

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014 년 1 월 16 일 (16.01.2014)



(10) 국제공개번호
WO 2014/010810 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2013/001819
- (22) 국제출원일: 2013 년 3 월 6 일 (06.03.2013)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2012-0074723 2012 년 7 월 9 일 (09.07.2012) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 을지로 6 가 18-12 번지,
Seoul (KR).
- (72) 발명자: 배형찬 (BAE, Hyung Chan); 448-132 경기도 용인시 수지구 상현 2 동 현대성우 3 차 A 285 동 304 호, Gyeonggi-do (KR). 백영미 (BEAK, Young Mi); 448-737 경기도 용인시 수지구 성북동 대우푸르지오 105 동 1104 호, Gyeonggi-do (KR). 김태형 (KIM, Tae Hyung); 448-130 경기도 용인시 수지구 상현동 만현마을 현대아이파크 501 동 703 호, Gyeonggi-do (KR). 박호철 (PARK, Ho Cheol); 442-150 경기도 수원시 팔달구 화서동 블루핑푸른숲 A 108 동 1104 호, Gyeonggi-do (KR). 이창준 (LEE, Chang Jun); 425-022 경기도 안산시 단원구 고잔 2 동 주공아파트 5 단지 535-404, Gyeonggi-do (KR). 신진용 (SHIN, Jin Young); 448-130 경기도 용인시 수지구 상현동 서원마을 현대홈타운 A 206 동 503 호, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 특허법인 한벳 (HANBEOT PATENT LAW FIRM); 120-013 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 15 층, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: NOVEL COMPOUND AND ELECTROLUMINESCENT DEVICE INCLUDING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to an excellent and novel benzimidazole-based compound having hole injection and transport capability, light-emitting capability, etc., and to an electroluminescent device including same in at least one organic layer so as to have improved characteristics in terms of light-emitting efficiency, driving voltage, service life, etc.

(57) 요약서: 본 발명은 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규의 벤즈이미다졸계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2014/010810 A1

명세서

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

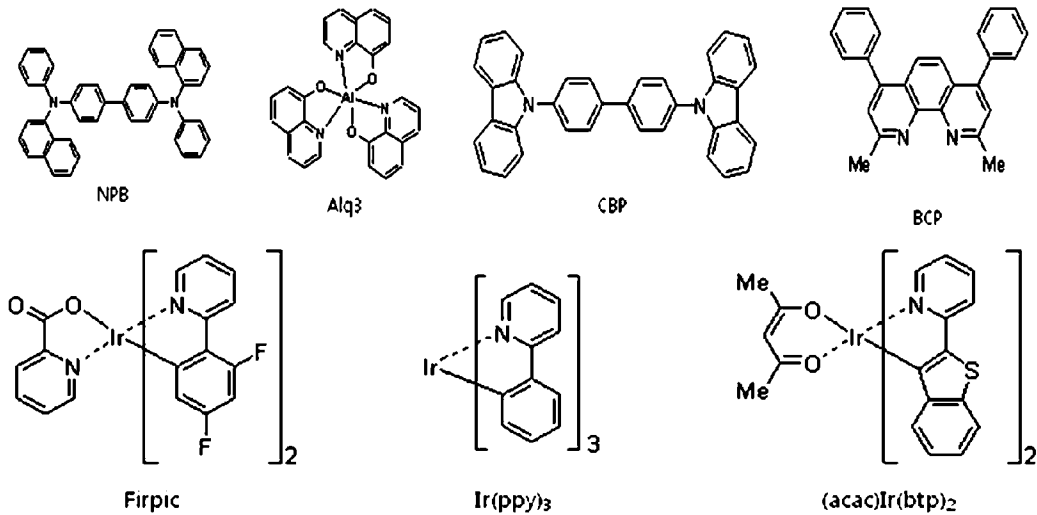
- [1] 본 발명은 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규 화합물 및 상기 화합물을 유기물층의 재료로서 포함하여 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구가 이어져 오다가, 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시 되었다. 이후, 유기 EL 소자의 효율 및 수명을 향상시키기 위하여, 소자 내 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 또한 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어져 왔다.
- [3] 유기 EL 소자의 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥 상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 유기 EL 소자의 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질로 구분될 수 있다. 그밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해서도 관심이 집중되고 있다.
- [5] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로 사용되는 물질로는, 하기 화학식으로 표시되는 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 물질로는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 물질 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 있고, 이들은 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다.

현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[6]



[7] 그러나, 종래 발광 물질들은 발광 특성 측면에서 양호하나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 우수한 성능을 가지는 발광 물질의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

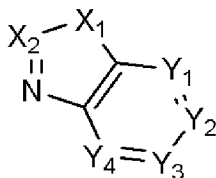
[8] 본 발명은 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 모두 우수하여 발광층 재료, 정공 수송층 재료, 정공 주입층 재료로 사용될 수 있는 신규 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[9] 또, 본 발명은 상기 신규 화합물을 포함하여 구동전압이 낮고, 발광 효율이 높으며, 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[10] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[11] 화학식 1



[12] 상기 화학식 1에서,

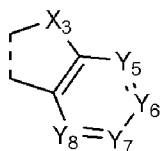
[13] X₁은 NR₁, O, S, Se, SiR₂R₃, 및 CR₄R₅로 이루어진 군에서 선택되고;

[14] X₂는 N 또는 CR₆이며;

[15] Y₁ 내지 Y₄은 각각 독립적으로 N 또는 CR₇이고, 이때 복수개의 CR₇은 서로

동일하거나 상이하며,

- [16] 단, Y_1 내지 Y_4 중에서 적어도 하나는 CR_7 이고, 이는 인접하는 기와 축합하여 하기 화학식 2로 표현된 축합고리를 형성하며;
- [17] R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 축합고리를 형성하는 기이고,
- [18] 이때 R_1 내지 R_7 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보레인지, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며;
- [19] 화학식 2



- [20] 상기 화학식 2에서,
- [21] 점선은 화학식 1의 화합물과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며;
- [22] X_3 는 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 이루어진 군에서 선택되며;
- [23] Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된

$C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

- [24] 이때 상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보레인지, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며;
- [25] Y_5 내지 Y_8 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_8 이고, 이때 복수개의 CR_8 은 서로 동일하거나 상이하며;
- [26] R_8 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 축합 고리를 형성하는 기이고,
- [27] 이때 R_8 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보레인지, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [28] 또한, 본 발명은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 EL 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중

적어도 하나는 전술한 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

- [29] 상기 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직하게는 발광층이다. 특히, 상기 화합물이 발광층에 포함될 경우, 상기 화합물은 인광 호스트 재료로 사용된다.

발명의 효과

- [30] 본 발명에 따른 화합물은 내열성, 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료 또는 발광층 재료로 사용될 수 있다.
- [31] 또한, 본 발명에 따른 화합물을 정공 주입층, 정공 수송층 및/또는 발광층에 포함하는 유기 전계 발광 소자는 발광성능, 구동전압, 수명, 효율 등의 측면에서 크게 향상될 수 있고, 나아가 풀 칼라 디스플레이 패널 등에 효과적으로 적용될 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [32] 이하, 본 발명에 대하여 설명한다.
- [33] 본 발명에 따른 신규 화합물은 인돌계 모이어티(indole moiety), 인다졸계 모이어티(indazole moiety) 또는 벤즈이미다졸계 모이어티(benzimidazole moiety) 등에, 인돌계 모이어티 등이 융합(fused)되어 기본 골격을 이루며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 결합되어 있는 화합물로서, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다. 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 EL 소자용 재료 [예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하 CBP로 표시함)] 보다 높은 분자량을 가져 열적 안정성이 높을 뿐만 아니라, 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자에 포함될 경우, 소자의 구동 전압, 효율 등이 향상될 수 있다.
- [34] 유기 전계 발광 소자에 있어, 높은 발광 효율을 갖기 위해서는 도펀트 분자보다 큰 에너지 레벨을 가져야 하는데, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 인돌 모이어티, 인다졸 모이어티 또는 벤즈이미다졸 모이어티 등과 인돌 모이어티 등이 융합(fused)되어 이루어진 기본 골격에 알킬기, 아릴기, 헤테로 알릴기 등의 다양한 치환체가 연결되어 있고, 또 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리, 바람직하게는 헤테로방향족 고리가 축합되어 있음으로써, 에너지 레벨이 조절되어 넓은 밴드갭 (sky blue ~ red)을 가질 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물은 발광 과정에서 에너지 손실을 최소화할 수 있어, 발광 효율을 개선시키는 효과를 발휘할 수 있다. 나아가, 상기 화합물의 이러한 특성은 소자의 인광 특성을 개선시킬 수 있을 뿐만 아니라, 정공 주입/수송 능력, 발광효율, 구동전압, 수명 특성 등을 개선시킬 수 있다. 또한, 도입되는 치환체의 종류에 따라 발광층뿐만 아니라 정공 수송층, 전자 수송층 등에 응용될 수 있다. 특히, 상기 화학식 1의 화합물은 인돌계 모이어티로 인해 종래 CBP에 비해 발광

호스트 재료로서의 우수한 특성을 나타낼 수 있다.

- [35] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 인돌계 모이어티, 인다졸계 모이어티 또는 벤즈이미다졸계 모이어티와 인돌계 모이어티 등이 융합(fused)되어 이루어진 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상되고, 이로 인해 종래 CBP보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 따라서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 내구성 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있다.
- [36] 아울러, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 정공 주입/수송층, 청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료로 채택할 경우, 종래 CBP 대비 효율 및 수명 면에서 월등히 우수한 효과를 발휘할 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 성능 개선 및 수명 향상에 크게 기여할 수 있으며, 나아가 유기 전계 발광 소자의 수명 향상은 풀 칼라 유기 발광 패널의 성능을 극대화시킬 수 있다.
- [37] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, X_1 은 NR_1 , O, S, Se, SiR_2R_3 , 및 CR_4R_5 에서 선택되고, 바람직하게는 X_1 은 NR_1 일 수 있다.
- [38] 상기 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.
- [39] 이때, 상기 R_1 내지 R_5 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보레인지, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [40] 특히, 상기 R_1 내지 R_4 는 밴드갭(band-gap) 및 열적 안정성을 고려하여, 각각 독립적으로 수소, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기(예: 페닐, 나프틸, 비스페닐), 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기(예: 피리딘)인 것이 더 바람직하다.
- [41] 또, 상기 X_2 는 N 또는 CR_6 에서 선택되고, 상기 R_6 는 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.
- [42] 이때, 상기 R_6 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1

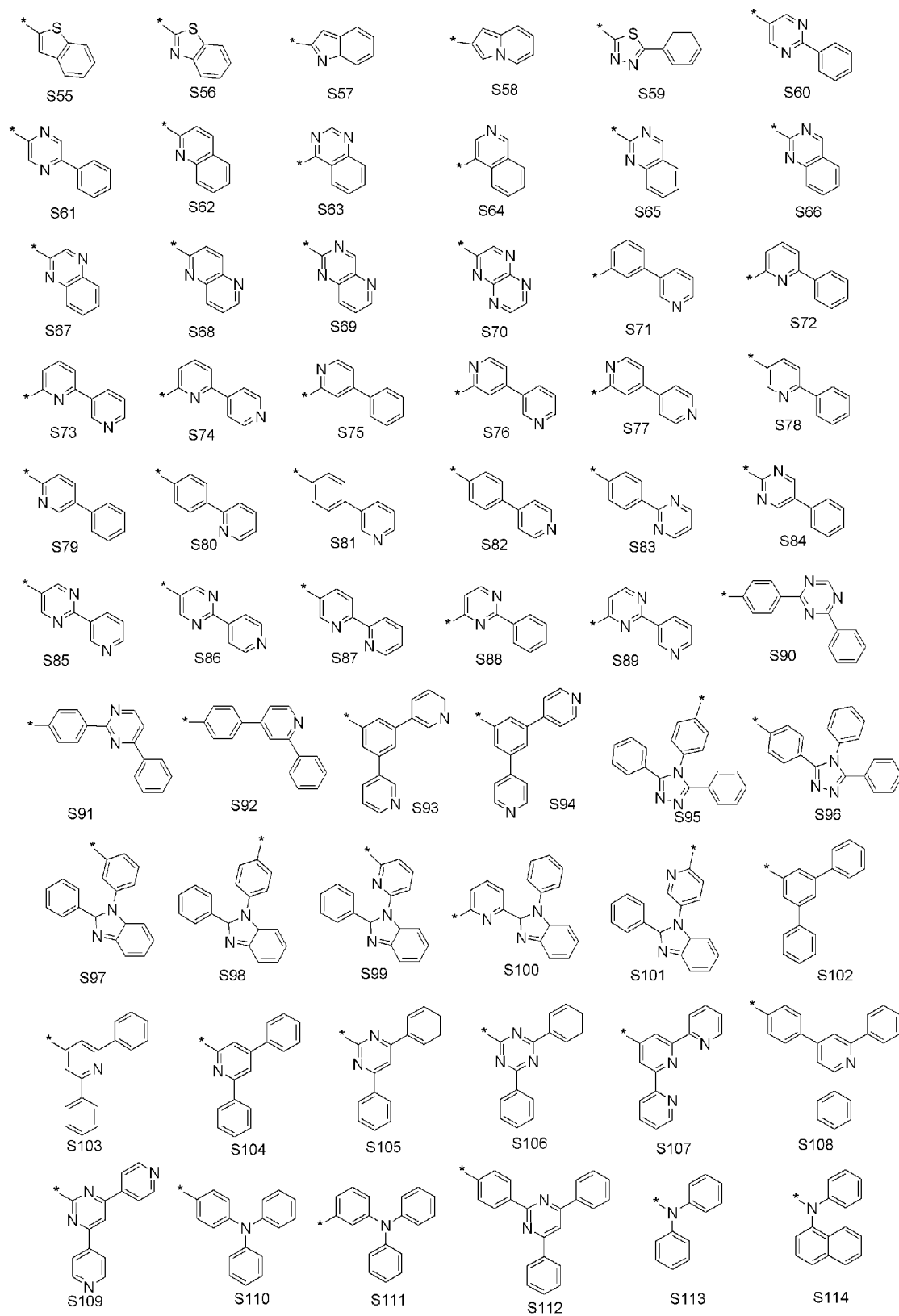
$\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보레인기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

