



공개특허 10-2020-0004253



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0004253  
(43) 공개일자 2020년01월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)	(71) 출원인
<i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)	롭엔드하스전자재료코리아유한회사
<i>H01L 51/52</i> (2006.01)	충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(52) CPC특허분류	(72) 발명자
<i>H01L 51/0071</i> (2013.01)	조상희
<i>H01L 51/5024</i> (2013.01)	경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
(21) 출원번호 10-2019-0078151	이효정
(22) 출원일자 2019년06월28일	경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
심사청구일자 없음	(뒷면에 계속)
(30) 우선권주장	(74) 대리인
1020180077056 2018년07월03일 대한민국(KR)	장춘

전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 복수 종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

### (57) 요 약

본원은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 제1 호스트 재료 및 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 제2 호스트 재료를 포함하고, 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물은 서로 다른, 복수 종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 특정 조합의 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료를 포함함으로써, 양호한 열적 안정성, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류

*H01L 51/52* (2013.01)

(72) 발명자

**김빛나리**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

**엄지원**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

**양정은**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

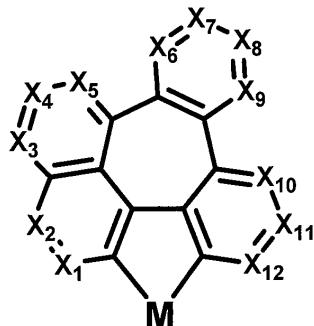
## 명세서

### 청구범위

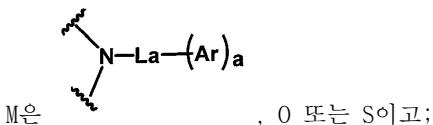
#### 청구항 1

제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료로서, 상기 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물은 하기 화학식 1로 표시되고, 상기 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물은 서로 다른 것인, 복수 종의 호스트 재료:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,



$X_1$  내지  $X_{12}$ 는 각각 독립적으로 N 또는  $CR_1$ 이며;

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  $R_1$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 Ar끼리 서로 연결되어 고리를 형성하거나, 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고,  $R_1$ 이 복수인 경우 각각의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

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

#### 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 La, Ar 및  $R_1$ 에서 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 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 헤드록시, (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 (3-30 원)헤테로아릴, (3-30원)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)아릴

실릴, 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, 복수 종의 호스트 재료.

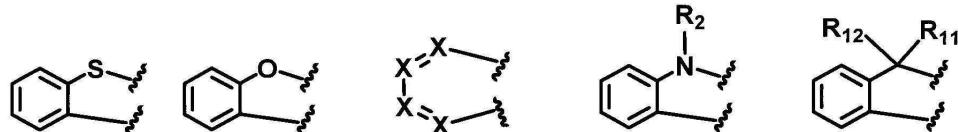
### 청구항 3

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, 복수 종의 호스트 재료.

### 청구항 4

제1항에 있어서,  $X_1$  내지  $X_{12}$  중 인접한 두 개가  $CR_1$ 이고, 인접한 두 개의  $R_1$ 이 연결되어 하기 화학식 2 내지 6 중 어느 하나의 고리를 형성하며, 상기 고리는 화학식 1로 표시되는 하나의 화합물에서 하나 이상 형성되는 것인, 복수 종의 호스트 재료:

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



상기 화학식 2 내지 6에서,

$R_2$ 는 수소, 중수소, 할로겐, 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;

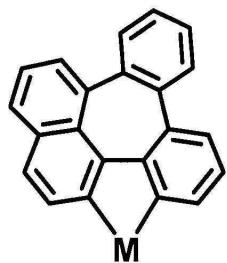
$R_{11}$  및  $R_{12}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

는  $CR_1$ 에서의 C와  $R_1$ 의 연결 부위를 나타낸다.

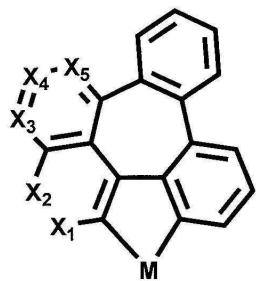
### 청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 7 내지 10 중 적어도 하나로 표시되는 것인, 복수 종의 호스트 재료:

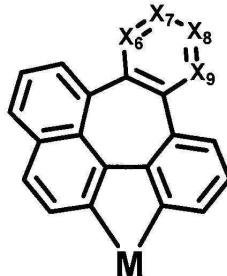
[화학식 7]



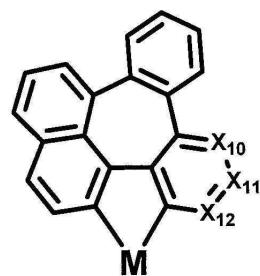
[화학식 8]



[화학식 9]



[화학식 10]

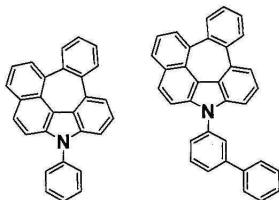


상기 화학식 7 내지 10에서,

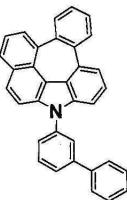
$X_1$  내지  $X_{12}$ , 및 M은 제1항에서 정의된 바와 같다.

#### 청구항 6

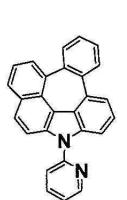
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택되는 하나 이상인 것인, 복수 종의 호스트 재료.



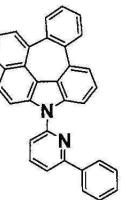
C-1



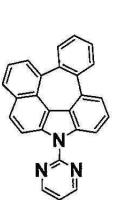
C-2



C-3



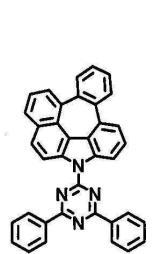
C-4



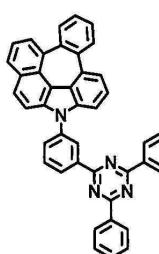
C-5



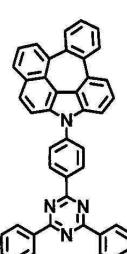
C-6



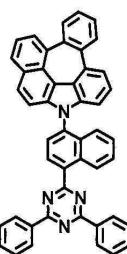
C-7



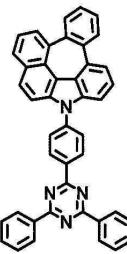
C-8



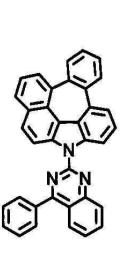
C-9

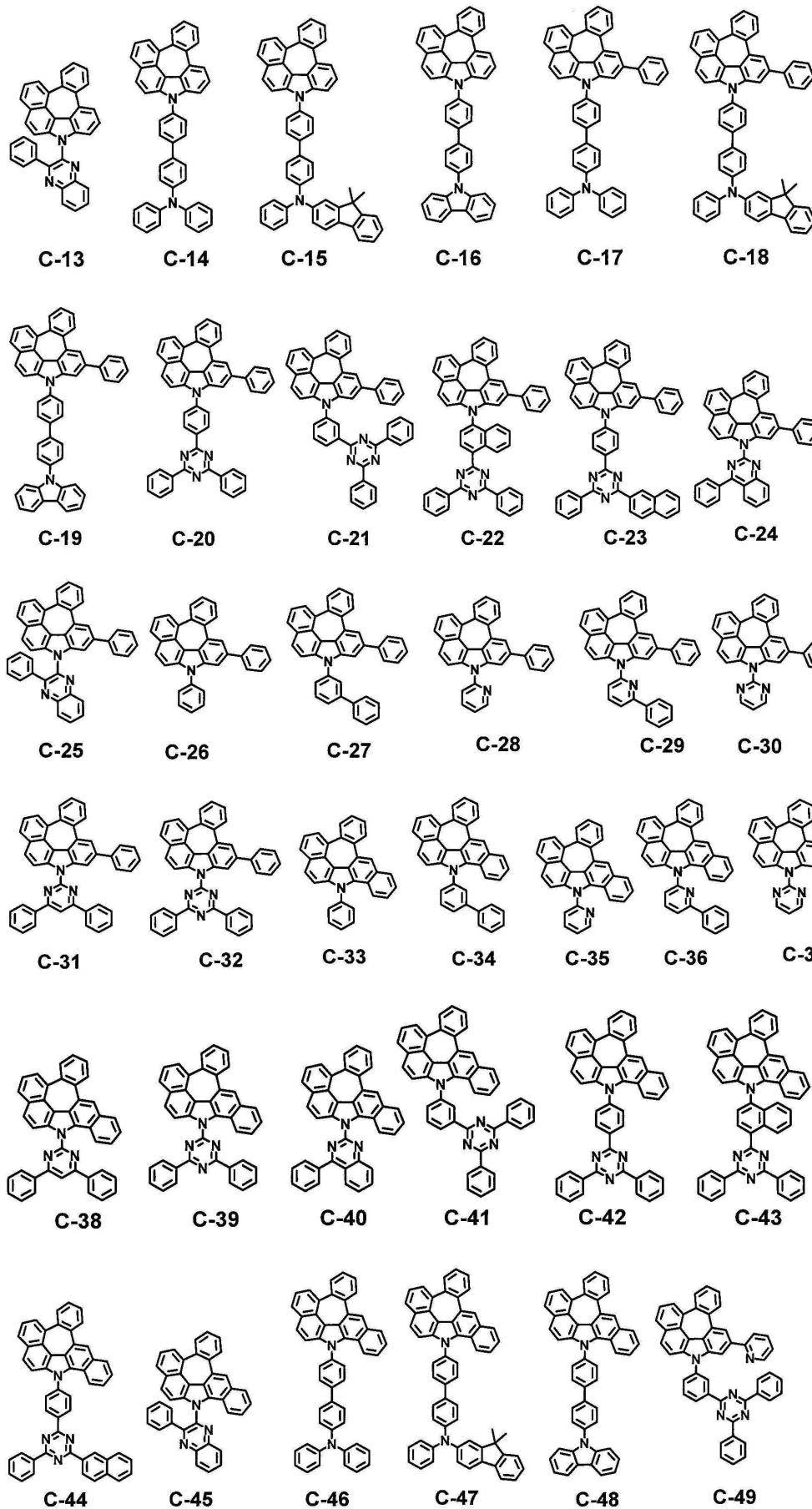


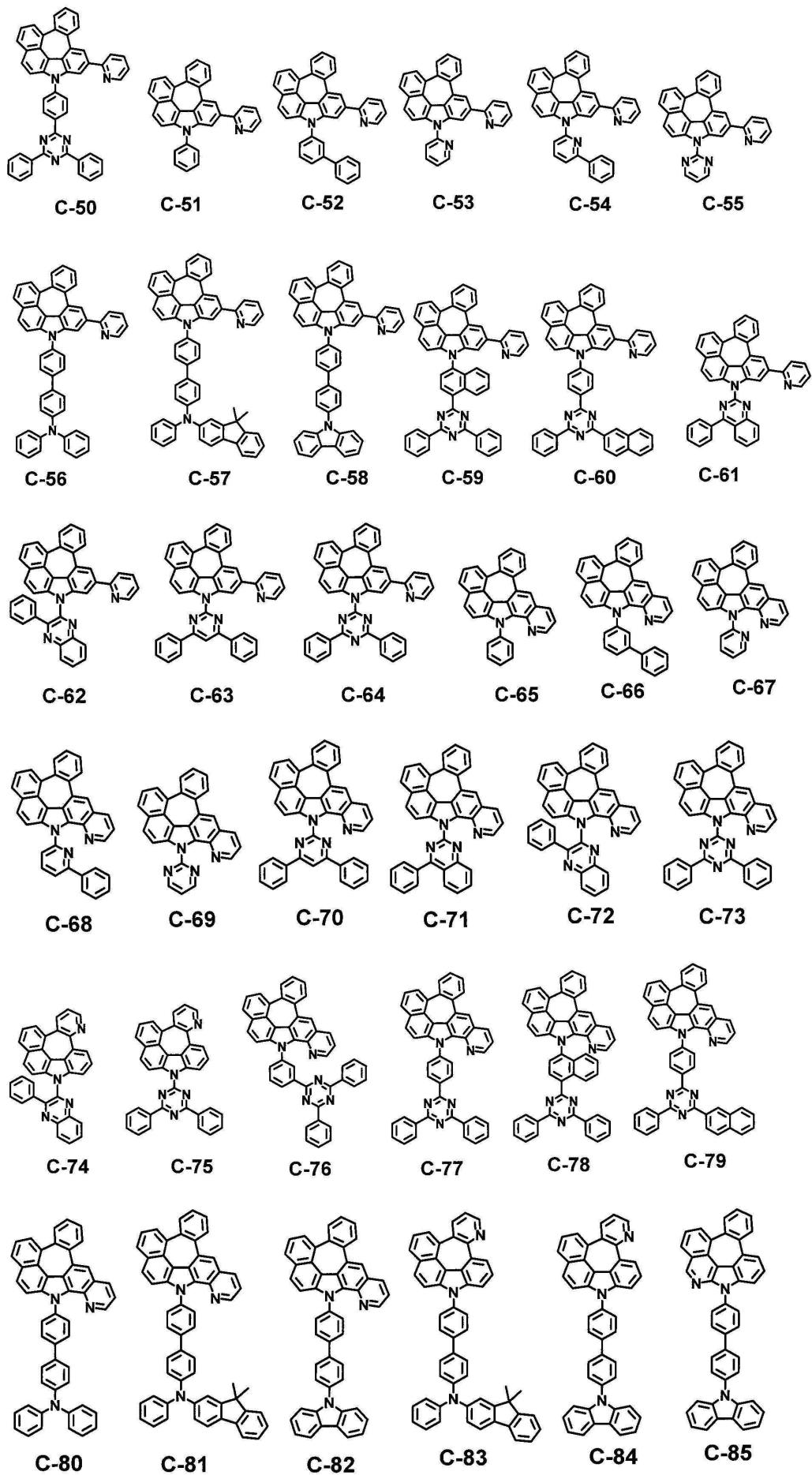
C-10

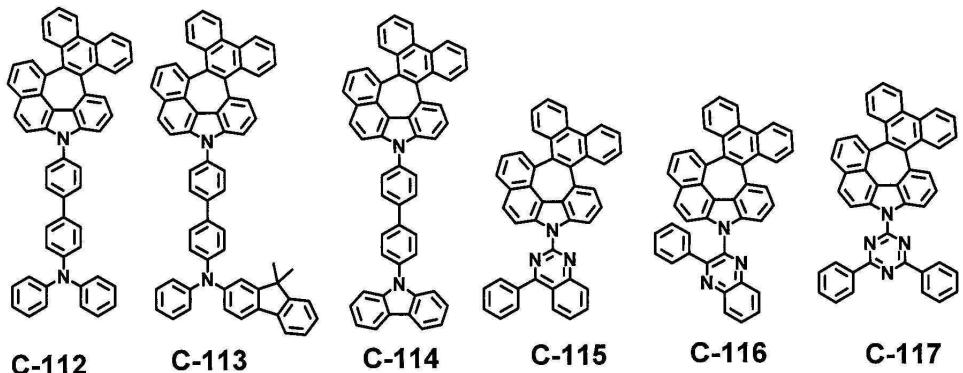
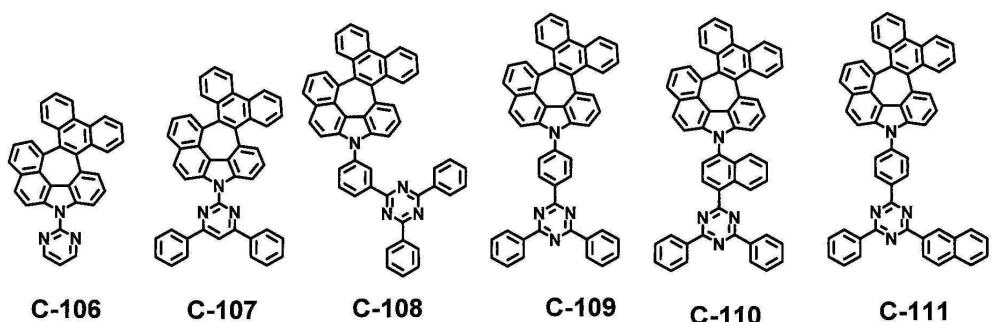
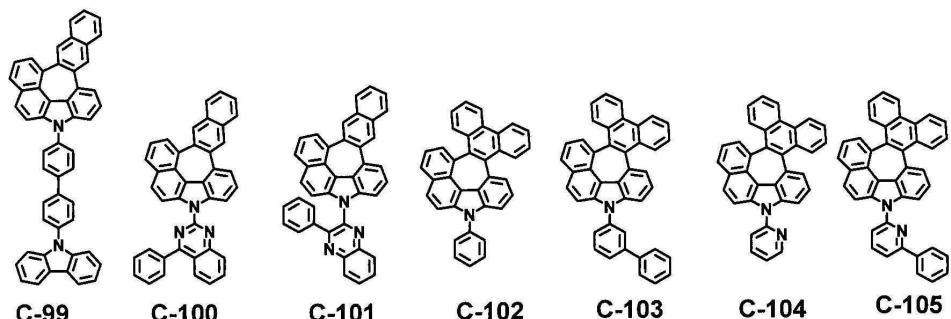
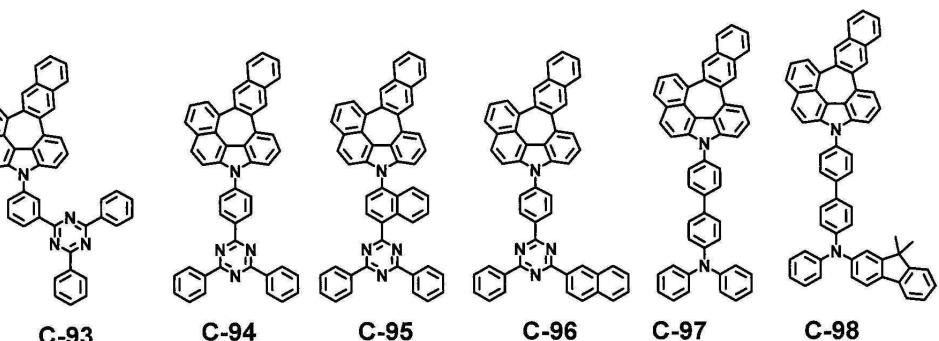
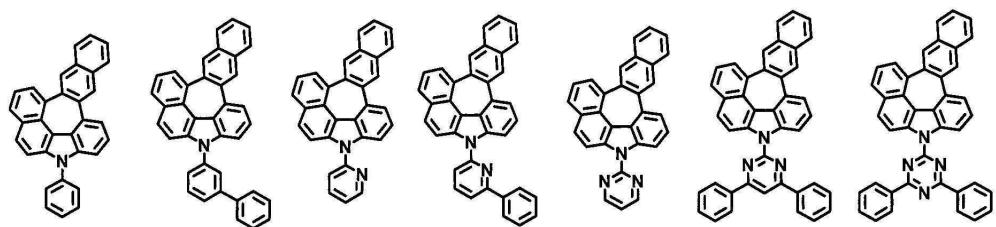


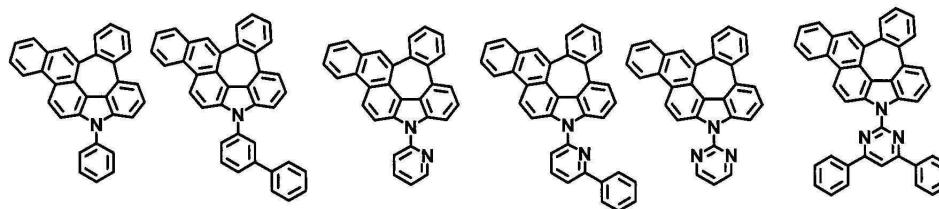
C-11











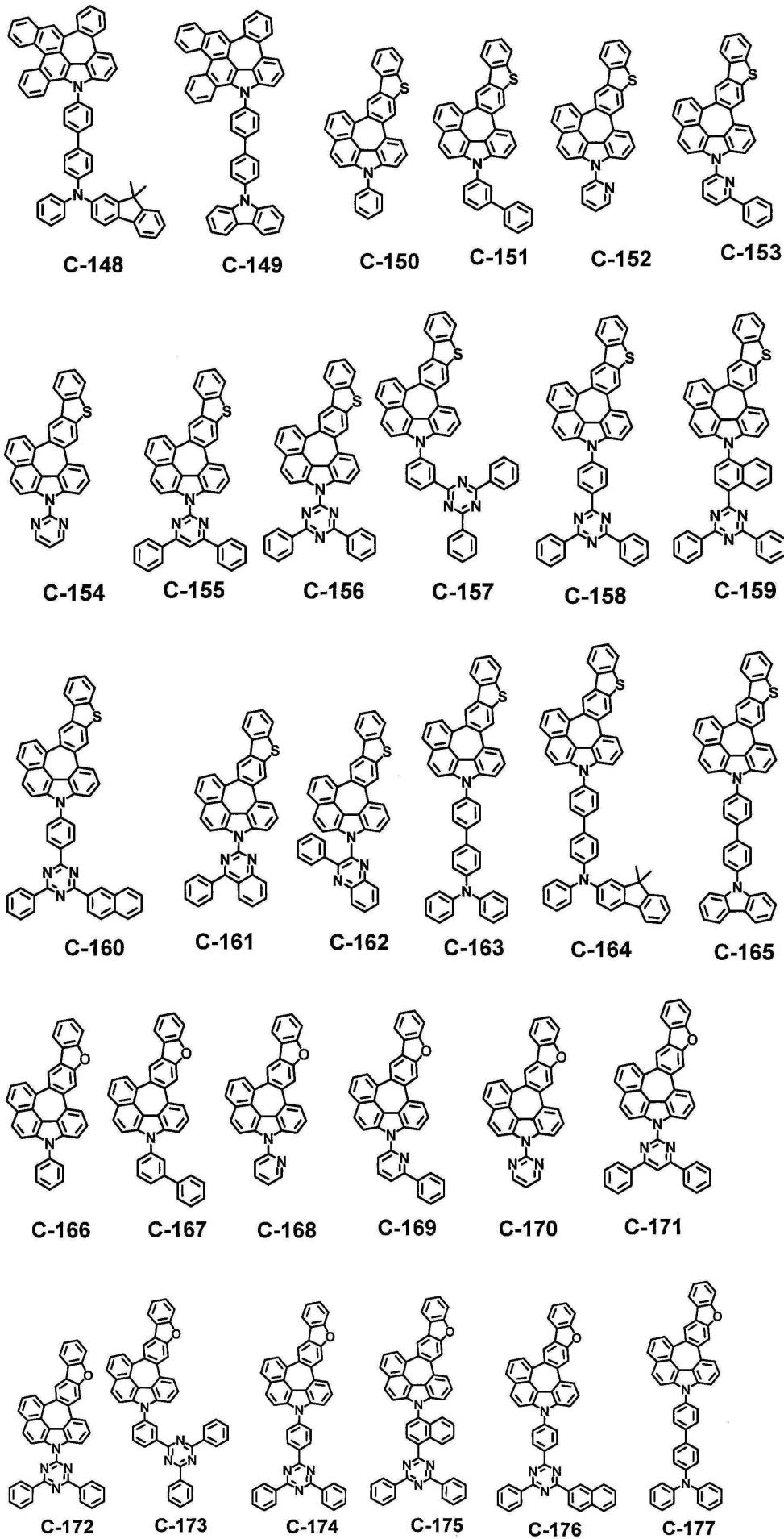
C-118 C-119 C-120 C-121 C-122 C-123

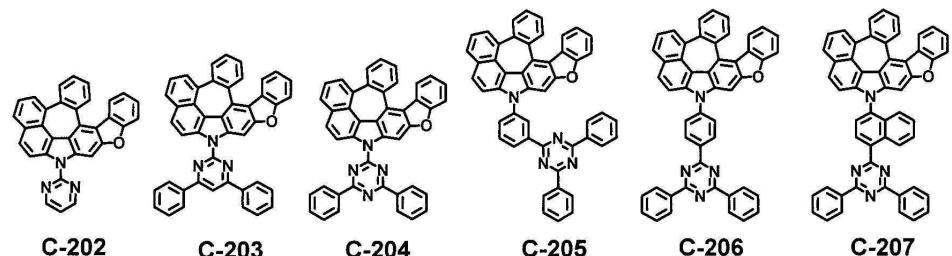
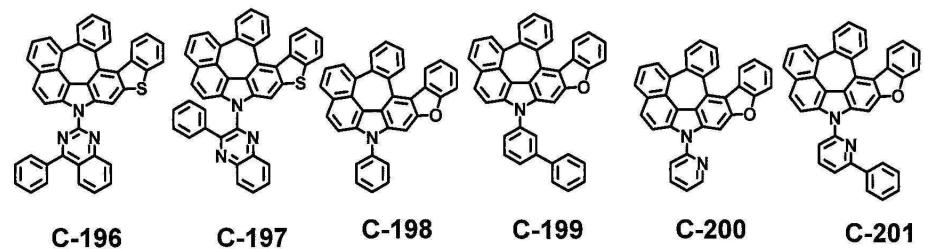
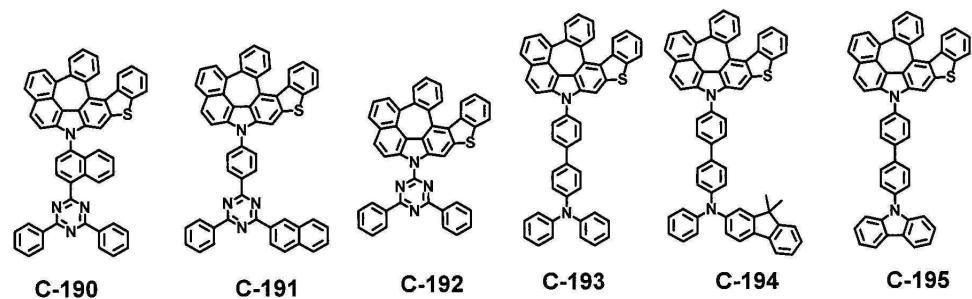
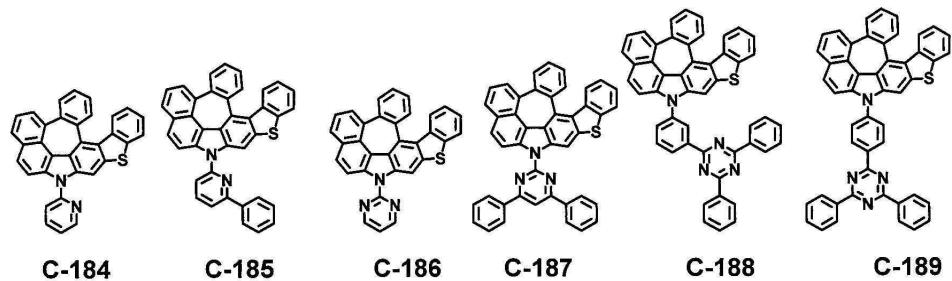
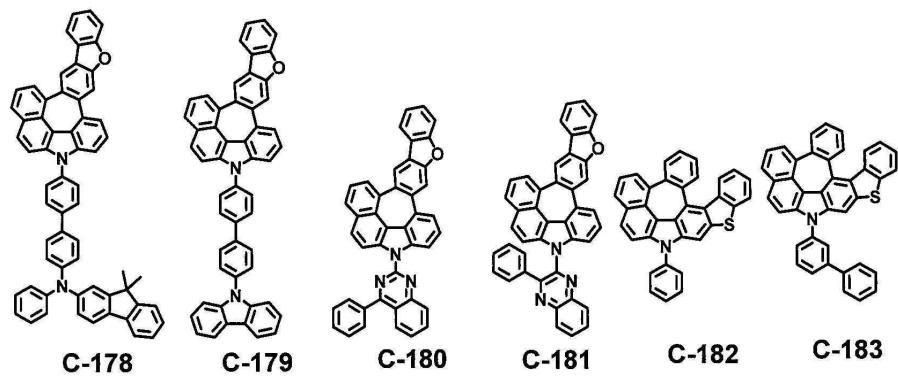
C-124 C-125 C-126 C-127 C-128 C-129

