

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2017년 3월 23일 (23.03.2017)

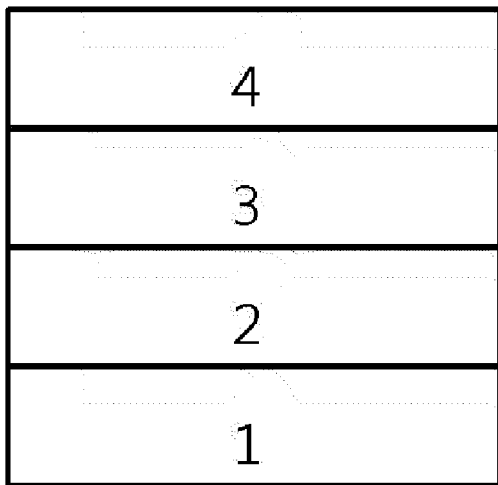


(10) 국제공개번호  
**WO 2017/048060 A1**

- (51) 국제특허분류:  
C07D 403/10 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
C07D 401/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
C07C 13/567 (2006.01)
  - (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/010350
  - (22) 국제출원일: 2016년 9월 13일 (13.09.2016)
  - (25) 출원언어: 한국어
  - (26) 공개언어: 한국어
  - (30) 우선권정보:  
10-2015-0130356 2015년 9월 15일 (15.09.2015) KR  
10-2016-0090117 2016년 7월 15일 (15.07.2016) KR
  - (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.) [KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
  - (72) 발명자: 구기철 (KOO, Kichul); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 장준기 (JANG, Jungi); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 허동욱 (HEO, Dong Uk); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한미연 (HAN, Miyeon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR).
  - (74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워 837 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, 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, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
  - (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 공개:  
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: HETEROCYCLIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT COMPRISING SAME  
(54) 발명의 명칭 : 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

[도1]



(57) Abstract: The present specification provides a heterocyclic compound and an organic light emitting element comprising the same..

(57) 요약서: 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

WO 2017/048060 A1

## 명세서

### 발명의 명칭: 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 기술분야

- [1] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [2] 본 출원은 2015년 9월 15일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2015-0130356호 및 2016년 07월 15일 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2016-0090117호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

### 배경기술

- [3] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜 주는 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 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [4] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

### 발명의 상세한 설명

#### 기술적 과제

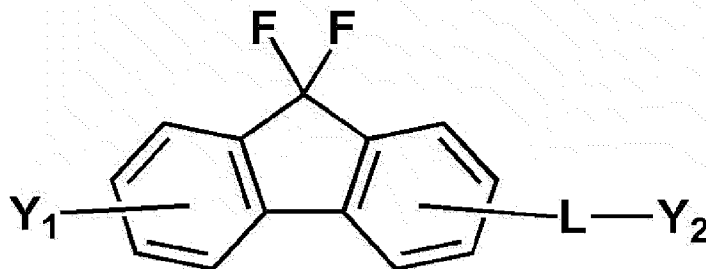
- [5] 본 명세서에는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

#### 과제 해결 수단

- [6] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[7] [화학식 1]

[8]



- [9] 상기 화학식 1에 있어서,

- [10] L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,
- [11] Y<sub>1</sub>은 수소; 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [12] Y<sub>2</sub>는 수소; 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
- [13] Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 함질소 헤테로고리기이며
- [14] A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [15] Y<sub>1</sub>이 2 이상의 A<sub>1</sub>로 치환된 경우에 A<sub>1</sub>은 서로 같거나 상이하고,
- [16] Y<sub>2</sub>가 2 이상의 A<sub>2</sub>로 치환된 경우에 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하다.
- [17] 또한, 본 명세서의 일 실시상태는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자를 제공한다.

### 발명의 효과

- [18] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 본 명세서에 기재된 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입과 정공수송, 전자억제, 발광, 정공억제, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [19] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [20] 도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자수송층(7) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다
- [21] 1: 기관
- [22] 2: 양극
- [23] 3: 발광층
- [24] 4: 음극
- [25] 5: 정공주입층
- [26] 6: 정공수송층

[27] 7: 전자수송층.

### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

[28] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.

[29] 본 명세서의 일 실시상태는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

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

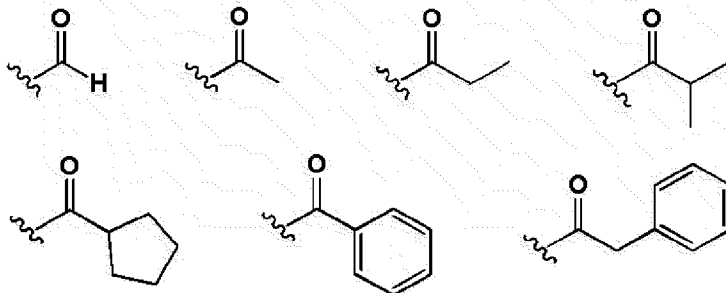
[31] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 시클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아랄킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

[32] 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.

[33] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

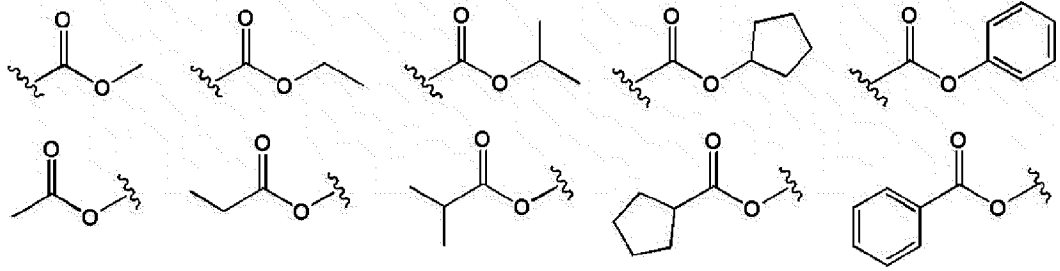
[34] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[35]



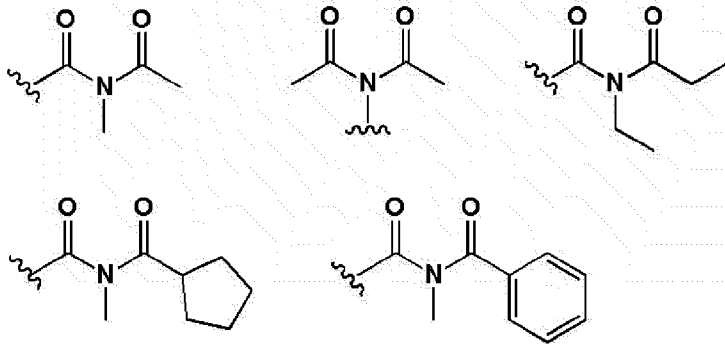
[36] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 40의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[37]



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

[39]



[40] 본 명세서에 있어서, 실릴기는  $-\text{SiR}_a\text{R}_b\text{R}_c$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $\text{R}_a$ ,  $\text{R}_b$  및  $\text{R}_c$ 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, *t*-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

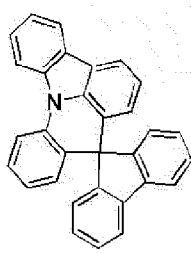
[41] 본 명세서에 있어서, 붕소기는  $-\text{BR}_a\text{R}_b$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $\text{R}_a$  및  $\text{R}_b$ 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, *t*-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[42] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, *n*-프로필, 이소프로필, 부틸, *n*-부틸, 이소부틸, *tert*-부틸, *sec*-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, *n*-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, *tert*-펜틸, 헥실, *n*-헥실, 1-메틸헥실, 2-메틸헥실, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, *n*-헵틸, 1-메틸헵틸, 시클로헵틸메틸, 시클로헵틸메틸, 옥틸, *n*-옥틸, *tert*-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵틸, 2-프로필헵틸, *n*-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필,

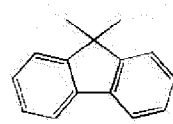
- 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [43] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [44] 본 명세서에 기재된 알킬기, 알콕시기 및 그 외 알킬기 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함한다.
- [45] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [46] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 40이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [47] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 40인 것이 바람직하다. 알킬아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [48] 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 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

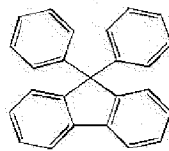
- [49] 아릴 아민기의 구체적인 예로는 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [50] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 단환식 헤테로고리기일 수 있고, 다환식 헤테로고리기일 수 있다. 상기 2 이상의 헤테로고리기를 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로고리기, 다환식 헤테로고리기, 또는 단환식 헤테로고리와 다환식 헤테로고리기를 동시에 포함할 수 있다.
- [51] 본 명세서에 있어서, 아릴헤테로아릴아민기는 아릴기 및 헤테로고리기로 치환된 아민기를 의미한다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 아릴포스핀기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 디아릴포스핀기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴포스핀기가 있다. 상기 아릴포스핀기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴포스핀기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.
- [53] 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, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [54] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다. 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



등의 스피로플루오레닐기,



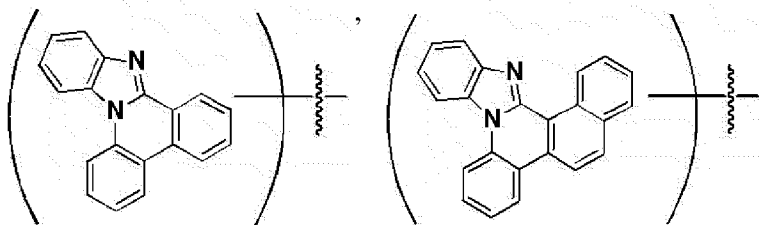
(9,9-디메틸플루오레닐기), 및



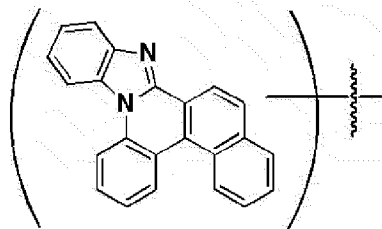
(9,9-디페닐플루오레닐기) 등의

치환된 플루오레닐기가 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [55] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 1 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 1 내지 30이다. 헤테로고리기의 예로는 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 피리다진기, 퓨란기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 옥사졸기, 이소옥사졸기, 티아졸기, 이소티아졸기, 트리아졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 디티아졸기, 테트라졸기, 피란기, 티오피란기, 피라진기, 옥사진기, 티아진기, 디옥신기, 트리아진기, 테트라진기, 퀴놀린기, 이소퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 나프티리딘기, 아크리딘기, 크산텐기, 페난트리딘기, 디아자나프탈렌기, 트리아자인텐기, 인돌기, 인돌린기, 인돌리진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 벤조티아졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티오펜기, 벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기, 디벤조실롤기, 카바졸기, 벤조카바졸기, 디벤조카바졸기, 인돌로카바졸기, 인데노카바졸기, 페나진기, 이미다조피리딘기, 페녹사진기, 페난트리딘기, 페난트롤린(phenanthroline)기, 페노티아진(phenothiazine)기, 이미다조피리딘기, 이미다조페난트리딘기, 벤조이미다조퀴나졸린기, 또는 벤조이미다조페난트리딘기,



등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.





- [56] 본 명세서에 있어서, 함질소 헤테로고리기는 고리원으로 질소 원자를 적어도 1개 이상 포함하는 헤테로고리기로서, 고리를 이루는 원자는 5개, 6개 또는 7 이상일 수 있다.
- [57] 구체적으로, 단환식의 함질소 헤테로고리기의 예로는 피리딘기, 피리미딘기, 피라진기, 피리다진기, 트리아진기, 피라졸기, 옥사졸기, 티아졸기, 트리아졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기가 있다. 또한, 다환식의 함질소 헤테로고리기의 예로는 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤조티아졸기, 페나지닐기, 페녹사진기, 페난트리딘기, 페난트롤린기, 페노티아진기, 이미다조피리딘기, 이미다조페난트리딘기, 벤조이미다조퀴나졸린기, 벤조이미다조페난트리딘기 등이 있다.
- [58] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폭시기, 아릴포스핀기, 아랄킬기, 아랄킬아민기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴헤테로아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [59] 본 명세서에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, 아랄킬기, 아랄킬아민기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [60] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기, 헤테로아릴아민기, 아릴헤테로아릴아민기 중 헤테로아릴기는 방향족인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [61] 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [62] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [63] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌기는 방향족 헤테로고리기의 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [64] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서,  $Y_1$ 은 수소; 1 이상의  $A_1$ 로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의  $A_1$ 로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,  $Y_2$ 는 수소; 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,  $Y_1$  및  $Y_2$  중 적어도 하나는 함질소 헤테로고리기이다.
- [65] 본 발명의 일 실시상태에 있어서,  $Y_1$ 은 1 이상의  $A_1$ 로 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로고리기이고,  $Y_2$ 는 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [66] 일 실시상태에 있어서,  $Y_1$ 은 1 이상의  $A_1$ 로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고,  $Y_2$ 는 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의  $A_2$ 로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [67] 또 하나의 실시상태에 있어서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 서로 같거나 상이하고,  $Y_1$ 은 1 이상의

A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로고리기이다.

[68] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이다.

[69] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 아릴기로 치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이다.

[70] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 수소이다.

[71] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 수소이다.

[72] 또 하나의 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 수소이고, Y<sub>2</sub>는 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로고리기이다.

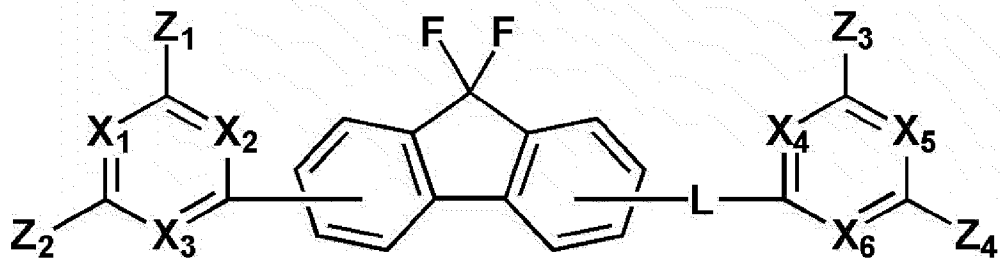
[73] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 수소이고, Y<sub>2</sub>는 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이다.

[74] 구체적으로, 상기 단환식의 함질소 헤테로고리는 피리딘기, 피리미딘기, 피라진기, 피리다진기 및 트리아진기로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나이다.

[75] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

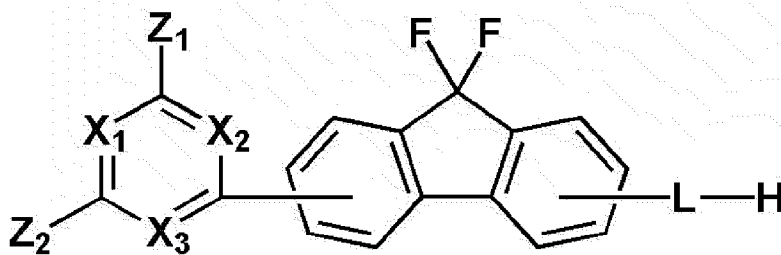
[76] [화학식 2]

[77]



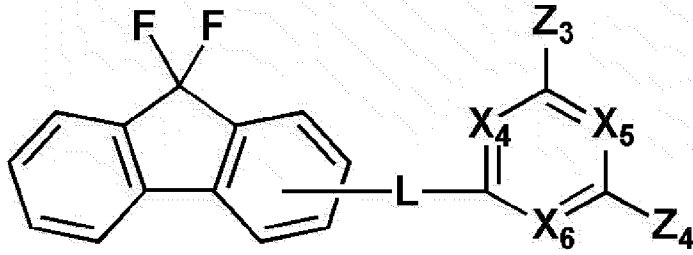
[78] [화학식 3]

[79]



[80] [화학식 4]

[81]



[82] 상기 화학식 2 내지 화학식 4에서,

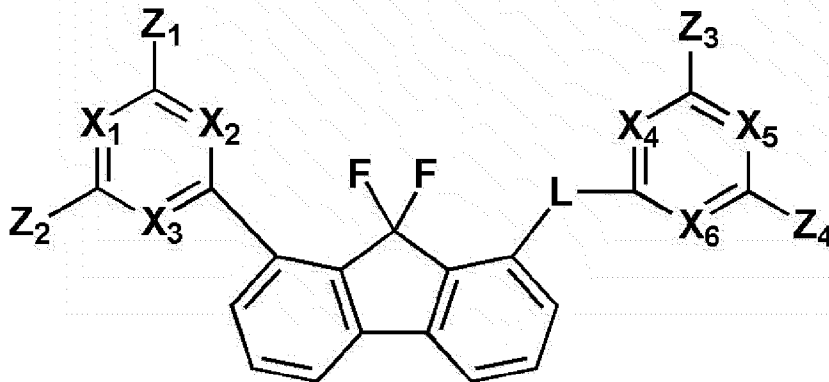
[83] L의 정의는 화학식 1에서와 같고,

[84] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>는 N 또는 CH이며,[85] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 N이고,[86] X<sub>4</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 적어도 하나는 N이며,[87] Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 화학식 1에서의 A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>의 정의와 같다.

[88] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 2의 화합물은 하기 화학식 5 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

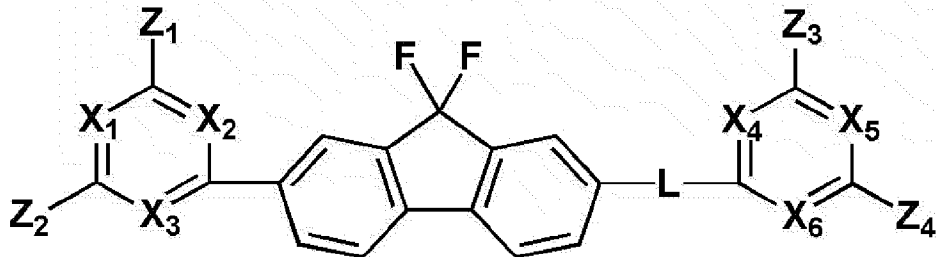
[89] [화학식 5]

[90]



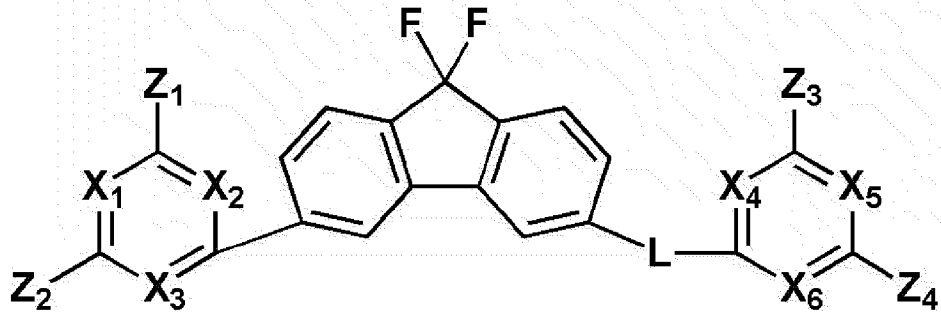
[91] [화학식 6]

[92]



[93] [화학식 7]

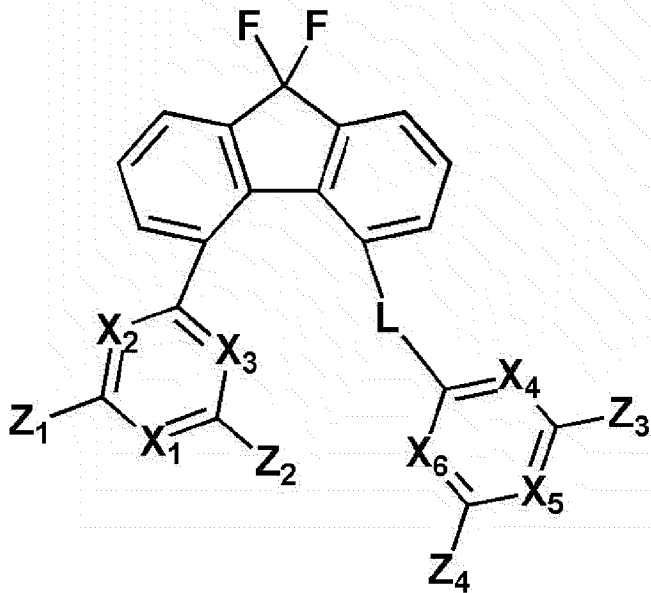
[94]



[95]

[화학식 8]

[96]



[97]

상기 화학식 5 내지 화학식 8에서,

[98]

L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 및 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>의 정의는 화학식 2에서와 같다.

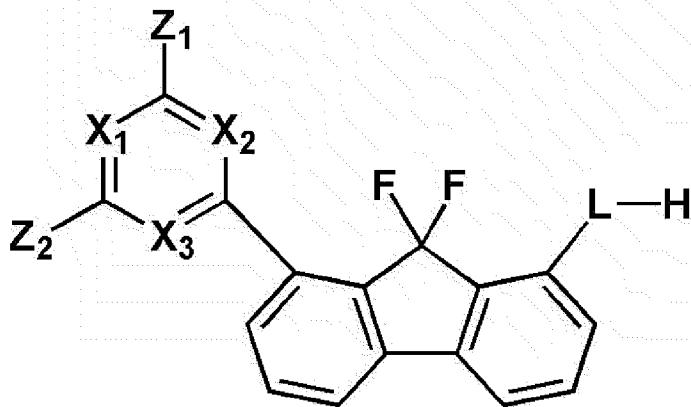
[99]

본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 3의 화합물은 하기 화학식 9 내지 화학식 12 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[100]

[화학식 9]

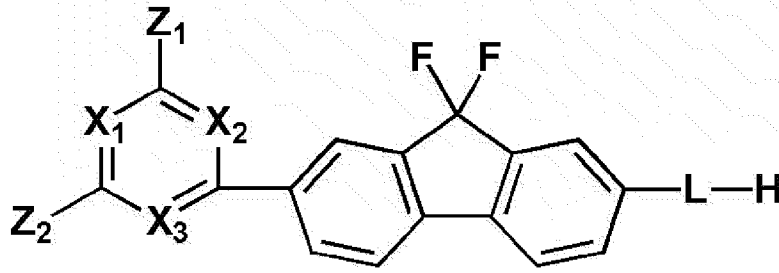
[101]



[102]

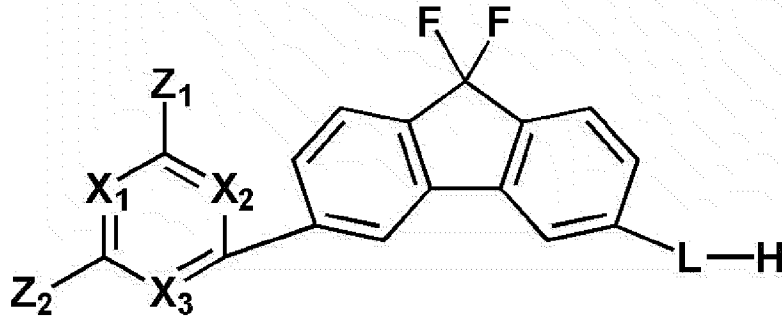
[화학식 10]

[103]



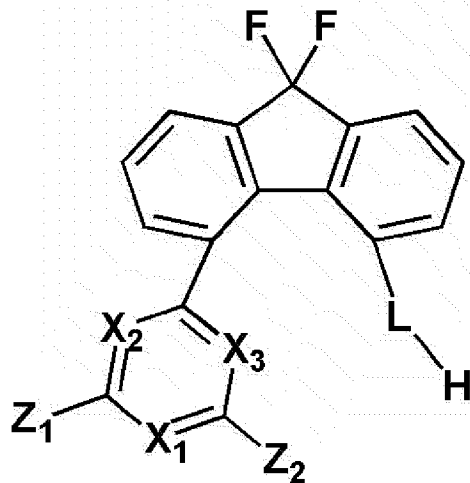
[104] [화학식 11]

[105]



[106] [화학식 12]

[107]



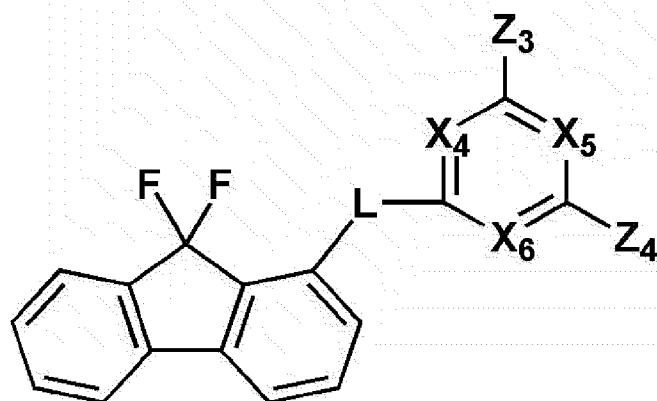
[108] 상기 화학식 9 내지 화학식 12에서,

[109] L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>의 정의는 화학식 3에서와 같다.

[110] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 4의 화합물은 하기 화학식 13 내지 화학식 16 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

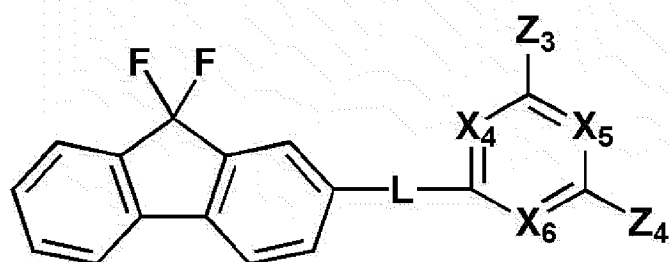
[111] [화학식 13]

[112]



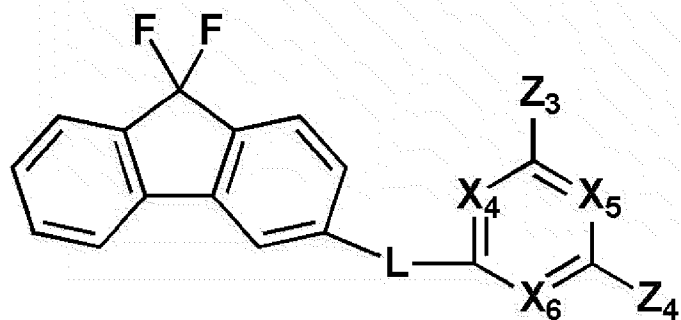
[113] [화학식 14]

[114]



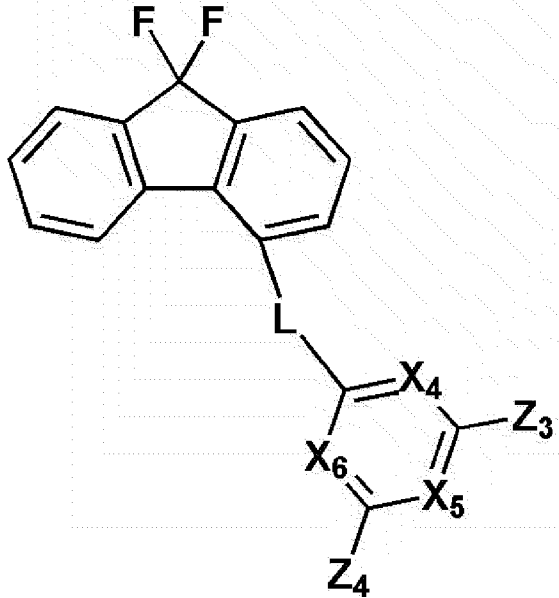
[115] [화학식 15]

[116]



[117] [화학식 16]

[118]



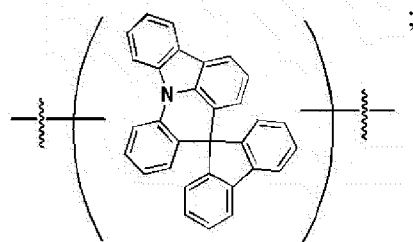
[119] 상기 화학식 13 내지 화학식 16에서,

[120] L, X<sub>4</sub> 내지 X<sub>6</sub>, Z<sub>3</sub> 및 Z<sub>4</sub>의 정의는 화학식 4에서와 같다.[121] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 아릴기로 치환된 피리딜기; 아릴기로 치환된 피리미딜기; 또는 아릴기로 치환된 트리아지닐기이고, 상기 아릴기는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기 및 플루오레닐기로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나이다.[122] 또 하나의 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 직접결합이고, A<sub>1</sub>은 수소이며, Y<sub>2</sub>는 아릴기로 치환된 피리딜기; 아릴기로 치환된 피리미딜기; 또는 아릴기로 치환된 트리아지닐기이며, 상기 아릴기는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기 및 플루오레닐기로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나이다.[123] 일 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기로 치환된 피리딜기; 페닐기로 치환된 피리미딜기; 또는 페닐기로 치환된 트리아지닐기이다.[124] 또 하나의 실시상태에 있어서, Y<sub>1</sub>은 직접결합이고, A<sub>1</sub>은 수소이며, Y<sub>2</sub>는 페닐기로 치환된 피리딜기; 페닐기로 치환된 피리미딜기; 또는 페닐기로 치환된 트리아지닐기이다.

