



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0099510
(43) 공개일자 2018년09월05일

- | | |
|---|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0067 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2018-0021961</p> <p>(22) 출원일자 2018년02월23일
심사청구일자 없음</p> <p>(30) 우선권주장
1020170026014 2017년02월28일 대한민국(KR)
(뒷면에 계속)</p> | <p>(71) 출원인
룸엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)</p> <p>(72) 발명자
양정은
경기도 화성시 삼성1로 5길 20
오홍세
경기도 화성시 삼성1로 5길 20
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
장훈</p> |
|---|--|

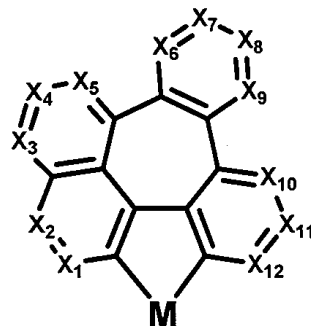
전체 청구항 수 : 총 10 항

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

(57) 요약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 양호한 열적 안정성, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/0072 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)

(72) 발명자

강희룡

경기도 화성시 삼성1로 5길 20

김영길

경기도 화성시 삼성1로 5길 20

조상희

경기도 화성시 삼성1로 5길 20

(30) 우선권주장

1020170124285 2017년09월26일 대한민국(KR)

1020170180988 2017년12월27일 대한민국(KR)

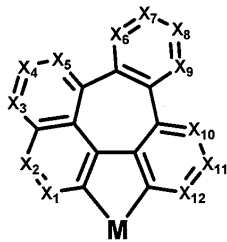
명세서

청구범위

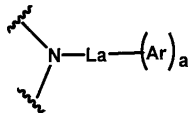
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,



M은 , O 또는 S이고;

X₁ 내지 X₁₂는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이며;

La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

Ar 및 R₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴 실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아 릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또 는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상 의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a는 1 또는 2의 정수이고, a가 2인 경우, 각각의 Ar은 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 La, Ar 및 R₁에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원) 헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 치 환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알 킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클 로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리

(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

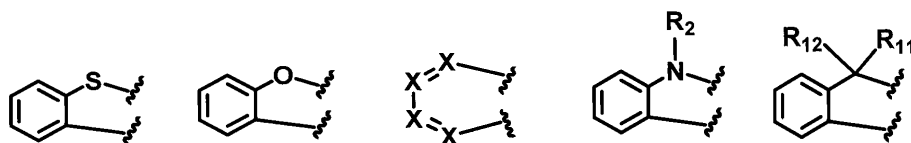
청구항 3

제1항에 있어서, Ar이 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미딘일, 치환 또는 비치환된 아세나프토피리미딘일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴, 치환 또는 비치환된 피라졸릴, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸리닐, 치환 또는 비치환된 페난트로이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 디페닐아미노, 치환 또는 비치환된 페닐비페닐아미노, 치환 또는 비치환된 플루오레닐페닐아미노, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서, X_1 내지 X_{12} 중 인접한 두 개가 CR_1 이고, 인접한 두 개의 R_1 이 하기 화학식 2 내지 6 중 어느 하나로 융합되어 고리를 형성하며, 상기 고리는 화학식 1로 표시되는 하나의 화합물에서 하나 이상 형성되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5] [화학식 6]



상기 화학식 2 내지 6에서,

R_2 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고,

X는 N 또는 CH이며,

R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

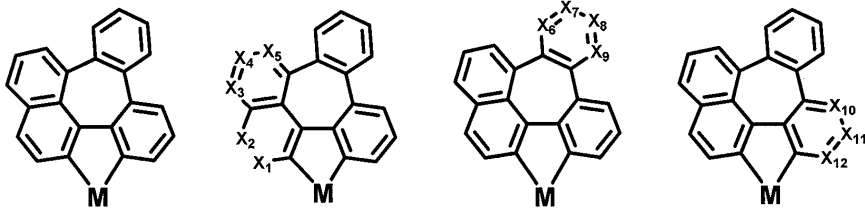


는 CR_1 에서의 C와 R_1 의 연결 부위를 나타낸다.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 7 내지 10 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 7] [화학식 8] [화학식 9] [화학식 10]

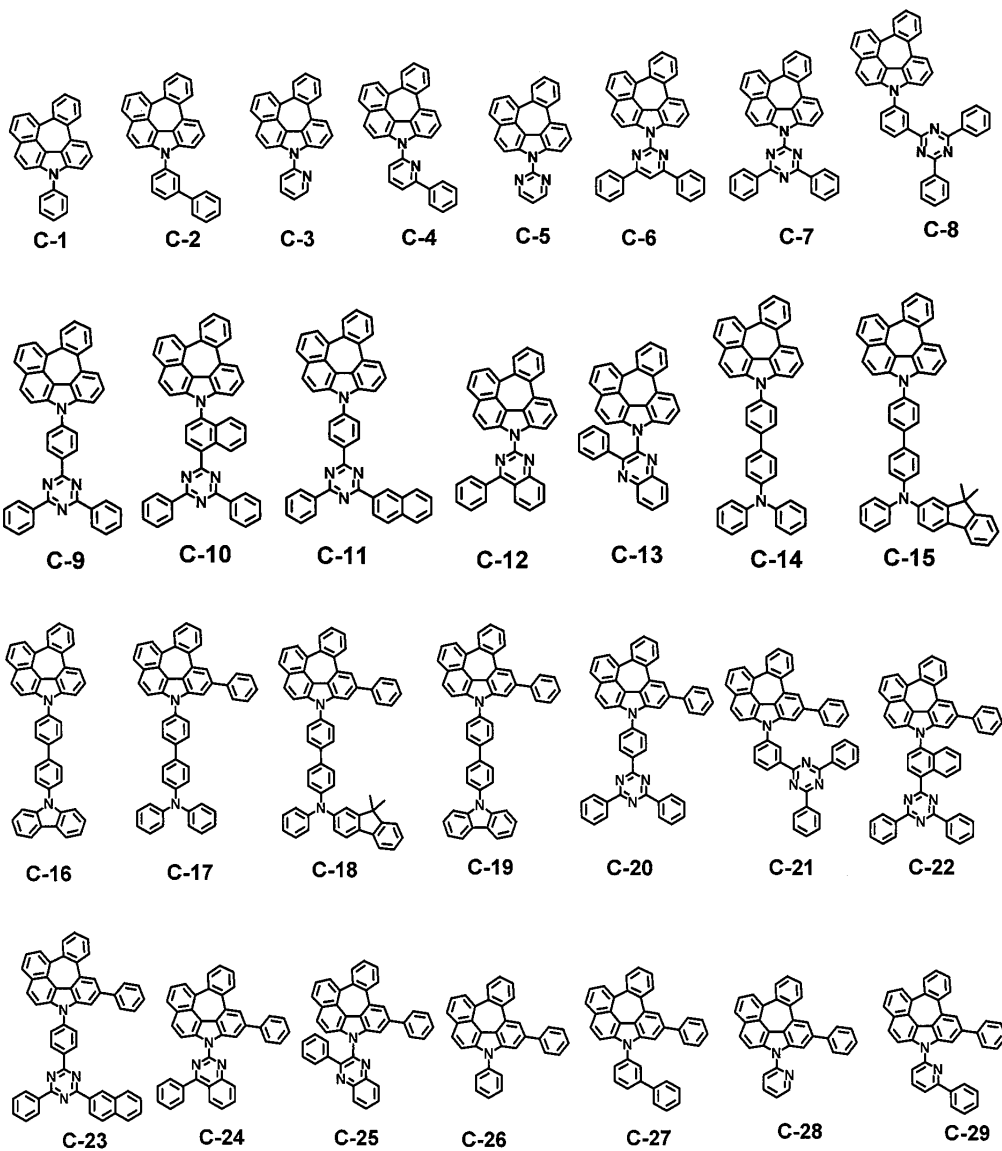


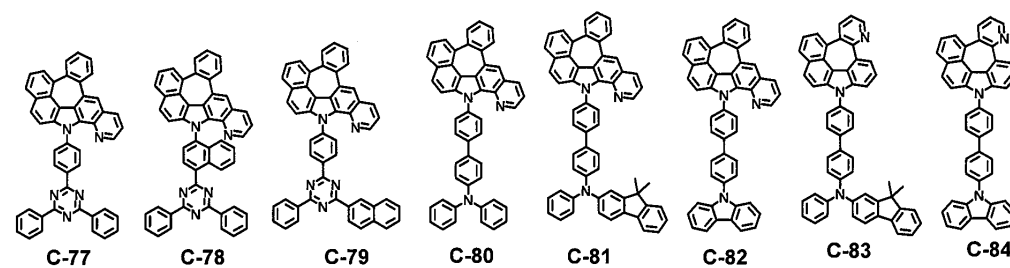
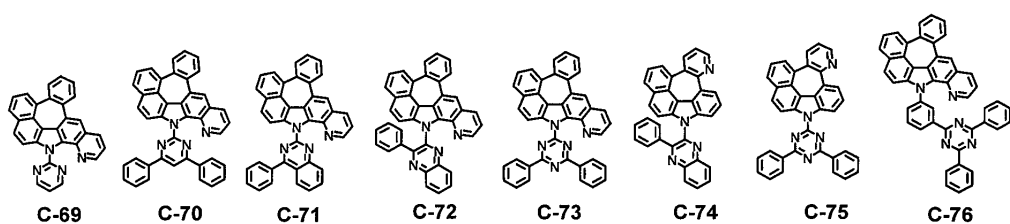
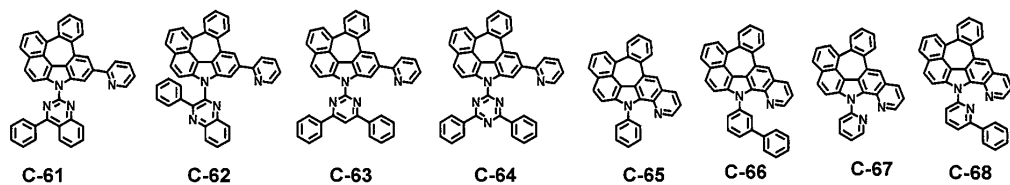
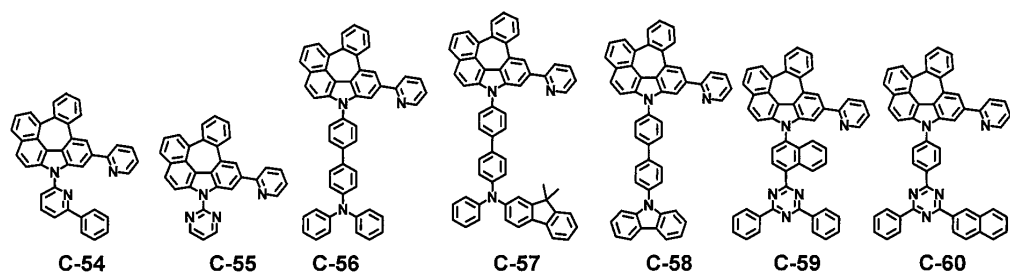
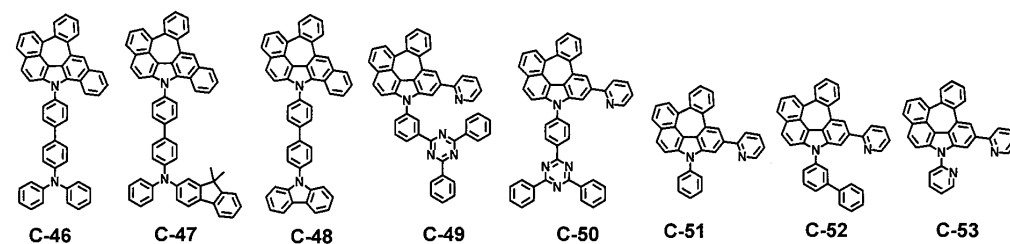
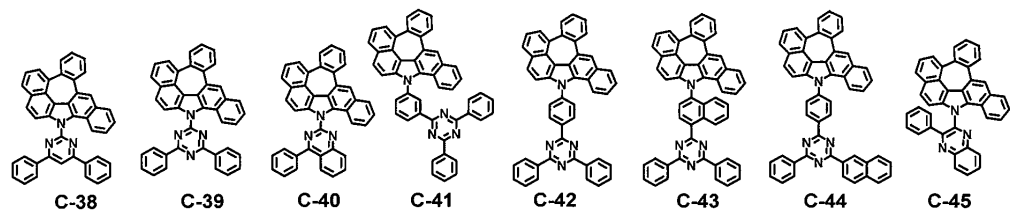
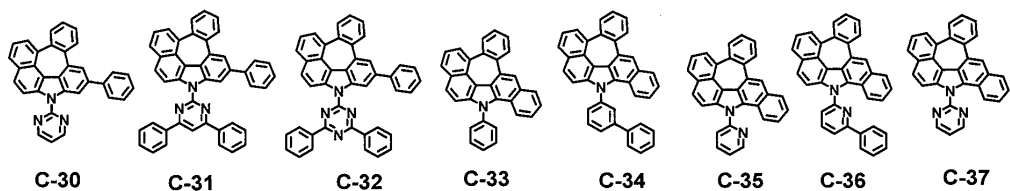
상기 화학식 7 내지 10에서,

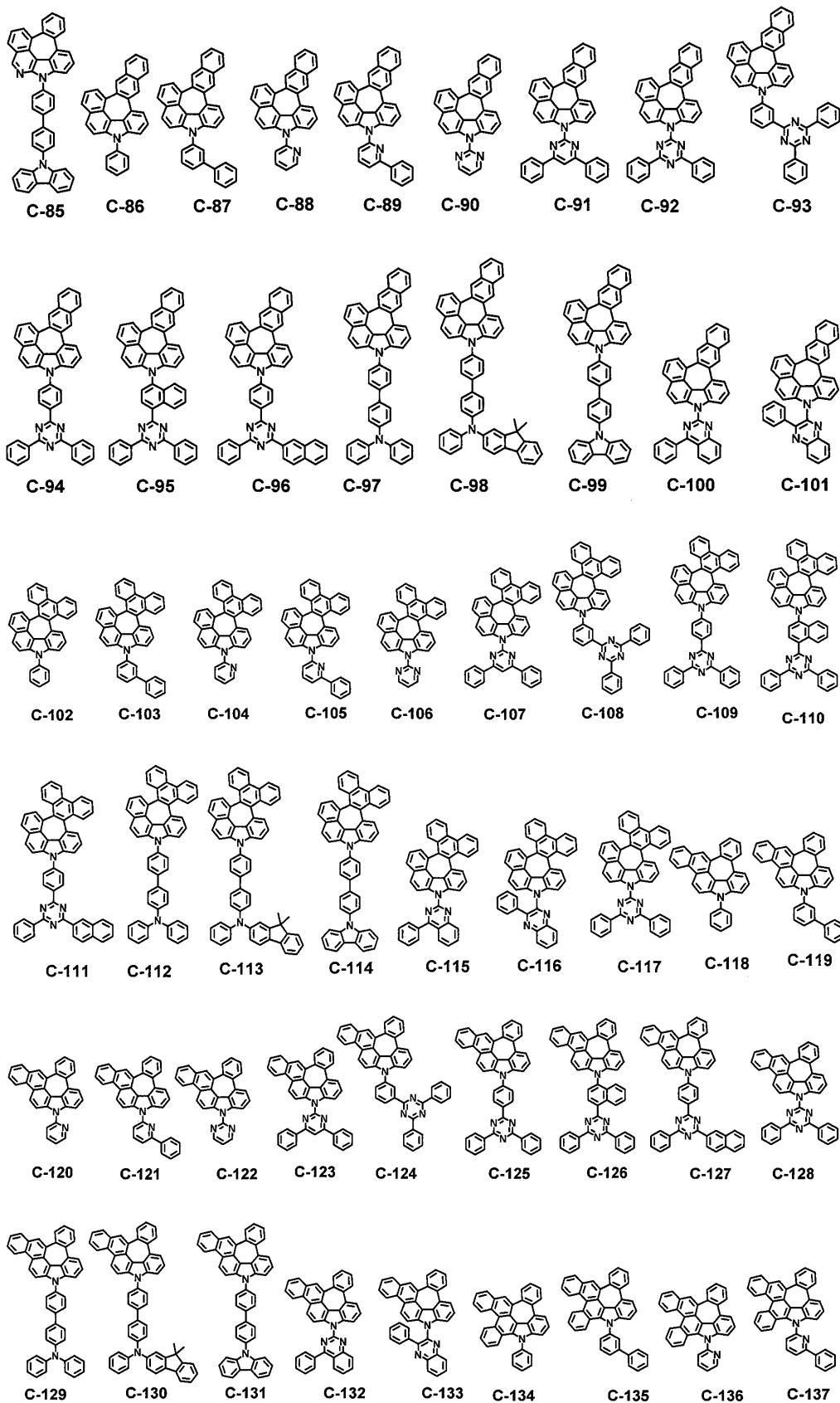
X₁ 내지 X₁₂, 및 M은 제1항에서 정의된 바와 같다.

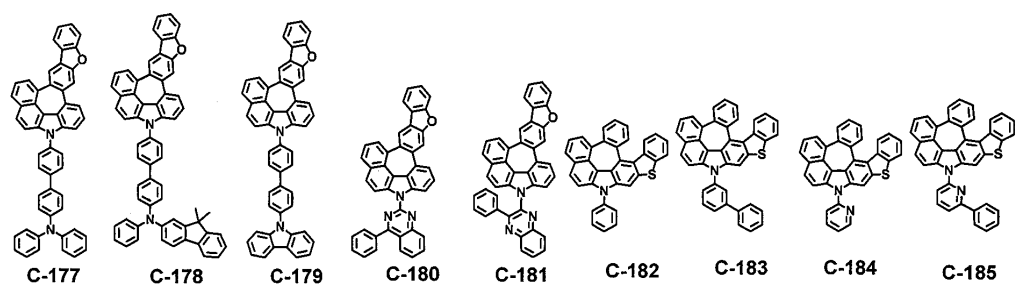
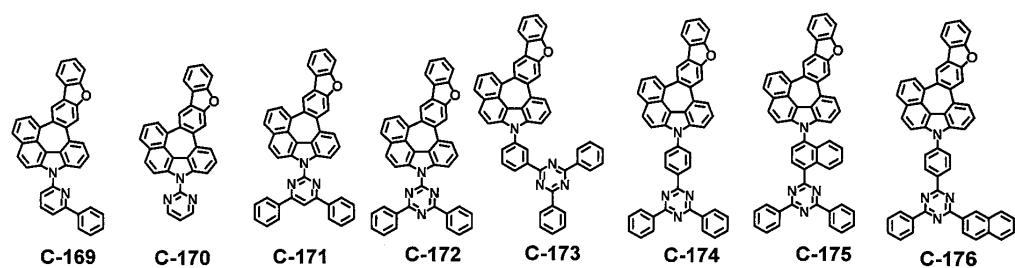
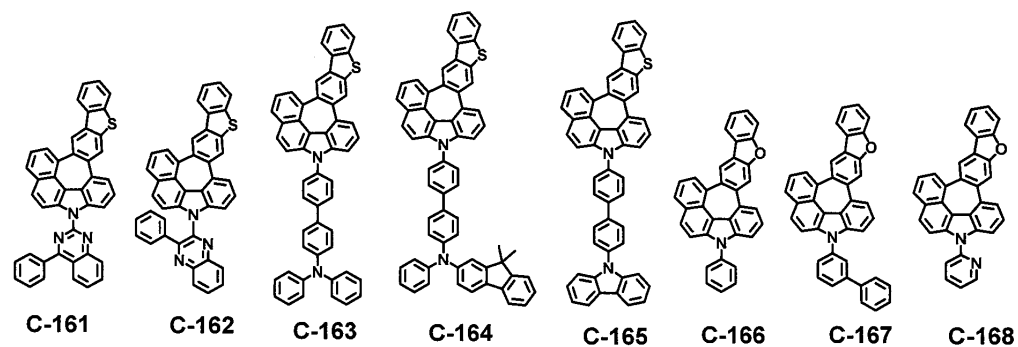
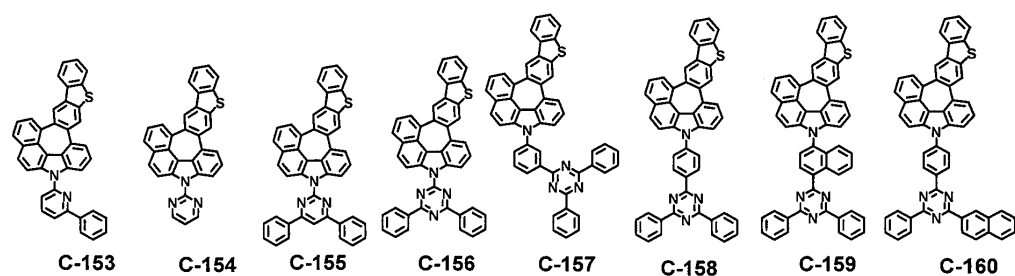
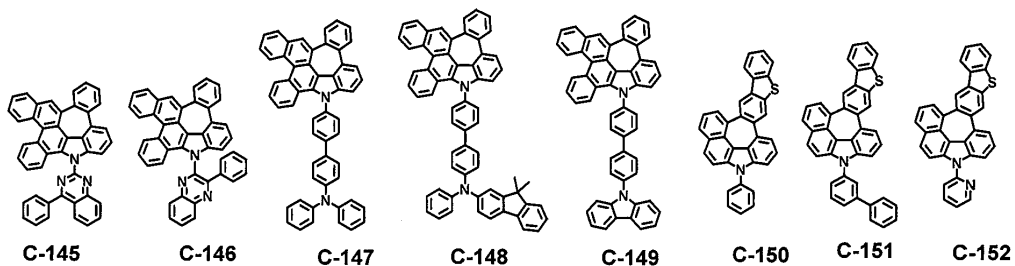
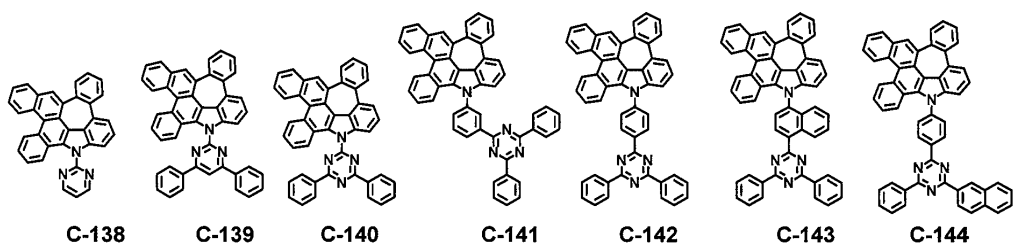
청구항 6

