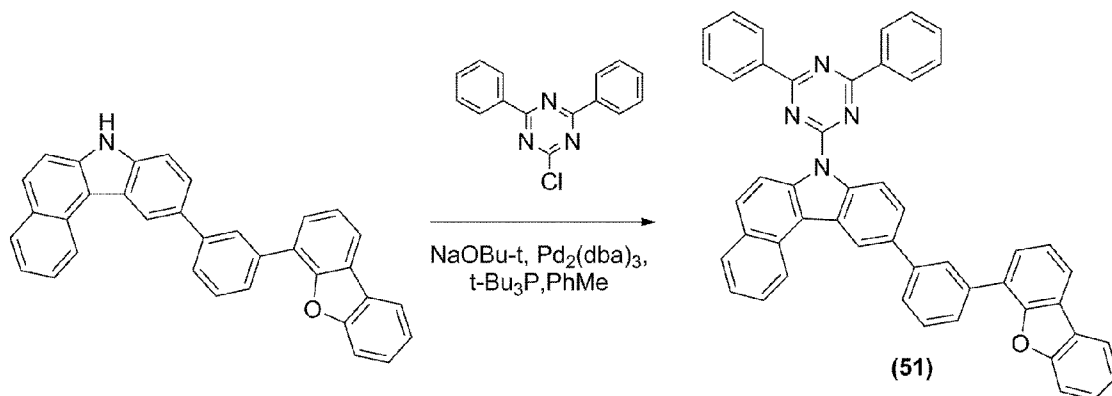
[206] CD1 대신 CD3(10 g, 22.9 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 191 (13.3 g, 수율 79%)를 얻었다.

[207] Mass: [(M+H)⁺] : 707

[208]

[209] [합성예 5] 화합물 51의 합성

[210]



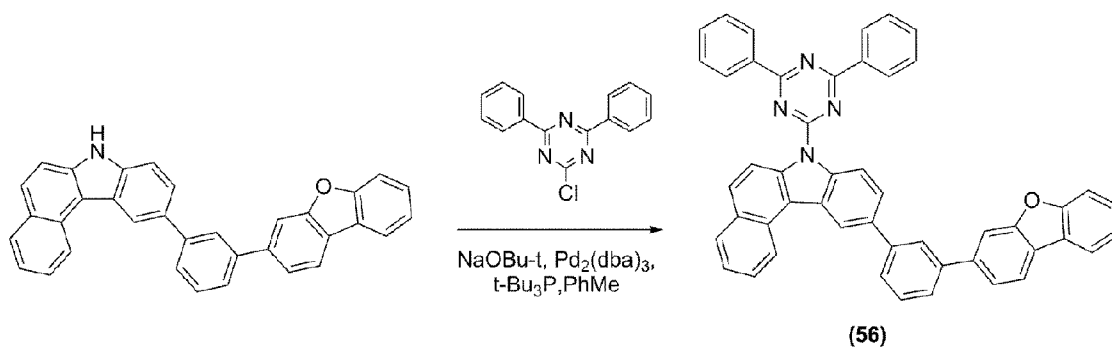
[211] CD1 대신 CD5(10 g, 21.7 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 51 (12.1 g, 수율 76%)를 얻었다.

[212] Mass: $[(M+H)^+]$: 691

[213]

[214] [합성예 6] 화합물 56의 합성

[215]



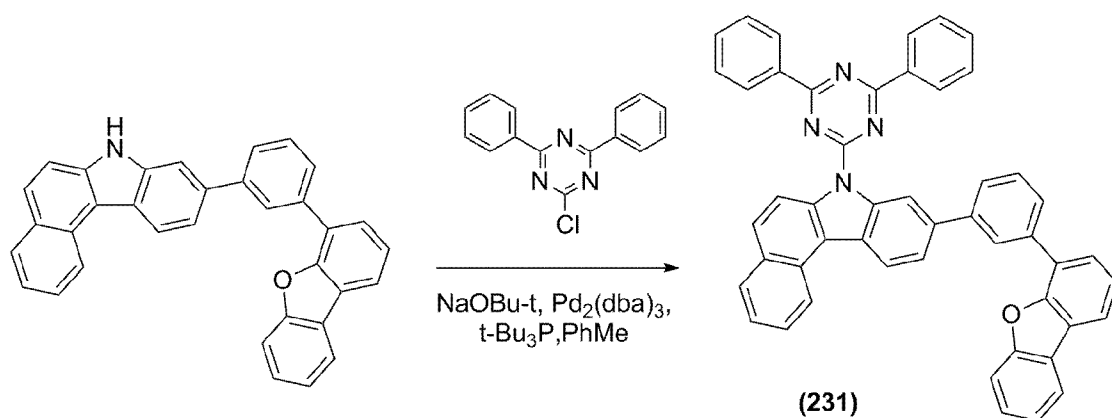
[216] CD1 대신 CD8(10 g, 21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 56 (13.5 g, 수율 79%)를 얻었다.