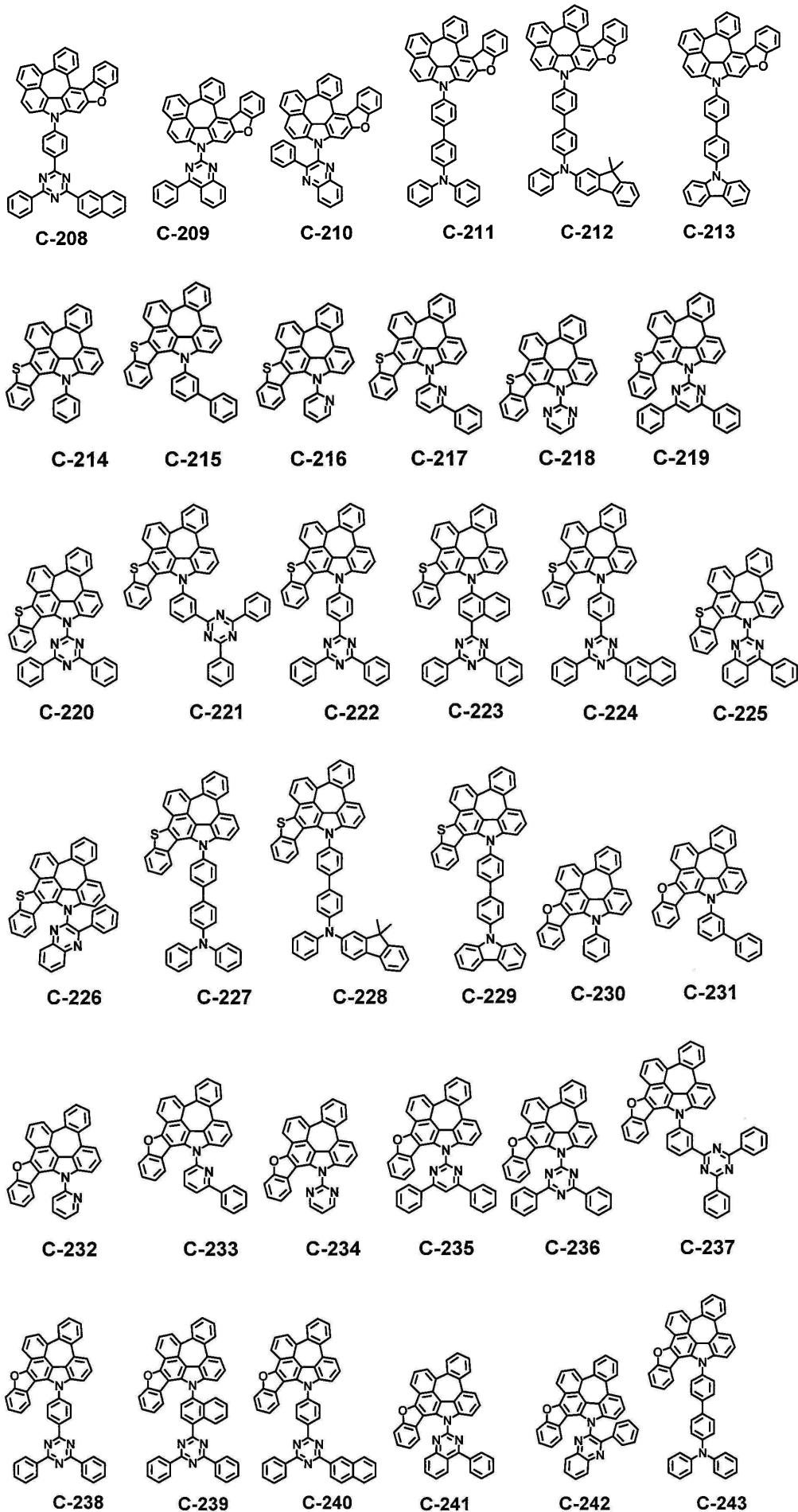
C-130 C-131 C-132 C-133 C-134 C-135

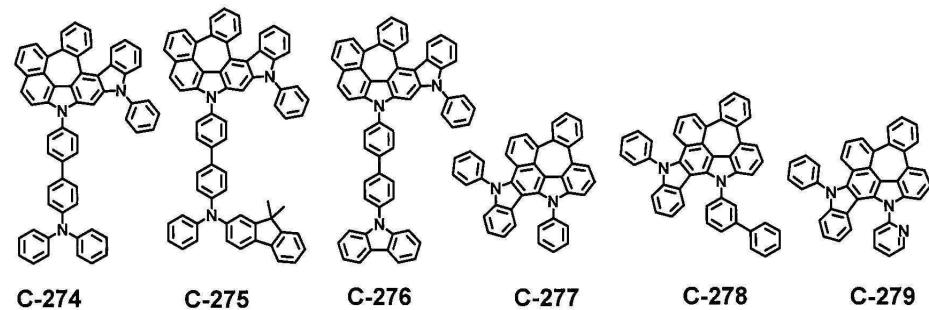
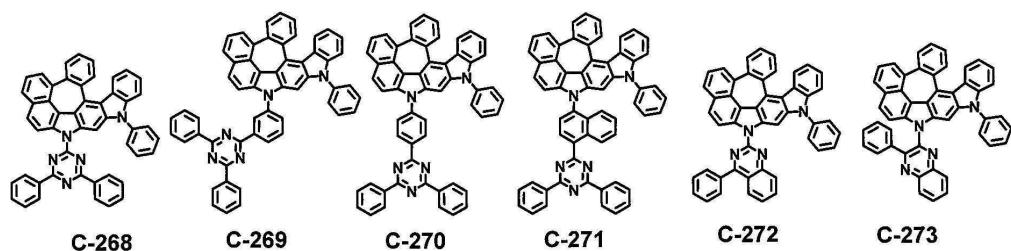
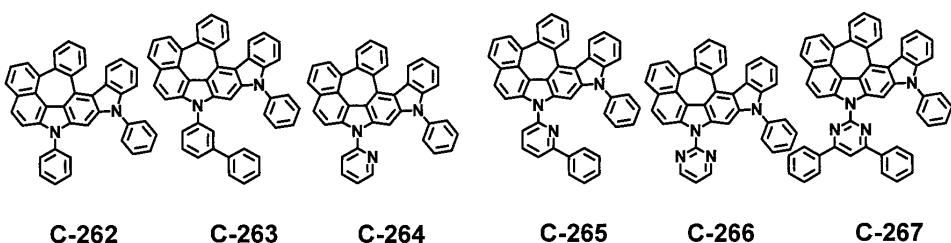
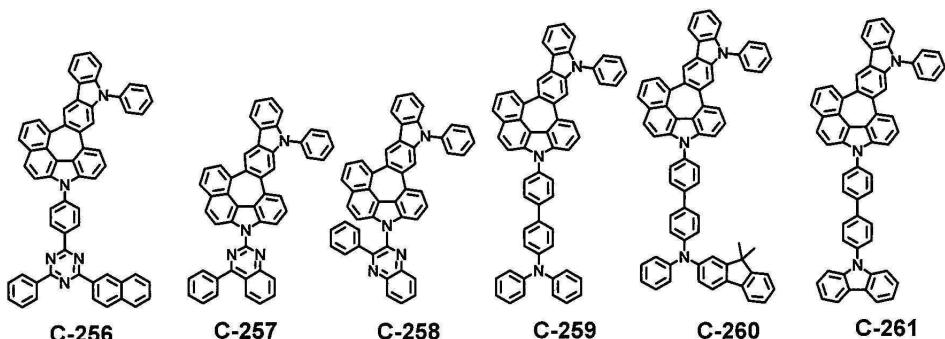
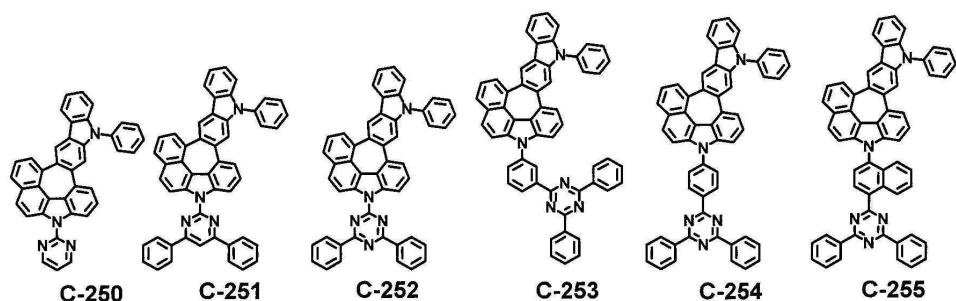
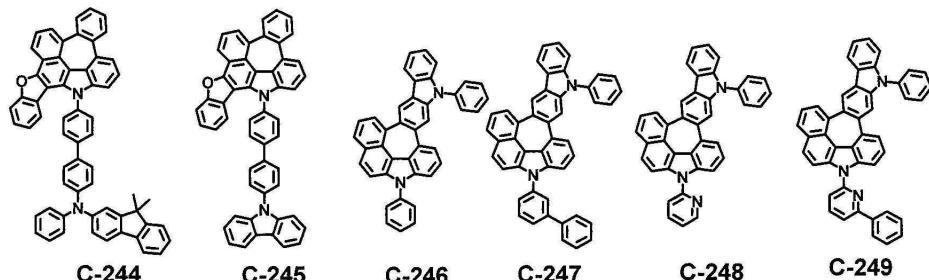
C-136 C-137 C-138 C-139 C-140 C-141

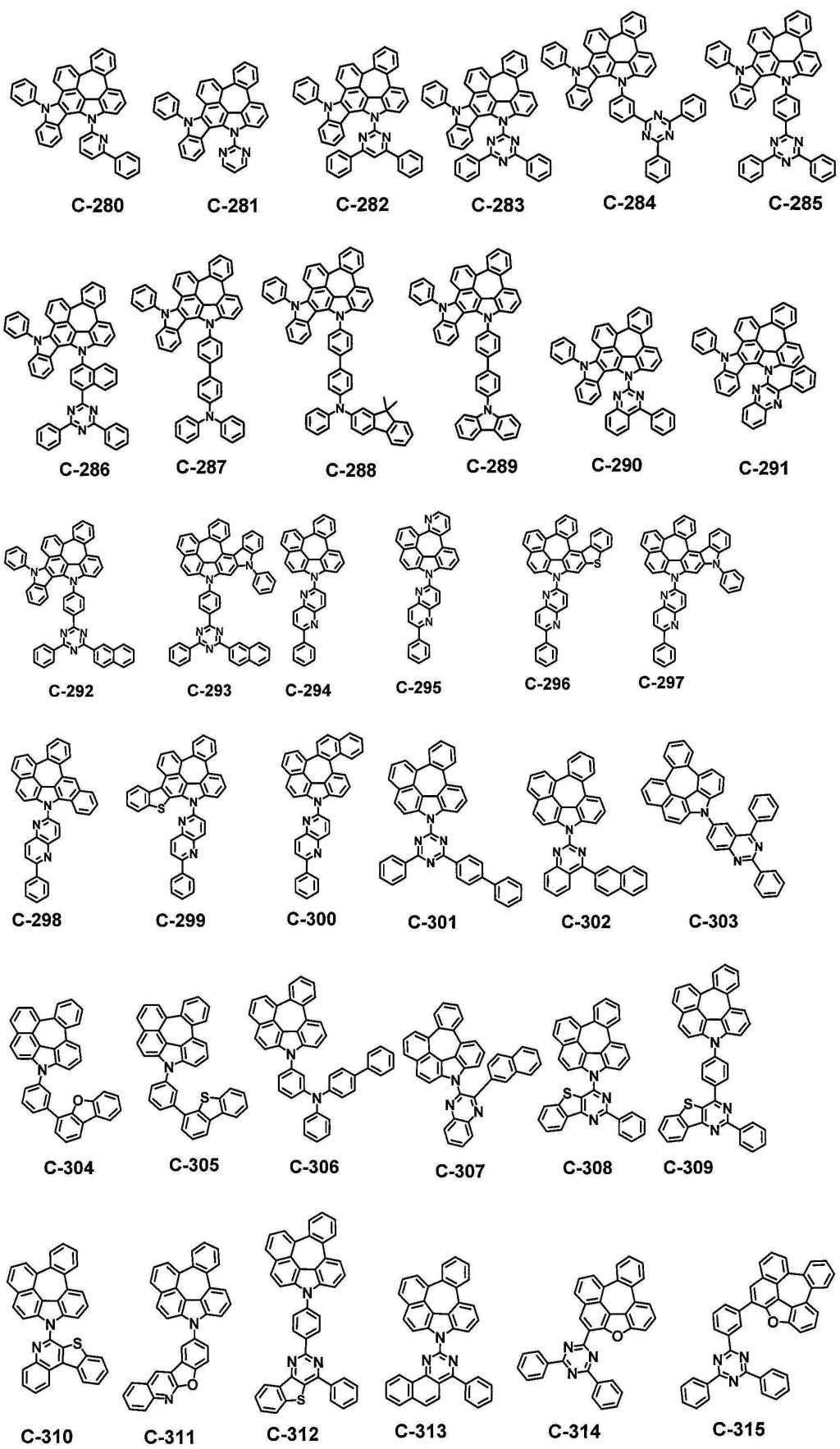
C-142 C-143 C-144 C-145 C-146 C-147

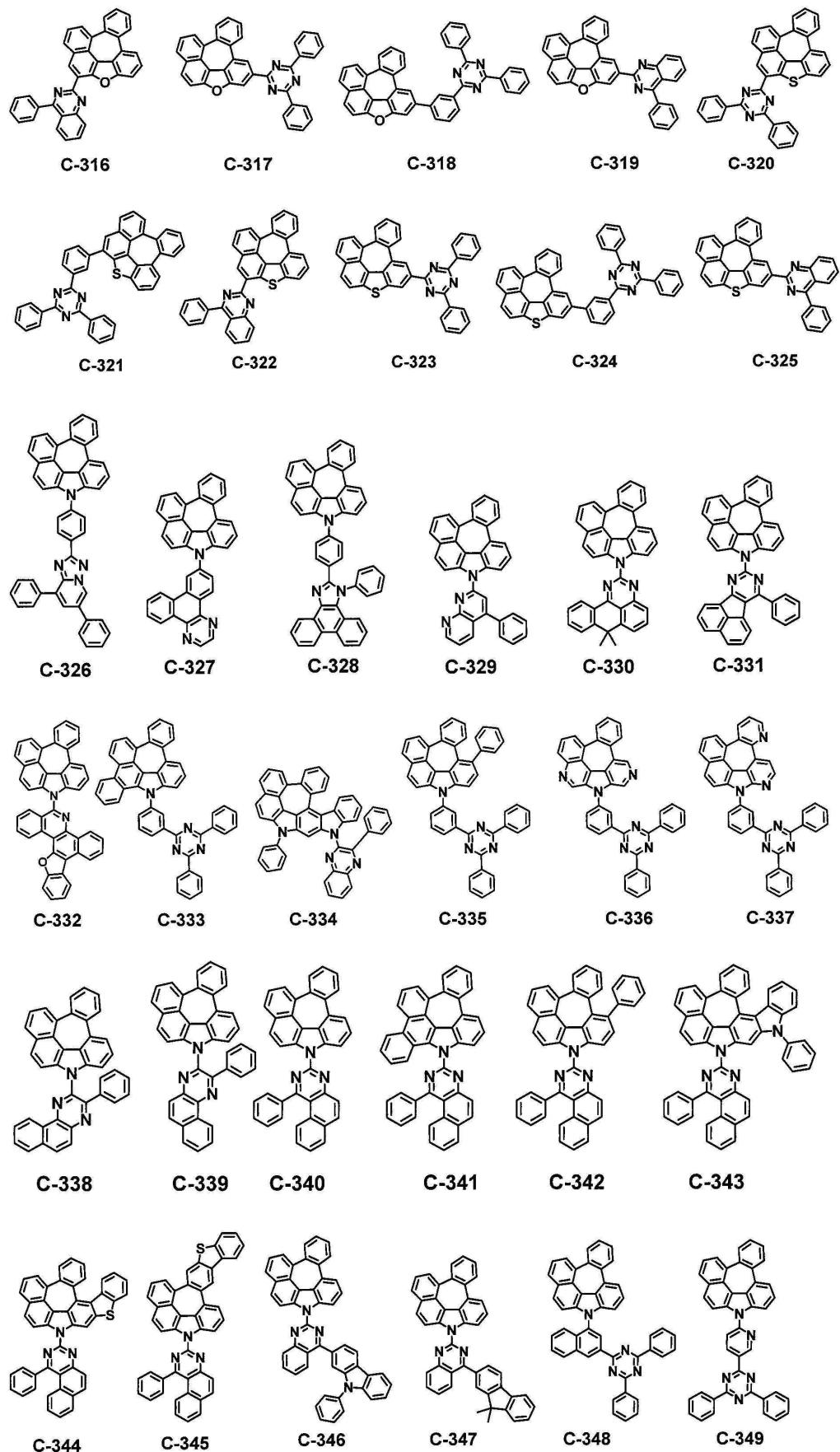


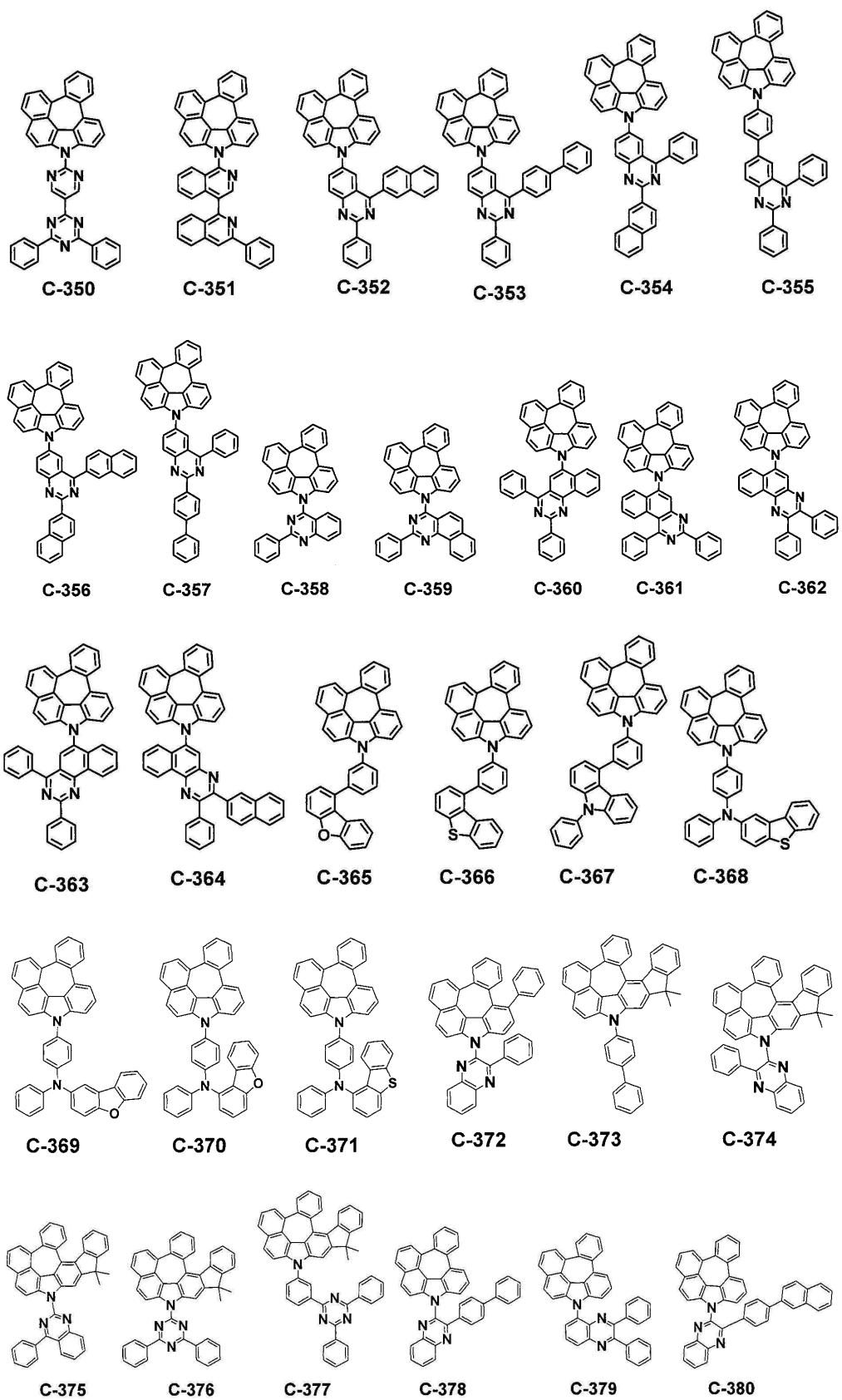


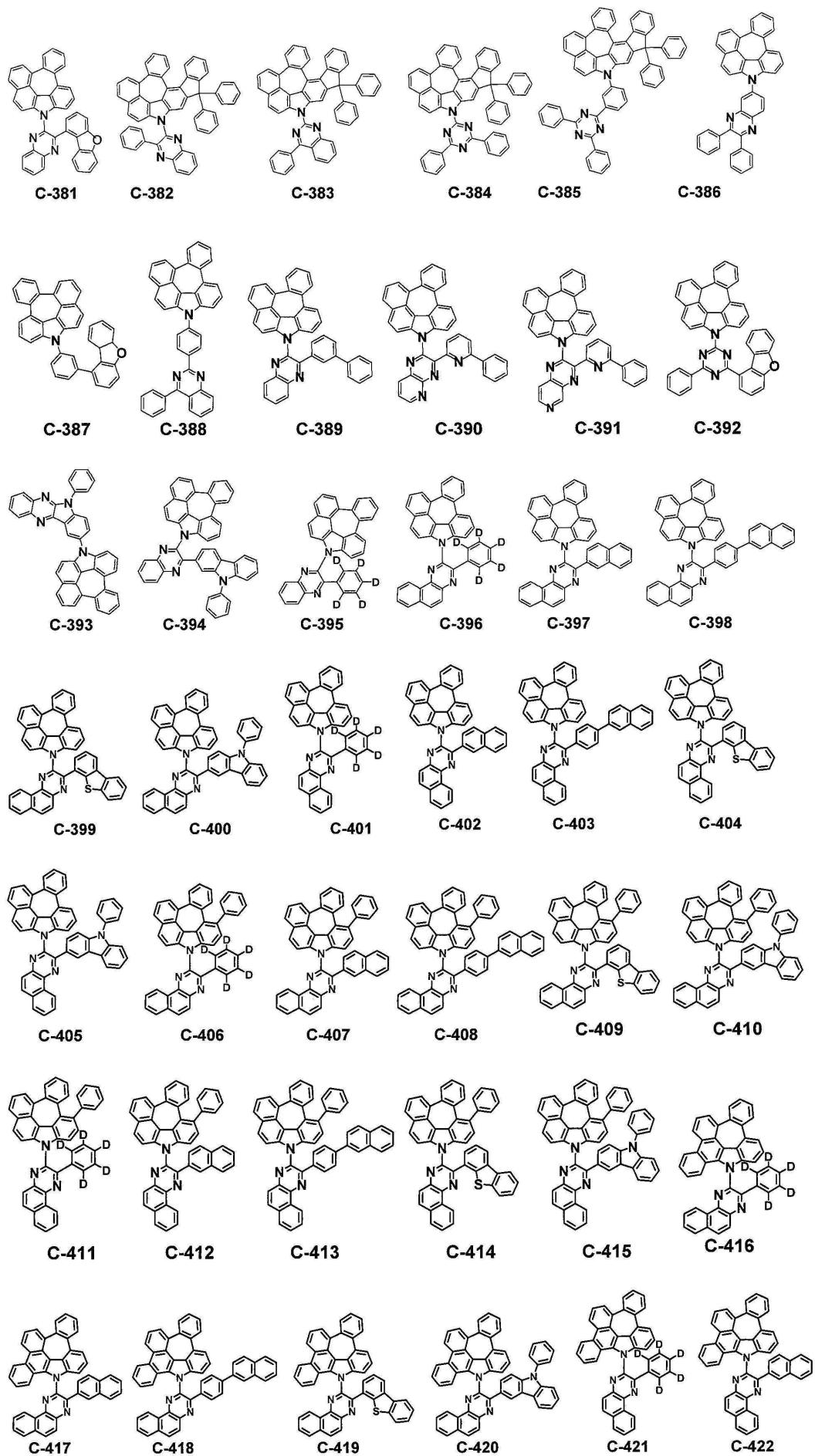


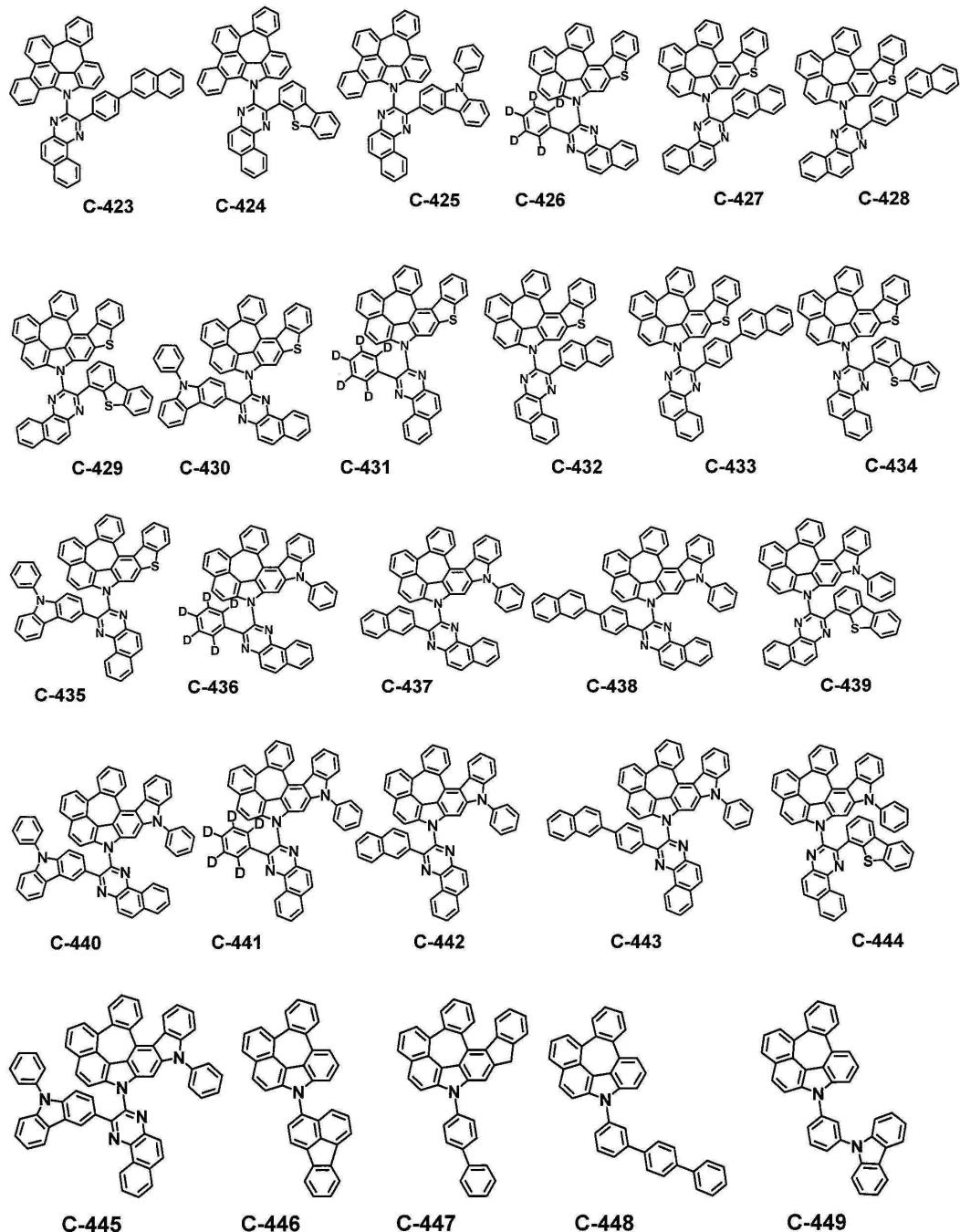












청구항 7

제1항에 있어서, 상기 제1 호스트 화합물의 화학식 1에서 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 상기 제2 호스트 화합물의 화학식 1에서 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴인, 복수 종의 호스트 재료.

청구항 8

제1항에 있어서, 상기 제1 호스트 화합물의 화학식 1의 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 상기 제2 호스트 화합물의 화학식 1의 Ar이 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 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)아릴아미노인, 복수 종의 호스트 재료.

청구항 9

애노드, 캐소드, 및 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 적어도 1층의 발광층을 포함하고, 상기 발광층 중 적어도 1층은 제1항에 기재된 복수 종의 호스트 재료를 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본원은 복수 종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

### 배경기술

[0002] 이스트만 코닥 사의 Tang 등이 1987년에 발광층과 전하 전달층으로 이루어진 TPD/A1q3 이중층 저분자 녹색 유기 전계 발광 소자(OLED)를 처음으로 개발한 이후, 유기 전계 발광 소자에 대한 연구가 급속도로 빠르게 이루어져 현재 상용화에 이르렀다. 현재, 유기 전계 발광 소자는 패널 구현에 있어 발광 효율이 뛰어난 인광 물질을 주로 사용하고 있다. 디스플레이의 장시간 사용과 높은 해상도를 위해서 높은 발광 효율 및/또는 장 수명을 갖는 OLED가 요구되고 있다.

[0003] 발광 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 개선시키기 위하여 유기 전계 발광 소자의 유기층에 여러 재료들 또는 컨셉들이 제안되어 왔으나, 현실적으로 사용하기에는 만족스럽지 못하였다.