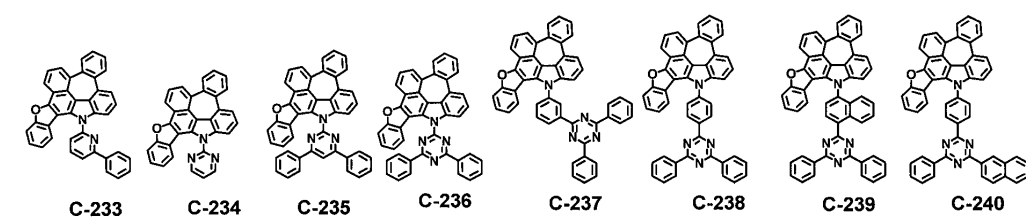
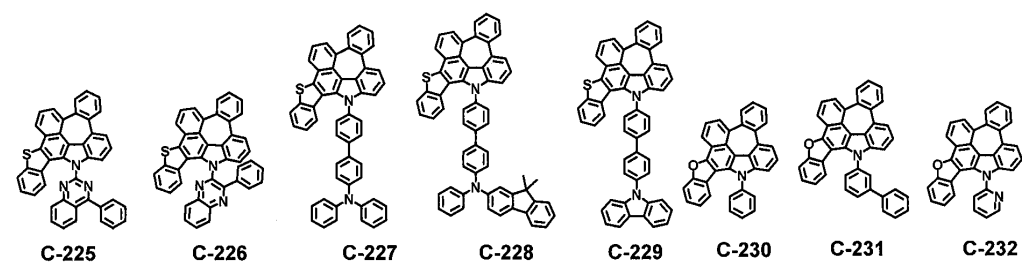
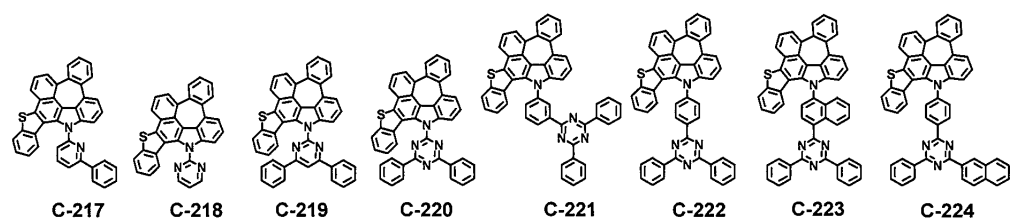
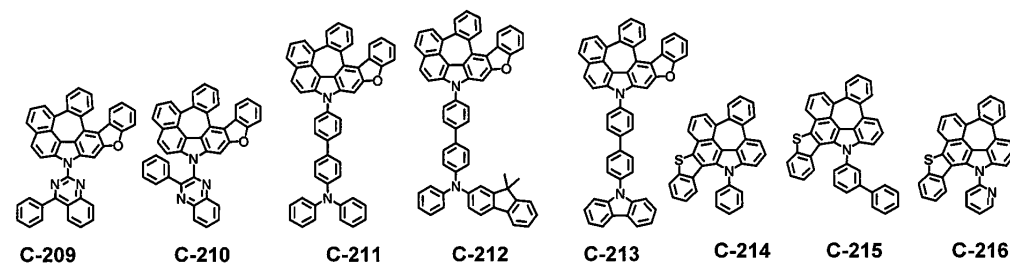
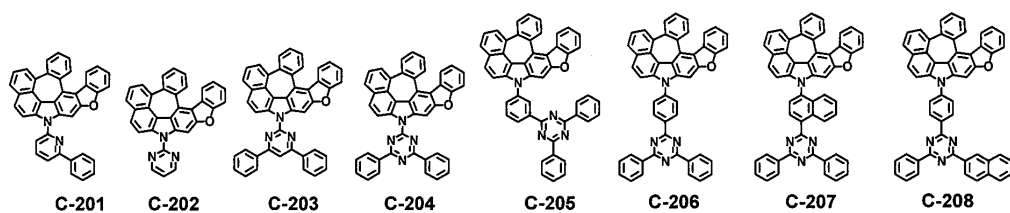
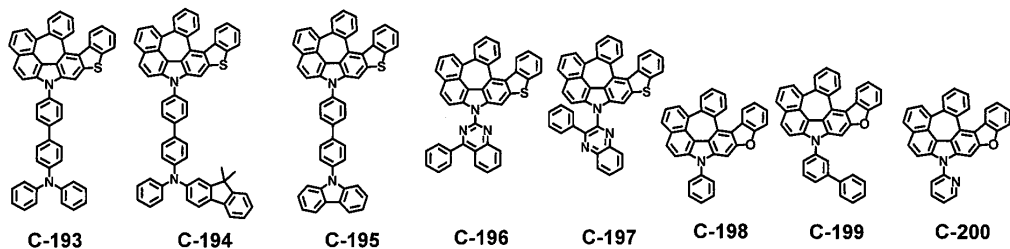
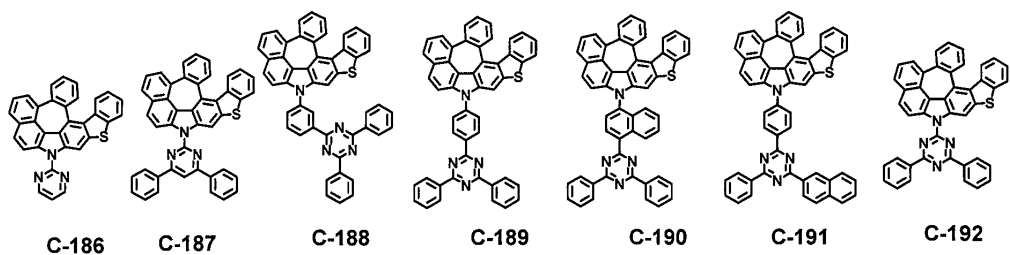
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

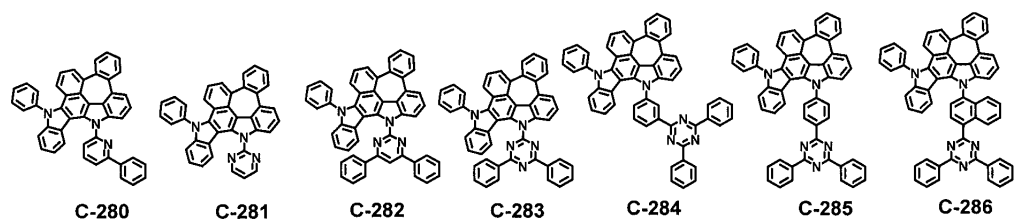
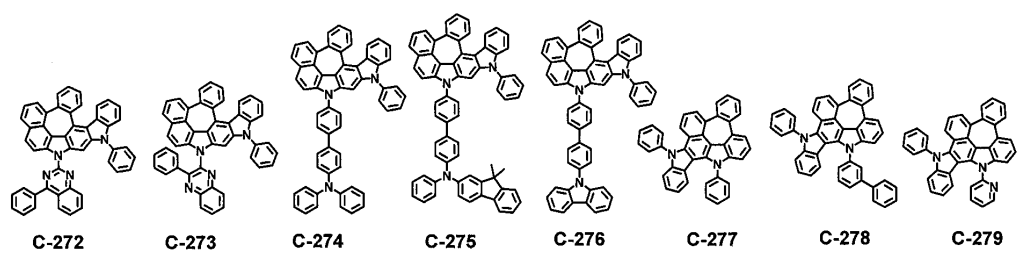
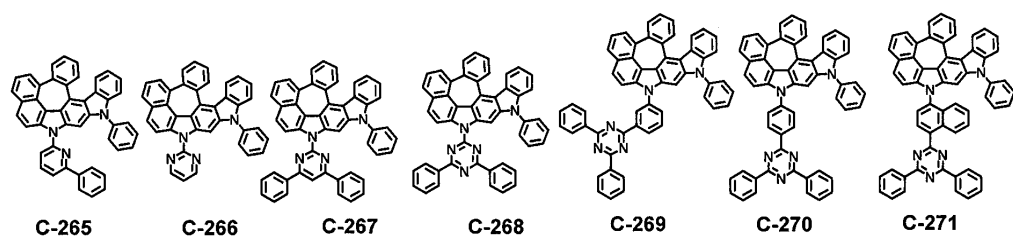
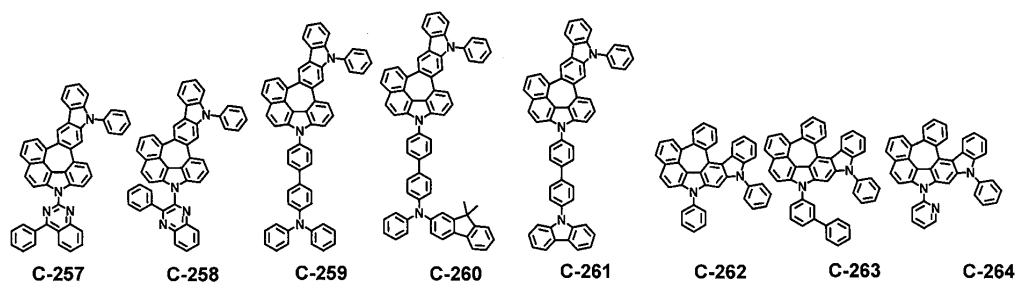
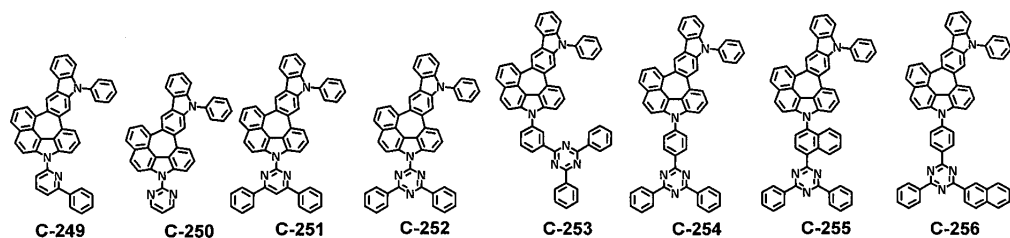
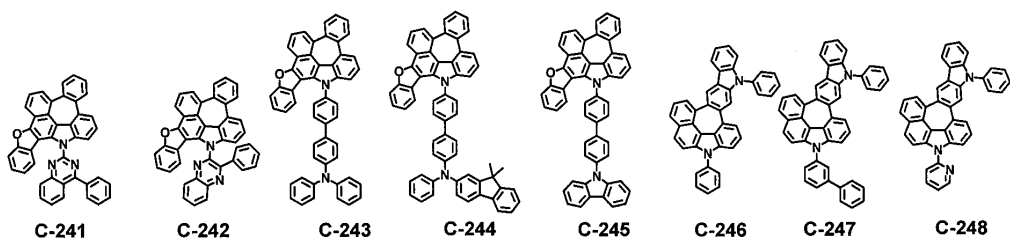


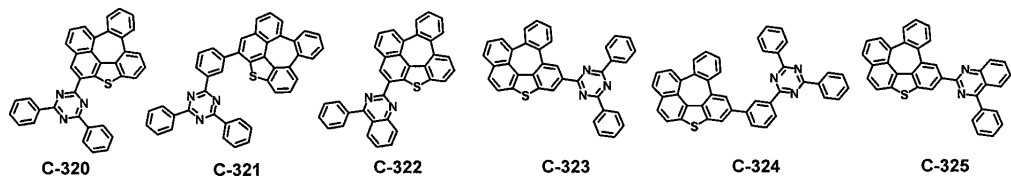
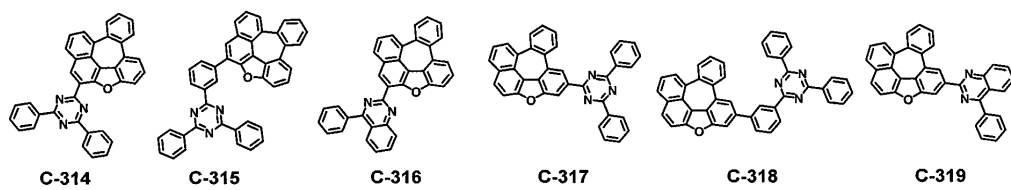
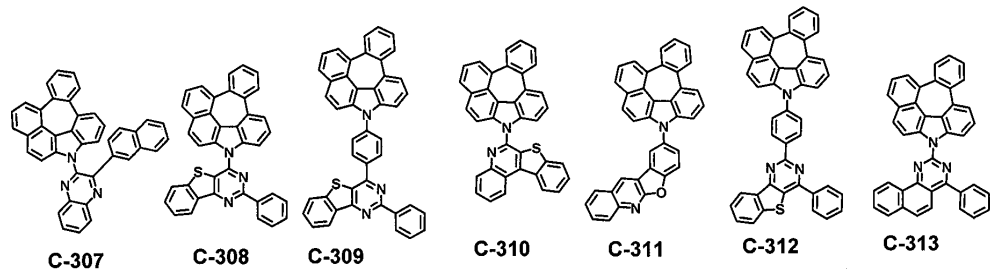
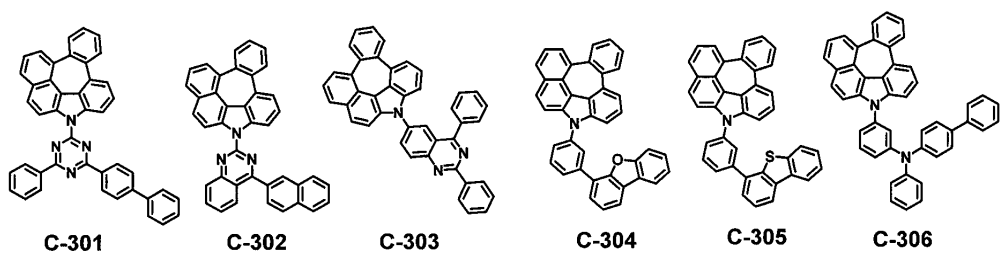
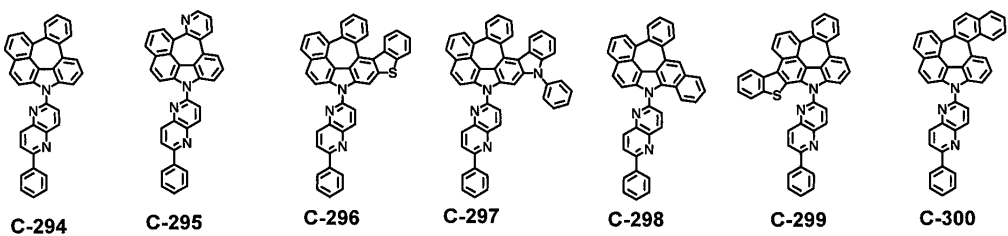
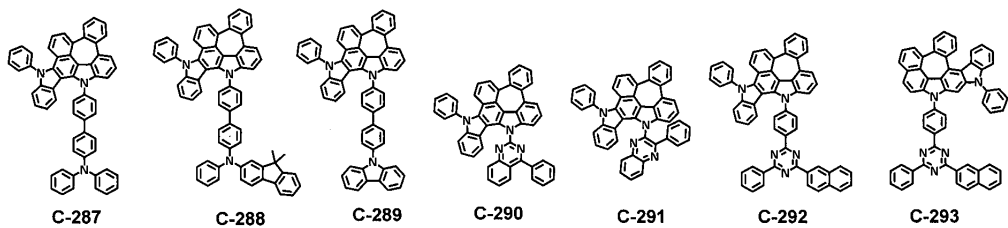


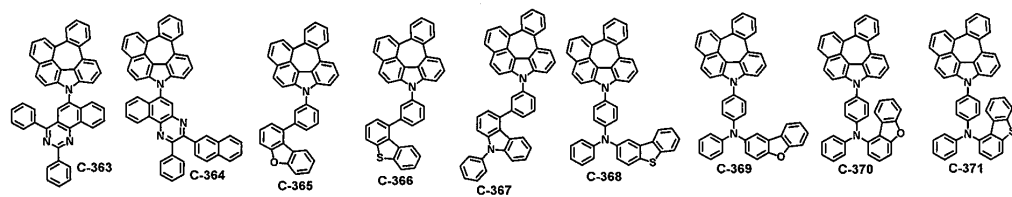
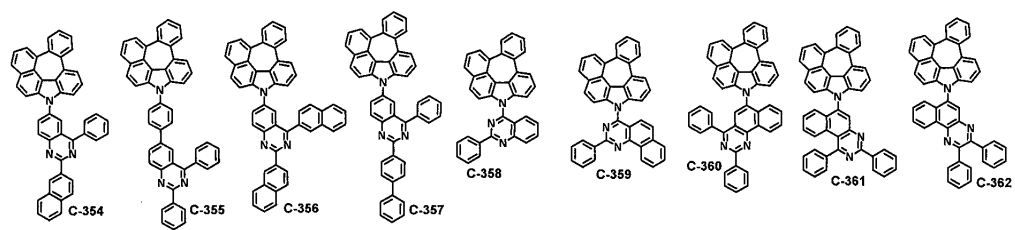
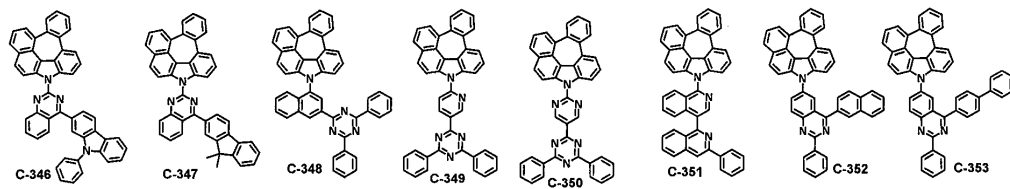
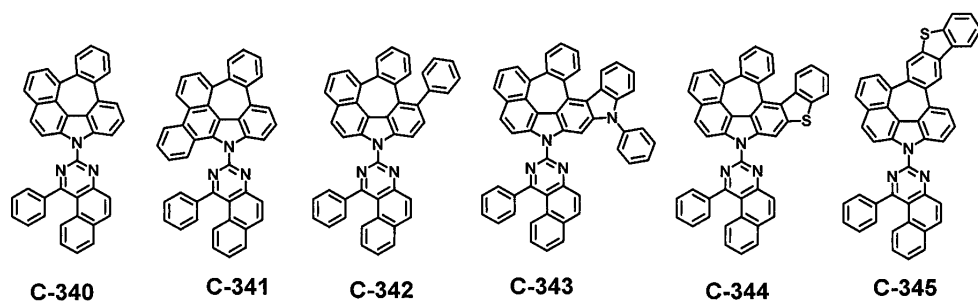
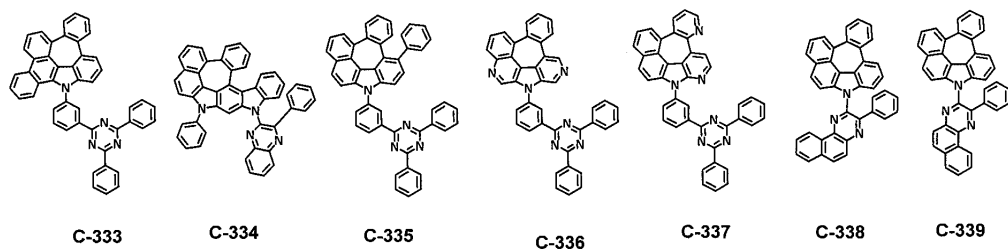
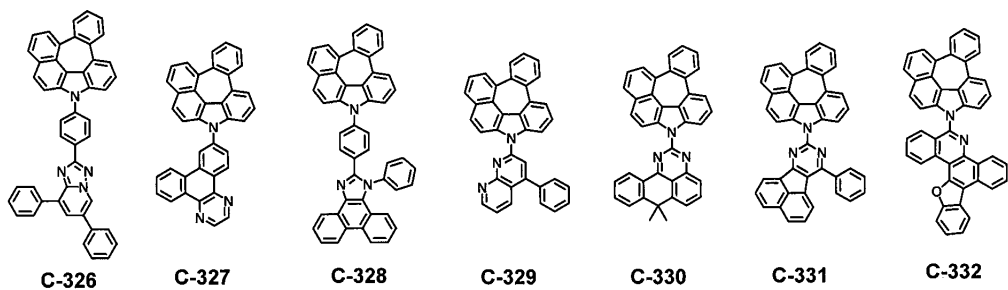


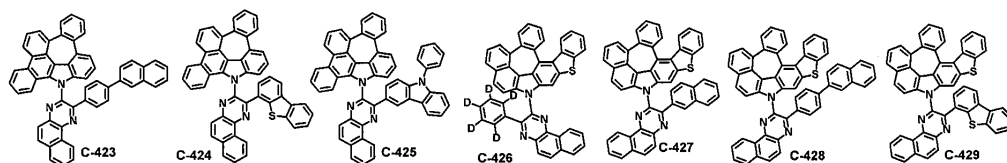
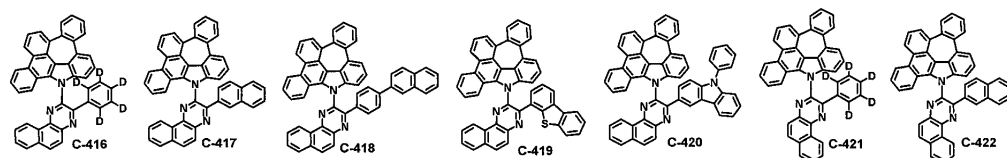
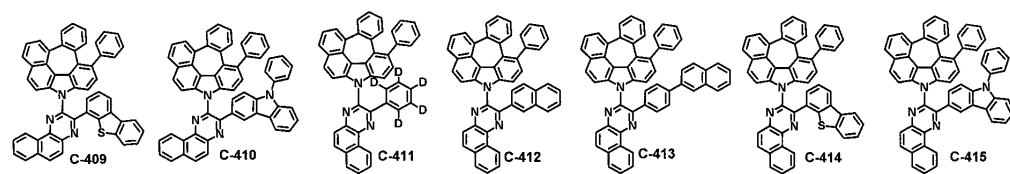
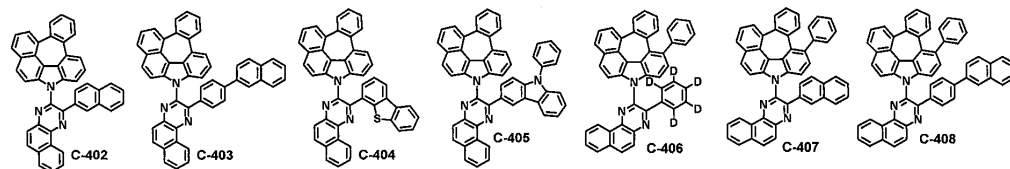
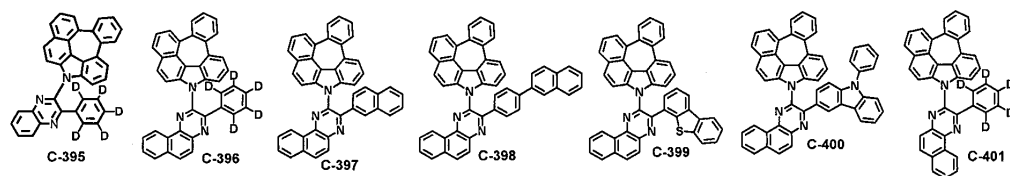
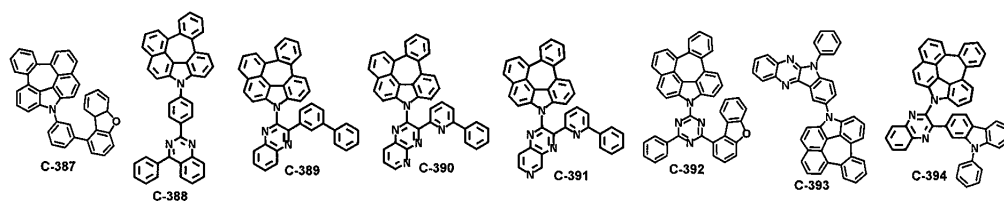
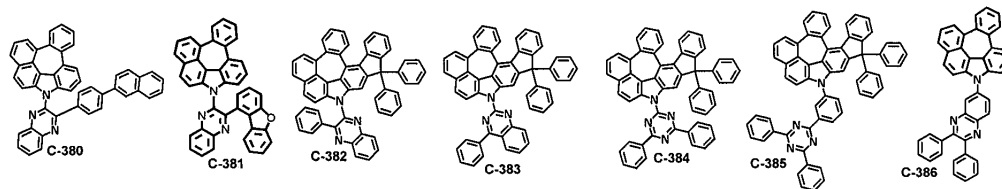
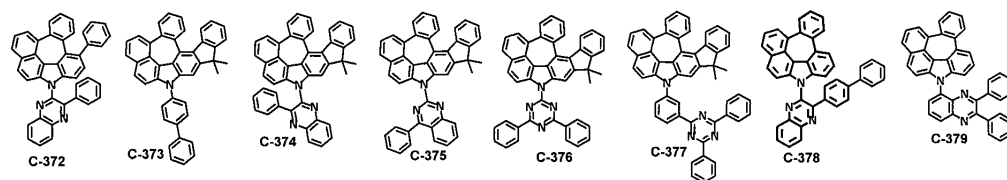


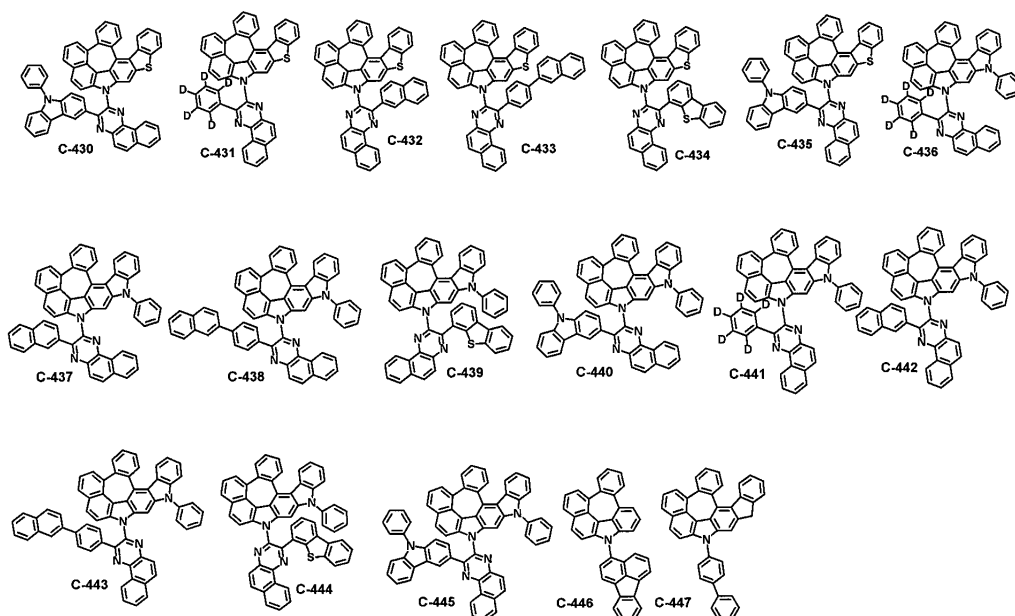












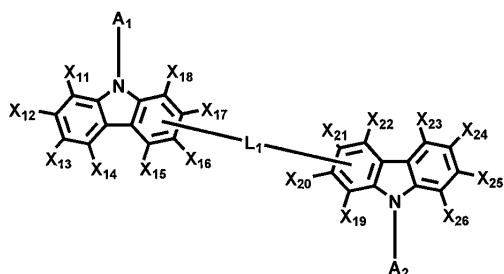
청구항 7

제1항에 기재된 화학식 1로 표시되는 화합물 및 1종 이상의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자용 복합 재료.