[217] Mass: $[(M+H)^+]$: 691

[218]

[219] [합성예 7] 화합물 231의 합성

[220]



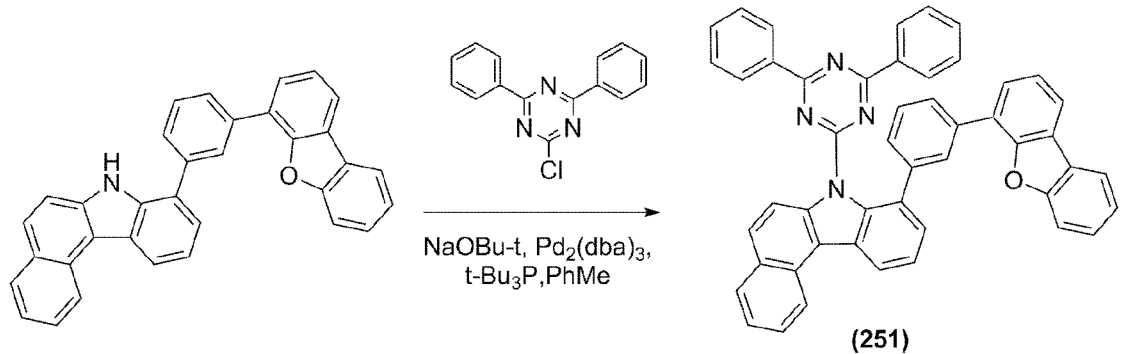
[221] CD1 대신 CD6(10 g, 21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 231 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[222] Mass: [(M+H)⁺] : 691

[223]

[224] [합성예 8] 화합물 251의 합성

[225]



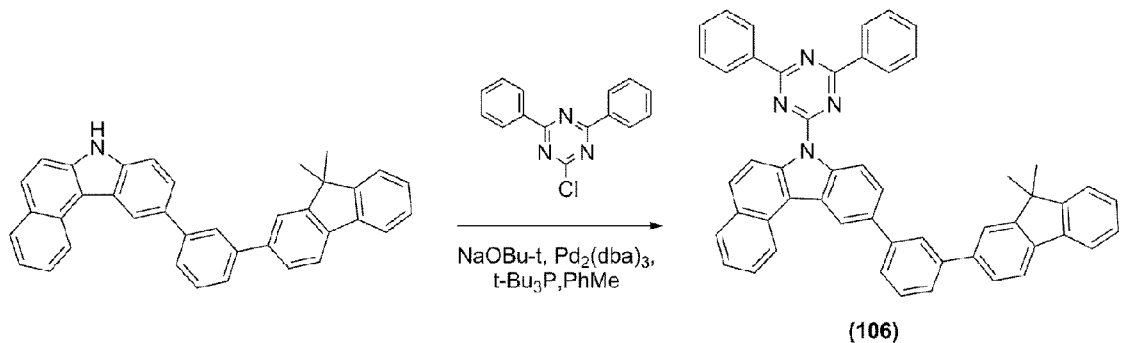
[226] CD1 대신 CD7(10 g, 21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 251 (12.9 g, 수율 77%)를 얻었다.

[227] Mass: [(M+H)⁺] : 691

[228]

[229] [합성예 9] 화합물 106의 합성

[230]



[231] CD1 대신 CD9(10 g, 20.6 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 106 (12.1 g, 수율 76%)를 얻었다.

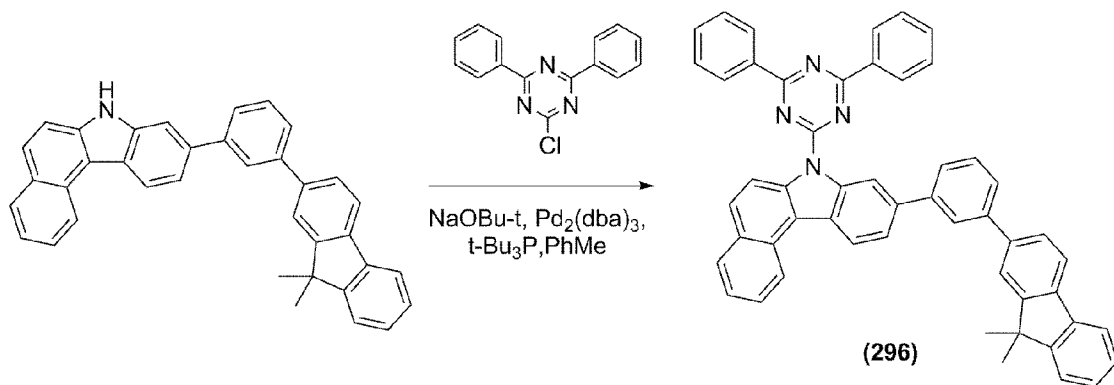
[232] Mass: [(M+H)⁺] : 717

[233]

[234] [합성예 10] 화합물 296의 합성

31

[235]



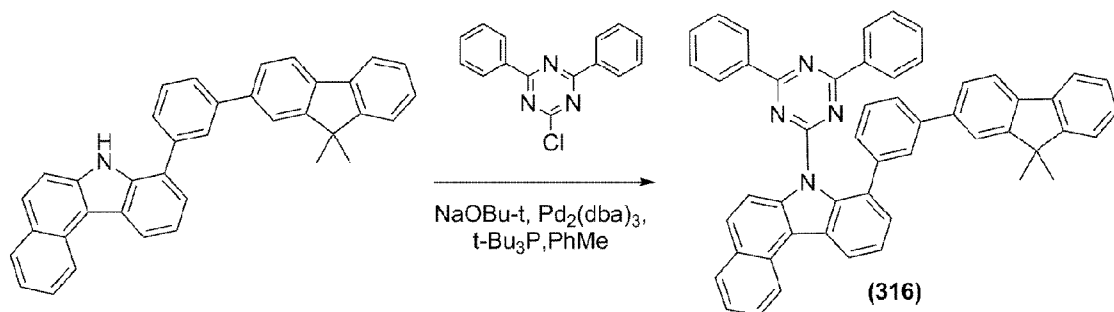
[236] CD1 대신 CD10(10 g, 20.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 296 (13.4 g, 수율 79%)를 얻었다.