[0004] 한국 특허공개공보 제2015-0121337호는 아줄렌 및 카바졸 등이 융합된 화합물을 개시하나, 복수 종의 호스트 화합물로 사용되는 것을 구체적으로 개시하지 못하며, 여전히 OLED 소자의 성능 향상을 위한 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

### 선행기술문헌

#### 특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 한국 특허공개공보 제2015-0121337호 (2015. 10. 29. 발행)

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

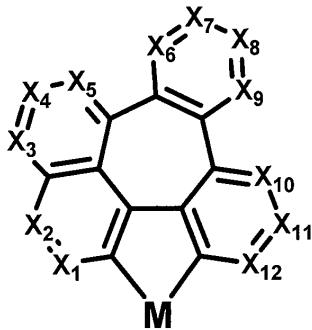
[0006] 본원의 목적은, 특정 조합의 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료를 포함함으로써, 양호한 열적 안정성, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

#### 과제의 해결 수단

[0007] 인광 도판트를 포함하는 발광층은 저전압, 고효율과 장수명을 위하여 발광층 재료의 정공 및 전자 전류 특성이 우수하며, 수명 향상을 위해 재료의 열적 안정성이 뛰어난 것이 유리하다. 이와 함께 발광층의 호스트에서 도판트로의 효율적인 에너지 전달을 위해서는 좁은 에너지 밴드 갭을 가지는 발광 재료를 사용함으로써 전하 트랩을 최소화하여 구동 전압 및 발광 효율에 기여할 수 있다. 본원의 소자에 포함되는 아줄렌 유도체는 본래  $S_2 \rightarrow S_1$ 의 내부 전환(internal conversion) 전이 상수가  $7 \times 10^{-8}$  s로 느린 반면,  $S_1 \rightarrow S_0$ 의 내부 전환 전이 상수는  $7 \times 10^{-12}$  s로 빨라  $S_2 \rightarrow S_0$ 의 형광 양자 수율(fluorescence quantum yield)이 증가하여 카샤의 법칙(Kasha's rule)을 위반하는 대표적인 재료 중의 하나이다. 비특허문헌 [Phys. Chem. Chem. Phys. 2015, 17, 23573, J. Phys. Chem. A, Vol. 103, No. 15, 1999 2529]에 의하면 아줄렌의  $S_2$ 와  $S_1$  준위는 각각 3.565 eV 및 1.771 eV인 반면,  $T_1 \rightarrow S_0$  전이는 1.711 eV로 매우 작은  $T_1$ 과  $S_0$ 의 준위 차이를 보이고 있을 뿐만 아니라, 치환 재료 및 용매의 극성 조건에 따라  $S_2 \rightarrow T_n$ 로의 계간 교차(intersystem crossing) 전이가 향상되어, 삼중항으로의 전이가 증가하여 인광 발광 특성 향상에 이점이 있을 수 있다는 보고가 있었다. 이러한 아줄렌 유도체는  $S_1 \rightarrow T_1$  에너지 갭이 작은 특성을 보이며 카바졸이나 벤조카바졸류 화합물 대비 상대적으로 높은 HOMO 특성을 보여 좁은 에너지 밴드 갭을 가질 수 있다. 본 발명자들은 본원의 아줄렌 유도체를 발광층에 제1 및 제2 호스트로 적절히 혼합하여 사용함으로써, 낮은 구동 전압, 높은 효율 및/또는 장수명의 특성을 나타낼 수 있음을 발견하였다. 구체적으로, 1종 이상의 제1 호스트 화합물 및 1종 이상의 제2 호스트 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료로서, 상기 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물은 하기 화학식 1로 표시되고, 상기 제1 호스트 화합물과 제2 호

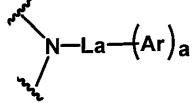
스트 화합물은 서로 다른 것인, 호스트 재료가 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 상기 화학식 1에서,



[0011]

M은 , O 또는 S이고;

[0012] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>1</sub>이며;

[0013] 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;

[0014] Ar 및 R<sub>1</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 Ar끼리 서로 연결되어 고리를 형성하거나, 인접한 R<sub>1</sub>끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, R<sub>1</sub>이 복수인 경우 각각의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0015] a는 1 또는 2의 정수이고, a가 2인 경우, 각각의 Ar은 동일하거나 상이할 수 있다.

### 발명의 효과

[0016] 본원에 따른 복수 종의 호스트 재료를 포함함으로써, 양호한 열적 안정성, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자가 제공되며, 이를 이용한 표시 장치 또는 조명 장치의 제조가 가능하다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0017] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

[0018] 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(호스트 재료 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등일 수 있다.

[0019] 본원에서 "복수 종의 유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있는 2종 이상의 화합물이 조합된 유기 전계 발광 재료를 의미하고, 유기 전계 발광 소자에 포함되기 전 (예를 들면, 증착 전) 및 포함된 후 (예를 들면, 증착 후)의 재료를 모두 의미할 수 있다. 예를 들면, 복수 종의 유기 전계 발

광 재료는 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자차단층, 발광층, 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층 및 전자주입층 중 하나 이상의 층에 포함될 수 있는 화합물이 2종 이상 조합된 것일 수 있다. 이러한 2종 이상의 화합물들은 같은 층 또는 다른 층에 포함될 수 있고, 혼합증착 또는 공증착되거나, 개별적으로 증착될 수 있다.

[0020] 본원에서 "복수 종의 호스트 재료"는 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 발광층에 포함될 수 있는 2종 이상의 화합물의 조합을 포함하는 호스트 재료를 의미하고, 유기 전계 발광 소자에 포함되기 전(예를 들면, 증착 전) 및 포함된 후(예를 들면, 증착 후)의 재료를 모두 의미할 수 있다. 일례로, 본원의 복수 종의 호스트 재료는 2종 이상의 호스트 재료가 조합된 것으로서, 선택적으로, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질을 추가로 포함한 것일 수 있다. 본원의 복수 종의 호스트 재료는 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 발광층에 포함될 수 있는데, 상기 복수 종의 호스트 재료에 포함된 2종 이상의 화합물은 하나의 발광층에 함께 포함될 수도 있고, 각각 다른 발광층에 포함될 수도 있다. 2종 이상의 호스트 재료가 하나의 층에 포함되는 경우, 예를 들어, 혼합증착되어 층을 형성할 수도 있고, 별도로 동시에 공증착되어 층을 형성할 수도 있다.

[0021] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0022] 본원에서 "(C1-C30)알킬(렌)"은 쇄를 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 쇄를 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 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 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 스페로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 폐닐, 비폐닐, 터폐닐, 나프틸, 비나프틸, 폐닐나프틸, 나프틸폐닐, 폐닐터폐닐, 폴루오레닐, 폐닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 폐난트레닐, 폐닐폐난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 폐레닐, 테트라세닐, 폐릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 폴루오란테닐, 스페로비플루오레닐 등이 있다. 더욱 구체적으로는, 폐닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 벤즈안트릴기, 1-폐난트릴기, 2-폐난트릴기, 3-폐난트릴기, 4-폐난트릴기, 9-폐난트릴기, 나프타세닐기, 폐레닐기, 1-크리세닐기, 2-크리세닐기, 3-크리세닐기, 4-크리세닐기, 5-크리세닐기, 6-크리세닐기, 벤조[c]폐난트릴기, 벤조[g]크리세닐기, 1-트리폐닐레닐기, 2-트리폐닐레닐기, 3-트리폐닐레닐기, 4-트리폐닐레닐기, 1-폴루오레닐기, 2-폴루오레닐기, 3-폴루오레닐기, 4-폴루오레닐기, 9-폴루오레닐기, 벤조폴루오레닐기, 디벤조폴루오레닐기, 2-비폐닐일기, 3-비폐닐일기, 4-비폐닐일기, o-터페닐기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-쿼터페닐기, 3-폴루오란테닐기, 4-폴루오란테닐기, 8-폴루오란테닐기, 9-폴루오란테닐기, 벤조폴루오란테닐기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기, 메시틸기, o-쿠멘일기, m-쿠멘일기, p-쿠멘일기, p-t-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 4'-메틸비페닐일기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기, 9,9-디메틸-1-폴루오레닐기, 9,9-디메틸-2-폴루오레닐기, 9,9-디메틸-3-폴루오레닐기, 9,9-디메틸-4-폴루오레닐기, 9,9-디페닐-1-폴루오레닐기, 9,9-디페닐-2-폴루오레닐기, 9,9-디페닐-3-폴루오레닐기, 9,9-디페닐-4-폴루오레닐기를 들 수 있다.

[0023] 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, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠화과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와

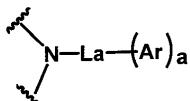
연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 혜테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 혜테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 벤조퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 폐녹사진일, 폐노티아진일, 폐난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 혜테로아릴 등이 있다. 더욱 구체적으로는, 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라지닐기, 2-피리디닐기, 2-피리미디닐기, 4-피리미디닐기, 5-피리미디닐기, 6-피리미디닐기, 1,2,3-트리아진-4-일기, 1,2,4-트리아진-3-일기, 1,3,5-트리아진-2-일기, 1-이미다졸릴기, 2-이미다졸릴기, 1-피라졸릴기, 1-인돌리디닐기, 2-인돌리디닐기, 3-인돌리디닐기, 5-인돌리디닐기, 6-인돌리디닐기, 7-인돌리디닐기, 8-인돌리디닐기, 2-이미다조피리디닐기, 3-이미다조피리디닐기, 5-이미다조피리디닐기, 6-이미다조피리디닐기, 7-이미다조피리디닐기, 8-이미다조피리디닐기, 3-피리디닐기, 4-피리디닐기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-이소인돌릴기, 2-이소인돌릴기, 3-이소인돌릴기, 4-이소인돌릴기, 5-이소인돌릴기, 6-이소인돌릴기, 7-이소인돌릴기, 2-푸릴기, 3-푸릴기, 2-벤조푸라닐기, 3-벤조푸라닐기, 4-벤조푸라닐기, 5-벤조푸라닐기, 6-벤조푸라닐기, 7-벤조푸라닐기, 1-이소벤조푸라닐기, 3-이소벤조푸라닐기, 4-이소벤조푸라닐기, 5-이소벤조푸라닐기, 6-이소벤조푸라닐기, 7-이소벤조푸라닐기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-이소퀴놀릴기, 3-이소퀴놀릴기, 4-이소퀴놀릴기, 5-이소퀴놀릴기, 6-이소퀴놀릴기, 7-이소퀴놀릴기, 8-이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살리닐기, 5-퀴녹살리닐기, 6-퀴녹살리닐기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기, 아자카바졸릴-1-일기, 아자카바졸릴-2-일기, 아자카바졸릴-3-일기, 아자카바졸릴-4-일기, 아자카바졸릴-5-일기, 아자카바졸릴-6-일기, 아자카바졸릴-7-일기, 아자카바졸릴-8-일기, 아자카바졸릴-9-일기, 1-페난트리디닐기, 2-페난트리디닐기, 3-페난트리디닐기, 4-페난트리디닐기, 6-페난트리디닐기, 7-페난트리디닐기, 8-페난트리디닐기, 9-페난트리디닐기, 10-페난트리디닐기, 1-아크리디닐기, 2-아크리디닐기, 3-아크리디닐기, 4-아크리디닐기, 9-아크리디닐기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사디아졸릴기, 5-옥사디아졸릴기, 3-푸라자닐기, 2-티에닐기, 3-티에닐기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-부틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-부틸-1-인돌릴기, 4-t-부틸-1-인돌릴기, 2-t-부틸-3-인돌릴기, 4-t-부틸-3-인돌릴기, 1-디벤조푸라닐기, 2-디벤조푸라닐기, 3-디벤조푸라닐기, 4-디벤조푸라닐기, 1-디벤조티오페닐기, 2-디벤조티오페닐기, 3-디벤조티오페닐기, 4-디벤조티오페닐기, 1-실라플루오레닐기, 2-실라플루오레닐기, 3-실라플루오레닐기, 4-실라플루오레닐기, 1-게르마플루오레닐기, 2-게르마플루오레닐기, 3-게르마플루오레닐기, 4-게르마플루오레닐기를 들 수 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0024] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원 화학식들에서의 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)혜테로아릴(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, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 헤드록시, (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)혜테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)혜테로아릴, (3-30 원)혜테로아릴로 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)혜테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, 더욱 바람직하게는 (C1-C10)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 및 (C6-C18)아릴로 치환된 (5-18원)혜테로아릴로 이루어진 군으로부

터 선택되는 하나 이상이고, 예를 들면, 메틸, 페닐, 디페닐트리아진일 및 페닐퀴녹살리닐로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0025] 본원 화학식에서, 인접한 치환기와 연결되어 고리를 형성 또는 두 개의 인접한 치환기가 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 상기 고리는 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 융합된 고리는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 폐난트렌 고리, 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 인돌고리, 치환 또는 비치환된 인텐 고리, 치환 또는 비치환된 벤젠 고리 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 고리 형태일 수 있다.

[0026] 본원 화학식에서, 헤테로아릴 또는 헤테로아릴렌은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)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, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이 결합될 수 있다.



[0027] 상기 화학식 1에서, M은 , O 또는 S이다.

[0028] 상기 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{12}$ 는 각각 독립적으로 N 또는  $\text{CR}_1$ 이다. 본원의 일 양태에 따르면,  $X_1$  내지  $X_{12}$ 는 모두  $\text{CR}_1$ 일 수 있고, 본원의 다른 일 양태에 따르면,  $X_1$  내지  $X_{12}$  중 어느 하나는 N일 수 있고, 본원의 또 다른 일 양태에 따르면, 두 개의  $X_1$  내지  $X_{12}$ 는 N일 수 있다.

[0029] 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.

[0030] 상기 화학식 1에서, Ar 및  $R_1$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 Ar끼리 서로 연결되어 고리를 형성하거나, 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고,  $R_1$ 이 복수인 경우 각각의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

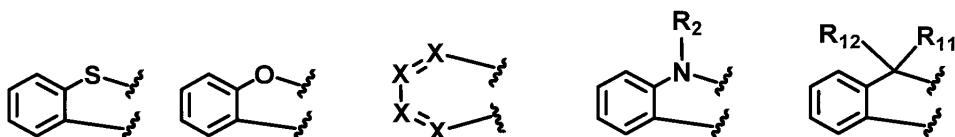
[0031] 상기 Ar은 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노일 수 있고, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C18)아릴, (C1-C10)알킬 및/또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노일 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘

일, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미딘일, 치환 또는 비치환된 아세나프토피리미딘일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 퀴독살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴독살리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조퀴독살리닐, 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 페닐파라졸릴, 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 폐난트로이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 디페닐아미노, 치환 또는 비치환된 폐닐비페닐아미노, 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 폐닐; 비치환된 나프틸; 비치환된 비페닐; 하나 이상의 메틸로 치환된 플루오레닐; 비치환된 플루오란테닐; 폐닐 및 나프틸 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 트리아진일; 하나 이상의 폐닐로 치환 또는 비치환된 폐닐; 하나 이상의 폐닐로 치환 또는 비치환된 폐리미딘일; 하나 이상의 폐닐로 치환된 퀴나졸리닐; 하나 이상의 폐닐로 치환된 이소퀴놀릴; 하나 이상의 폐닐로 치환 또는 비치환된 카바졸릴; 비치환된 디벤조티오펜일; 비치환된 디벤조푸란일; 하나 이상의 폐닐로 치환된 나프티리디닐; 비치환된 디페닐아미노; 비치환된 폐닐비페닐아미노; 디메틸플루오레닐페닐아미노; 하나 이상의 폐닐로 치환된 벤조티에노피리미딘일; 비치환된 벤조티에노퀴놀릴; 비치환된 벤조푸로퀴놀릴; 하나 이상의 폐닐로 치환된 벤조퀴나졸리닐; 하나 이상의 폐닐로 치환된 벤조티아졸리닐; 하나 이상의 폐닐로 치환된 벤조퀴독살리닐; 비치환된 디벤조퀴독살리닐; 하나 이상의 폐닐로 치환된 폐난트로이미다졸릴; 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노; 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노; 하나 이상의 메틸로 치환된 질소 함유 17원 헤테로아릴; 질소 및 산소 함유 25원 헤테로아릴; 또는 하나 이상의 폐닐로 치환된 아세나프토피리미딘일일 수 있다.

[0032] 상기  $R_1$ 은 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이거나; 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-25원)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 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이거나; 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-18원)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 (C<sub>6</sub>-C<sub>12</sub>)아릴, 또는 (C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-13원)헤테로아릴이거나; 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-10원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤�테로원자로 대체될 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면,  $R_1$ 은 디페닐트리아진일로 치환 또는 비치환된 폐닐, 디페닐트리아진일, 폐닐로 치환된 퀴나졸리닐, 또는 비치환된 폐리딜이거나, 인접한  $R_1$ 끼리 서로 연결되어 비치환된 벤젠 고리, 메틸 및 폐닐 중 하나 이상으로 치환된 인텐 고리, 비치환된 폐리딘 고리, 비치환된 벤조티오펜 고리, 비치환된 벤조푸란 고리, 또는 폐닐 또는 폐닐퀴독살리닐로 치환된 인돌 고리를 형성할 수 있다.

[0033] 본원의 일 태양에 따르면, 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{12}$  중 인접한 두 개가  $CR_1$ 이고, 인접한 두 개의  $R_1$ 이 연결되어 하기 화학식 2 내지 6 중 어느 하나의 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, 폐난트렌 고리, 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 고리일 수 있다.

[0034] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5] [화학식 6]



[0035]

[0036] 상기 화학식 2 내지 6에서, 는 CR<sub>1</sub>에서의 C와 R<sub>1</sub>의 연결 부위를 나타낸다.

[0037] 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.

[0038] 상기 화학식 5에서, R<sub>2</sub>는 수소, 중수소, 할로겐, 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 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, R<sub>2</sub>는 비치환된 페닐, 또는 페닐로 치환된 퀴녹살리닐일 수 있다.

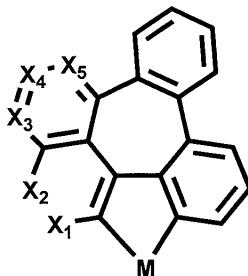
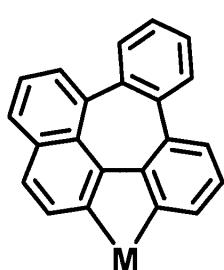
[0039] 상기 화학식 6에서, R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며, 바람직하게는 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (5-10원)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.

[0040] 상기 화학식 1에서, a는 1 또는 2의 정수이고, a가 2인 경우, 각각의 Ar은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0041] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 7 내지 10 중 적어도 하나로 표시될 수 있다.

[0042] [화학식 7]

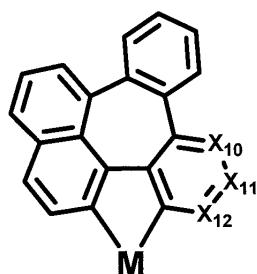
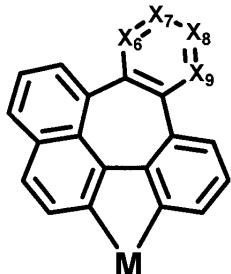
[화학식 8]



[0043]

[화학식 9]

[화학식 10]



[0044]

[0046] 상기 화학식 7 내지 10에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>12</sub>, 및 M은 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

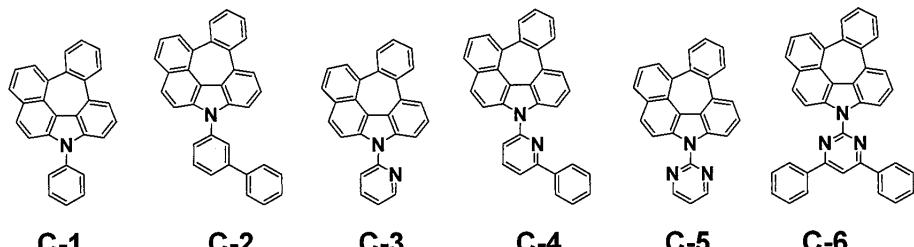
[0047] 본원의 일양태에 따르면, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 하나 이상, X<sub>6</sub> 내지 X<sub>9</sub> 중 하나 이상, 및 X<sub>10</sub> 내지 X<sub>12</sub> 중 하나 이상은 N 또는 CR<sub>1</sub>이고, 여기서 R<sub>1</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-25원)의 단일환 또는 다환의 지환족,

방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

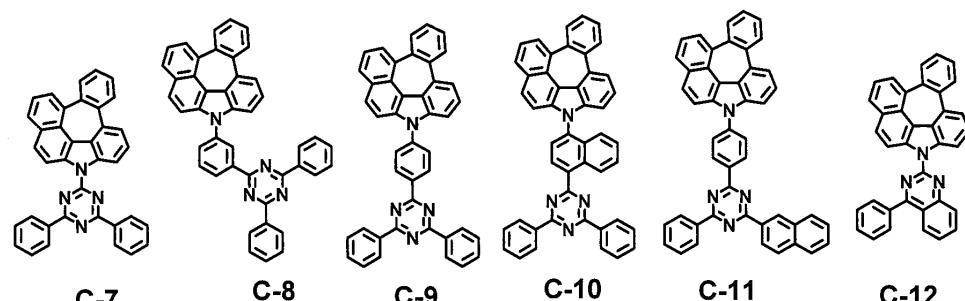
[0048] 본원의 일양태에 따르면, 상기 제1 호스트 화합물의 화학식 1에서 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 상기 제2 호스트 화합물의 화학식 1에서 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴일 수 있다.

[0049] 본원의 다른 일양태에 따르면, 상기 제1 호스트 화합물의 화학식 1의 Ar이 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 상기 제2 호스트 화합물의 화학식 1의 Ar이 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 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)아릴아미노일 수 있다.

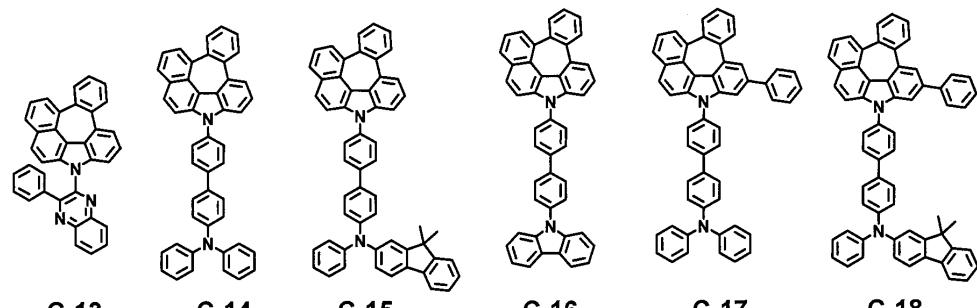
[0050] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



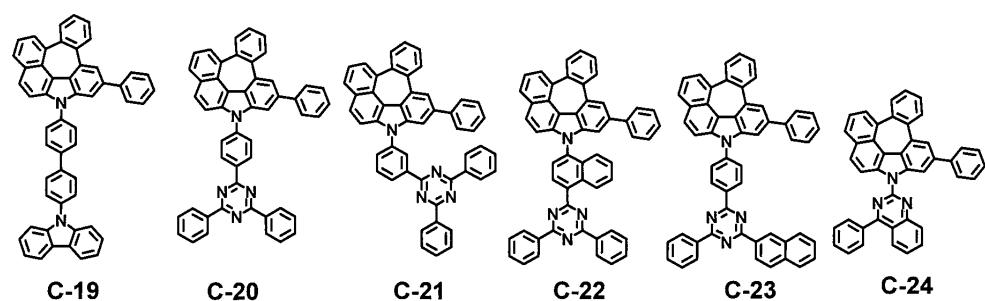
[0051]



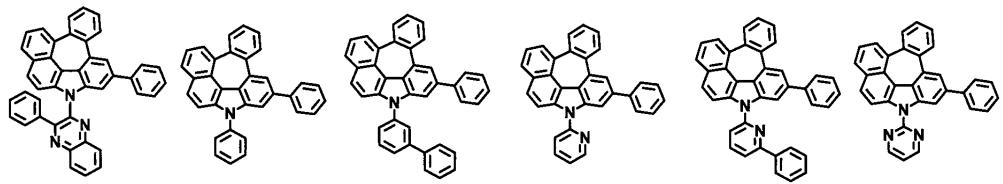
[0052]



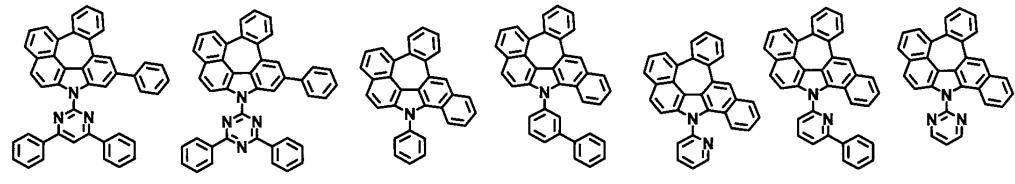
[0053]



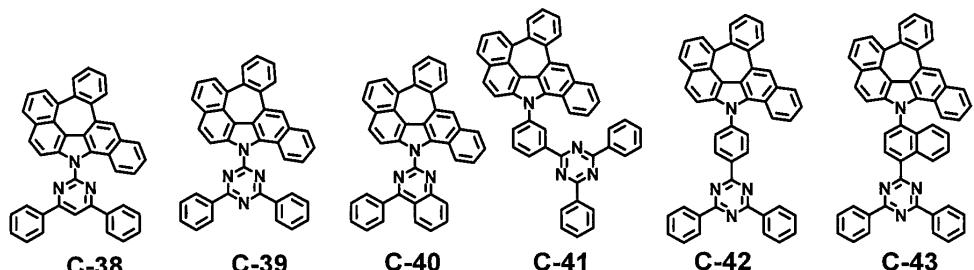
[0054]



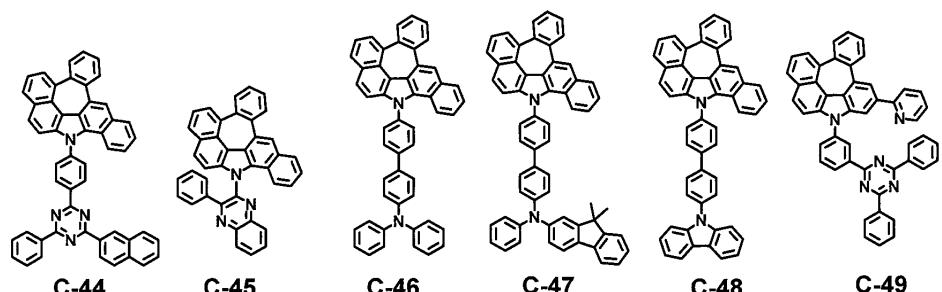
[0055]



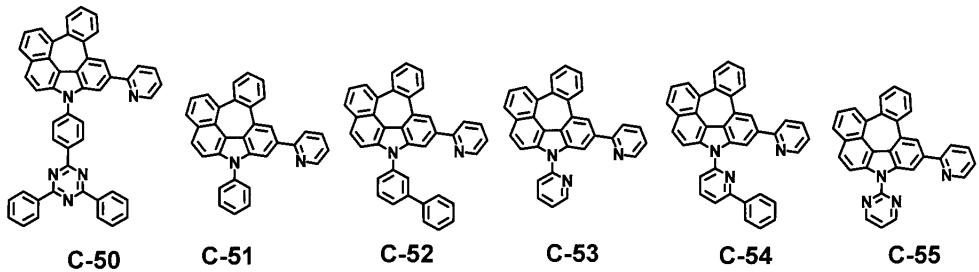
[0056]



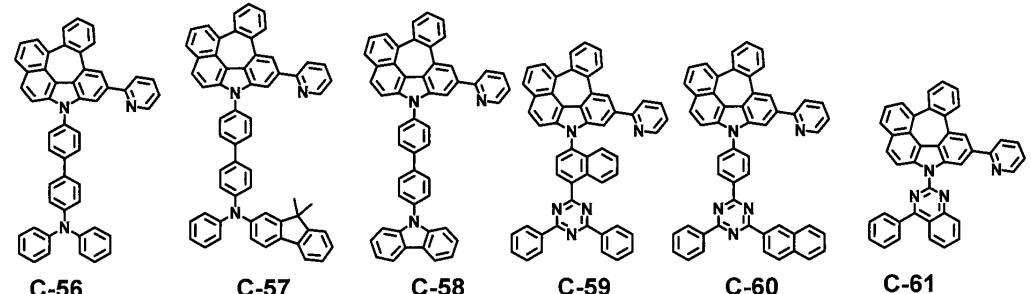
[0057]



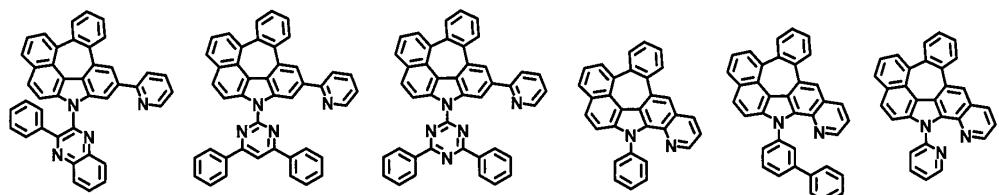
[0058]



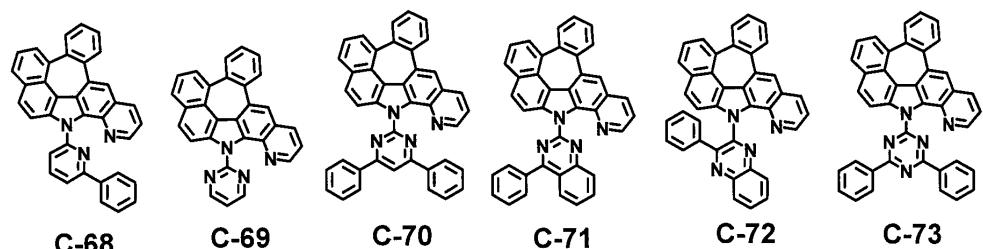
[0059]



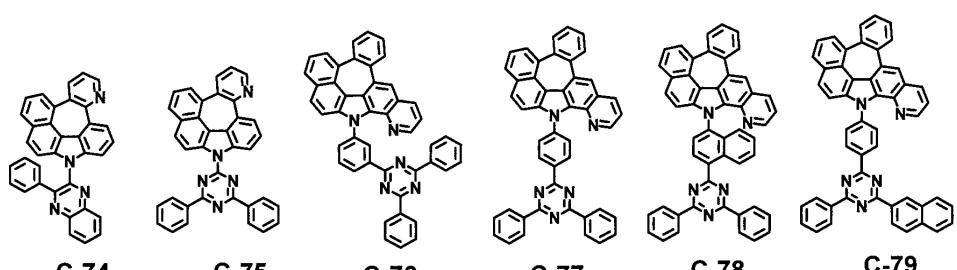
[0060]