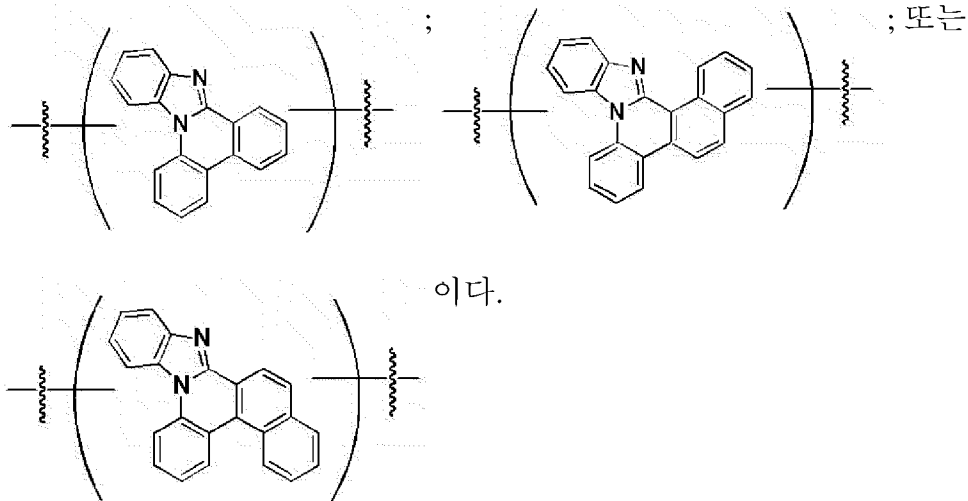
[125] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, L은 직접결합; 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.

[126] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, L은 직접결합; 탄소수 6 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 탄소수 1 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.

- [127] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐릴렌기; 치환 또는 비치환된 터페닐렌기; 치환 또는 비치환된 퀴터페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기; 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기; 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기; 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기; 치환 또는 비치환된 피리다지닐렌기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기; 치환 또는 비치환된 피라졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 옥사졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 티아졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 트리아졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기; 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐렌기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기; 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐렌기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 벤즈옥사졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 벤조티아졸릴렌기; 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐렌기; 치환 또는 비치환된 디벤조실롤릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기이다.
- [128] 일 실시상태에 있어서, L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.
- [129] 일 실시상태에 있어서, L은 직접결합; 니트릴기, 트리페닐실릴기, 트리페닐메틸기, 니트릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 피리딘기, 피리딘기로 치환 또는 비치환된 퀴놀린기, 디벤조푸란기, 디벤조티오펜기, 카바졸기, 및 메틸기로 치환 또는 비치환된 디벤조실롤기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기; 페닐기, 바이페닐기 및 나프틸기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기; 페닐기, 바이페닐기 및 나프틸기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기; 피리다지닐렌기; 페닐기, 바이페닐기 및 나프틸기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴렌기; 퀴놀리닐렌기; 퀴녹살리닐렌기; 디벤조티오페닐렌기; 디벤조푸라닐렌기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기;







- [130] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [131] 또 하나의 실시상태에 있어서, A<sub>1</sub>은 수소이고, A<sub>2</sub>는 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [132] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 탄소수 1 내지 40의 아릴기 또는 탄소수 16 내지 60의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 60의 아릴기로 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 탄소수 1 내지 40의 알킬기; 탄소수 1 내지 40의 알콕시기; 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [133] 또 하나의 실시상태에 있어서, A<sub>1</sub>은 수소이고, A<sub>2</sub>는 수소; 중수소; 니트릴기; 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 60의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 60의 아릴기로 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 탄소수 1 내지 40의 알킬기; 탄소수 1 내지 40의 알콕시기; 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는

탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 헥테로고리기이다.

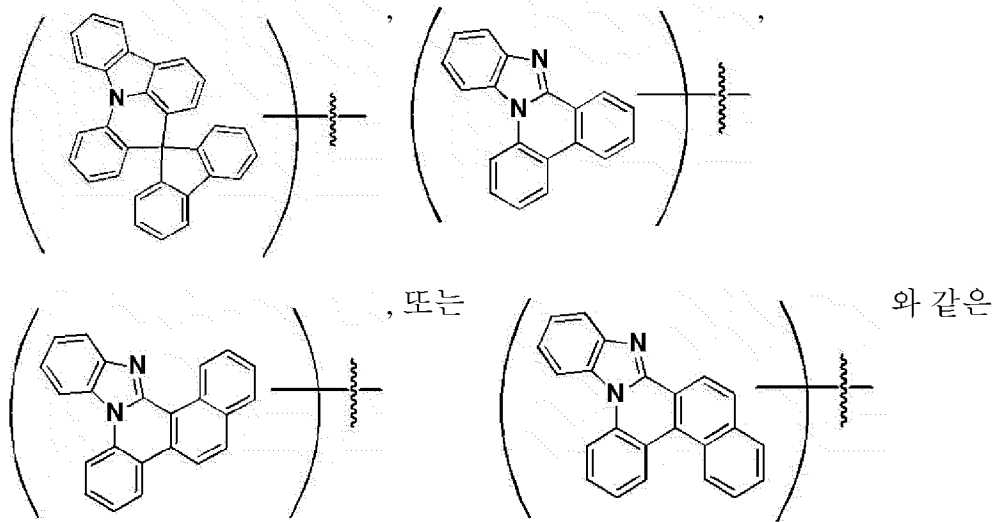
[134] 본 발명의 일 실시상태에 있어서,  $A_1$  및  $A_2$ 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 탄소수 1 내지 20의 알콕시기; 탄소수 6 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 탄소수 1 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 헥테로고리기이다.

[135] 또 하나의 실시상태에 있어서,  $A_1$ 은 수소이고,  $A_2$ 는 수소; 중수소; 니트릴기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 탄소수 1 내지 20의 알콕시기; 탄소수 6 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 탄소수 1 내지 30의 단환식 또는 다환식의 치환 또는 비치환된 헥테로고리기이다.

[136] 본 발명의 일 실시상태에 있어서,  $A_1$  및  $A_2$ 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 실릴기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 크라이세닐기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 치환 또는 비치환된 트리페릴레닐기; 치환 또는 비치환된 파이레닐기; 치환 또는 비치환된 테트라세닐기; 치환 또는 비치환된 펜타세닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기와 같은 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 피리미딜기; 치환 또는 비치환된 피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기; 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기; 치환 또는 비치환된 아크리딜기; 치환 또는 비치환된 크산테닐기; 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기; 치환 또는 비치환된 디아자나프탈레닐기; 치환 또는 비치환된 트리아자인데닐기; 치환 또는 비치환된 인돌기; 치환 또는 비치환된 인돌리닐기; 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기; 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기; 치환 또는 비치환된 벤즈옥사졸기; 치환 또는 비치환된 벤조티아졸기; 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기; 치환 또는 비치환된 피라지노피라지닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 나프토벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 나프토벤조퓨라닐기; 치환

또는 비치환된 디벤조카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 인데노카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 페난트롤린(phenanthroline)기; 치환 또는 비치환된 페나지닐기; 치환 또는 비치환된 페녹사지닐기; 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기; 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기; 치환 또는 비치환된 이미다조페난트리딘기; 치환 또는 비치환된 벤조이미다조퀴나졸리닐기; 또는 치환 또는 비치환된 벤조이미다조페난트리디닐기와 같은 헤테로고리기이다.

- [137] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 크라이세닐기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 치환 또는 비치환된 트리페릴레닐기; 치환 또는 비치환된 파이레닐기; 치환 또는 비치환된 테트라세닐기; 치환 또는 비치환된 펜타세닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기와 같은 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 피리미딜기; 치환 또는 비치환된 피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기; 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기; 치환 또는 비치환된 아크리딜기; 치환 또는 비치환된 크산테닐기; 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기; 치환 또는 비치환된 디아자나프탈레닐기; 치환 또는 비치환된 트리아자인데닐기; 치환 또는 비치환된 인돌기; 치환 또는 비치환된 인돌리닐기; 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기; 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기; 치환 또는 비치환된 벤즈옥사졸기; 치환 또는 비치환된 벤조티아졸기; 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기; 치환 또는 비치환된 피라지노피라지닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 나프토벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 나프토벤조퓨라닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 인데노카바졸릴기; 치환 또는 비치환된 페난트롤린(phenanthroline)기; 치환 또는 비치환된 페나지닐기; 치환 또는 비치환된 페녹사지닐기; 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기; 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기; 치환 또는 비치환된 이미다조페난트리딘기; 치환 또는 비치환된 벤조이미다조퀴나졸리닐기; 치환 또는 비치환된



헤테로고리기이다. 또 하나의 실시상태에 있어서,  $A_1$ 은 수소이고,  $A_2$ 는 수소; 중수소; 니트릴기; 트리페닐실릴기; 디페닐포스핀옥사이드기; 니트릴기, 페닐기, 퀴놀린기 및 피리딘기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 알킬기 및 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 페닐기 및 피리딘기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 피리딘기; 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기 및 메톡시기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 피리미딘기; 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기 및 메톡시기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 트리아진기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 옥사디아졸기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 티아디아졸기; 피리딘기로 치환 또는 비치환된 퀴놀린기; 또는 카바졸기이다.

[138] 일 실시상태에 있어서,  $A_1$  및  $A_2$ 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

[139] 일 실시상태에 있어서,  $A_1$  및  $A_2$ 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이다.

[140] 본 발명의 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  내지  $X_6$ 는 N 또는 CH이고,  $X_1$  내지  $X_3$  중 어느 하나는 N이며,  $X_4$  내지  $X_6$  중 어느 하나는 N이다.

[141] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  내지  $X_3$ 는 모두 N이다.

[142] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  내지  $X_3$  중 어느 두 개는 N이고, 나머지 하나는 CH이다.

[143] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 N이고,  $X_3$ 은 CH이다.

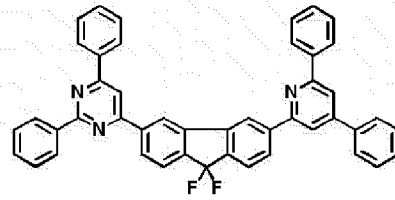
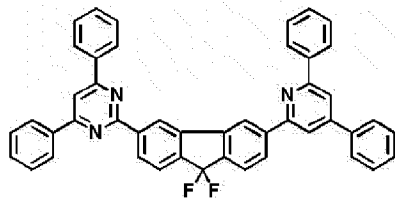
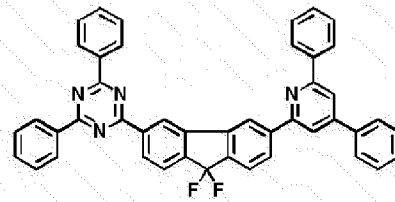
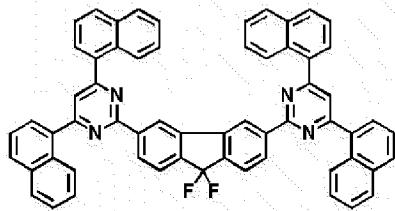
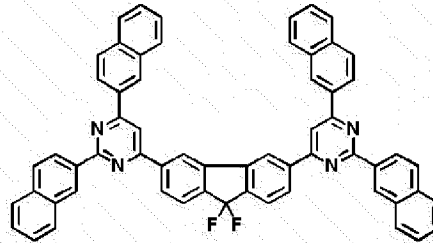
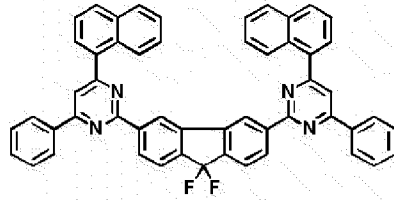
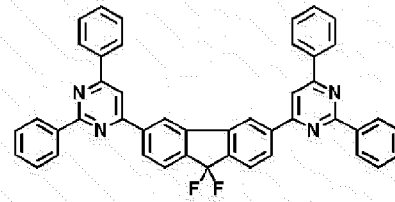
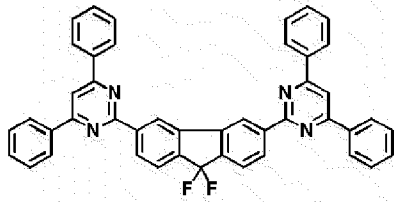
[144] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  및  $X_3$ 은 N이고,  $X_2$ 는 CH이다.

[145] 일 실시상태에 있어서,  $X_2$  및  $X_3$ 은 N이고,  $X_1$ 은 CH이다.

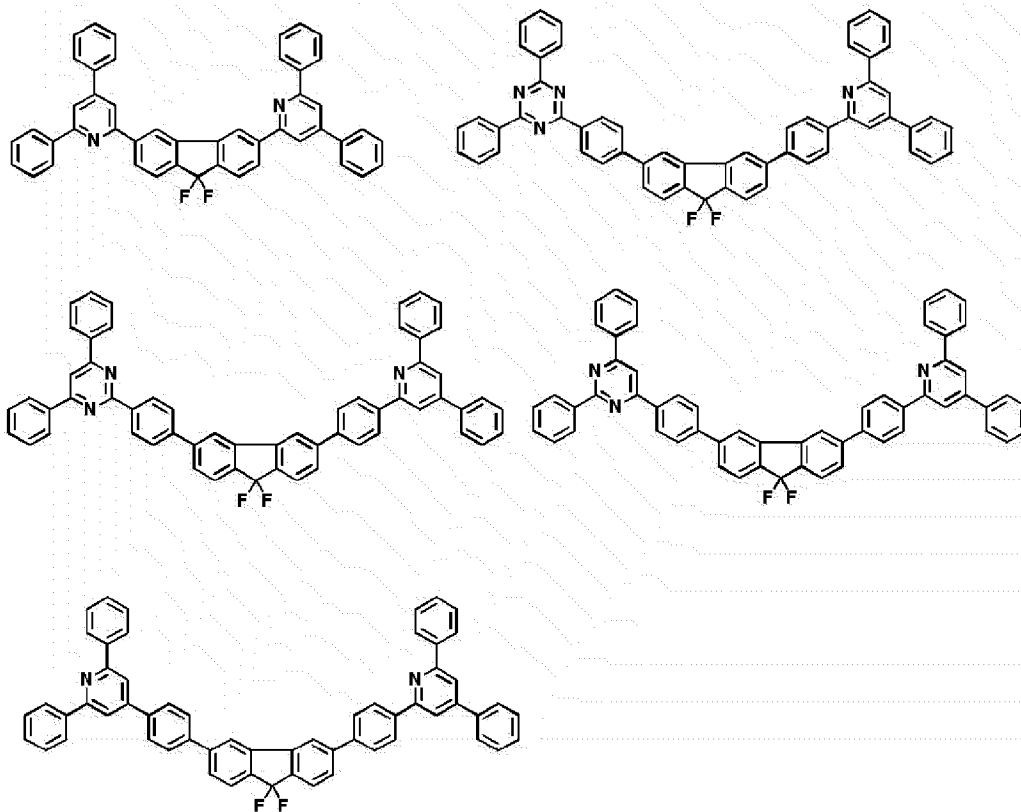
[146] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$  내지  $X_3$  중 어느 하나가 N이고, 나머지 두 개는 CH이다.

- [147] 일 실시상태에 있어서,  $X_1$ 은 N이고,  $X_2$  및  $X_3$ 은 CH이다.
- [148] 일 실시상태에 있어서,  $X_2$ 는 N이고,  $X_1$  및  $X_3$ 은 CH이다.
- [149] 일 실시상태에 있어서,  $X_3$ 은 N이고,  $X_1$  및  $X_2$ 는 CH이다.
- [150] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$  내지  $X_6$ 는 모두 N이다.
- [151] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$  내지  $X_6$  중 어느 두 개는 N이고, 나머지 하나는 CH이다.
- [152] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$  및  $X_5$ 는 N이고,  $X_6$ 은 CH이다.
- [153] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$  및  $X_6$ 은 N이고,  $X_5$ 는 CH이다.
- [154] 일 실시상태에 있어서,  $X_5$  및  $X_6$ 은 N이고,  $X_4$ 는 CH이다.
- [155] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$  내지  $X_6$  중 어느 하나가 N이고, 나머지 두 개는 CH이다.
- [156] 일 실시상태에 있어서,  $X_4$ 은 N이고,  $X_5$  및  $X_6$ 은 CH이다.
- [157] 일 실시상태에 있어서,  $X_5$ 는 N이고,  $X_4$  및  $X_6$ 은 CH이다.
- [158] 일 실시상태에 있어서,  $X_6$ 은 N이고,  $X_4$  및  $X_5$ 는 CH이다.
- [159] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물들 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.

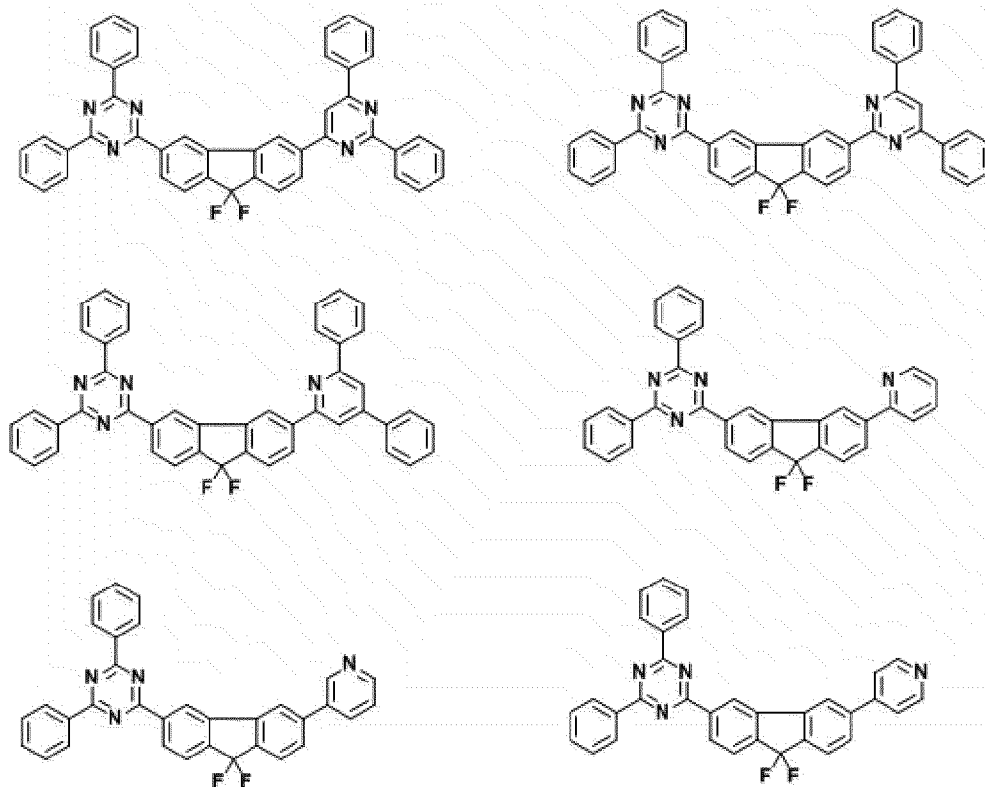
[160]



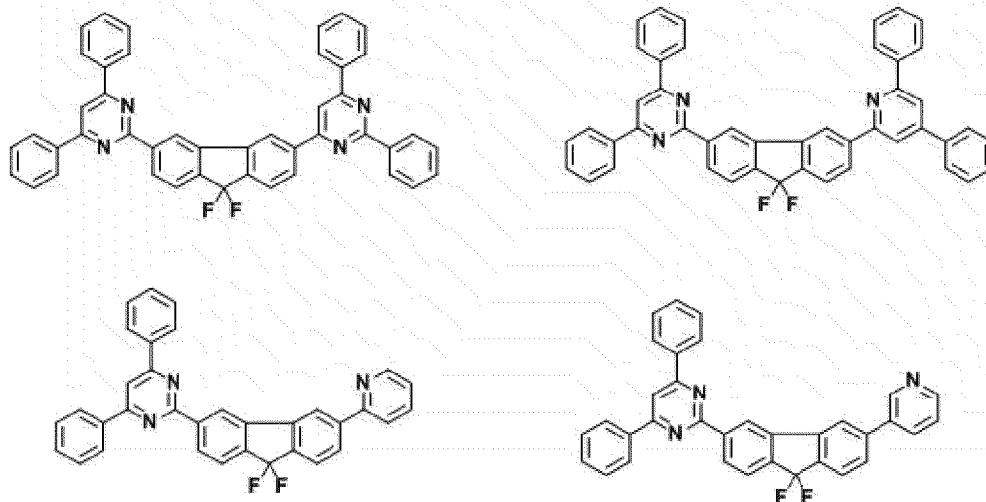
[161]



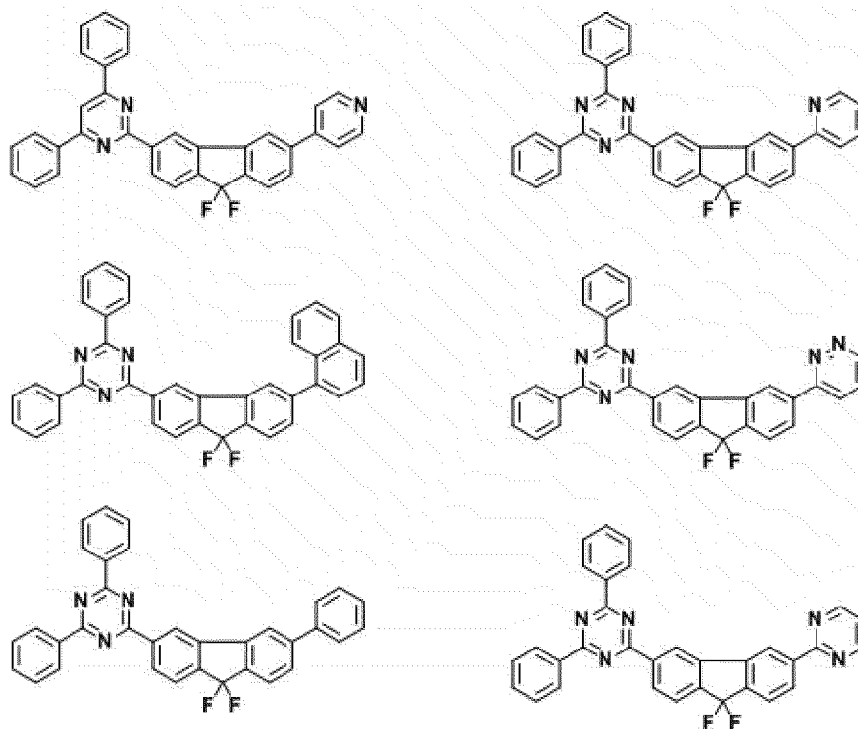
[162]



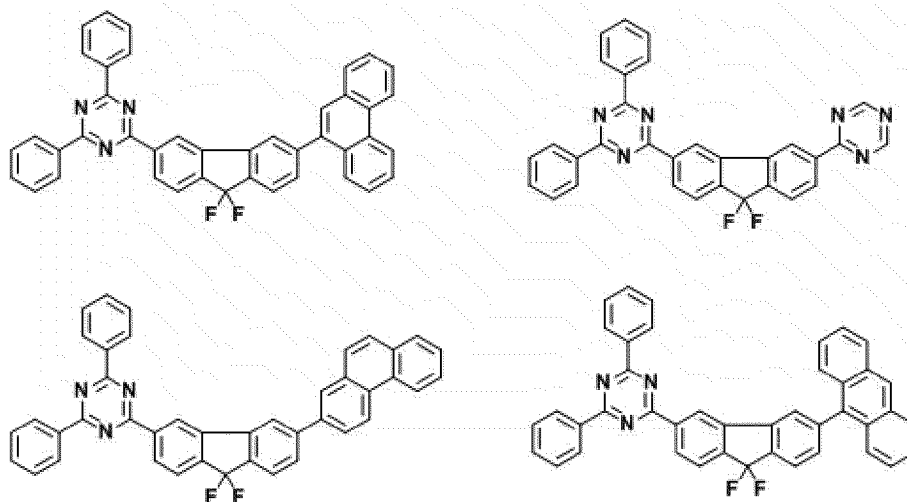
[163]



[164]

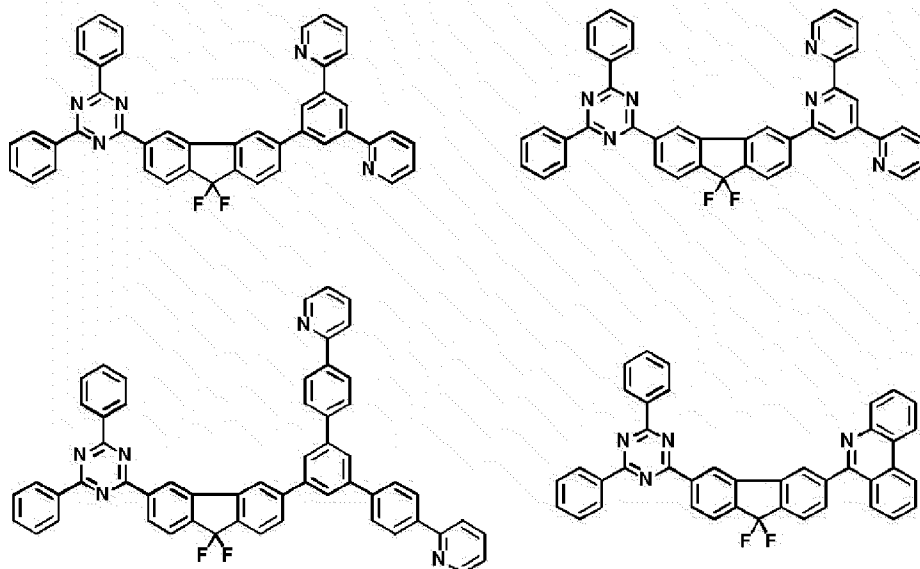


[165]