청구항 8

제7항에 있어서, 상기 1종 이상의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 11로 표시되는 화합물 중 1종 이상인, 유기 전계 발광 소자용 복합 재료.

[화학식 11]



상기 화학식 11에서,

A_1 및 A_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

L_1 은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이며;

X_{11} 내지 X_{26} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

청구항 9

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층 및 전자 전달 대역 중 하나 이상의 층에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device; EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device)는 유기 발광재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입재료, 정공전달재료, 정공보조재료, 발광보조재료, 전자차단재료, 발광재료, 전자버퍼재료, 정공차단재료, 전자전달재료, 전자주입재료 등으로 나뉘어질 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광재료도 있다. 또한, 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이를 위하여 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야 하며, 진공증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야 하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형 박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접한 다른 층의 재료들과는 접착력이 좋은 반면 층간 이동은 하지 않아야 한다.

[0005] 그 밖에, 정공 전달층, 버퍼층, 전자 전달층 등에 있어서도 열적 안정성이 양호하고, 유기 전계 발광 소자의 성능, 예컨대 구동 전압, 발광 효율, 수명 특성을 개선할 수 있는 재료의 개발이 요구된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

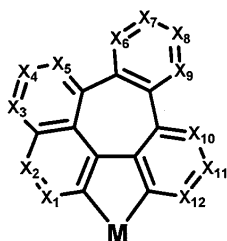
[0006] 본원의 목적은, 양호한 열적 안정성, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

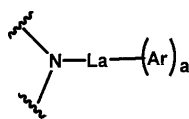
[0007] 낮은 Tg를 갖는 화합물은 박막 내에서의 전하 이동성을 감소시키고, OLED 소자의 성능을 저하시킬 수 있다. 이에, 본 발명자들은 예의 연구한 결과, 평면 형태의 메인 코어를 가짐으로써 진공 증착 층에서의 파이-파이 스택

킹(pi-pi stacking)을 도울 수 있어 빠른 전하 이동성을 초래할 수 있고, 상대적으로 낮은 분자량에도 불구하고 높은 유리 전이 온도(Tg)를 가져 우수한 형태학적 안정성(morphological stability)을 제공할 수 있는 새로운 유기 전계 발광 화합물을 개발하였다. 구체적으로 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,



M은 , O 또는 S이고;

X₁ 내지 X₁₂는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이며;

La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

Ar 및 R₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴 실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아 릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또 는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a는 1 또는 2의 정수이고, a가 2인 경우, 각각의 Ar은 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전 계 발광 소자를 제공할 수 있다. 이와 함께 또는 선택적으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 유사한 분 자량의 다른 유기 전계 발광 화합물 대비 열적 안정성이 우수하다.

도면의 간단한 설명

도 1은, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

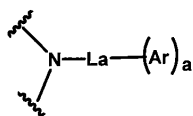
본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

[0021] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등 일 수 있다.

[0022] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층에 포함될 수 있으며, 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로 포함될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 전달 대역에 포함될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니지만, 화학식 1의 화합물은 전자 버퍼층에 포함될 수 있다.

[0023] 본원에서 "유기 전계 발광 소자용 복합 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 2종 이상의 재료가 함께 존재하거나 함께 존재할 수 있도록 준비된 것을 의미한다. 여기서, "함께 존재"한다고 함은 2종 이상의 재료가 혼합된 상태만을 의미하지는 않고, 서로 구분되어 있는 상태도 포함한다. 또한, 유기 전계 발광 소자용 복합 재료는 유기 전계 발광 소자에 포함되기 전 (예를 들면, 증착 전)의 재료뿐만 아니라, 유기 전계 발광 소자에 포함된 (예를 들면, 증착 후) 재료도 포괄하는 개념이다. 예를 들어, 상기 유기 전계 발광 소자용 복합 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료(호스트 재료 및 도판트 재료), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료 및 전자 주입 재료 중 2 이상을 포함할 수 있다. 또는, 2종 이상의 정공 주입 재료, 2종 이상의 정공 전달 재료, 2종 이상의 정공 보조 재료, 2종 이상의 발광 보조 재료, 2종 이상의 전자 차단 재료, 2종 이상의 발광 재료(호스트 재료 및 도판트 재료), 2종 이상의 전자 버퍼 재료, 2종 이상의 정공 차단 재료, 2종 이상의 전자 전달 재료, 또는 2종 이상의 전자 주입 재료를 포함할 수 있다. 본원의 유기 전계 발광 소자용 복합 재료는 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있는데, 상기 복합 재료에 포함된 2종 이상의 재료는 하나의 층에 함께 포함될 수도 있고, 각각 다른 층에 포함될 수도 있다. 2종 이상의 재료가 하나의 층에 포함되는 경우, 혼합증착되어 층을 형성할 수도 있고, 별도로 동시에 공증착되어 층을 형성할 수도 있다.

[0024] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.



[0025] 상기 화학식 1에서, M은 N , O 또는 S 이다.

[0026] 상기 화학식 1에서, X_1 내지 X_{12} 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_1 이다. 본원의 일 양태에 따르면, X_1 내지 X_{12} 는 모두 CR_1 일 수 있고, 본원의 다른 일 양태에 따르면, X_1 내지 X_{12} 중 어느 하나는 N 일 수 있고, 본원의 또 다른 일 양태에 따르면, 두 개의 X_1 내지 X_{12} 는 N 일 수 있다.

[0027] 상기 화학식 1에서, La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며, 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌이다. 상기 헤테로아릴렌은 질소, 산소 및 황 중 하나 이상을 포함할 수 있으며, 바람직하게는 질소 및 황 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, La는 단일 결합, 페닐렌, 나프틸렌, 비페닐렌, 피리딜렌, 피리미디닐렌, 트리아지닐렌, 이소퀴놀리닐렌, 퀴나졸리닐렌, 나프티리디닐렌, 퀴녹살리닐렌, 벤조퀴녹살리닐렌, 인돌로퀴녹살리닐렌, 벤조티에노피리미디닐렌, 또는 벤조퀴나졸리닐렌일 수 있다.

[0028] 상기 화학식 1에서, Ar 및 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으

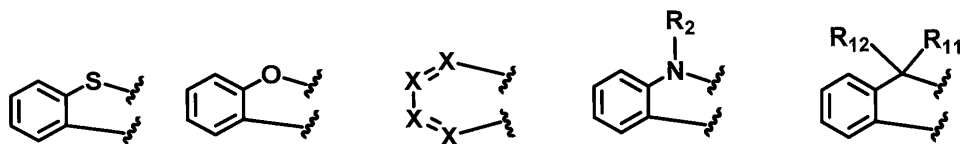
로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

[0029] 상기 Ar은 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노일 수 있고, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C18)아릴, (C1-C10)알킬 및/또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노일 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미딘일, 치환 또는 비치환된 아세나프토피리미딘일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴, 치환 또는 비치환된 피라졸릴, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸리닐, 치환 또는 비치환된 페난트로이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 디페닐아미노, 치환 또는 비치환된 페닐비페닐아미노, 치환 또는 비치환된 플루오레닐페닐아미노, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, Ar은 중수소 및 나프틸 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 페닐; 비치환된 나프틸; 비치환된 비페닐; 하나 이상의 메틸로 치환된 플루오레닐; 비치환된 플루오란테닐; 페닐 및 나프틸 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 트리아진일; 하나 이상의 페닐로 치환 또는 비치환된 피리딜; 하나 이상의 페닐로 치환 또는 비치환된 피리미딘일; 하나 이상의 페닐로 치환된 퀴나졸리닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 이소퀴놀릴; 하나 이상의 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸릴; 비치환된 디벤조티오펜일; 비치환된 디벤조푸란일; 하나 이상의 페닐로 치환된 나프티리디닐; 비치환된 디페닐아미노; 비치환된 페닐비페닐아미노; 디메틸플루오레닐페닐아미노; 하나 이상의 페닐로 치환된 벤조티에노피리미딘일; 비치환된 벤조티에노퀴놀릴; 비치환된 벤조푸로퀴놀릴; 하나 이상의 페닐로 치환된 벤조퀴나졸리닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 벤조티아졸리닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 벤조퀴녹살리닐; 비치환된 디벤조퀴녹살리닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 페난트로이미다졸릴; 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노; 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노; 하나 이상의 메틸로 치환된 질소 함유 17원 헤테로아릴; 질소 및 산소 함유 25원 헤테로아릴; 또는 하나 이상의 페닐로 치환된 아세나프토피리미딘일일 수 있다.

[0030] 상기 R₁은 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C18)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 더더욱 바람직하게는 (5-18원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-13원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C10)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, R₁은 디페닐트리아진일로 치환 또는 비치환된 페닐, 디페닐트리아진일, 페닐로 치환된 퀴나졸리닐, 또는 비치환된 피리딜이거나, 인접한 치환체와 연결되어 비치환된 벤젠 고리, 메틸 및 페닐 중 하나 이상으로 치환된 인텐 고리, 비치환된 피리딘 고리, 비치환된 벤조티오펜 고리, 비치환된 벤조푸란 고리, 또는 페닐 또는 페닐퀴녹살리닐로 치환된 인돌 고리를 형성할 수 있다.

[0031] 본원의 일 태양에 따르면, 화학식 1에서, X₁ 내지 X₁₂ 중 인접한 두 개가 CR₁이고, 인접한 두 개의 R₁이 하기 화학식 2 내지 6 중 어느 하나로 융합되어 고리를 형성할 수 있고, 상기 고리는 화학식 1로 표시되는 하나의 화합물에서 하나 이상 형성될 수 있다. 예를 들면, 상기 고리는 디벤조티오펜 고리, 디벤조푸란 고리, 나프탈렌 고리, 페난트렌 고리, 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 고리일 수 있다.

[0032] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5] [화학식 6]



[0033]

[0034]

상기 화학식 2 내지 6에서,  는 CR₁에서의 C와 R₁의 연결 부위를 나타낸다.

[0035]

상기 화학식 4에서, X는 N 또는 CH이다. 본원의 일 양태에 따르면, X는 모두 CH일 수 있고, 본원의 다른 일 양태에 따르면, X 중 어느 하나는 N일 수 있다.

[0036]

상기 화학식 5에서, R₂는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴이고, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이다. 본원의 일 양태에 따르면, R₂는 비치환된 페닐, 또는 페닐로 치환된 퀴놀살리닐일 수 있다.

[0037]

상기 화학식 6에서, R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C5-C10)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 더욱 바람직하게는, 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 스파이로 고리를 형성할 수 있다.

[0038]

상기 화학식 1에서, a는 1 또는 2의 정수이고, a가 2인 경우, 각각의 Ar은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0039]

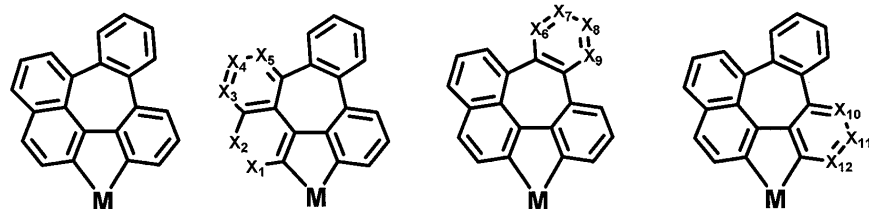
상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 바람직하게는 하나 이상의 N을 포함한다.

[0040]

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 7 내지 10 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0041]

[화학식 7] [화학식 8] [화학식 9] [화학식 10]



[0042]

[0043]

상기 화학식 7 내지 10에서, X₁ 내지 X₁₂, 및 M은 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0044]

본원에서 "(C1-C30)알킬(렌)"은 체를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬(렌)을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 체를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은

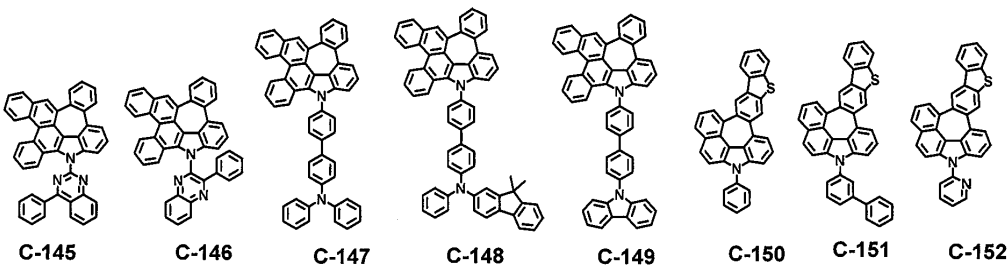
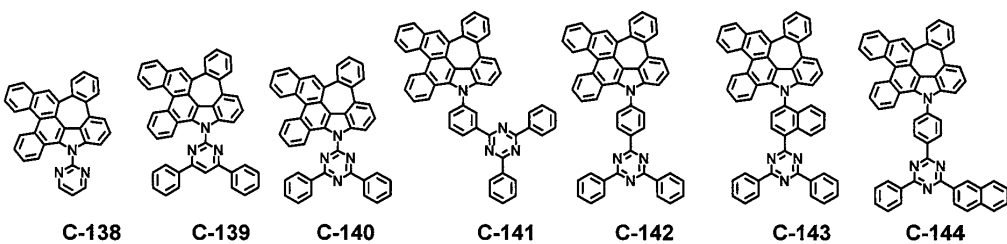
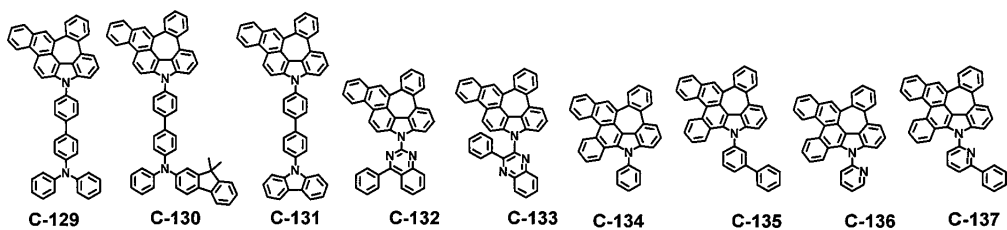
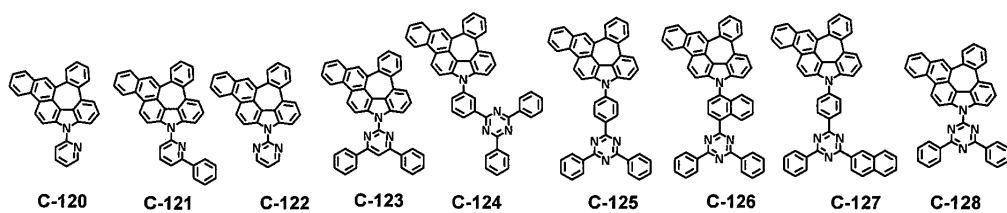
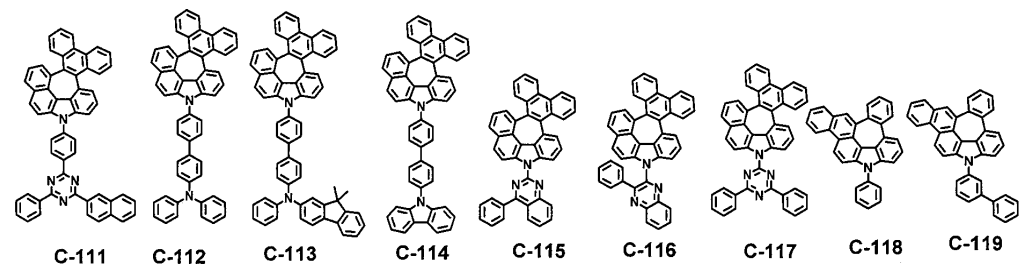
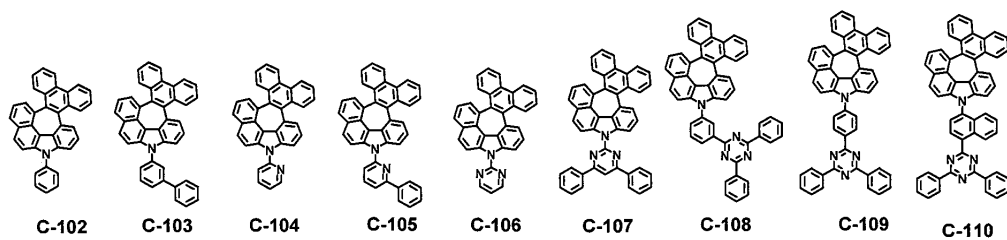
쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알킬닐의 예로서, 에틸닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부틸닐, 2-부틸닐, 3-부틸닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬(렌)"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 벤조퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

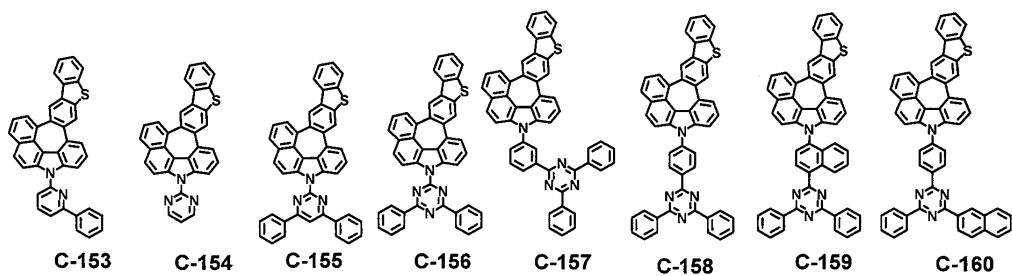
[0045] 또한 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1 내지 15의 상기 La, Ar, R₁, R₂, R₁₁, R₁₂, A₁, A₂, L₁ 및 X₁₁ 내지 X₂₆에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고, 바람직하게는 (C1-C20)알킬, 비치환된 (C6-C25)아릴, 및 (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, 더욱 바람직하게는 (C1-C10)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 및 (C6-C18)아릴로 치환된 (5-18원)헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, 예를 들면, 메틸, 페닐, 디페닐트리아진일 및 페닐퀴녹살리닐로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0046] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

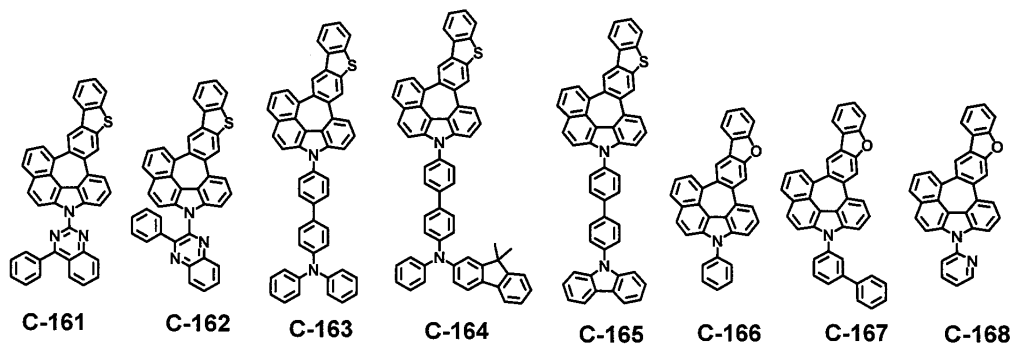




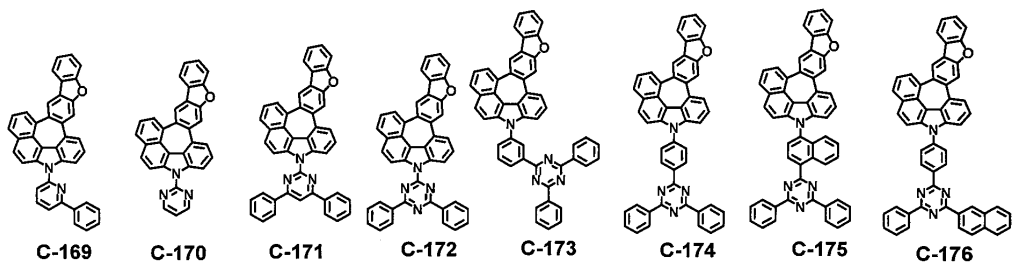




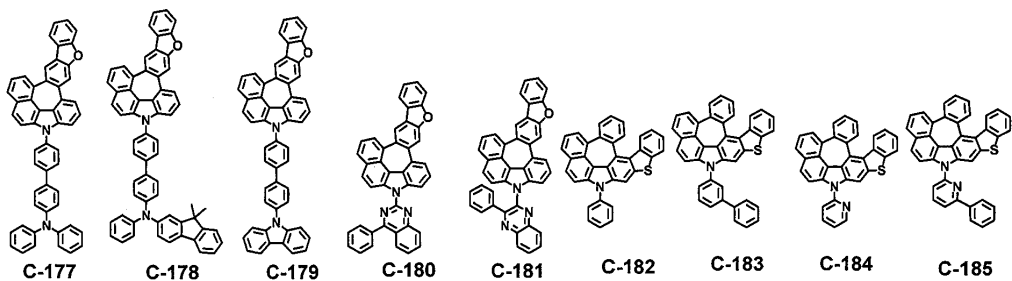
[0066]



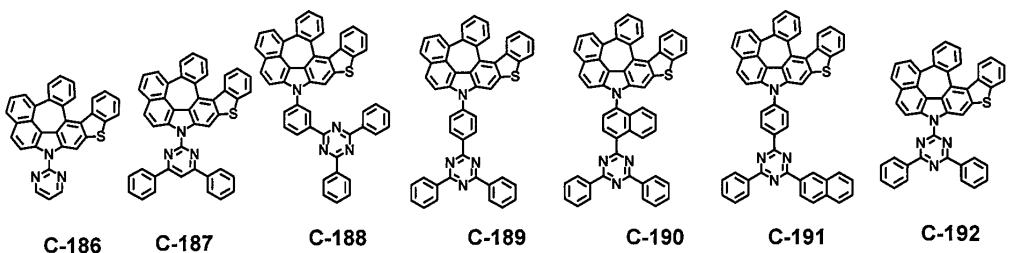
[0067]



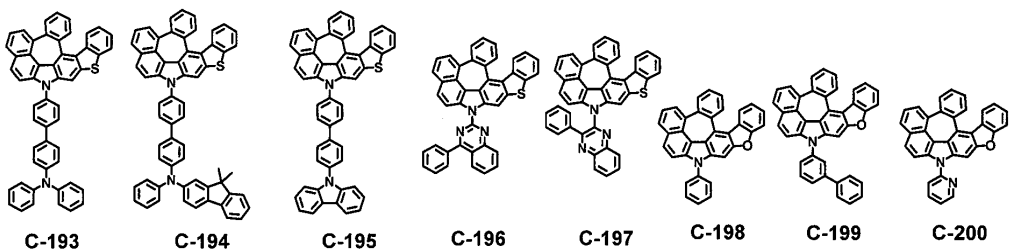
[0068]



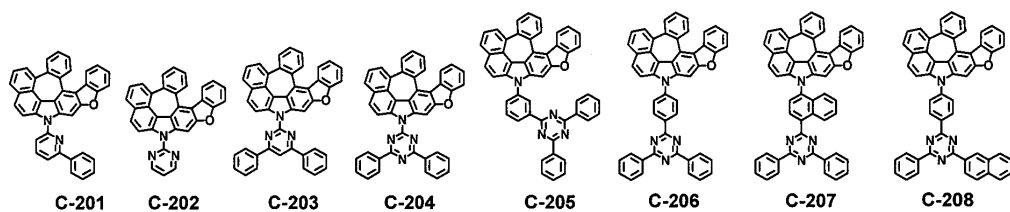
[0069]



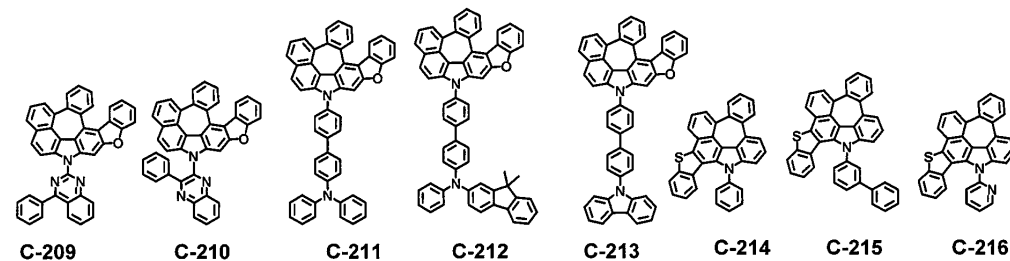
[0070]



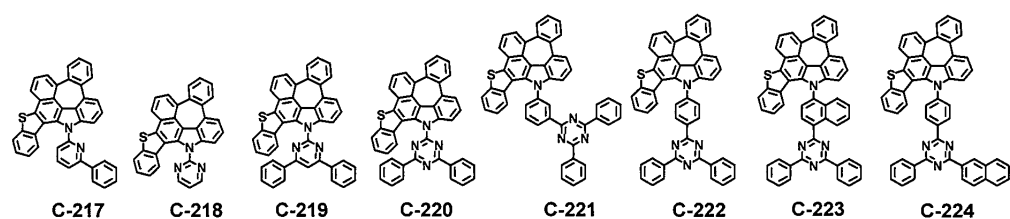
[0071]