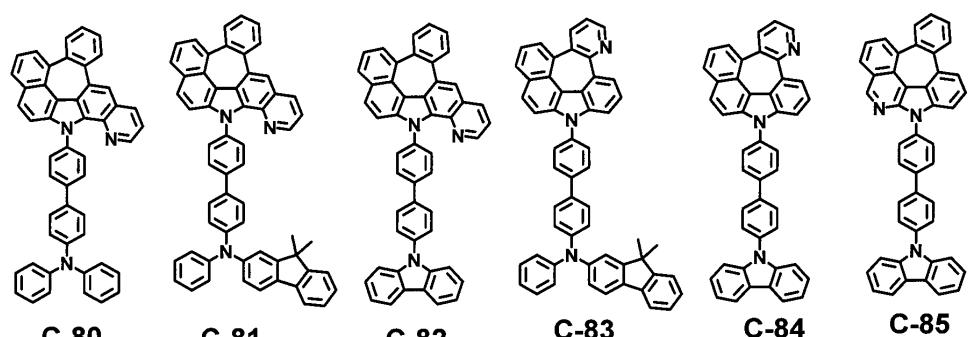
[0061]



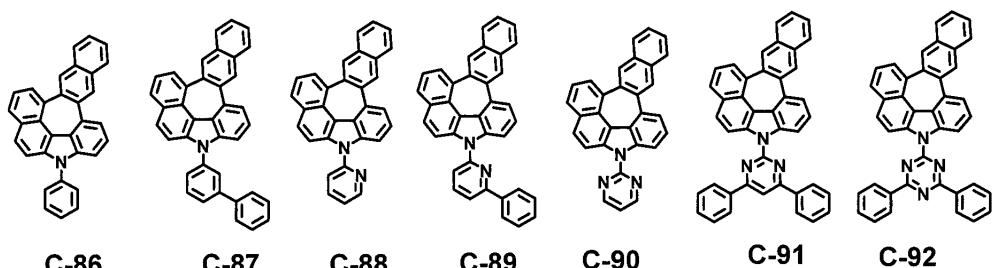
[0062]



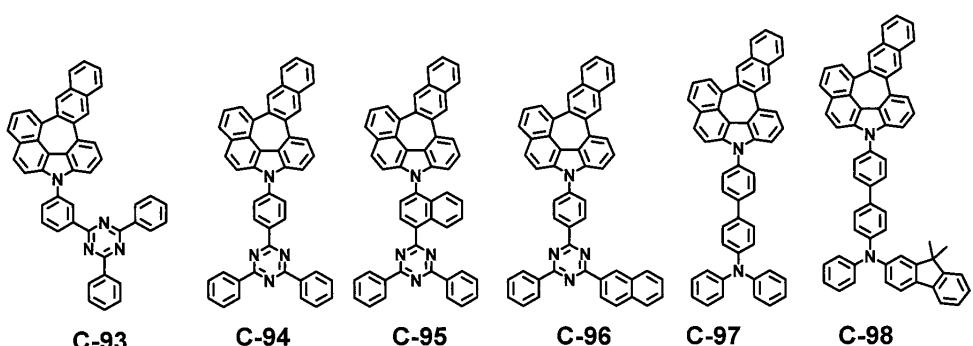
[0063]



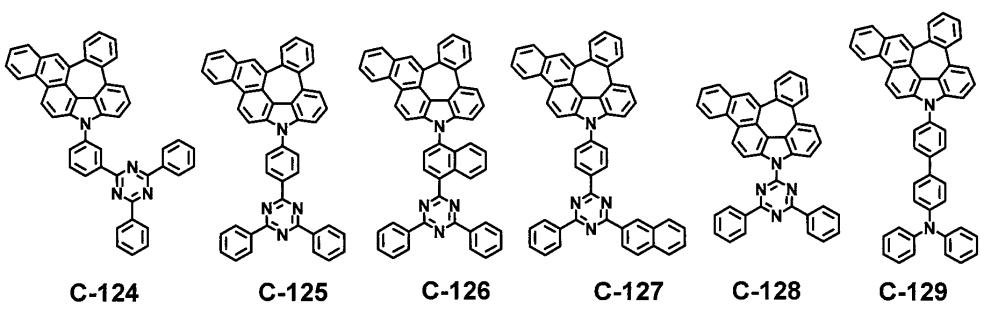
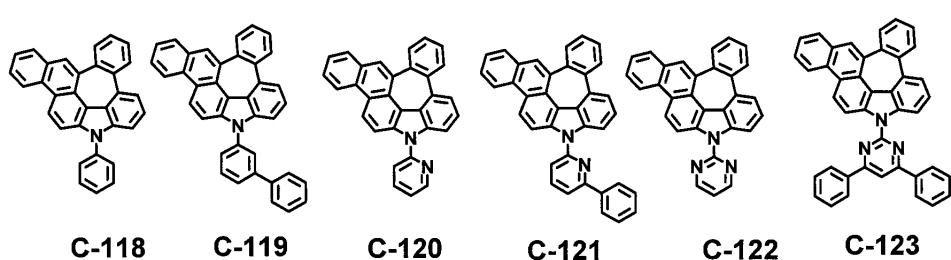
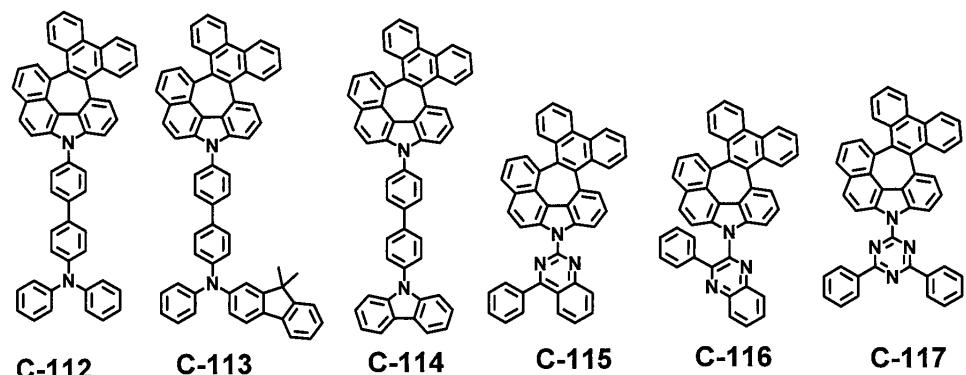
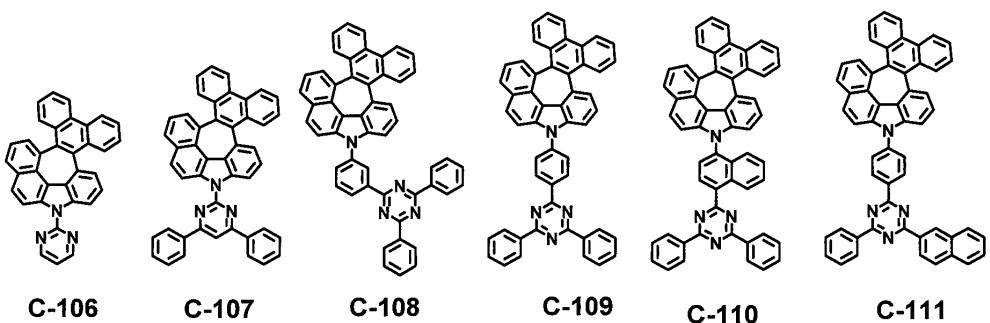
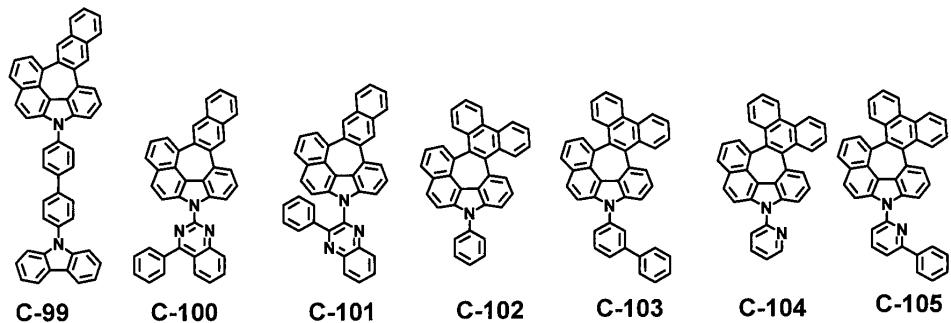
[0064]

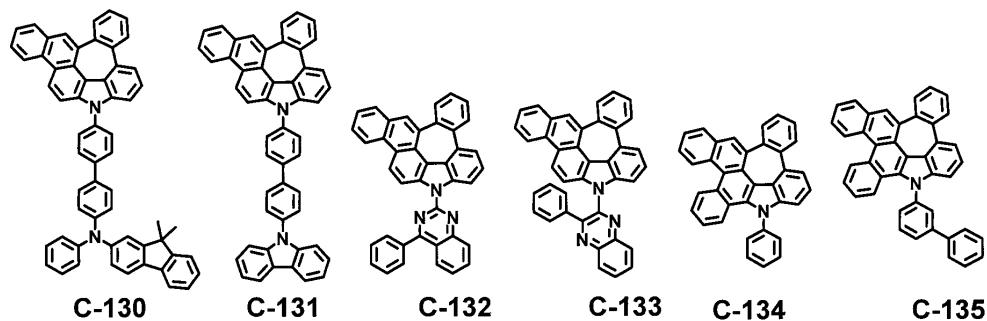


[0065]

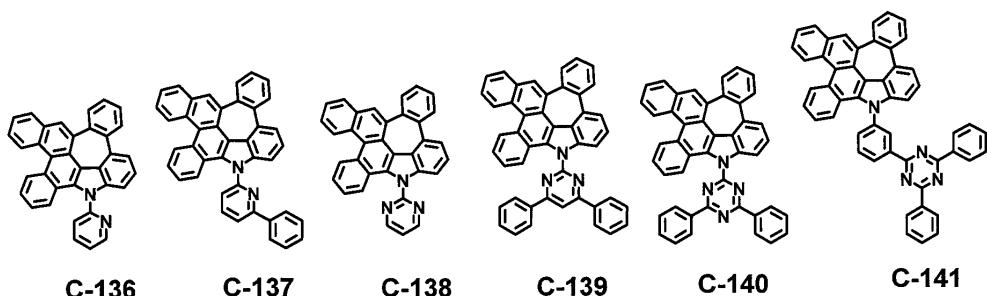


[0066]

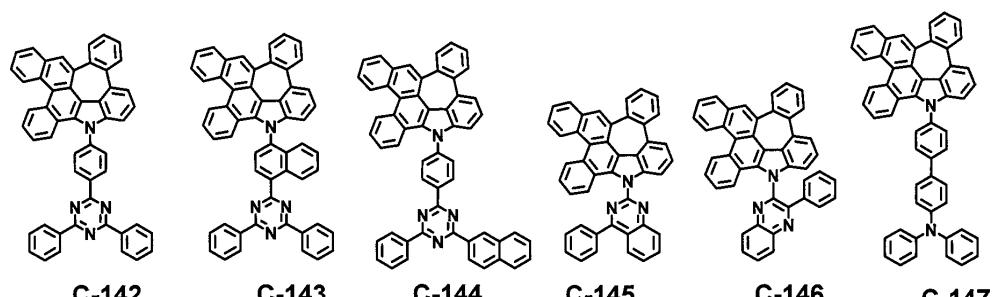




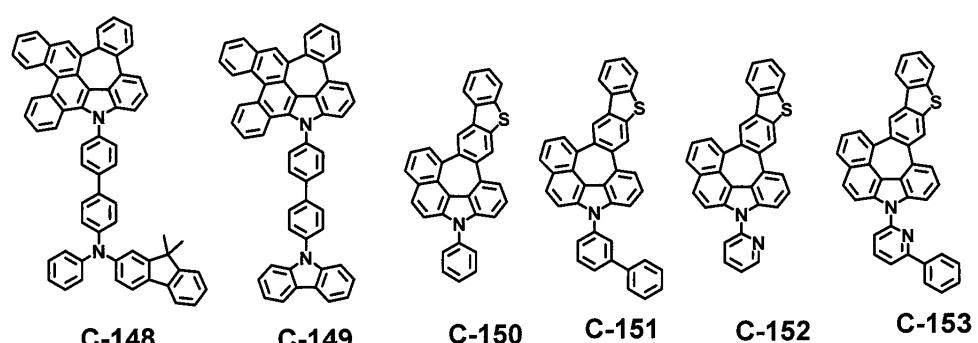
[0072]



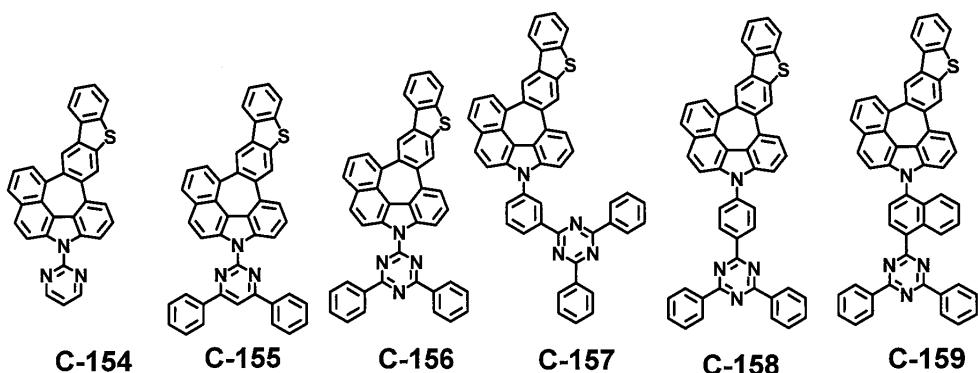
[0073]



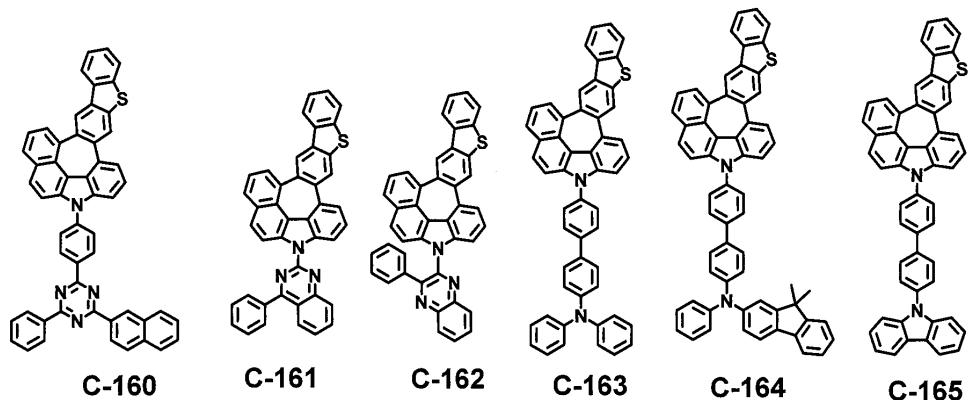
[0074]



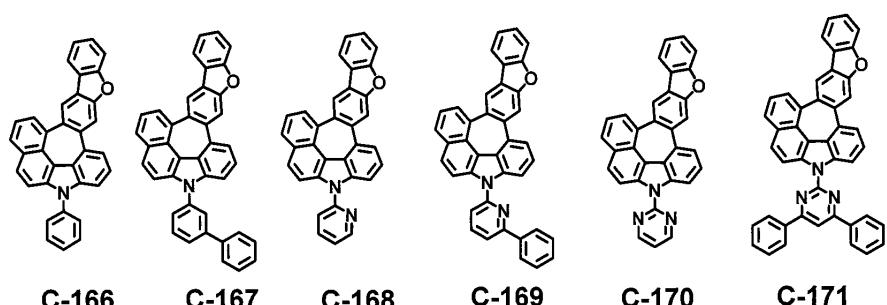
[0075]



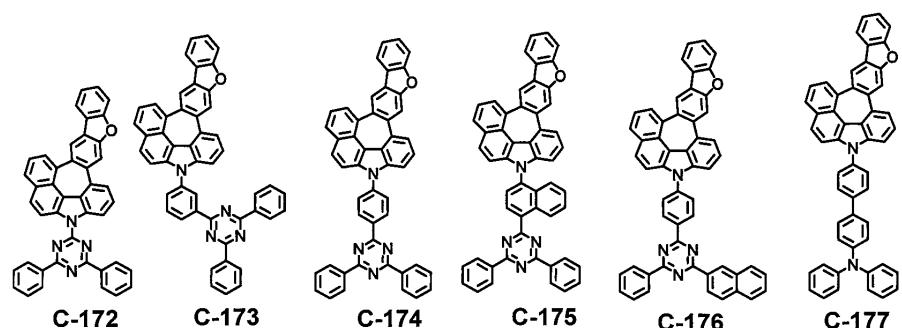
[0076]



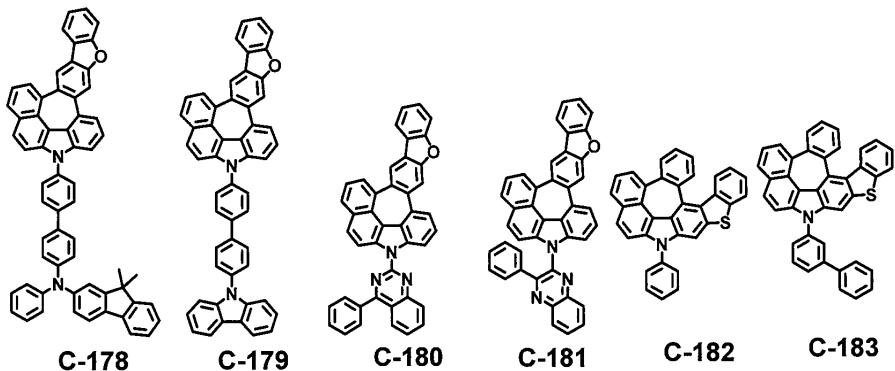
[0077]



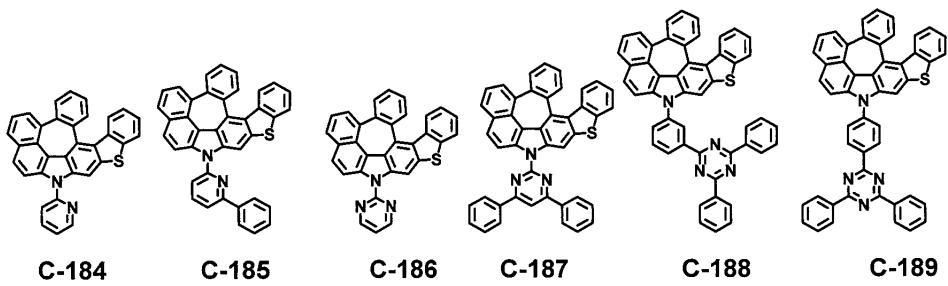
[0078]



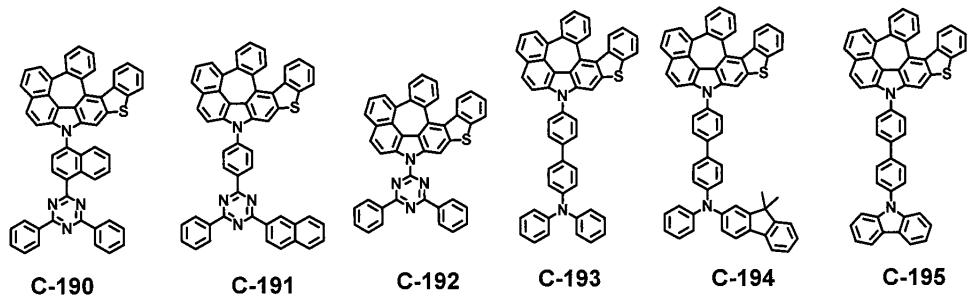
[0079]



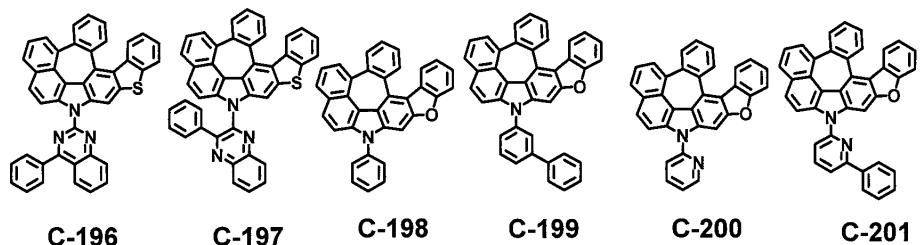
[0080]



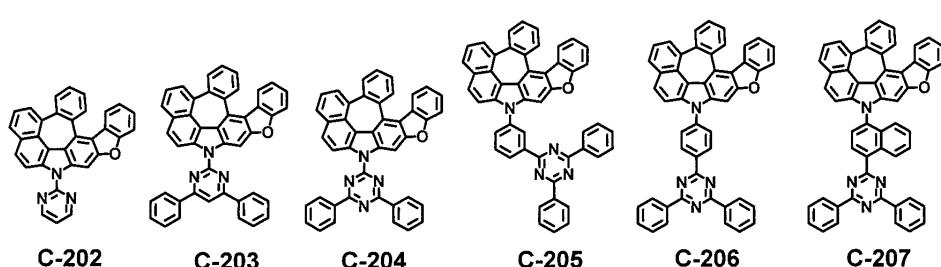
[0081]



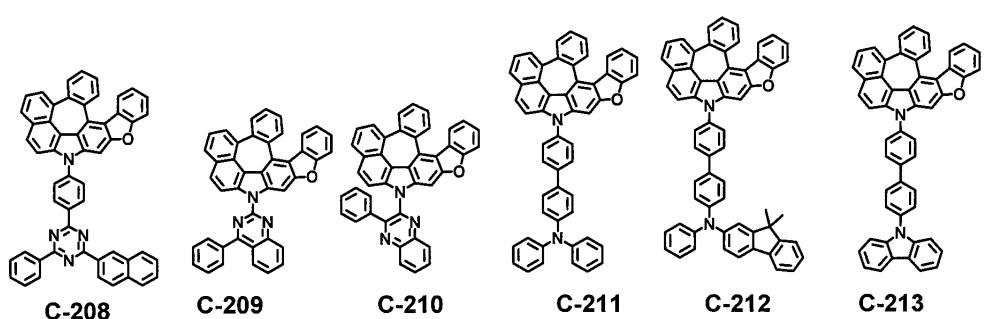
[0082]



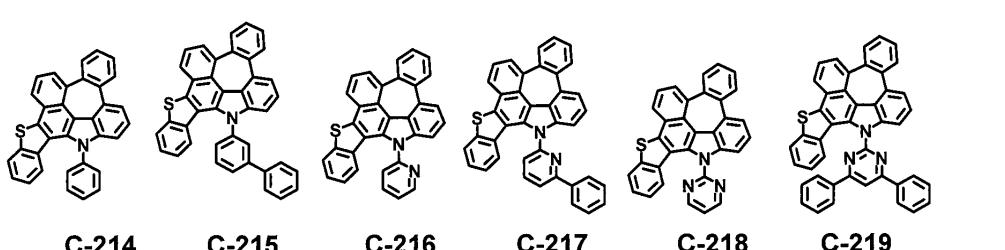
[0083]



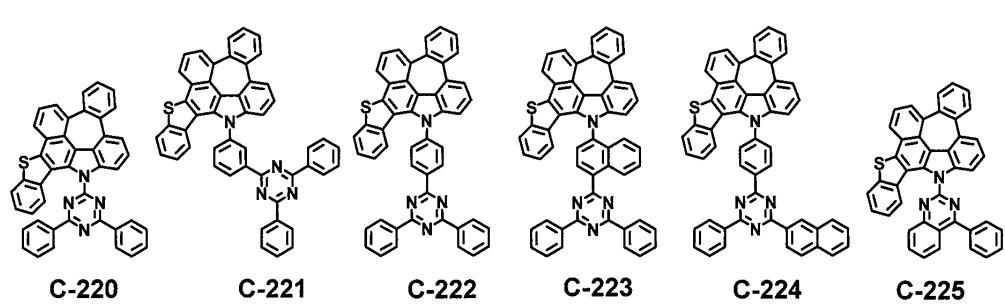
[0084]



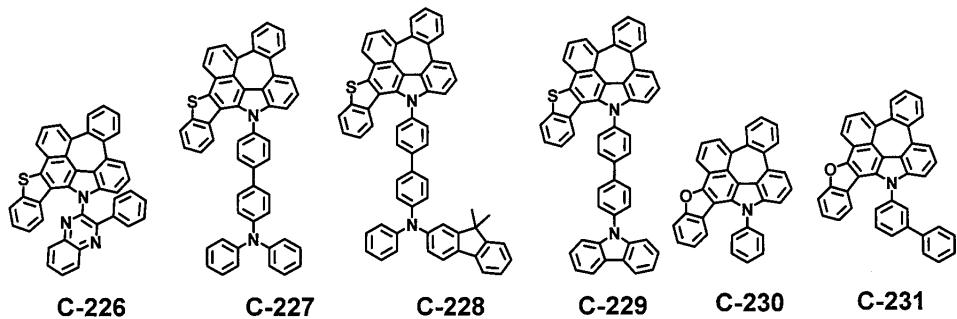
[0085]



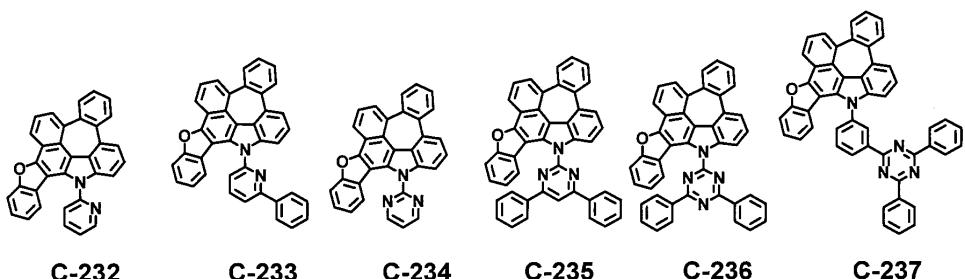
[0086]



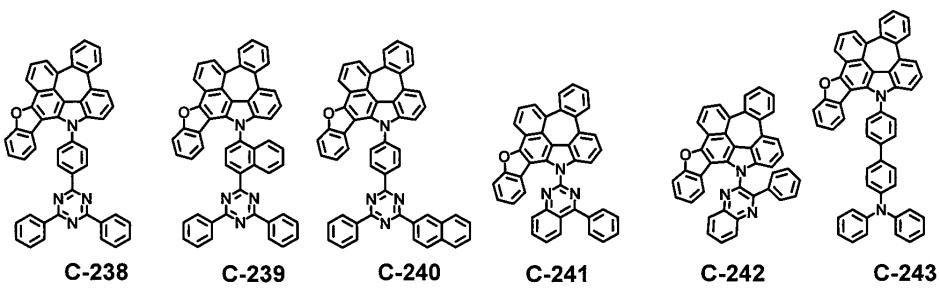
[0087]



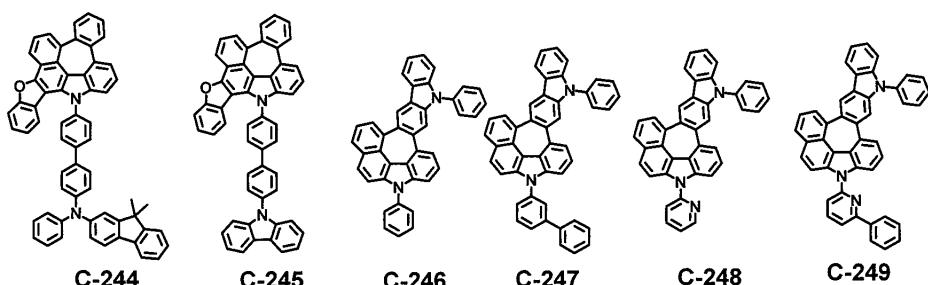
[0088]



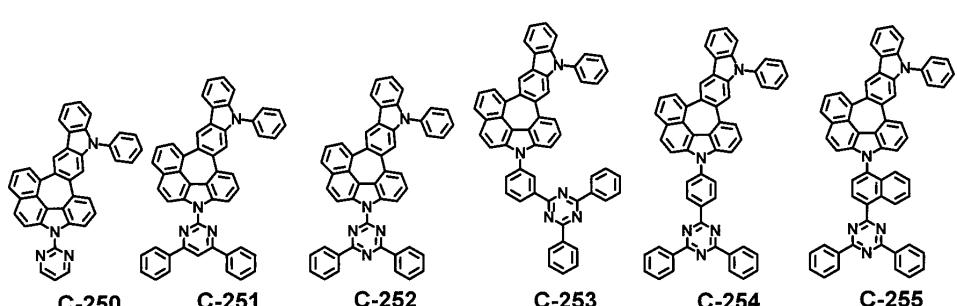
[0089]