- [43] 또, 상기 화학식 1에서, 상기 Y_1 내지 Y_4 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이고, 이때 복수개의 CR_7 은 서로 동일하거나 상이하다.
- [44] 다만, Y_1 내지 Y_4 중에서 적어도 하나가 CR_7 이고, 이는 인접한 기와 축합하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성한다. 바람직하게는 Y_1 내지 Y_4 이 모두 CR_7 일 수 있으며, 이들 중에서 적어도 하나는 인접한 기와 축합하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성한다. 예를 들어, Y_1 내지 Y_4 중에서 Y_1 이 CR_7 이고, 상기 Y_1 은 Y_2 와 축합하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성할 수 있다. 또는, Y_1 내지 Y_4 중에서 Y_1 및 Y_3 가 각각 CR_7 이고, 상기 Y_1 은 Y_2 와, 상기 Y_3 는 Y_4 와 각각 축합하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성할 수 있다.
- [45] 상기 R_7 은 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 기와 축합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있는 것이 바람직하다.
- [46] 이때, 상기 R_7 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [47] 상기 화학식 2로 표시되는 축합 고리에 있어서, X_3 는 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 X_3 가 $N(Ar_1)$ 일 수 있다.
- [48] 상기 Ar_1 내지 Ar_5 는 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.
- [49] 이때, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의

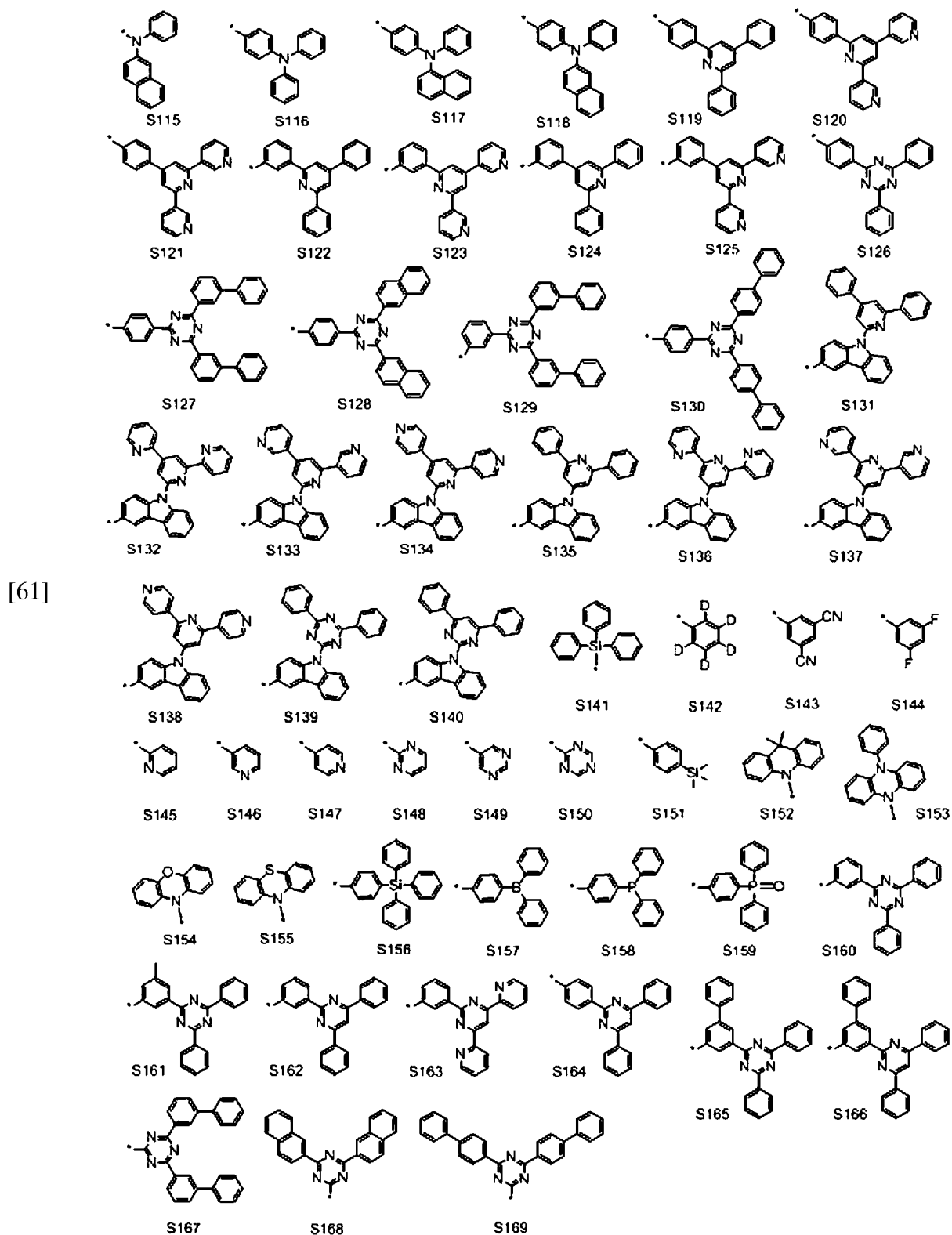
아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

- [50] 바람직하게는, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 것일 수 있다.
- [51] 이때, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [52] 또, 상기 화학식 2에서, 상기 Y_5 내지 Y_8 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_8 이고, 바람직하게는 Y_5 내지 Y_8 모두가 CR_8 일 수 있다. 이때, 복수개의 CR_8 은 서로 동일하거나 상이하다.
- [53] 상기 R_8 은 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 기와 축합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있는 것이 바람직하다.
- [54] 이때, 상기 R_8 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [55] 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물에서, 상기 R_1 내지 R_8 및 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 및 하기 치환기 S1 내지 S169로 이루어진 군에서 선택될 수 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [56]



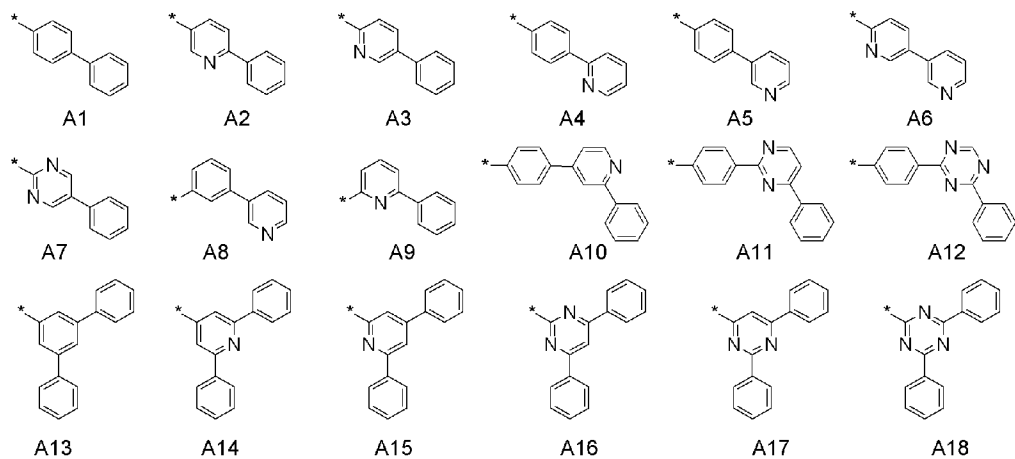


[60]

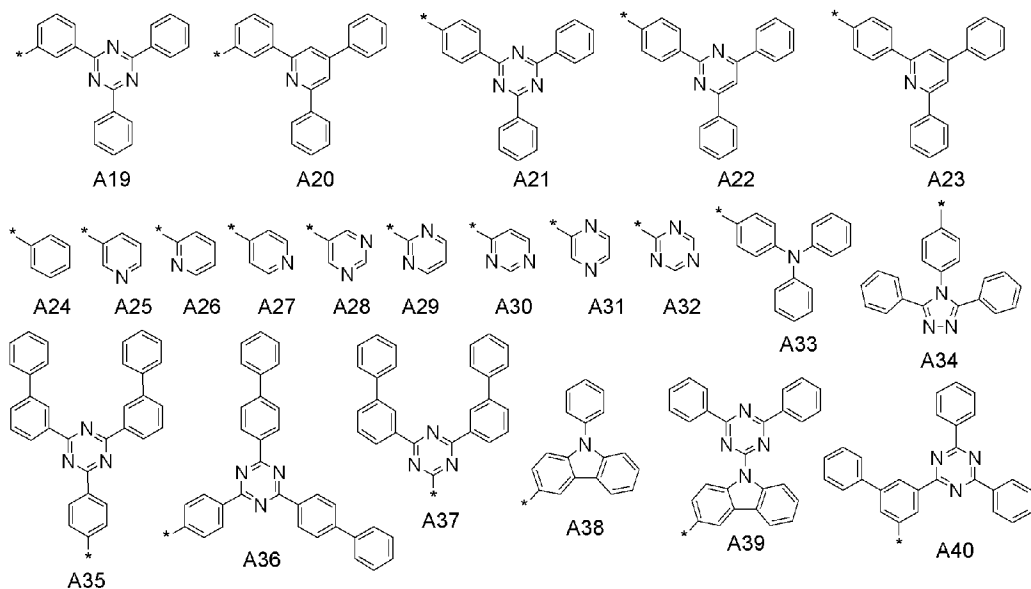


[62] 바람직하게는, 상기 R₁ 내지 R₈, 및 Ar₁ 내지 Ar₅가 각각 독립적으로 수소, 및 하기 치환기 A1 내지 A40으로 이루어진 군에서 선택될 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[63]

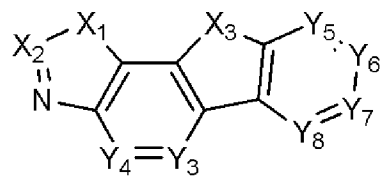


[64]

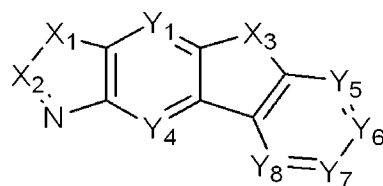


[65] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 3 내지 12로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

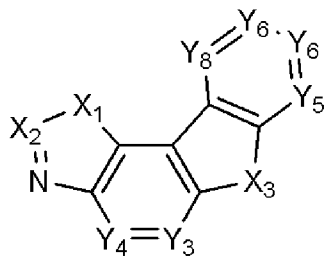
[66] 화학식 3



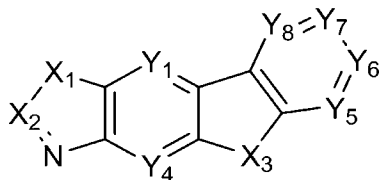
[67] 화학식 4



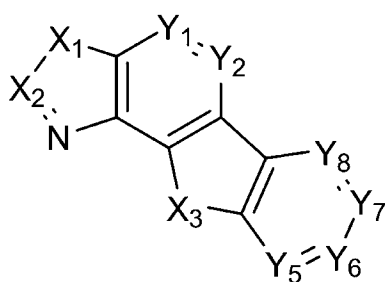
[68] 화학식 5



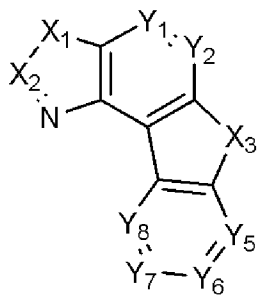
[69] 화학식 6



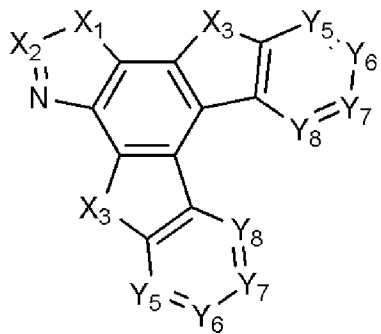
[70] 화학식 7



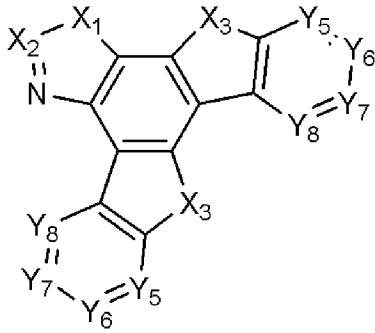
[71] 화학식 8



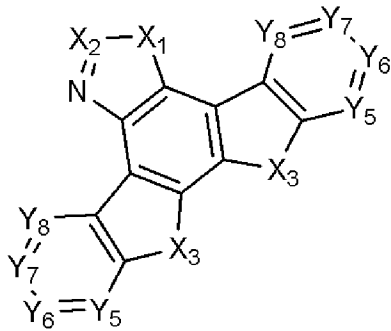
[72] 화학식 9



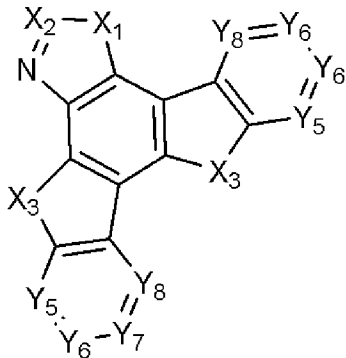
[73] 화학식 10



[74] 화학식 11



[75] 화학식 12



[76] 상기 화학식 3 내지 12에서,

[77] X_1 내지 X_3 는 각각 독립적으로 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고, 이때 복수개의 X_3 는 서로 동일하거나 상이하며;

[78] Y_1 내지 Y_4 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이고, 이때 복수개의 CR_7 은 서로 동일하거나 상이하며,

[79] R_7 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고;

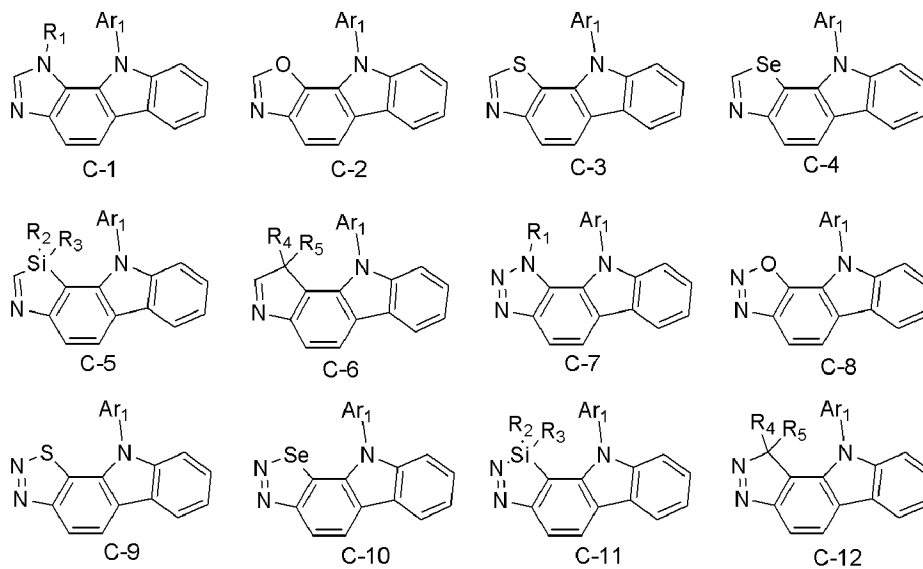
[80] Y_5 내지 Y_8 은 각각 독립적으로 화학식 1에서 정의한 바와 동일하며,

[81] 이때 복수개의 Y_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 복수개의 Y_6 은 서로 동일하거나 상이하며, 복수개의 Y_7 은 서로 동일하거나 상이하고, 복수개의 Y_8 은 서로 동일하거나 상이하다.