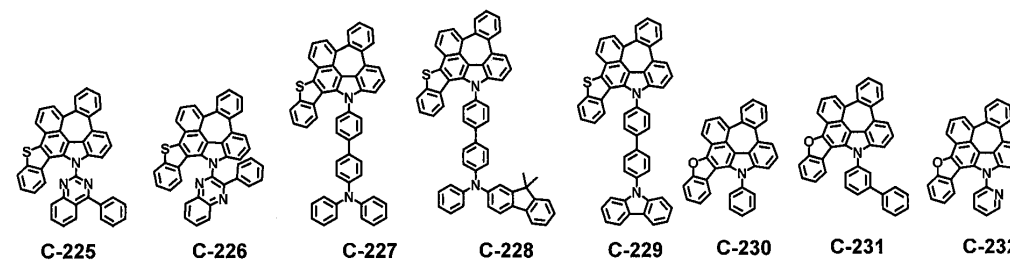
[0072]



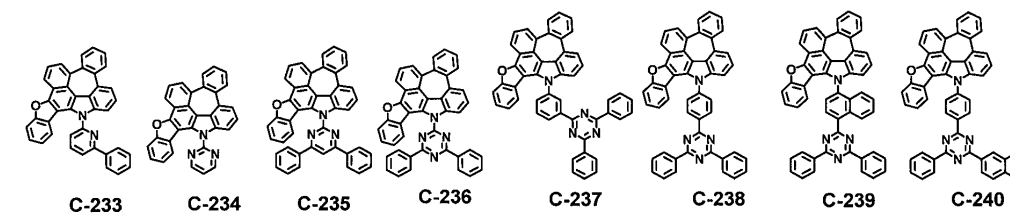
[0073]



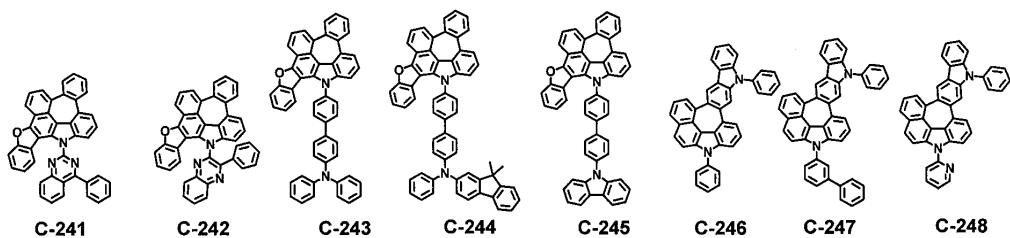
[0074]



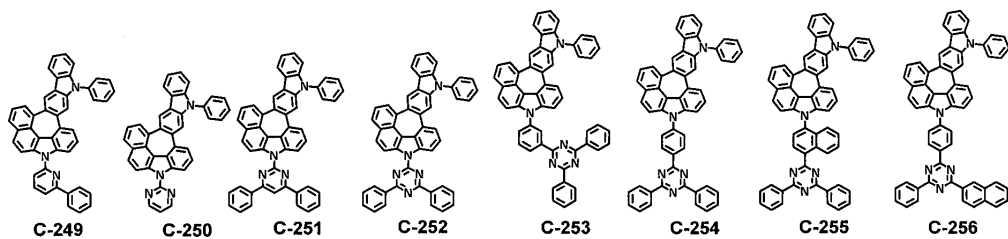
[0075]



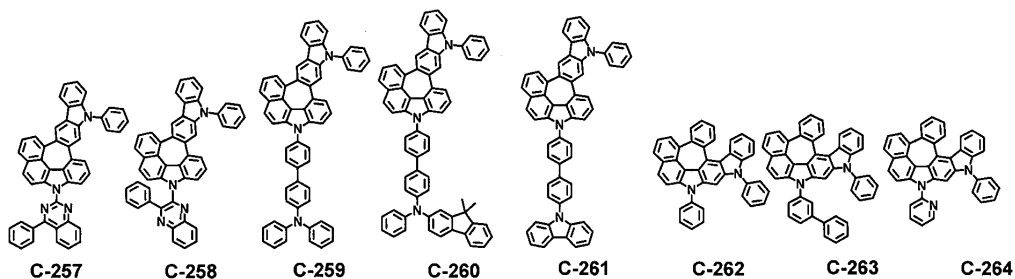
[0076]



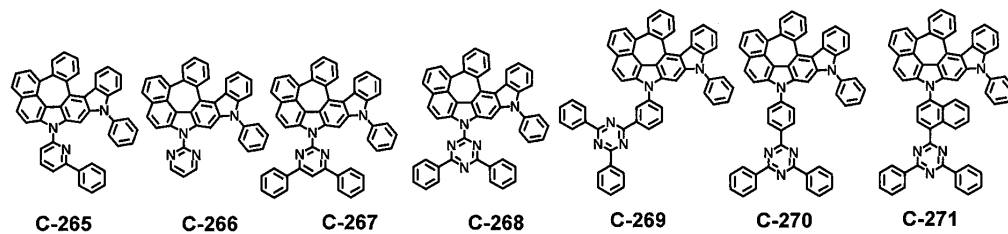
[0077]



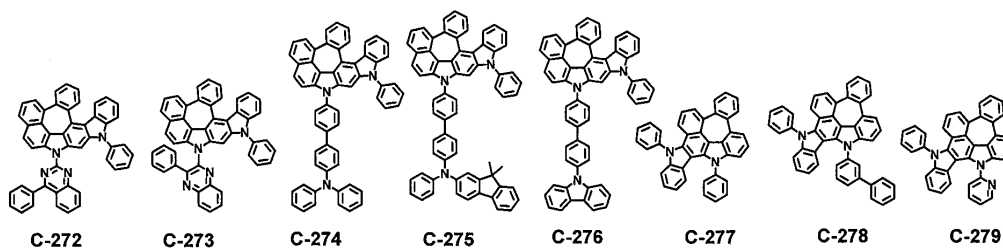
[0078]



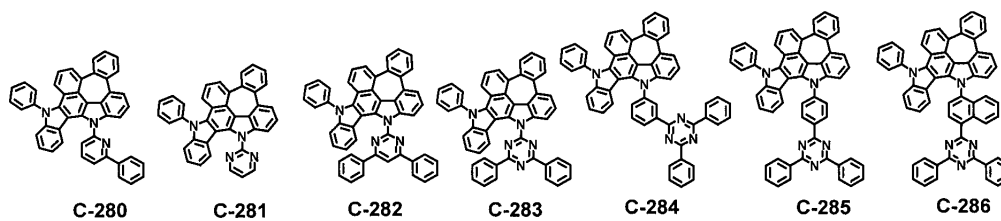
[0079]



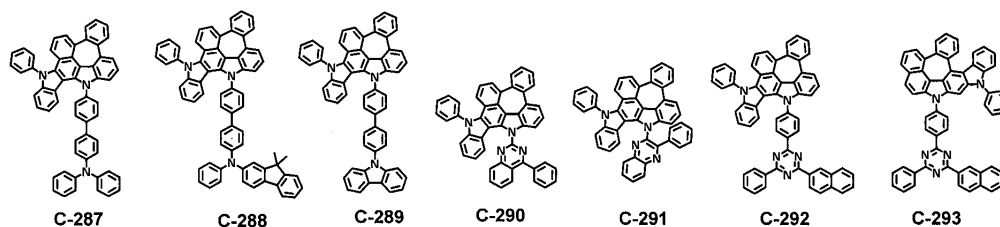
[0080]



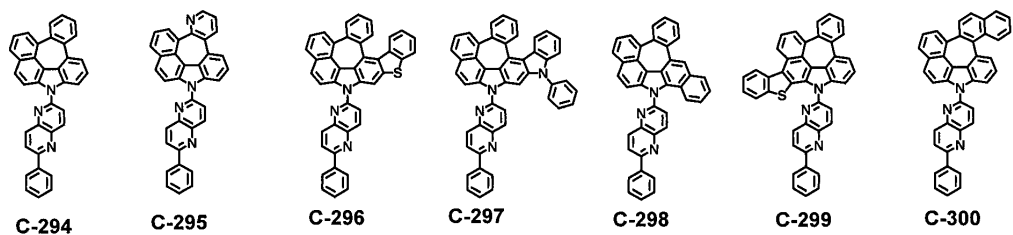
[0081]



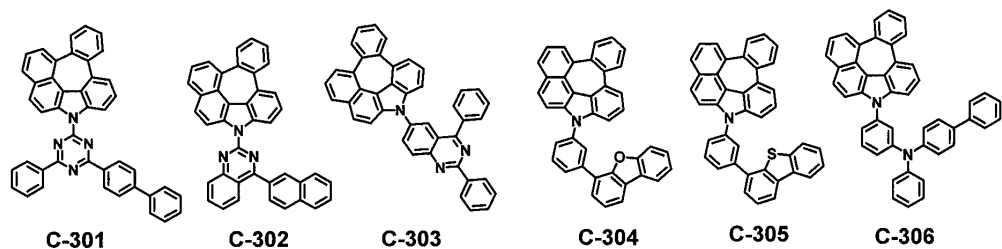
[0082]



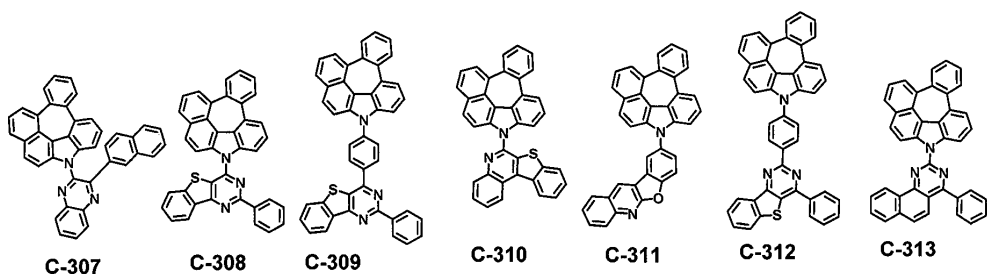
[0083]



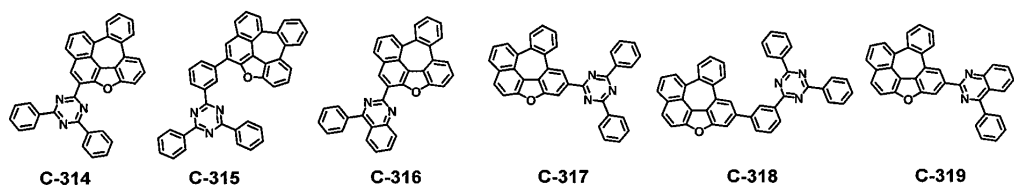
[0084]



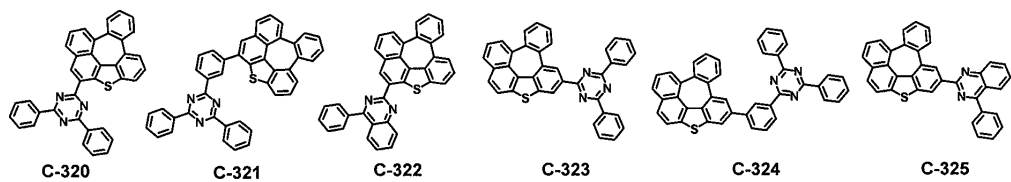
[0085]



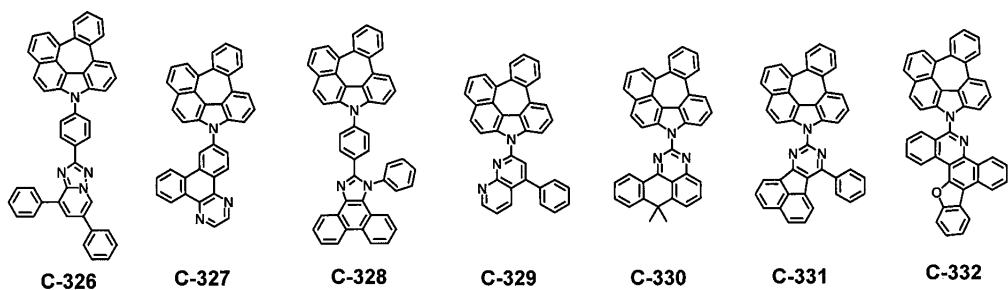
[0086]



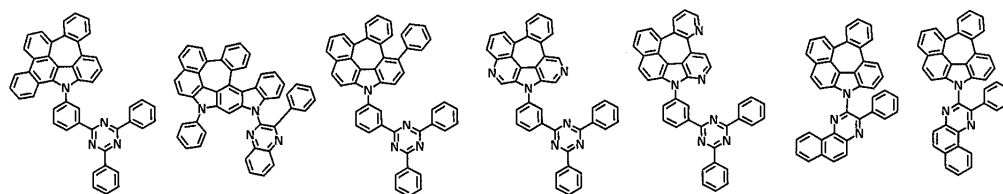
[0087]



[0088]

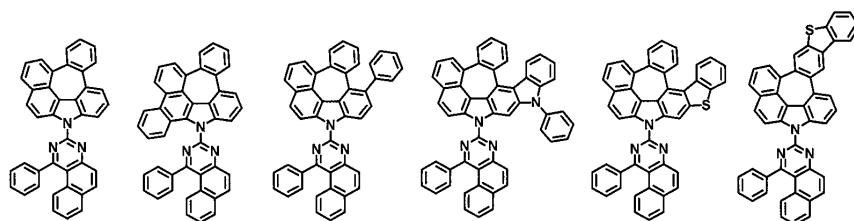


[0089]



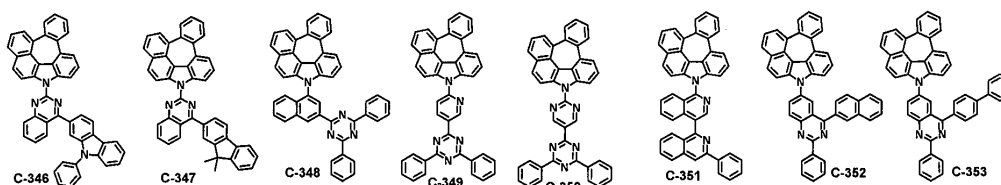
C-333 C-334 C-335 C-336 C-337 C-338 C-339

[0090]



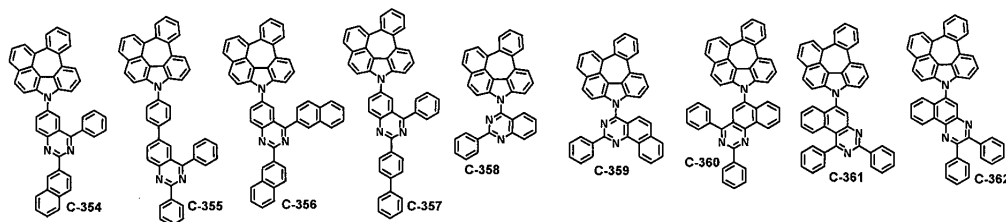
C-340 C-341 C-342 C-343 C-344 C-345

[0091]



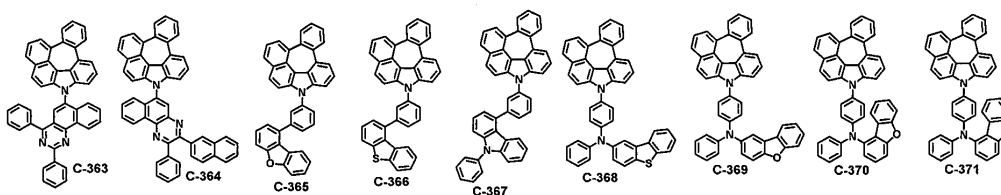
C-346 C-347 C-348 C-349 C-350 C-351 C-352 C-353

[0092]



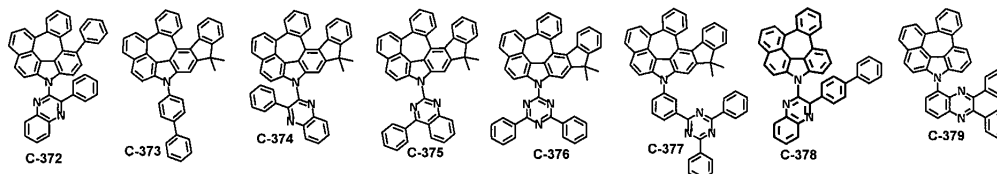
C-354 C-355 C-356 C-357 C-358 C-359 C-360 C-361 C-362

[0093]



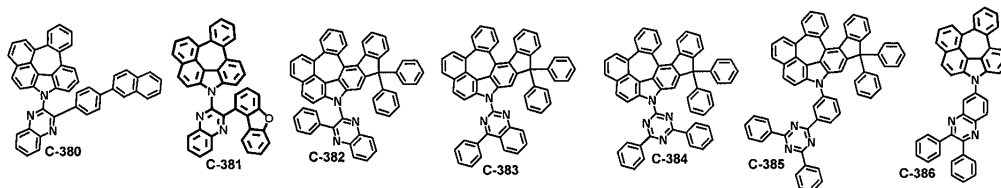
C-363 C-364 C-365 C-366 C-367 C-368 C-369 C-370 C-371

[0094]



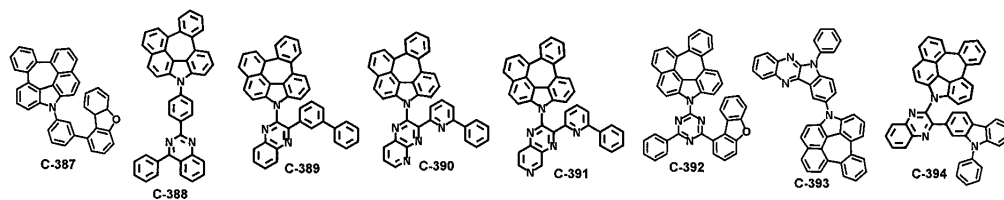
C-372 C-373 C-374 C-375 C-376 C-377 C-378 C-379

[0095]

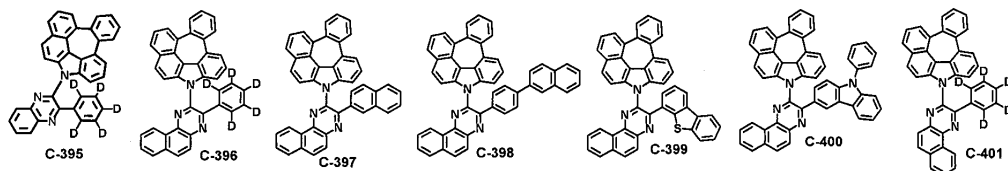


C-380 C-381 C-382 C-383 C-384 C-385 C-386

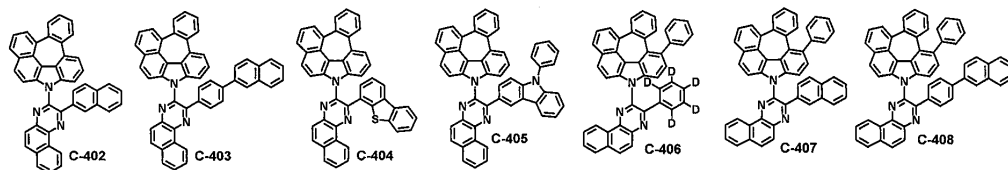
[0096]



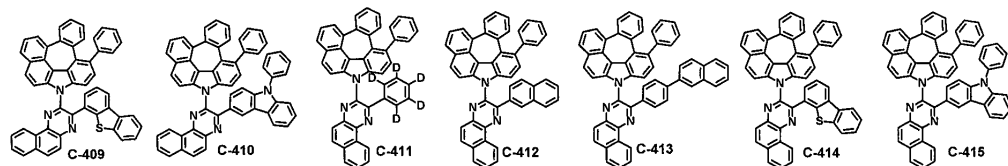
[0097]



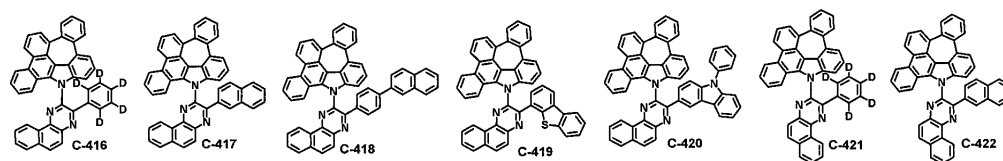
[0098]



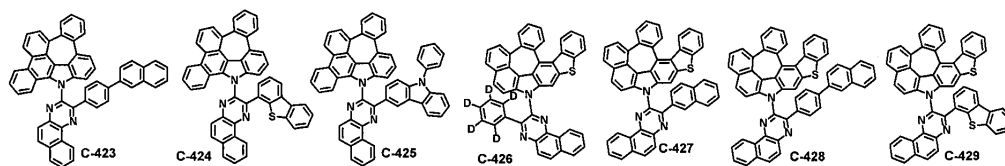
[0099]



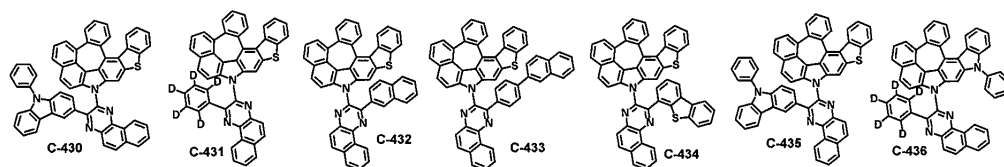
[0100]



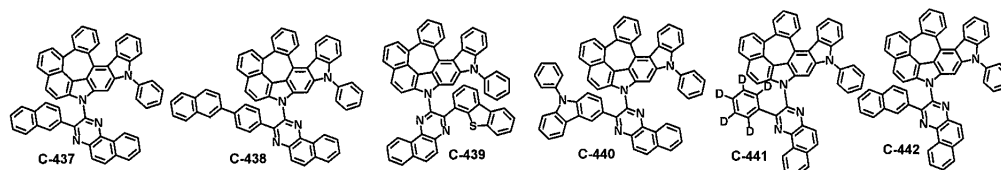
[0101]



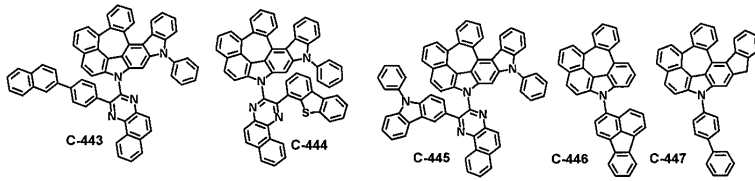
[0102]



[0103]



[0104]

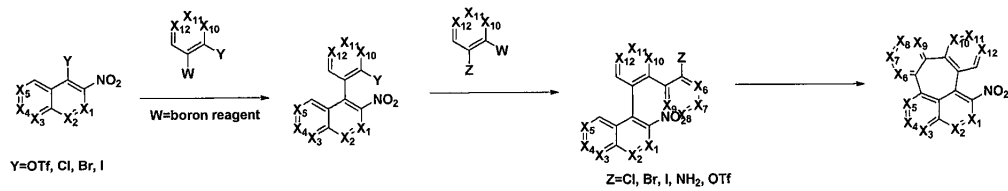


[0105]

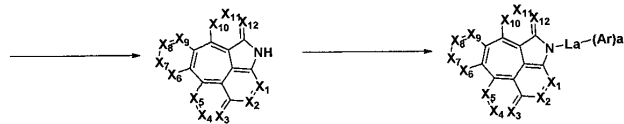
[0106] 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1 내지 7에 나타난 바와 같이 제조할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0107]

[반응식 1]



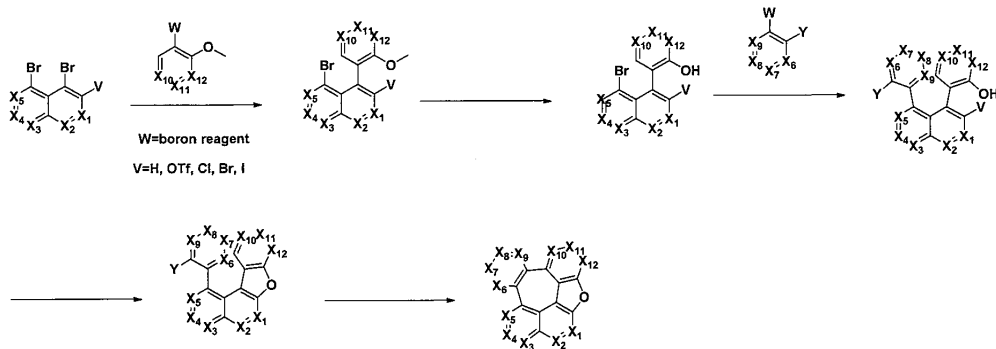
[0108]



[0109]

[0110]

[반응식 2]