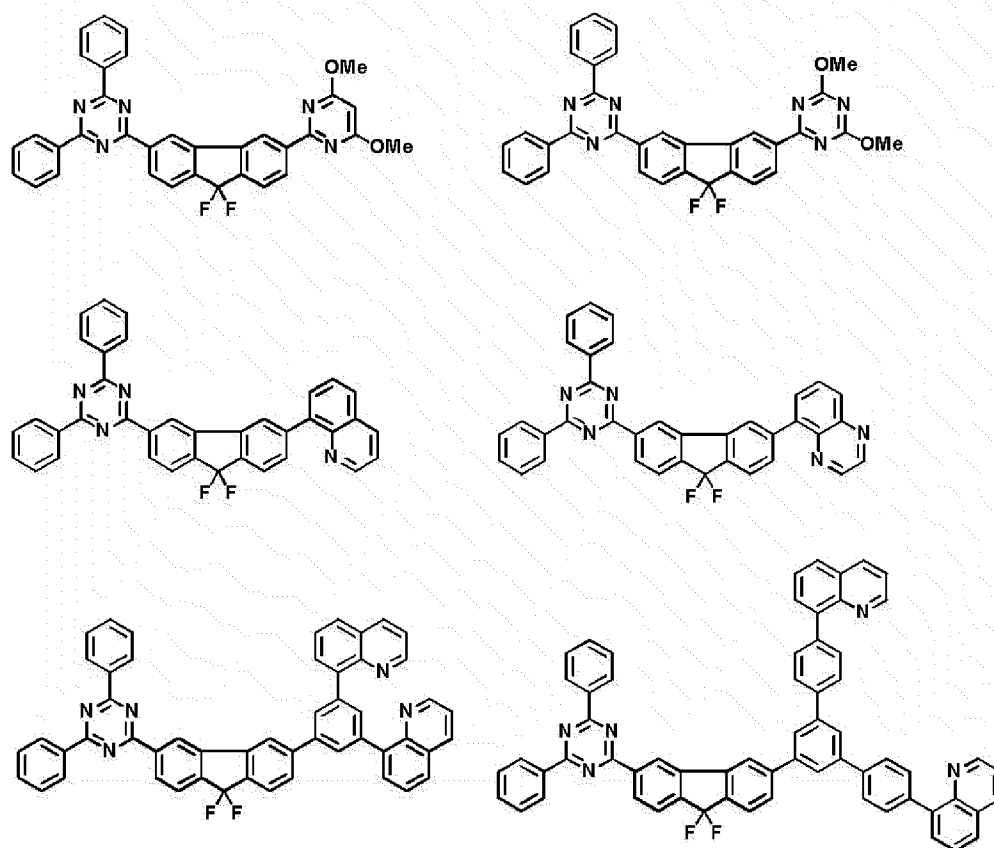




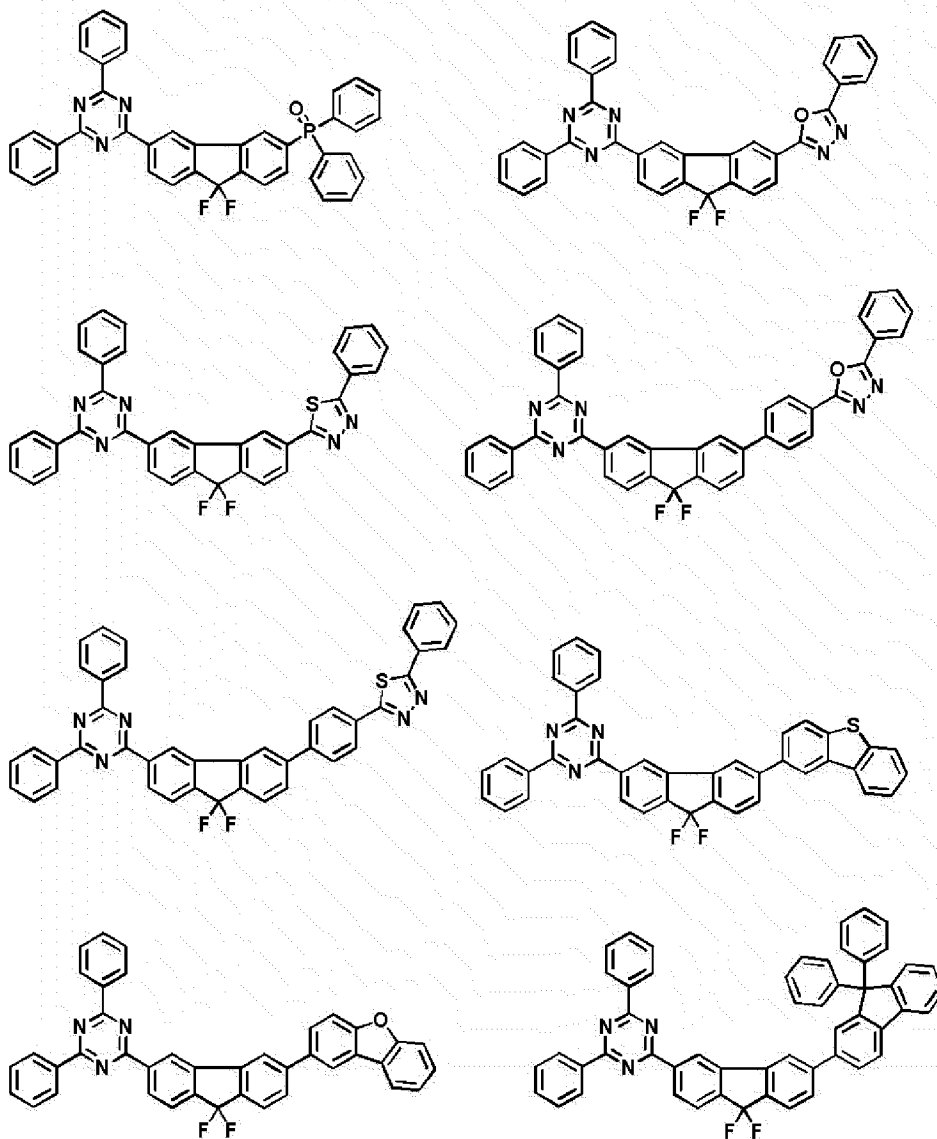
[166]



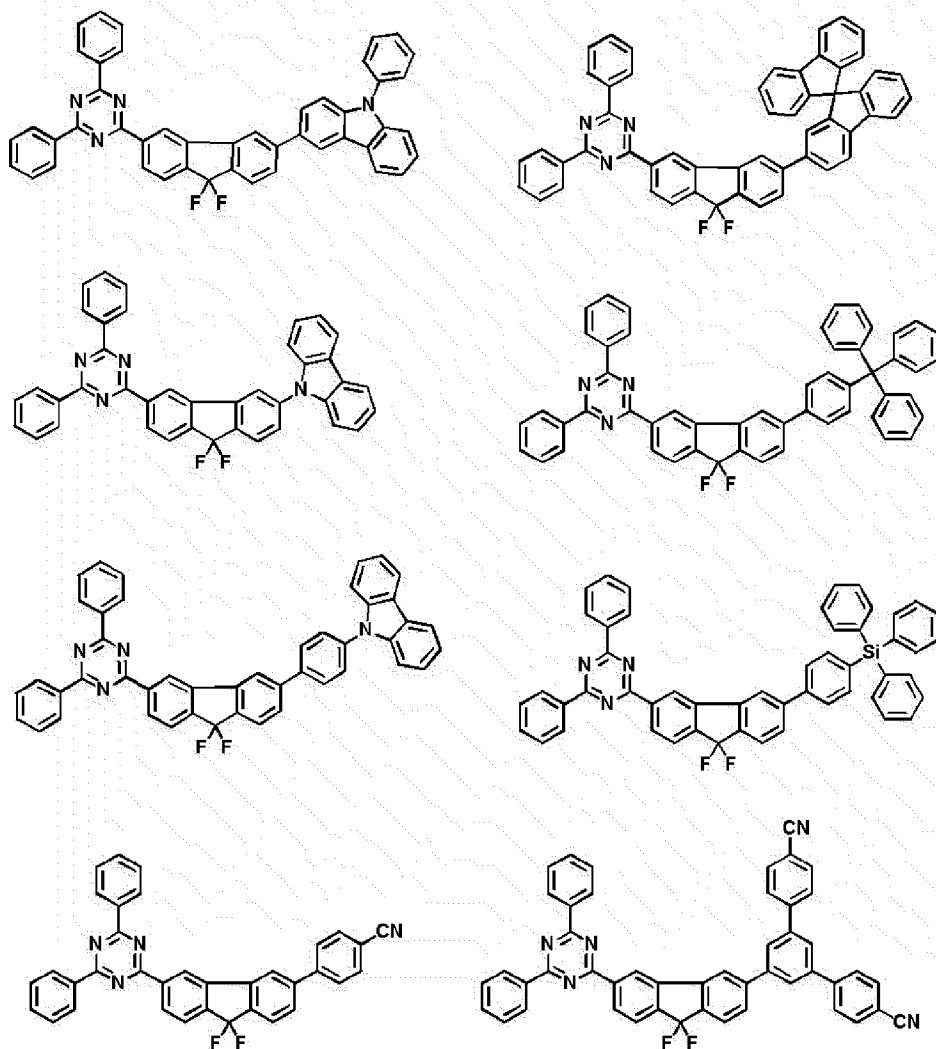
[167]



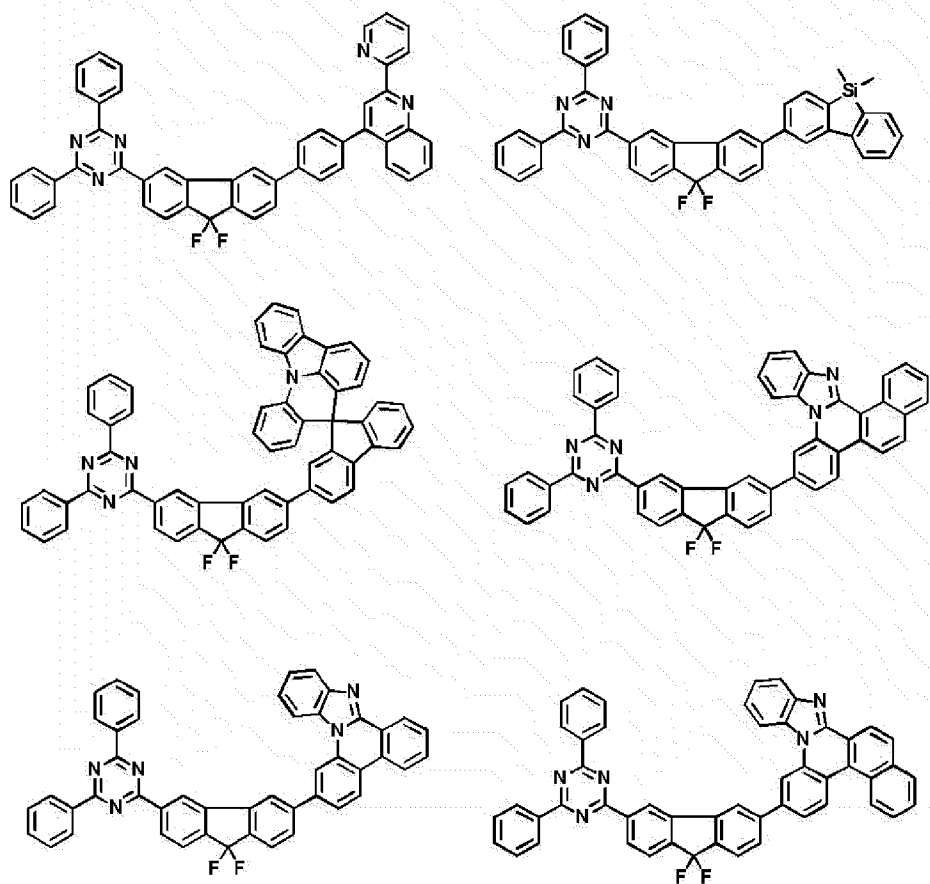
[168]



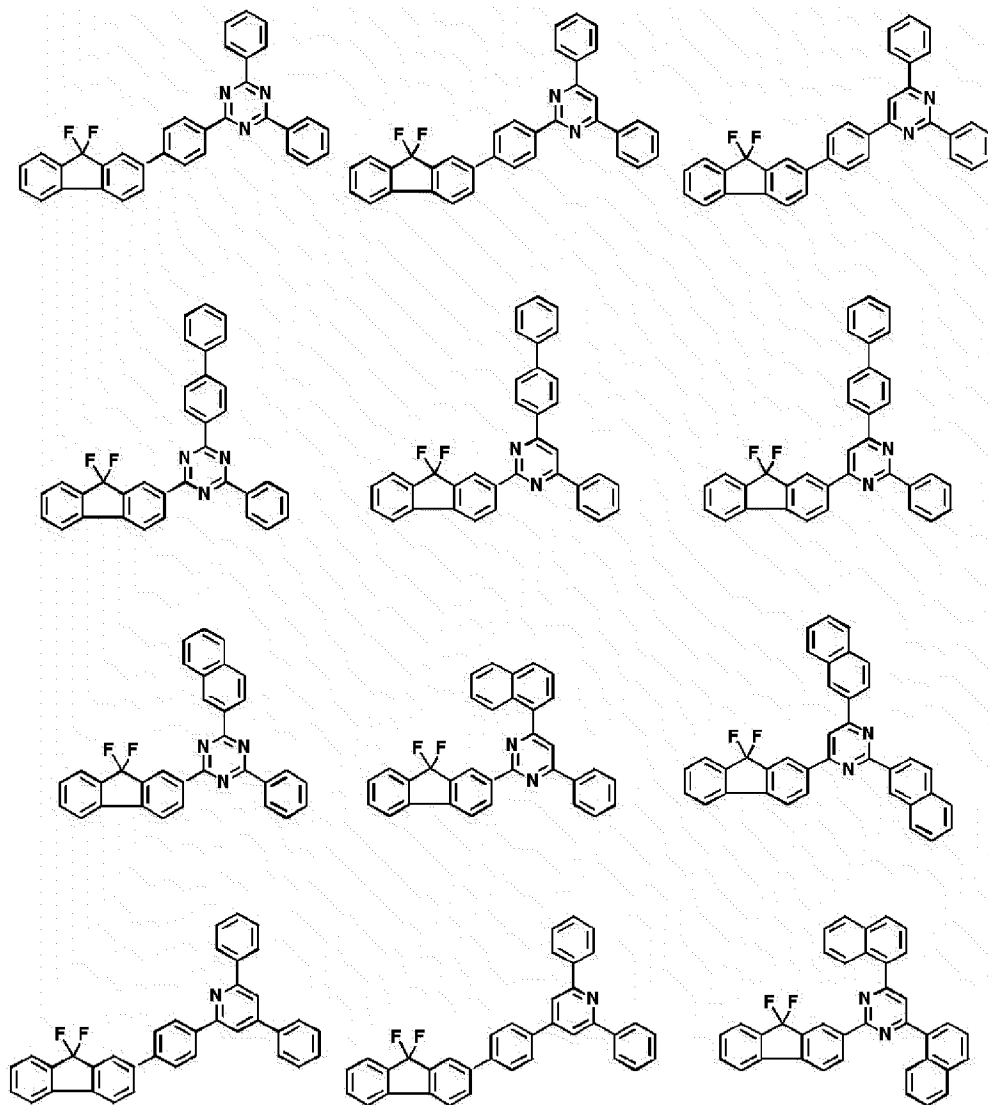
[169]



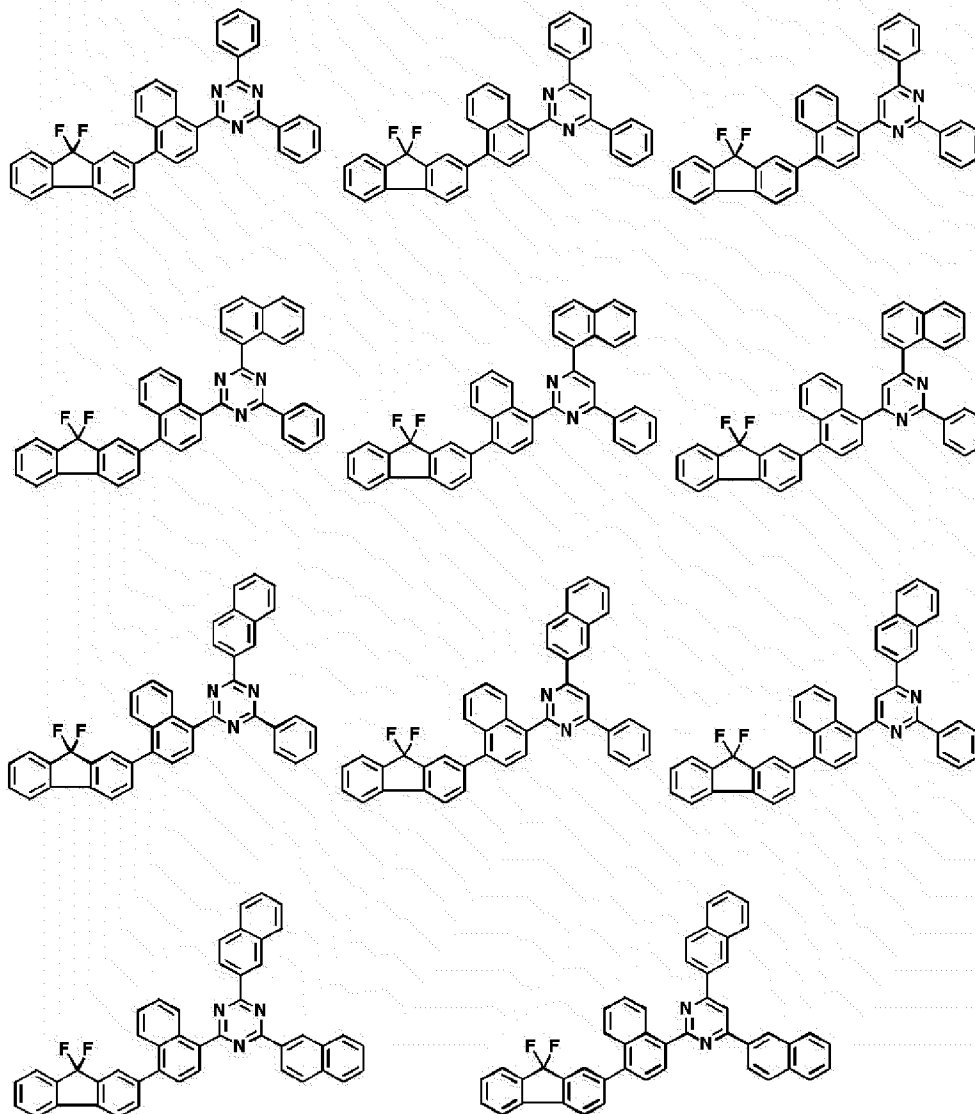
[170]



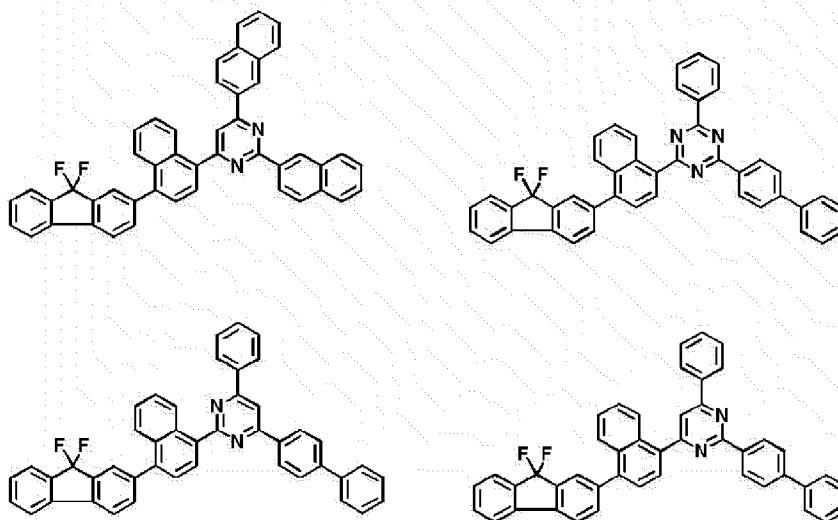
[171]



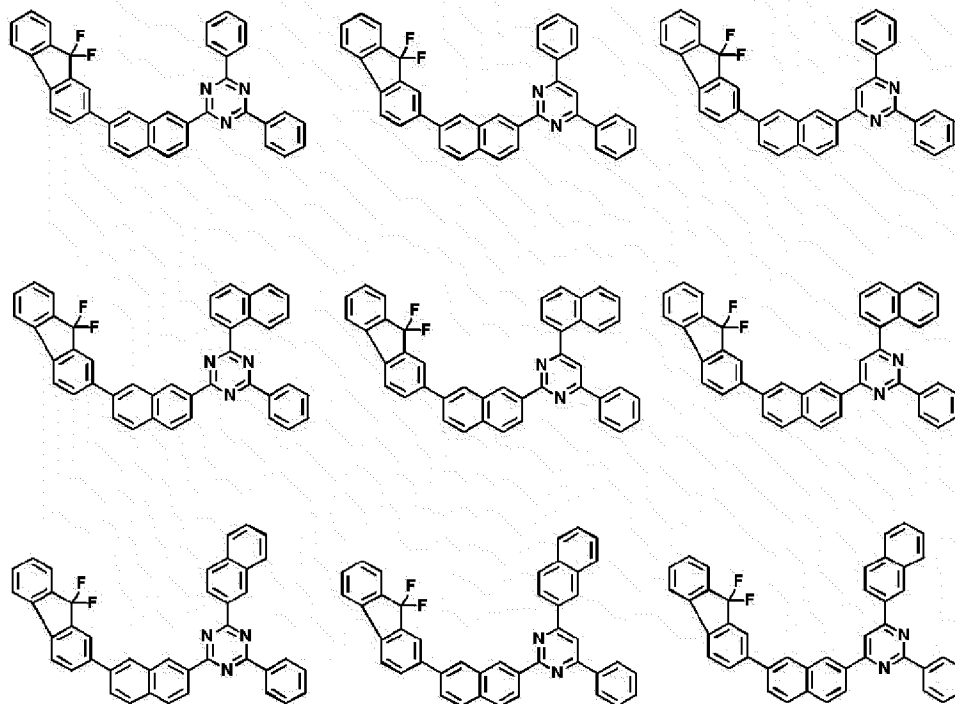
[172]



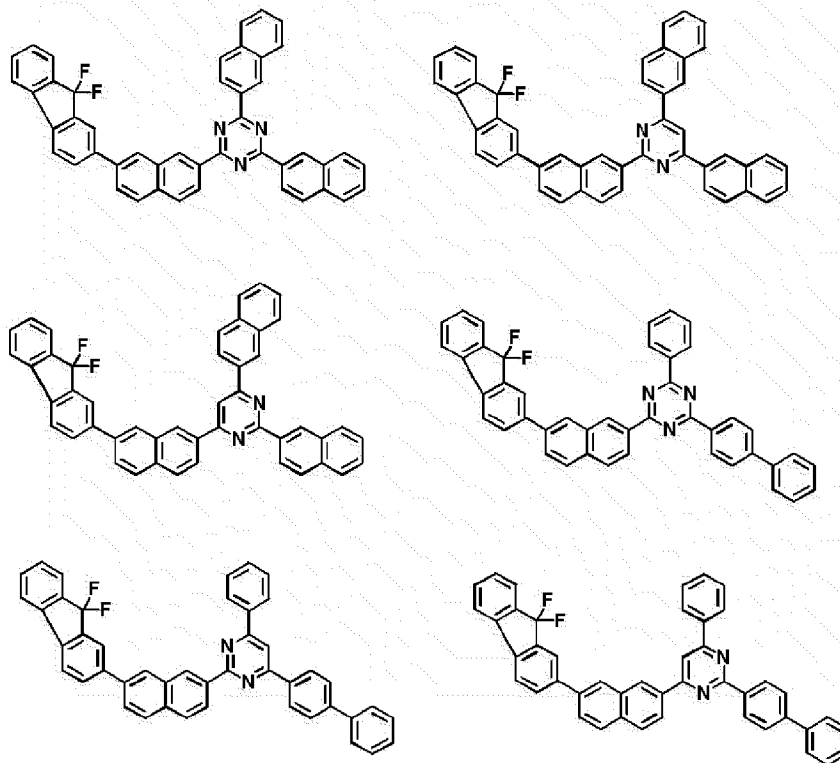
[173]



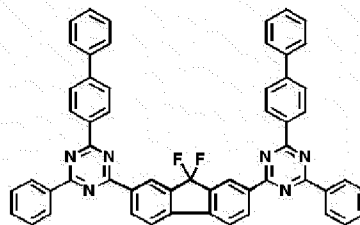
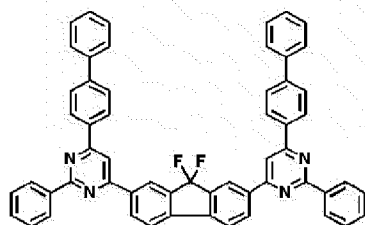
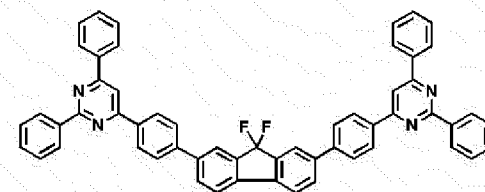
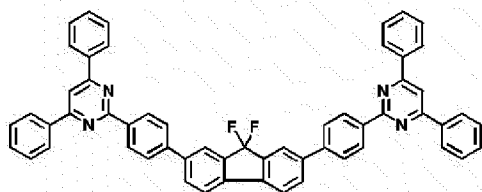
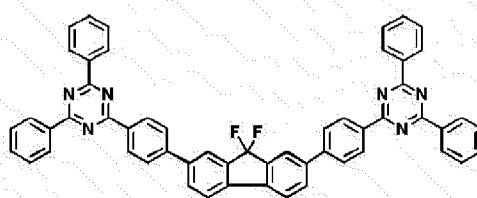
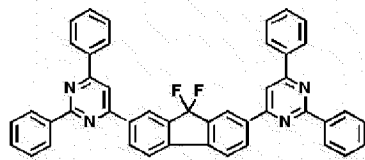
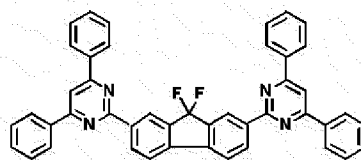
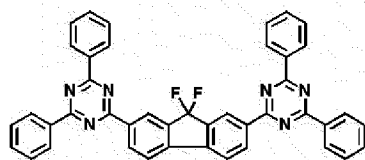
[174]



[175]

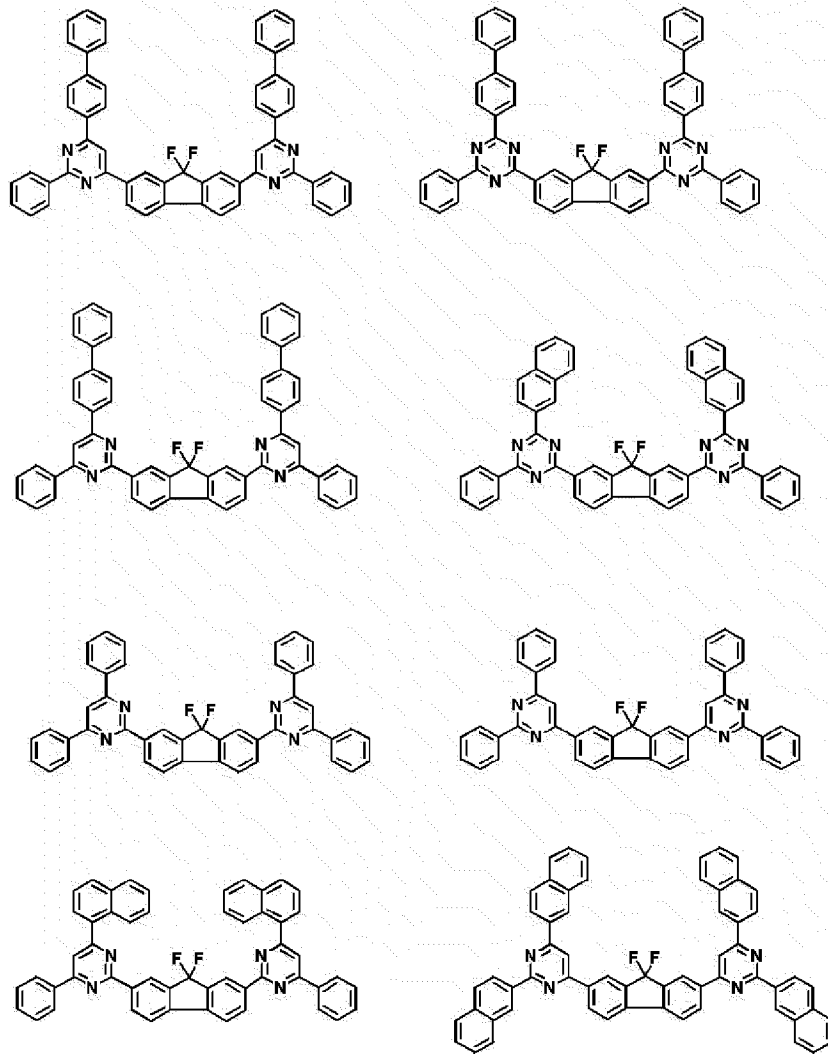


[176]