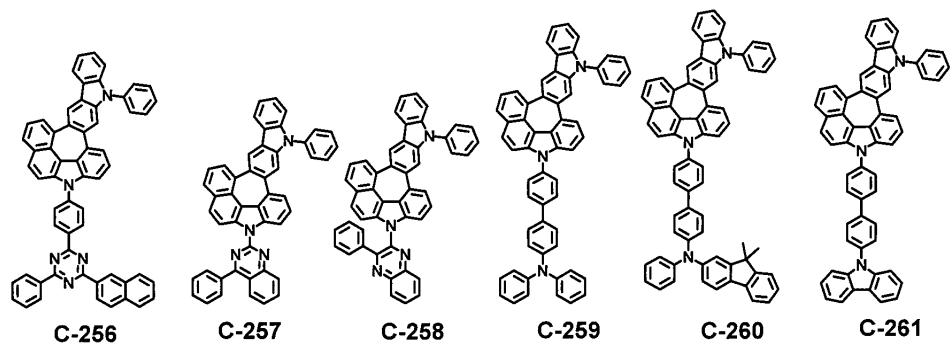
[0090]



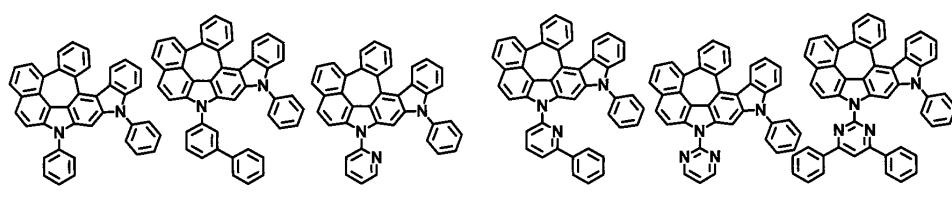
[0091]



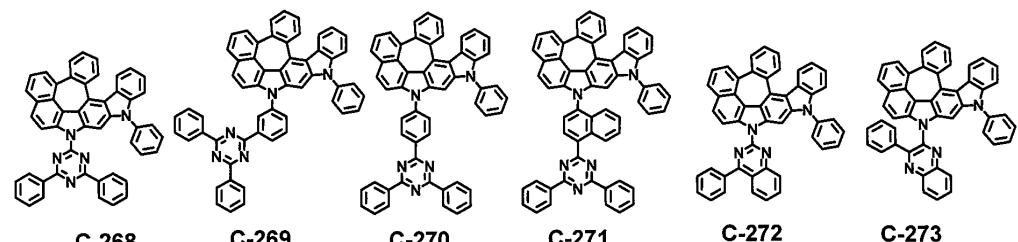
[0092]



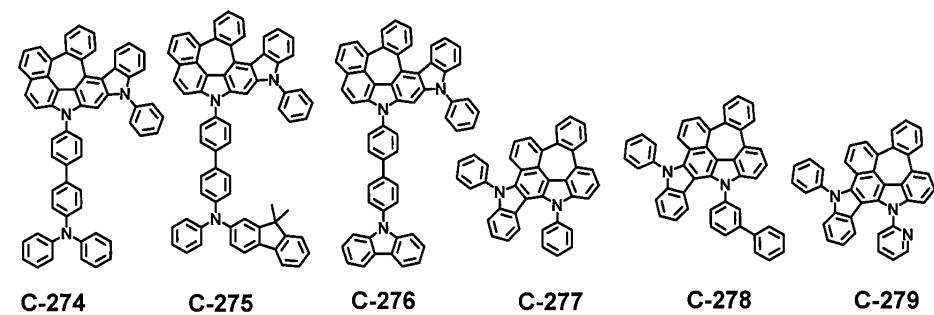
[0093]



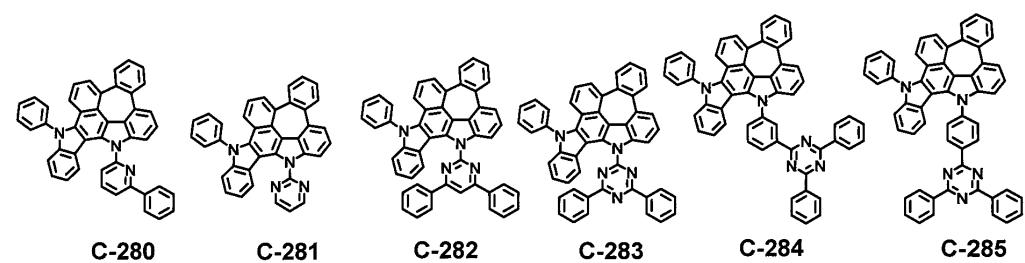
[0094]



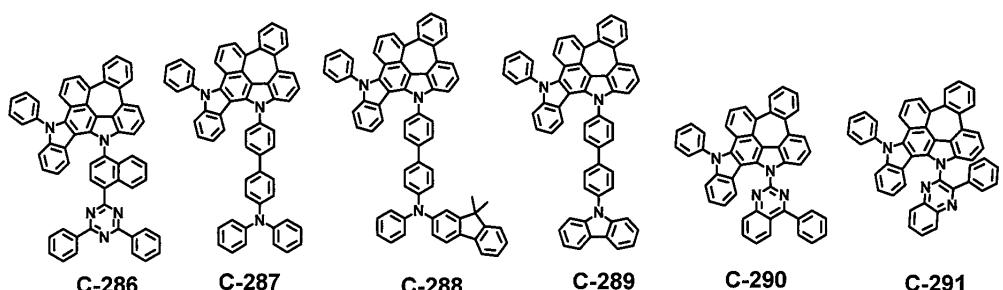
[0095]



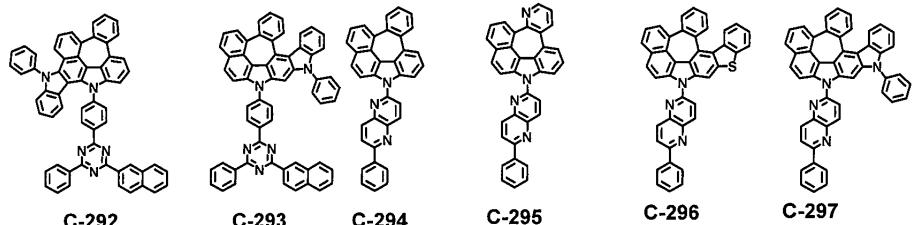
[0096]



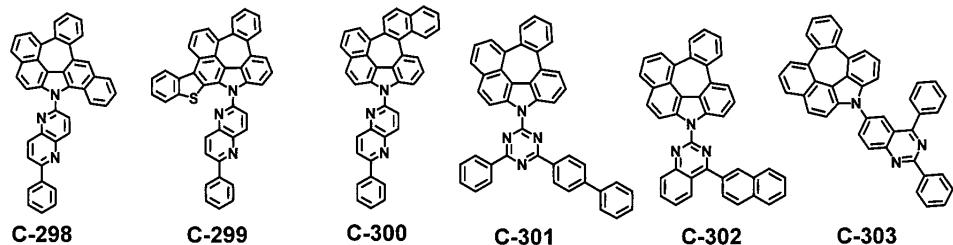
[0097]



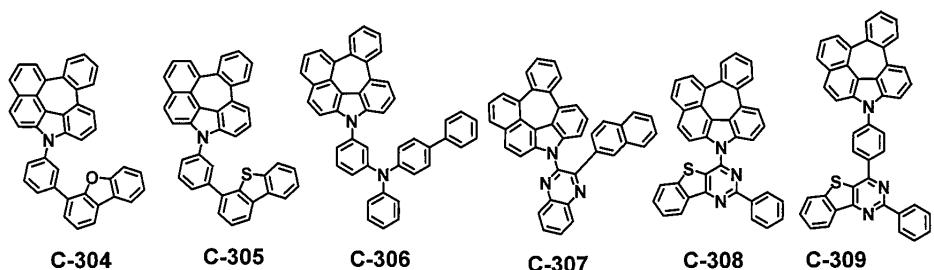
[0098]



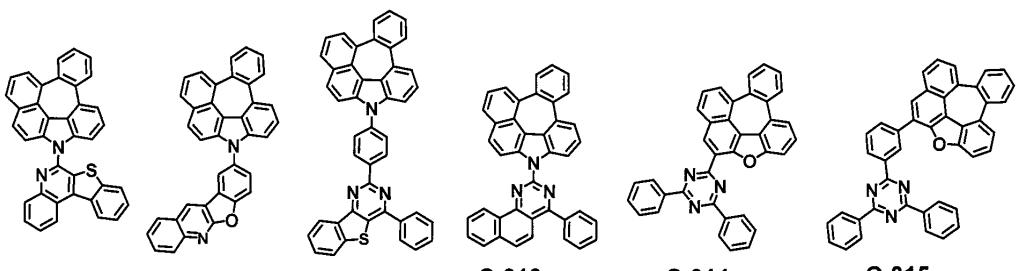
[0099]



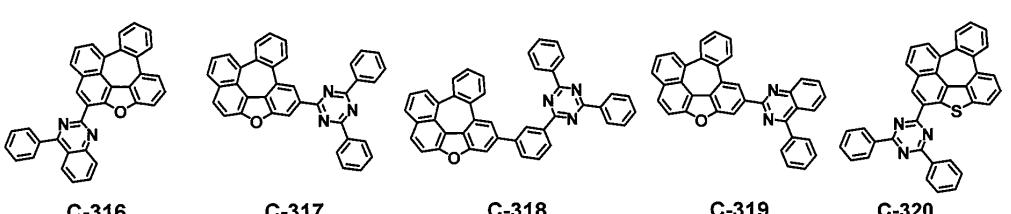
[0100]



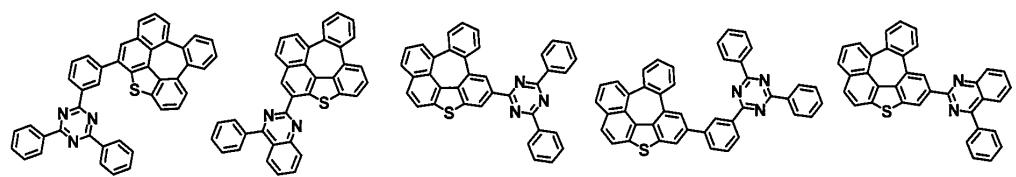
[0101]



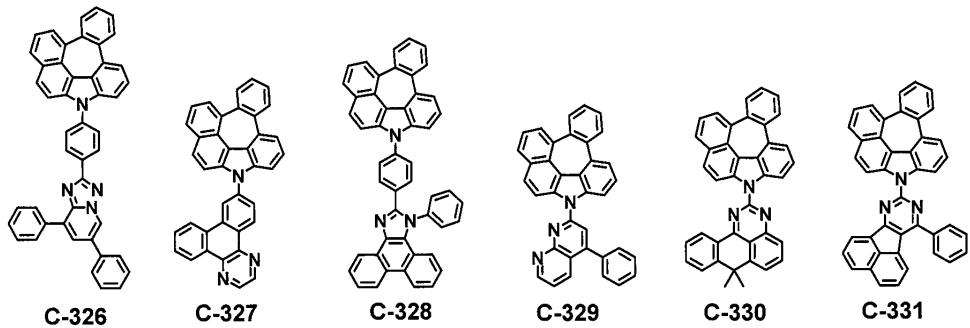
[0102]



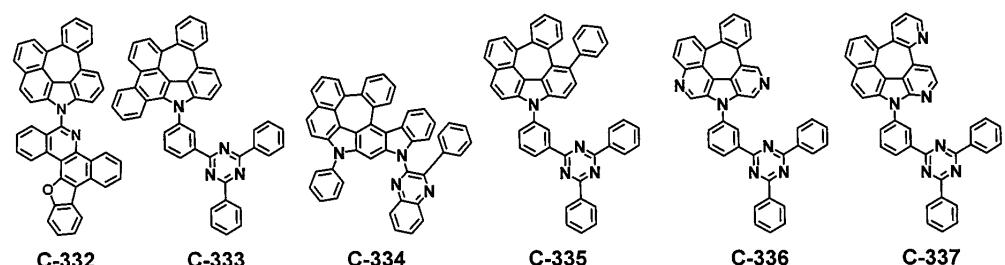
[0103]



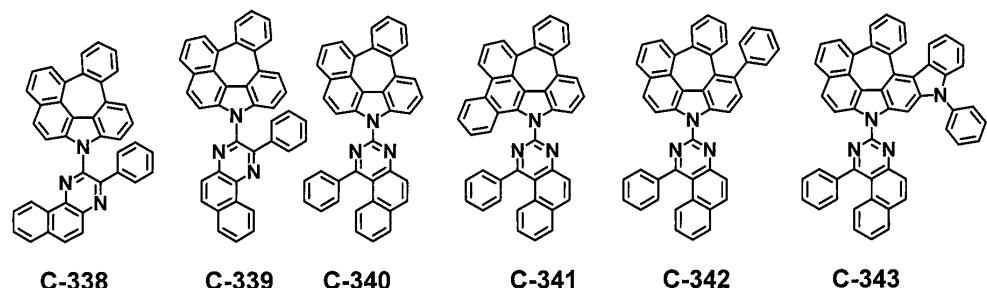
[0104]



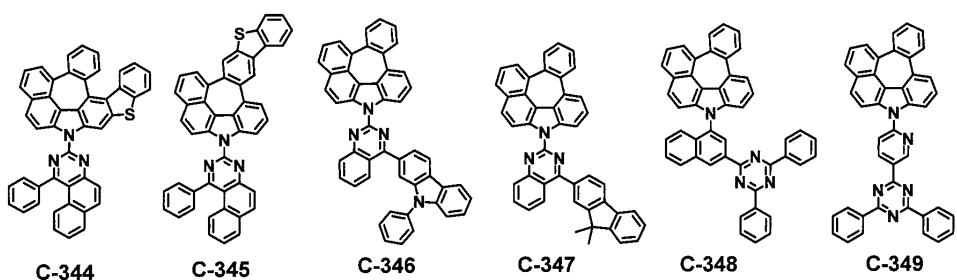
[0105]



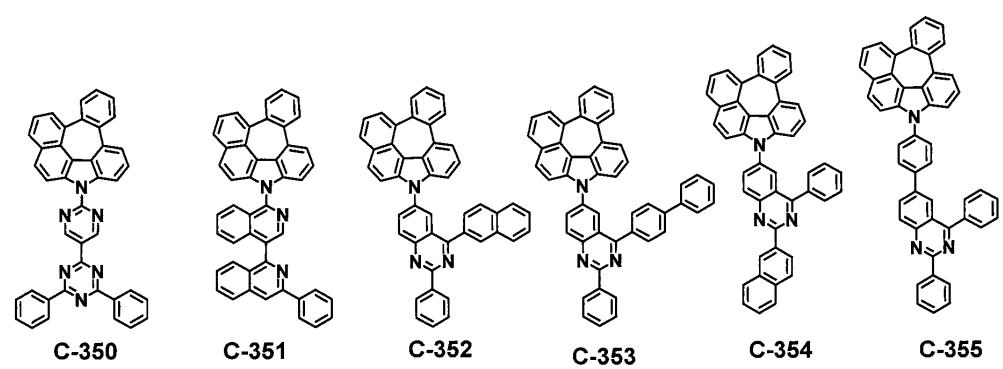
[0106]



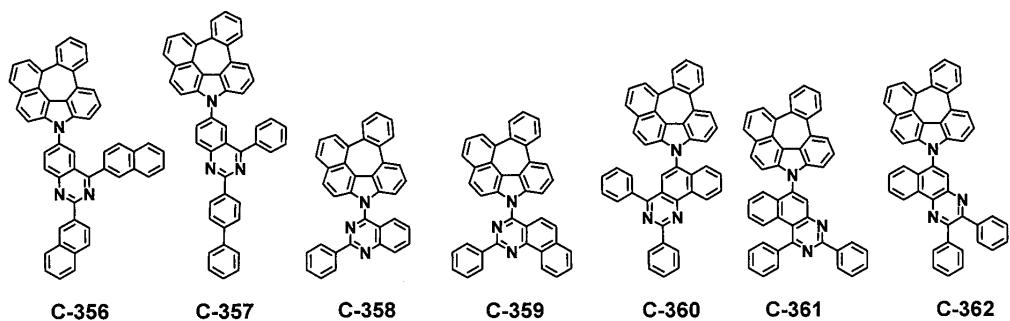
[0107]



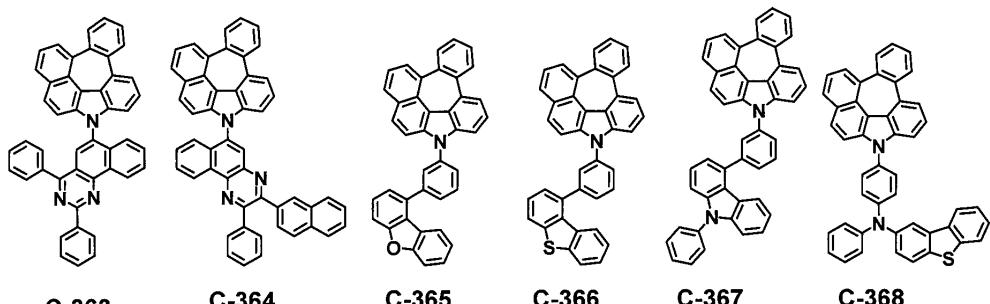
[0108]



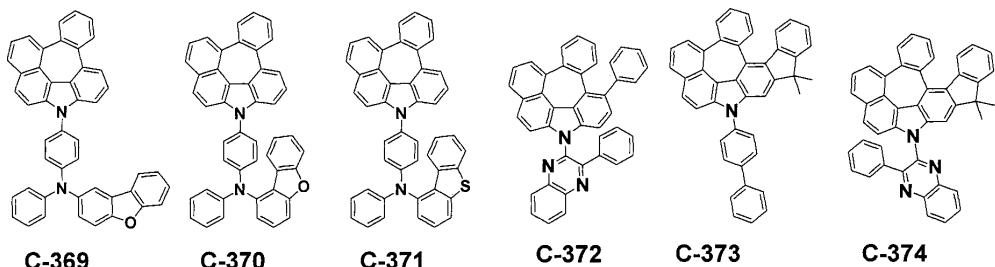
[0109]



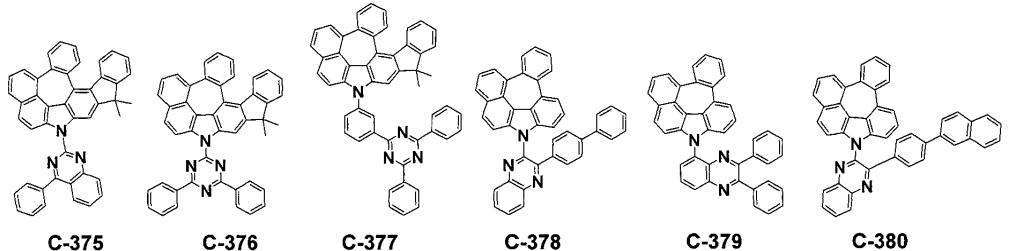
[0110]



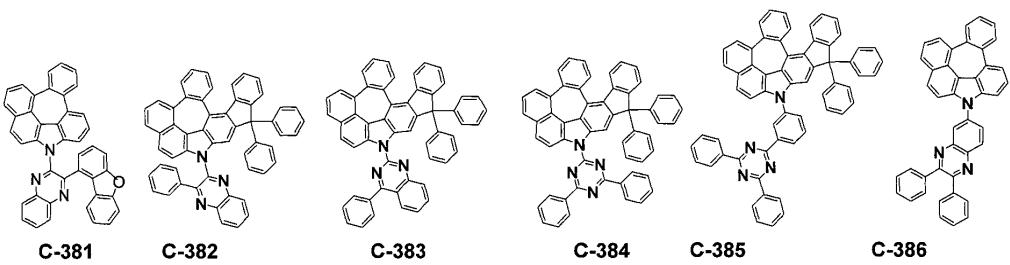
[0111]



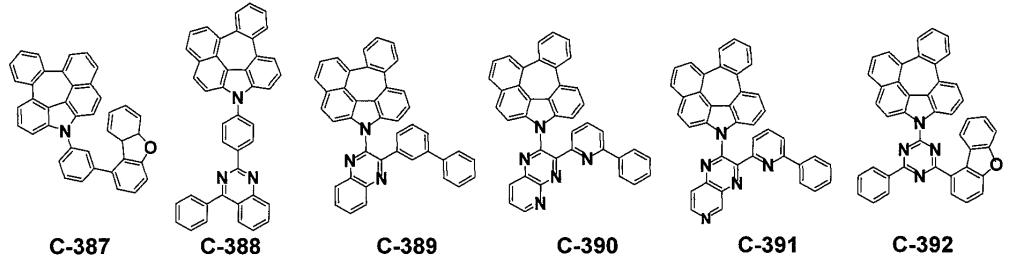
[0112]



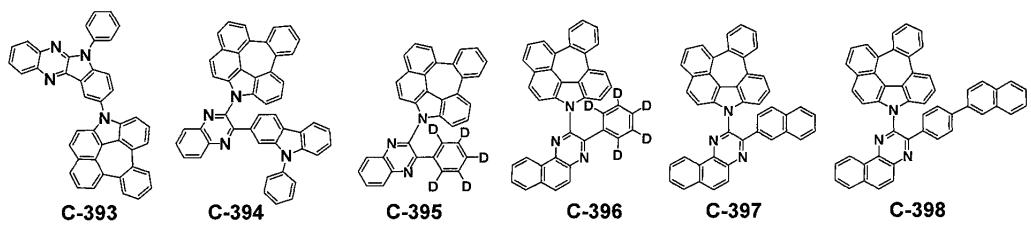
[0113]



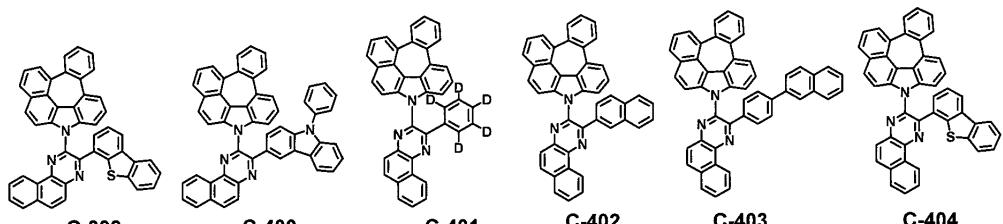
[0114]



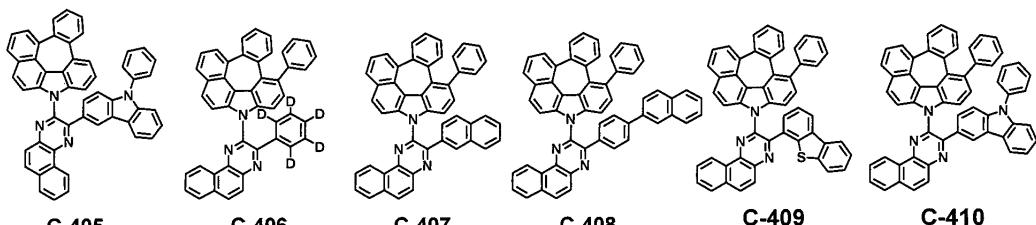
[0115]



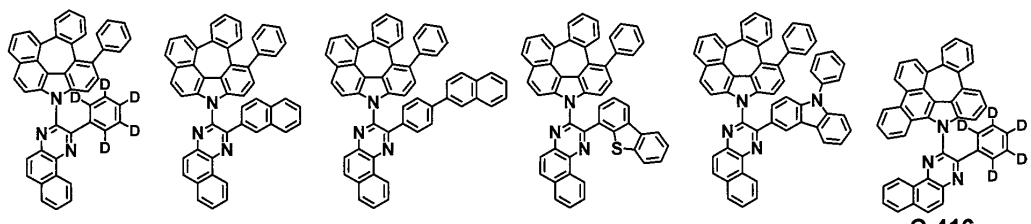
[0116]



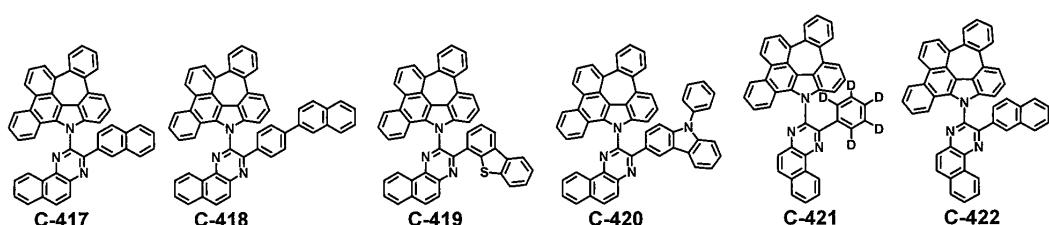
[0117]



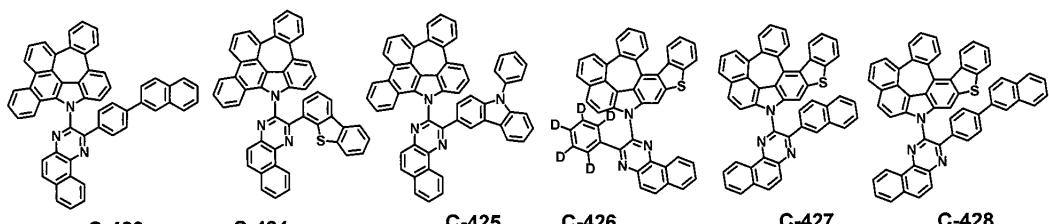
[0118]



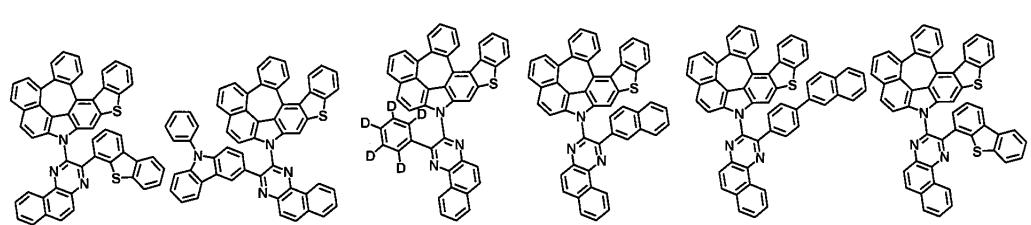
[0119]



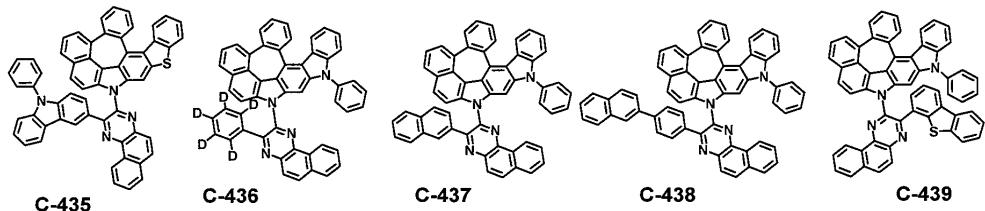
[0120]



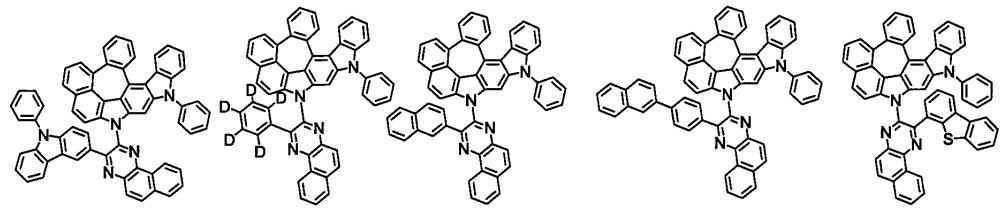
[0121]



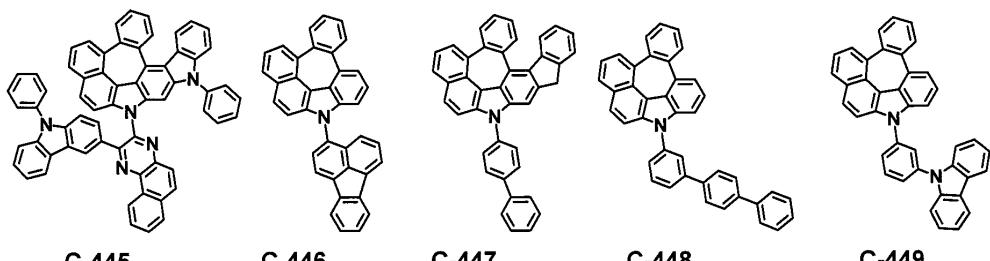
[0122]



[0123]



[0124]

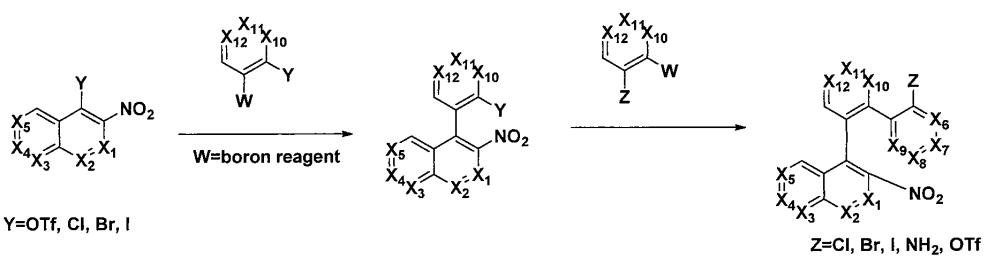


[0125]

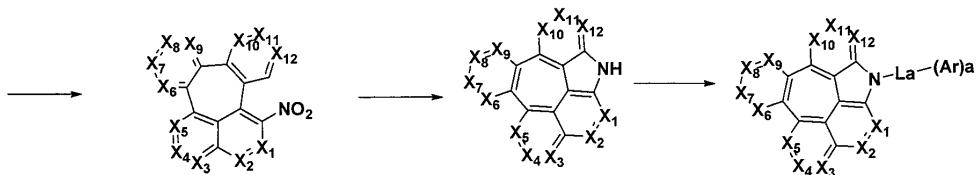
[0126] 상기 화합물 C-1 내지 C-449 중 둘 이상이 조합되어 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있다.