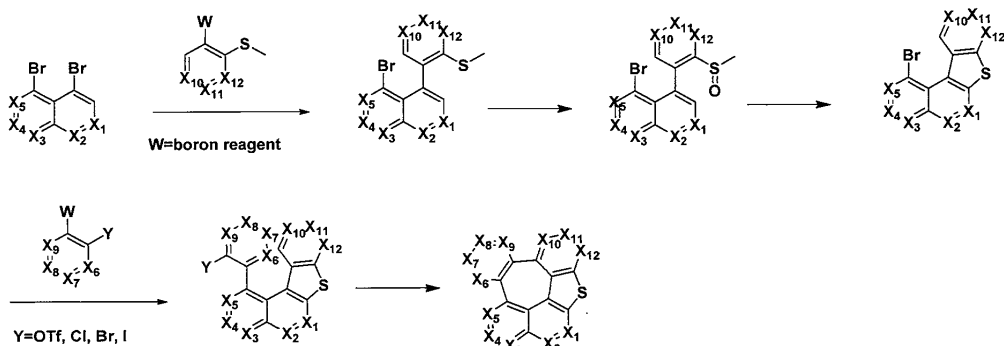


[0111]

[0112]

[0113]

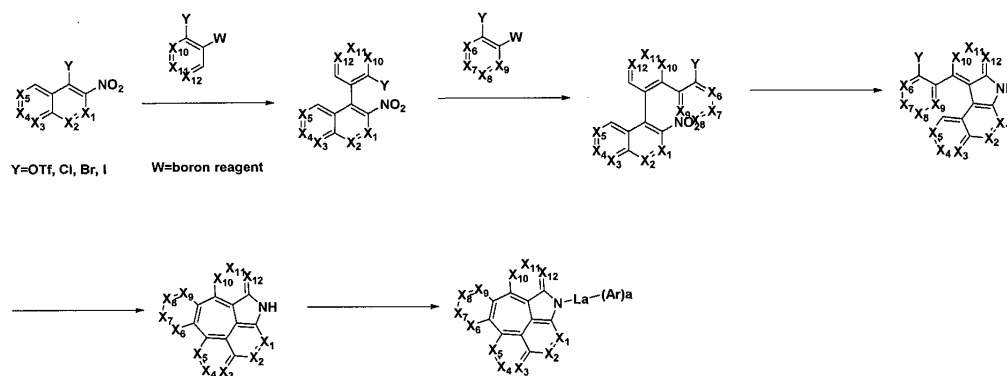
[반응식 3]



[0114]

[0115]

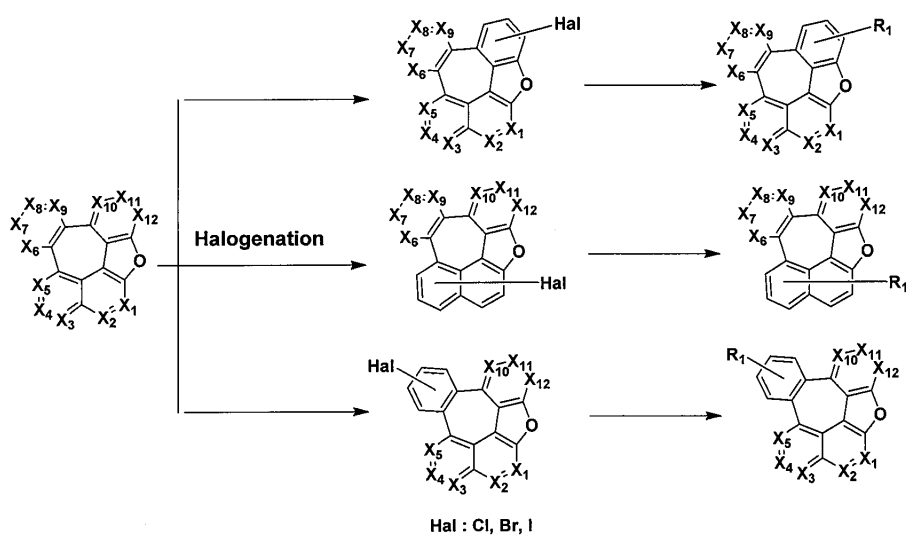
[0116] [반응식 4]



[0117]

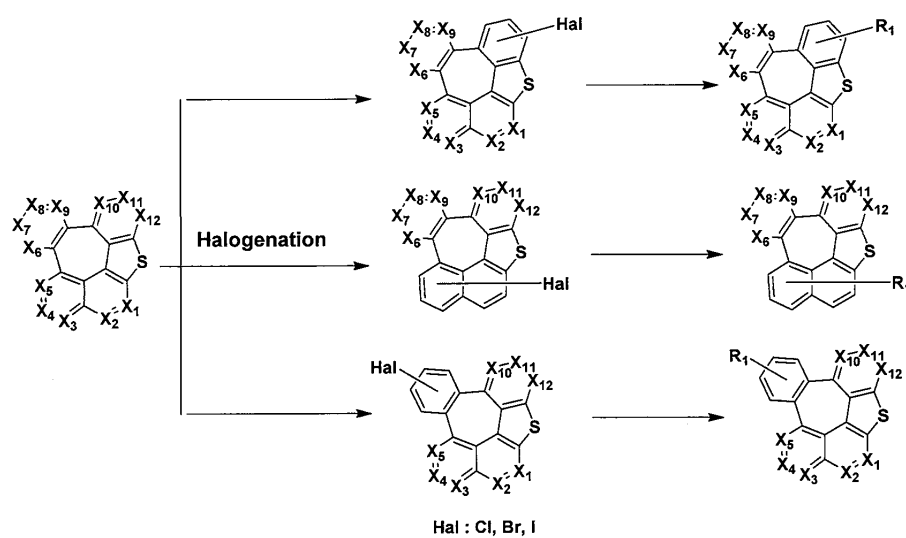
[0118]

[0119] [반응식 5]



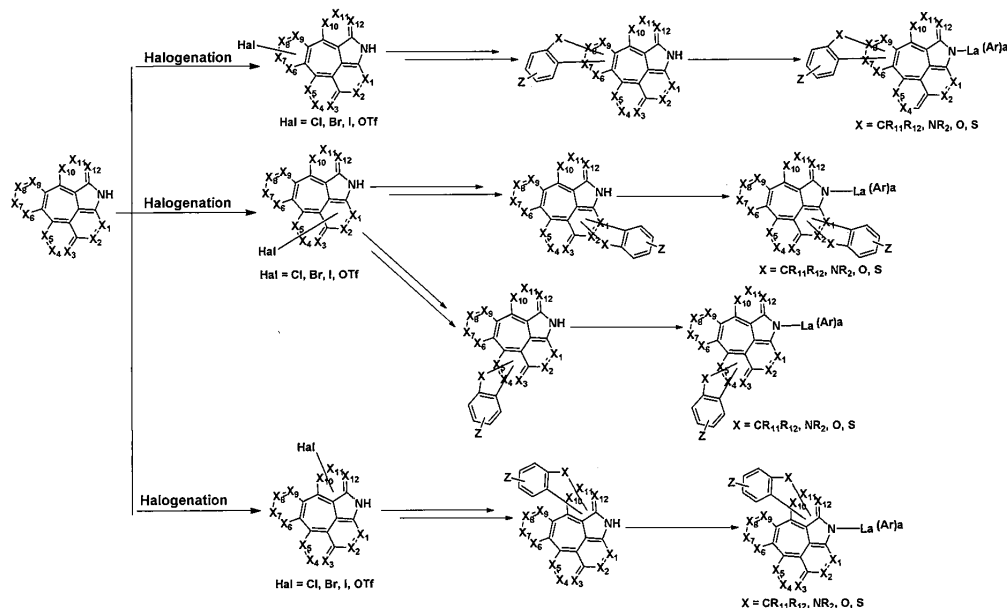
[0120]

[0121] [반응식 6]



[0122]

[0123] [반응식 7]

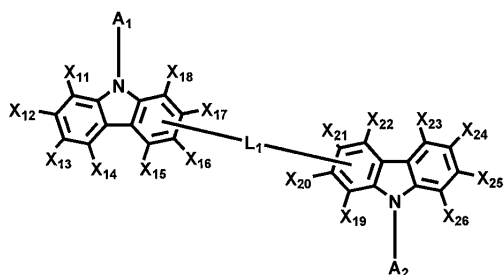


[0124]

[0125] 상기 반응식 1 내지 7에서 X₁ 내지 X₁₂, R₁, La, Ar 및 a는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, R₂, R₁₁ 및 R₁₂는 화학식 5 및 6에서의 정의와 동일하며, Z는 R₁의 정의와 동일하고, OTf는 트리플루오로메탄설포네이트이다.

[0126] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 및 추가로 1종 이상의 유기 전계 발광 화합물을 더 포함하는 유기 전계 발광 소자용 복합 재료를 제공할 수 있다. 예를 들어, 본원의 유기 전계 발광 소자용 복합 재료는 화학식 1로 표시되는 하나 이상의 화합물 및 하기 화학식 11로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0127] [화학식 11]



[0128]

[0129] 상기 화학식 11에서,

[0130] A₁ 및 A₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

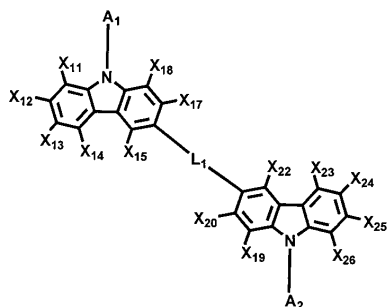
[0131] L₁은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이며;

[0132] X₁₁ 내지 X₂₆은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

[0133] 상기 화학식 11의 화합물은 하기 화학식 12 내지 15 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

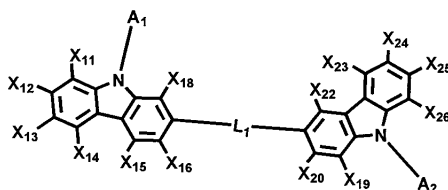
[0134]

[화학식 12]



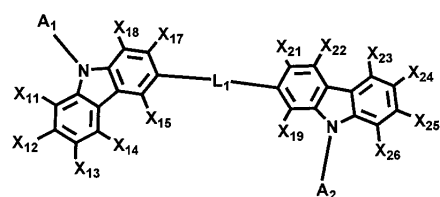
[0135]

[화학식 13]



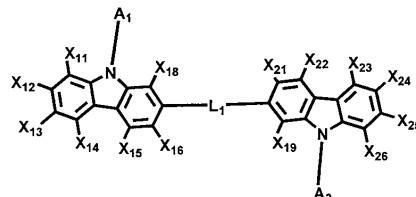
[0136]

[화학식 14]



[0137]

[화학식 15]



[0138]

상기 화학식 12 내지 15에서,

[0139]

A_1 , A_2 , L_1 및 X_{11} 내지 X_{26} 은 화학식 11에서 정의된 것과 같다.

[0140]

상기 화학식 11 내지 15에서, A_1 및 A_2 는 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이며; 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C18)아릴, (5-20원)헤테로아릴 또는 트리(C6-C12)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 구체적으로, A_1 및 A_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 벤조플루오레닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 인데닐, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐, 치환 또는 비치환된 피레닐, 치환 또는 비치환된 테트라세닐, 치환 또는 비치환된 페틸레닐, 치환 또는 비치환된 크라이세닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 및 치환 또는 비치환된 플루오란테닐로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

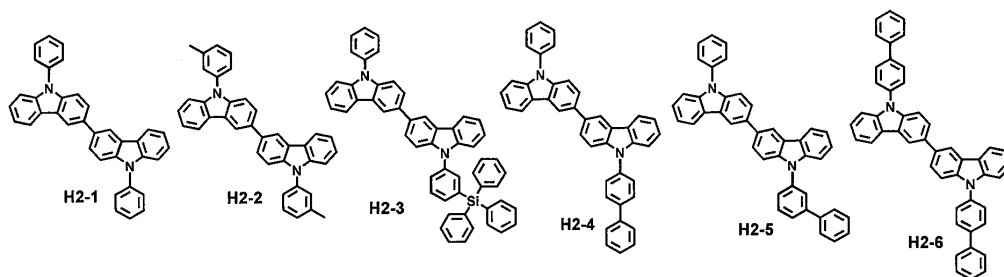
[0141]

상기 화학식 11 내지 15에서, L_1 은 바람직하게는 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌이며; 더욱 바람직하게는 단일결합, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌이다. 구체적으로, L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌, 치환 또는 비치환된 나프틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 비페닐렌일 수 있다.

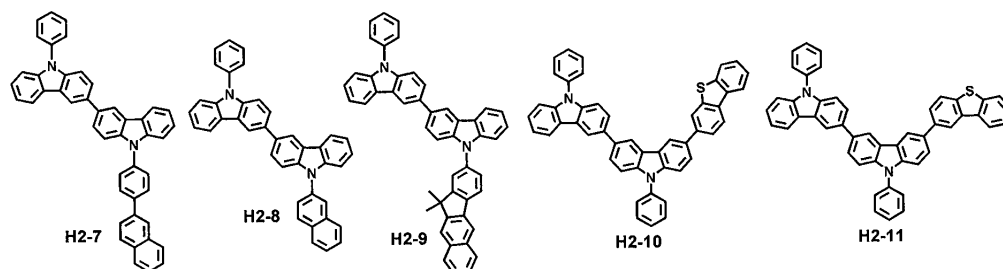
[0142]

상기 화학식 11 내지 15에서, X_{11} 내지 X_{26} 은 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C6-C12)의 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며; 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 비치환된 (C6-C12)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

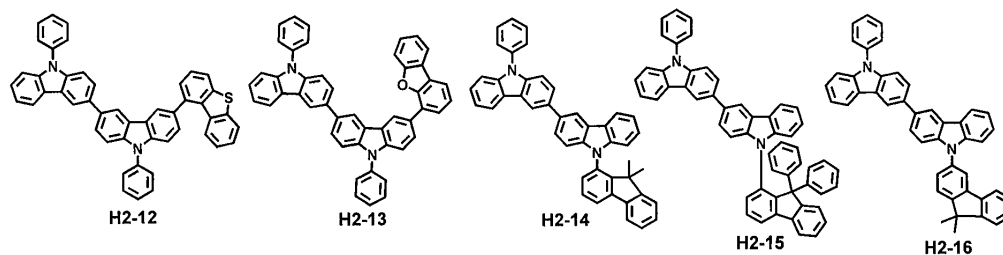
[0143] 상기 화학식 11로 표시되는 화합물은 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



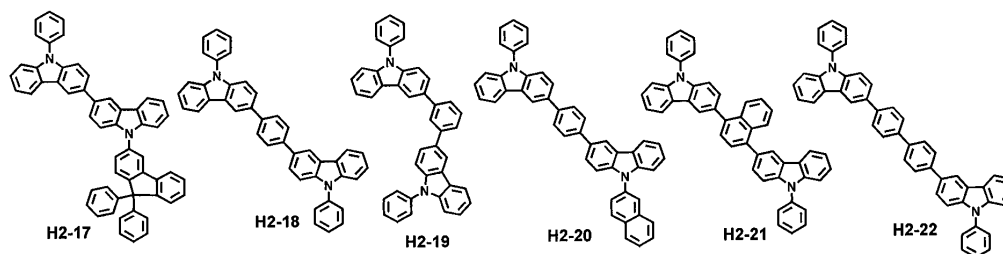
[0144]



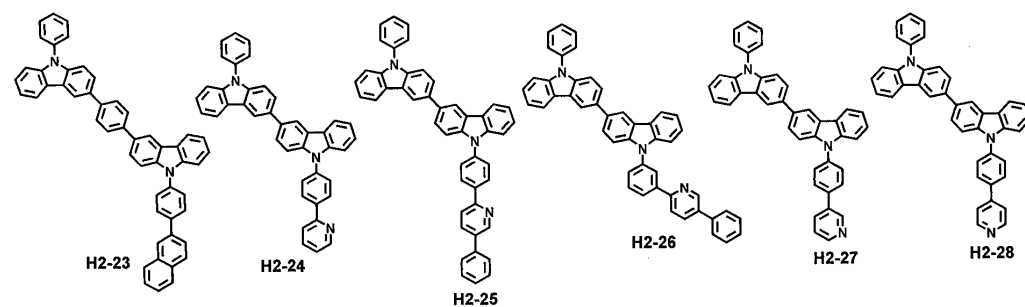
[0145]



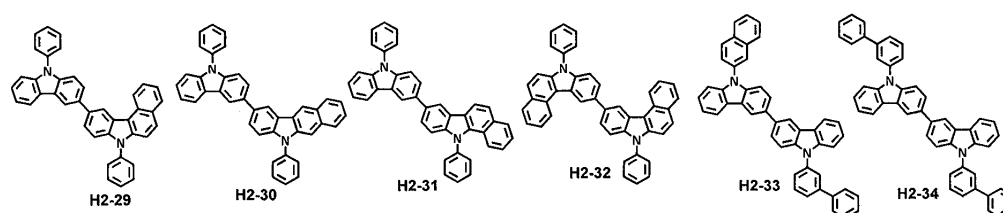
[0146]



[0147]



[0148]



[0149]

- [0150] 본원의 일 양태에 따르면, 유기 전계 발광 소자용 복합 재료에 포함되는 재료 중 화학식 1로 표시되는 화합물은 제1 호스트 재료이고, 화학식 11로 표시되는 화합물은 제2 호스트 재료일 수 있다. 여기서, 제1 및 제2 호스트 재료는 하나의 발광층에 포함될 수도 있고, 복수의 발광층 중 각각 다른 발광층에 포함될 수도 있다. 본원의 유기 전계 발광 소자용 복합 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 11로 표시되는 화합물이 1:99 내지 99:1의 비, 바람직하게는 10:90 내지 90:10의 비, 더욱 바람직하게는 30:70 내지 70:30의 비로 포함될 수 있다. 또한, 화학식 1로 표시되는 화합물과 화학식 11로 표시되는 화합물을 원하는 비율의 양으로, 셰이크에 넣은 뒤 섞는 방법, 유리 튜브에 넣은 뒤 열을 가하여 녹인 후 수거하는 방법, 또는 용매에 녹이는 방법 등으로 배합할 수 있다.
- [0151] 본원은 화학식 1로 표시되는 화합물 또는 본원의 일 양태에 따른 유기 전계 발광 소자용 복합 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다. 구체적으로, 상기 유기 전계 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 화합물 및 추가로 1종 이상의 유기 전계 발광 화합물을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 하나 이상의 화합물 및 화학식 11로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.
- [0152] 또한, 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 유기 전계 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다. 상기 유기 전계 발광 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0153] 한편, 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0154] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 양극(애노드)이고, 다른 하나는 음극(캐소드)일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층, 전자 차단층, 및 전자 버퍼층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.
- [0155] 본원은 양극과 발광층 사이에 정공 전달 대역을 포함할 수 있으며, 상기 정공 전달 대역은 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층 및 전자 차단층 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 상기 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층 및 전자 차단층은 각각 하나의 단일층, 또는 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다.
- [0156] 또한, 상기 정공 전달 대역은 p-도핑된 정공 주입층, 정공 전달층 및 발광 보조층을 포함할 수 있다. 여기서, p-도핑된 정공 주입층은 p-도판트가 도핑된 정공 주입층을 의미한다. p-도판트는 p 반도체 특성을 갖도록 하는 물질이다. p 반도체 특성은 HOMO 에너지 준위로 정공을 주입받거나 전달하는 특성, 즉, 정공의 전도도가 큰 물질의 특성을 의미한다.
- [0157] 본원은 발광층과 음극 사이에 전자 전달 대역을 포함할 수 있으며, 상기 전자 전달 대역은 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 버퍼층 및 전자 주입층 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 상기 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 버퍼층 및 전자 주입층은 각각 하나의 단일층, 또는 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 전자 버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.
- [0158] 상기 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다. 유기 전계

발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 정공 보조층 또는 전자 차단층의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

[0159] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

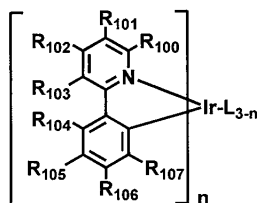
[0160] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역, 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 2개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0161] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다. 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 상기 화학식 11로 표시되는 화합물이 발광 효율 면에서 바람직하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0162] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.

[0163] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0164] [화학식 101]

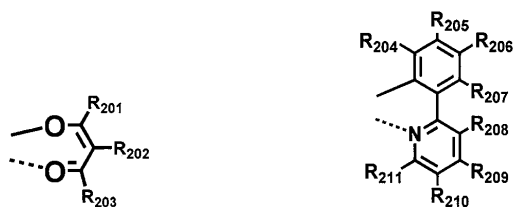


[0165]

[0166] 상기 화학식 101에서,

[0167] L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0168] [구조 1] [구조 2]



[0169]

[0170]

R₁₀₀ 내지 R₁₀₃, 및 R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 치환 기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 고리를 형성할 수 있으며; R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘을 형성할 수 있으며;

[0171]

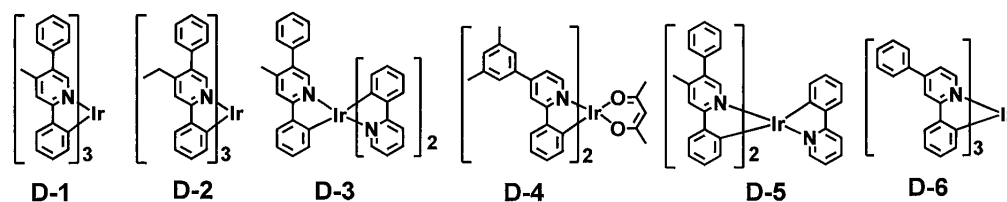
R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나, 인접한 치환 기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

[0172]

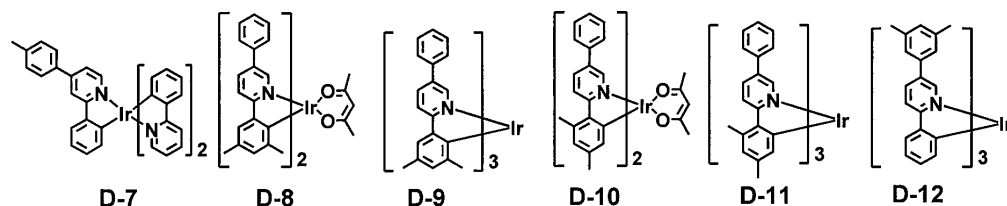
n은 1 내지 3의 정수이다.