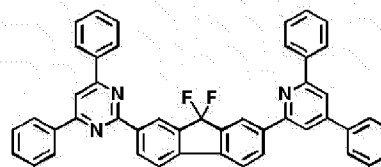
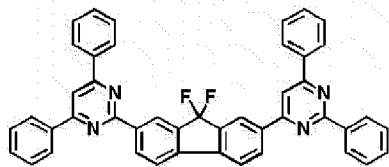
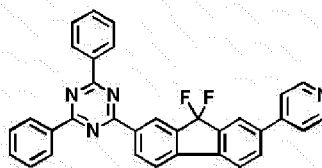
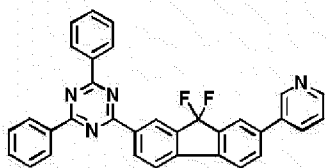
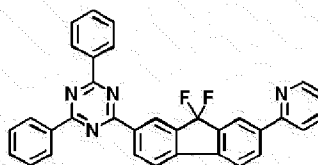
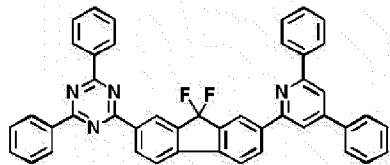
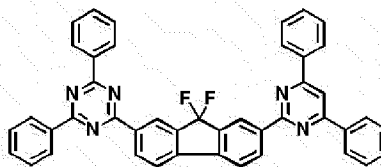
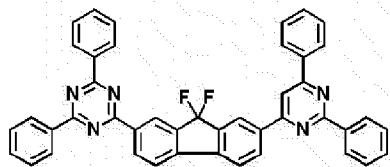




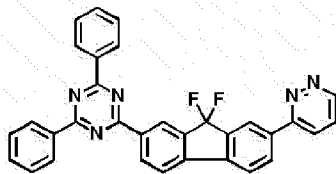
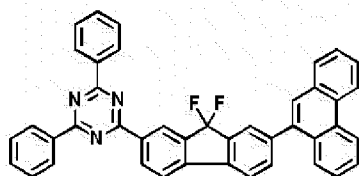
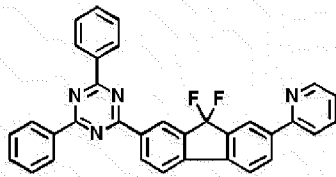
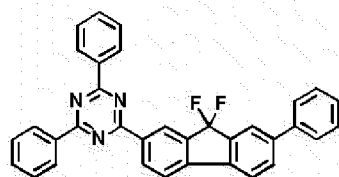
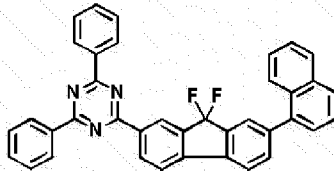
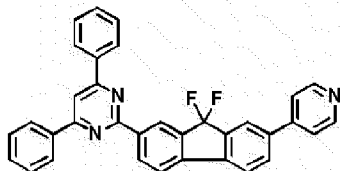
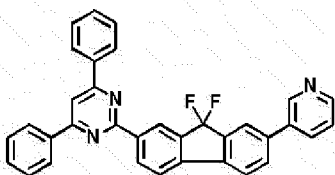
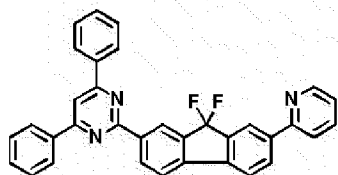
[177]



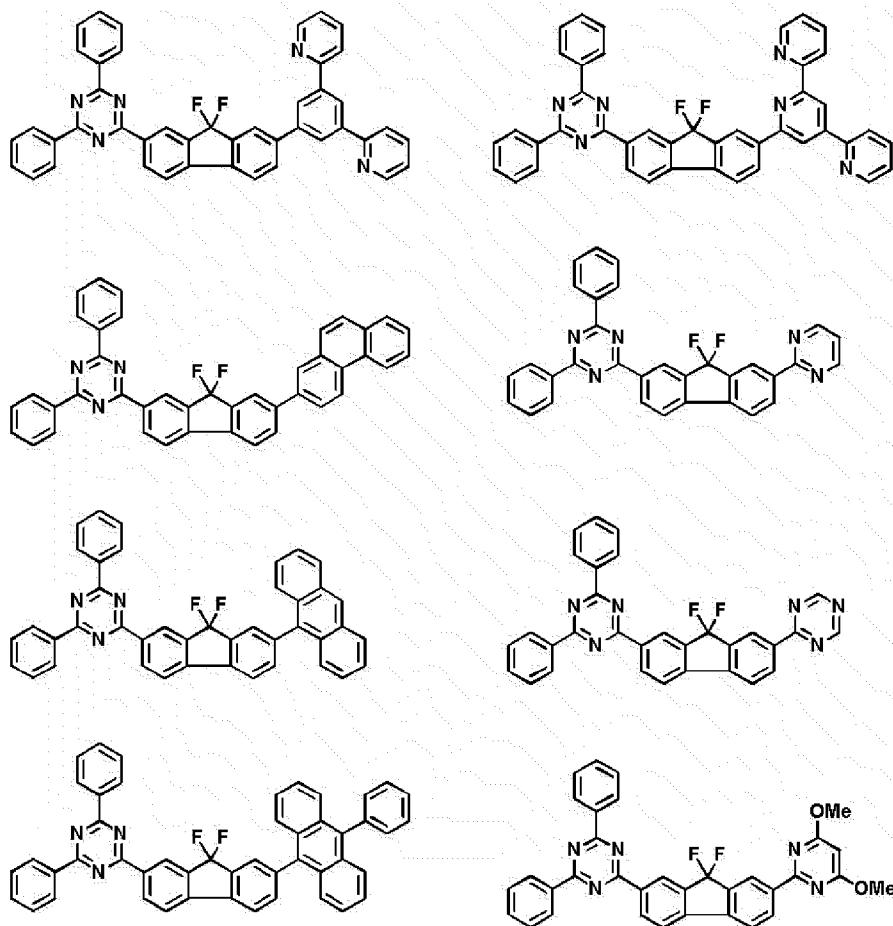
[178]



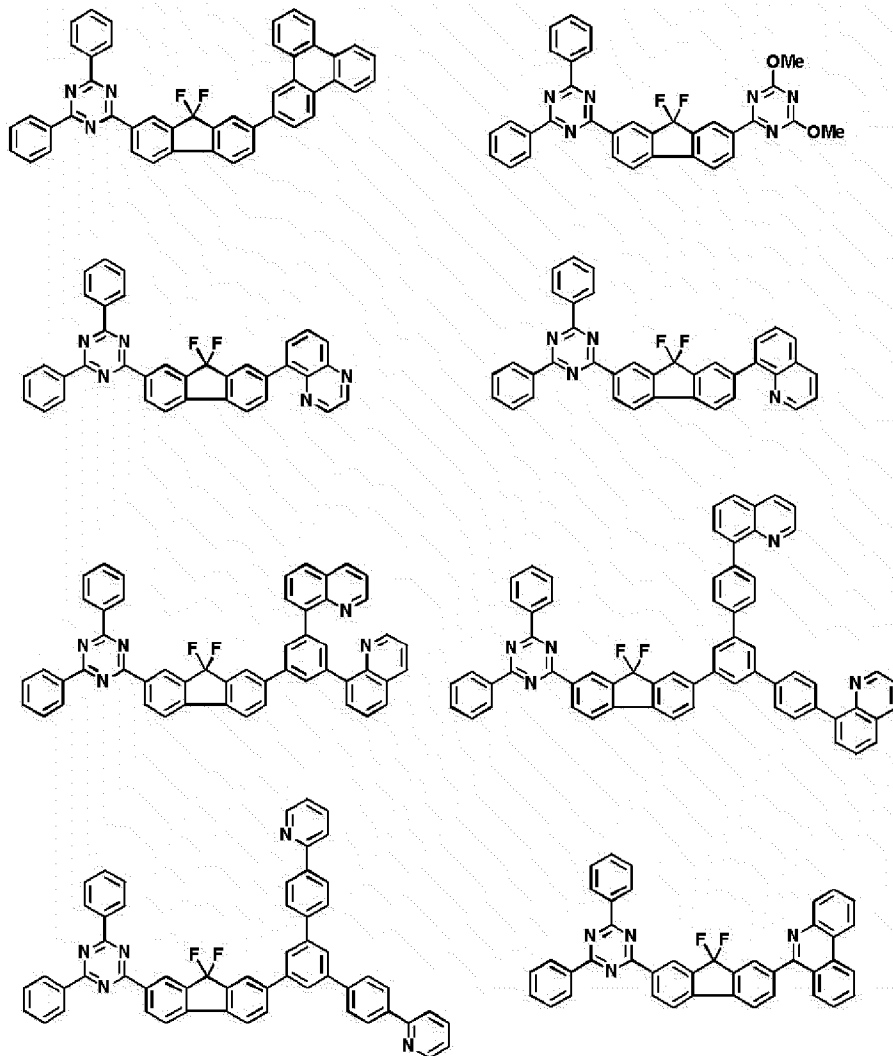
[179]



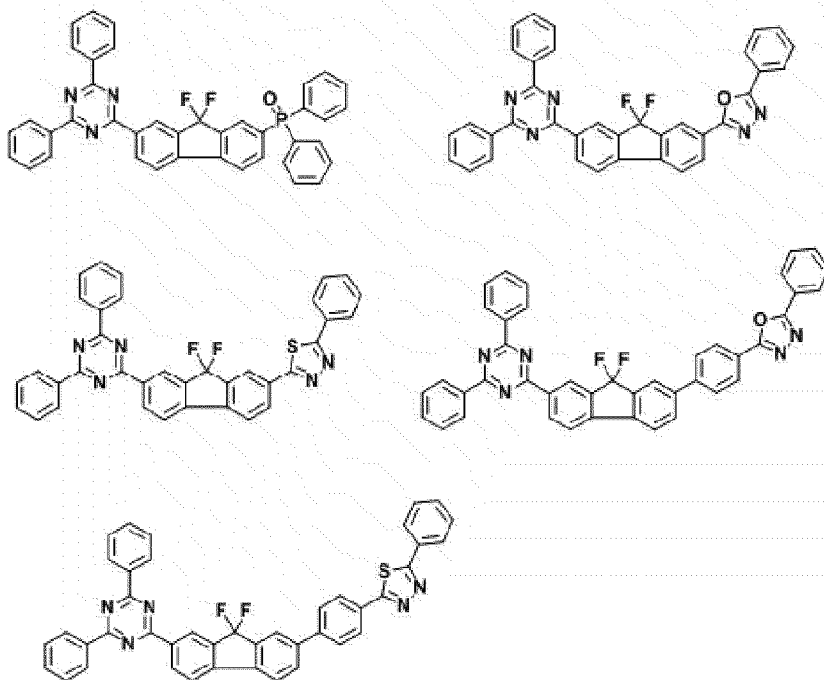
[180]



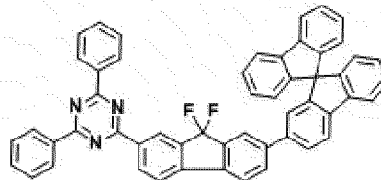
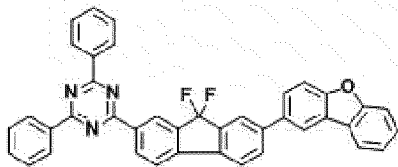
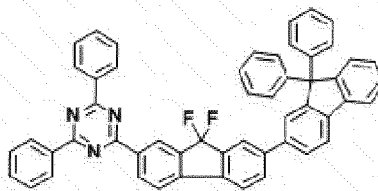
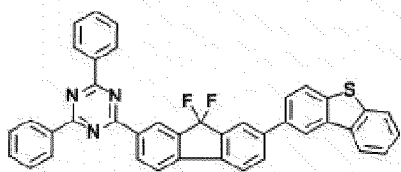
[181]



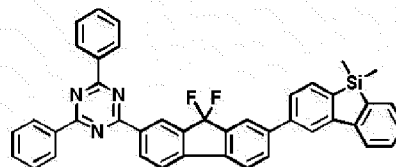
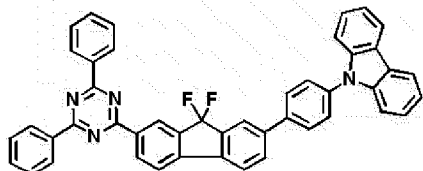
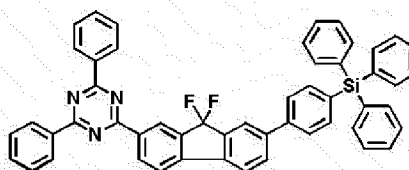
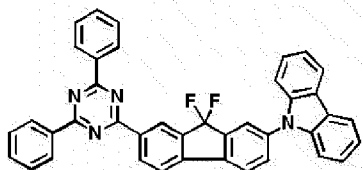
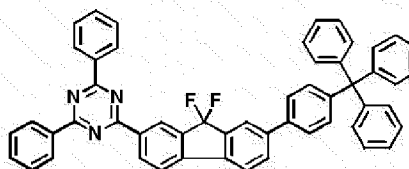
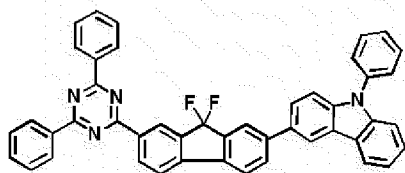
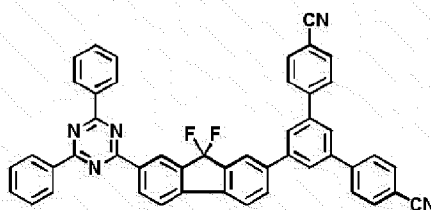
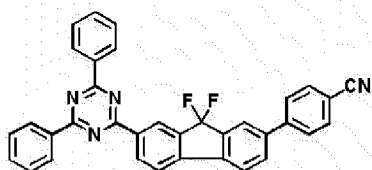
[182]



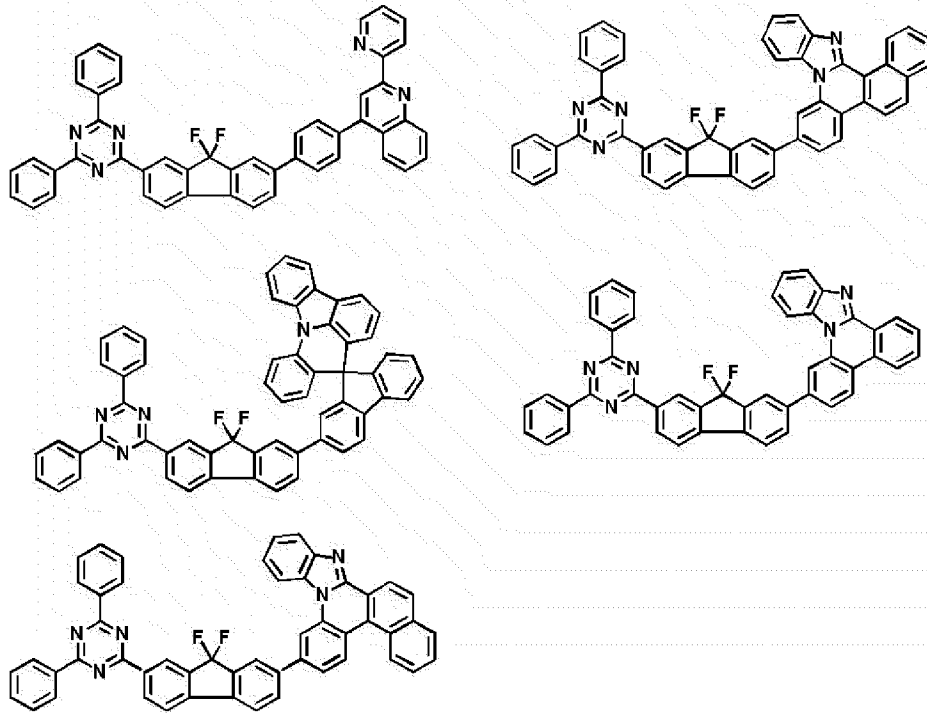
[183]



[184]



[185]



[186] 화합물의 컨쥬게이션 길이와 에너지 밴드갭은 밀접한 관계가 있다. 구체적으로, 화합물의 컨쥬게이션 길이가 길수록 에너지 밴드갭이 작아진다. 전술한 바와 같이, 상기 화합물의 코어는 제한된 컨쥬게이션을 포함하고 있으므로, 이는 에너지 밴드갭이 큰 성질을 갖는다.

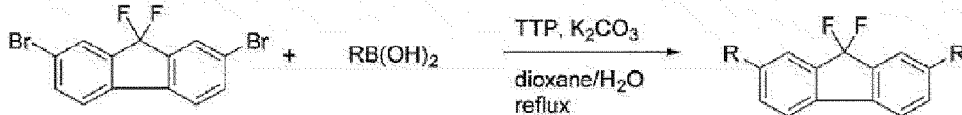
[187] 본 발명에서는 상기와 같이 에너지 밴드갭이 큰 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 통상 에너지 밴드갭이 큰 코어 구조에 치환기를 도입하여 에너지 밴드갭을 조절하는 것은 용이하나, 코어 구조가 에너지 밴드갭이 작은 경우에는 치환기를 도입하여 에너지 밴드갭을 크게 조절하기 어렵다. 또한, 본 발명에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.

[188] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공주입층 물질, 정공수송층 물질, 발광층 물질 및 전자수송층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.

[189] 본 명세서에 따른 화합물은 아래의 일반적인 반응식에 의하여 제조할 수 있다.

[190] 1)

[191]



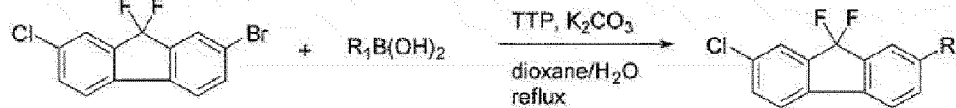
[192] 2)

[193]



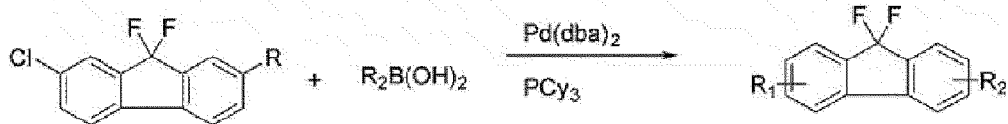
[194] 3)

[195]



[196] 4)

[197]



[198] 상기 반응식에 있어서 R, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>의 정의는 화학식 1에서 Y<sub>1</sub> 또는 -L-Y<sub>2</sub>의 정의와 같다.

[199] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

[200] 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.

[201] 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.

[202] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.

[203] 따라서, 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 및 정공주입과 정공수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[204] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트로서 포함될 수 있다. 또 하나의



예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트 재료로서 포함될 수 있다.

[205] 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도펀트로 포함할 수 있다.

[206] 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 이리듐계(Ir) 도펀트와 함께 사용할 수 있다.

[207] 또한, 상기 유기물층은 전자주입층 및 전자수송층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함할 수 있다.

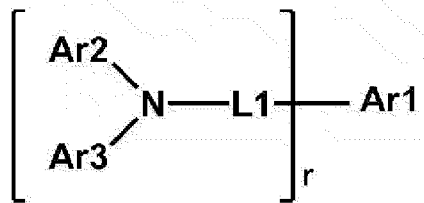
[208] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 정공수송층을 포함하고, 상기 정공수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[209] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 화합물은 발광층, 정공주입/정공수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.

[210] 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 하기 화학식 17로 표시되는 화합물을 포함한다.

[211] [화학식 17]

[212]



[213] 상기 화학식 17에 있어서,

[214] r은 1 이상의 정수이고,

[215] Ar1은 치환 또는 비치환된 1가 이상의 벤조플루오렌기; 치환 또는 비치환된 1가 이상의 플루오란텐기; 치환 또는 비치환된 1가 이상의 파이렌기; 또는 치환 또는 비치환된 1가 이상의 크라이센기이고,

[216] L1은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

[217] Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있으며,

[218] r이 2 이상인 경우, 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하다.

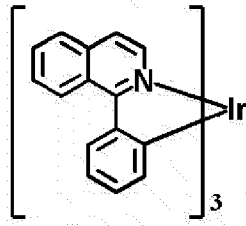
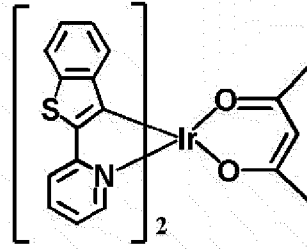
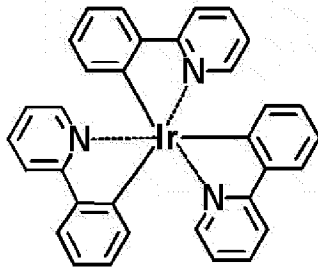
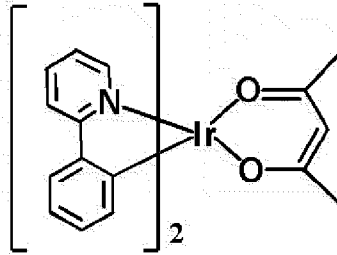
[219] 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 직접결합이다.

- [220] 일 실시상태에 따르면, 상기 r은 2이다.
- [221] 일 실시상태에 있어서, Ar1은 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 이소프로필기 또는 tert-부틸기로 치환 또는 비치환된 2가의 파이렌기; 또는 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 이소프로필기 또는 tert-부틸기로 치환 또는 비치환된 1가의 크라이센기이다.
- [222] 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 2가의 파이렌기이다.
- [223] 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [224] 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [225] 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기 또는 이소프로필기로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [226] 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기이다.
- [227] 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar2 및 Ar3는 페닐기이다.
- [228] 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [229] 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.
- [230] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자수송층(7) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3) 또는 전자수송층(7)에 포함될 수 있다.
- [231] 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 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 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.
- [232] 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 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

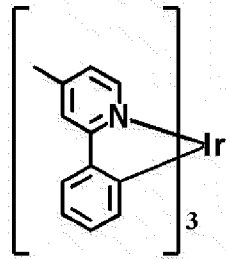
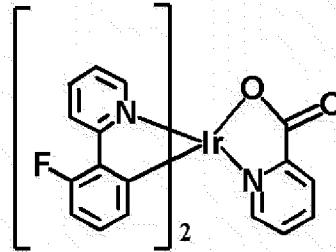
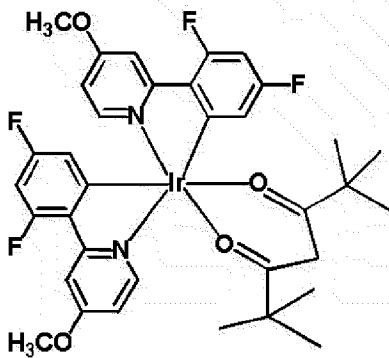
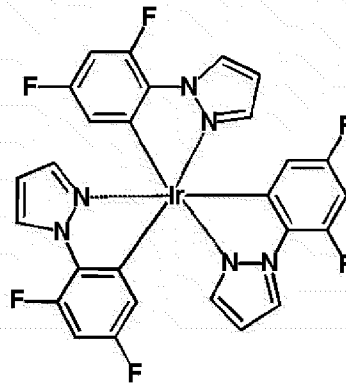
수 있다.

- [233] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 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 SnO<sub>2</sub> : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸화합물의), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)화합물의](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [234] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [235] 상기 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [236] 상기 정공수송 물질로는 양극이나 정공주입층으로부터 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.
- [237] 상기 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 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<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAiq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [238] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 이리듐계(Ir) 도펀트와 함께 사용할 수 있다.
- [239] 도펀트로 사용되는 이리듐계 착물은 하기와 같다.