[237] Mass: [(M+H)⁺] : 717

[238]

[239] [합성에 11] 화합물 316의 합성

[240]



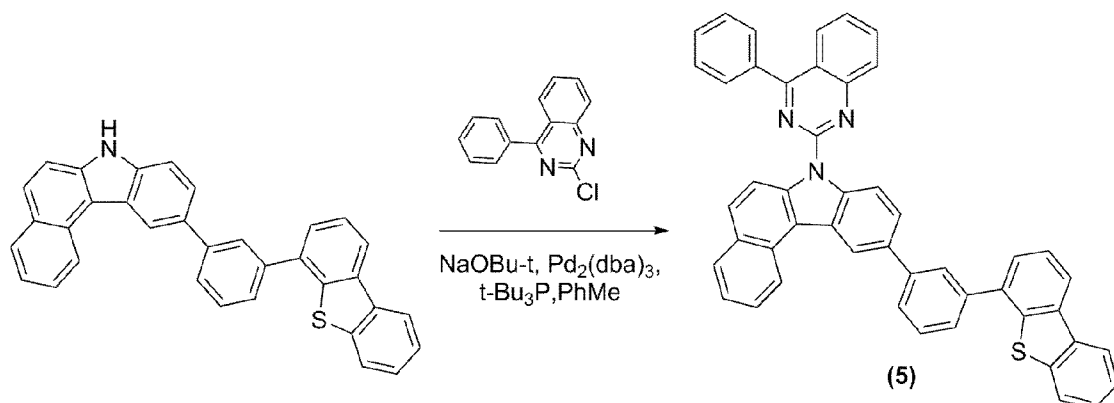
[241] CD1 대신 CD11(10 g, 20.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 316 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[242] Mass: [(M+H)⁺] : 717

[243]

[244] [합성에 12] 화합물 5의 합성

[245]



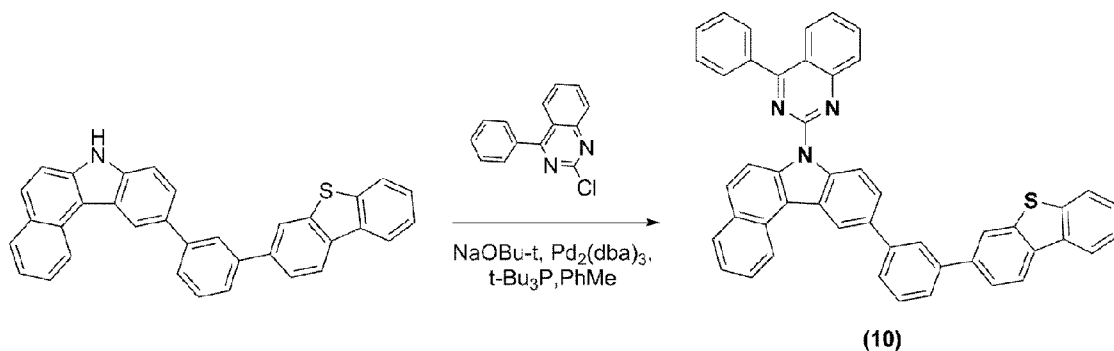
[246] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 (6.3 g, 22.9 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5 (10.9 g, 수율 73%)를 얻었다.

[247] Mass: [(M+H)⁺] : 680

[248]

[249] [합성예 13] 화합물 10의 합성

[250]



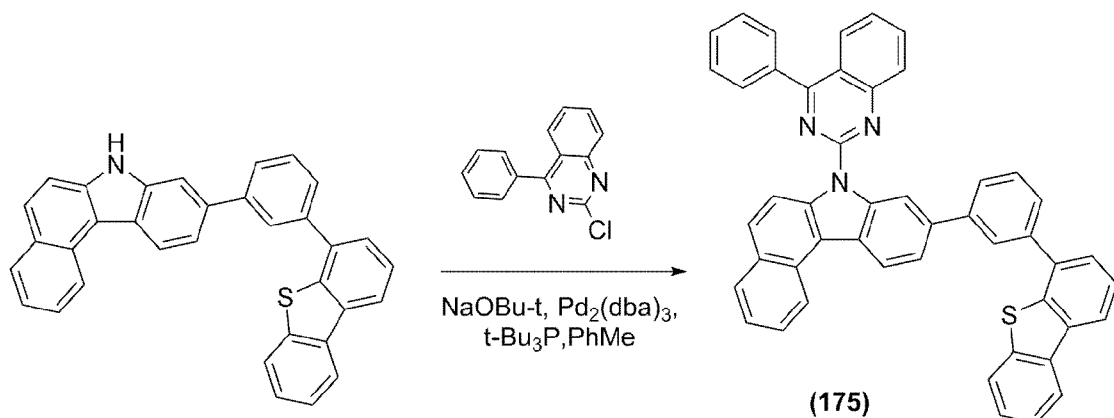
[251] CD1 대신 CD4(10 g, 22.9 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10 (13.5 g, 수율 79%)를 얻었다.

[252] Mass: [(M+H)⁺] : 680

[253]

[254] [합성예 14] 화합물 175의 합성

[255]



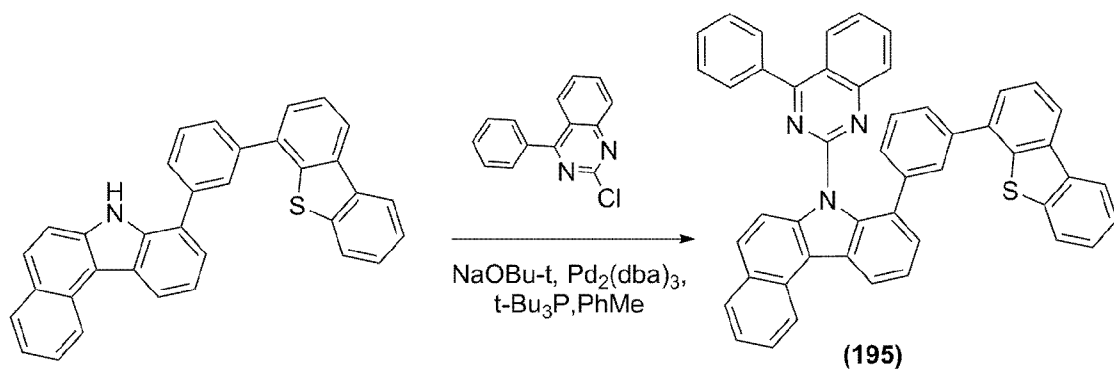
[256] CD1 대신 CD2(10 g, 22.9 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 175 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[257] Mass: [(M+H)⁺] : 680