[0173]

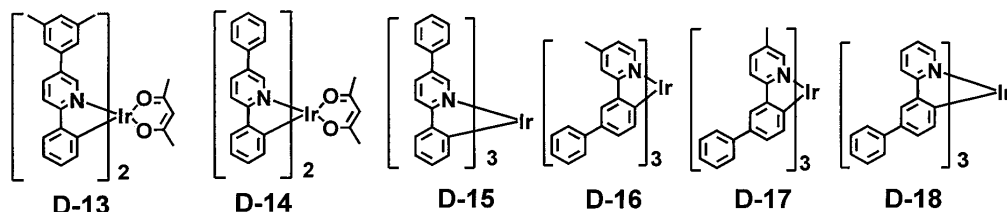
구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



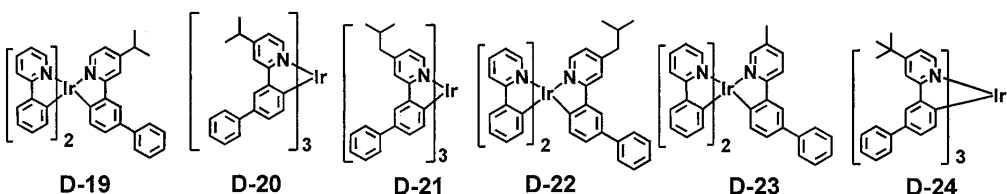
[0174]



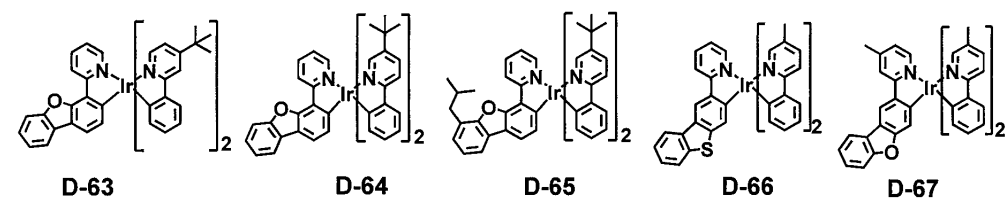
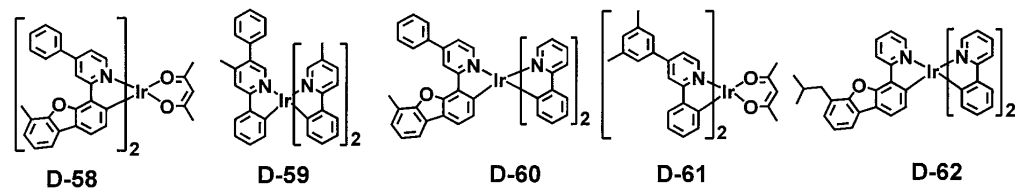
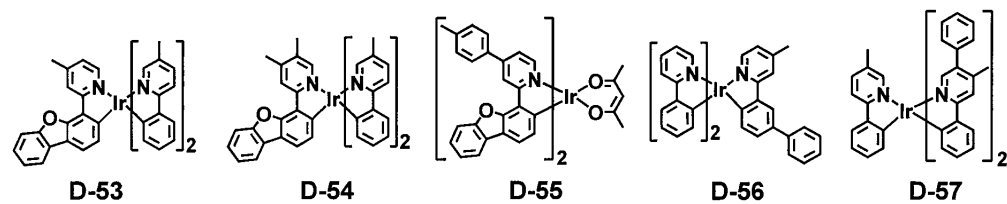
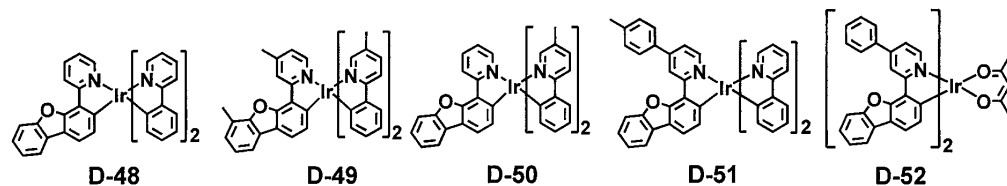
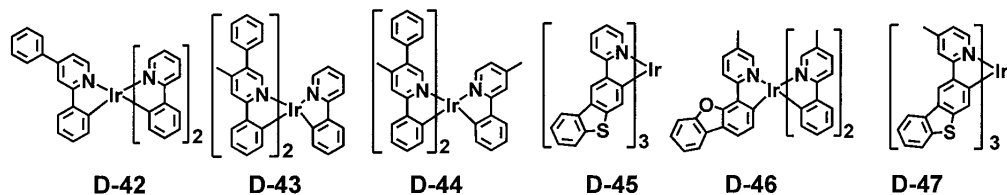
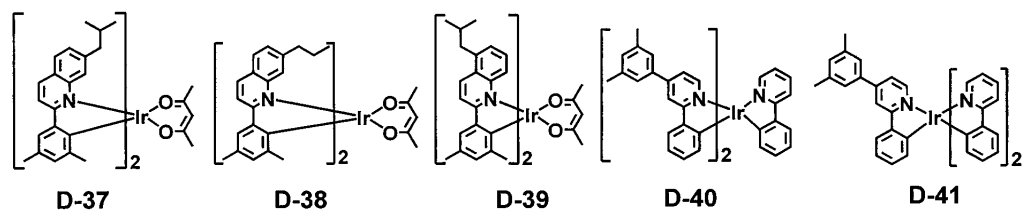
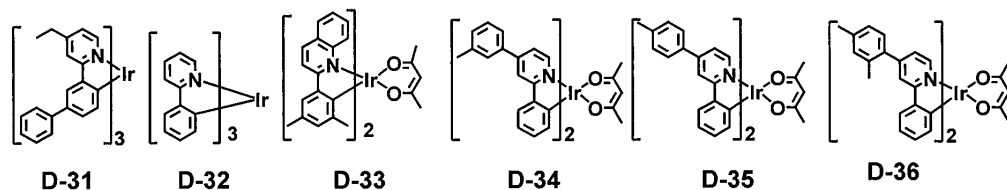
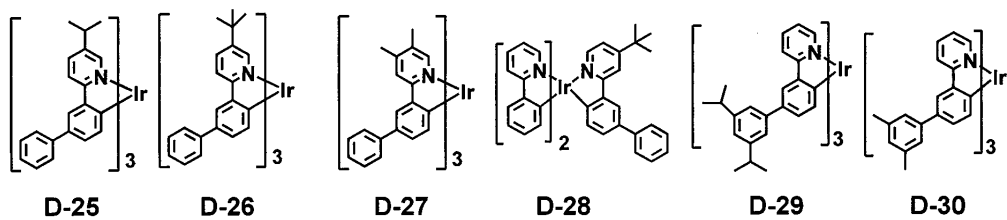
[0175]



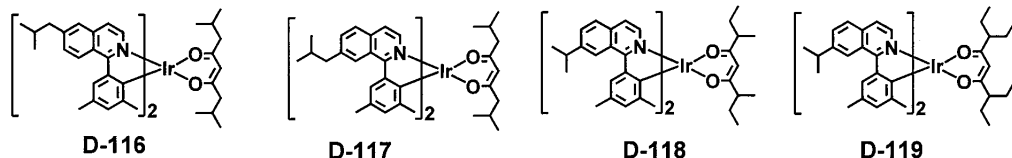
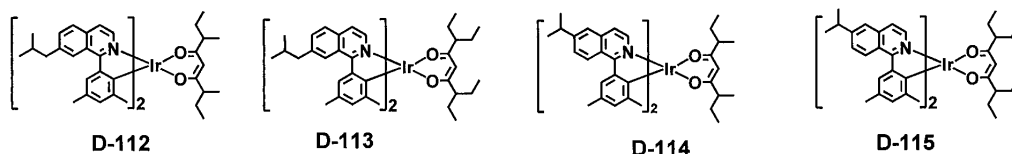
[0176]



[0177]







본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크 젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 제 1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물을 성막할 때, 공증착 또는 혼합증착으로 공정한다.

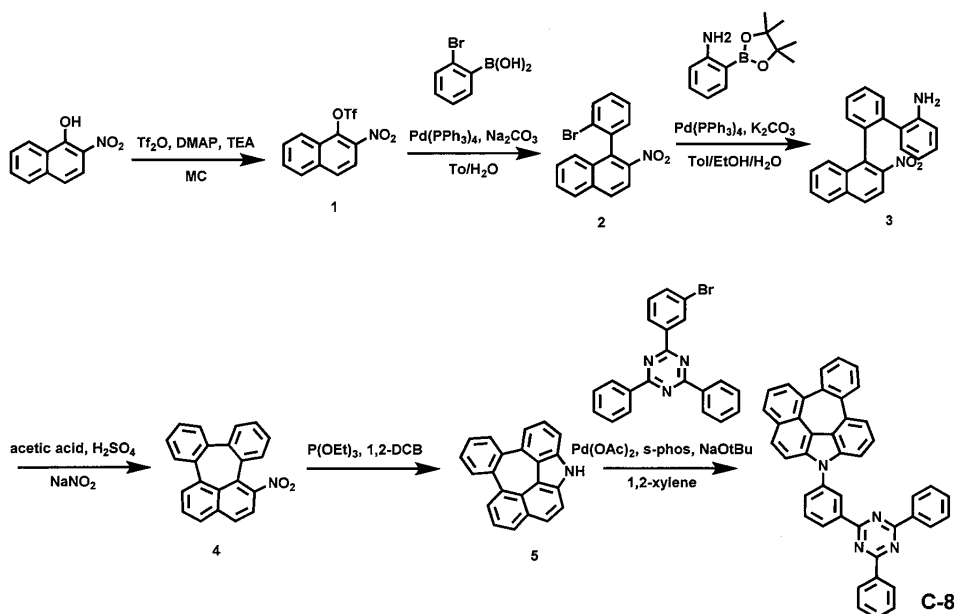
습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성을 나타내었다. 그러나, 본원은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[실시예 1] 화합물 C-8의 제조



1) 화합물 1의 합성

플라스크에 2-니트로-1-나프톨 (70 g, 370 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (DMAP) (4.5 g, 37 mmol), 및 메틸렌 클로라이드 (MC) 1800 mL를 넣어 녹인 후, 트리에틸아민 (TEA) (62 mL, 444 mmol)을 0℃에서 적가한 뒤, 20분 동안 교반시킨다. 반응물에 트리플루오로메탄술폰산무수물 (125.3 g, 444 mmol)을 동일 온도에서 천천히 적가한 뒤 1시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여

수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1** (96.2 g, 수율: 81 %)을 얻었다.

[0206] 2) 화합물 2의 합성

[0207] 플라스크에 화합물 **1** (96.2 g, 299 mmol), 2-브로모페닐보론산 (72.1 g, 359 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (17.3 g, 15 mmol), 탄산나트륨 (79.3 g, 749 mmol), 톨루엔 1400 mL, 에탄올 350 mL 및 물 350 mL를 넣어 녹인 후 1시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **2** (98 g, 수율: 99 %)을 얻었다.

[0208] 3) 화합물 3의 합성

[0209] 플라스크에 화합물 **2** (98 g, 299 mmol), 2-아미노페닐보론산피나콜에스테르 (78.5 g, 358 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (17.2 g, 15 mmol), 탄산칼륨 (103 g, 747 mmol), 톨루엔 1300 mL, 에탄올 350 mL 및 물 350 mL를 넣어 녹인 후 20시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **3** (54 g, 수율: 53 %)을 얻었다.

[0210] 4) 화합물 4의 합성

[0211] 플라스크에 화합물 **3** (25 g, 73 mmol), 아세트산 250 mL 및 황산 25 mL를 넣어 녹인 후 0°C에서 아질산나트륨 (6.5 g, 95 mmol)을 천천히 적가한 뒤, 40분 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 반응물을 물에 적가한 뒤 필터하여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **4** (2 g, 수율: 8.4 %)을 얻었다.

[0212] 5) 화합물 5의 합성

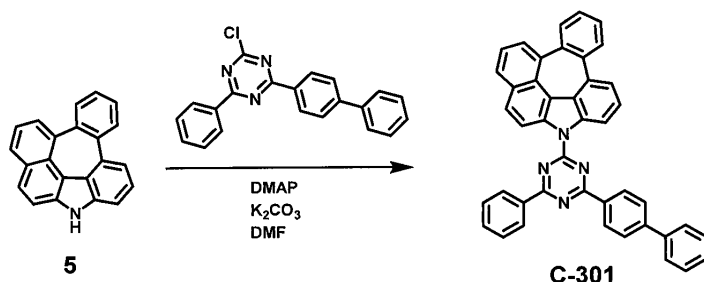
[0213] 플라스크에 화합물 **4** (4.7 g, 15 mmol), 트리에틸포스파이트 48 mL 및 1,2-디클로로벤젠 48 mL를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **5** (2.7 g, 수율: 63 %)을 얻었다.

[0214] 6) 화합물 C-8의 합성

[0215] 플라스크에 화합물 **5** (2.1 g, 7 mmol), 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1 g, 8 mmol), 아세트산 팔라듐(II) (0.81 g, 0.36 mmol), 2-디사이클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐 (S-Phos) (0.3 g, 0.7 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (1.7 g, 18 mmol), 및 1,2-자일렌 72 mL를 넣어 녹인 후, 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-8** (2.5 g, 수율: 58 %)을 얻었다.

화합물	MW	UV	PL	M.P.	Tg
C-8	598.71	308 nm	495 nm	285°C	132.37°C

[실시예 2] 화합물 C-301의 제조



[0219] 플라스크에 화합물 5 (5.0 g, 17 mmol), 2-([1,1'-바이페닐]-4-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 (7.08 g, 21 mmol), DMAP (105 mg, 0.858 mmol), 포타슘 카보네이트 (7.1 g, 51 mmol), 및 다이메틸포름아마이드(DMF) (85 mL)를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-301 (4.8 g, 수율: 47%)을 얻었다.

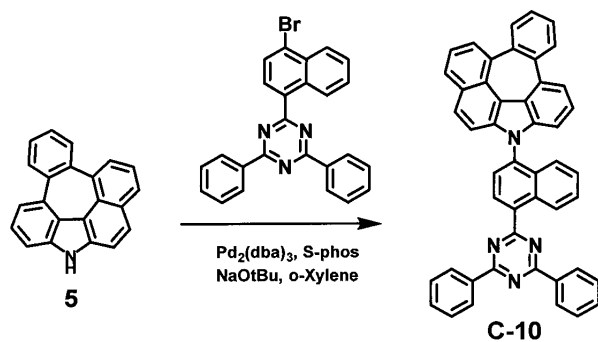
¹H NMR (600MHz, CDC13) 9.09-9.07(d, *J*= 12 Hz, 1H), 8.93-8.91(d, *J* = 12 Hz, 1H), 8.74-8.73(d, *J*= 6 Hz, 2H), 8.71-8.69(d, *J*= 12 Hz, 2H), 7.80-7.75 (m, 6H), 7.73-7.69 (m, 3H), 7.64-7.57 (m, 3H), 7.52-7.38 (m, 8H)

[0220]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-301	598.71	124.4℃	236℃

[0221]

[0222] [실시예 3] 화합물 C-10의 제조



[0223]

[0224] 플라스크에 화합물 5 (5.0 g, 17 mmol), 2-(4-브로모나프탈렌-1-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (11.28 g, 21 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (625 mg, 0.686 mmol), S-Phos (565 mg, 1 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (4.9 g, 51 mmol) 및 *o*-자일렌 (100 mL)를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-10 (3.6g, 수율: 32%)을 얻었다.

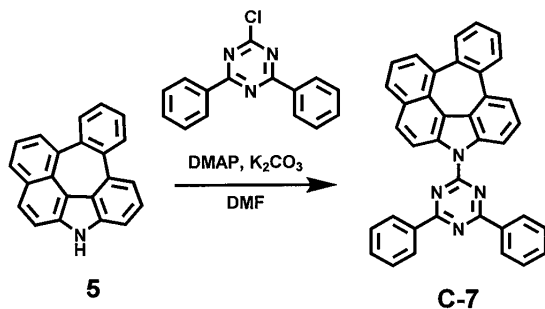
¹H NMR (600MHz, CDC13) 9.25-9.24(d, *J*=6Hz, 1H), 8.85-8.83 (sd, *J*=12Hz, 4H), 8.68-8.67 (d, *J*=6Hz, 1H), 7.94-7.92(m, 1H), 7.82-7.79(m, 3H), 7.74-7.61(m, 10H), 7.49-7.42(m, 5H), 7.31-7.29 (t, *J*=6Hz, 1H), 7.16-7.15(d, *J*=6Hz, 1H), 6.96-6.94(d, *J*=12Hz, 1H)

[0225]

화합물	MW	Tg	M.P
C-10	648.7	159.5℃	176℃

[0226]

[실시예 4] 화합물 C-7의 제조

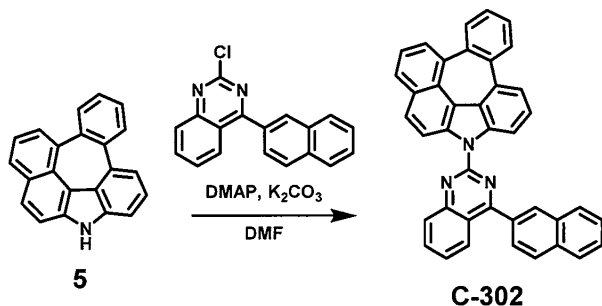


플라스크에 화합물 5 (5 g, 17.1 mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 (5.5 g, 20.5 mmol), DMAP (0.1 g, 0.85mmol), 포타슘 카보네이트 (7.1 g, 51.4 mmol), 및 DMF 85mL를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 식힌 후, 메탄올과 물을 넣고 여과하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-7 (4.4g, 수율: 49%)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDC13) 9.13-9.11(d, J=12Hz, 1H), 8.97-8.95 (d, J=12Hz, 1H), 8.75-8.73 (d, J=12Hz, 4H), 7.83-7.75(m, 5H), 7.64-7.59(m, 6H), 7.54-7.51(m, 3H), 7.48-7.45(t, J=12Hz, 3H), 7.40-7.39 (m, 2H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-7	522.6	105℃	209℃

[실시예 5] 화합물 C-302의 제조

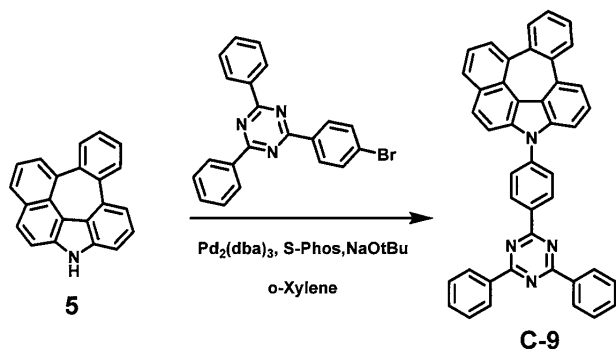


플라스크에 화합물 5 (4.5 g, 15.4 mmol), 2-클로로-4-(나프탈렌-2-일)퀴나졸린 (5.4 g, 18.5 mmol), DMAP (0.09 g, 0.7 mmol), 포타슘 카보네이트 (6.4 g, 46.3 mmol), 및 DMF 77 mL을 넣어 녹인 후, 1.5시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 여과한 후, 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-302 (7.5g, 수율: 80 %)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDC13) 9.03-9.02 (d, J=6Hz, 1H), 8.88-8.86 (d, J=12Hz, 1H), 8.39 (s, 1H), 8.22-8.21 (d, J=6Hz, 1H), 8.20-8.17(d, J=18 Hz, 1H), 8.15-8.05 (m, 2H), 8.00-7.98(t, J=6Hz, 2H), 7.91-7.89 (m, 1H), 7.76-7.72 (m, 5H), 7.63-7.61(m, 2H), 7.54-7.52(m, 2H), 7.43-7.36(m, 4H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-302	545.65	120.6℃	257 ℃

[0237] [실시예 6] 화합물 C-9의 제조



[0238]

[0239] 플라스크에 화합물 5 (5.0 g, 17.16 mmol), 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (6.6 g, 17.16 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.6 g, 0.686 mmol), S-Phos(0.7 g, 1.176 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (4.0 g, 42.9 mmol), 및 *o*-자일렌 90mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-9 (6.2 g, 수율: 62%)을 얻었다.

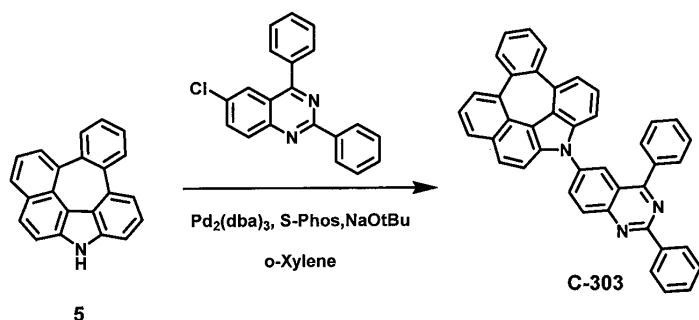
¹H NMR (600MHz, CDCl₃, δ) 9.06-9.05 (d, J=6.0Hz, 2H), 8.85-8.83 (d, J=12Hz, 4H), 7.90-7.89 (m, 1H), 7.82-7.78 (m, 4H), 7.74-7.72 (m, 2H), 7.66-7.58 (m, 8H), 7.45-7.43 (m, 3H), 7.42-7.39 (m, 2H)

[0240]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-9	598.71	140.59℃	260℃

[0241]

[0242] [실시예 7] 화합물 C-303의 제조



[0243]

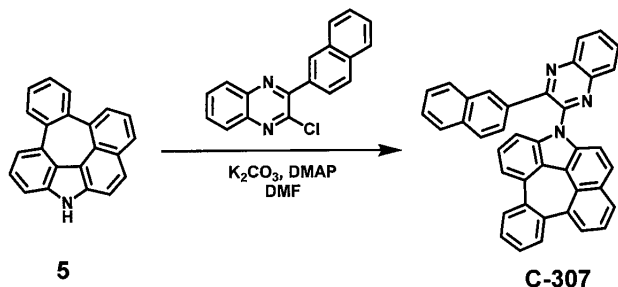
[0244] 플라스크에 화합물 5 (4.3 g, 14.83 mmol), 6-클로로-2,4-디페닐퀴나졸린(4.7 g, 14.83 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.5 g, 0.593 mmol), S-Phos (0.6 g, 1.483 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (3.6g, 37.07mmol), 및 *o*-자일렌 80 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-303 (1.8 g, 수율: 21%)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDCl₃, δ) 8.74-8.73 (d, J=6.0 Hz, 2H), 8.37-8.36 (d, J=6.0Hz, 1H), 8.28-8.27 (d, J=6.0Hz, 1H), 8.05-8.04 (d, J=6.0Hz, 1H), 7.89-7.88 (d, J=6.0Hz, 2H), 7.85-7.83 (m, 1H), 7.75-7.73 (d, J=12Hz, 2H), 7.69-7.67 (m, 2H), 7.57-7.50 (m, 7H), 7.42-7.37 (m, 4H), 7.34-7.31 (m, 1H), 7.22-7.21 (m, 1H)

[0245]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-303	571.67	140.16℃	189.3℃

[실시예 8] 화합물 C-307의 제조

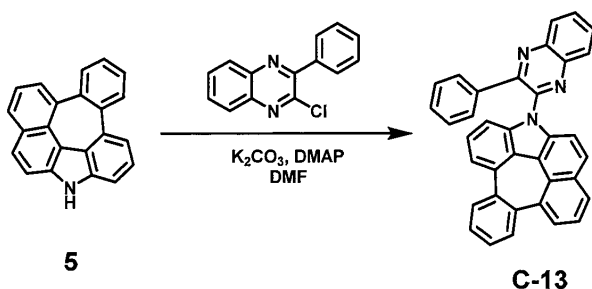


플라스크에 화합물 **5** (5.4 g, 18.53 mmol), 2-클로로-3-나프틸퀴녹살린(4.5 g, 15.44 mmol), 포타슘 카보네이트 (2.1 g, 15.44 mmol), DMAP (0.9 g, 7.72 mmol), 및 DMF 80 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 이 후, 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-307** (2.3 g, 수율: 47%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.36-8.34 (d, $J=6.0\text{Hz}$, 1H), 8.23 (s, 1H), 8.17-8.16 (d, $J=6.0\text{Hz}$, 1H), 7.90-7.86 (m, 3H), 7.73-7.71 (d, $J=12\text{Hz}$, 1H), 7.68-7.63 (m, 4H), 7.50-7.48(m, 2H), 7.40-7.35 (m, 6H), 7.32-7.24 (m, 2H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-307	545.65	133℃	152℃

[실시예 9] 화합물 C-13의 제조

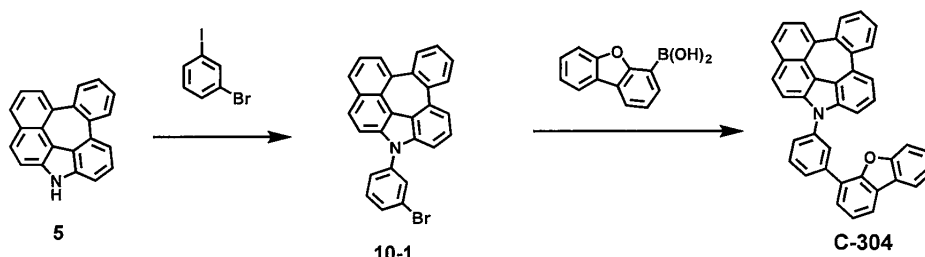


플라스크에 화합물 **5** (4.0 g, 13.73 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴녹살린 (4.0 g, 16.47 mmol), 포타슘 카보네이트 (3.8 g, 27.46 mmol), DMAP (0.84 g, 6.87 mmol), 및 DMF 68 mL를 넣어 녹인 후 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 이 후, 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-13** (2.3 g, 수율: 33.8%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.32-8.30 (m, 1H), 8.16-8.15 (m, 1H), 7.89-7.83 (m, 3H), 7.73 (d, $J=7.38\text{Hz}$, 1H), 7.69-7.68 (m, 2H), 7.60-7.54 (m, 2H), 7.50 (d, $J=9.00\text{Hz}$, 1H), 7.42-7.37 (m, 3H), 7.29-7.27 (m, 3H), 7.21-7.15 (m, 4H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-13	495.59	124.88℃	154-164℃

[실시예 10] 화합물 C-304 의 제조



1) 화합물 10-1의 합성

화합물 5 (9 g, 30.89 mmol), 1-브로모-3-아이오도벤젠 (10.6 g, 61.78 mmol), CuI (3 g, 15.44 mmol), EDA (1.8 g, 30.89 mmol), 및 K₃PO₄ (16.4 g, 77.22 mmol)에 톨루엔 155 mL을 투입한 후 하룻동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤, 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 CHCl₃에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 10-1 (10 g, 수율: 75%)를 얻었다.