[240]

[Ir(piq)<sub>3</sub>][Btp<sub>2</sub>Ir(acac)][Ir(ppy)<sub>3</sub>][Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac)]

[241]

[Ir(mppy)<sub>3</sub>][F<sub>2</sub>Irpic][(F<sub>2</sub>ppy)<sub>2</sub>Ir(tmd)][Ir(dfppz)<sub>3</sub>]

[242] 상기 전자수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는

8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물;  
히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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

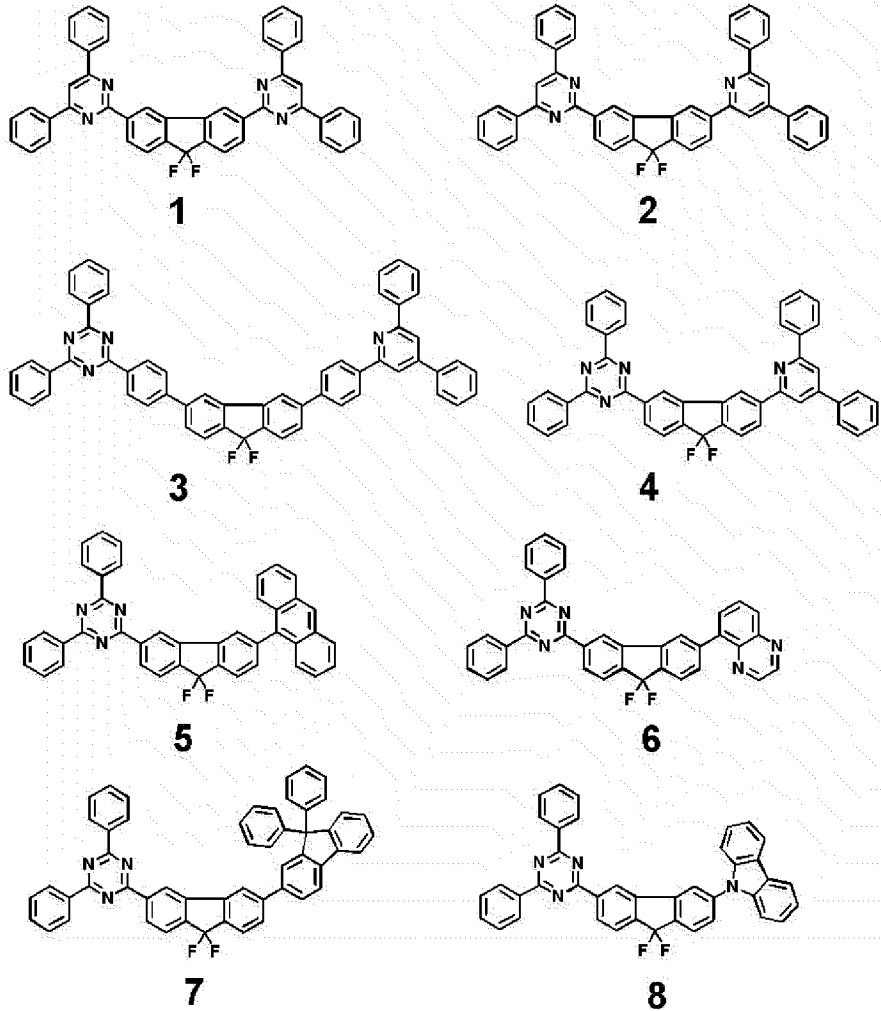
### 발명의 실시를 위한 형태

[244] 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

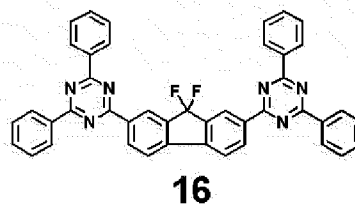
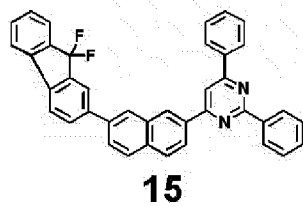
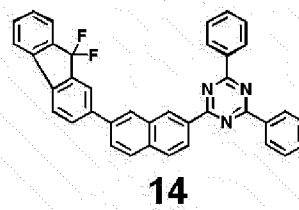
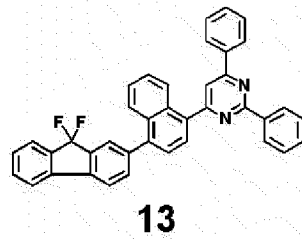
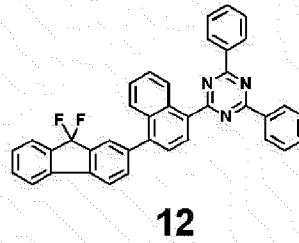
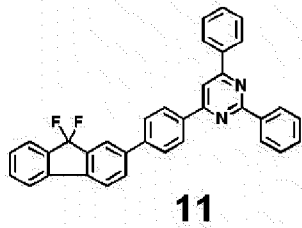
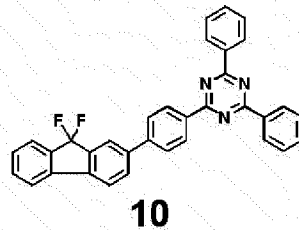
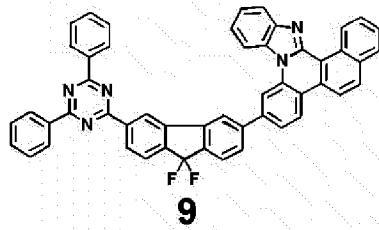
[245] 제조예

[246] 하기 제조예 1 내지 23에 의하여 하기 화합물 1 내지 23을 제조하였다.

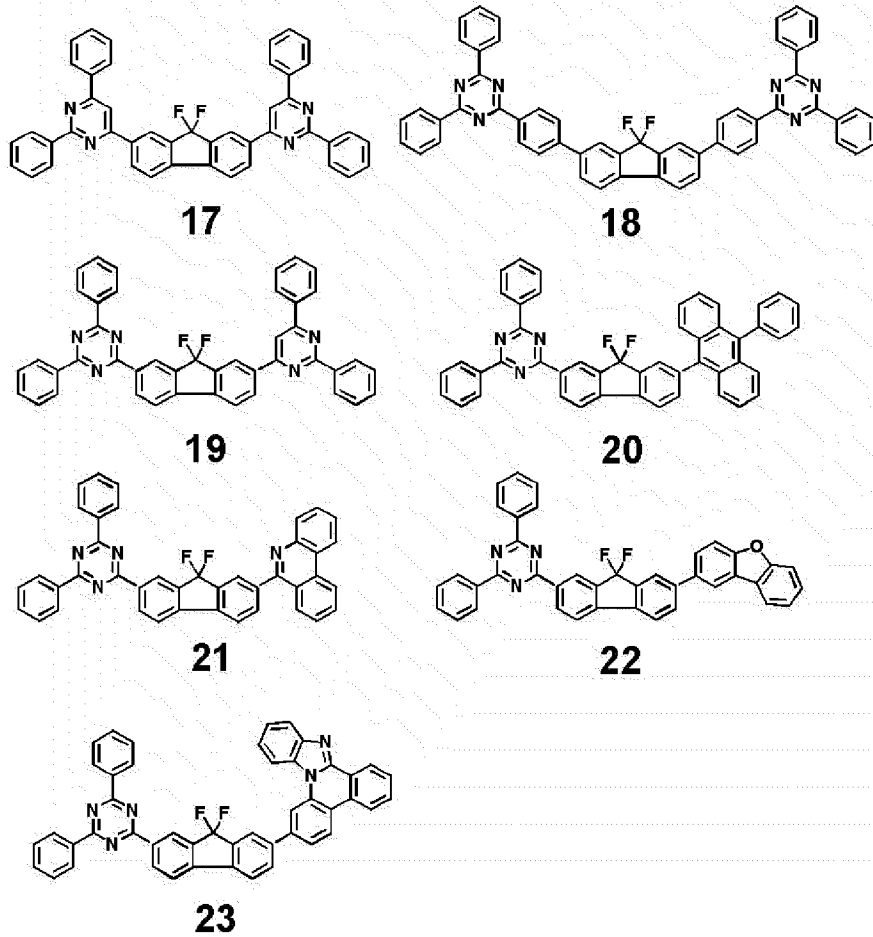
[247]



[248]



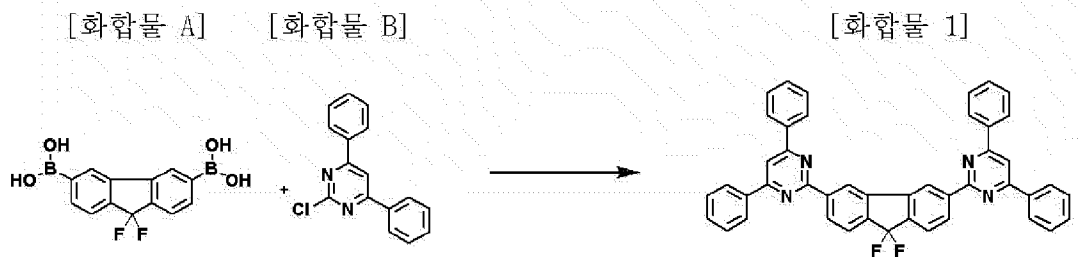
[249]



[250] &lt;제조예&gt;

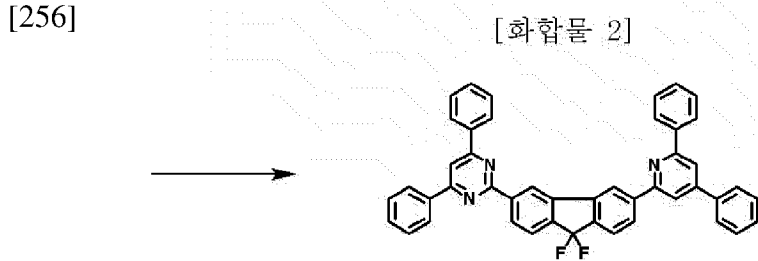
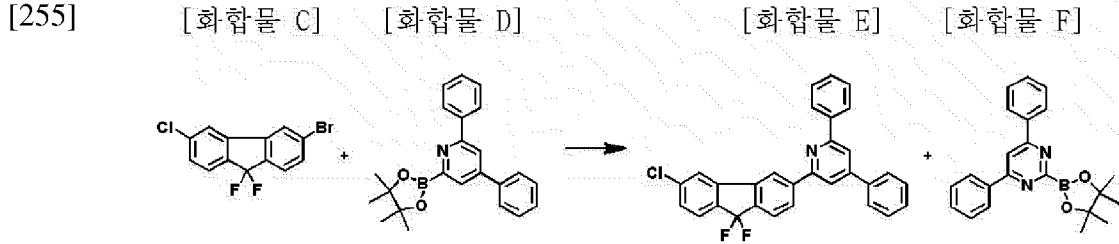
[251] 제조예 1: 하기 화합물 1의 제조

[252]



[253] 질소 분위기에서 상기 화합물 A(10g, 34.6mmol), B(9.2g, 34.6mmol)을 디옥산(100 mL)에 녹이고 탄산칼륨(9.5g, 69.2mmol)을 물(50 mL)에 녹여 첨가하고 교반하면서 가열하였다. 환류되는 상태에서 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(398mg, 0.69mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(386mg, 1.4mmol)을 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 여과하였다. 얻은 고체를 물과 에탄올로 세척하여 상기 화합물 1(19.9g, 수율: 87%)을 제조하였다.

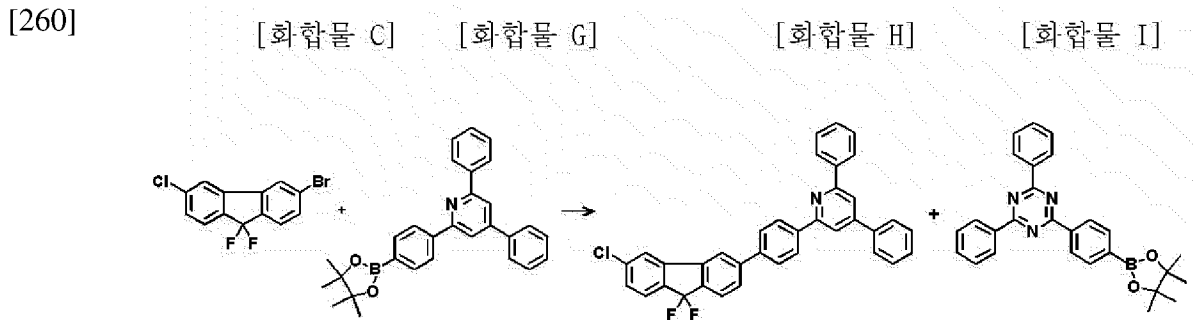
[254] 제조예 2: 하기 화합물 2의 합성



[257] 질소 분위기에서 상기 화합물 C(12g, 38.1mmol), D(13.6g, 38.1mmol)을 테트라하이드로퓨란(120 mL)에 녹이고 탄산칼륨(9.5g, 69.2mmol)을 물(50 mL)에 녹여 첨가하고 교반하면서 가열하였다. 환류되는 상태에서 팔라듐 테트라트리페닐포스핀(440mg, 0.38mmol)을 넣고 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 에탄올을 첨가하여 고체를 얻었다. 여과 후 얻은 고체를 물과 에탄올로 세척하여 상기 화합물 E를 85% 수율로 제조하였다.

[258] 질소 분위기에서 상기 화합물 E(15g, 32.3mmol), F(11.2g, 32.3mmol)을 디옥산(120 mL)에 녹이고 탄산칼륨(8.9g, 64.6mmol)을 물(60 mL)에 녹여 첨가하고 교반하면서 가열하였다. 환류되는 상태에서 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(371mg, 0.65mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(364mg, 1.3mmol)을 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 여과하였다. 얻은 고체를 물과 에탄올로 세척하여 상기 화합물 2(17.0g, 수율: 85%)를 제조하였다.

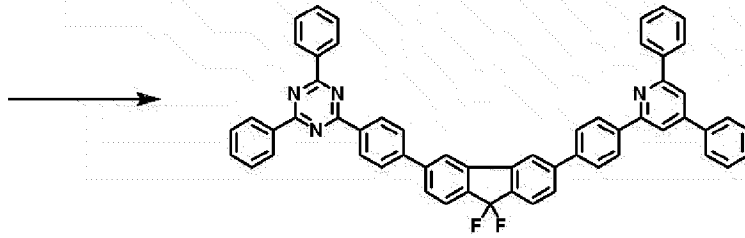
[259] 제조예 3: 하기 화합물 3의 합성





[261]

[화합물 3]



[262]

상기 화합물 D 대신에 G를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 H를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 H 그리고 F 대신에 I를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 3을 제조하였다.

[263]

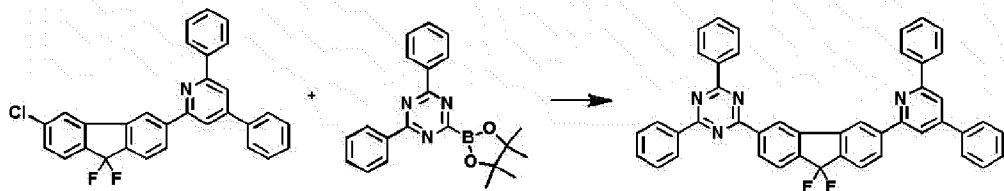
제조예 4: 하기 화합물 4의 합성

[264]

[화합물 E]

[화합물 J]

[화합물 4]



[265]

상기 화합물 D 대신에 G를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 H를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 H 그리고 F 대신에 I를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 3을 제조하였다.

[266]

제조예 4: 하기 화합물 4의 합성

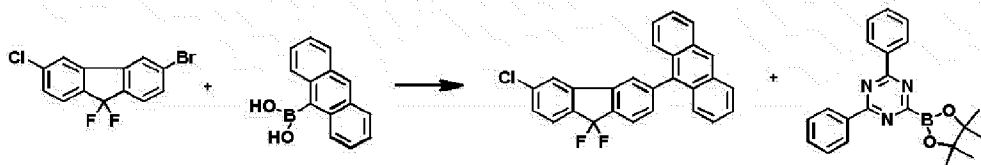
[267]

[화합물 C]

[화합물 K]

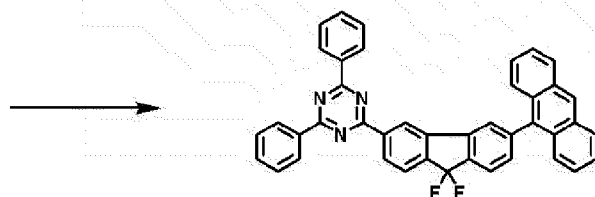
[화합물 L]

[화합물 J]



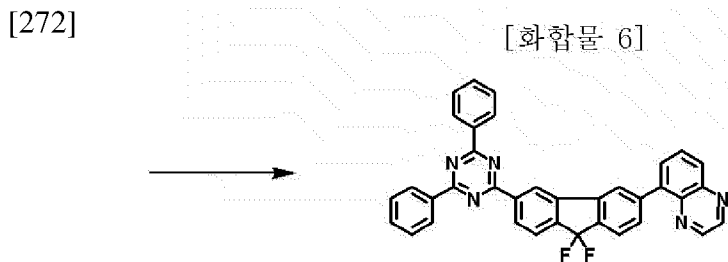
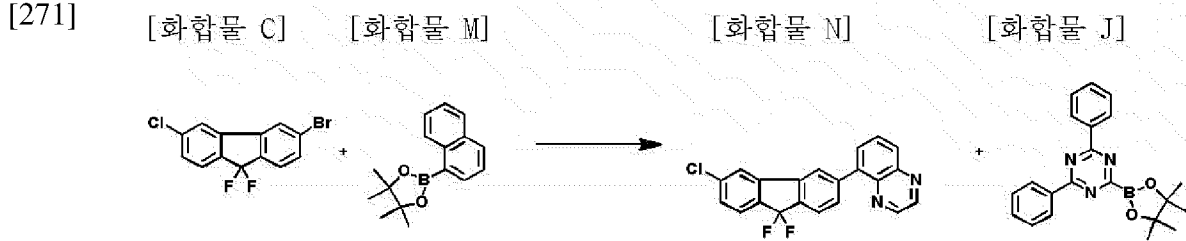
[268]

[화합물 5]



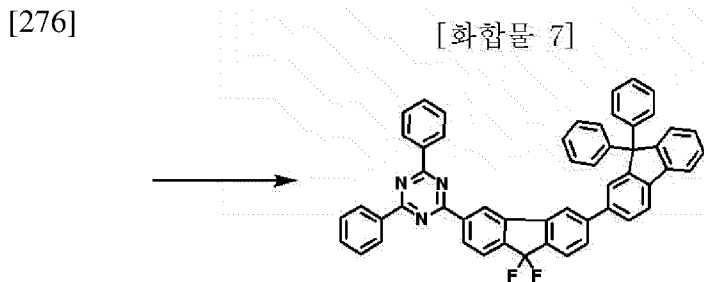
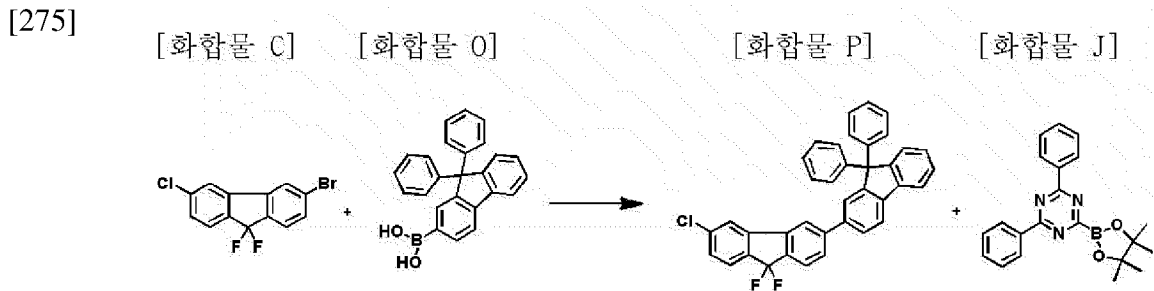
[269] 상기 화합물 D 대신에 K를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 L을 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 L 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 5를 제조하였다.

[270] 제조예 6: 하기 화합물 6의 합성



[273] 상기 화합물 D 대신에 M을 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 N을 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 N 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 6을 제조하였다.

[274] 제조예 7: 하기 화합물 7의 합성



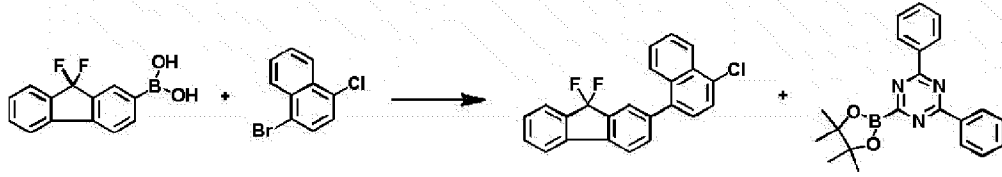
[277] 상기 화합물 D 대신에 O를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 P를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 P 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는



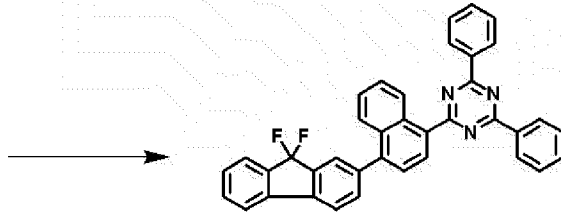
화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 11을 제조하였다.

[288] 제조예 12: 하기 화합물 12의 합성

[289] [화합물 W] [화합물 X] [화합물 Y] [화합물 J]



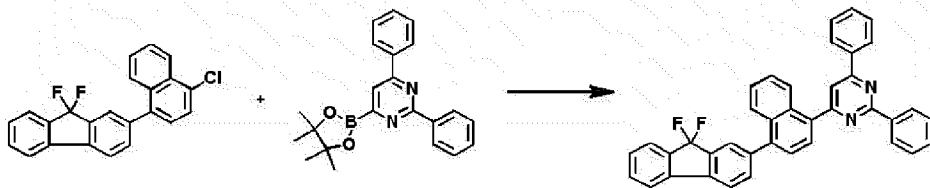
[290] [화합물 12]



[291] 상기 화합물 C 대신에 X 그리고 D 대신에 W를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 Y를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 Y 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 12를 제조하였다.

[292] 제조예 13: 하기 화합물 13의 합성

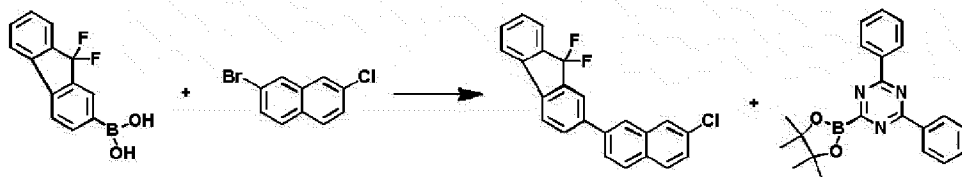
[293] [화합물 Y] [화합물 Z] [화합물 13]



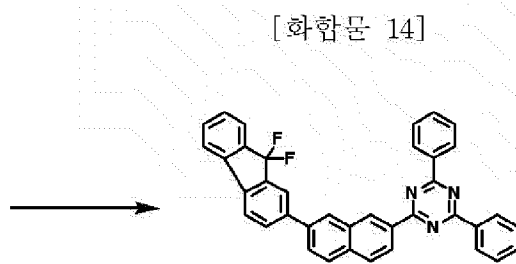
[294] 상기 화합물 X 대신에 Z를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 12를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 13을 제조하였다.

[295] 제조예 14: 하기 화합물 14의 합성

[296] [화합물 W] [화합물 AA] [화합물 BB] [화합물 J]



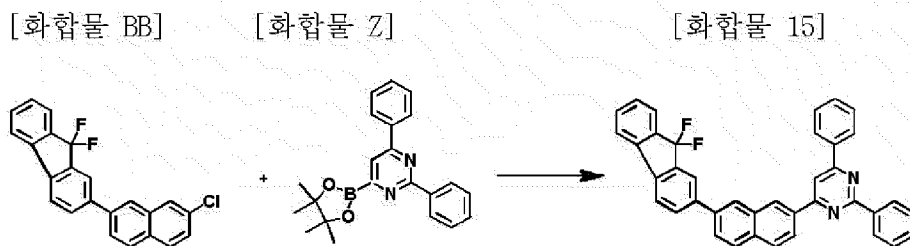
[297]



[298] 상기 화합물 C 대신에 AA 그리고 D대신에 W를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 BB를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 BB 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 14를 제조하였다.

[299] 제조예 15: 하기 화합물 15의 합성

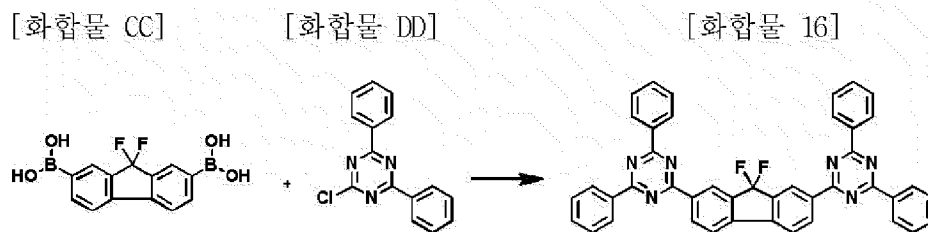
[300]



[301] 상기 화합물 J 대신에 Z를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 14를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 15를 제조하였다.

[302] 제조예 16: 하기 화합물 16의 합성

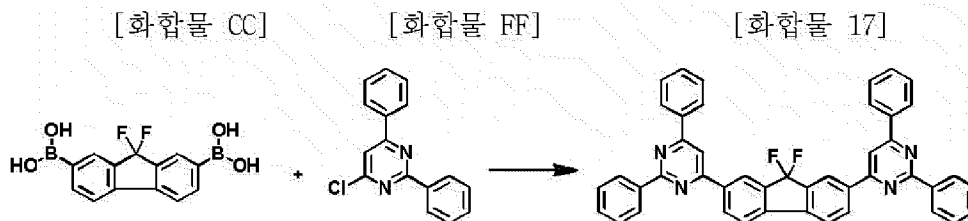
[303]



[304] 상기 화합물 E 대신에 DD 그리고 F 대신에 CC를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 16을 제조하였다.

[305] 제조예 17: 하기 화합물 17의 합성

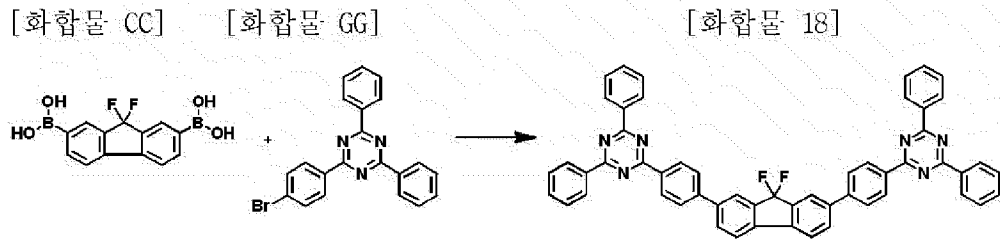
[306]



[307] 상기 화합물 E 대신에 FF 그리고 F 대신에 CC를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 17을 제조하였다.

[308] 제조예 18: 하기 화합물 18의 합성

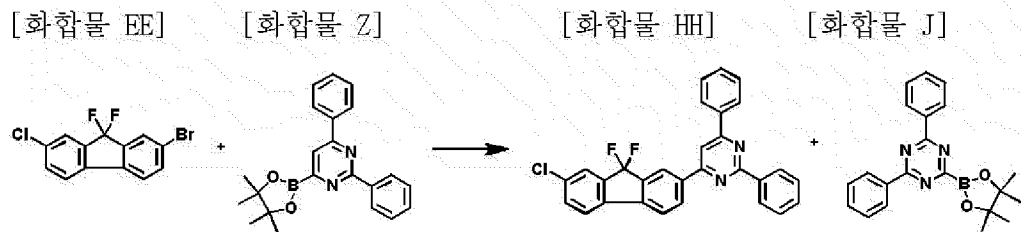
[309]



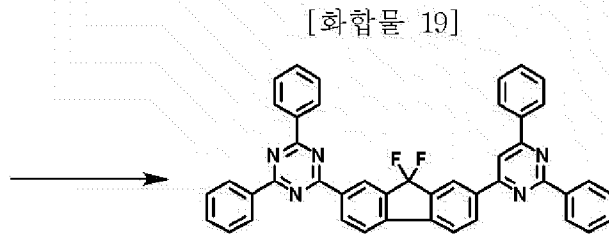
[310] 상기 화합물 E 대신에 GG 그리고 F 대신에 CC를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 18을 제조하였다.

[311] 제조예 19: 하기 화합물 19의 합성

[312]



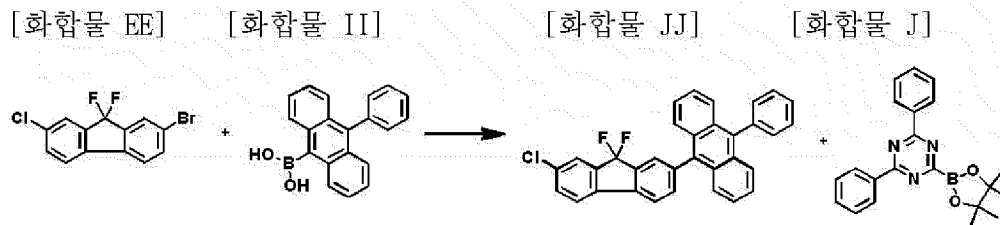
[313]



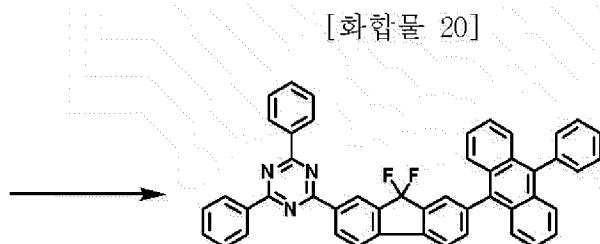
[314] 상기 화합물 C 대신에 EE를 그리고 E 대신에 Z를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 HH를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 HH 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 19를 제조하였다.