[258]

[259] [합성예 15] 화합물 195의 합성

[260]



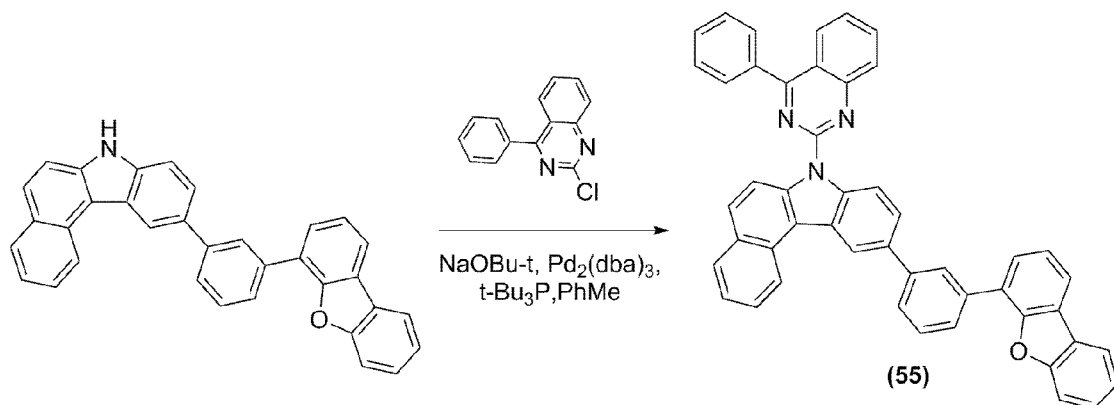
[261] CD1 대신 CD3(10 g, 22.9 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 195 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[262] Mass: $[(M+H)^+]$: 680

[263]

[264] [합성예 16] 화합물 55의 합성

[265]



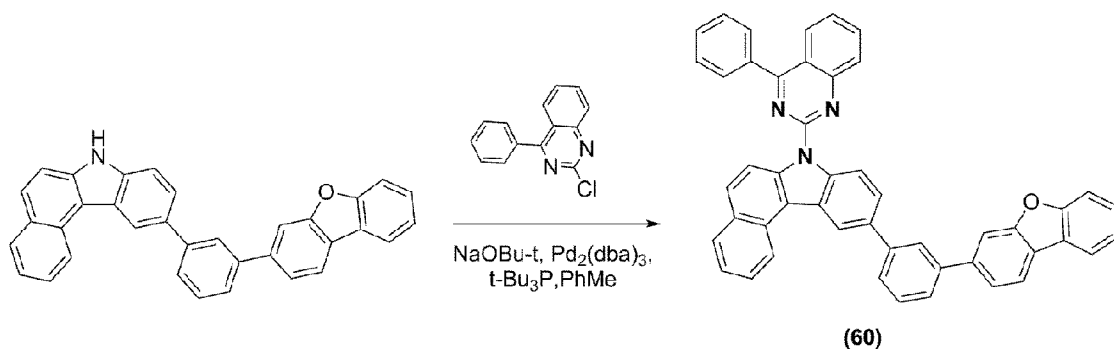
[266] CD1 대신 CD5(10 g, 21.7 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 55 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[267] Mass: $[(M+H)^+]$: 664

[268]

[269] [합성예 17] 화합물 60의 합성

[270]



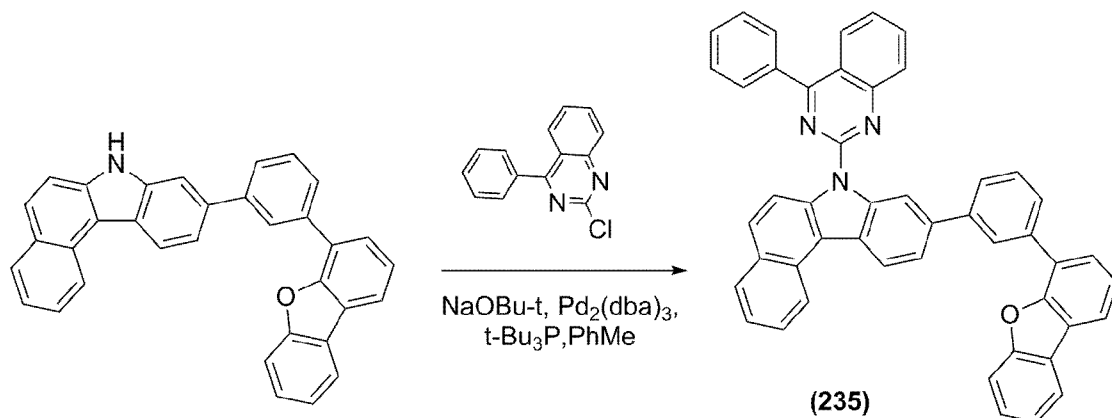
[271] CD1 대신 CD8(10 g, 21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 60 (12.1 g, 수율 76%)를 얻었다.