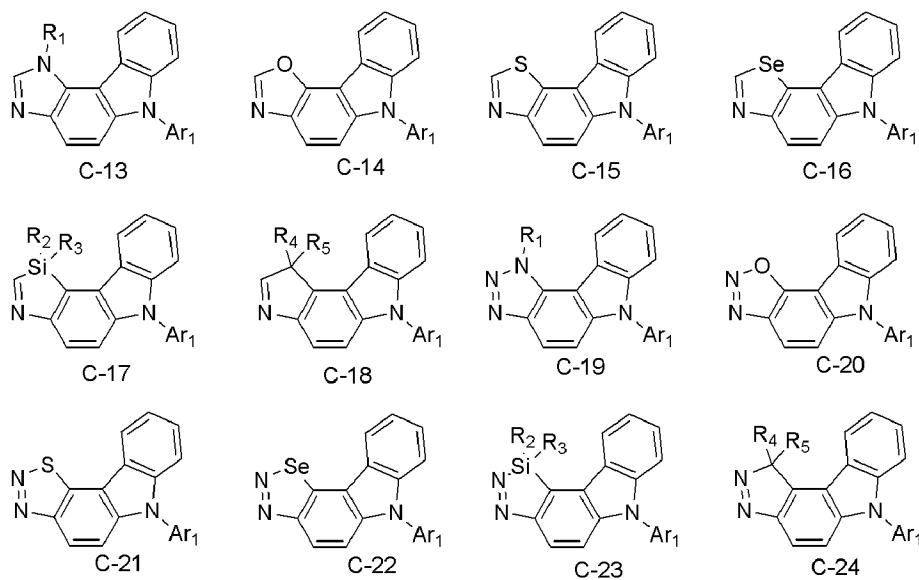
[82] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 구체적인 예로는 하기 화학식 C-1 내지 C-192로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다. 하기 화학식 C-1 내지 C-192에서, R_1 내지 R_5 , 및 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 화학식 1에서

정의한 바와 동일하고, 이때 복수개의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이하다.

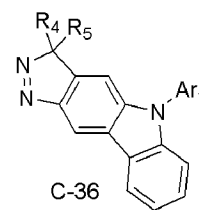
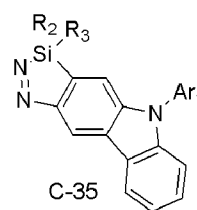
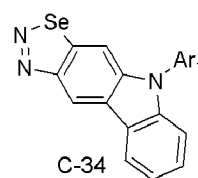
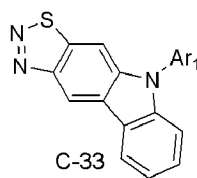
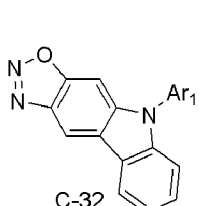
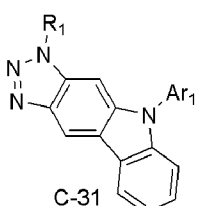
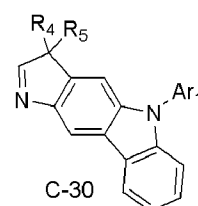
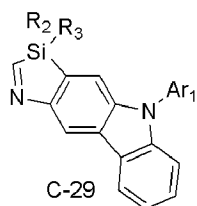
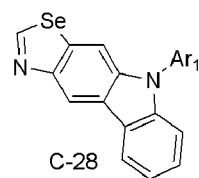
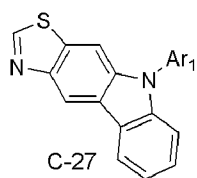
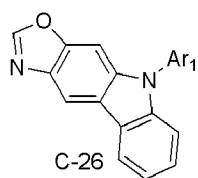
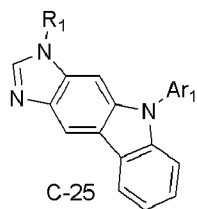
[83]



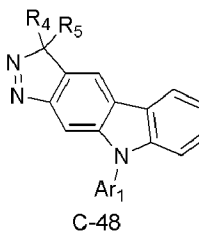
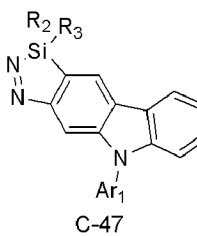
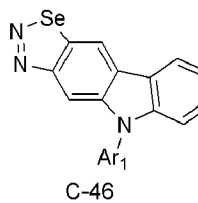
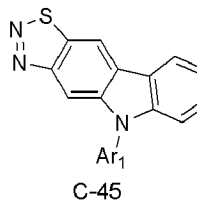
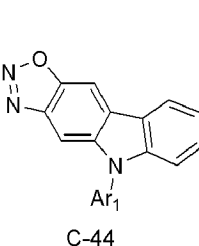
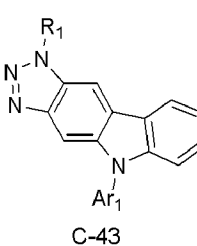
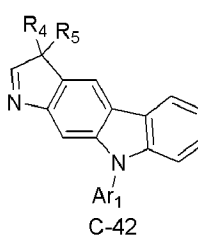
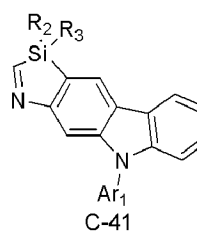
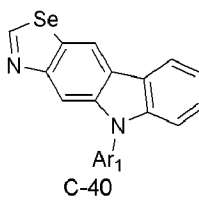
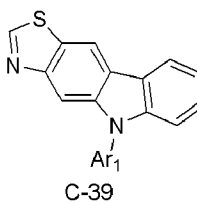
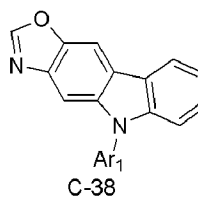
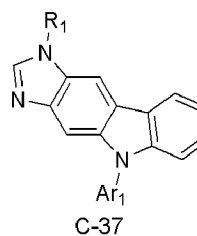
[84]



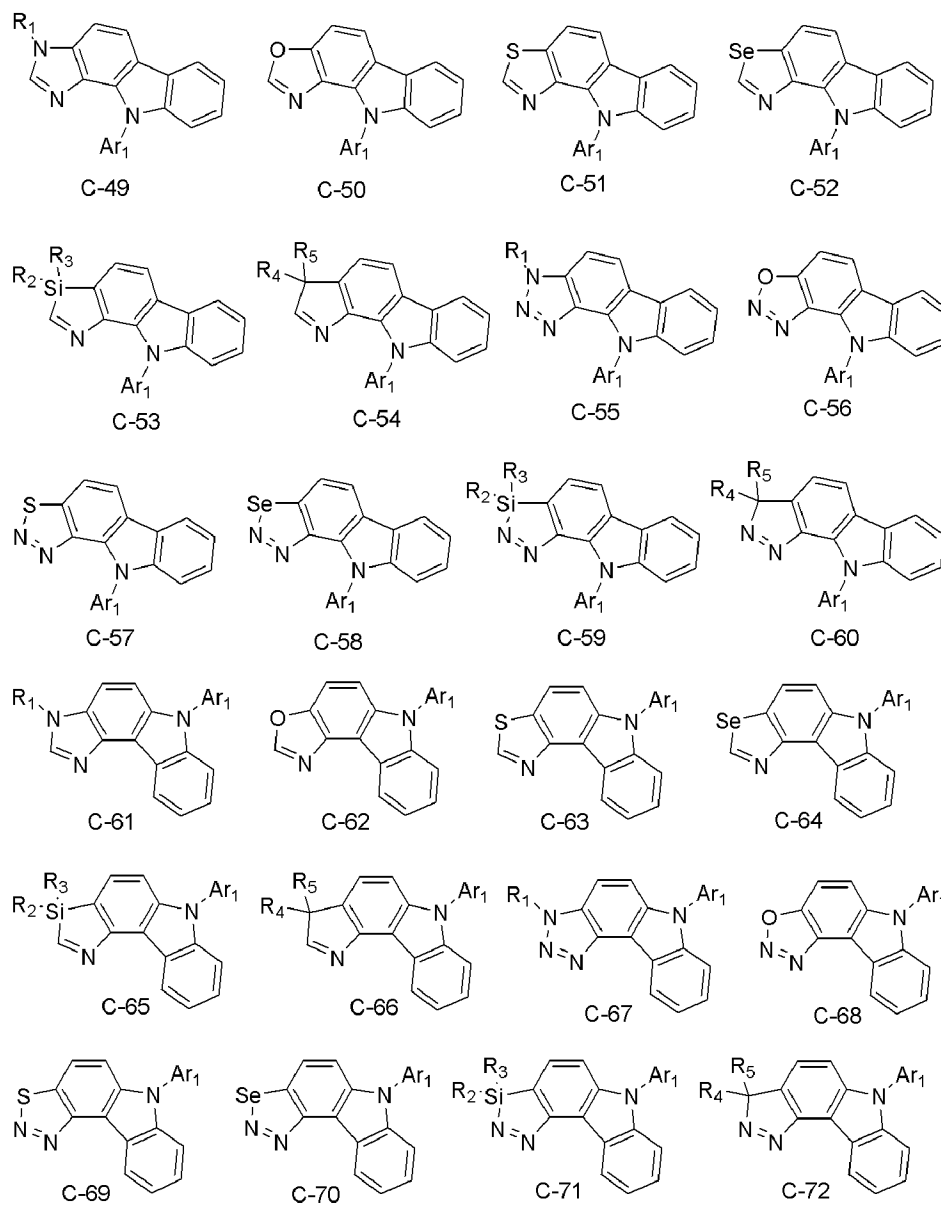
[85]



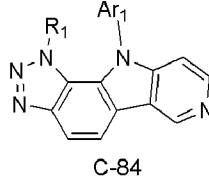
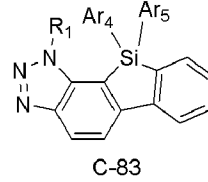
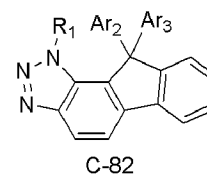
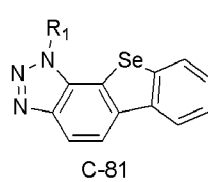
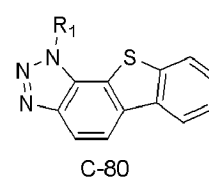
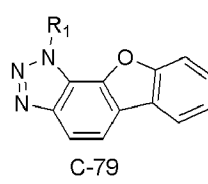
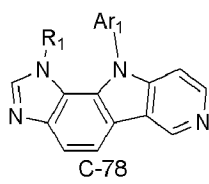
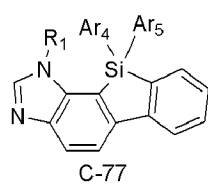
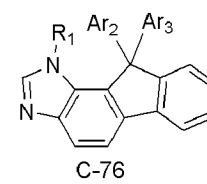
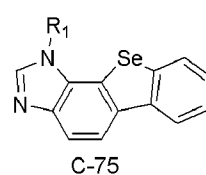
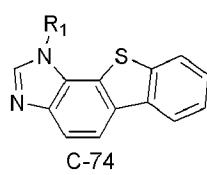
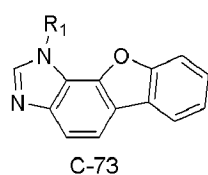
[86]



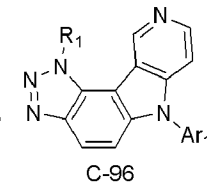
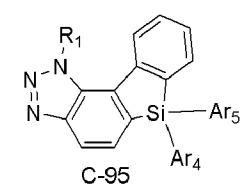
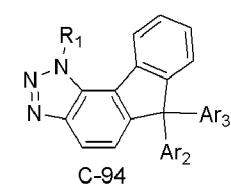
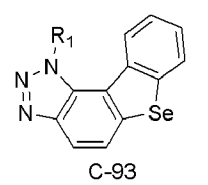
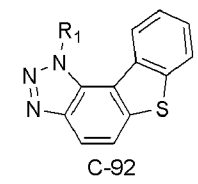
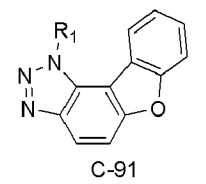
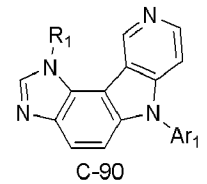
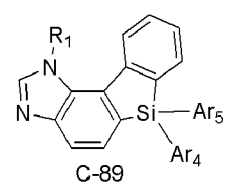
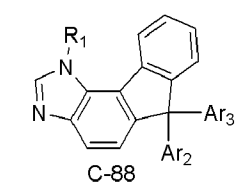
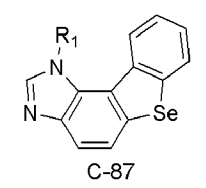
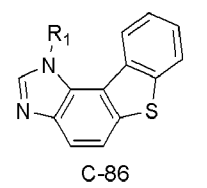
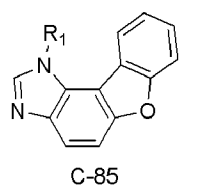
[87]