[0127] 본원에 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.

[0128] [반응식 1]

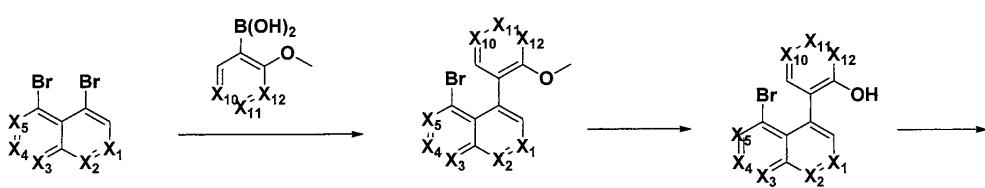


[0129]

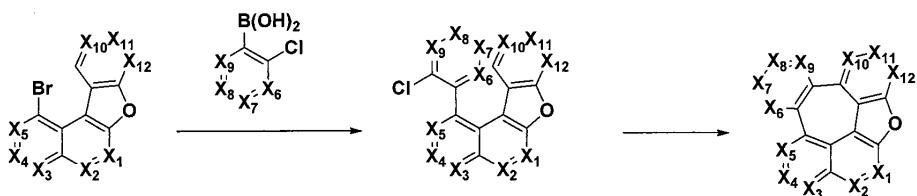


[0130]

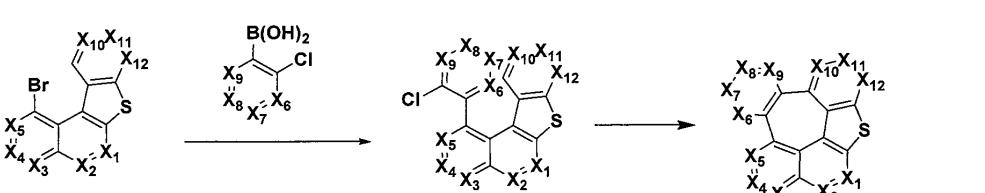
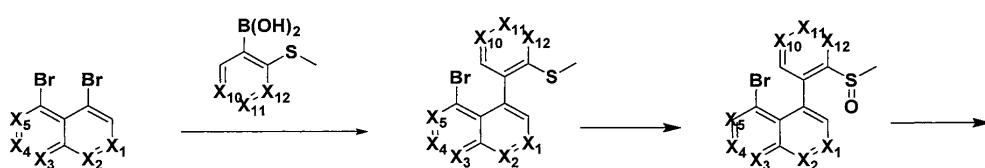
[0131] [반응식 2]



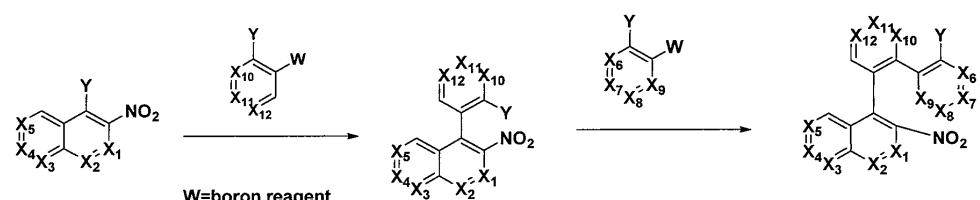
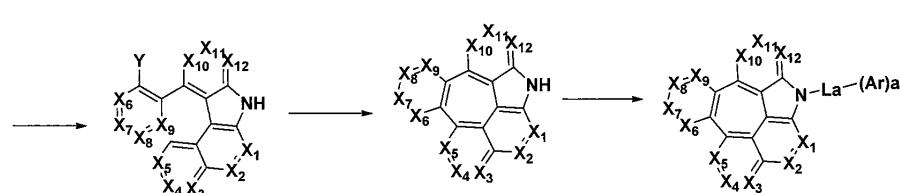
[0132]



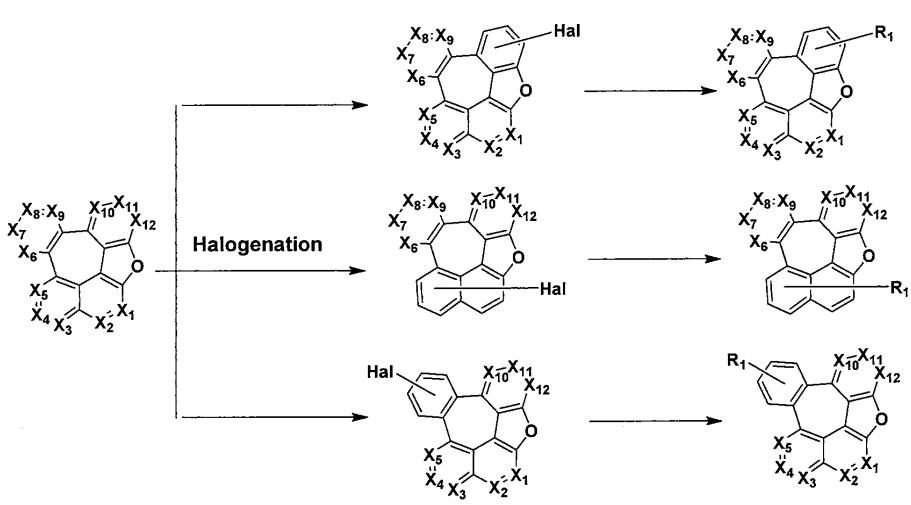
[반응식 3]



[반응식 4]

 $Y=OTf, Cl, Br, I$ 

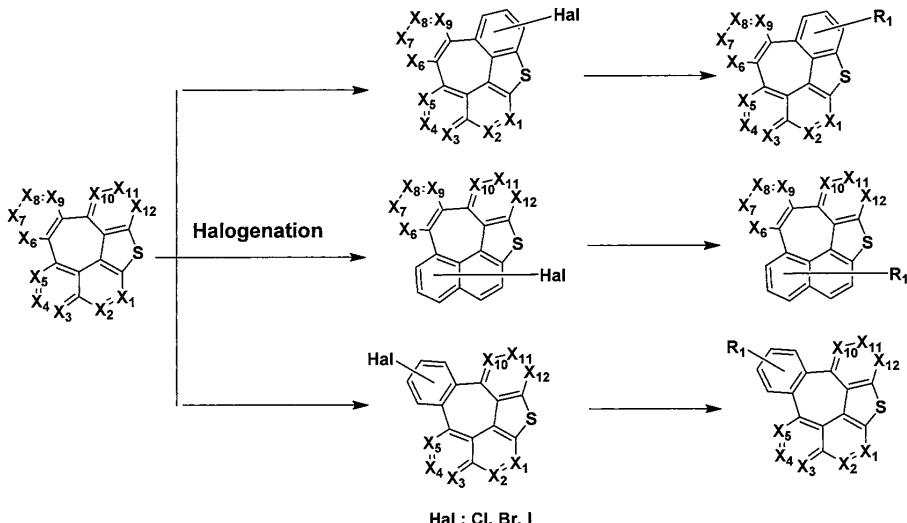
[반응식 5]

 $Hal : Cl, Br, I$ 

[0141]

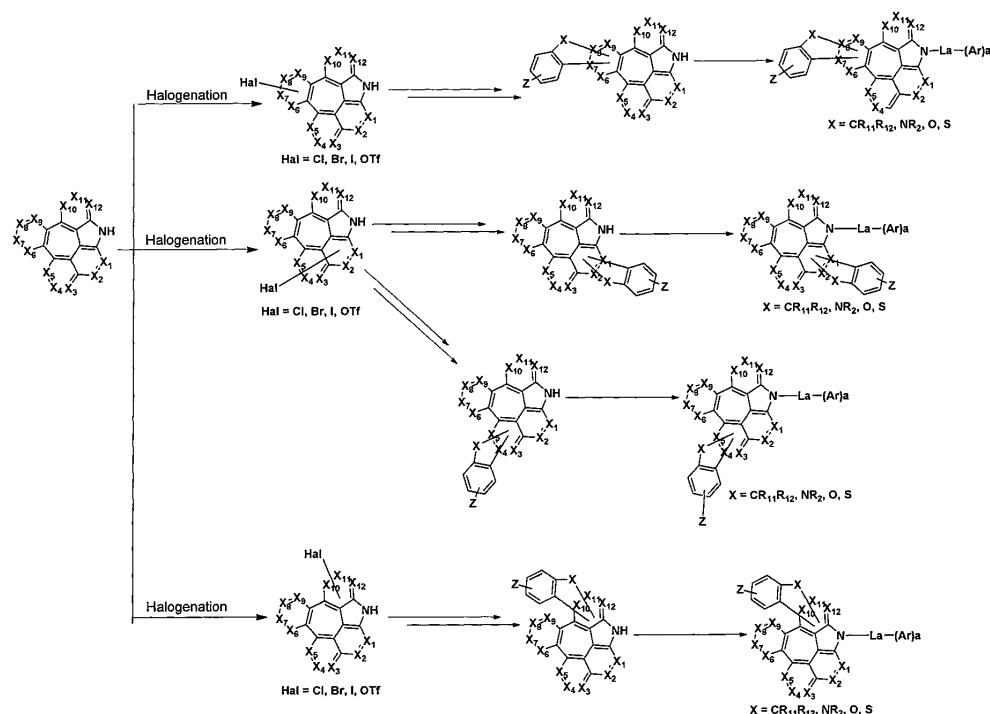
[0142]

[반응식 6]



[0143]

[0144] [반응식 7]



[0145]

[0146]

상기 반응식 1 내지 7에서  $X_1$  내지  $X_{12}$ ,  $R_1$ ,  $La$ ,  $Ar$  및  $a$ 는 화학식 1에서의 정의와 동일하고,  $R_2$ ,  $R_{11}$  및  $R_{12}$ 는 화학식 5 및 6에서의 정의와 동일하며,  $Z$ 는  $R_1$ 의 정의와 동일하고,  $OTf$ 는 트리플루오로메탄설포네이트이다.

[0147]

본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖는다.

[0148]

상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 베피층, 전자 주입층, 계면층 (interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서 제2 전극은 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있고, 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다. 또한, 상기 정공 주입층은 p-도판트를, 상기 전자 주입층은 n-도판트를 추가로 도핑할 수 있다.

[0149]

본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 적어도 1층의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층은 제1 유기 전계 발광 재료 및 제2 유기 전계 발광 재료로 상기 화학식 1로 표시

되는 서로 다른 화합물을 포함하는 복수 종의 유기 전계 발광 재료를 포함할 수 있다. 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 애노드, 캐소드, 및 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 적어도 1층의 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 화학식 1로 표시되는 서로 다른 둘 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0150] 상기 발광층은 호스트와 도판트를 포함하고, 상기 호스트는 복수종의 호스트 재료를 포함하며, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 복수종의 호스트 재료 중 제1 및 제2 호스트 화합물로 포함될 수 있다. 여기서, 제1 호스트 화합물과 제 2 호스트 화합물의 중량비는 약 1:99 내지 약 99:1, 바람직하게는 약 10:90 내지 약 90:10, 더욱 바람직하게는 약 30:70 내지 약 70:30, 더욱 바람직하게는 약 40:60 내지 약 60:40이며, 더욱 더 바람직하게는 약 50:50이다.

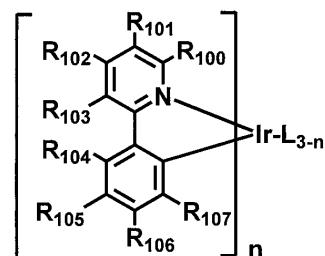
[0151] 본원에서 발광층은 발광이 이루어지는 층으로서 단일층일 수 있으며, 또한 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 본원의 복수 종의 호스트 재료는 제1 및 제2 호스트 재료가 모두 하나의 층에 포함될 수도 있고, 제1 및 제2 호스트 재료가 각각 다른 발광층에 포함될 수도 있다. 본원의 일 태양에 따르면, 상기 발광층의 호스트 화합물에 대한 도판트 화합물의 도핑 농도는 20 중량% 미만일 수 있다.

[0152] 본원의 유기 전계 발광 소자는 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 전자벼퍼층, 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자는 본원의 복수 종의 호스트 재료 이외에 아민계 화합물을 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 재료, 발광 보조 재료, 및 전자 차단 재료 중 하나 이상으로 더 포함할 수 있다. 또한, 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자는 본원의 복수 종의 호스트 재료 이외에 아진계 화합물을 전자 전달 재료, 전자 주입 재료, 전자 벼퍼 재료 및 정공 차단 재료 중 하나 이상으로 더 포함할 수 있다.

[0153] 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(0s), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(0s), 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.

[0154] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0155] [화학식 101]



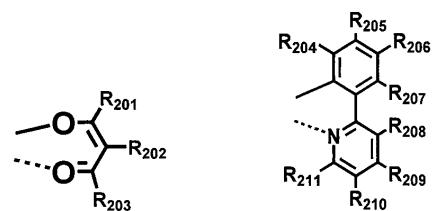
[0156]

[0157] 상기 화학식 101에서,

[0158] L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0159] [구조 1]

[구조 2]



[0160]

[0161] R<sub>100</sub> 내지 R<sub>103</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테

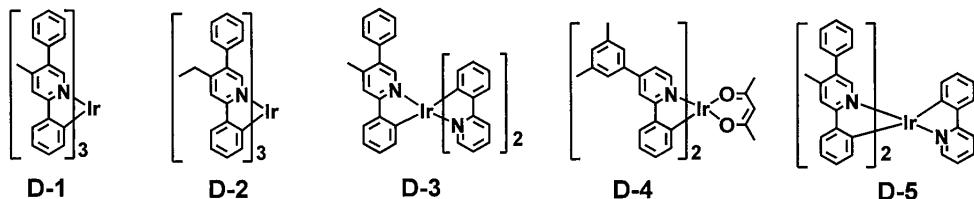
로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; 인접한 치환기와 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 피리딘과 함께 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

[0162]  $R_{104}$  내지  $R_{107}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헥테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; 인접한 치환기와 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 벤젠과 함께 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 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

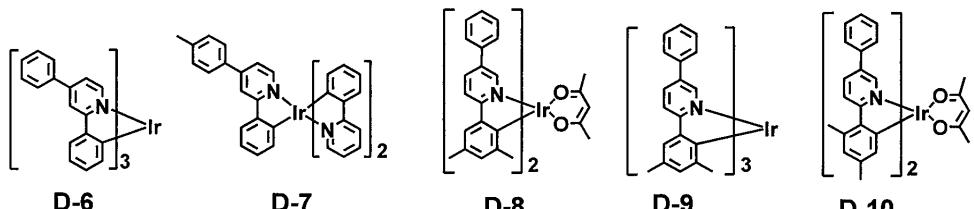
[0163]  $R_{201}$  내지  $R_{211}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; 인접 치환기와 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

[0164] n은 1 내지 3의 정수이다.

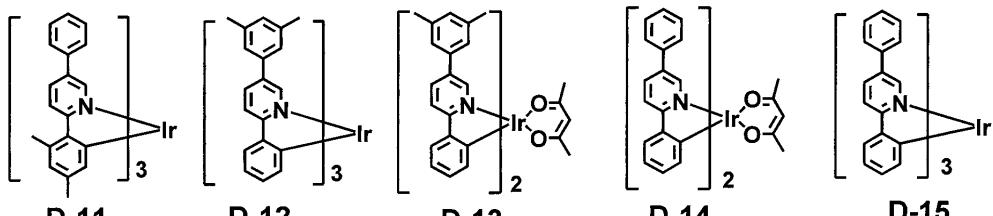
[0165] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



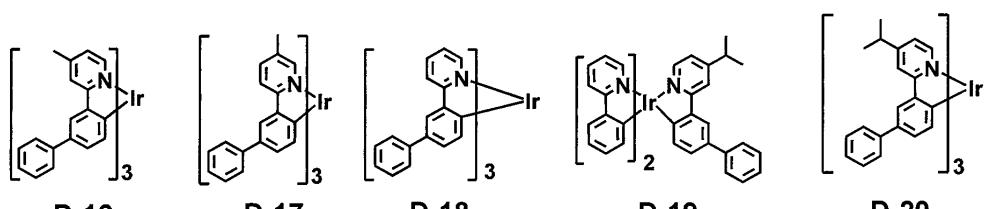
[0166]



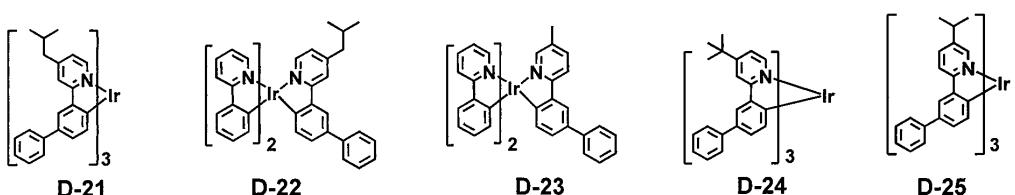
[0167]



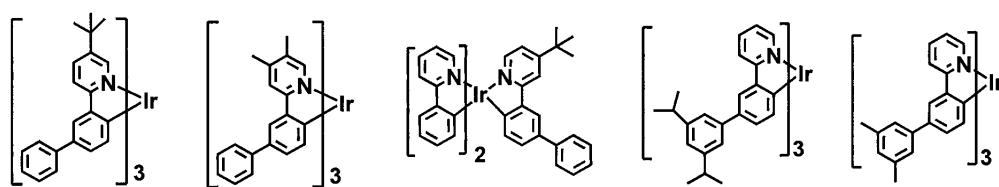
[0168]



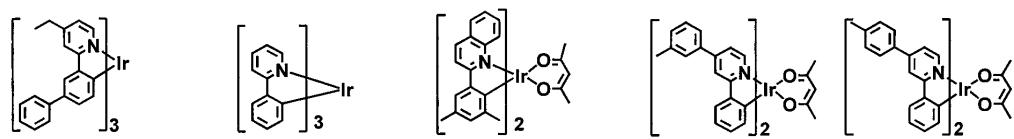
[0169]



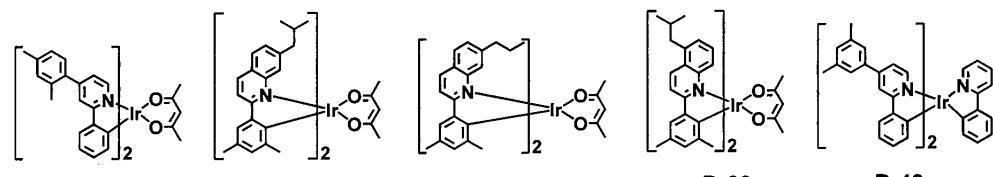
[0170]



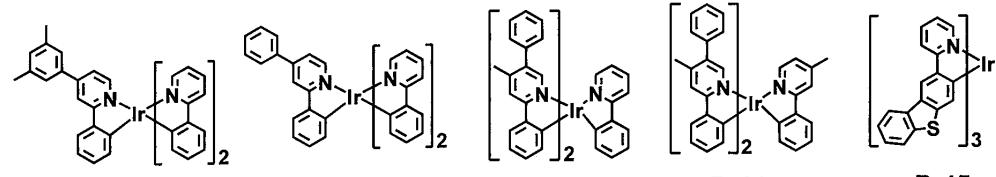
[0171]



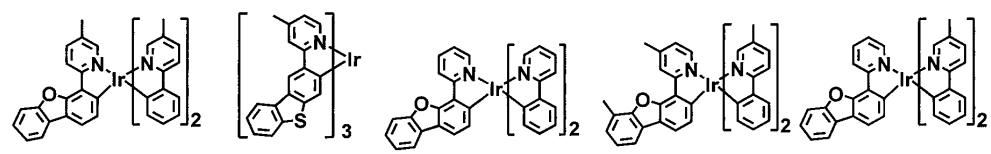
[0172]



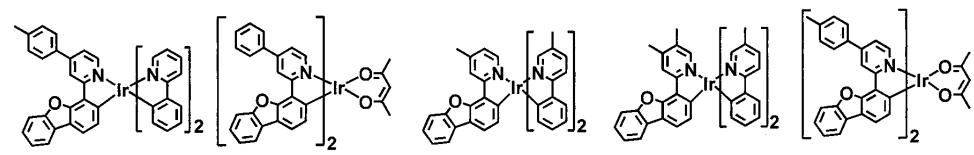
[0173]



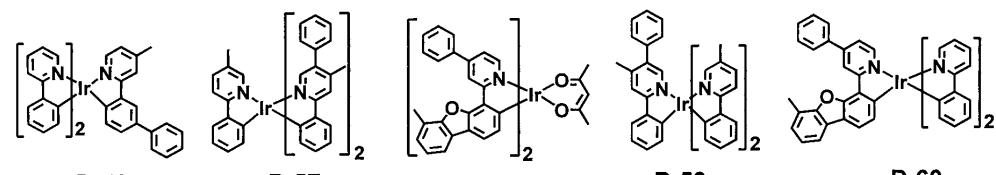
[0174]



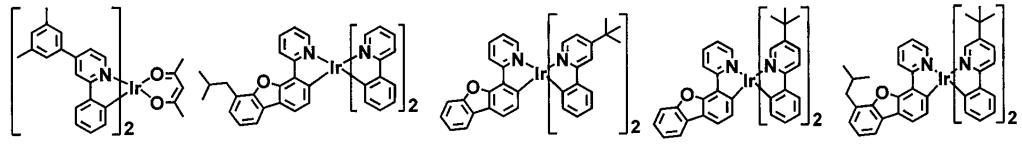
[0175]



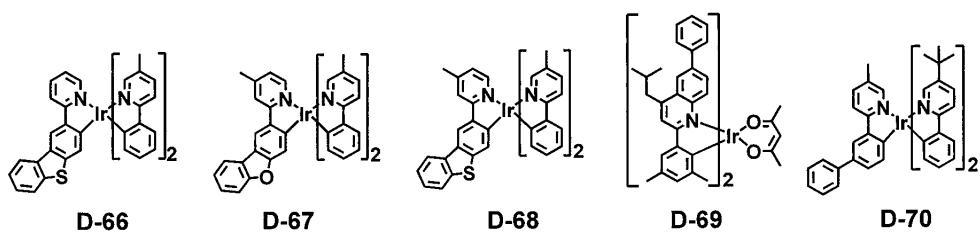
[0176]



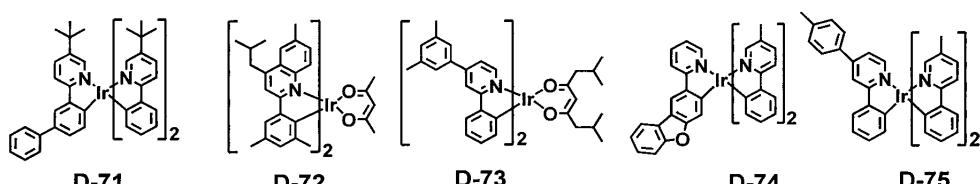
[0177]



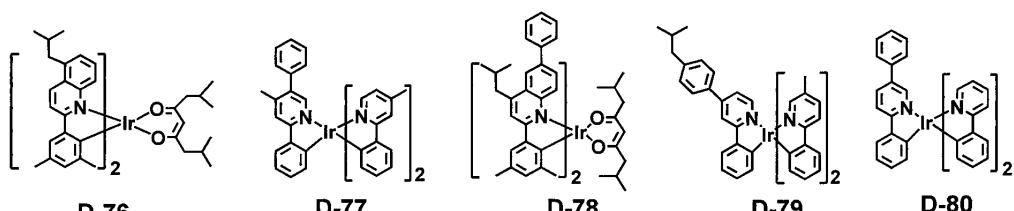
[0178]



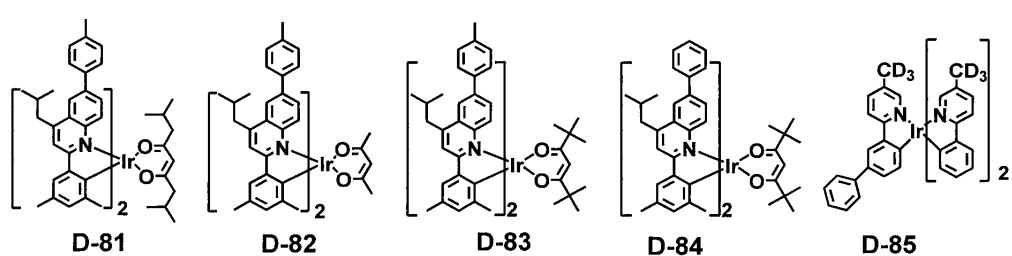
[0179]



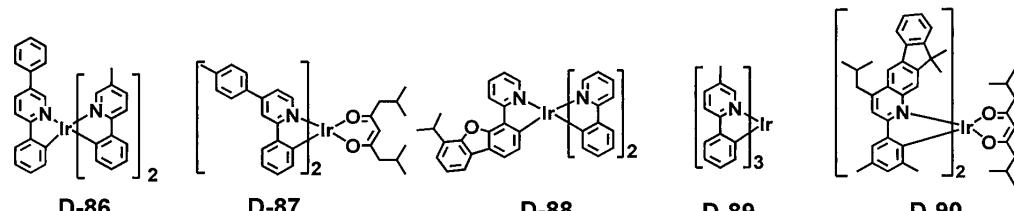
[0180]



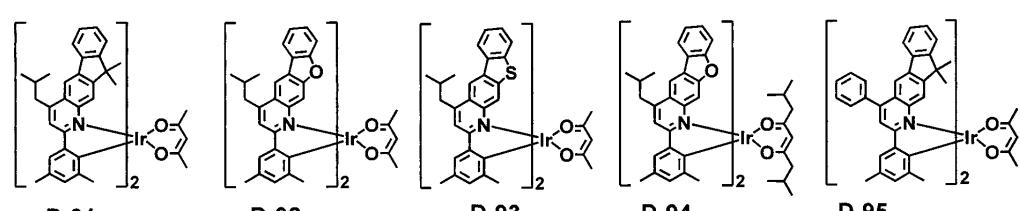
[0181]



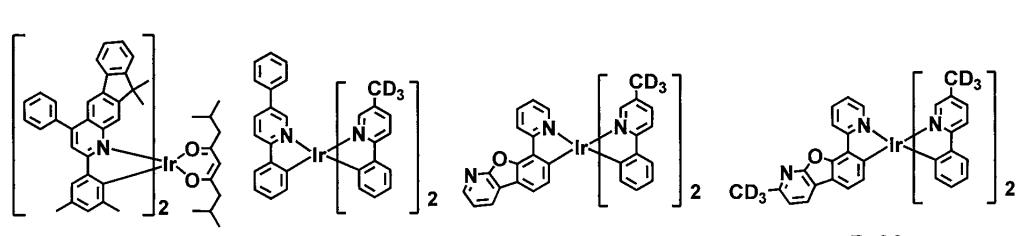
[0182]

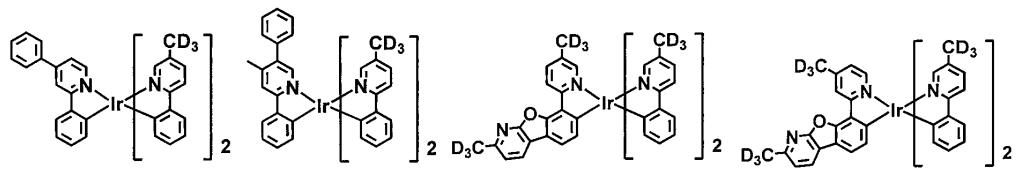


[0183]

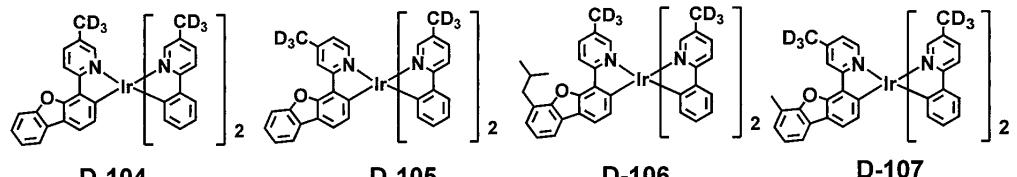


[0184]

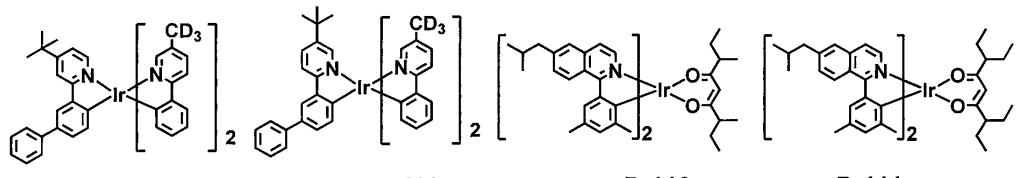




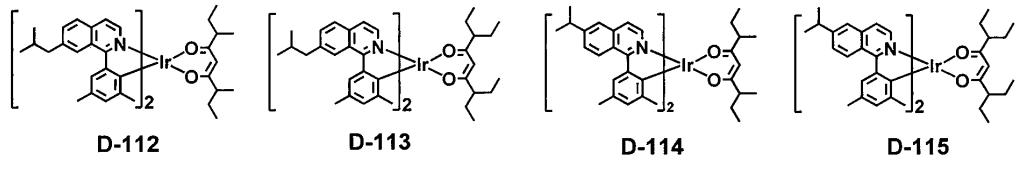
[0186]



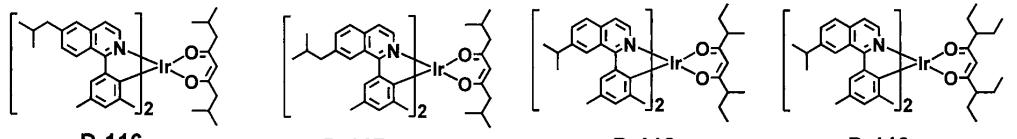
[0187]



[0188]



[0189]



[0190]

본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 애노드와 발광층 사이에 정공주입층, 정공전달층, 또는 전자차단층에서 선택되거나 이들의 조합으로 이루어진 층이 사용될 수 있다. 정공주입층은 애노드에서 정공전달층 또는 전자차단층으로의 정공주입 장벽(또는 정공주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공전달층 또는 전자차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0191]

또한, 발광층과 캐소드 사이에 전자차단층, 정공차단층, 전자전달층, 또는 전자주입층에서 선택되거나 이들의 조합으로 이루어진 층이 사용될 수 있다. 전자벼퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공차단층 또는 전자전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

[0192]

또한, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물 또는 복수 종의 호스트 재료는 양자점(QD)을 포함하는 유기 전계 발광 소자에도 사용될 수 있다.