[272] Mass: $[(M+H)^+]$: 664

[273]

[274] [합성예 18] 화합물 235의 합성

[275]



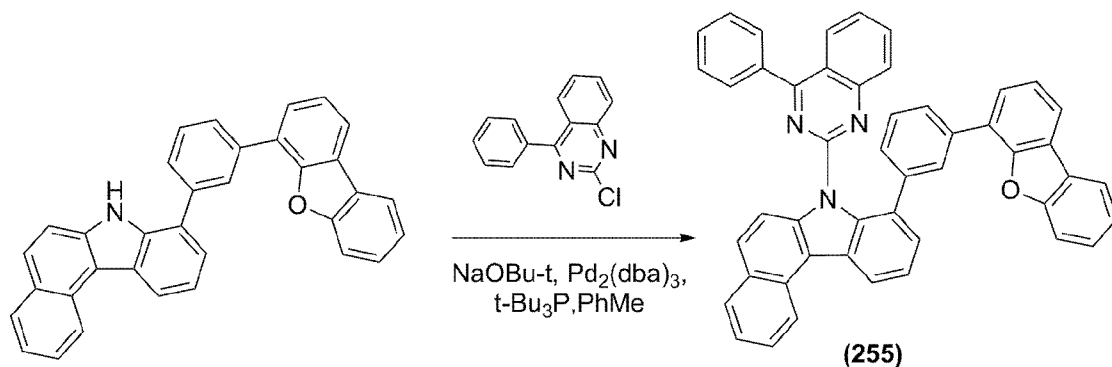
[276] CD1 대신 CD6(10 g, 21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 235 (12.6 g, 수율 76%)를 얻었다.

[277] Mass: [(M+H)⁺] : 664

[278]

[279] [합성에 19] 화합물 255의 합성

[280]



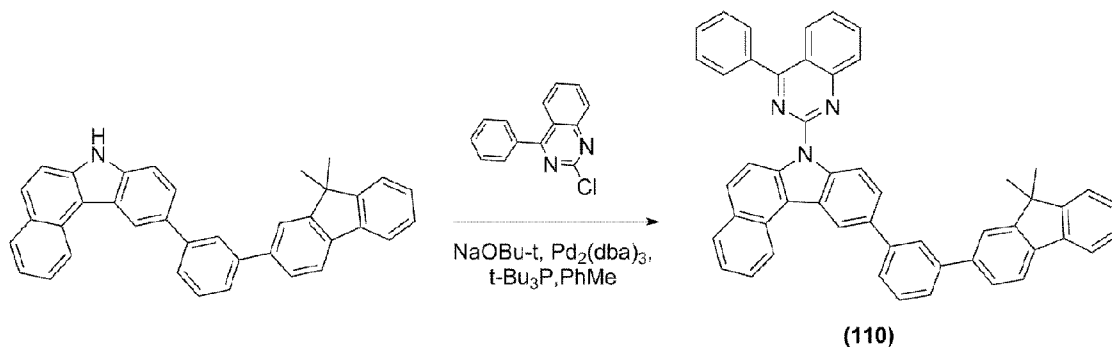
[281] CD1 대신 CD7(10 g, 21.7 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 255 (11.2 g, 수율 74%)를 얻었다.

[282] Mass: [(M+H)⁺] : 664

[283]

[284] [합성에 20] 화합물 110의 합성

[285]



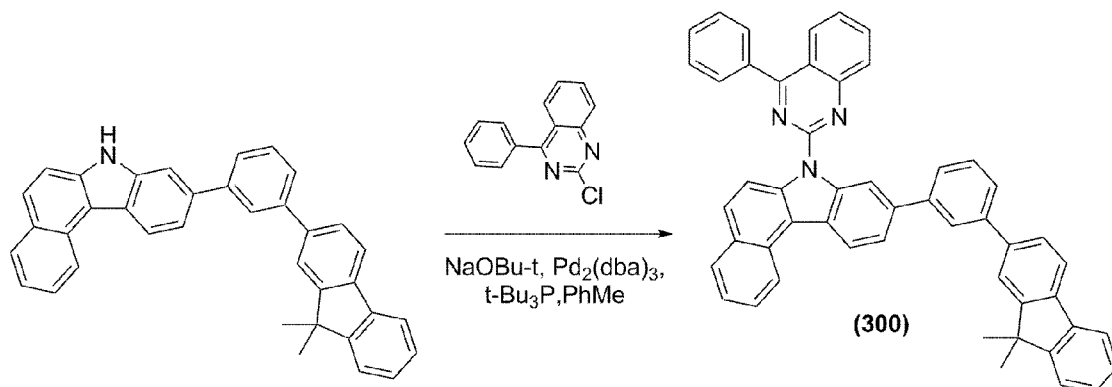
[286] CD1 대신 CD9(10 g, 20.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 110 (11.4 g, 수율 74%)를 얻었다.

[287] Mass: [(M+H)⁺] : 690

[288]

[289] [합성예 21] 화합물 300의 합성

[290]



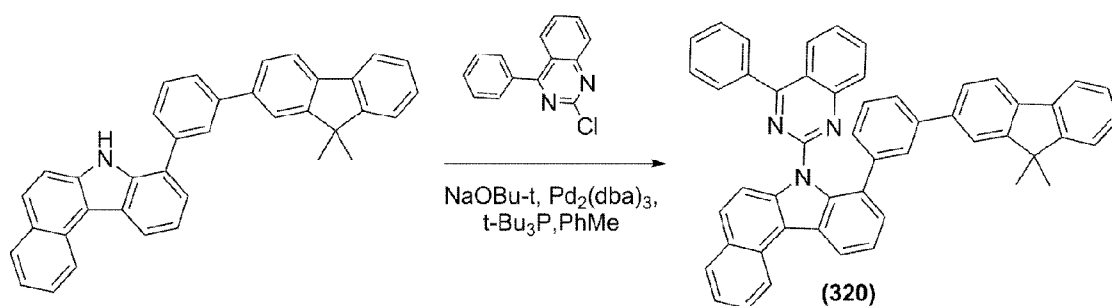
[291] CD1 대신 CD10(10 g, 20.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 300 (10.9 g, 수율 72%)를 얻었다.