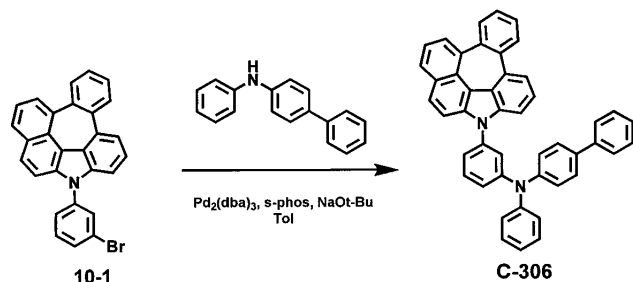
2) 화합물 C-304의 합성

화합물 10-1 (5.7 g, 12.77 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.73 g, 0.638 mmol), 및 K₂CO₃ (3.5 g, 25.54 mmol)에 톨루엔 50 mL, EtOH 13mL, 정제수 13 mL을 투입한 후 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤, 생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 CHCl₃에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-304 (2.9 g, 수율: 43%)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, DMSO-d₆, δ) 8.232-8.206(m, 3H), 8.111-8.098(d, 1H), 7.962-7.946(m, 1H), 7.929-7.903(m, 3H), 7.896-7.882(d, 1H), 7.806-7.802(d, 2H), 7.783-7.759(t, 2H), 7.738-7.723(d, 1H), 7.635-7.620(m, 1H), 7.581-7.548(m, 2H), 7.513-7.440(m, 6H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-304	533.6	119℃	208℃

[실시예 11] 화합물 C-306의 제조



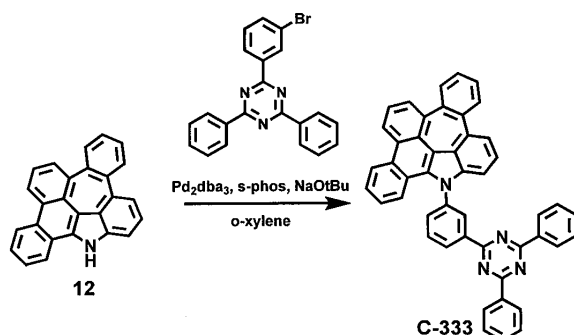
플라스크에 화합물 10-1 (5.0 g, 11.2 mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민 (3.0 g, 12.3 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.51 g, 0.56 mmol), S-Phos (0.46 g, 1.12 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (2.7 g, 28 mmol), 및 톨루엔 60 mL를 넣은 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그

네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-306 (2.3 g, 수율: 34%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, DMSO- d_6 , δ) 7.896-7.880(m, 1H), 7.863-7.850(d, 1H), 7.805-7.790(d, 1H), 7.758-7.745(d, 1H), 7.733-7.720(d, 1H), 7.669-7.650(m, 2H), 7.640-7.627(d, 1H), 7.604-7.566(m, 2H), 7.522-7.507(d, 1H), 7.447-7.384(m, 7H), 7.373-7.347(t, 1H), 7.335-7.311(t, 1H), 7.269-7.237(m, 6H), 7.175-7.156(d, 1H), 7.147-7.122(t, 1H), 7.069-7.062(t, 1H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-306	610.8	114℃	132℃

[실시예 12] 화합물 C-333의 제조

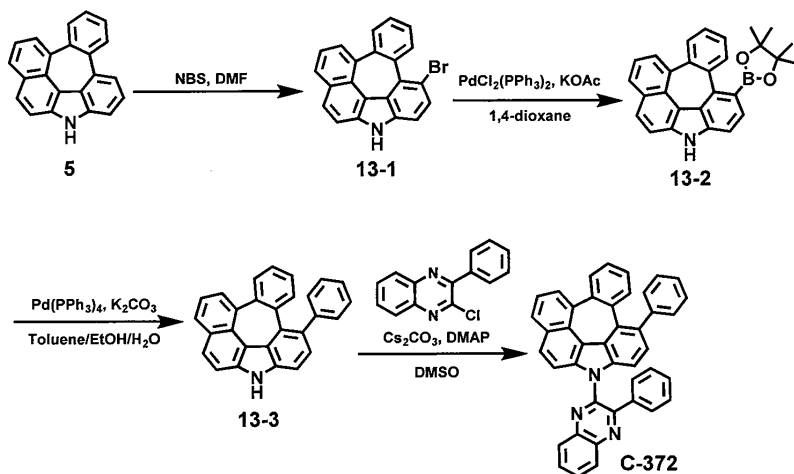


플라스크에 화합물 12 (2.6 g, 7.6 mmol), 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.95 g, 7.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 (0) (0.27 g, 0.3 mmol), 2-디시클로 헥실 포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐 (0.3 g, 0.7 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 (1.8 g, 19 mmol), 및 1,2-디메틸벤젠 50 mL를 넣어 녹인 후, 12 시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-333 (1.9 g, 수율: 38 %)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, DMSO- d_6 , δ) 9.086-9.072(d, 1H), 8.887-8.882(t, 1H), 8.821-8.807(d, 1H), 8.714-8.699(d, 4H), 8.676-8.663(d, 1H), 8.014-7.988(t, 1H), 7.883-7.833(m, 3H), 7.781-7.768(d, 1H), 7.691-7.665(t, 2H), 7.640-7.575(m, 6H), 7.540-7.485(m, 3H), 7.399-7.343(m, 3H), 6.982-6.968(d, 1H)

화합물	MW	M.P.	Tg
C-333	648.77	195℃	165℃

[실시예 13] 화합물 C-372의 제조



1) 화합물 13-1의 합성

플라스크에 화합물 5 (70 g, 240 mmol), N-브로모숙신이미드 (40.6 g, 255 mmol), 및 디메틸포름아마이드 1200 mL를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 0℃에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 13-1 (68 g, 수율: 76 %)을 얻었다.

2) 화합물 13-2의 합성

플라스크에 화합물 13-1 (47.3 g, 127 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (42 g, 166 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐디클로라이드 (II) (4.5 g, 6.4 mmol), 아세트산칼륨 (25 g, 255 mmol), 및 1,4-옥산 635 mL를 넣어 녹인 후, 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 13-2 (31.5 g, 수율: 59 %)을 얻었다.

3) 화합물 13-3의 합성

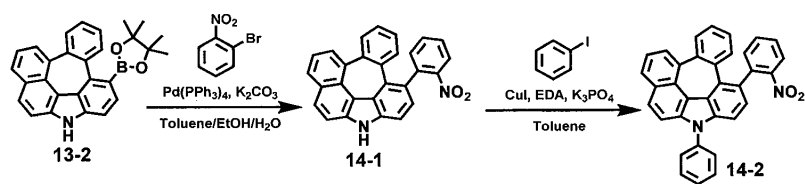
플라스크에 화합물 13-2 (4.5 g, 10.7 mmol), 1-브로모벤젠 (1.9 g, 11.85 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.63 g, 0.54 mmol), 탄산칼륨 (3.7 g, 26.95 mmol), 톨루엔 54 mL, 에탄올 13 mL, 및 물 13 mL를 넣어 녹인 후 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 13-3 (2.2 g, 수율: 56 %)을 얻었다.

4) 화합물 C-372의 합성

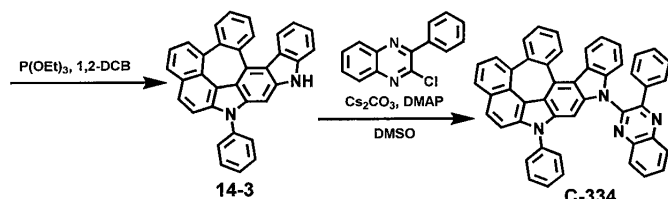
플라스크에 화합물 13-3 (2.2 g, 5.9 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀살린 (1.58 g, 6.57 mmol), 탄산세슘 (3.89 g, 11.96 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.36 g, 2.99 mmol), 및 디메틸 일산화황 30 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 100℃에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-372 (2.9 g, 수율: 85 %)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.	Tg
C-372	571.68	210℃	167℃

[0287] [실시예 14] 화합물 C-334의 제조



[0288]



[0289]

[0290] 1) 화합물 14-1의 합성

[0291] 플라스크에 화합물 13-2 (27 g, 64.7 mmol), 1-브로모-2-니트로벤젠 (14.4 g, 71.2 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (3.7 g, 3.2 mmol), 탄산칼륨 (22.4 g, 162 mmol), 톨루엔 320 mL, 에탄올 80 mL, 및 물 80 mL를 넣어 녹인 후 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 14-1 (26.7 g, 수율: 100 %)을 얻었다.

[0292] 2) 화합물 14-2의 합성

[0293] 플라스크에 화합물 14-1 (26.7 g, 64.7 mmol), 1-아이오도벤젠 (18 mL, 162 mmol), 요오드화제일구리 (18.5 g, 97 mmol), 에틸렌다이아민 (13 mL, 194 mmol), 인산칼륨 (27.4 g, 129 mmol), 및 톨루엔 325 mL를 넣어 녹인 후 2시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 14-2 (15.7 g, 수율: 49 %)을 얻었다.

[0294] 3) 화합물 14-3의 합성

[0295] 플라스크에 화합물 14-2 (13.1 g, 26.8 mmol), 트리에틸포스파이트 180 mL, 및 1,2-다이클로로벤젠 180 mL를 넣고, 200℃로 2시간 교반하였다. 반응이 끝나면 감압증류하여 용매를 제거한 후, 상온으로 냉각하고 헥산을 넣어 고체를 얻었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 14-3 (0.71 g, 수율: 5.8 %)을 얻었다.

[0296] 4) 화합물 C-334 의 합성

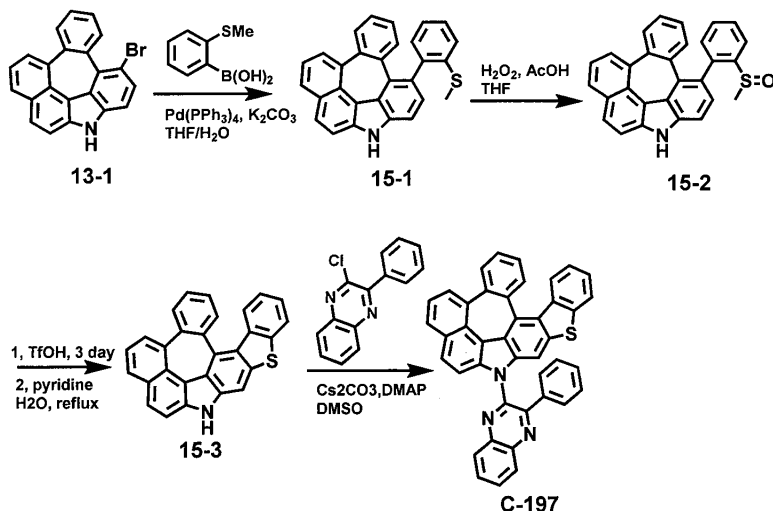
[0297] 플라스크에 화합물 14-3 (0.71 g, 1.56 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀리딘 (0.45 g, 1.87 mmol), 탄산세슘 (1.01 g, 3.12 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.095 g, 0.78 mmol), 및 디메틸 일산화황 30 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 100℃에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수와 메탄올을 넣었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토 그래피로 분리하여 화합물 C-334 (0.50 g, 수율: 49 %)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDCl₃, δ) 8.333-8.248(m, 3H), 8.192-8.099(m, 1H), 7.911-7.820(m, 3H), 7.767-7.754(d, 1H), 7.613-7.526(m, 5H), 7.488-7.410(m, 4H), 7.395-7.347(m, 3H), 7.329-7.296(m, 2H), 7.230-7.205(m, 2H), 7.179-7.153(m, 1H), 7.130-7.075(m, 1H), 7.056-7.030(m, 1H), 6.874-6.688(m, 1H)

[0298]

화합물	MW	M.P.
C-334	660.78	290℃

[실시예 15] 화합물 C-197의 제조



1) 화합물 15-1의 합성

플라스크에 화합물 13-1 (40 g, 108 mmol), (2-메틸티오펜일)보론산(25.4 g, 153.5 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (6.26 g, 5.40 mmol), 탄산칼륨 (26.3 g, 272.0 mmol), 테트라하이드로푸란 536 mL 및 증류수 134 mL를 넣어 녹인 후 100℃에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 15-1 (40 g, 수율: 89 %)을 얻었다.

2) 화합물 15-2의 합성

플라스크에 화합물 15-1 (40 g, 96.8 mmol), 테트라하이드로푸란 400 mL, 아세트산 200 mL 및 34.5 %의 과산화수소 (12.6 mL, 145.2 mmol)를 넣어 녹인 후 상온에서 20시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 혼합물을 농축시킨 후, 염화메틸렌과 탄산수소나트륨 수용액으로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시켜 화합물 15-2 (42 g, 수율: 100 %)을 얻었다.

3) 화합물 15-3의 합성

화합물 15-2 (42 g, 96.4 mmol)을 트리플루오로메탄술폰산 190 mL에 녹인 후 상온에서 3일 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 0℃에서 혼합물에 피리딘 50 mL 와 1M NaOH 수용액을 넣어 pH를 7 내지 8로 맞춘 후, 100℃에서 1시간 동안 환류시켰다. 필터를 통하여 용매를 제거한 후 생성된 고체를 칼럼으로 분리하여 화합물 15-3 (9.1 g, 수율: 24 %)을 얻었다.

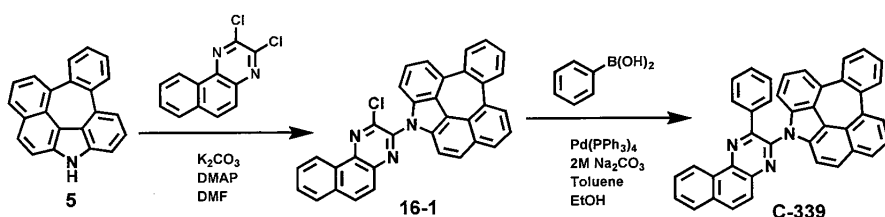
4) 화합물 C-197 의 합성

플라스크에 화합물 15-3 (4 g, 10.1 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀리딘 (3 g, 12.1 mmol), 탄산세슘 (6.6 g, 20.2 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.62 g, 5.1 mmol), 및 디메틸 일산화황 50 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 100℃에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수와 메탄올을 넣었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-197 (4.8 g, 수율: 79 %)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.337-8.310(m, 1H), 8.247-8.202(m, 1H), 8.196-8.151(m, 1H), 7.957-7.945(m, 1H), 7.928(s, 1H), 7.912-7.837(m, 3H), 7.794-7.728(m, 3H), 7.685-7.672(d, 1H), 7.531-7.498(m, 1H), 7.469-7.414(m, 2H), 7.348-7.300(m, 2H), 7.262-7.173(m, 4H), 7.102-7.087(d, 1H), 7.036-6.955(m, 1H)

화합물	MW	M.P.	Tg
C-197	601.73	317℃	194℃

[실시예 16] 화합물 C-339의 제조



1) 화합물 16-1의 합성

화합물 5 (15.6 g, 53.5 mmol), 2,3-디클로로벤조[*f*]퀴놀살린 (20 g, 80.3 mmol), 탄산칼륨 (15 g, 107.0 mmol), *N,N*-디메틸-4-피리딘아민 (3.3 g, 26.7 mmol), 및 *N,N*-디메틸포름아미드 270 mL를 첨가한 후 150℃에서 4 시간 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 16-1 (2.2 g, 8 %)를 얻었다.

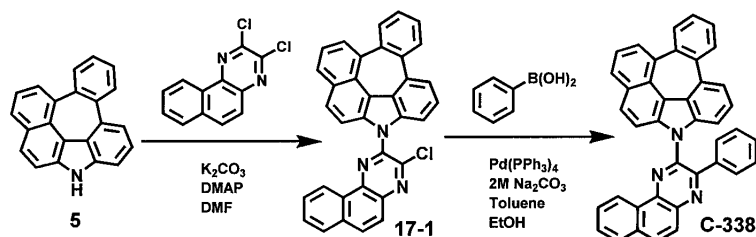
2) 화합물 C-339의 합성

반응용기에 화합물 16-1 (2.2 g, 4.4 mmol), 페닐보론산 (800 mg, 6.6 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (250 mg, 0.2 mmol), 탄산나트륨 (1.2 g, 10.9 mmol), 톨루엔 20 mL, 및 에탄올 5 mL를 첨가한 후 130℃에서 3 시간 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-339 (1.8 g, 76 %)를 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 9.403-9.390(d, 1H), 8.119-8.105(d, 1H), 8.012-7.997(d, 1H), 7.994-7.979(d, 1H), 7.867-7.851(m, 1H), 7.847-7.822(td, 1H), 7.815-7.788(td, 1H), 7.734-7.722(d, 1H), 7.686-7.656(m, 4H), 7.600-7.585(m, 1H), 7.509-7.494(d, 1H), 7.404-7.389(m, 2H), 7.385-7.359(t, 1H), 7.295-7.264(m, 2H), 7.250-7.219(t, 1H), 7.208-7.182(m, 3H).

화합물	MW	M.P.	Tg
C-339	545.65	247℃	148℃

[실시예 17] 화합물 C-338의 제조



1) 화합물 17-1의 합성

화합물 5 (15.6 g, 53.5 mmol), 2,3-디클로로벤조[*f*]퀴녹살린 (20 g, 80.3 mmol), 탄산칼륨 (15 g, 107.0 mmol), N,N-디메틸-4-피리딘아민 (3.3 g, 26.7 mmol), 및 N,N-디메틸포름아미드 270 mL를 첨가한 후 150℃에서 4 시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 17-1 (2.8 g, 10 %)를 얻었다.

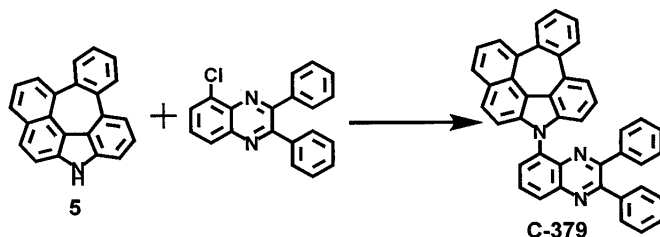
2) 화합물 C-338의 합성

반응용기에 화합물 17-1 (2.7 g, 5.4 mmol), 페닐보론산 (1 g, 8.0 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (310 mg, 0.3 mmol), 탄산나트륨 (1.4 g, 13.4 mmol), 톨루엔 28 mL, 및 에탄올 7 mL를 첨가한 후 130℃에서 3 시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-338 (2.5 g, 86 %)를 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDCl₃, δ) 9.119-9.106(d, 1H), 8.160-8.125(dd, 2H), 8.001-7.988(d, 1H), 7.878-7.862(m, 1H), 7.782-7.755(td, 1H), 7.748-7.726(m, 2H), 7.709-7.685(t, 2H), 7.623-7.594(m, 3H), 7.518-7.503(d, 1H), 7.418-7.371(m, 4H), 7.305-7.271(m, 2H), 7.200-7.182(m, 3H).

화합물	MW	M.P.	Tg
C-338	545.65	299℃	149℃

[실시예 18] 화합물 C-379의 제조

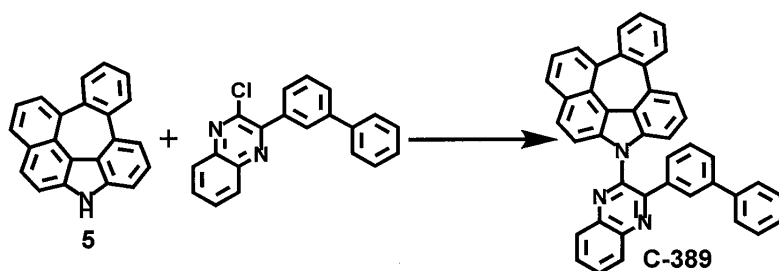


플라스크에 화합물 5 (4.0 g, 13.73 mmol), 5-클로로-2,3-디페닐퀴녹살린 (5.2 g, 16.47 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.629 g, 0.686 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐 (0.564 mg, 1.0 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 (3.9 g, 41 mmol), 및 1,2-디메틸벤젠 80 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-379 (2.8 g, 수율: 35.67%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.323-8.307(d, $J=7.2\text{Hz}$, 1H), 7.947-7.935(m, 2H), 7.883-7.867 (m, 1H), 7.762-7.749(d, $J=7.2\text{Hz}$, 2H), 7.686-7.673(d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 7.633-7.603(m, 2H), 7.568-7.556(d, $J=7.2\text{Hz}$, 2H), 7.404-7.337 (m, 6H), 7.307-7.281(t, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 7.195-7.281(m, 3H), 7.144-7.110(t, $J=7.2\text{Hz}$, 1H), 7.087-7.074(d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 7.010-6.990(m, 2H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-379	571.67	135.60℃	142℃

[실시예 19] 화합물 C-389의 제조

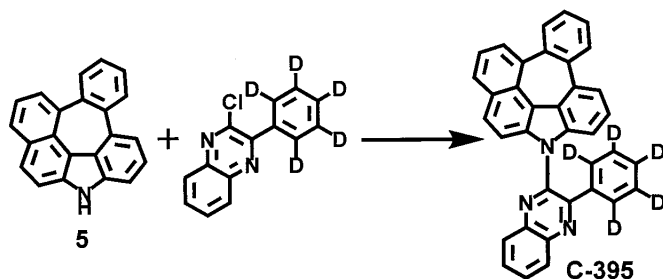


플라스크에 화합물 5 (6.0 g, 21 mmol), 2-([1,1'-바이페닐]-3-일)-3-클로로퀴놀린 (7.8 g, 25 mmol), 탄산 칼륨 (8.5 g, 62 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.126 g, 1 mmol), 디메틸포름아마이드 100 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-389 (8.8 g, 수율: 74%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.338-8.325(d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 8.228-8.212(d, $J=8.7\text{Hz}$, 1H), 7.907-7.877(m, 3H), 7.783-7.758(m, 2H), 7.686-7.683(d, $J=7.8\text{Hz}$, 2H), 7.630-7.590(m, 1H), 7.523-7.508(d, $J=9\text{Hz}$, 2H), 7.447-7.390 (m, 3H), 7.341-7.332(m, 2H), 7.284-7.236(m, 3H), 7.205(s, 1H), 7.088-7.066(m, 1H), 7.016-7.002(d, $J=7.8\text{Hz}$, 2H), 6.903-6.877(m, 2H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-389	571.67	120.06℃	202℃

[0339] [실시예 20] 화합물 C-395의 제조



[0340]

[0341] 플라스크에 화합물 5 (7.9 g, 27 mmol), 2-클로로-3-(페닐-D5)퀴녹살린 (7.9 g, 33 mmol), 탄산칼륨 (11.24 g, 81 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.166 g, 1 mmol), 및 디메틸포름아마이드 135 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-395 (3.2 g, 수율: 23.7%)을 얻었다.

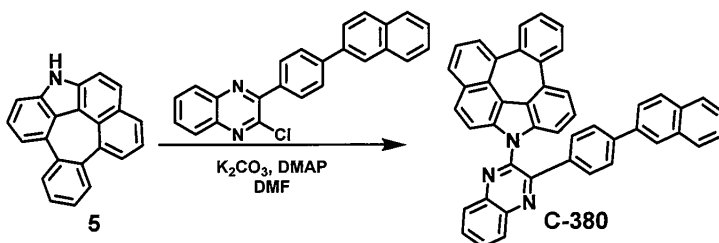
[0342]

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.318-8.305(d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 8.164-8.151(d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 7.892-7.834(m, 3H), 7.740-7.728(d, $J=7.2\text{Hz}$, 1H), 7.691-7.679(d, $J=7.2\text{Hz}$, 2H), 7.603-7.587(m, 1H), 7.508-7.493(d, $J=9\text{Hz}$, 1H), 7.413-7.370 (m, 3H), 7.291-7.250(m, 2H), 7.212-7.197 (d, $J=9\text{Hz}$, 1H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-395	500.62	127°C	158°C

[0343]

[0344] [실시예 21] 화합물 C-380의 제조



[0345]

[0346] 플라스크에 화합물 5 (10 g, 28.82 mmol), 2-클로로-3-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)퀴녹살린 (7.0 g, 24.02 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (1.5 g, 12.01 mmol), 탄산칼륨 (3.3 g, 24.02 mmol), 및 디메틸포름아마이드 (130 mL)를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-380 (8.8 g, 수율: 59%)을 얻었다.

[0347]

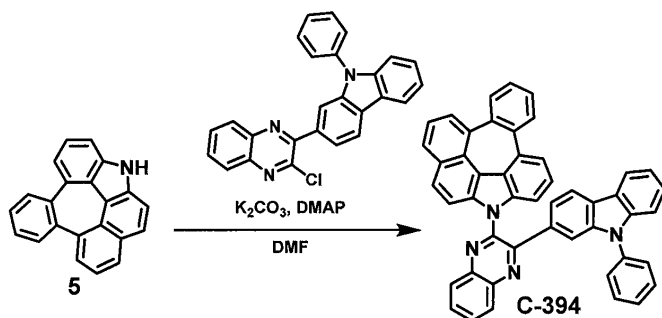
^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.33-8.32 (d, $J=6.0\text{ Hz}$, 1H), 8.16-8.15 (d, $J=6.0\text{ Hz}$, 1H), 7.88-7.84 (m, 4H), 7.80-7.77 (m, 3H), 7.74-7.73(d, $J=6.0\text{ Hz}$, 1H), 7.69-7.66 (m, 4H), 7.57-7.56 (m, 2H), 7.53-7.50 (m, 3H), 7.43-7.37 (m, 5H), 7.32-7.23 (m, 3H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-380	621.74	145.6℃	262.7℃

[0348]

[0349]

[실시예 22] 화합물 C-394의 제조



[0350]

[0351]

플라스크에 화합물 5 (6 g, 20.59 mmol), 2-(3-클로로퀴놀린-2-일)-9-페닐-9H-카바졸 (9.1 g, 22.65 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (1.2 g, 10.29 mmol), 탄산칼륨 (2.8 g, 20.59 mmol), 및 디메틸포름아마이드 (100 mL)를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-394 (9.6 g, 수율: 70%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.31-8.30 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 8.13-8.11 (d, J = 12.0 Hz, 1H), 8.04-8.03 (d, J = 6.0Hz, 1H), 7.94-7.93 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.86-7.81 (m, 3H), 7.74-7.73 (d, J =6.0 Hz, 1H), 7.65-7.63 (d, J = 12.0 Hz, 2H), 7.61-7.60 (m, 1H), 7.44-7.36 (m, 4H), 7.30-7.28 (m, 1H), 7.23-7.15 (m, 6H), 6.98-6.93 (m, 3H), 6.88-6.87 (m, 2H).