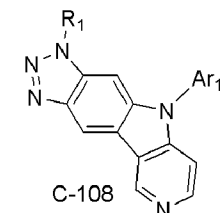
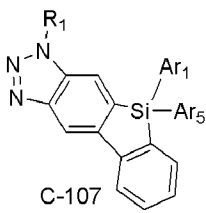
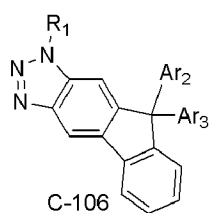
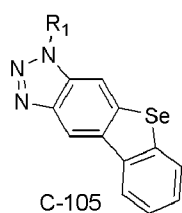
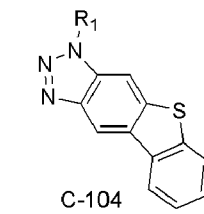
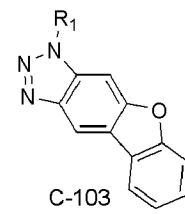
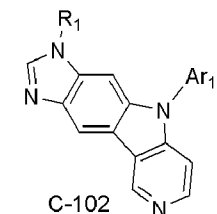
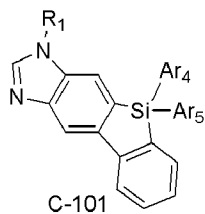
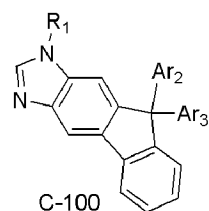
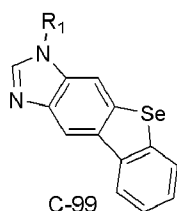
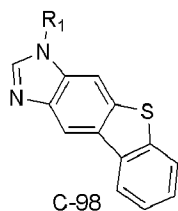
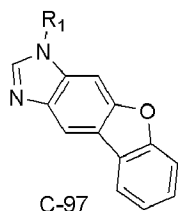
[89]



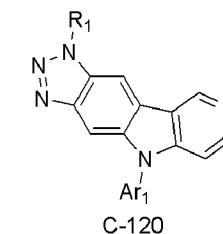
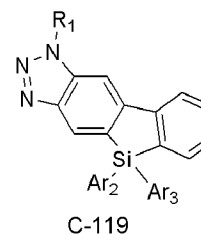
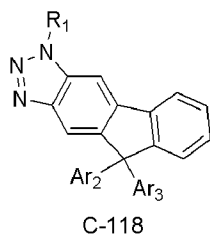
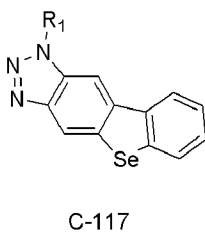
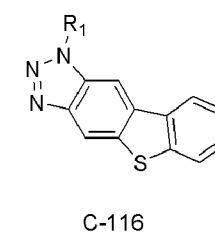
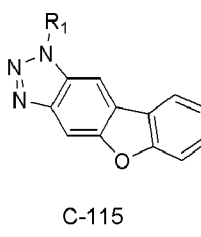
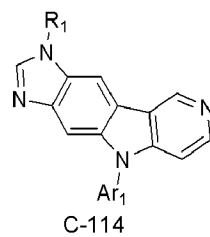
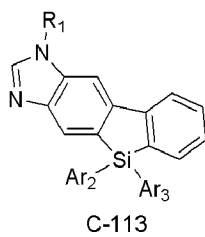
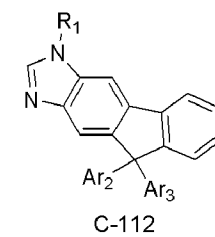
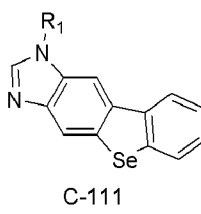
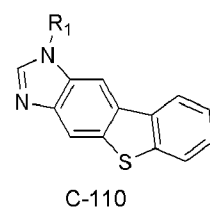
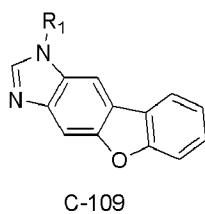
[90]



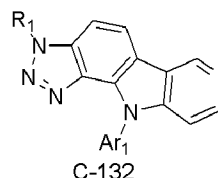
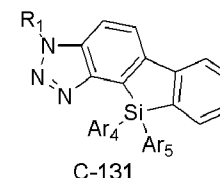
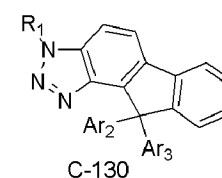
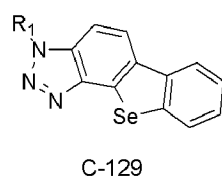
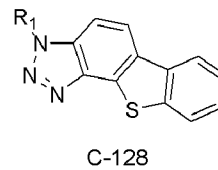
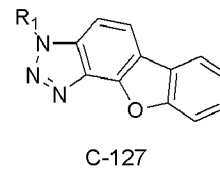
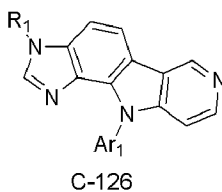
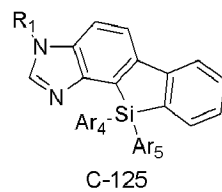
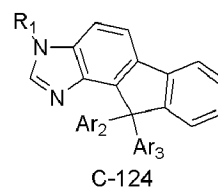
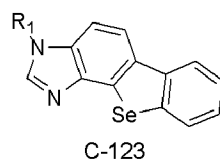
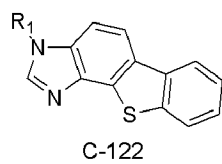
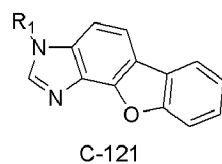
[91]



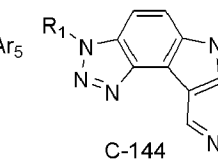
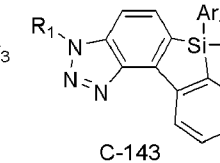
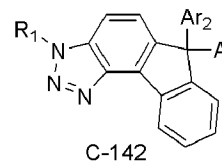
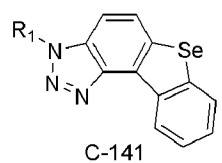
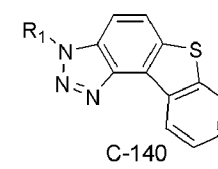
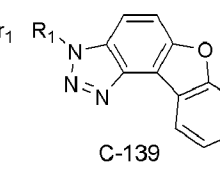
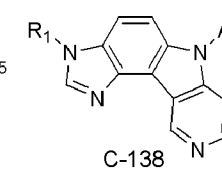
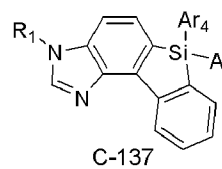
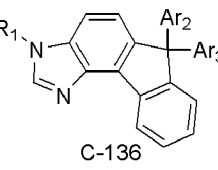
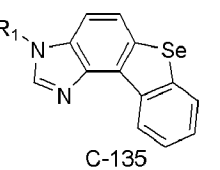
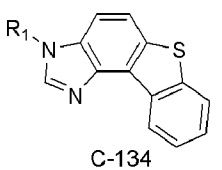
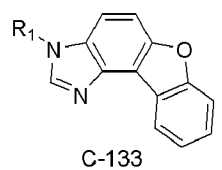
[92]



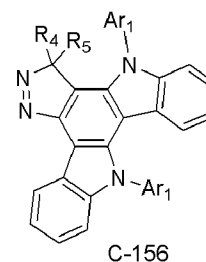
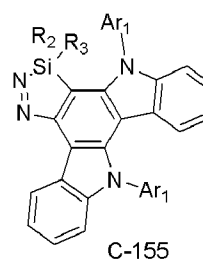
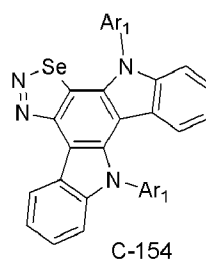
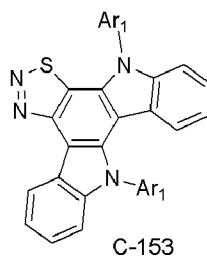
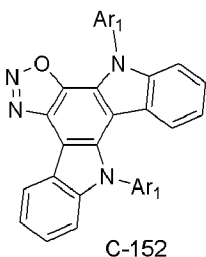
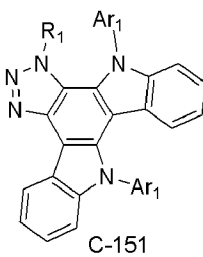
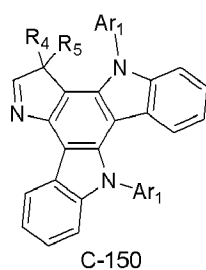
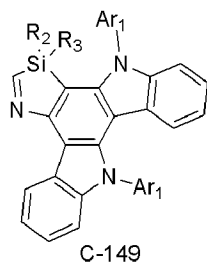
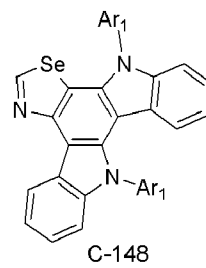
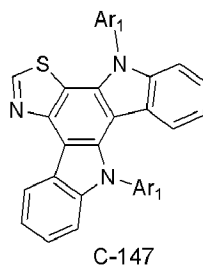
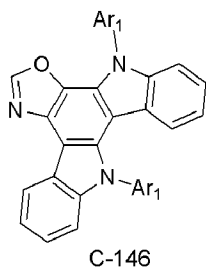
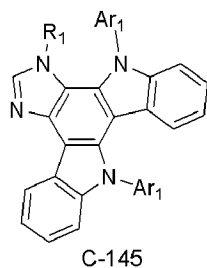
[93]



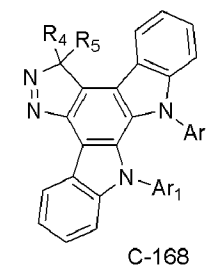
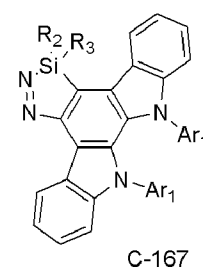
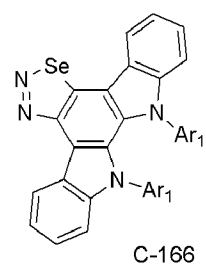
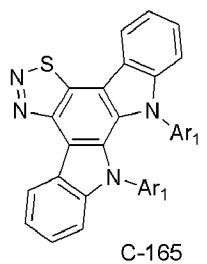
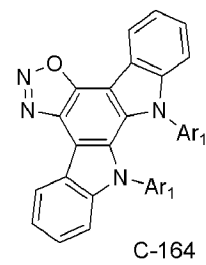
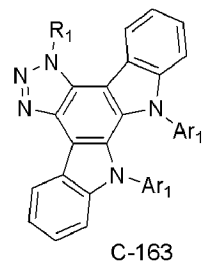
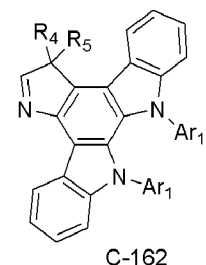
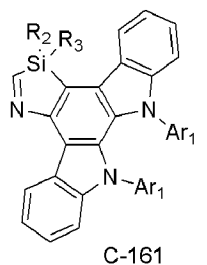
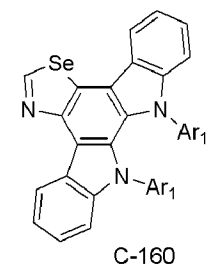
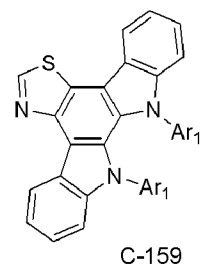
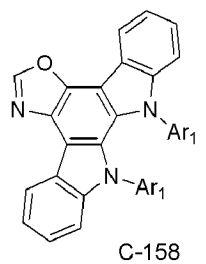
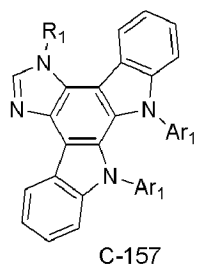
[94]



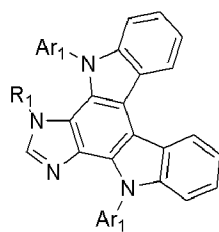
[95]



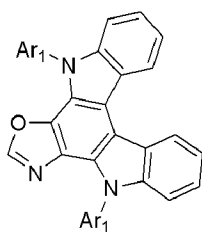
[96]



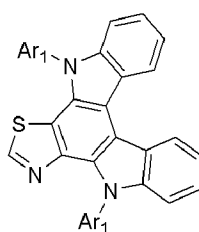
[97]