[292] Mass: [(M+H)⁺] : 690

[293]

[294] [합성예 22] 화합물 320의 합성

[295]



[296] CD1 대신 CD11(10 g, 20.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 12와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 320 (11.4 g, 수율 74%)를 얻었다.

[297] Mass: [(M+H)⁺] : 690

[298]

[299] [실시예 1] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[300] 합성예 1에서 합성한 화합물 1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기 과정에 따라 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[301] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 코팅된 유리 기판을 이송하였다.

[302] 이렇게 준비된 ITO 투명 유리 기판(전극) 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90%의 화합물 1 + 10%의 Ir(ppy)₃ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[303]

[304] [실시예 2 내지 11] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[305] 녹색 발광 호스트 물질로서 화합물 1 대신 합성예 2~11에서 합성된 각각의 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[306]

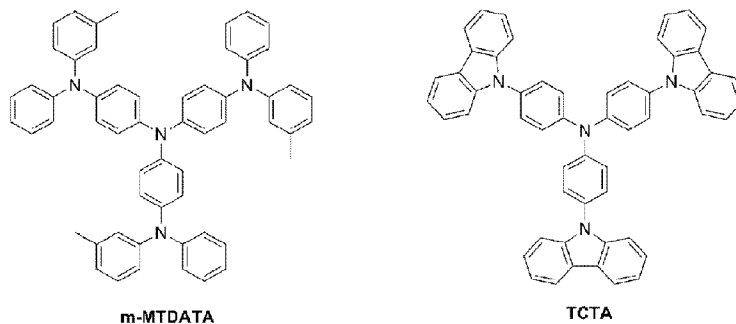
[307] [비교예 1] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[308] 녹색 발광 호스트 물질로서 화합물 1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

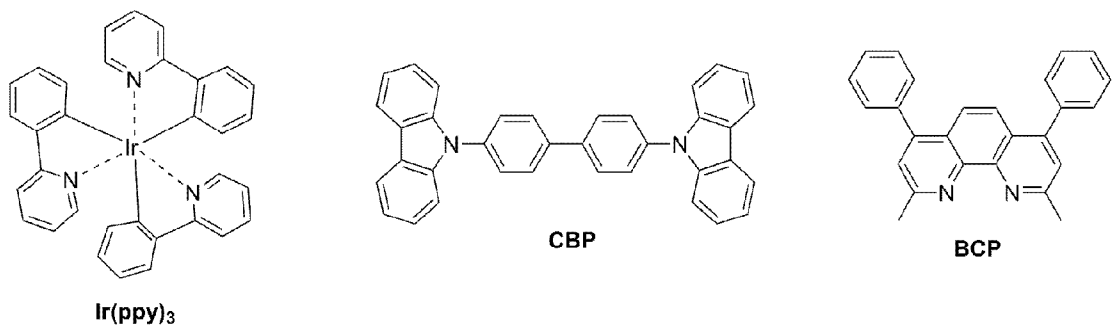
[309]

[310] 한편 실시예 1 내지 11 및 비교예 1에서 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[311]



[312]



[313]

[314] [평가예 1]

[315] 실시예 1 내지 11 및 비교예 1에서 각각 제조된 녹색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[316] [표1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	발광 피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	화합물 1	6.61	515	41.3
실시예 2	화합물 6	6.72	516	42.6
실시예 3	화합물 171	6.43	517	44.5
실시예 4	화합물 191	6.63	517	42.3
실시예 5	화합물 51	6.53	518	44.1
실시예 6	화합물 56	6.34	515	43.6
실시예 7	화합물 231	6.34	514	48.2
실시예 8	화합물 251	6.54	515	47.4
실시예 9	화합물 106	6.56	516	43.2
실시예 10	화합물 296	6.45	517	42.4
실시예 11	화합물 316	6.74	515	43.5
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[317] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층의 재료로 사용한 실시예 1 내지 11의 녹색 유기 전계 발광 소자는, 종래 CBP를 발광층에 사용한 비교예 1의 녹색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압이 우수하다는 것을 알 수 있다.

[318]

[319] **[실시예 12] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조**

[320] 합성에 12에서 합성한 화합물 5를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[321] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 코팅된 유기 기판을 이송하였다.

[322] 이렇게 준비된 ITO 투명 유리 기판(전극) 위에, m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90%의 화합물 5 + 10%의 (piq)₂Ir(acac) (300 nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[323]

[324] **[실시예 13 내지 22] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조**

[325] 적색 발광 호스트 물질로서 화합물 5 대신 합성예 13~22에서 합성된 각각의 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일하게 수행하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[326]

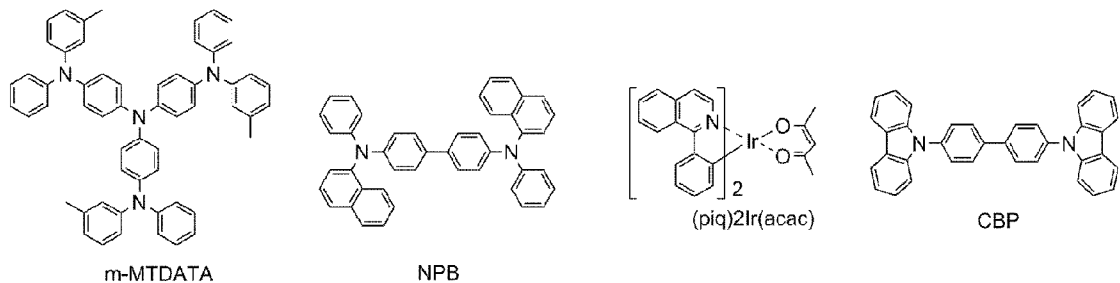
[327] **[비교예 2]**

[328] 적색 발광 호스트 물질로서 화합물 5 대신 CBP를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일하게 수행하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[329]

[330] 한편 상기 실시예 12 내지 22 및 비교예 2에서 사용된 m-MTDATA, NPB, (piq)₂Ir(acac) 및 CBP의 구조는 하기와 같다.