[0193]

본원의 유기 전계 발광 소자의 각 층은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크젯 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 방법으로 형성될 수 있다.

[0194]

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.

[0195]

또한, 본원의 제1 및 제2 호스트 화합물을 상기 열거된 방법으로 성막할 수 있으며, 흔히 공증착 또는 혼합증착 공정에 의해 성막할 수 있다. 상기 공증착은 두 가지 이상의 재료를 각각의 개별 도가니 소스에 넣고, 두 셀을 동시에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이고, 상기 혼합 증착은 증착 전 두 가지 이상의

재료를 하나의 도가니 소스에 혼합한 후, 하나의 셀에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이다. 또한, 제1 및 제2 호스트 화합물이 유기 전계 발광 소자 내의 같은 층 또는 다른 층에 존재하게 되는 경우, 두 호스트 화합물은 각각 개별적으로 성막할 수도 있다. 예를 들어, 제1 호스트 화합물을 증착한 후 제2 호스트 화합물을 증착할 수 있다.

[0197]

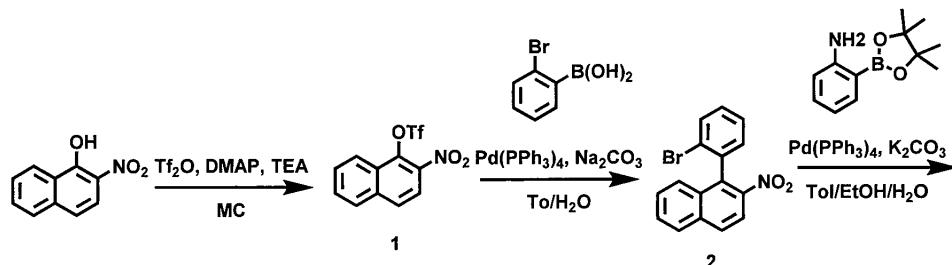
본원은 상기 화학식 1로 표시되는 서로 다른 둘 이상의 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료를 이용하여 디스플레이 장치를 제공할 수 있다. 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다. 구체적으로, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0198]

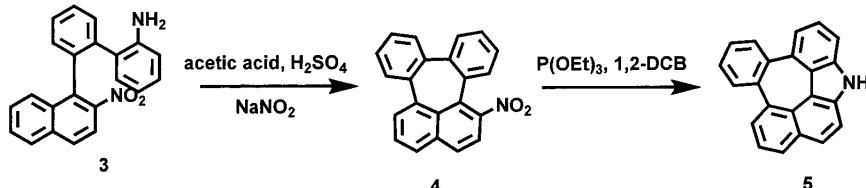
이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성, 그리고 본원의 복수 종의 호스트 재료를 포함하는 OLED 소자의 특성에 대해 살펴본다. 그러나, 이하의 실시예는 본원의 상세한 이해를 위하여 본원에 따른 화합물 및 본원에 따른 복수 종의 호스트 재료를 포함하는 OLED 소자의 특성을 설명한 것일 뿐, 본원은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0199]

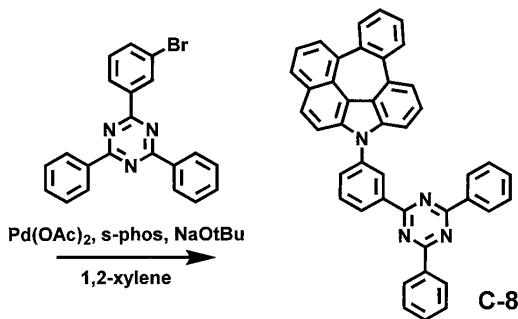
### [실시예 1] 화합물 C-8의 제조



[0200]



[0201]



[0202]

### 1) 화합물 1의 합성

[0203]

플라스크에 2-나트로-1-나프톨 (70 g, 370 mmol), 4-(다이메틸아미노)페리딘 (DMAP) (4.5 g, 37 mmol), 및 메틸렌 클로라이드 (MC) 1800 mL를 넣어 녹인 후, 트리에틸아민 (TEA) (62 mL, 444 mmol)을 0°C에서 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.

[0204]

### 2) 화합물 2의 합성

[0205]

플라스크에 화합물 1 (96.2 g, 299 mmol), 2-브로모페닐보론산 (72.1 g, 359 mmol), 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (17.3 g, 15 mmol), 탄산나트륨 (79.3 g, 749 mmol), 톨루엔 1400 mL, 에탄올 350 mL 및 물 350

㎖를 넣어 녹인 후 1시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 살페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 2 (98 g, 수율: 99%)을 얻었다.

### 3) 화합물 3의 합성

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.

#### 4) 화합물 4의 합성

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.

### 5) 화합물 5의 합성

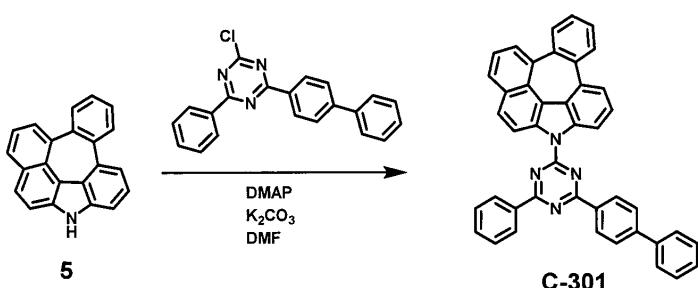
플라스크에 화합물 4 (4.7 g, 15 mmol), 트리에틸포스파이트 48 mL 및 1,2-디클로로벤젠 48 mL를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 침압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5 (2.7 g, 수율: 63%)을 얻었다.

### 6) 화합물 C-8의 합성

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-디사이클로헥실포스피노-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

### [실습예 2] 환화물 C-301의 제조

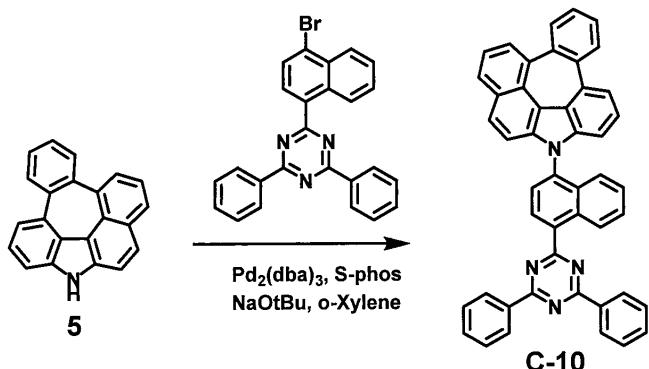


클라스트에 화합물 3 (3.0 g, 17 mmol), 2-[1,1'-마이페닐]-4-클로도-6-페닐-1,3,5-트리아신 (7.06 g, 21 mmol), DMAP (105 mg, 0.858 mmol), 포타슘 카보네이트 (7.1 g, 51 mmol), 및 다이메틸포름아마이드(DMF) (85 mL)를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 중류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-301 (4.8 g, 수율: 47%)을 얻었다.

[0219]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>) 9.09–9.07(d,  $J=12\text{ Hz}$ , 1H), 8.93–8.91(d,  $J=12\text{ Hz}$ , 1H), 8.74–8.73(d,  $J=6\text{ Hz}$ , 2H), 8.71–8.69(d,  $J=12\text{ Hz}$ , 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)

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

[0220] [실시예 3] 화합물 C-10의 제조

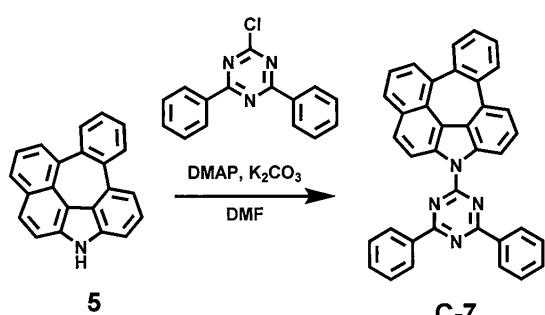


[0221] [0222] 플라스크에 화합물 5 (5.0 g, 17 mmol), 2-(4-브로모나프탈렌-1-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진) (11.28 g, 21 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (625 mg, 0.686 mmol), S-Phos (565 mg, 1 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (4.9 g, 51 mmol) 및 o-자일렌 (100 mL)를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 살레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-10 (3.6 g, 수율: 32%)을 얻었다.

[0223]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>) 9.25–9.24(d,  $J=6\text{Hz}$ , 1H), 8.85–8.83 (sd,  $J=12\text{Hz}$ , 4H), 8.68–8.67 (d,  $J=6\text{Hz}$ , 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,  $J=6\text{Hz}$ , 1H), 7.16–7.15(d,  $J=6\text{Hz}$ , 1H), 6.96–6.94(d,  $J=12\text{Hz}$ , 1H)

화합물	MW	Tg	M.P
C-10	648.7	159.5°C	176°C

[0224] [0225] [실시예 4] 화합물 C-7의 제조



[0226] [0227] [0228] 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, 0.85 mmol), 포타슘 카보네이트 (7.1 g, 51.4 mmol), 및 DMF 85 mL를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류 시켰다. 반응이 끝나면 식힌 후, 메탄올과 물을 넣고 여과하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-7 (4.4 g, 수율: 49%)을 얻었다.

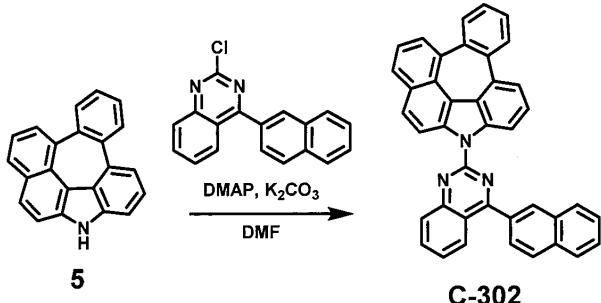
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>) 9.13–9.11(d, J=12Hz, 1H), 8.97–8.95 (d, J=12Hz, 1H), 8.75–8.73 (d, J=12Hz, 4H), 7.83–7.75(m, 5H), 7.64–7.59(m, 6H), 7.54–7.51(m, 3H), 7.48–7.45(t, J=12Hz, 3H), 7.40–7.39 (m, 2H)

[0229]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-7	522.6	105°C	209°C

[0230]

[0231]



[0232]

[0233]

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, 철럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-302 (7.5 g, 수율: 80%)을 얻었다.

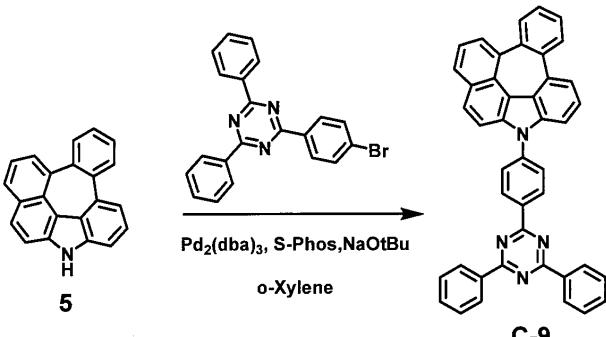
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>) 9.03–9.02 (d, J=6Hz, 1H), 8.88–8.86 (d, J=12Hz, 1H), 8.39 (s, 1H), 8.22–8.21 (d, J=6Hz, 1H), 8.20–8.17 (d, J=18 Hz, 1H), 8.15–8.05 (m, 2H), 8.00–7.98 (t, J=6Hz, 2H), 7.91–7.89 (m, 1H), 7.76–7.72 (m, 5H), 7.63–7.61 (m, 2H), 7.54–7.52 (m, 2H), 7.43–7.36 (m, 4H).

[0234]

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

[0235]

[0236]



[0237]

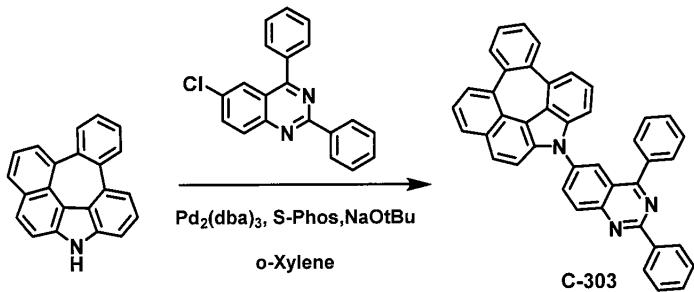
[0238]

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*-부 톡사이드 (4.0 g, 42.9 mmol), 및 o-자일렌 90 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이후 건조시키고, 철럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-9 (6.2 g, 수율: 62%)을 얻었다.

[0239]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, 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)

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

[0240] [실시예 7] 화합물 C-303의 제조



5

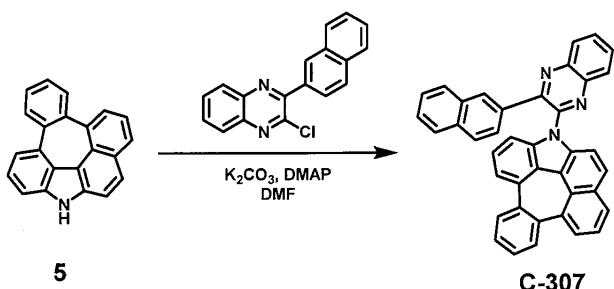
[0241] 플라스크에 화합물 5 (4.3 g, 14.83 mmol), 6-클로로-2,4-디페닐퀴나졸린(4.7 g, 14.83 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.5 g, 0.593 mmol), S-Phos (0.6 g, 1.483 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (3.6 g, 37.07 mmol), 및 o-자일렌 80 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 세레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-303 (1.8 g, 수율: 21%)을 얻었다.

[0242]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, 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)

1H)

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

[0243] [실시예 8] 화합물 C-307의 제조



5

[0244] 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. 이후, 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-307 (2.3 g, 수율: 47%)을 얻었다.

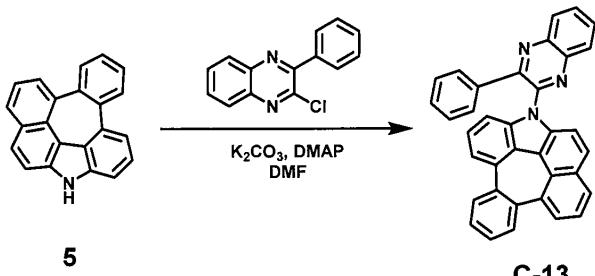
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ) 8.36–8.34 (d, J=6.0Hz, 1H), 8.23 (s, 1H), 8.17–8.16 (d, J=6.0Hz, 1H), 7.90–7.86 (m, 3H), 7.73–7.71 (d, J=12Hz, 1H), 7.68–7.63 (m, 4H), 7.50–7.48(m, 2H), 7.40–7.35 (m, 6H), 7.32–7.24 (m, 2H)

[0249]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-307	545.65	133°C	152°C

[0250]

[0251]



[0252]

[0253] 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 중류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 이 후, 감압 중류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-13 (2.3 g, 수율: 33.8%)을 얻었다.

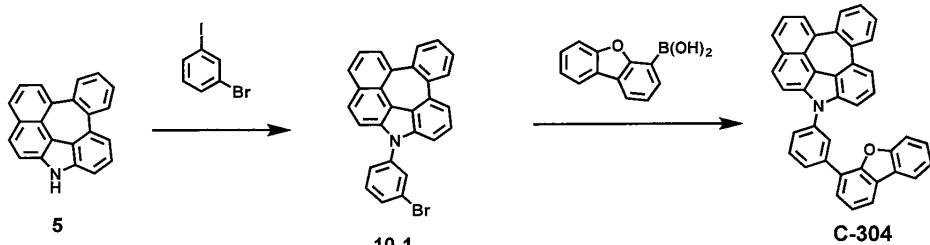
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ) 8.32–8.30 (m, 1H), 8.16–8.15 (m, 1H), 7.89–7.83 (m, 3H), 7.73 (d, J=7.38Hz, 1H), 7.69–7.68 (m, 2H), 7.60–7.54 (m, 2H), 7.50 (d, J=9.00Hz, 1H), 7.42–7.37 (m, 3H), 7.29–7.27 (m, 3H), 7.21–7.15 (m, 4H)

[0254]

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

E02563

### [실시예 10] 화합물 C-304 의 제조



[0257]

### 1) 화합물 10-1의 합성

[0259]

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  $K_3PO_4$  (16.4 g, 77.22 mmol)에 툴루엔 155 mL을 투입한 후 하룻동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤, 생성된 고체를 간접 여과하였다. 고체를  $CHCl_3$ 에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 10-1 (10 g, 수율: 75%)를 얻었다.

[0260]

### 2) 화합물 C-304의 합성

[0261]

화합물 **10-1** (5.7 g, 12.77 mmol),  $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$  (0.73 g, 0.638 mmol), 및  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (3.5 g, 25.54 mmol)에 툴루엔 50 mL, EtOH 13 mL, 정제수 13 mL을 투입한 후 2시간 동안 화류 교반하였다. 밤용 종결 후 실온으로 냉각한 뒤,

생성된 고체를 감압 여과하였다. 고체를 CHCl<sub>3</sub>에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-304 (2.9 g, 수율: 43%)을 얻었다.

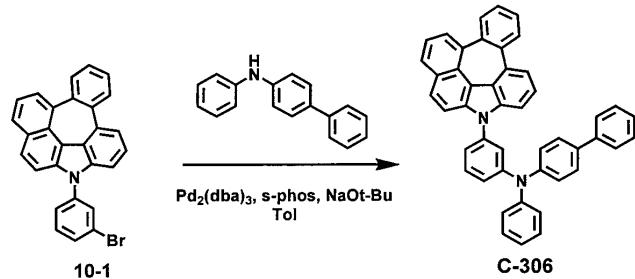
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, DMSO-d6, δ) 8.232-8.206(m, 3H), 8.111-8.098(d, 1H), 7.962-7.946(m, 1H), 7.929-7.903(m, 3H), 7.896-7.882(d, 1H), 7.806-7.802(d, 2H), 7.783-7.759(t, 2H), 7.738-7.723(d, 1H), 7.635-7.620(m, 1H), 7.581-7.548(m, 2H), 7.513-7.440(m, 6H)

[0262]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-304	533.6	119°C	208°C

[0263]

[실시예 11] 화합물 C-306의 제조



[0265]

플라스크에 화합물 10-1 (5.0 g, 11.2 mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민 (3.0 g, 12.3 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.51 g, 0.56 mmol), S-Phos (0.46 g, 1.12 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (2.7 g, 28 mmol), 및 툴루엔 60 mL를 넣은 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 살피아트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-306 (2.3 g, 수율: 34%)을 얻었다.

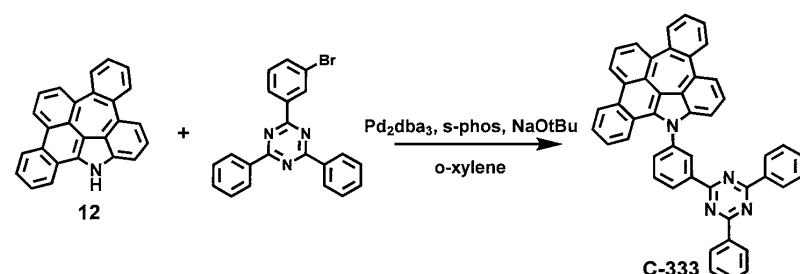
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, DMSO-d6, δ) 7.896-7.880(m, 1H), 7.863-7.850(d, 1H), 7.805-7.790(d, 1H), 7.758-7.745(d, 1H), 7.733-7.720(d, 1H), 7.669-7.650(m, 2H), 7.640-7.627(d, 1H), 7.604-7.566(m, 2H), 7.522-7.507(d, 1H), 7.447-7.384(m, 7H), 7.373-7.347(t, 1H), 7.335-7.311(t, 1H), 7.269-7.237(m, 6H), 7.175-7.156(d, 1H), 7.147-7.122(t, 1H), 7.069-7.062(t, 1H)

[0267]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-306	610.8	114°C	132°C

[0268]

[실시예 12] 화합물 C-333의 제조



[0270]

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 포스피노-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, 12시간 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.

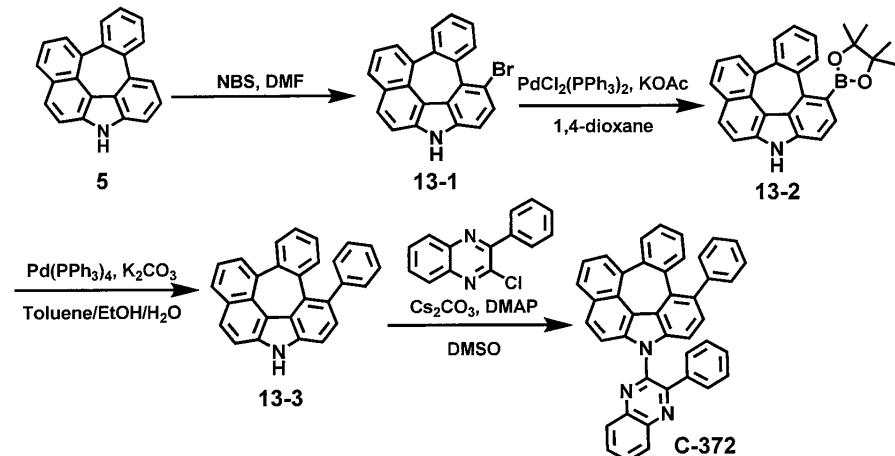
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, DMSO-d6, δ) 9.086–9.072(d, 1H), 8.887–8.882(t, 1H), 8.821–8.807(d, 1H), 8.714–8.699(d, 4H), 8.676–8.663(d, 1H), 8.014–7.988(t, 1H), 7.883–7.833(m, 3H), 7.781–7.768(d, 1H), 7.691–7.665(t, 2H), 7.640–7.575(m, 6H), 7.540–7.485(m, 3H), 7.399–7.343(m, 3H), 6.982–6.968(d, 1H)

[0272]

화합물	MW	M.P.	Tg
C-333	648.77	195°C	165°C

[0273]

[0274] [실시예 13] 화합물 C-372의 제조



[0275]

## 1) 화합물 13-1의 합성

[0276]

플라스크에 화합물 5 (70 g, 240 mmol), N-브로모숙신이미드 (40.6 g, 255 mmol), 및 디메틸포름아마이드 1200 mL를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 0°C에서 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.

[0277]

## 2) 화합물 13-2의 합성

[0278]

플라스크에 화합물 13-1 (47.3 g, 127 mmol), 비스(페나콜라토)디보론 (42 g, 166 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐디클로라이드(II) (4.5 g, 6.4 mmol), 아세트산칼륨 (25 g, 255 mmol), 및 1,4-디옥산 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.

[0279]

## 3) 화합물 13-3의 합성

[0280]

플라스크에 화합물 13-2 (4.5 g, 10.7 mmol), 1-브로모벤젠 (1.9 g, 11.85 mmol), 테트라카이스(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.

[0281]

## 4) 화합물 C-372의 합성

[0282]

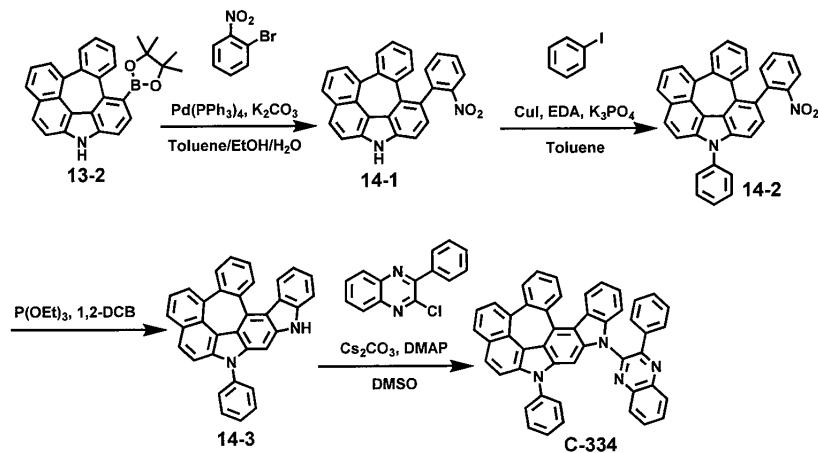
플라스크에 화합물 13-3 (2.2 g, 5.9 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀살린 (1.58 g, 6.57 mmol), 탄산세슘 (3.89

g, 11.96 mmol), 4-디메틸아미노파리딘 (0.36 g, 2.99 mmol), 및 디메틸 일산화황 30 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 100°C에서 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°C	167°C

[0284]

## [실시 예 14] 화합물 C-334의 제조



[0286]

## 1) 화합물 14-1의 합성

[0287]

플라스크에 화합물 13-2 (27 g, 64.7 mmol), 1-브로모-2-나트로벤젠 (14.4 g, 71.2 mmol), 테트라카스(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.

[0288]

## 2) 화합물 14-2의 합성

[0289]

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.

[0290]

## 3) 화합물 14-3의 합성

[0291]

플라스크에 화합물 14-2 (13.1 g, 26.8 mmol), 트리에틸포스파이트 180 mL, 및 1,2-다이클로로벤젠 180 mL를 넣고, 200°C로 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.

[0292]

## 4) 화합물 C-334 의 합성

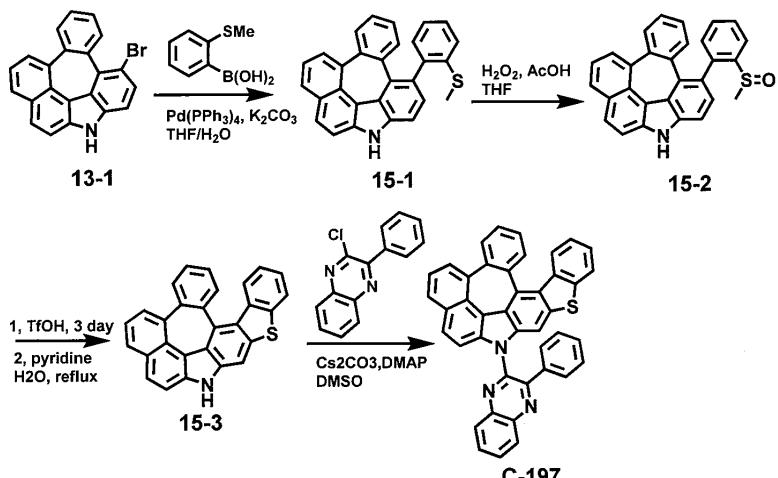
[0293]

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

[0295]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$ ) 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)

화합물	MW	M.P.
C-334	660.78	290°C

### [0297] [실시예 15] 화합물 C-197의 제조



[0298]

#### 1) 화합물 15-1의 합성

[0300]

플라스크에 화합물 13-1 (40 g, 108 mmol), (2-메틸티오페닐)보론산 (25.4 g, 153.5 mmol), 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (6.26 g, 5.40 mmol), 탄산칼륨 (26.3 g, 272.0 mmol), 테트라하이드로푸란 536 mL 및 중류수 134 mL를 넣어 녹인 후 100°C에서 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.

[0301]

#### 2) 화합물 15-2의 합성

[0302]

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.

[0303]

#### 3) 화합물 15-3의 합성

[0304]

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

[0305]

#### 4) 화합물 C-197 의 합성

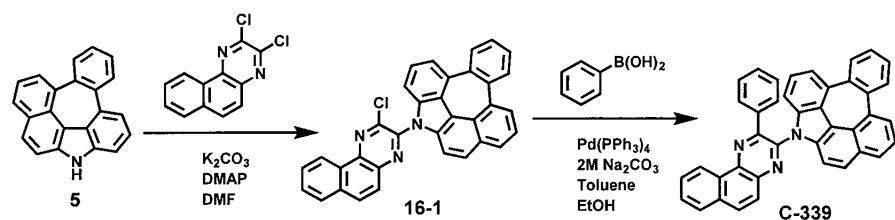
[0306]

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

[0307]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$ ) 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°C	194°C

### [0309] [실시예 16] 화합물 C-339의 제조



#### [0311] 1) 화합물 16-1의 합성

[0312] 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-페리딘아민 (3.3 g, 26.7 mmol), 및 N,N-디메틸포름아미드 270 mL를 첨가한 후 150°C에서 4 시간 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 16-1 (2.2 g, 8%)를 얻었다.