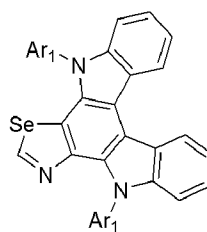
C-169



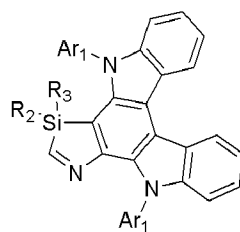
C-170



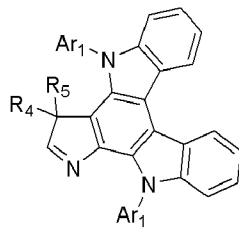
C-171



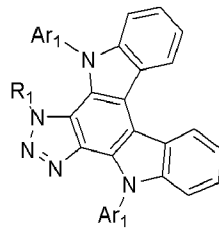
C-172



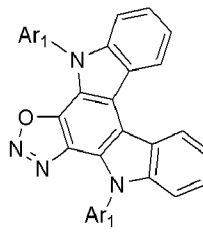
C-173



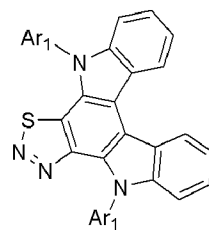
C-174



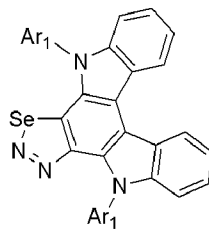
C-175



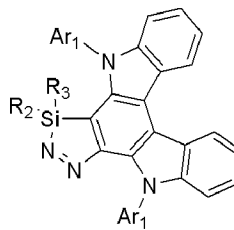
C-176



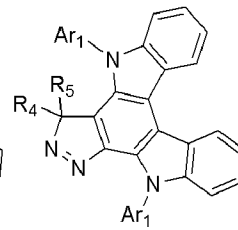
C-177



C-178

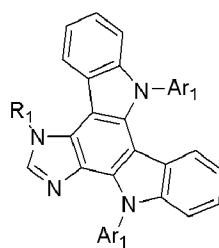


C-179

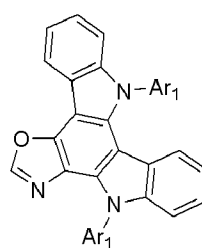


C-180

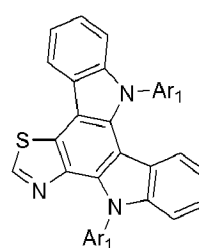
[98]



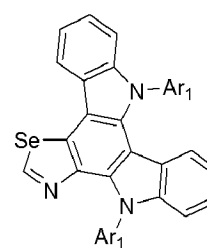
C-181



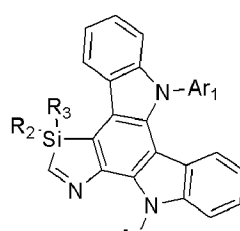
C-182



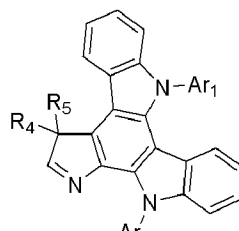
C-183



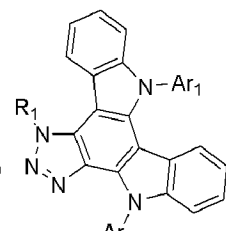
C-184



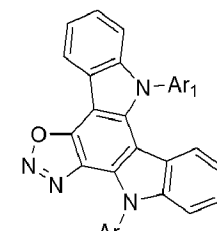
C-185



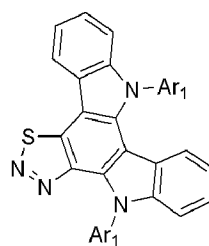
C-186



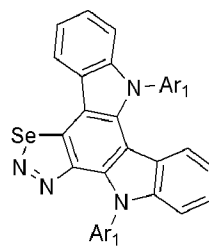
C-187



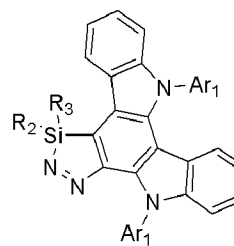
C-188



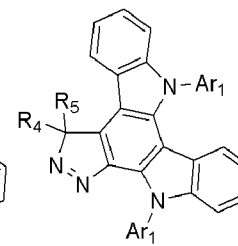
C-189



C-190



C-191



C-192

- [99] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미하며, 이의 비제한적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있다.
- [100] 또, 본 발명에서 "비치환된 시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이러한 시클로알킬의 예로는 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실, 놀보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine)등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [101] 또, 본 발명에서 "비치환된 헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미하며, 이때 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이의 비-제한적인 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있다.
- [102] 또, 본 발명에서 "비치환된 아릴"은 단독 고리 혹은 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이때, 2 이상의 고리는 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태로 부착될 수 있다. 이의 비제한적인 예로는 페닐, 비페닐, 터페닐(terphenyl), 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있다.
- [103] 또, 본 발명에서 "비치환된 헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기로서, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 질소(N), 산소(O), 황(S) 또는 셀레늄(Se)과 같은 헤테로원자로 치환된다. 이때, 헤테로아릴은 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태로 부착될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함한다. 이러한 헤테로아릴의 비제한적인 예로는 피리디닐, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazoly)과 같은 폴리사이클릭 고리를 포함하고, 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등도 포함하는 것으로 해석한다.
- [104] 또, 본 발명에서 "비치환된 알킬옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 작용기를 의미하며, 이때 상기 R은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로서, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 포함될 수 있으며 이에 한정되지는 않는다.
- [105] 또, 본 발명에서 "비치환된 아릴옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 작용기를

의미하며, 이때 상기 R'는 탄소수 6 내지 60의 아릴이다. 아릴옥시의 비제한적인 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있다.

[106] 또, 본 발명에서 "비치환된 아릴아민"은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[107] "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[108] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다 [*Chem. Rev.*, 60:313 (1960); *J. Chem. SOC.* 4482 (1955); *Chem. Rev.* 95: 2457 (1995) 등 참조]. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[109]

[110] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물(바람직하게는 화학식 3 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물)을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[111] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극(anode), 음극(cathode), 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물(바람직하게는 화학식 3 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물)을 1종 이상 포함하는 것을 특징으로 한다.

[112] 상기 1층 이상의 유기물층으로는 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등이 있는데, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 또는 발광층일 수 있으며, 보다 바람직하게는 발광층일 수 있다.

[113] 일례로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료 및/또는 도펀트 재료를 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물(바람직하게는 화학식 3 내지 8 중 어느 하나로 표시되는 화합물)을 발광층의 인광 호스트 재료로 사용할 수 있다. 이 경우, 상기 화합물로 인해 소자의 발광효율, 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 수명이 향상될 수 있다.

[114] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 비제한적인 예로는 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다. 또한, 바람직하게는 본 발명의 화합물이 넓은 밴드갭, 및 우수한 열적 안정성을 갖기 때문에, 발광층의 인광 호스트 재료로 이용될 수 있다. 선택적으로, 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수도 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는

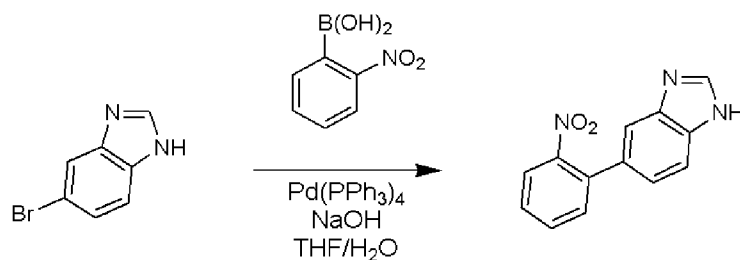
접착층이 삽입된 구조로 이루어질 수도 있다.

- [115] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상(예컨대, 발광층, 정공수송층 및/또는 전자수송층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.
- [116] 상기 유기물층은 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에만 한정되지 않는다.
- [117] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [118] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [119] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [120] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.
- [121]
- [122] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[123] [준비예 1] 화합물 **Core1A** 및 **Core1B**의 합성

[124] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole의 합성

[125]



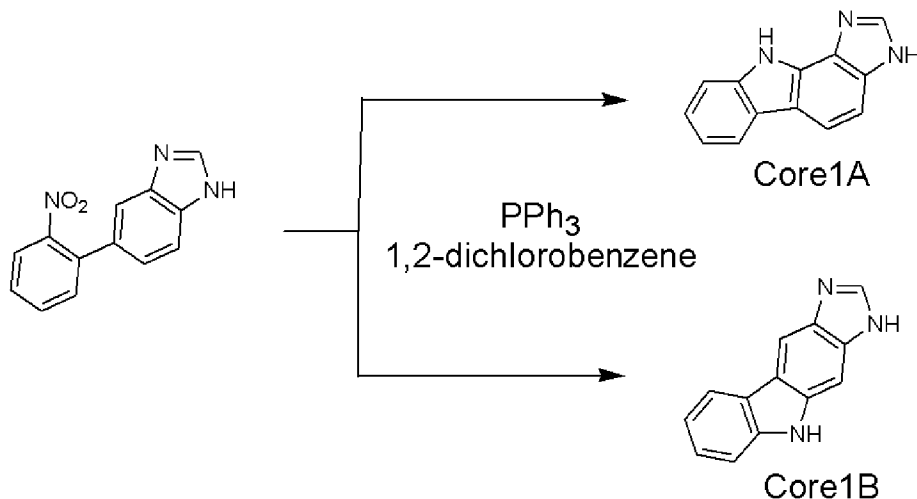
- [126] 질소 기류 하에서 6.5 g (32.98 mmol)의 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole, 6.6g (39.58 mmol)의 2-nitrophenylboronic acid, 3.9 g (98.96 mmol)의 NaOH, 및 150 ml/50 ml의 THF/H₂O를 넣고 교반하였다. 40 °C에서 1.14 g (0.98mmol)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80 °C에서 12 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후,

디클로로메탄으로 추출하여 얻은 유기층을 MgSO_4 로 건조한 다음 감압 여과하였다. 여과된 유기층을 감압 증류한 후, 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 화합물 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 5.2 g (yield: 66 %)을 획득하였다.

[127] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.68 (m, 2H), 8.02 (m, 5H), 8.14 (s, 1H), 8.45 (s, 1H)

[128] <단계 2> 화합물 Core1A 및 Core1B의 합성

[129]



[130] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 1>에서 얻은

5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 5.2 g (21.73 mmol)을, triphenylphosphine 11.4 g (43.47 mmol), 및 1,2-dichlorobenzene 100 ml과 혼합 후 12 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 디스틸레이션을 통해 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 유기층을 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO_4 로 건조한 다음 감압 여과하였다. 여과된 유기층을 감압 증류한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 화합물 Core1A 1.8 g (yield: 40 %) 및 화합물 Core1B 1.3g (yield: 28%)을 얻었다.

[131] 화합물 Core1A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.31 (t, 1H), 7.55 (m, 3H), 7.87 (d, 1H), 8.15 (m, 2H), 8.43 (s, 1H), 10.23(s, 1H)

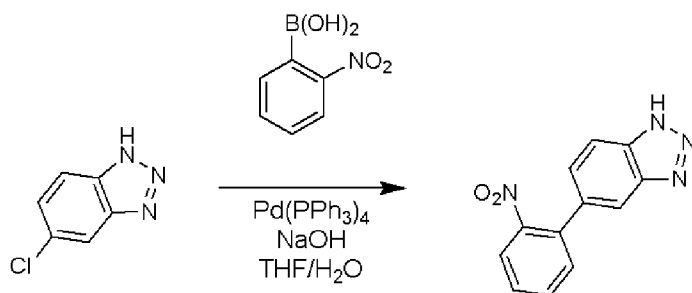
[132] 화합물 Core2B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.52 (t, 1H), 7.68 (m, 3H), 8.13 (m, 2H), 8.47 (s, 1H), 10.18(s, 1H)

[133]

[134] [준비예 2] 화합물 Core2A 및 Core2B의 합성

[135] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d][1,2,3]triazole의 합성

[136]

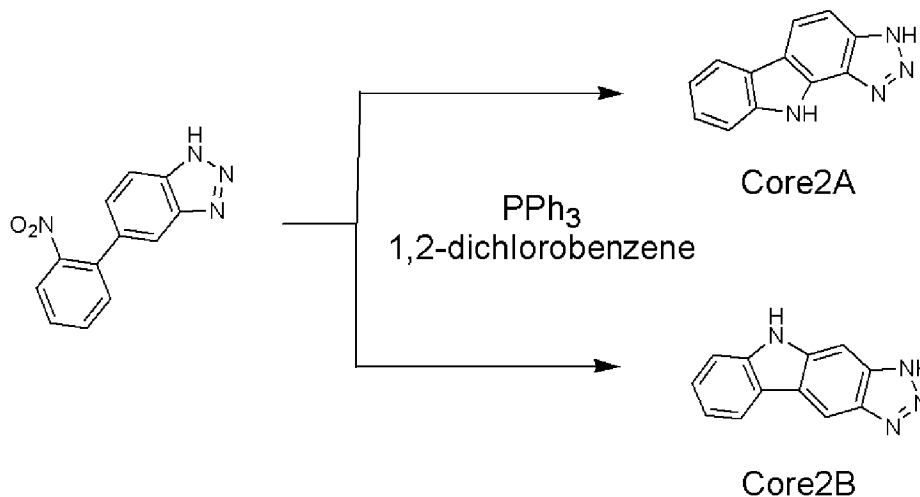


[137] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 5-chloro-1H-benzo[d][1,2,3]triazole 7.9g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d][1,2,3]triazole 6.3 g (yield: 51 %)을 획득하였다.

[138] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.68 (m, 2H), 7.92 (t, 1H), 8.03 (m, 3H), 8.20 (s, 1H)

[139] <단계 2> 화합물 Core2A 및 Core2B의 합성

[140]



[141] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 2의 <단계 1>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d][1,2,3]triazole 6.3g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core2A 2.3g(yield: 42 %) 및 화합물 Core2B 0.8g (yield: 14%)을 얻었다.