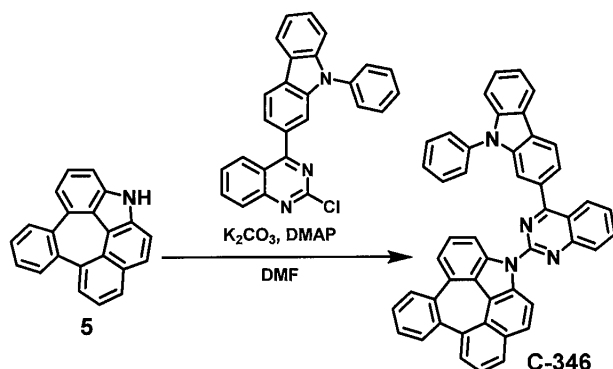
[0352]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-394	660.78	154.09℃	290.5℃

[0353]

[0354]

[실시예 23] 화합물 C-346의 제조



[0355]

[0356]

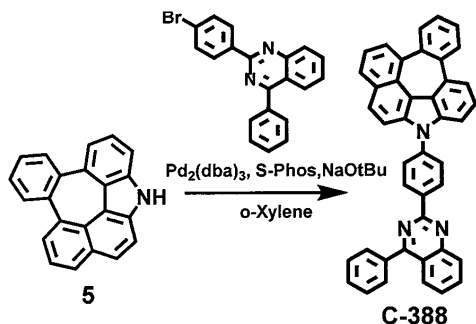
플라스크에 화합물 5 (6.0 g, 20.59 mmol), 2-(2-클로로퀴나졸린-4-일)-9-페닐-9H-카바졸 (9.1 g, 22.65 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (1.2 g, 10.29 mmol), 탄산칼륨 (2.8 g, 20.59 mmol), 및 디메틸포름아마이드

드 (100 mL)를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-346** (10 g, 수율: 77%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 9.01-9.00 (d, $J=6.0$ Hz, 1H), 8.85-8.84 (d, $J=6.0$ Hz, 1H), 8.34-8.33 (d, $J=6.0$ Hz, 1H), 8.23-8.22 (d, $J=6.0$ Hz, 2H), 8.11-8.10 (d, $J=6.0$ Hz, 1H), 8.05 (s, 1H), 7.86-7.82 (m, 2H), 7.79-7.77 (m, 1H), 7.75-7.71 (m, 3H), 7.67-7.64 (m, 3H), 7.59-7.57 (m, 2H), 7.53-7.52 (m, 1H), 7.50-7.47 (m, 3H), 7.43-7.37 (m, 2H), 7.36-7.35 (m, 4H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-346	660.78	158℃	189.9℃

[실시예 24] 화합물 C-388의 제조

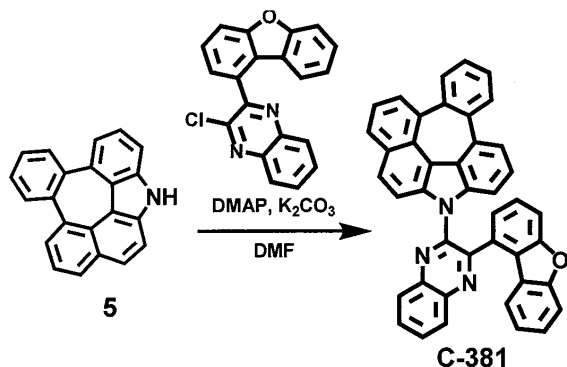


플라스크에 화합물 **5** (12 g, 41.1 mmol), 2-(4-브로모페닐)-4-페닐퀴나졸린 (14.8 g, 41.1 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 (0) (1.5 g, 1.6 mmol), 2-디사이클로헥실포스포노-2'-6'-디메톡시바이페닐 (1.7 g, 4.1 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (9.8 g, 102.9 mmol) 및 자일렌 (274 mL)를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 식힌 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-388** (1.1 g, 수율: 4.7%)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.927-8.912 (d, $J=7.8\text{Hz}$, 2H), 8.199-8.160(m, 2H), 7.925-7.910(m, 3H), 7.865-7.855(m, 1H), 7.759-7.672(m, 6H), 7.620-7.587 (m, 5H), 7.540-7.525 (d, $J=9\text{Hz}$, 1H), 7.401-7.375(m, 3H), 7.339-7.328 (m, 2H).

화합물	MW	Tg	M.P.
C-388	571.6	133℃	241 ℃

[0364] [실시예 25] 화합물 C-381의 제조



[0365]

[0366] 플라스크에 화합물 5 (5.7 g, 19.5 mmol), 2-클로로-3-(다이벤조[b,d]퓨란-1-일)퀴녹살린 (7.7 g, 23.2 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (0.1 g 0.9 mmol), 탄산칼륨 (8.1 g, 58.5 mmol), 및 다이메틸포름아마이드 99 mL 를 넣어 녹인 후 3시간 30분 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 식힌 후, 메탄올과 물을 넣고 필터하였다. 이 후에 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-381 (6 g, 수율: 52 %)을 얻었다.

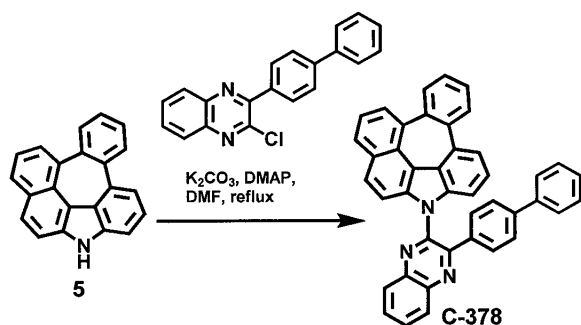
^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.324-8.271(m, 2H), 7.962-7.942 (m, 2H), 7.867-7.855(d, $J=7.2\text{Hz}$, 1H), 7.821-7.805(m, 1H), 7.705-7.693(d, $J=7.2\text{Hz}$, 1H), 7.655-7.595(m, 3H), 7.567-7.537 (m, 2H), 7.394-7.272(m, 8H), 7.124-7.155 (m, 1H), 6.984-6.958(t, $J=7.2\text{Hz}$, 1H) , 6.830-6.817 (d, $J=7.8\text{Hz}$, 1H)

[0367]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-381	585.6	154.79℃	233℃

[0368]

[0369] [실시예 26] 화합물 C-378의 제조



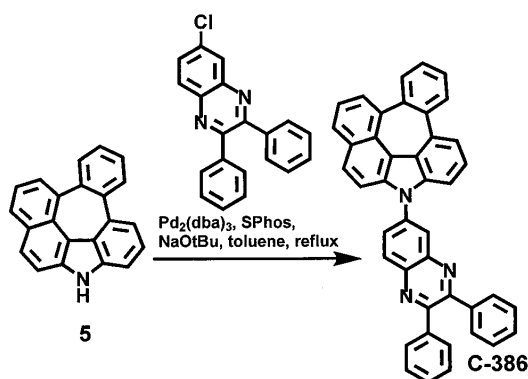
[0370]

[0371] 플라스크에 화합물 5 (3.8 g, 13 mmol), 2-([1,1'-바이페닐]-4-일)-3-클로로퀴녹살린 (5.0 g, 16 mmol), DMAP (800 mg, 7 mmol), 탄산 칼륨 (3.6 g, 26 mmol), 및 디메틸포름아마이드 55 mL를 넣어 녹인 후 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-378 (1.4 g, 수율: 19 %)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDC13, δ) 8.33-8.32(m, 1H), 8.17-8.16(m, 1H), 7.90-7.84(m, 3H), 7.74(d, J=7.50 Hz, 1H), 7.69(t, J= 6.72 Hz, 2H), 7.63 (d, J=8.4 Hz, 2H), 7.61-7.59(m, 1H), 7.51(d, J=9.00 Hz, 1H), 7.45-7.37(m, 7H), 7.35-7.27 (m, 5H), 7.23 (d, J= 8.79 Hz, 1H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-378	571.68	137.6℃	189℃

[실시예 27] 화합물 C-386의 제조

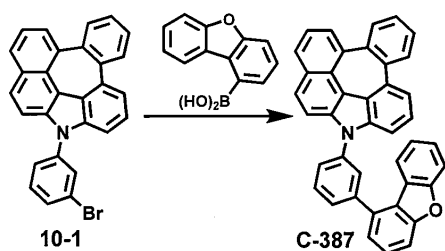


플라스크에 화합물 5 (5.1 g, 17 mmol), 6-클로로-2,3-디페닐퀴녹살린 (5.0 g, 16 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 (0) (578 mg, 0.631 mmol), 2-디사이클로헥실포스포노-2'-6'-디메톡시바이페닐 (648 mg, 2 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (3.8 g, 39 mmol), 및 톨루엔 100 mL를 넣어 녹인 후 16시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-386 (7.6 g, 수율: 84%)을 얻었다.

¹H NMR (600MHz, CDC13, δ) 8.01 (s, 1H), 8.40 (d, J= 5.4 Hz, 1H), 7.99 (dd, J= 5.4 Hz; 2.22 Hz, 1H), 7.89-7.87 (m, 1H), 7.79-7.77 (m, 2H), 7.74-7.70 (m, 2H), 7.63-7.60 (m, 2H), 7.59-7.56 (m, 4H), 7.44 - 7.34 (m, 11H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-386	571.68	138.80℃	295℃

[실시예 28] 화합물 C-387 의 제조



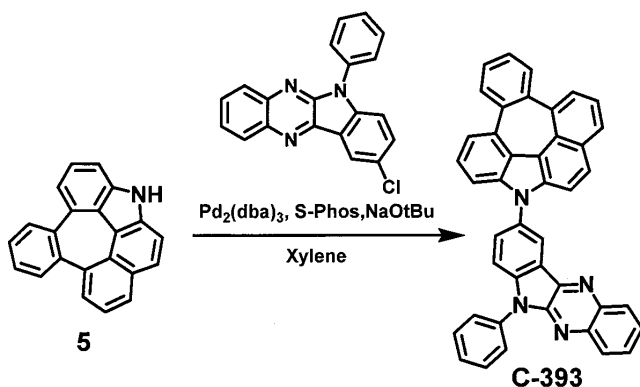
화합물 10-1 (6.6 g, 14.78 mmol), 디벤조[b,d]퓨란-1-일-보론산 (3.4 g, 16.24 mmol), 테트라키스(트리페닐포

스핀)팔라듐(0) (0.85 g, 0.739 mmol), 및 탄산칼륨 (4 g, 29.57 mmol)에 톨루엔 60 mL, 에탄올 15 mL, 및 정제수 15 mL 을 투입한 후 하룻동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤 생성된 고체를 감압여과하였다. 고체를 CHCl_3 에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-387** (3.5 g, 수율: 45%)를 얻었다.

^1H NMR (600MHz,DMSO, δ) 7.953-7.927(m,2H), 7.896-7.872(t,2H), 7.848-7.810(m,3H), 7.793-7.746(m,4H), 7.656-7.601(m,4H), 7.539-7.511(t,1H), 7.485-7.443(m,4H), 7.419-7.393(t,1H), 7.369-7.356(d,1H), 7.294-7.269(t,1H)

화합물	MW	M.P.	Tg
C-387	533.6	224℃	117℃

[실시예 29] 화합물 C-393의 제조

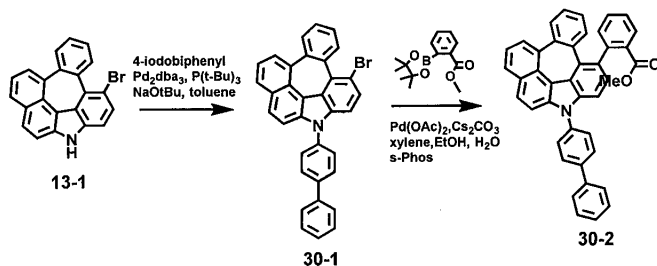


플라스크에 화합물 **5** (4.4 g, 15.16 mmol), 9-클로로-6-페닐-6H-인돌로[2,3,b]퀴녹살린 (5.0 g, 15.16 mmol), 트리스(디메틸릴렌아세톤)디팔라듐(0) (0.5 g, 0.606 mmol), 2-디시클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시비페닐 (0.6 g, 1.516 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 (12 g, 37.90 mmol), 및 1,2-디메틸벤젠 100 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **C-393** (1.9 g, 수율: 21 %)을 얻었다.

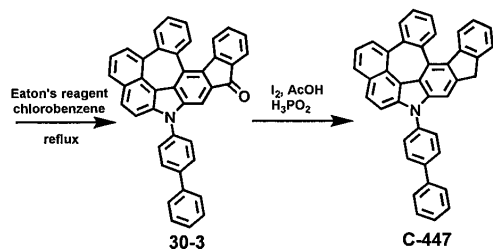
^1H NMR (600MHz,CDC13, δ) 8.74 (s, 1H), 8.33-8.32 (d, J=6.0Hz, 1H), 8.15-8.14 (d, J=6.0Hz, 1H), 7.91-7.90 (m, 1H), 7.84-8.73 (m, 2H), 7.80-7.78 (m, 5H), 7.77-7.69 (m, 5H), 7.64-7.63 (m, 1H), 7.60-7.59 (m, 1H), 7.50-7.49 (d, J=6.0Hz, 1H), 7.43-7.41 (m, 3H), 7.36-7.34 (t, J=6.0 Hz, 1H), 7.28-7.27 (m, 1H)

화합물	MW	Tg	M.P.
C-393	584.67	129.07℃	294℃

[0389] [실시예 30] 화합물 C-447의 제조



[0390]



[0391]

[0392] 1) 화합물 30-1의 합성

[0393] 플라스크에 화합물 13-1 (8.0 g, 21.6 mmol), 4-요오도바이페닐 (12.1 g, 43.2 mmol), 트리스(디벤질리덴아세트론)디팔라듐(0) (1.0 g, 1.08 mmol), 트리-*tert*-부틸포스핀 (0.87 mL, 2.16 mmol 50% 톨루엔용액), 소듐 *tert*-부톡사이드 (5.2 g, 54.0 mmol), 및 톨루엔 216 mL를 넣고 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 반응용액을 상온으로 냉각하고 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 30-1 (7.5 g, 66%)을 얻었다.

[0394] 2) 화합물 30-2의 합성

[0395] 플라스크에 화합물 30-1 (7.5 g, 14.4 mmol), 메틸 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥실보렌-2-일)벤조에이트 (4.5 g, 17.3 mmol), 팔라듐아세테이트 (Pd(OAc)₂) (323 mg, 1.44 mmol), 리간드(2-다이사이클로헥실포스포늄-2',6'-다이메톡시비페닐) (1.2 g, 2.88 mmol), 탄산세슘 (14 g, 43.2 mmol), 자일렌 80 mL, 에탄올 40 mL 및 증류수 40 mL를 넣고 18시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 증류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조시켰다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 30-2 (2.2 g, 수율: 27%)을 얻었다.

[0396] 3) 화합물 30-3의 합성

[0397] 플라스크에 화합물 30-2 (2.2 g, 3.8 mmol), 이튼 시약(Eaton's reagent) 2 mL 및 염화벤젠 13 mL을 넣고 18시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 탄산수소나트륨 수용액을 넣었다. 아세트산에틸(EA)로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조시켰다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 30-3 (1.5 g, 수율: 71%)을 얻었다.

[0398] 4) 화합물 C-447의 합성

[0399] 플라스크에 요오드 (244 mg, 0.96 mmol), 하이포아인산 (0.48 mL, 4.4 mmol, 50% 수용액) 및 아세트산 14 mL을 넣고 80°C에서 30분 간 교반하였다. 여기에 화합물 30-3 (1.5 g, 2.75 mmol)을 천천히 적가한 후 4시간 동안 환류교반하였다. 반응 용액을 상온으로 냉각하고 석출된 고체를 여과하고, 다량의 물과 에탄올로 씻어주었다. 생성된 고체는 필터를 통하여 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-447 (270 mg, 수율: 18 %)을 얻었다.

^1H NMR (600MHz, CDCl_3 , δ) 8.051-8.036(dd, 1H), 7.967-7.953(m, 1H), 7.920-7.909(d, 1H), 7.857-7.843(d, 2H), 7.797-7.784(d, 1H), 7.720-7.698(m, 2H), 7.669-7.643(m, 3H), 7.562-7.500(m, 5H), 7.463-7.416(m, 5H), 7.217-7.190(m, 2H), 4.153-4.188(d, 1H), 3.949-3.913(d, 1H).

[0400]

[0401]

이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 특성을 설명한다.

[0402]

[소자 제조예 1 내지 16] 호스트로서 본원에 따른 화합물을 증착한 OLED 소자 제조

[0403]

본원에 따른 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-2**를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공주입층과 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 하기 표 1에 기재된 호스트 재료를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-39**를 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트량의 3중량%의 양으로 도판트를 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 **ET-1** 과 화합물 **EI-1**을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 **EI-1**을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

[0404]

[비교예 1] 호스트로서 종래의 화합물을 포함하는 OLED 소자 제조

[0405]

발광층의 호스트로서 화합물 A를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0406]

이상과 같이 제조된 적색 발광 OLED 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, 및 5,000 nits의 휘도에서의 전류 값을 각 소자에 일정하게 가하였을 때, 처음 나오는 빛의 세기를 100%로 보고, 그 세기가 99%로 떨어질 때까지의 걸리는 시간(수명; T99)을 하기 표 1에 나타내었다.

[0407] [표 1]

	호스트 재료	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	수명 (T99, hr)
소자 제조예 1	C-8	2.9	26	41
소자 제조예 2	C-301	2.9	24.5	45.8
소자 제조예 3	C-10	2.9	21.9	45.4
소자 제조예 4	C-7	3.2	25.2	40.4
소자 제조예 5	C-302	3.1	23.3	52.6
소자 제조예 6	C-9	2.8	24.9	67.4
소자 제조예 7	C-303	3.1	27.3	7.46
소자 제조예 8	C-307	3.1	25.2	25.0
소자 제조예 9	C-13	3.0	27.1	29.3

[0408]

소자 제조예 10	C-386	2.8	23.2	31.2
소자 제조예 11	C-333	2.8	26.3	23.6
소자 제조예 12	C-338	2.9	23.4	55.1
소자 제조예 13	C-339	3.4	27.4	34.3
소자 제조예 14	C-389	3.3	27.3	46.7
소자 제조예 15	C-394	3.1	23.3	17.8
소자 제조예 16	C-346	3.0	23.7	9.1
비교예 1	A	9.2	11.6	0

[0409]

[0410] 상기 표 1로부터, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는, 종래의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비하여 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/또는 개선된 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다. 또한, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 고용합된 구조여서 유사한 분자량의 다른 유기 전계 발광 화합물과 비교해 유리 전이 온도(Tg)가 상대적으로 높아, 열적 안정성이 양호함을 알 수 있다.

[0411] [비교예 2] 전자 버퍼층을 포함하지 않는 OLED 소자 제조

[0412] 전자 버퍼층을 포함하지 않는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤 및 이소프로필알코올을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-7} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-3**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 **FH-1**을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **FD-1**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 20 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 전자 전달 재료로서 한쪽 셀에 화합물 **ET-1**을 넣고 다른 한쪽 셀에 화합물 **EI-1**을 1:1의 중량비로 증발시켜 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 화합물 **EI-1**을 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0413] [소자 제조예 17] 본원에 따른 화합물을 전자 버퍼층에 포함하는 OLED 소자 제조

[0414] 소자 제조예 17에서는, 전자 전달층의 두께를 30 nm로 줄이고, 발광층과 전자 전달층 사이에 화합물 **C-8**을 포함하는 전자 버퍼층 5 nm를 삽입한 것 외에는 비교예 2와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0415] 상기 비교예 2 및 소자 제조예 17의 유기 전계 발광 소자의 1 mA/cm^2 휘도 기준의 구동 전압, 색좌표, 및 2,000 nits의 휘도에서의 전류 값을 각 소자에 일정하게 가하였을 때, 처음 나오는 빛의 세기를 100%로 보고, 그 세기가 90%로 떨어질 때까지의 걸리는 시간(수명; T90)을 하기 표 2에 나타내었다.

[0416] [표 2]

	전자 버퍼 재료	구동 전압 (V)	색좌표 (x)	색좌표 (y)	수명 (T90, hr)
비교예 2	-	3.7	0.139	0.096	61.3
소자 제조예 17	C-8	3.9	0.140	0.100	73.2

[0417]

[0418] 상기 표 2로부터, 본원의 화합물을 전자 버퍼층에 포함한 소자 제조예 17의 OLED 소자는 비교예 2의 OLED 소자에 비해, 낮은 구동 전압 및 개선된 수명 특성을 나타냄을 확인할 수 있다.

[0419] [소자 제조예 18] 본원에 따른 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

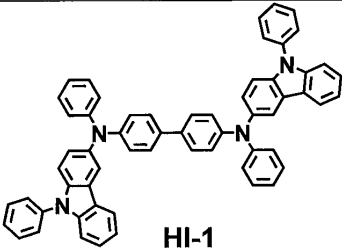
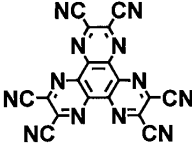
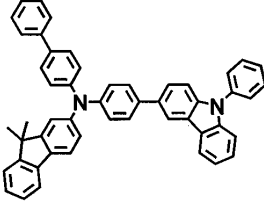
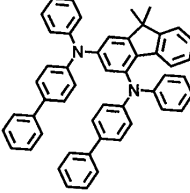
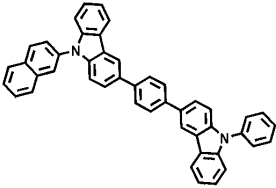
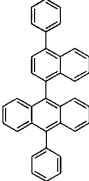
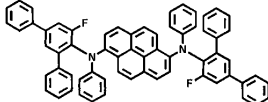
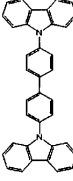
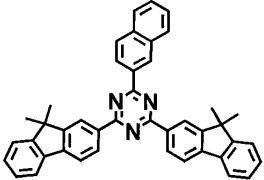
[0420] 소자 제조예 18에서는, 발광층을 다음과 같이 증착시킨 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다. 진공 증착 장비 내의 셀에 제1 호스트로서 화합물 **C-8**을 넣고, 다른 셀에 제2 호스트로서 화합물 **H2-6**을 넣어 1:1의 속도로 증발시키고, 또 다른 셀에는 화합물 **D-39**을 넣은 후, 세 물질을 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다.

[0421] 그 결과, 4.3V의 전압에서 20.8 cd/A 의 효율을 보였으며, 5000 cd/m^2 의 적색 발광이 확인되었으며, 5000 nit의

휘도에서 발광이 97%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 137시간이었다.

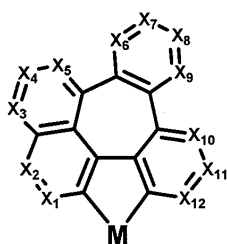
상기 소자 제조예들 및 비교예들에 사용된 화합물을 하기 표 3에 나타내었다.

[표 3]

정공 주입층/ 정공 전달층	 HI-1  HI-2  HT-1  HT-2  HT-3
발광층	 FH-1  FD-1  A
전자 버퍼층/ 전자 전달층/ 전자 주입층	 ET-1  EI-1

도면

도면1



专利名称(译)	有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020180099510A	公开(公告)日	2018-09-05
申请号	KR1020180021961	申请日	2018-02-23
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	YANG JEONG EUN 양정은 OH HONG SE 오홍세 KANG HEE RYONG 강희룡 KIM YOUNG GIL 김영길 CHO SANG HEE 조상희		
发明人	양정은 오홍세 강희룡 김영길 조상희		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C07D209/94 C07D401/04 C07D401/10 C07D401/14 C07D403/04 C07D403/14 C07D405/04 C07D405/10 C07D407/14 C07D409/04 C07D409/10 C07D409/14 C07D471/04 C07D471/16 C07D487/06 C07D491/048 C07D491/06 C07D495/04 C07D495/06 C07D513/04 C07D519/00 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K2211/1051 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092 C09K2211/185 C07D209/56 C07D403/10 C07D407/10 C07D407/12 C07D409/12 C07D471/14 C07D487/04 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/5096 H01L2251/5384 H01L51/006 H01L51/0074 H01L51/5056 H01L51/5088		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020170026014 2017-02-28 KR 1020170124285 2017-09-26 KR 1020170180988 2017-12-27 KR		
其他公开文献	KR102129236B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本申请涉及有机电致发光化合物和包含其的有机电致发光器件。通过包含本申请的有机电致发光化合物，可以提供具有良好的热稳定性，低驱动电压，高发光效率和/或寿命特性的有机电致发光器件。