[315] 제조예 20: 하기 화합물 20의 합성

[316]

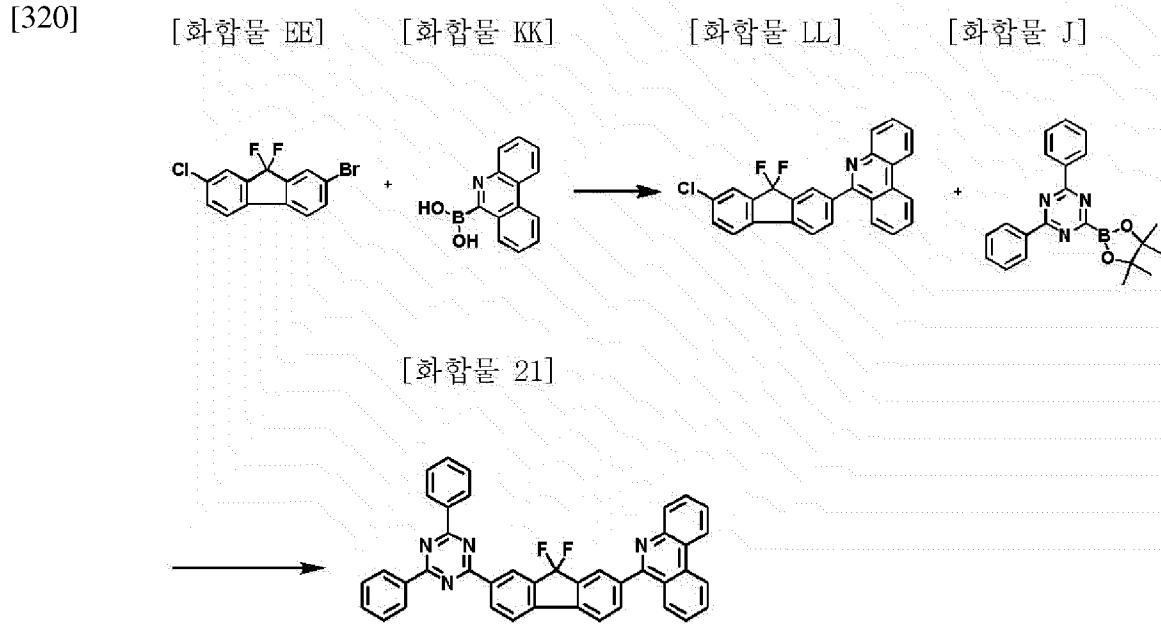


[317]



[318] 상기 화합물 C 대신에 EE를 그리고 E 대신에 II를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 JJ를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 JJ 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 20을 제조하였다.

[319] 제조예 21: 하기 화합물 21의 합성

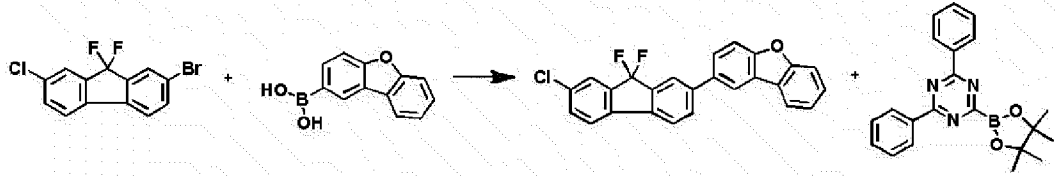


[321] 상기 화합물 C 대신에 EE를 그리고 E 대신에 KK를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 LL을 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 LL 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 21을 제조하였다.

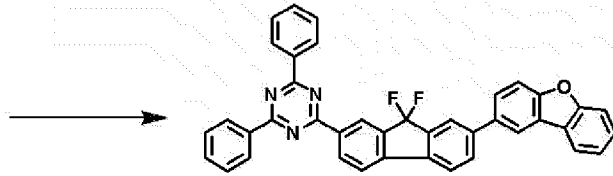
[322] 제조예 22: 하기 화합물 22의 합성

[323]

[화합물 EE]      [화합물 MM]      [화합물 NN]      [화합물 J]



[화합물 22]



[324]

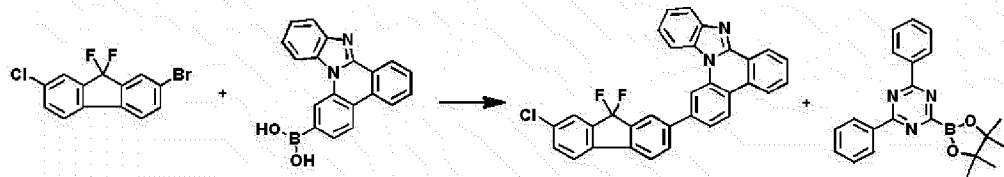
상기 화합물 C 대신에 EE를 그리고 E 대신에 MM을 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 NN을 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 NN 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 22를 제조하였다.

[325]

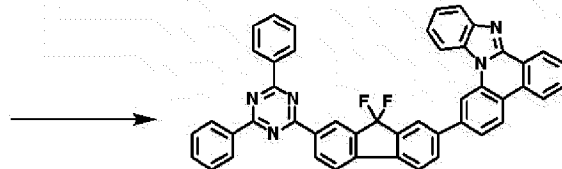
제조예 23: 하기 화합물 23의 합성

[326]

[화합물 EE]      [화합물 OO]      [화합물 PP]      [화합물 J]



[화합물 23]



[327]

상기 화합물 C 대신에 EE를 그리고 E 대신에 OO를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 E를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 PP를 제조하였다. 다음으로, 상기 화합물 E 대신에 PP 그리고 F 대신에 J를 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 23을 제조하였다.



[328] <OLED 소자 제작 평가>

[329] 비교예 1

[330] ITO(indium tin oxide)가 1500 Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔(Fischer Co.)사의 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어(Millipore Co.)사 제품의 필터(Filter)로 2 차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitriple hexaazatriphenylene; HAT)를 100Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다.

[331] 상기 정공주입층 위에 하기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB) (700Å), 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(HAT) (50Å) 및 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노] 비페닐(NPB) (700Å)을 순차적으로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다.

[332] [헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌]

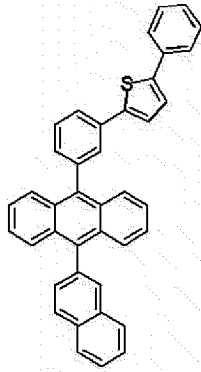
[NPB]



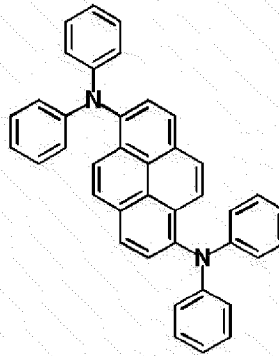
[333] 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 200Å으로 아래와 같은 H1와 D1를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 위에 E1를 100Å의 두께로 전자수송층을 형성하였다.

[334]

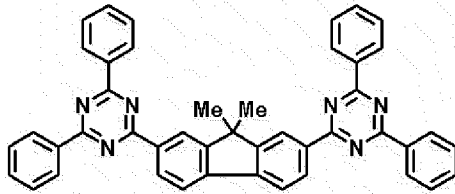
[H1]



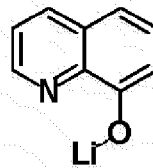
[D1]



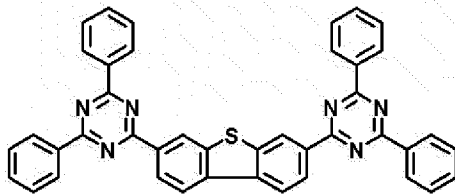
[E1]



[E2]



[E3]



[335] 상기 전자수송층 위에 E1과 E2를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 200Å의 두께로 전자주입 및 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자주입 및 수송층 위에 순차적으로 15Å 두께로 리튬 플루라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[336] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는  $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$  torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[337] **비교예 2**

[338] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 E3를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[339] **실시예 1**

[340] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 1을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[341] **실시예 2**

- [342] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [343] **실시예 3**
- [344] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 9를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [345] **실시예 4**
- [346] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 11을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [347] **실시예 5**
- [348] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 12를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [349] **실시예 6**
- [350] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 14를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [351] **실시예 7**
- [352] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 16을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [353] **실시예 8**
- [354] 상기 비교예 1에서 전자주입 및 전자수송층 E1 대신에 화합물 18을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [355] 상기 비교예 1, 2 및 실시예 1 내지 8의 각각의 화합물을 사용하여 제조한 유기 발광 소자를 실험한 결과를 표 1에 나타내었다.
- [356] [표1]

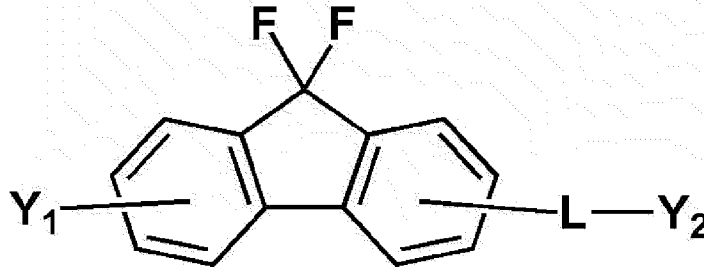
| 실험예 10 mA/cm <sup>2</sup> | 전자주입 및 전자수송층에 사용된 물질 | 전압(V) | 전류효율(cd/A) |
|---------------------------|----------------------|-------|------------|
| 비교예 1                     | E1 + E2              | 4.2   | 4.6        |
| 비교예 2                     | E3 + E2              | 4.3   | 4.7        |
| 실시예 1                     | 화합물 1 + E2           | 4.1   | 4.2        |
| 실시예 2                     | 화합물 4 + E2           | 4.1   | 4.1        |
| 실시예 3                     | 화합물 9 + E2           | 4.3   | 4.5        |
| 실시예 4                     | 화합물 11 + E2          | 4.2   | 4.3        |
| 실시예 5                     | 화합물 12 + E2          | 4.2   | 4.4        |
| 실시예 6                     | 화합물 14 + E2          | 4.2   | 4.3        |
| 실시예 7                     | 화합물 16 + E2          | 4.0   | 4.1        |
| 실시예 8                     | 화합물 18 + E2          | 4.0   | 4.2        |

- [357] 위의 소자 평가 결과로부터, 본 명세서에 따른 헤테로고리 화합물은 화합물은 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 이용한 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자는 효율, 구동전압 등에서 우수한 특성을 나타냄을 알 수 있다.

## 청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

Y<sub>1</sub>은 수소; 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

Y<sub>2</sub>는 수소; 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 함질소 헤테로고리기이며

A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소;

할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기;

이미드기; 아미노기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된

붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환

또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환

또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기;

치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

Y<sub>1</sub>이 2 이상의 A<sub>1</sub>로 치환된 경우에 A<sub>1</sub>은 서로 같거나 상이하고,

Y<sub>2</sub>가 2 이상의 A<sub>2</sub>로 치환된 경우에 A<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기인 것인 화합물.

[청구항 3] 청구항 1에 있어서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하고, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 1 이상의 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기인 것인 화합물.

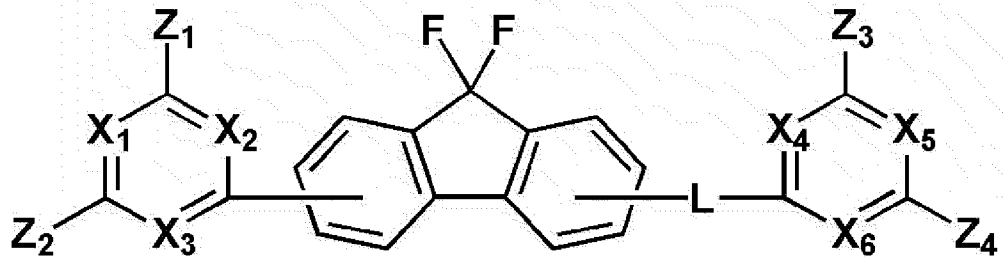
[청구항 4] 청구항 1에 있어서, Y<sub>1</sub>은 1 이상의 A<sub>1</sub>로 치환 또는 비치환된 단환식의 함질소 헤테로고리기이고, Y<sub>2</sub>는 수소인 것인 화합물.

[청구항 5] 청구항 1에 있어서, Y<sub>1</sub>은 수소이고, Y<sub>2</sub>는 A<sub>2</sub>로 치환 또는 비치환된

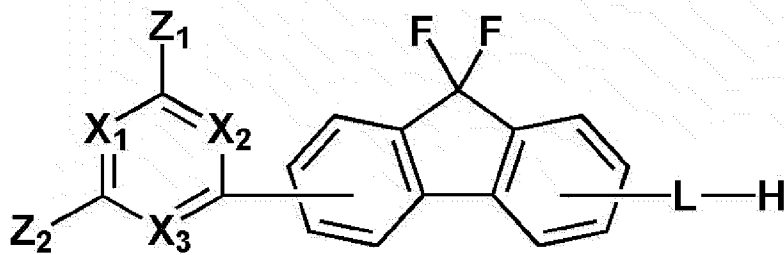
단환식의 함질소 헤테로고리기인 것인 화합물.

[청구항 6] 청구항 1에 있어서, 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

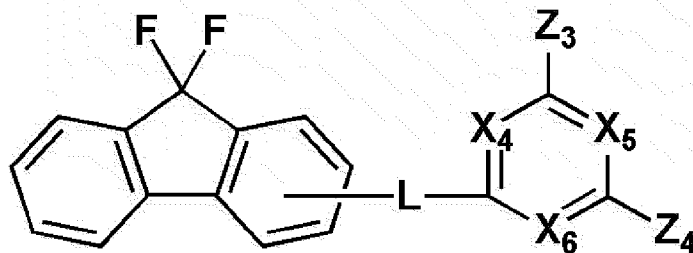
[화학식 2]



[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 2 내지 화학식 4에서,

L의 정의는 화학식 1에서와 같고,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>는 N 또는 CH이며,

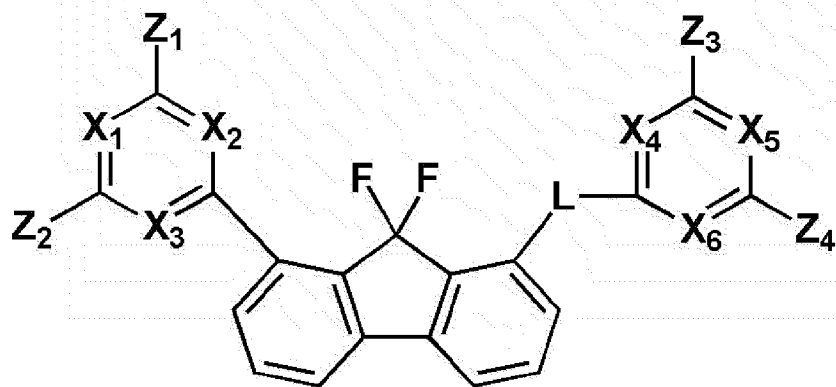
X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 N이고,

X<sub>4</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 적어도 하나는 N이며,

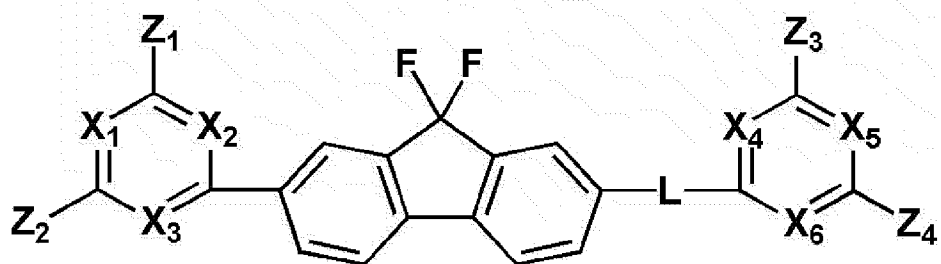
Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 화학식 1에서의 A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>의 정의와 같다.

[청구항 7] 청구항 6에 있어서, 화학식 2의 화합물은 하기 화학식 5 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

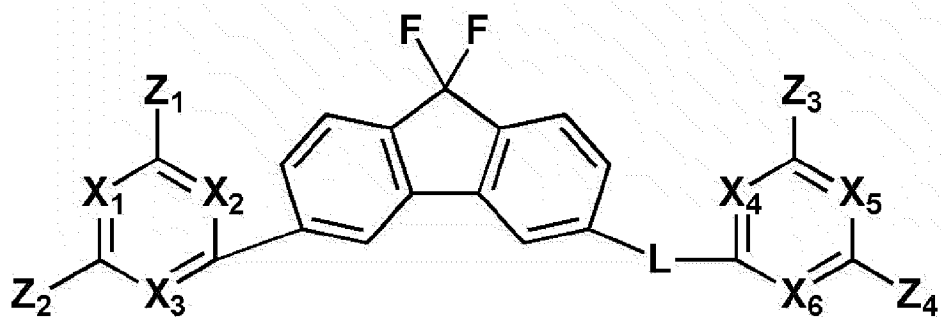
[화학식 5]



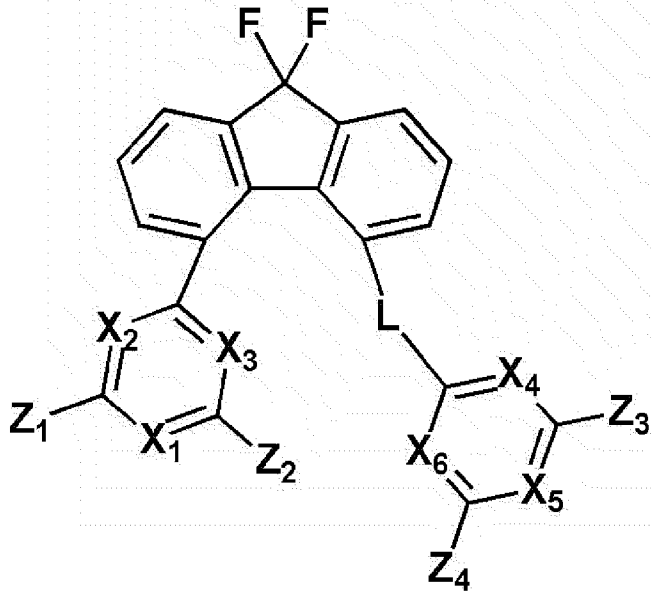
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]

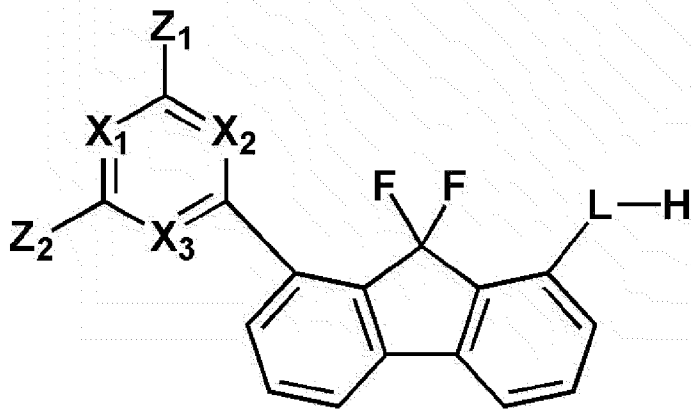


상기 화학식 5 내지 화학식 8에서,  
L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 및 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>의 정의는 화학식 2에서와 같다.

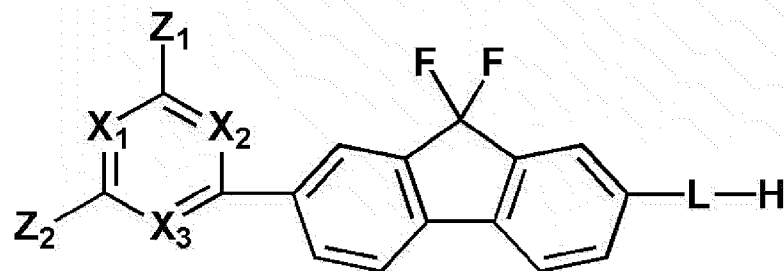
[청구항 8]

청구항 6에 있어서, 화학식 3의 화합물은 하기 화학식 9 내지 화학식 12 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

[화학식 9]

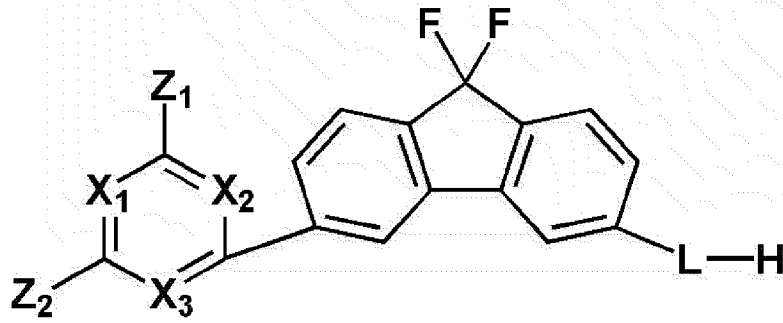


[화학식 10]

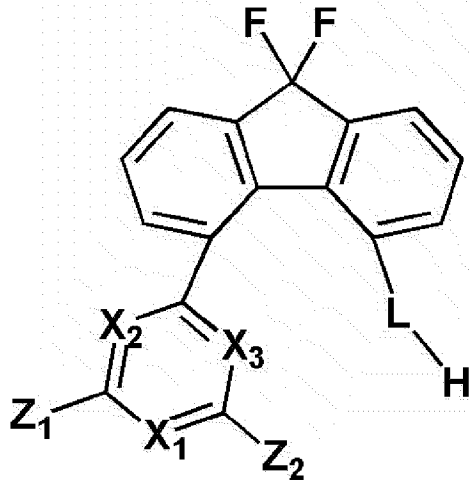


[화학식 11]





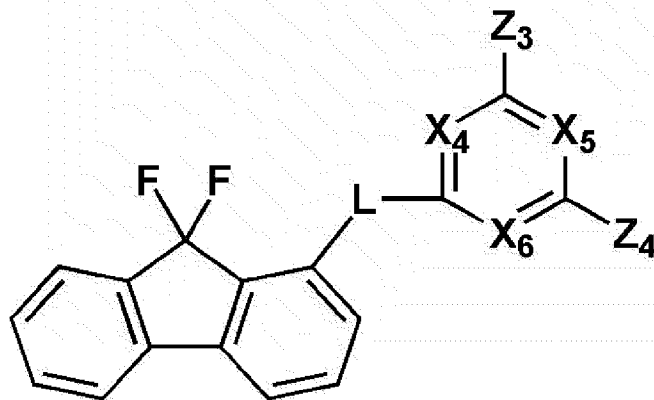
[화학식 12]



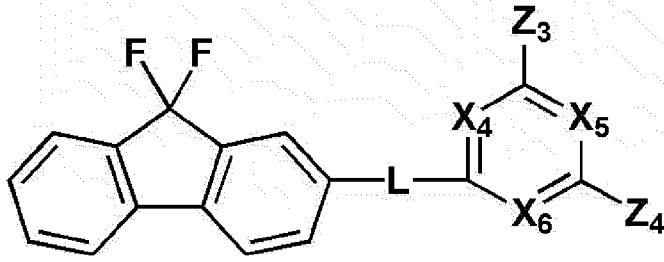
상기 화학식 9 내지 화학식 12에서,  
L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>의 정의는 화학식 3에서와 같다.

[청구항 9] 청구항 6에 있어서, 화학식 4의 화합물은 하기 화학식 13 내지 화학식 16  
중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

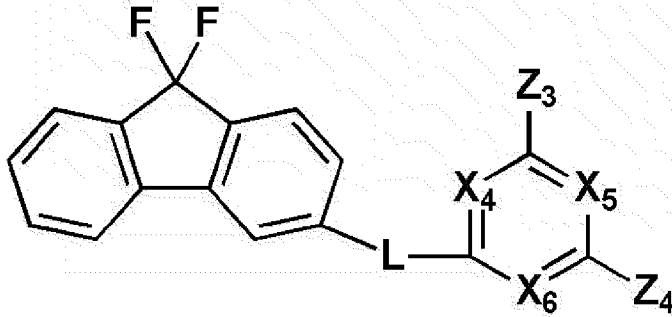
[화학식 13]



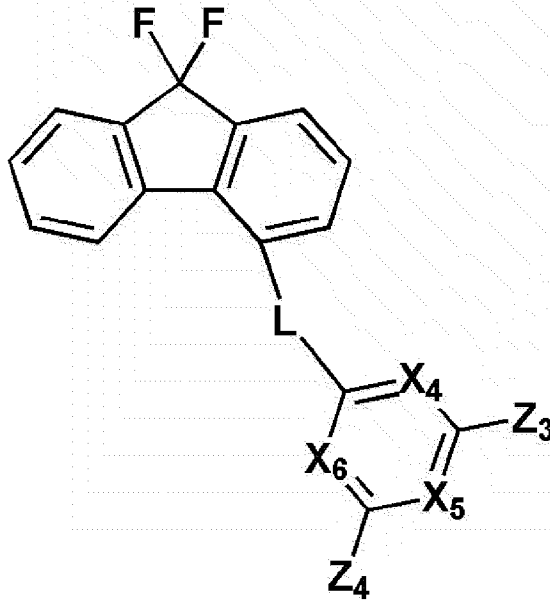
[화학식 14]



[화학식 15]

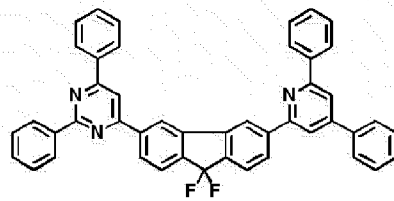
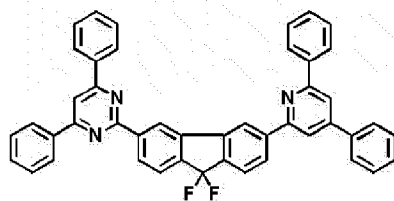
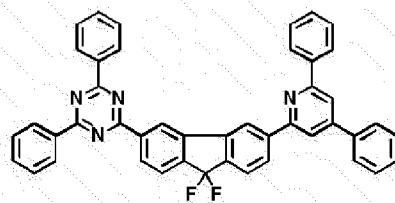
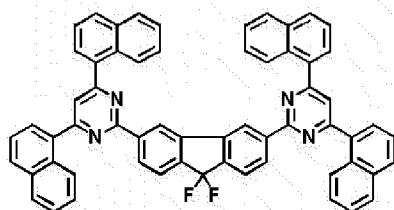
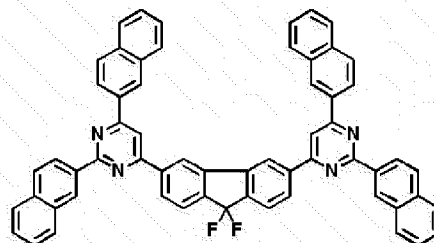
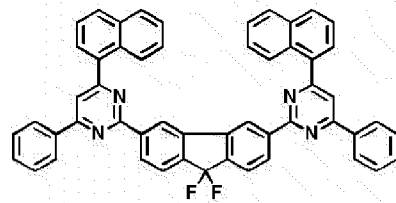
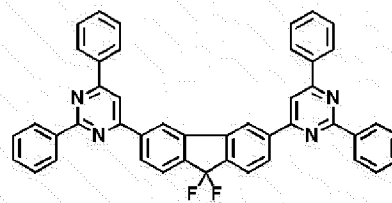
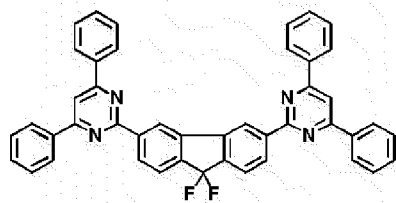