[142] 화합물 Core2A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.28 (t, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.65 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 10.33(s, 1H)

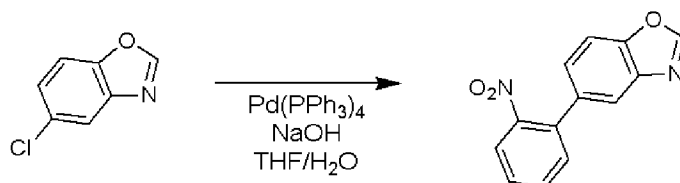
[143] 화합물 Core2B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.30 (t, 1H), 7.52 (t, 1H), 7.65 (d, 1H), 8.02 (m, 2H), 8.15 (d, 1H), 10.35(s, 1H)

[144]

[145] [준비예 3] 화합물 Core3A 및 Core3B의 합성

[146] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)benzo[d]oxazole의 합성

[147]

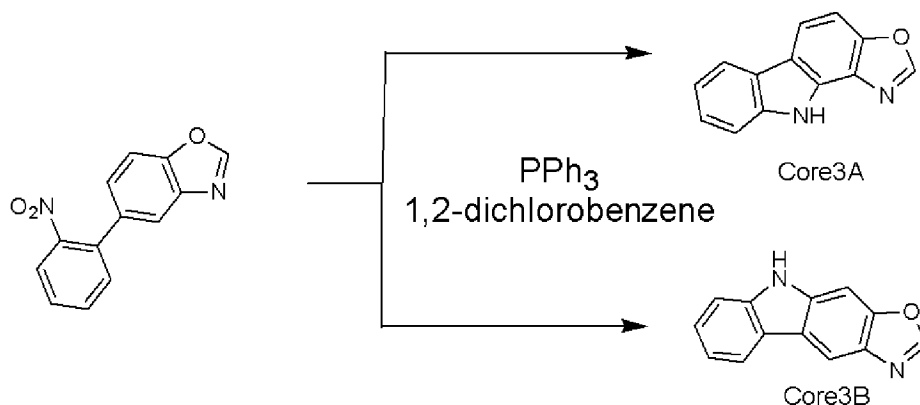


[148] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 5-chlorobenzo[d]oxazole 5.7g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)benzo[d]oxazole 4.1 g (yield: 46 %)을 획득하였다.

[149] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.65 (t, 1H), 7.88 (m, 4H), 8.12 (m, 3H)

[150] <단계 2> 화합물 Core3A 및 Core3B의 합성

[151]



[152] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)benzo[d]oxazole 4.1g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core3A 1.6 g (yield: 45 %), 및 화합물 Core3B 0.4 g (yield: 14 %)을 얻었다.

[153] 화합물 Core3A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.02 (d, 1H), 7.28 (t, 1H), 7.53 (t, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 8.15(m, 2H), 10.38(s, 1H)

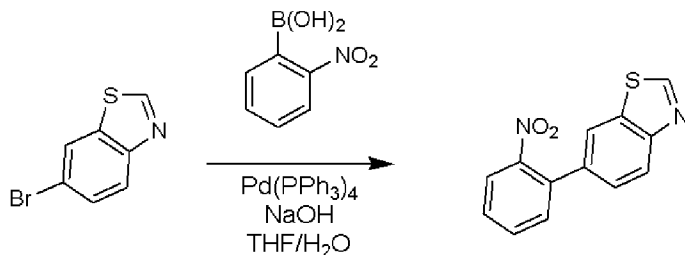
[154] 화합물 Core3B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.30 (t, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.58 (m, 3H), 7.98 (s, 1H), 8.18 (d, 1H), 10.34(s, 1H)

[155]

[156] [준비예 4] 화합물 Core4A 및 Core4B의 합성

[157] <단계 1> 6-(2-nitrophenyl)benzo[d]thiazole의 합성

[158]

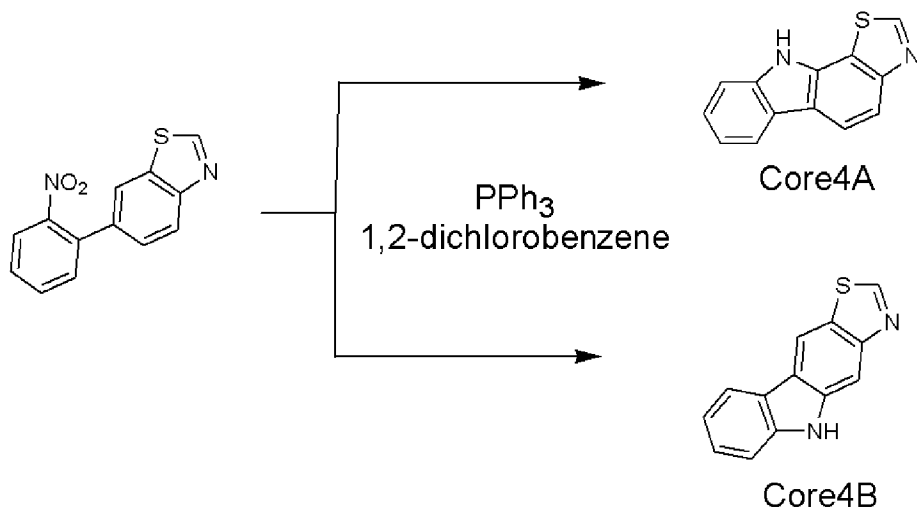


[159] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 6-bromobenzo[d]thiazole 6.3g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)benzo[d]thiazole 4.7 g (yield: 62 %)을 획득하였다.

[160] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.72 (m, 2H), 7.92 (m, 3H), 8.35 (s, 1H), 9.28 (s, 1H)

[161] <단계 2> 화합물 Core4A 및 Core4B의 합성

[162]



[163] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 4의 <단계 1>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)benzo[d]thiazole 4.7g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core4A 2.2 g (yield: 53 %), 및 화합물 Core4B 0.9 g (yield: 21 %)을 얻었다.

[164] 화합물 Core4A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.25 (t, 1H), 7.55 (m, 3H), 7.78 (d, 1H), 8.15 (d, 1H), 9.26 (s, 1H), 10.27(s, 1H)

[165] 화합물 Core4B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.26 (t, 1H), 7.52 (t, 1H), 7.66 (d, 1H), 8.10 (m, 2H), 8.25 (s, 1H), 9.27(s, 1H), 10.42(s, 1H)

[166]

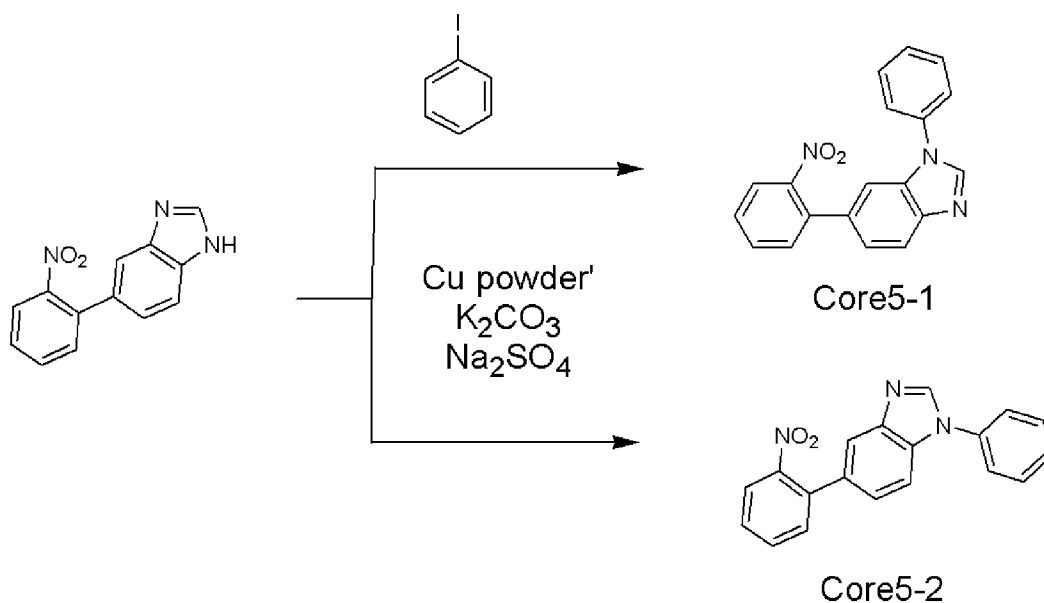
[167] [준비예 5] 화합물 Core5A 및 Core5B의 합성

[168] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole의 합성

[169] 준비예 1의 <단계 1>과 동일하게 수행하여 화합물 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole을 얻었다.

[170] <단계 2> Core5-1, Core5-2 의 합성

[171]



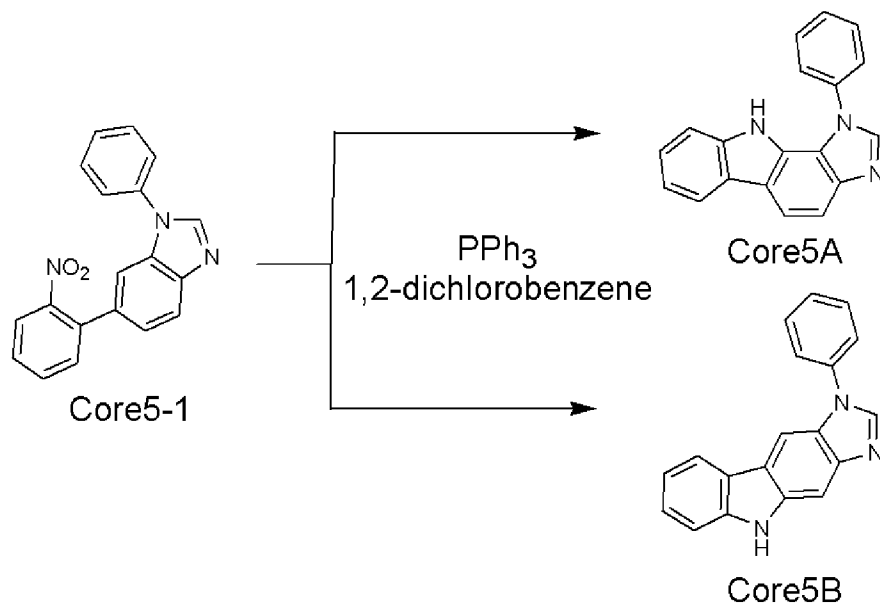
[172] 질소 기류 하에서 준비예 5의 <단계 1>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 7.5 g (31.35 mmol), iodobenzene 9.6g (47 mmol), Cu powder 0.2 g (3.135 mmol), Na₂SO₄ 8.9g (62.7 mmol), 및 K₂CO₃ 4.3g (31.35 mmol)을, 100 ml의 nitrobenzene에 넣고 24 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결 후, 디스틸레이션으로 nitrobenzene을 제거한 뒤 디클로로메탄으로 추출하여 얻은 유기층을 MgSO₄로 건조한 다음 감압 여과하였다. 여과된 유기층을 감압 증류한 다음, 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 화합물 Core5-1 4.2g (yield: 42 %), 및 화합물 Core5-2 3.6g (yield: 36%)를 획득하였다.

[173] 화합물 Core5-1의 ¹H-NMR: δ 7.55 (m, 6H), 7.98 (m, 2H), 8.05 (m, 4H), 8.32 (d, 1H)

[174] 화합물 Core5-2의 ¹H-NMR: δ 7.58 (m, 7H), 7.92 (m, 2H), 8.07 (m, 4H)

[175] <단계 3> 화합물 Core5A 및 Core5B의 합성

[176]



[177] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 5의 <단계 2>에서 얻은 화합물 Core5-1 4.2g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core5A 1.6g (yield: 42 %), 및 화합물 Core5B 1.1g (yield: 29 %)을 얻었다.

[178] 화합물 Core5A의 ¹H-NMR: δ 7.27(t, 1H), 7.58 (m, 8H), 7.83 (d, 1H), 8.12 (m, 2H), 10.32 (s, 1H)

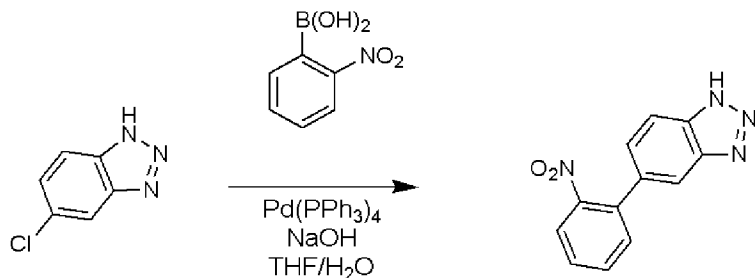
[179] 화합물 Core5B의 ¹H-NMR: δ 7.28 (t, 1H), 7.62 (m, 9H), 8.08 (m, 2H), 10.35 (s, 1H)

[180]

[181] [준비예 6] 화합물 Core6A 및 Core6B의 합성

[182] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d][1,2,3]triazole의 합성

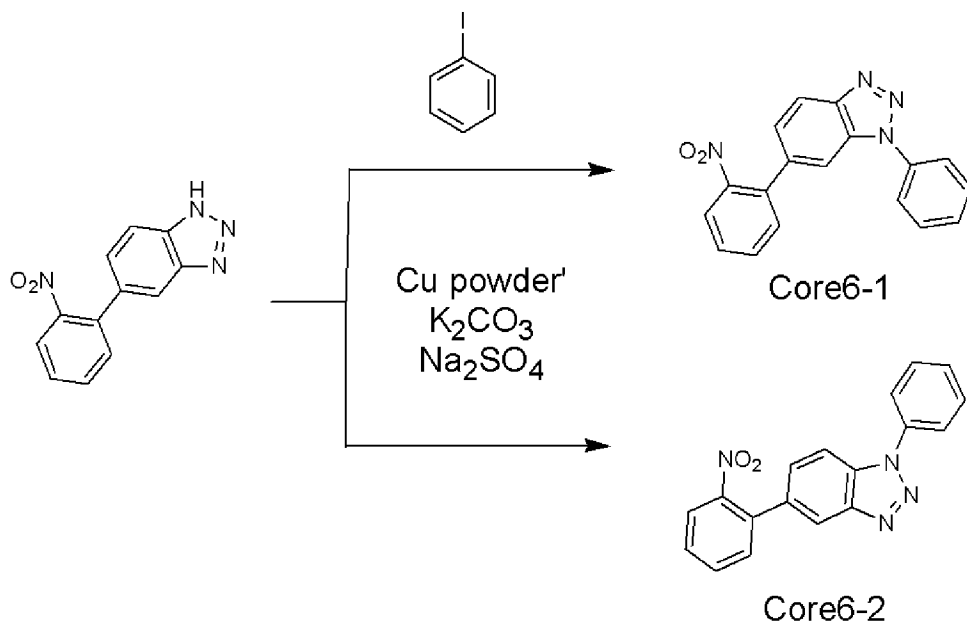
[183]



[184] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 5-chloro-1H-benzo[d][1,2,3]triazole 6.5g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d][1,2,3]triazole을 6.8g(yield: 68%) 획득하였다.