[331]



[332]

[333] **[평가예 2]**

[334] 실시예 12 내지 22 및 비교예 2에서 각각 제조된 적색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[335] [표2]

샘플	호스트	구동 전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 12	화합물 5	4.94	12.7
실시예 13	화합물 10	4.85	12.6
실시예 14	화합물 175	4.73	12.9
실시예 15	화합물 195	4.96	13.8
실시예 16	화합물 55	4.92	12.6
실시예 17	화합물 60	4.84	13.6
실시예 18	화합물 235	4.28	14.8
실시예 19	화합물 255	4.14	15.8
실시예 20	화합물 110	4.32	14.7
실시예 21	화합물 300	4.25	14.6
실시예 22	화합물 320	4.28	15.8
비교예 2	CBP	5.25	8.2

[336] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층에 사용한 실시예 12 내지 22의 적색 유기 전계 발광 소자는, 종래 CBP를 발광층에 사용한 비교예 2의 적색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압이 우수하다는 것을 알 수 있다.

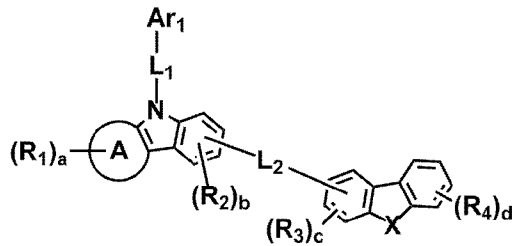
산업상 이용가능성

[337] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물 층의 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 열적 안정성, 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

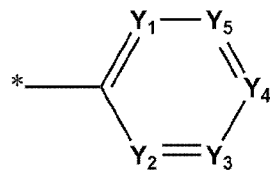
A 고리는 단일환 또는 다환의 방향족 고리이고;

X는 -O-, -S-, 또는 -C(R₅R₆)- 이며;

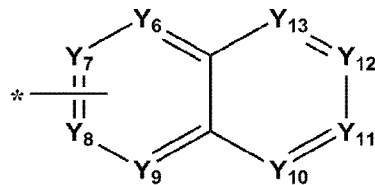
L₁ 및 L₂는 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

Ar₁은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시되고;

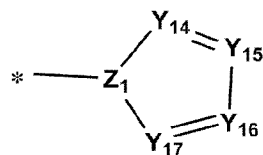
[화학식 2]



[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 2 내지 4에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

Y₁ 내지 Y₁₇은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₇)에서 선택되고, 이때 R₇이 복수인 경우, 복수의 R₇은 서로 같거나 또는 상이하며;

상기 화학식 3에서 L₁에 결합되는 Y₆ 내지 Y₉ 중 어느 하나는 C(R₇)이고;

Z₁은 N 또는 C(R₇)이며,

R₁ 내지 R₄ 및 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C

$_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의
 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의
 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의
 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의
 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및
 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

R_5 및 R_6 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의
 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의
 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$
 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의
 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의
 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서
 선택되거나, 서로 결합하여 축합 고리를 형성하며,

R_1 내지 R_7 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기,
 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기,
 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및
 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의
 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의
 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의
 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의
 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의
 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및
 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로
 치환 또는 비치환되며,

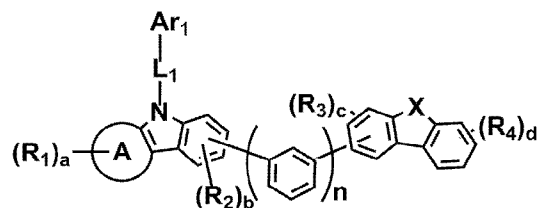
a 내지 d는 각각 1 내지 4의 정수이다.

[청구항 2]

제1항에 있어서,

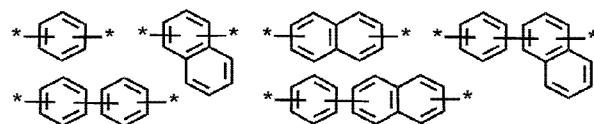
상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 화합물:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

L_1 은 단일결합 또는 하기 구조에서 선택되는 아릴렌이고;



n은 0 내지 2의 정수이며;

A, X, Ar₁, R₁ 내지 R₄, 및 a 내지 d는 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 L₁은 단일결합이고,