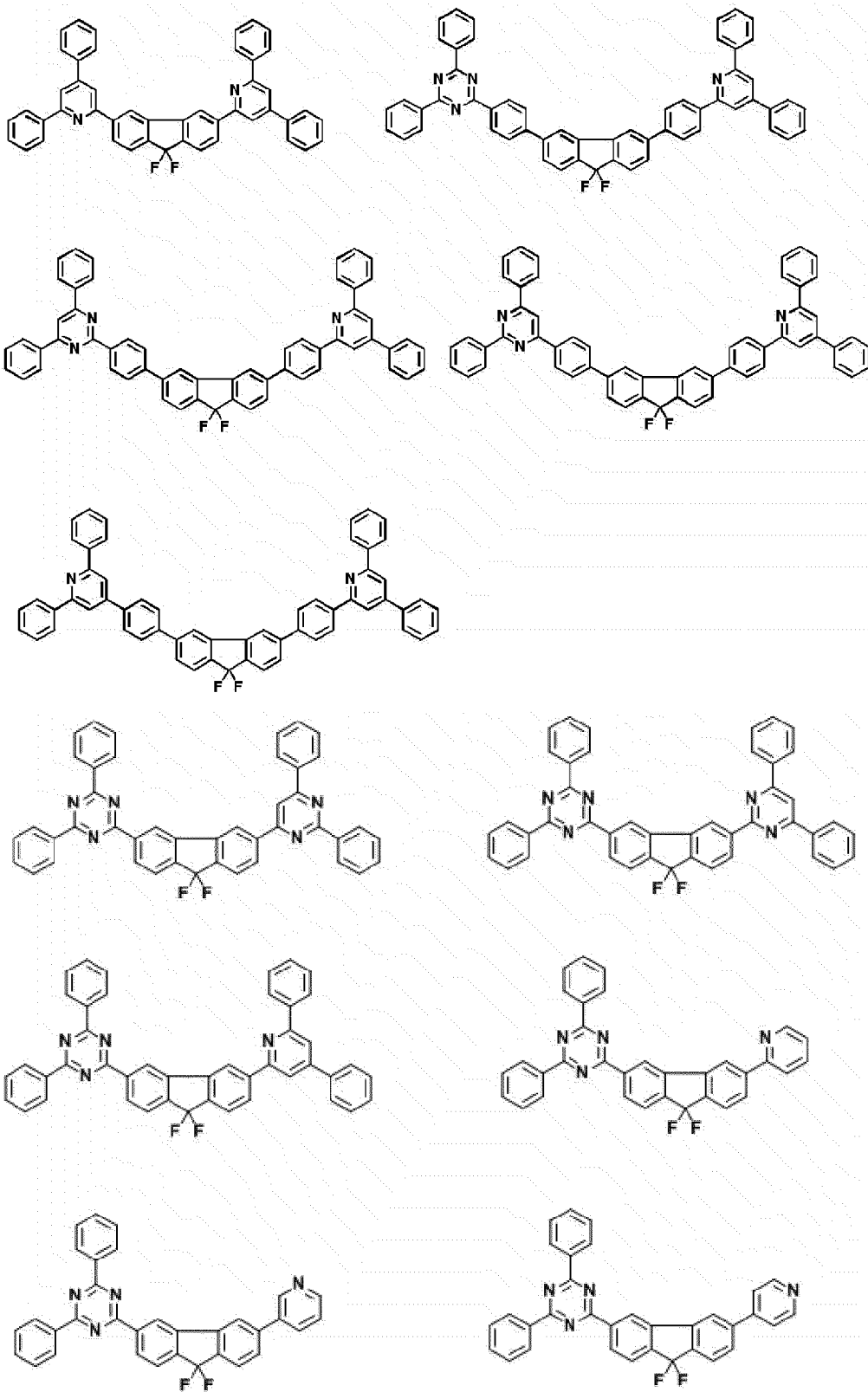
[화학식 16]

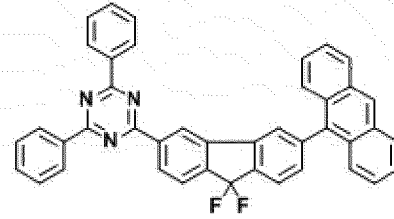
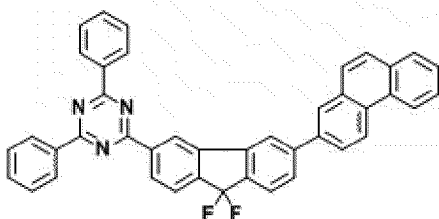
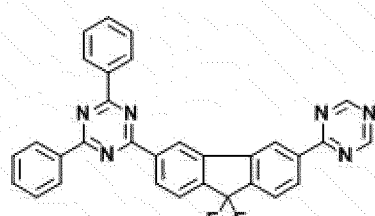
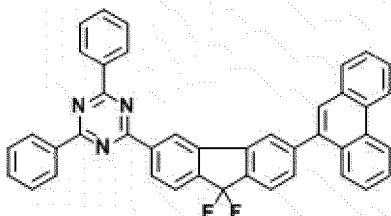
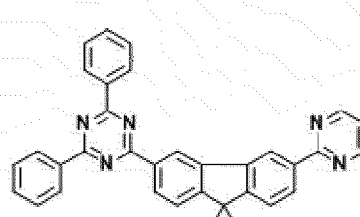
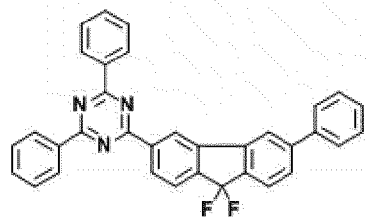
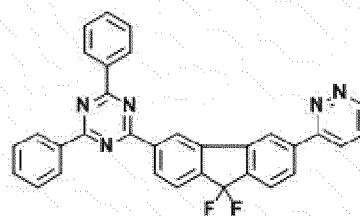
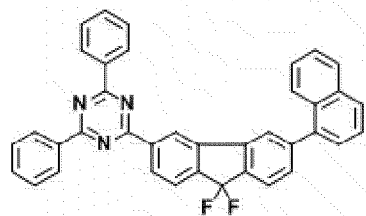
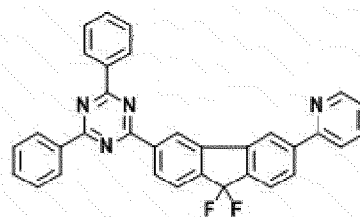
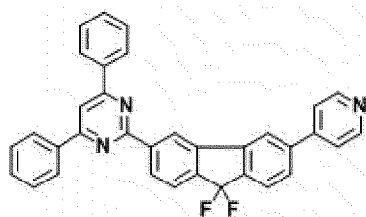
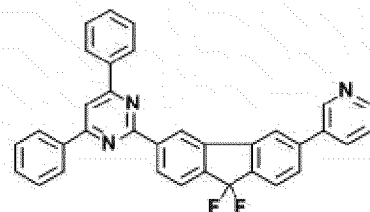
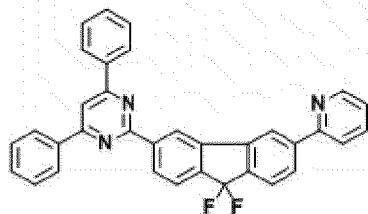
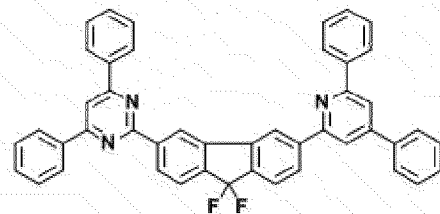
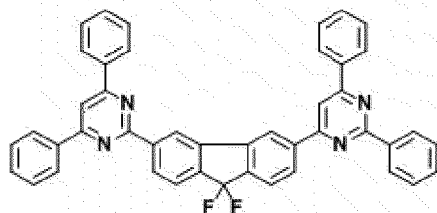


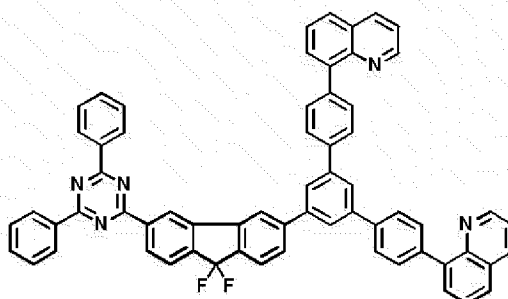
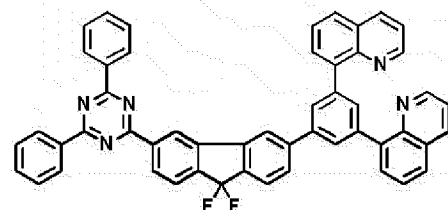
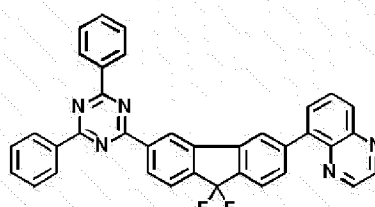
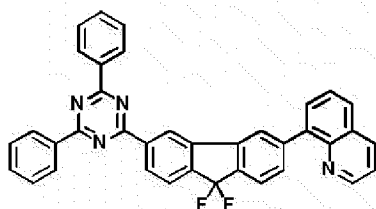
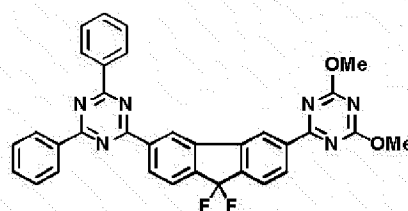
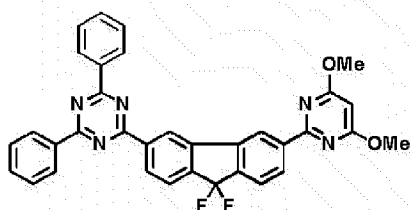
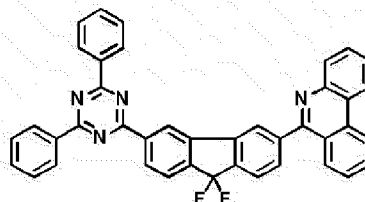
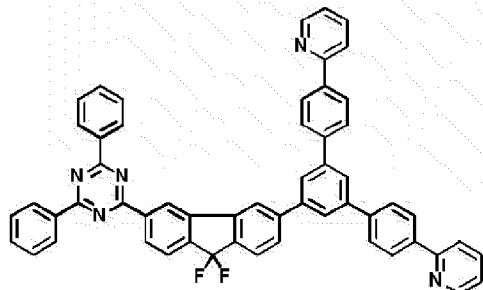
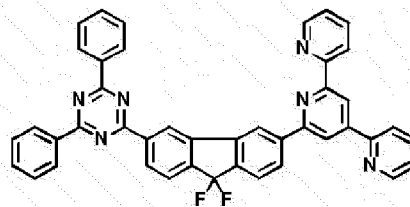
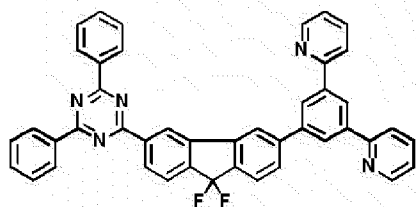
상기 화학식 13 내지 화학식 16에서,  
L, X<sub>4</sub> 내지 X<sub>6</sub>, Z<sub>3</sub> 및 Z<sub>4</sub>의 정의는 화학식 4에서와 같다.

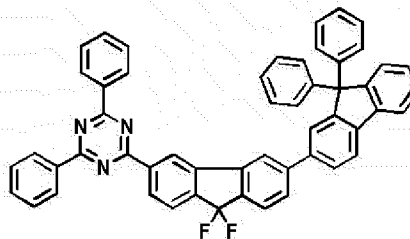
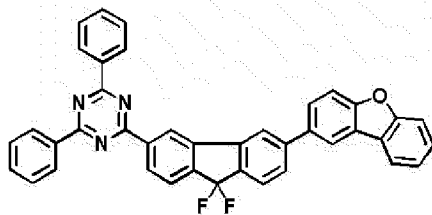
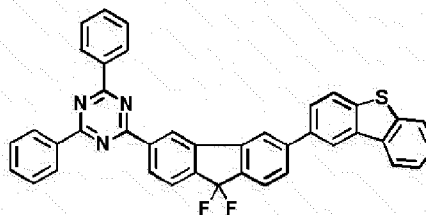
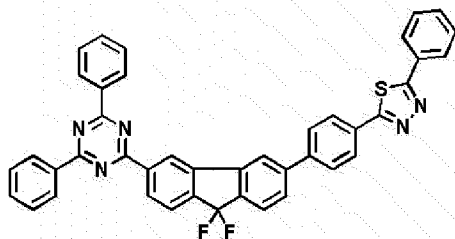
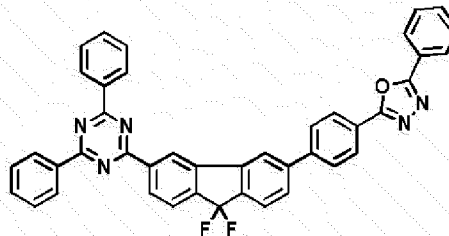
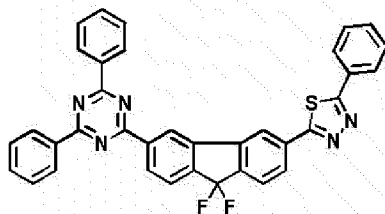
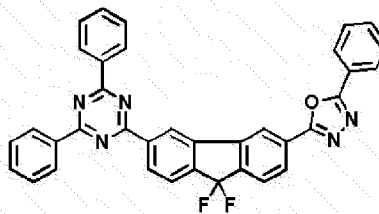
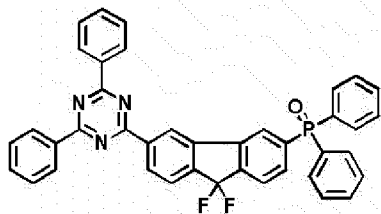
[청구항 10] 청구항 1에 있어서, 화학식 1의 화합물은 하기 구조들 중에서 선택된 어느 하나인 것인 화합물.





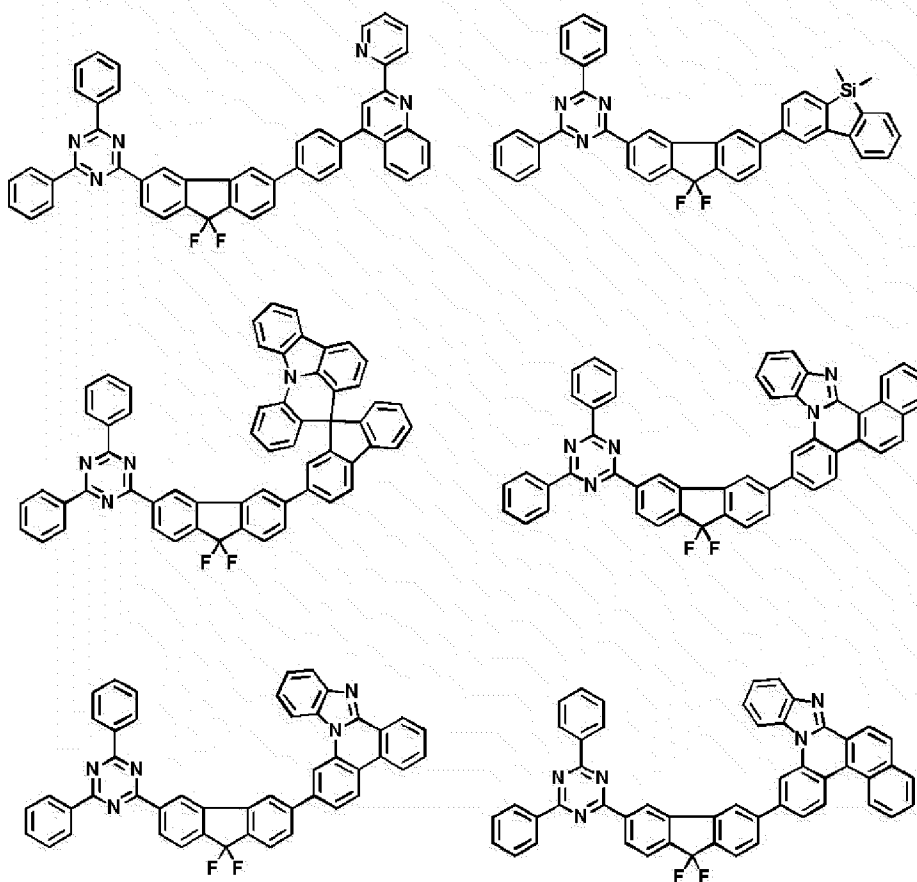


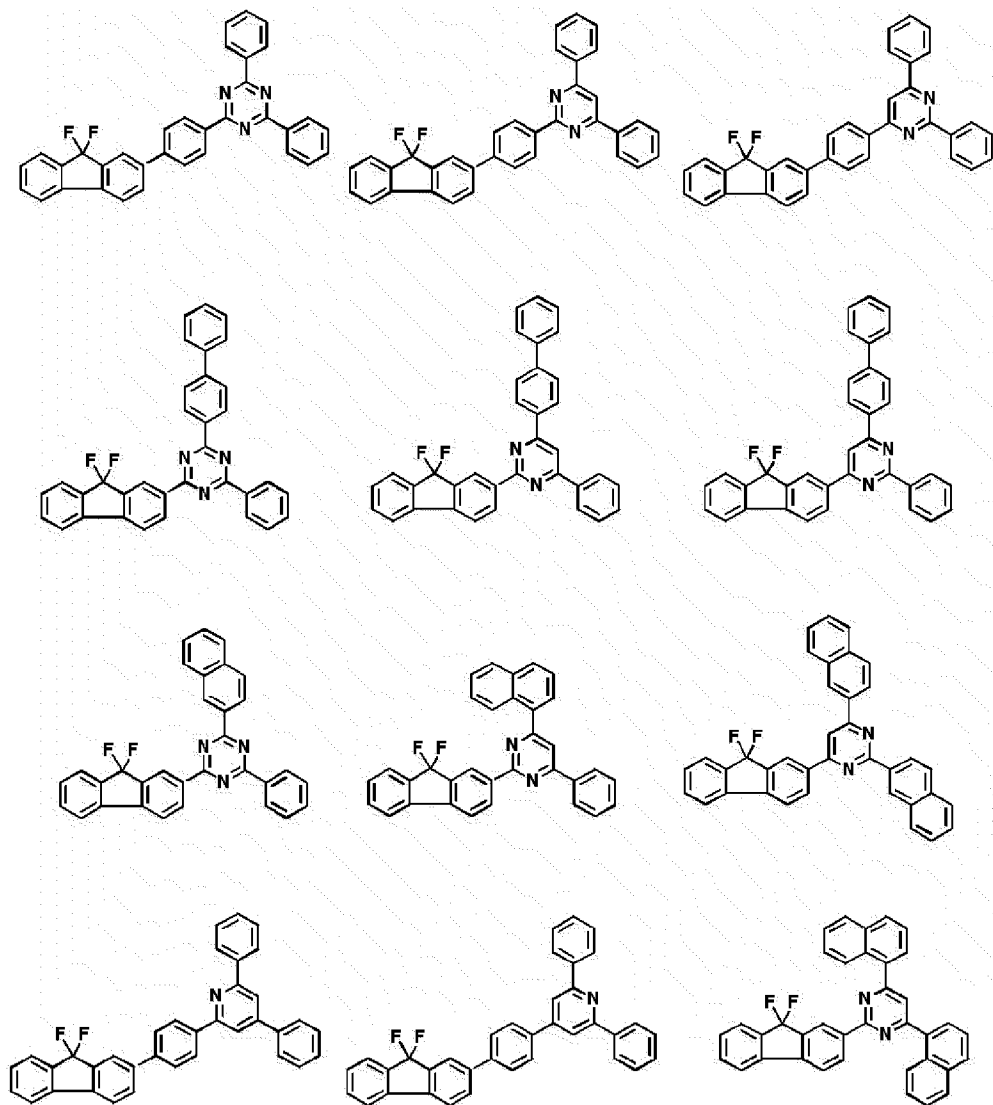


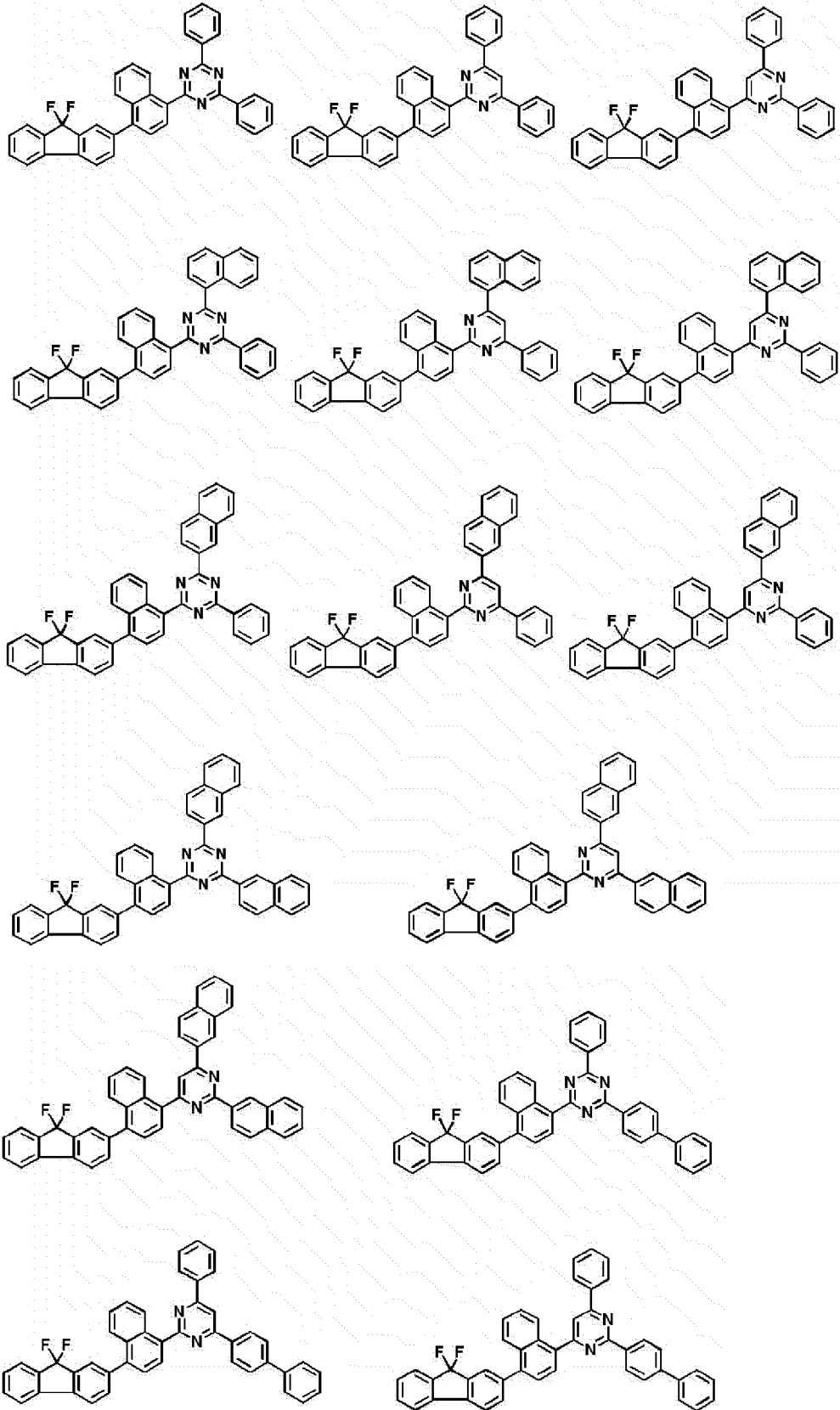


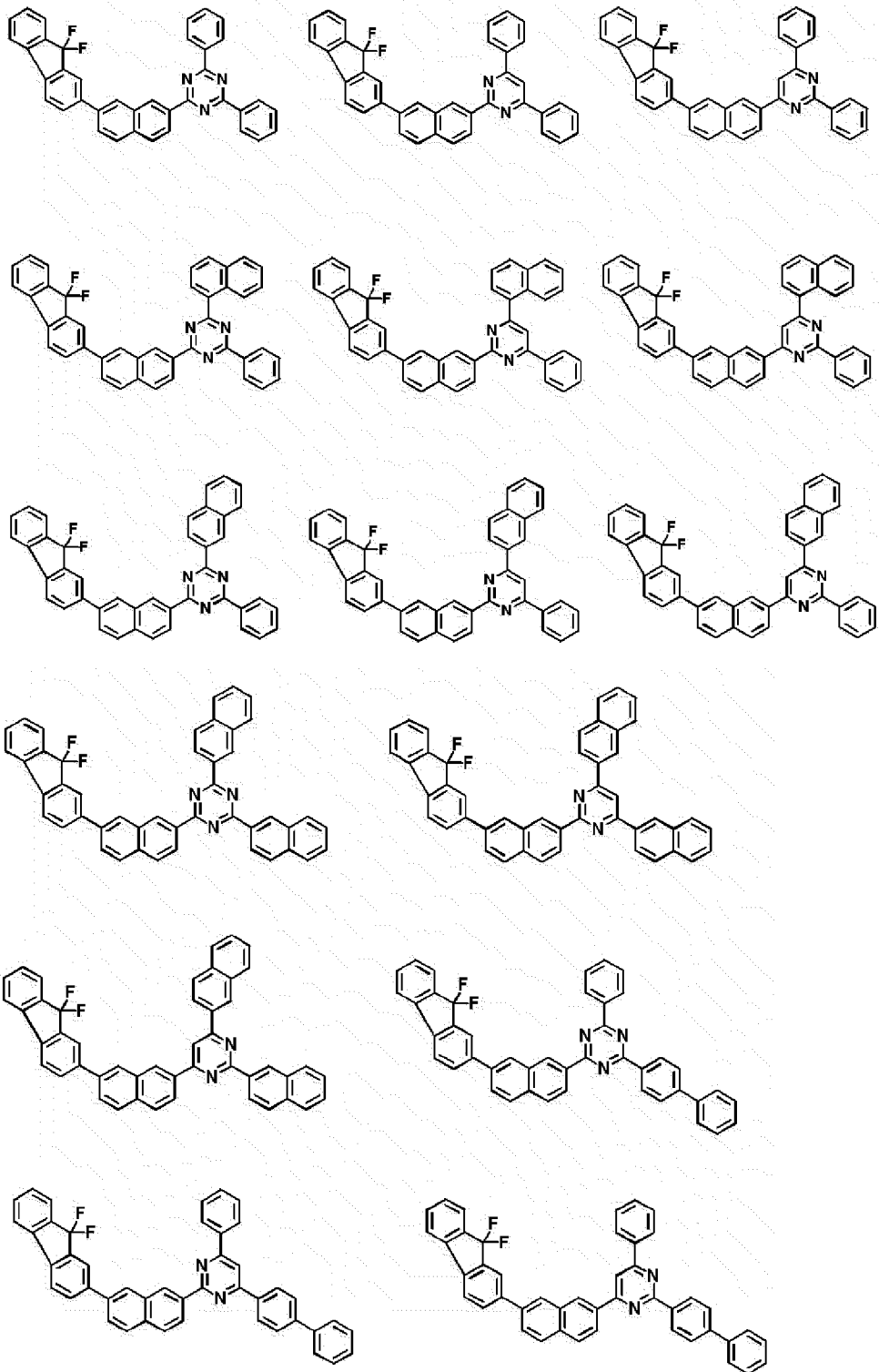


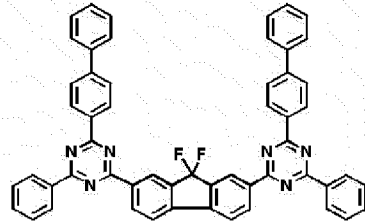
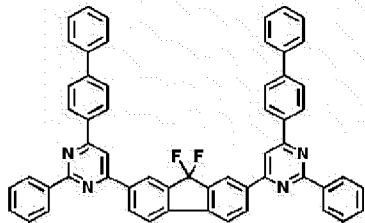
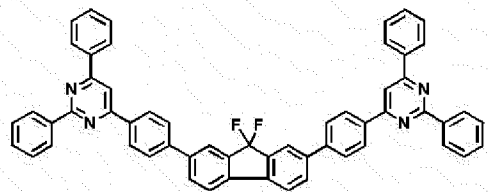
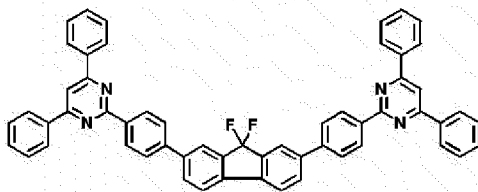
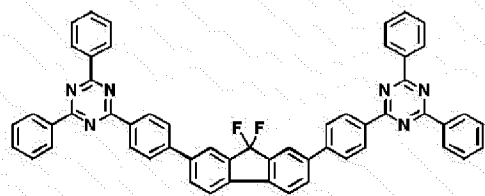
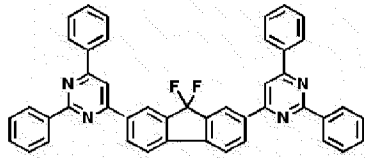
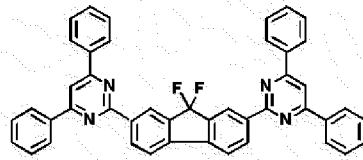
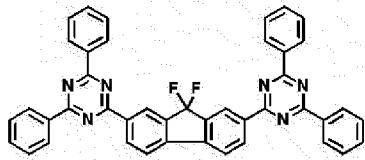