[185] <단계 2> 화합물 Core6-1 및 Core6-2의 합성

[186]



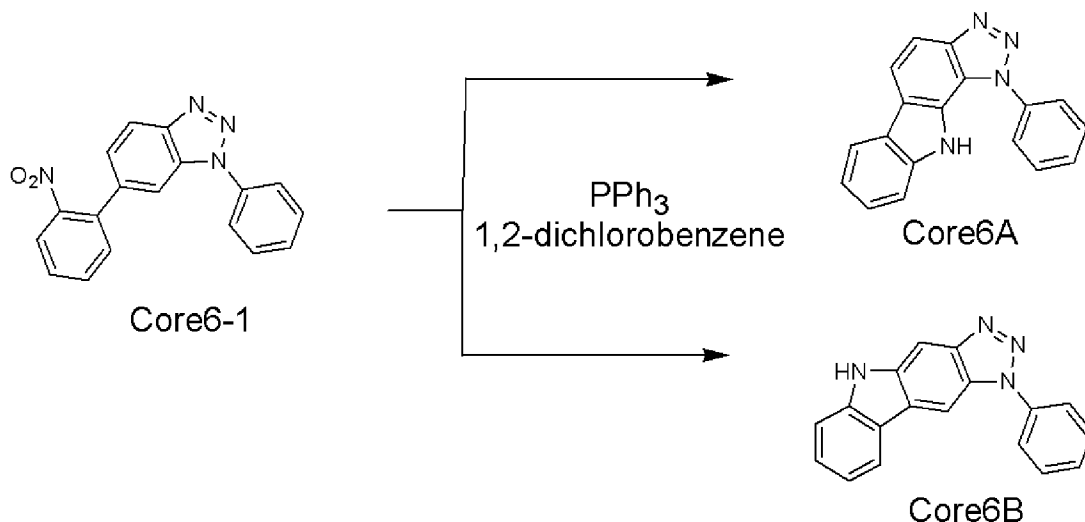
[187] 준비예 5의 <단계 1>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 6의 <단계 1>에서 얻은 5-chloro-1H-benzo[d][1,2,3]triazole 6.8g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 5의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core6-1 4.2 g (yield: 47%), 및 화합물 Core6-2 2.8 g (yield: 31%)을 획득하였다.

[188] 화합물 Core6-1의 ¹H-NMR: δ 7.43 (t, 1H), 7.60 (m, 6H), 7.88 (t, 1H), 8.00 (m, 3H), 8.18 (s, 1H)

[189] 화합물 Core6-2의 ¹H-NMR: δ 7.47 (t, 1H), 7.64 (m, 6H), 7.92 (t, 1H), 8.03 (m, 3H), 8.22 (s, 1H)

[190] <단계 3> 화합물 Core6A 및 Core6B의 합성

[191]



[192] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 6의 <단계 2>에서 얻은 화합물 Core6-1 4.2g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core6-1 1.5 g (yield: 39 %), 및 화합물 Core6-2 0.8 g (yield: 21 %)을 획득하였다.

[193] 화합물 Core6A의 ¹H-NMR: δ 7.32 (t, 1H), 7.48 (m, 3H), 7.65 (m, 5H), 7.98 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 10.45(s, 1H)

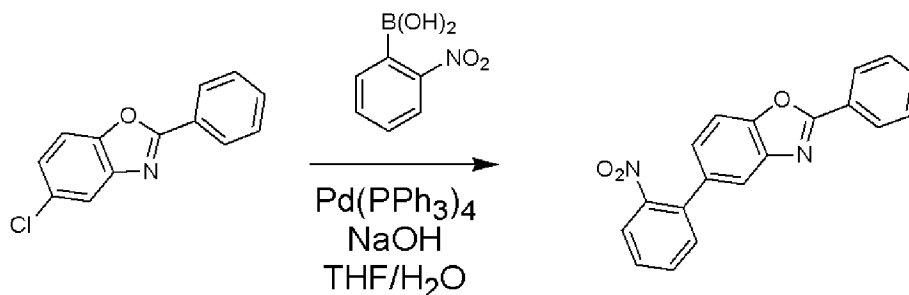
[194] 화합물 Core6B의 ¹H-NMR: δ 7.29 (t, 1H), 7.62 (m, 7H), 8.01 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 10.42(s, 1H)

[195]

[196] [준비예 7] 화합물 Core7A 및 Core7B의 합성

[197] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole의 합성

[198]

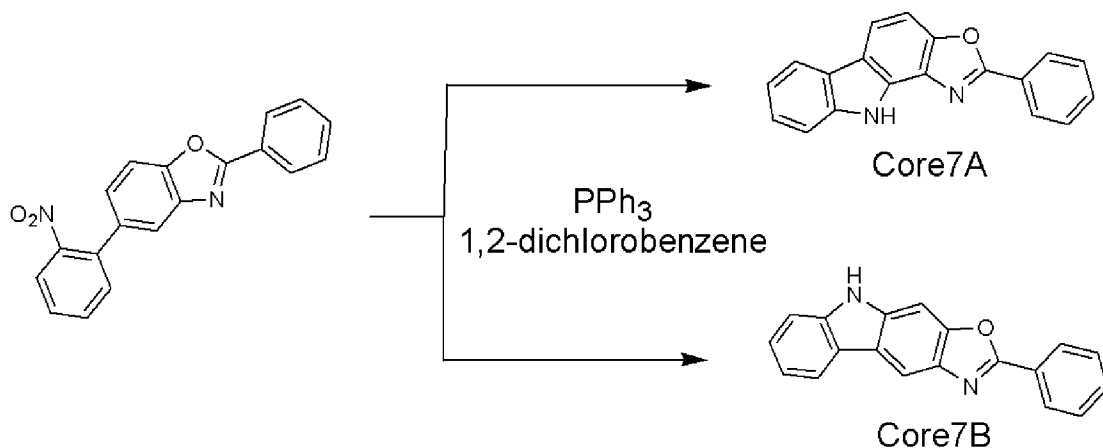


[199] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 5-chloro-2-phenylbenzo[d]oxazole 6.45g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole 4.8 g (yield: 54 %)을 획득하였다.

[200] ¹H-NMR: δ 7.34 (m, 2H), 7.66 (m, 2H), 7.95 (m, 4H), 8.18 (d, 1H), 9.50 (s, 1H)

[201] <단계 2> 화합물 Core7A 및 Core7B의 합성

[202]



[203] 준비예 1에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 7의 <단계 1>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole 4.8을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core7A 1.9g (yield: 44 %), 화합물 Core7B 0.7g (yield: 16 %)을 얻었다.

[204] 화합물 Core7A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.02 (d, 1H), 7.33 (t, 1H), 7.51 (m, 4H), 8.08 (m, 4H), 10.44 (s, 1H)

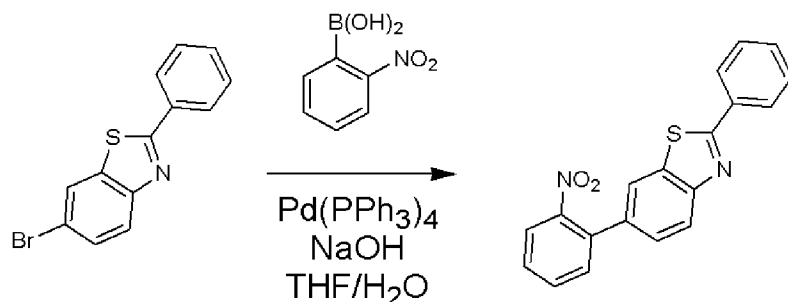
[205] 화합물 Core7B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.28 (t, 1H), 7.55 (m, 7H), 8.05 (m, 3H), 10.42 (s, 1H)

[206]

[207] [준비예 8] 화합물 Core8A 및 Core8B의 합성

[208] <단계 1> 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole의 합성

[209]

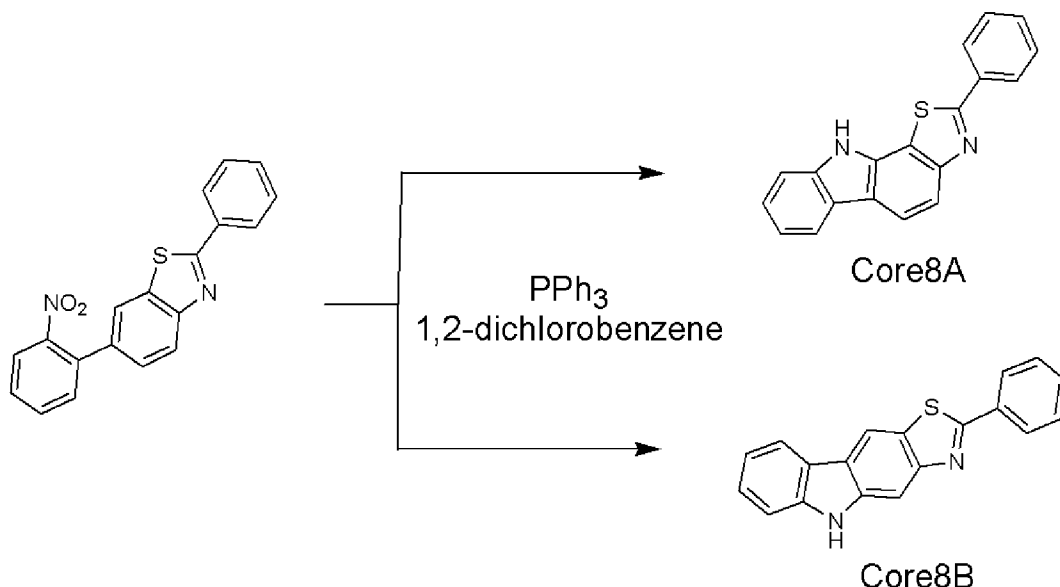


[210] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 6-bromo-2-phenylbenzo[d]thiazole 7.2g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole 4.2 g (yield: 51 %)을 획득하였다.

[211] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45 (m, 3H), 7.68 (t, 1H), 7.78 (m, 2H), 7.93 (t, 1H), 8.03 (m, 4H), 8.36(s, 1H)

[212] <단계 2> 화합물 Core8A 및 Core8B의 합성

[213]



[214] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 8의 <단계 1>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole 4.2g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core8A 1.3g (yield: 39 %), 및 화합물 Core8B 0.8g (yield: 24 %)을 얻었다.

[215] 화합물 Core8A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 1H), 7.51 (m, 6H), 8.07 (m, 3H), 10.38 (s, 1H)

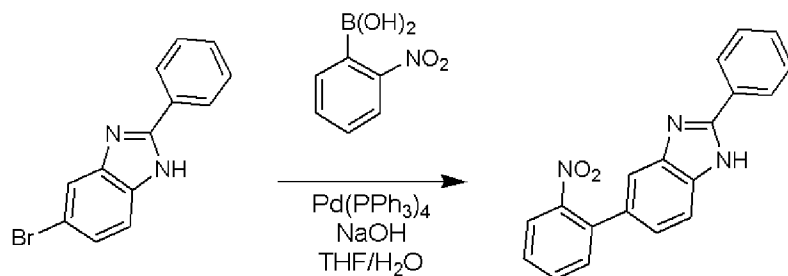
[216] 화합물 Core8B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.45 (m, 4H), 8.05 (m, 4H), 8.26 (s, 1H), 10.35 (s, 1H)

[217]

[218] [준비예 9] 화합물 Core9A 및 Core9B의 합성

[219] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole의 합성

[220]



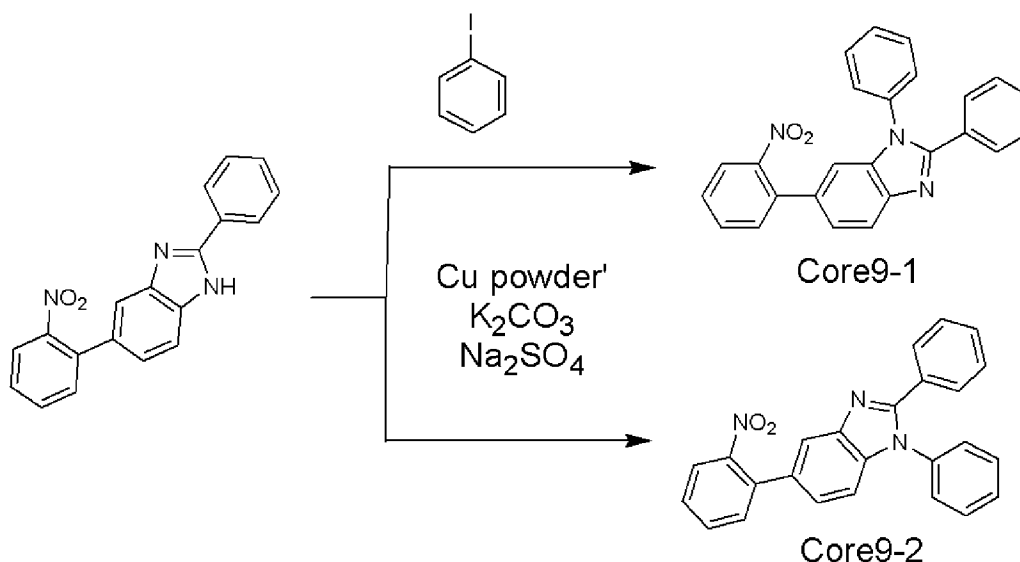
[221] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-1H-benzo[d]imidazole 대신 5-bromo-2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole 8.6을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole 6.2 g (yield: 62 %)을 획득하였다.