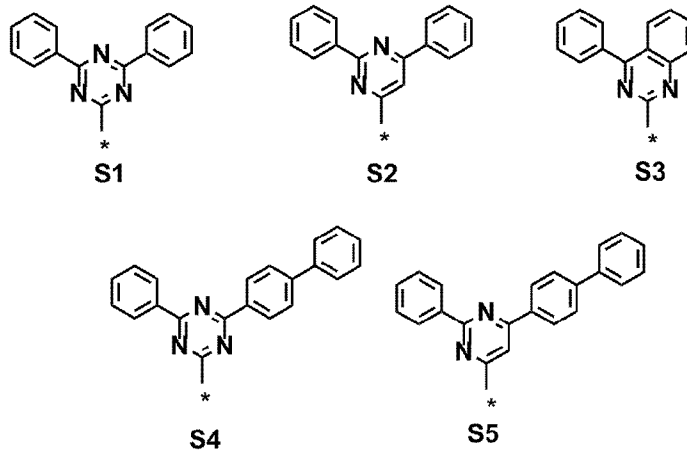
상기 Ar₁은 화학식 2 또는 3으로 표시되고, 여기서 Y₁ 내지 Y₅, 및 Y₆ 내지 Y₉ 중에서 2 이상은 N이고,

상기 L₂는 C₆~C₁₈의 아릴렌기인 화합물.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 화학식 2 및 3으로 표시되는 치환체는 하기 화학식 S1 내지 S5로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:



[청구항 5]

제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₄는 모두 수소인 화합물.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로, 수소, C₁~C₄₀의 알킬기 및 C₆~C₆₀의 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

[청구항 7]

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의

유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 8]

제7항에 있어서,

상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층 및 전자수송 보조층으로 구성된 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2017/005670

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 209/56(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, C09K 11/06(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 209/56; C07D 403/14; C07D 409/14; H01L 27/32; C07D 209/82; C07D 333/76; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 307/91; 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), Google & Keywords: carbazole, dibenzo moiety, organic electroluminescence element, light emitting layer, electron transfer layer, auxiliary electron transfer layer

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2013-0139535 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 23 December 2013 See claims 1, 5; and paragraphs [0048], [0049].	1-8
X	KR 10-2013-0130236 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 02 December 2013 See claims 1, 4; and paragraphs [0060]-[0062].	1-8
X	KR 10-2015-0110101 A (PNH TECH) 02 October 2015 See claims 1, 3, 7, 9.	1-8
X	KR 10-2014-0082351 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 02 July 2014 See claims 1, 5; and paragraphs [0073]-[0075].	1-8
X	KR 10-2016-0044690 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 26 April 2016 See claims 1, 2, 4.	1-8



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

31 AUGUST 2017 (31.08.2017)

Date of mailing of the international search report

31 AUGUST 2017 (31.08.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
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/KR2017/005670

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2013-0139535 A	23/12/2013	CN 104364345 A	18/02/2015
		EP 2841527 A1	04/03/2015
		JP 2015-527972 A	24/09/2015
		KR 10-1513006 B1	17/04/2015
		TW 201406924 A	16/02/2014
		US 2015-0133662 A1	14/05/2015
		WO 2013-187689 A1	19/12/2013
KR 10-2013-0130236 A	02/12/2013	CN 103764786 A	30/04/2014
		CN 103764786 B	26/04/2017
		EP 2694619 A1	12/02/2014
		JP 2014-514344 A	19/06/2014
		JP 6046701 B2	21/12/2016
		KR 10-1396171 B1	27/05/2014
		WO 2012-150826 A1	08/11/2012
KR 10-2015-0110101 A	02/10/2015	NONE	
KR 10-2014-0082351 A	02/07/2014	CN 104870434 A	26/08/2015
		TW 201435043 A	16/09/2014
		WO 2014-104720 A1	03/07/2014
KR 10-2016-0044690 A	26/04/2016	US 2016-0111658 A1	21/04/2016

국제조사보고서

국제출원번호
PCT/KR2017/005670

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 209/56(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(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 209/56; C07D 403/14; C07D 409/14; H01L 27/32; C07D 209/82; C07D 333/76; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 307/91; 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), Google & 키워드:카바졸, 디벤조모이티, 유기 전계 발광 소자, 발광층, 전자 수송층, 전자수송 보조층

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2013-0139535 A (롭엔드하스전자재료코리아유한회사) 2013.12.23 청구항 1, 5; 및 단락 [0048], [0049] 참조.	1-8
X	KR 10-2013-0130236 A (롭엔드하스전자재료코리아유한회사) 2013.12.02 청구항 1, 4; 및 단락 [0060]-[0062] 참조.	1-8
X	KR 10-2015-0110101 A ((주)피엔에이치테크) 2015.10.02 청구항 1, 3, 7, 9 참조.	1-8
X	KR 10-2014-0082351 A (롭엔드하스전자재료코리아유한회사) 2014.07.02 청구항 1, 5; 및 단락 [0073]-[0075] 참조.	1-8
X	KR 10-2016-0044690 A (삼성디스플레이 주식회사) 2016.04.26 청구항 1, 2, 4 참조.	1-8

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 08월 31일 (31.08.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 08월 31일 (31.08.2017)

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



국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호

PCT/KR2017/005670

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2013-0139535 A	2013/12/23	CN 104364345 A EP 2841527 A1 JP 2015-527972 A KR 10-1513006 B1 TW 201406924 A US 2015-0133662 A1 WO 2013-187689 A1	2015/02/18 2015/03/04 2015/09/24 2015/04/17 2014/02/16 2015/05/14 2013/12/19
KR 10-2013-0130236 A	2013/12/02	CN 103764786 A CN 103764786 B EP 2694619 A1 JP 2014-514344 A JP 6046701 B2 KR 10-1396171 B1 WO 2012-150826 A1	2014/04/30 2017/04/26 2014/02/12 2014/06/19 2016/12/21 2014/05/27 2012/11/08
KR 10-2015-0110101 A	2015/10/02	없음	
KR 10-2014-0082351 A	2014/07/02	CN 104870434 A TW 201435043 A WO 2014-104720 A1	2015/08/26 2014/09/16 2014/07/03
KR 10-2016-0044690 A	2016/04/26	US 2016-0111658 A1	2016/04/21