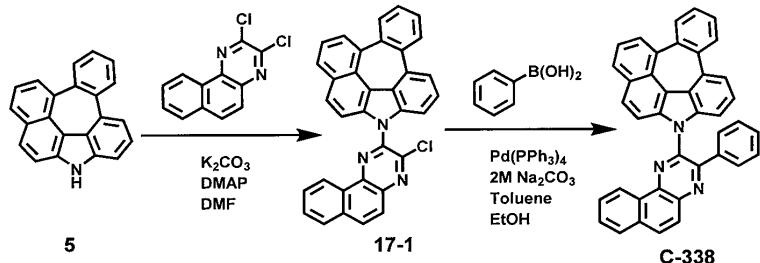
#### [0313] 2) 화합물 C-339의 합성

[0314] 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), 툴루엔 20 mL, 및 에탄올 5 mL를 첨가한 후 130°C에서 3 시간 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-339 (1.8 g, 76%)를 얻었다.

[0315]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$ ) 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°C	148°C

## [0317] [실시예 17] 화합물 C-338의 제조



[0318]

## 1) 화합물 17-1의 합성

[0319]

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-페리딘아민 (3.3 g, 26.7 mmol), 및 N,N-디메틸포름아미드 270 mL를 첨가한 후 150°C에서 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.

[0320]

## 2) 화합물 C-338의 합성

[0321]

반응용기에 화합물 17-1 (2.7 g, 5.4 mmol), 페닐보론산 (1 g, 8.0 mmol), 테트라카이스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (310 mg, 0.3 mmol), 탄산나트륨 (1.4 g, 13.4 mmol), 톨루엔 28 mL, 및 에탄올 7 mL를 첨가한 후 130°C에서 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.

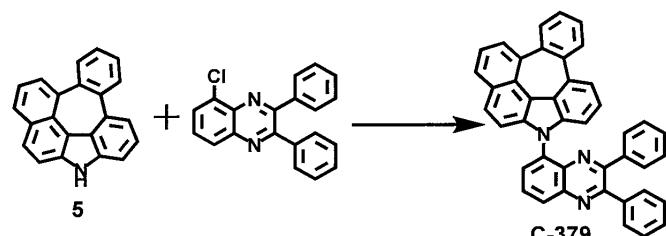
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ) 9.119–9.106(d, 1H), 8.160–8.125(dd, 2H), 8.001–7.988(d, 1H), 7.878–7.862(m, 1H), 7.782–7.755(td, 1H), 7.748–7.726(m, 2H), 7.709–7.685(t, 2H), 7.623–7.594(m, 3H), 7.518–7.503(d, 1H), 7.418–7.371(m, 4H), 7.305–7.271(m, 2H), 7.200–7.182(m, 3H).

[0322]

화합물	MW	M.P.	Tg
C-338	545.65	299°C	149°C

[0323]

## [실시예 18]화합물 C-379의 제조



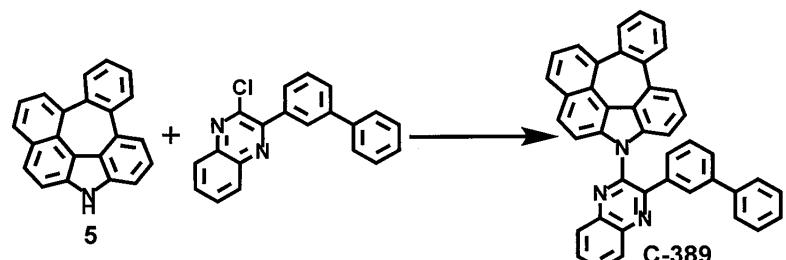
[0324]

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.

[0328]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 8.323–8.307(d, J=7.2Hz, 1H), 7.947–7.935(m, 2H), 7.883–7.867(m, 1H), 7.762–7.749(d, J=7.2Hz, 2H), 7.686–7.673(d, J=7.8Hz, 1H), 7.633–7.603(m, 2H), 7.568–7.556(d, J=7.2Hz, 2H), 7.404–7.337(m, 6H), 7.307–7.281(t, J=7.8Hz, 1H), 7.195–7.281(m, 3H), 7.144–7.110(t, J=7.2Hz, 1H), 7.087–7.074(d, J=7.8Hz, 1H), 7.010–6.990(m, 2H)

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

[0330] [실시예 19] 화합물 C-389의 제조

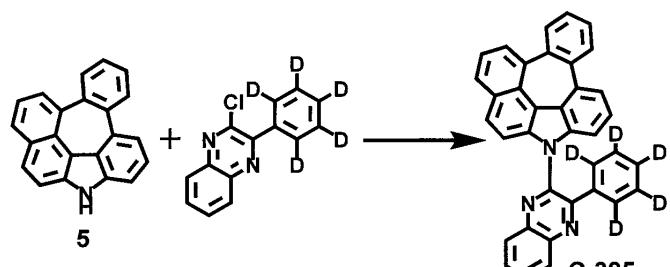


[0331] [0332] 플라스크에 화합물 5 (6.0 g, 21 mmol), 2-([1,1'-바이페닐]-3-일)-3-클로로퀴녹살린 (7.8 g, 25 mmol), 탄산칼륨 (8.5 g, 62 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.126 g, 1 mmol), 디메틸포름아마이드 100 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 중류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설피아이트로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-389 (8.8 g, 수율: 74%)을 얻었다.

[0333]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 8.338–8.325(d, J=7.8Hz, 1H), 8.228–8.212(d, J=8.7Hz, 1H), 7.907–7.877(m, 3H), 7.783–7.758(m, 2H), 7.686–7.683(d, J=7.8Hz, 2H), 7.630–7.590(m, 1H), 7.523–7.508(d, J=9Hz, 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=7.8Hz, 2H), 6.903–6.877(m, 2H)

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

[0335] [실시예 20] 화합물 C-395의 제조

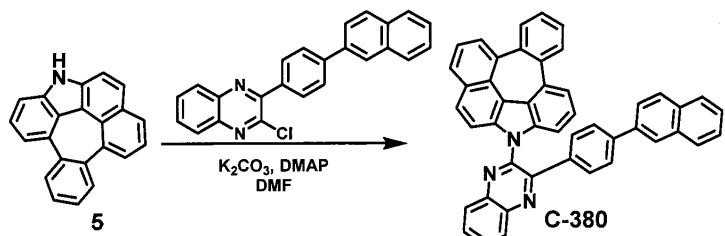


[0336] [0337] 플라스크에 화합물 5 (7.9 g, 27 mmol), 2-클로로-3-(페닐-D5)퀴녹살린 (7.9 g, 33 mmol), 탄산칼륨 (11.24 g, 81 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.166 g, 1 mmol), 및 디메틸포름아마이드 135 mL를 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 중류수를 넣었다. MC로 유기층을 추출하고 마그네슘 설피아이트로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-395 (3.2 g, 수율: 23.7%)을 얻었다.

[0338]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 8.318–8.305(d, J=7.8Hz, 1H), 8.164–8.151(d, J=7.8Hz, 1H), 7.892–7.834(m, 3H), 7.740–7.728(d, J=7.2Hz, 1H), 7.691–7.679(d, J=7.2Hz, 2H), 7.603–7.587(m, 1H), 7.508–7.493(d, J=9Hz, 1H), 7.413–7.370 (m, 3H), 7.291–7.250(m, 2H), 7.212–7.197 (d, J=9Hz, 1H)

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

[0340] [실시예 21] 화합물 C-380의 제조

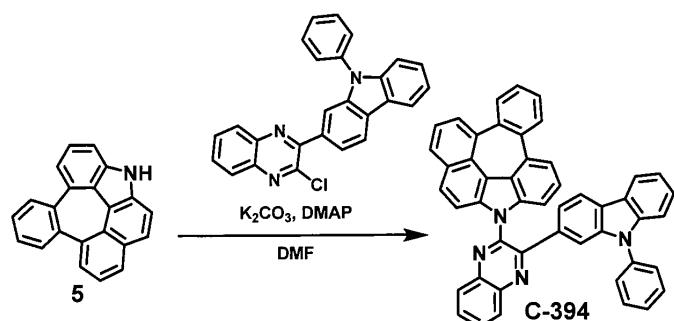


[0341] [0342] 플라스크에 화합물 5 (10 g, 28.82 mmol), 2-클로로-3-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)퀴녹살린 (7.0 g, 24.02 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (1.5 g, 12.01 mmol), 탄산칼륨 (3.3 g, 24.02 mmol), 및 디메틸포름아마이드 (130 mL)를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 칼륨 증류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-380 (8.8 g, 수율: 59%)을 얻었다.

[0343]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 8.33–8.32 (d, J=6.0 Hz, 1H), 8.16–8.15 (d, J=6.0 Hz, 1H), 7.88–7.84 (m, 4H), 7.80–7.77 (m, 3H), 7.74–7.73(d, J= 6.0 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 °C	262.7 °C

[0345] [실시예 22] 화합물 C-394의 제조

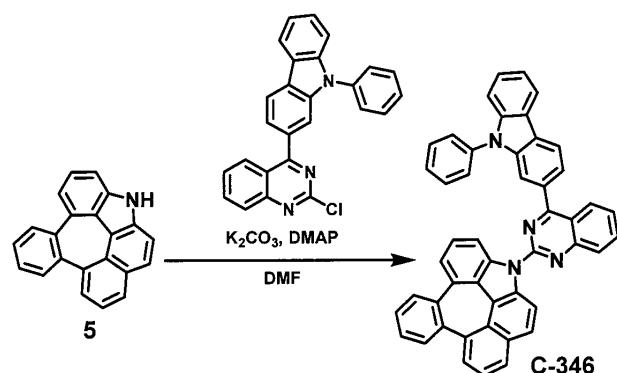


[0346] [0347] 플라스크에 화합물 5 (6 g, 20.59 mmol), 2-(3-클로로퀴녹살린-2-일)-9H-카바졸 (9.1 g, 22.65 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (1.2 g, 10.29 mmol), 탄산칼륨 (2.8 g, 20.59 mmol), 및 디메틸포름아마이드 (100 mL)를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 칼륨 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-394 (9.6 g, 수율: 70%)을 얻었다.

[0348]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 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).

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

[0350] [실시예 23] 화합물 C-346의 제조



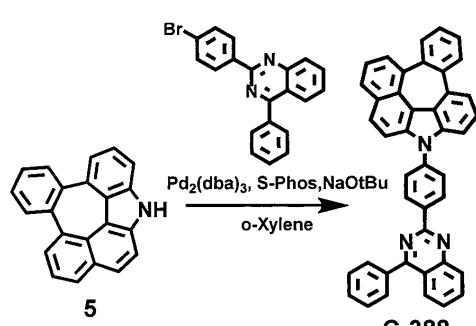
[0351]

[0352] 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)파리딘 (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 충류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 세레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-346 (10 g, 수율: 77%)을 얻었다.

[0353]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 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°C	189.9°C

[0355] [실시예 24] 화합물 C-388의 제조



[0356]

[0357]

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-디사이클로헥실포스파노-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.

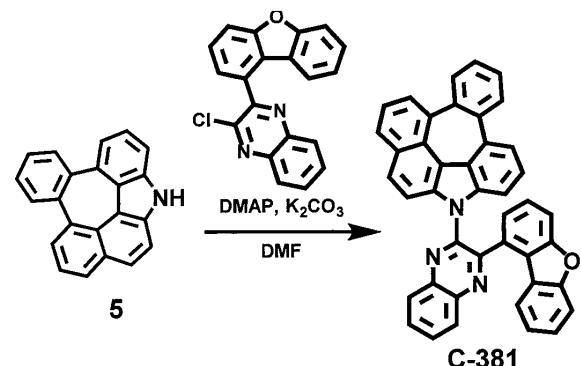
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ) 8.927–8.912 (d, J=7.8Hz, 2H), 8.199–8.160(m, 2H), 7.925–7.910(m, 3H), 7.865–7.855(m, 1H), 7.759–7.672(m, 6H), 7.620–7.587 (m, 5H), 7.540–7.525 (d, J=9Hz, 1H), 7.401–7.375(m, 3H), 7.339–7.328 (m, 2H).

[0358]

화합물	MW	Tg	M.P.
C-388	571.6	133°C	241 °C

[0359]

[실시예 25] 화합물 C-381의 제조



[0361]

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)파리딘 (0.1 g, 0.9 mmol), 탄산칼륨 (8.1 g, 58.5 mmol), 및 다이메틸포름아마이드 99 mL를 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.

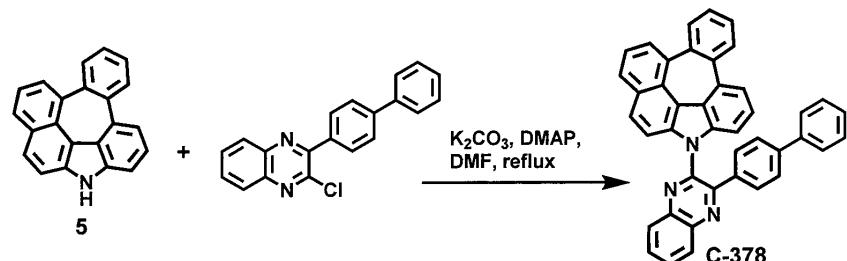
<sup>1</sup>H NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ) 8.324–8.271(m, 2H), 7.962–7.942 (m, 2H), 7.867–7.855(d, J=7.2Hz, 1H), 7.821–7.805(m, 1H), 7.705–7.693(d, J=7.2Hz, 1H), 7.655–7.595(m, 3H), 7.567–7.537 (m, 2H), 7.394–7.272(m, 8H), 7.124–7.155 (m, 1H), 6.984–6.958(t, J=7.2Hz, 1H), 6.830–6.817 (d, J=7.8Hz, 1H)

[0363]

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

[0364]

[실시예 26] 화합물 C-378의 제조



[0366]

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 환

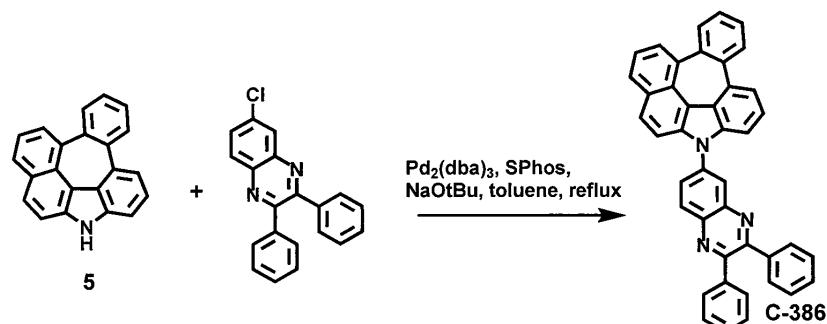
류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-378 (1.4 g, 수율: 19 %)을 얻었다.

[0368]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 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)

[0369]

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

[0370] [실시예 27] 화합물 C-386의 제조

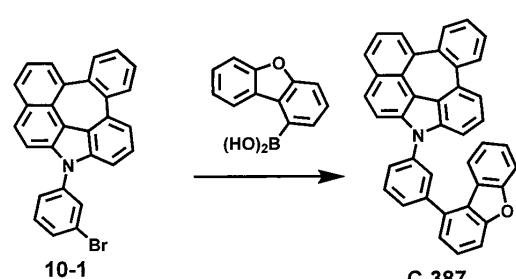


[0371] [0372] 플라스크에 화합물 5 (5.1 g, 17 mmol), 6-클로로-2,3-디페닐퀴녹살린 (5.0 g, 16 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 (0) (578 mg, 0.631 mmol), 2-디사이클로헥실포스피노-2'-6'-디메톡시바이페닐 (648 mg, 2 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (3.8 g, 39 mmol), 및 톨루엔 100 mL를 넣어 녹인 후 16시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압 증류후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 이 후 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-386 (7.6 g, 수율: 84%)을 얻었다.

[0373]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>,  $\delta$ ) 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°C	295°C

[0375] [실시예 28] 화합물 C-387 의 제조



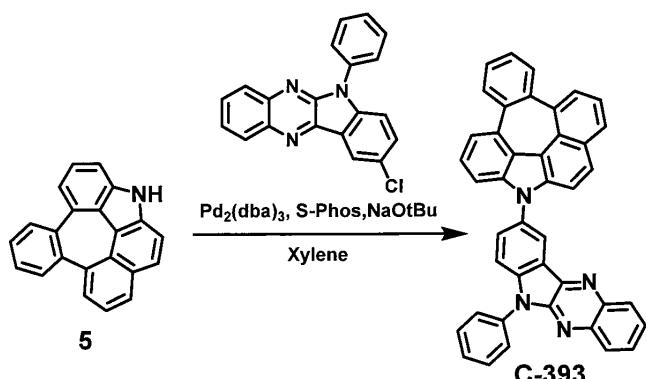
[0376] [0377] 화합물 10-1 (6.6 g, 14.78 mmol), 디벤조[b,d]퓨란-1-일-보론산 (3.4 g, 16.24 mmol), 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.85 g, 0.739 mmol), 및 탄산칼륨 (4 g, 29.57 mmol)에 톨루엔 60 mL, 에탄올 15 mL, 및 정제수 15 mL 을 투입한 후 하룻동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤 생성된 고체를 감압여

과하였다. 고체를  $\text{CHCl}_3$ 에 녹여 MC/Hex으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-387 (3.5 g, 수율: 45 %)를 얻었다.

[0378]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, DMSO,  $\delta$ ) 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°C	117°C

[0379] [실시예 29] 화합물 C-393의 제조



[0381]

[0382] 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(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.5 g, 0.606 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 (0.6 g, 1.516 mmol), 나트륨-*tert*-부록사이드 (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.

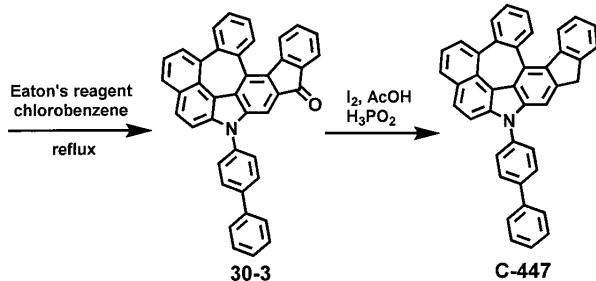
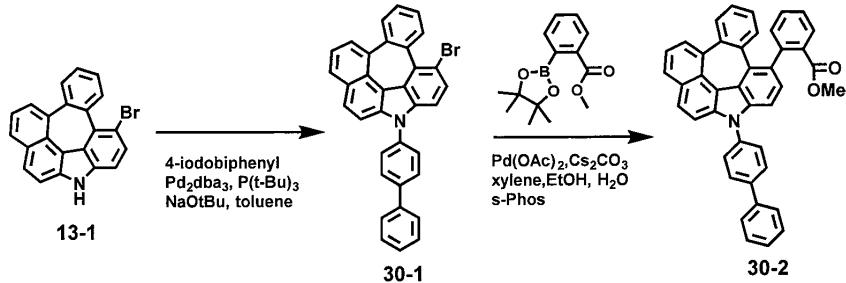
[0383]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$ ) 8.74 (s, 1H), 8.33–8.32 (d,  $J=6.0\text{Hz}$ , 1H), 8.15–8.14 (d,  $J=6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.91–7.90 (m, 1H), 7.84–7.73 (m, 2H), 7.80–7.78 (m, 5H), 7.77–7.69 (m, 5H), 7.64–7.63 (m, 1H), 7.60–7.59 (m, 1H), 7.50–7.49 (d,  $J=6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.43–7.41 (m, 3H), 7.36–7.34 (t,  $J=6.0\text{ Hz}$ , 1H), 7.28–7.27 (m, 1H)

[0384] [0384] [0384]

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

[0385]

## [실시예 30] 화합물 C-447의 제조



[0386]

## 1) 화합물 30-1의 합성

[0387]

플라스크에 화합물 13-1 (8.0 g, 21.6 mmol), 4-요오도바이페닐 (12.1 g, 43.2 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (1.0 g, 1.08 mmol), 트리-*tert*-부틸포스핀 (0.87 mL, 2.16 mmol 50% 톨루엔용액), 소다음 *tert*-부록사이드 (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.

[0388]

## 2) 화합물 30-2의 합성

[0389]

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)<sub>2</sub>) (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.

[0390]

## 3) 화합물 30-3 의 합성

[0391]

플라스크에 화합물 30-2 (2.2 g, 3.8 mmol), 이튼 시약(Eaton's reagent) 2 mL 및 염화벤젠 13 mL를 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.

[0392]

## 4) 화합물 C-447의 합성

[0393]

플라스크에 요오드 (244 mg, 0.96 mmol), 하이포아인산 (0.48 mL, 4.4 mmol, 50% 수용액) 및 아세트산 14 mL를 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.

[0395]  $^1\text{H}$  NMR (600MHz, CDCl<sub>3</sub>, 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).

#### [0396] [비교예 1] 호스트로서 종래의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제조

[0397] 본원에 따르지 않는, 종래의 화합물을 호스트 재료로 사용한 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED 용 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-1을 넣고 챔버 내의 진공도가  $10^{-7}$  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-2를 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-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-3를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 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 CBP를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-39를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달 재료로서 화합물 ETL-1:EIL-1을 50:50의 중량비로 35 nm 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 화합물 EIL-1을 상기 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.

#### [0398] [소자 제조 예 1 내지 5] 본원에 따른 복수 종의 호스트 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제조

[0399] 소자 제조 예 1 내지 5에서는, 발광층을 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 각각 하기 표 1에 기재된 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 넣고, 또 다른 셀에는 D-39를 넣은 후, 두 호스트 물질을 1:1의 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착한 것 외에는 비교 예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0400] 이상과 같이 제조된 비교 예 1 및 소자 제조 예 1 내지 5의 유기 전계 발광 소자의 5,000 nit 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, 및 빛의 세기가 100%에서 98%로 떨어지는 데까지 걸리는 시간(수명; T98)을 하기 표 1에 나타내었다.

[0401]

[표 1]

	제 1 호스트	제 2 호스트	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	수명 (T98, hr)
비교예 1		CBP	11.6	9.3	0.07
소자 제조예 1	C-387	C-8	4.1	25.8	358.6
소자 제조예 2	C-306	C-8	3.9	25.1	282.1
소자 제조예 3	C-449	C-8	4.4	25.5	428.3
소자 제조예 4	C-448	C-8	4.0	24.5	168.9
소자 제조예 5	C-7	C-8	3.8	23.4	265.3

[0402]

## [소자 제조예 6] 본원에 따른 복수 종의 호스트 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제조

[0404]

소자 제조예 6에서는, 제2 정공 전달층 재료로서 화합물 HT-3 대신에 화합물 HT-2를 사용한 것과 발광층을 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 각각의 제1 호스트 화합물(C-339) 및 제2 호스트 화합물(C-338)을 넣고, 또 다른 셀에는 D-39를 넣은 후, 두 호스트 물질을 1:1의 속도로 중발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 중발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착한 것 외에는 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0405]

이상과 같이 제조된 소자 제조예 6의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nit 휘도 기준에서 구동 전압은 2.8 V, 발광 효율은 29.0 cd/A를 나타내었고, 5,000 nit 휘도 기준 빛의 세기가 100%에서 98%로 떨어지는 데까지 걸린 시간은 169.8시간이었다.

[0406]

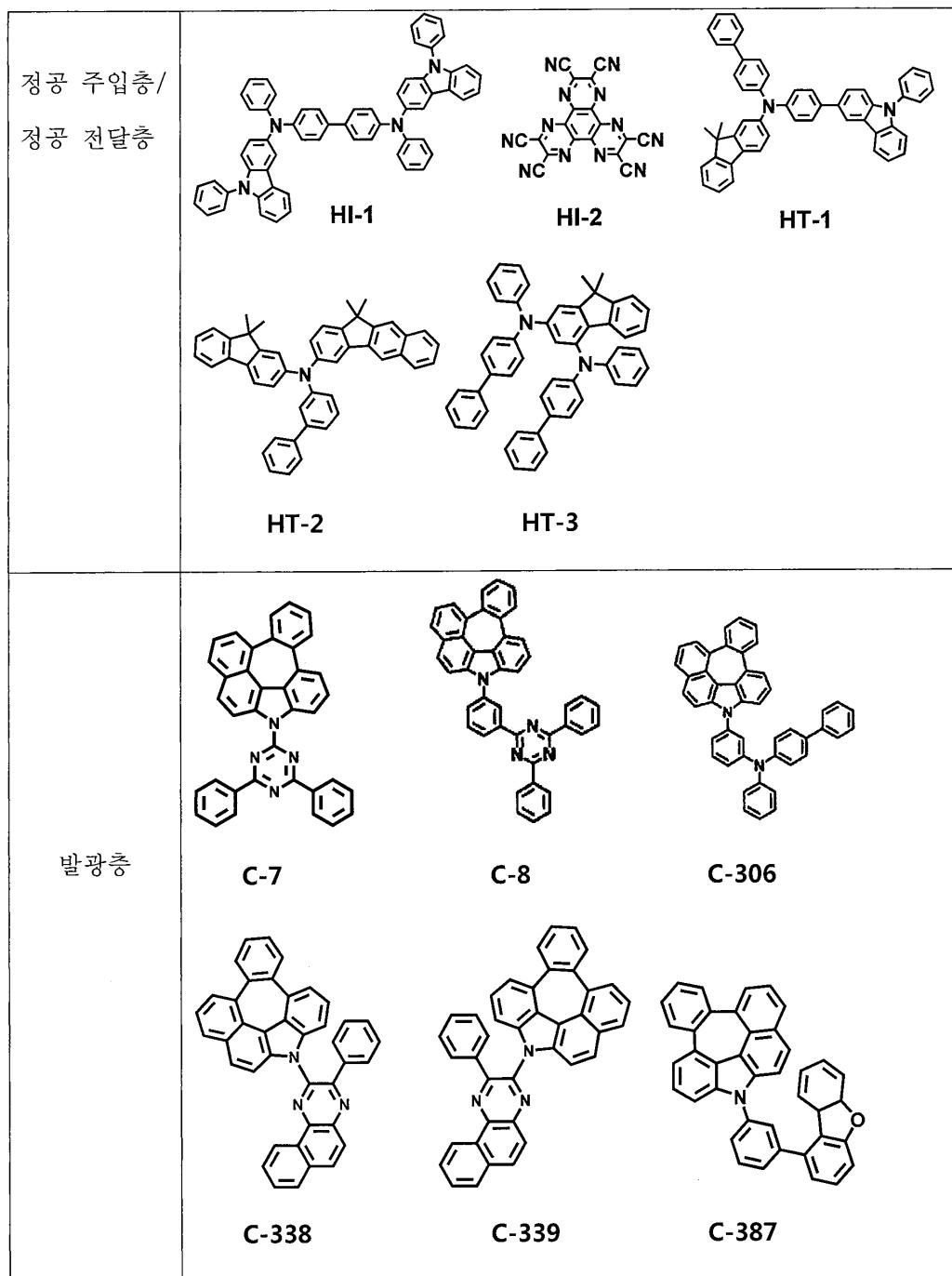
상기 표 1 및 소자 제조예 6으로부터, 본원의 복수 종의 호스트 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자는, 종래의 유기 전계 발광 화합물 1종을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비하여 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/ 또는 개선된 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0407]

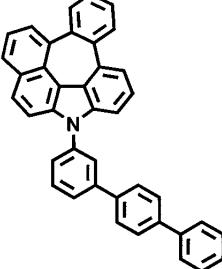
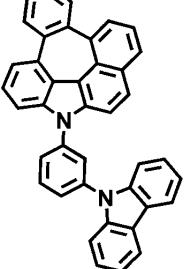
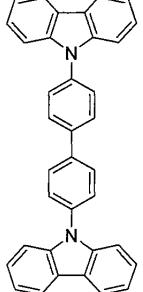
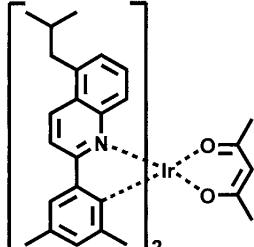
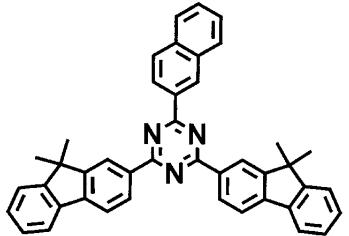
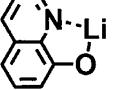
상기 소자 실시예 및 비교예에 사용된 화합물을 하기 표 2에 나타내었다.

[0408]

[표 2]



[0409]

			
	C-448	C-449	CBP
 <p>D-39</p>			
전자 전달층/ 전자 주입층			

[0410]

专利名称(译)	多种主体材料和包括该主体材料的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020200004253A</a>	公开(公告)日	2020-01-13
申请号	KR1020190078151	申请日	2019-06-28
[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	조상희 이효정 김빛나리 엄지원 양정은		
发明人	조상희 이효정 김빛나리 엄지원 양정은		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50 H01L51/52		
CPC分类号	H01L51/0071 H01L51/5024 H01L51/52		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180077056 2018-07-03 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

## 摘要(译)

本发明的应用涉及多种类型的主体材料和包括该主体材料的有机电致发光元件，其包括包含化学式1表示的化合物的第一主体材料和包含化学式1表示的化合物的第二主体材料，其中第一主体化合物和第二主体化合物不同。通过包含包含特定化合物组合的多种类型的主体材料，可以制造具有良好的热稳定性，低的驱动电压，高的发光效率和/或改善的寿命特性的有机电致发光元件。