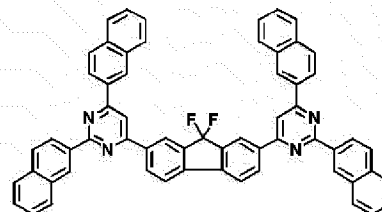
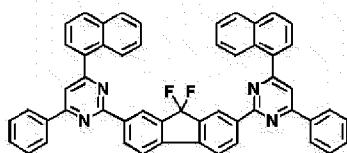
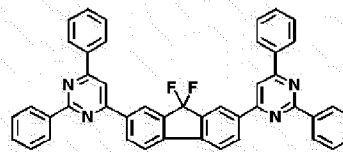
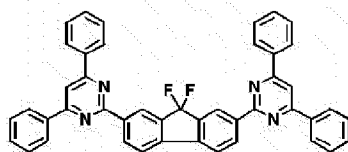
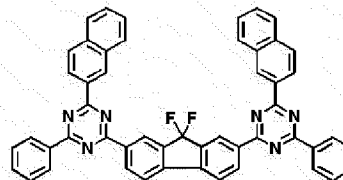
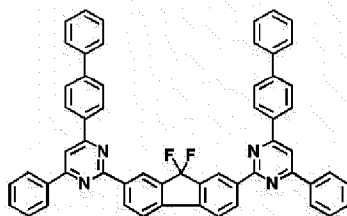
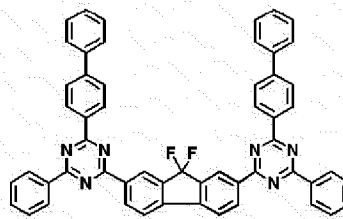
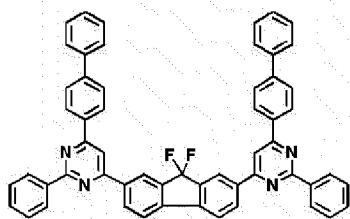


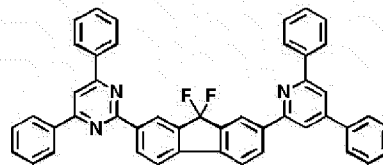
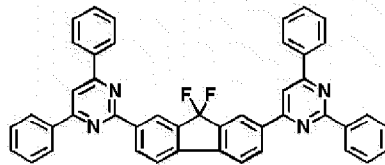
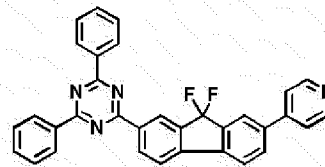
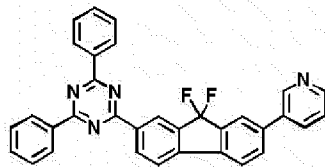
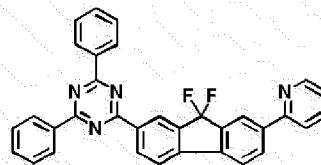
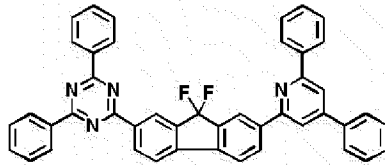
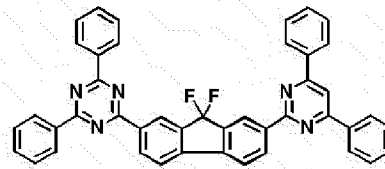
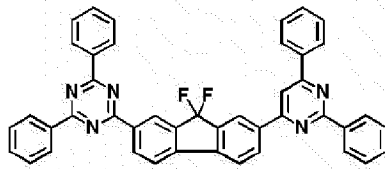


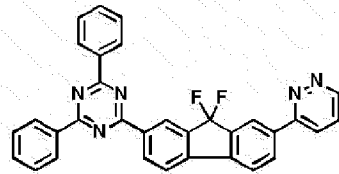
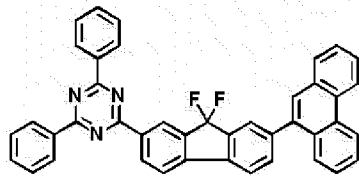
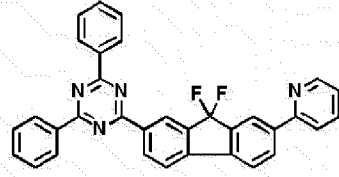
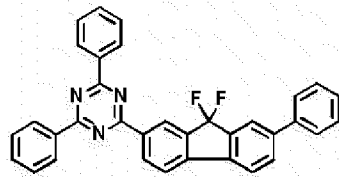
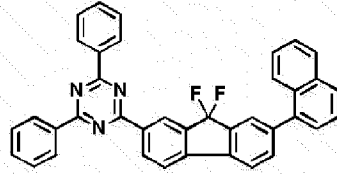
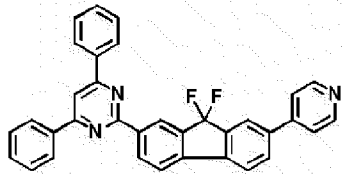
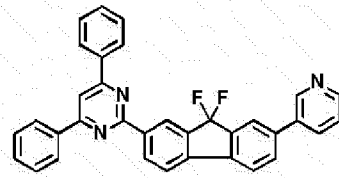
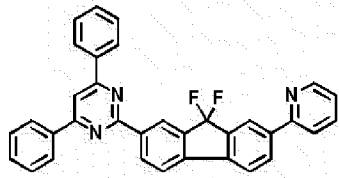




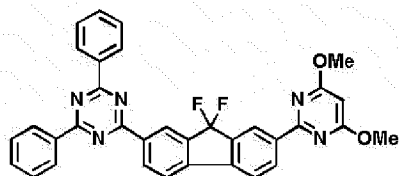
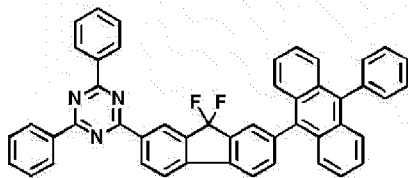
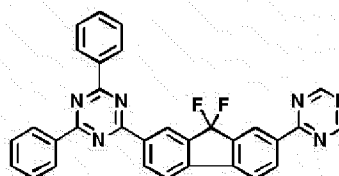
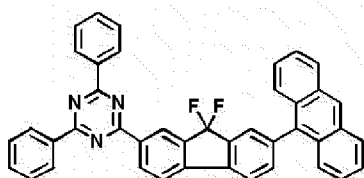
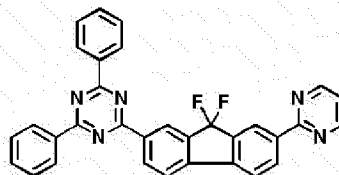
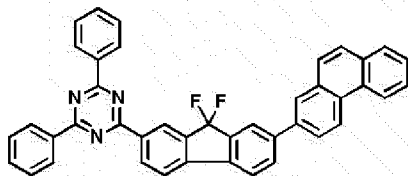
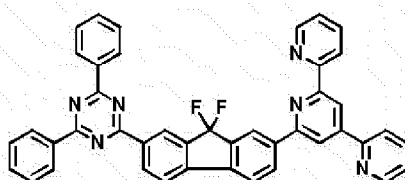
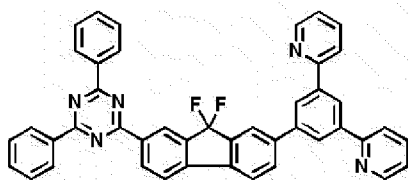


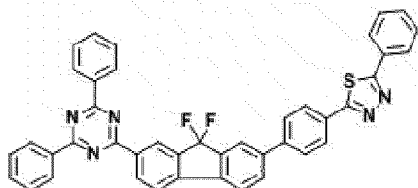
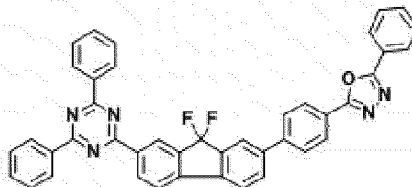
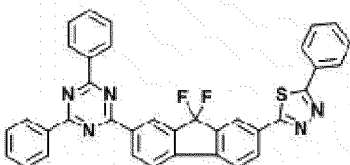
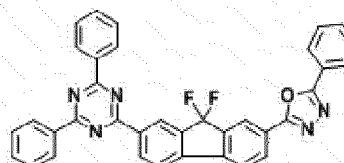
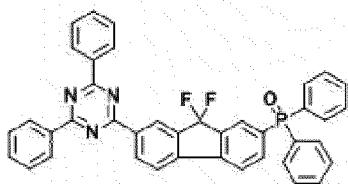
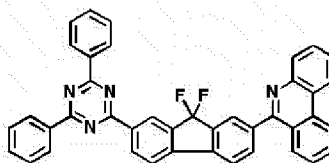
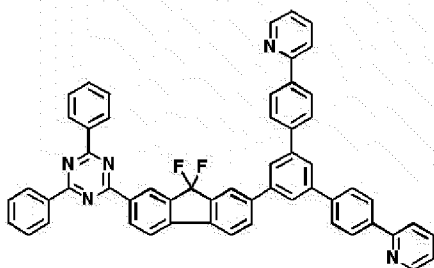
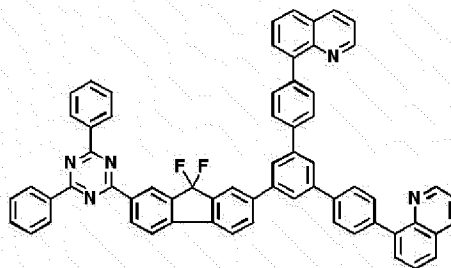
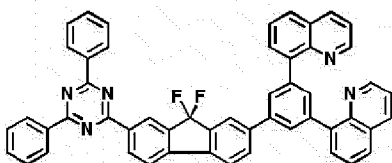
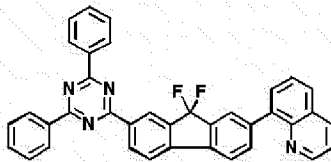
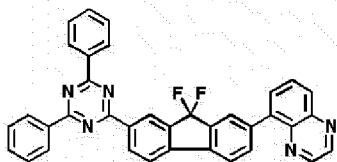
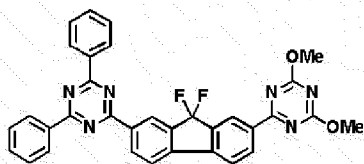
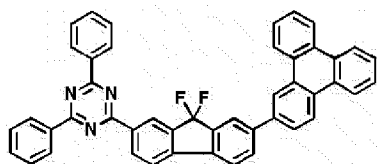


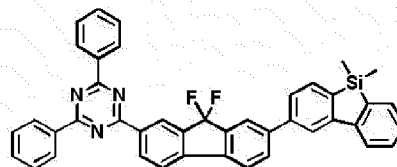
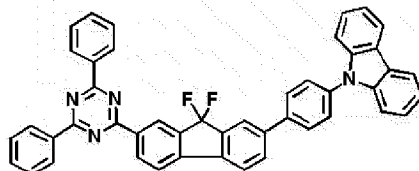
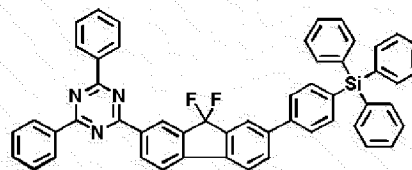
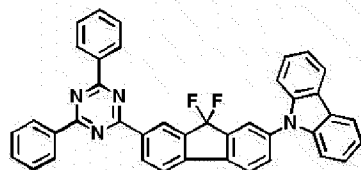
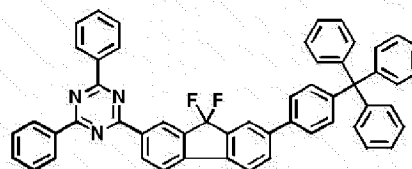
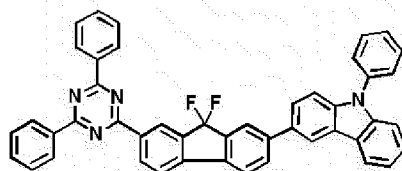
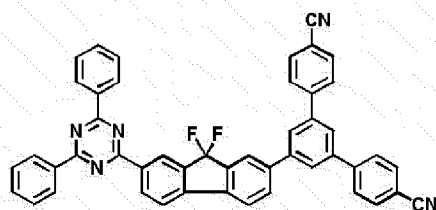
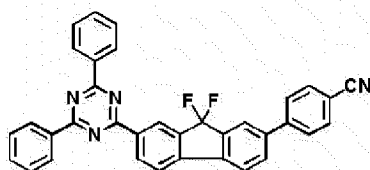
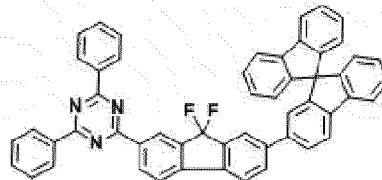
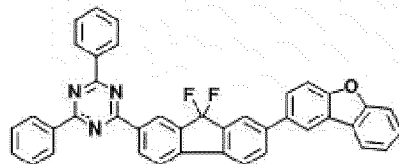
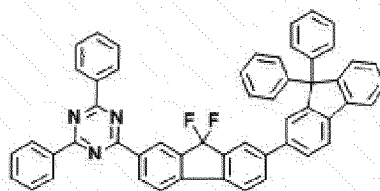
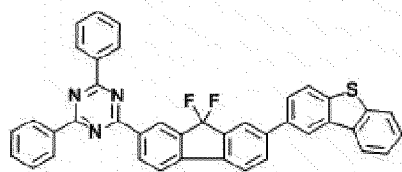


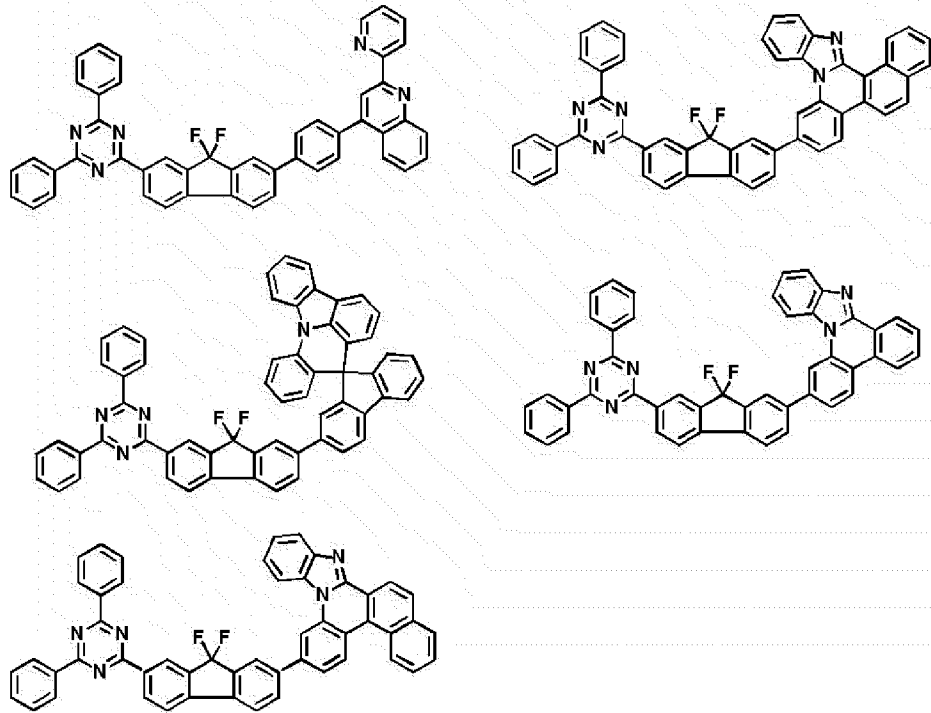




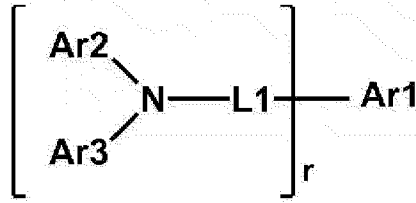








- [청구항 11] 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 10 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.
- [청구항 12] 청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층 및 전자수송층 중 적어도 한 층을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.
- [청구항 13] 청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화합물을 발광층의 호스트로서 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 14] 청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 및 정공주입과 정공수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상의 층을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.
- [청구항 15] 청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화합물을 호스트로서 포함하고, 다른 유기 화합물, 금속 또는 금속 화합물을 도펀트로 포함하는 것인 유기 발광소자.
- [청구항 16] 청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 하기 화학식 17로 표시되는 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자:  
[화학식 17]



상기 화학식 17에 있어서,

r은 1 이상의 정수이고,

Ar1은 치환 또는 비치환된 1가 이상의 벤조플루오렌기; 치환 또는 비치환된 1가 이상의 플루오란텐기; 치환 또는 비치환된 1가 이상의 파이렌기; 또는 치환 또는 비치환된 1가 이상의 크라이센기이고,

L1은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

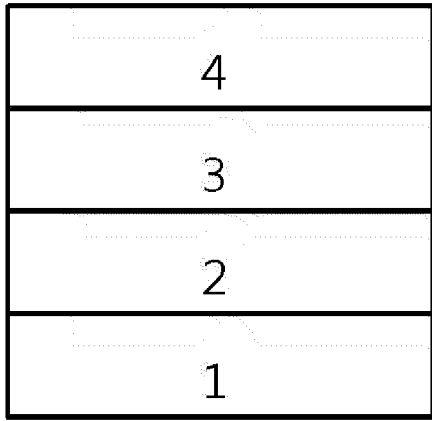
Ar2 및 Ar3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있으며,

r이 2 이상인 경우, 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하다.

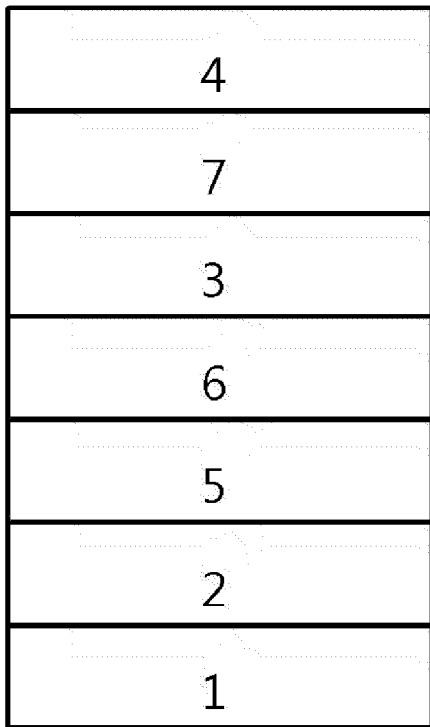
[청구항 17]

청구항 16에 있어서, 상기 L1은 직접결합이고, Ar1은 치환 또는 비치환된 2가의 파이렌기이며, Ar2 및 Ar3는 서로 같나 상이하고 각각 독립적으로 아릴기이고, r은 2인 것인 유기 발광 소자.

[도1]



[도2]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

**PCT/KR2016/010350**

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

*C07D 403/10(2006.01)i, C07D 401/10(2006.01)i, C07C 13/567(2006.01)i, C09K 11/06(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 403/10; C07D 307/33; C07D 319/06; C07D 403/14; C07D 317/16; A61K 31/415; B32B 9/04; G02B 6/12; C08G 73/22; A01N 43/50; C07D 307/06; C07D 401/10; C07C 13/567; C09K 11/06; H01L 51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above  
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal), STN(Registry, Caplus), Google &amp; Keywords: organic light emitting device, heterocycle, light emitting layer, efficiency, lifespan, driving voltage

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages   | Relevant to claim No. |
|-----------|--|-----------------------|
| X         | CN 104829599 A (SHANGHAI ZHONGQIANG PHARMACEUTICAL CO., LTD.)<br>12 August 2015<br>See paragraph [0002]; page 4, compound 6. | 1,2                   |
| A         |  | 3-17                  |
| A         | DE 19720289 A1 (HOECHST AG.) 19 November 1998<br>See abstract; claims 4, 5.  | 1-17                  |
| A         | US 8158275 B2 (IE, Yutaka et al.) 17 April 2012<br>See abstract; claims 1-13.  | 1-17                  |
| A         | JP 2004-059761 A (SUMITOMO BAKELITE CO., LTD.) 26 February 2004<br>See abstract; claims 1-6.                                 | 1-17                  |
| A         | CN 104513223 A (SHANGHAI FOREFRONT PHARMACEUTICAL., LTD.)<br>15 April 2015<br>See abstract; claims 1-10.                     | 1-17                  |
| A         | WO 2010-096462 A1 (ENANTA PHARMACEUTICALS, INC.) 26 August 2010<br>See abstract; page 151.                                   | 1-17                  |



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

"I" 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

"&amp;" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

23 DECEMBER 2016 (23.12.2016)

Date of mailing of the international search report

**23 DECEMBER 2016 (23.12.2016)**

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. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.

**PCT/KR2016/010350**

| Patent document cited in search report | Publication date | Patent family member | Publication date |
|--|------------------|----------------------|------------------|
| CN 104829599 A                         | 12/08/2015       | WO 2016-145990 A1    | 22/09/2016       |
| DE 19720289 A1                         | 19/11/1998       | NONE                 |                  |
| US 8158275 B2                          | 17/04/2012       | CN 101389634 A       | 18/03/2009       |
|  |                  | CN 101389634 B       | 30/05/2012       |
|  |                  | EP 1997821 A1        | 03/12/2008       |
|  |                  | EP 1997821 A4        | 29/09/2010       |
|  |                  | JP 2008-110957 A     | 15/05/2008       |
|  |                  | JP 5105581 B2        | 26/12/2012       |
|  |                  | KR 10-2008-0107420 A | 10/12/2008       |
|  |                  | US 2009-0240014 A1   | 24/09/2009       |
|  |                  | WO 2007-097395 A1    | 30/08/2007       |
| JP 2004-059761 A                       | 26/02/2004       | NONE                 |                  |
| CN 104513223 A                         | 15/04/2015       | WO 2016-078505 A1    | 26/05/2016       |
| WO 2010-096462 A1                      | 26/08/2010       | US 2010-0221216 A1   | 02/09/2010       |
|  |                  | US 2010-0226882 A1   | 09/09/2010       |
|  |                  | US 2010-0226883 A1   | 09/09/2010       |
|  |                  | US 8420686 B2        | 16/04/2013       |
|  |                  | US 8426458 B2        | 23/04/2013       |
|  |                  | US 8637561 B2        | 28/01/2014       |



**A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))**  
C07D 403/10(2006.01)i, C07D 401/10(2006.01)i, C07C 13/567(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

**B. 조사된 분야**

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 403/10; C07D 307/33; C07D 319/06; C07D 403/14; C07D 317/16; A61K 31/415; B32B 9/04; G02B 6/12; C08G 73/22; A01N 43/50; C07D 307/06; C07D 401/10; C07C 13/567; C09K 11/06; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC  
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus), 구글 & 키워드: 유기 발광 소자, 헤테로고리, 발광층, 효율, 수명, 구동전압

**C. 관련 문헌**

| 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재   | 관련 청구항 |
|-------|--|--------|
| X     | CN 104829599 A (SHANGHAI ZHONGQIANG PHARMACEUTICAL CO., LTD.) 2015.08.12 단락 [0002]; 페이지 4, 화합물 6 참조. | 1,2    |
| A     |  | 3-17   |
| A     | DE 19720289 A1 (HOECHST AG) 1998.11.19 요약; 청구항 4, 5 참조.  | 1-17   |
| A     | US 8158275 B2 (IE, YUTAKA 등) 2012.04.17 요약; 청구항 1-13 참조.   | 1-17   |
| A     | JP 2004-059761 A (SUMITOMO BAKELITE CO., LTD.) 2004.02.26 요약; 청구항 1-6 참조.                            | 1-17   |
| A     | CN 104513223 A (SHANGHAI FOREFRONT PHARMACEUTICAL., LTD.) 2015.04.15 요약; 청구항 1-10 참조.                | 1-17   |
| A     | WO 2010-096462 A1 (ENANTA PHARMACEUTICALS, INC) 2010.08.26 요약; 페이지 151 참조.                           | 1-17   |

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

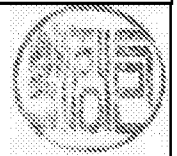
“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일  
2016년 12월 23일 (23.12.2016)

국제조사보고서 발송일  
2016년 12월 23일 (23.12.2016)

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

심사관  
박정민  
전화번호 +82-42-481-3516



| 국제조사보고서에서<br>인용된 특허문헌 | 공개일        | 대응특허문헌   | 공개일  |
|-----------------------|------------|--|--|
| CN 104829599 A        | 2015/08/12 | WO 2016-145990 A1  | 2016/09/22   |
| DE 19720289 A1        | 1998/11/19 | 없음   |  |
| US 8158275 B2         | 2012/04/17 | CN 101389634 A<br>CN 101389634 B<br>EP 1997821 A1<br>EP 1997821 A4<br>JP 2008-110957 A<br>JP 5105581 B2<br>KR 10-2008-0107420 A<br>US 2009-0240014 A1<br>WO 2007-097395 A1 | 2009/03/18<br>2012/05/30<br>2008/12/03<br>2010/09/29<br>2008/05/15<br>2012/12/26<br>2008/12/10<br>2009/09/24<br>2007/08/30 |
| JP 2004-059761 A      | 2004/02/26 | 없음   |  |
| CN 104513223 A        | 2015/04/15 | WO 2016-078505 A1  | 2016/05/26   |
| WO 2010-096462 A1     | 2010/08/26 | US 2010-0221216 A1<br>US 2010-0226882 A1<br>US 2010-0226883 A1<br>US 8420686 B2<br>US 8426458 B2<br>US 8637561 B2  | 2010/09/02<br>2010/09/09<br>2010/09/09<br>2013/04/16<br>2013/04/23<br>2014/01/28   |