[222] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.51 (m, 3H), 7.67 (m, 2H), 8.03 (m, 5H), 8.32 (m, 2H), 8.45 (s, 1H)

[223] <단계 2> 화합물 Core9-1 및 Core9-2의 합성

[224]



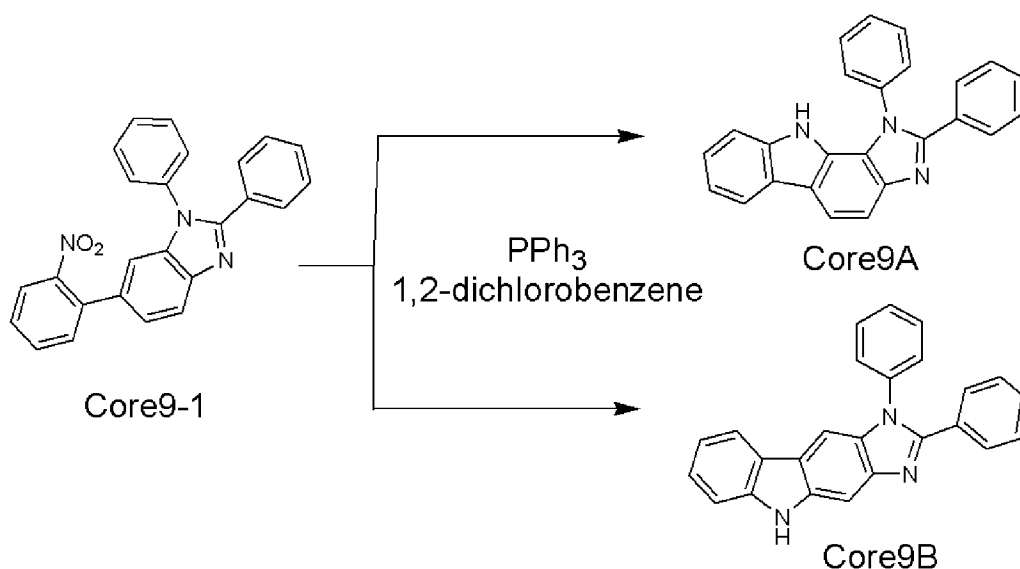
[225] 준비예 5의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 9의 <단계 1>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole 6.2g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 5의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core9-1 3.1 g (yield: 40 %), 및 화합물 Core9-2 2.3 g (yield: 30 %)을 획득하였다.

[226] 화합물 Core9-1의 ¹H-NMR: δ 7.45 (m, 6H), 7.63 (m, 4H), 7.95 (m, 2H), 8.07 (m, 3H), 8.31 (m, 2H)

[227] 화합물 Core9-2의 ¹H-NMR: δ 7.43 (m, 6H), 7.63 (m, 3H), 7.92 (m, 2H), 8.03 (m, 3H), 8.28 (m, 3H)

[228] <단계 3> 화합물 Core9A 및 Core9B의 합성

[229]



[230] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-1H-benzo[d]imidazole 대신 준비예 9의 <단계 2>에서 얻은 화합물 Core9-1 3.1g을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 Core9A 1.2 g (yield: 42

%), 및 화합물 Core9B 0.6 g (yield: 21 %)을 획득하였다.

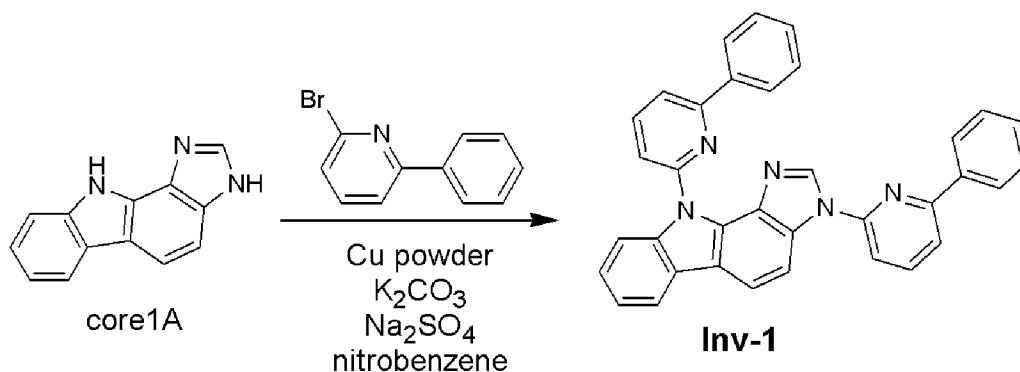
[231] 화합물 Core9A의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.28 (t, 1H), 7.45 (m, 7H), 7.62 (m, 4H), 7.87 (d, 1H), 8.15(d, 1H), 10.42(s, 1H)

[232] 화합물 Core9B의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.32 (t, 1H), 7.47 (m, 7H), 7.62 (m, 5H), 8.15 (d, 1H), 8.30 (m, 2H), 10.45(s, 1H)

[233]

[234] [합성 예 1] 화합물 Inv-1의 합성

[235]



[236] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 Core1A (2.48 g, 12.00 mmol)을, 2-bromo-6-phenylpyridine (6.74 g, 28.80 mmol), Cu powder(0.08 g, 1.20 mmol), K_2CO_3 (1.66 g, 1.20 mmol), Na_2SO_4 (1.71 g, 12.00 mmol) 및 nitrobenzene(100 ml)과 혼합한 다음, 190 $^\circ\text{C}$ 에서 12 시간 동안 교반하였다.

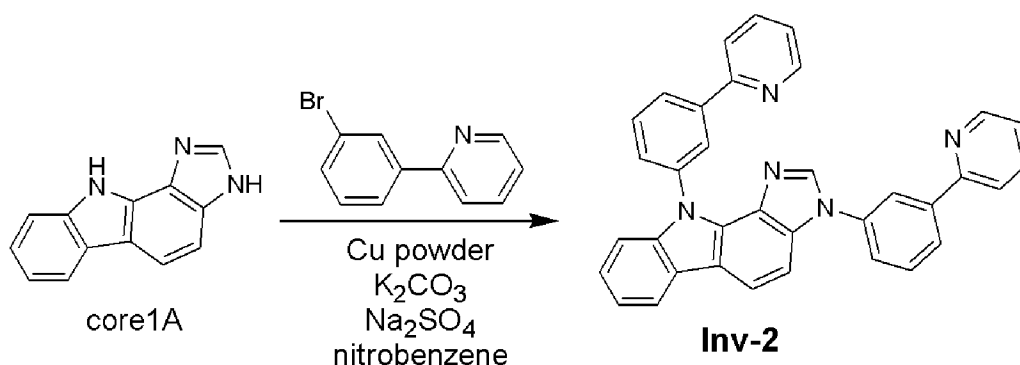
[237] 반응이 종결된 후, nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음, MgSO_4 를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 유기층에서 용매를 제거한 다음, 컬럼 크로마토그래피(Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 화합물 Inv-1 (4.61 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[238] GC-Mass (이론치: 513.20 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[239]

[240] [합성 예 2] 화합물 Inv-2의 합성

[241]



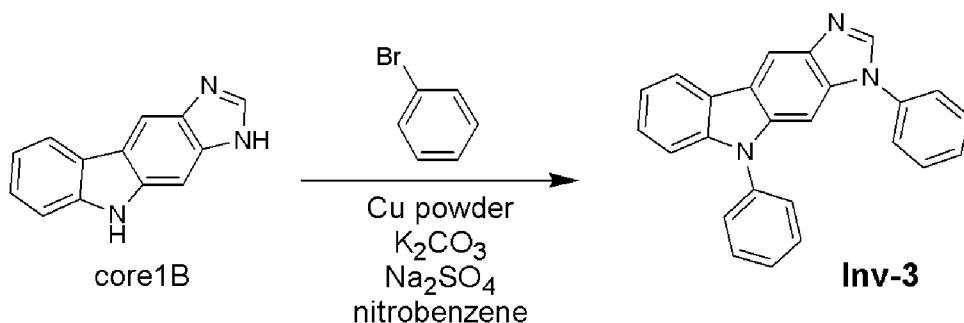
[242] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-6-phenylpyridine 대신 2-(3-bromophenyl)pyridine 2.48g을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-2 (4.31 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[243] GC-Mass (이론치: 513.20 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[244]

[245] [합성예 3] 화합물 **Inv-3**의 합성

[246]



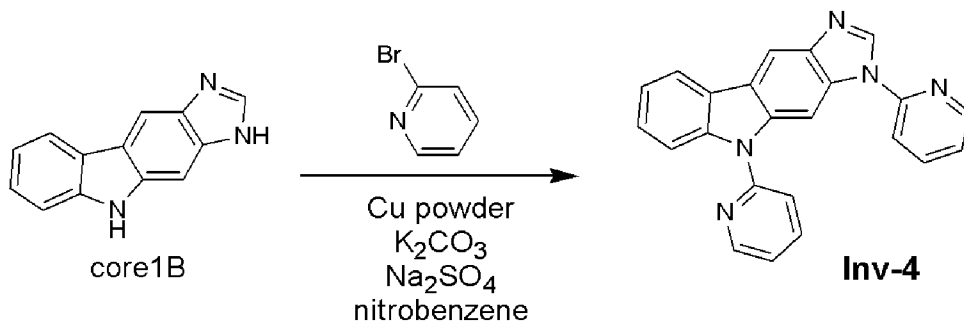
[247] 합성예 1에서 사용된 화합물 Core1A 대신 준비예 1에서 합성된 화합물 Core1B 2.48g을 사용하고, 2-bromo-6-phenylpyridine 대신 bromobenzene 2.81g을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-3 (3.14 g, 수율: 73 %)를 얻었다.

[248] GC-Mass (이론치: 359.42 g/mol, 측정치: 359 g/mol)

[249]

[250] [합성예 4] 화합물 **Inv-4**의 합성

[251]



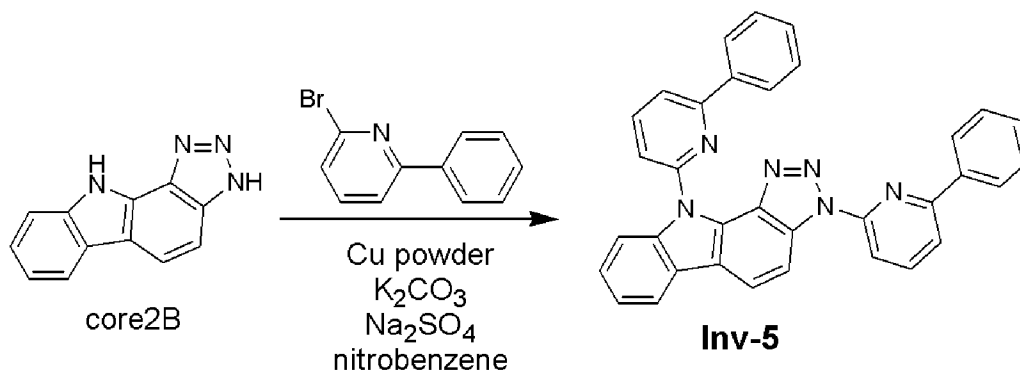
[252] 합성예 1에서 사용된 화합물 Core1A 대신 준비예 1에서 합성된 화합물 Core1B 2.48g을 사용하고, 2-bromo-6-phenylpyridine 대신 2-bromopyridine 2.83g을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-4 (3.20 g, 수율: 74 %)를 얻었다.

[253] GC-Mass (이론치: 361.40 g/mol, 측정치: 361 g/mol)

[254]

[255] [합성예 5] 화합물 **Inv-5**의 합성

[256]



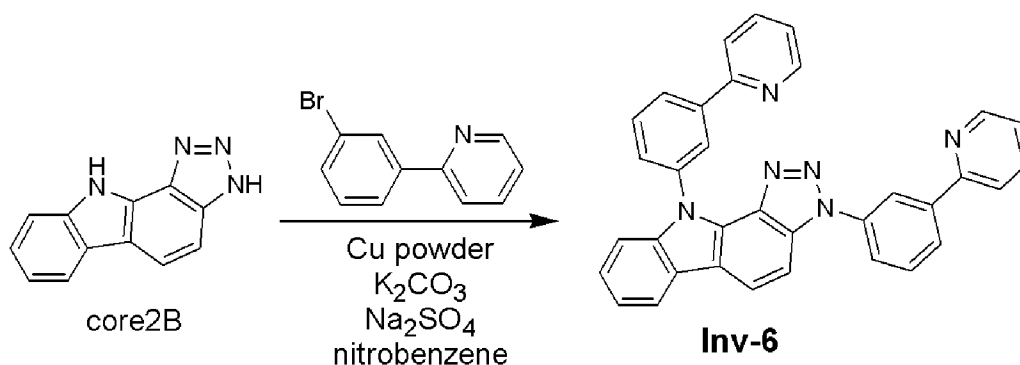
[257] 합성에 1에서 사용된 화합물 Core1A 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 Core2B 2.48g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-5 (4.38 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[258] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[259]

[260] [합성예 6] 화합물 Inv-6의 합성

[261]



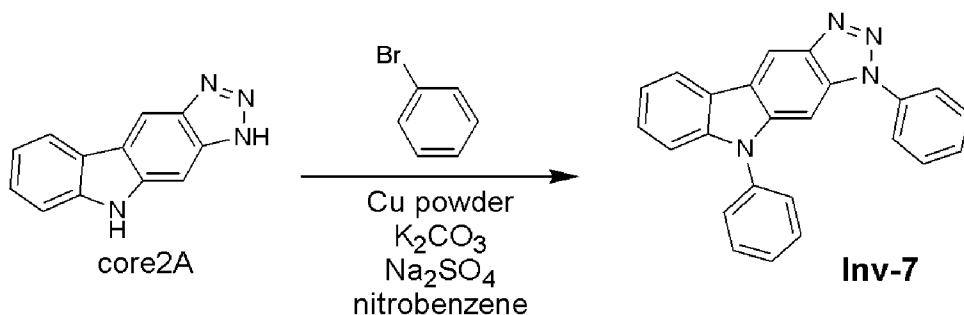
[262] 합성에 2에서 사용된 화합물 Core1A 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 Core2B 2.48g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 2와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-6 (4.38 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[263] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[264]

[265] [합성예 7] 화합물 Inv-7의 합성

[266]



[267] 합성에 3에서 사용된 화합물 Core1B 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 Core2A 2.48g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 3과 동일한 방법으로 수행하여 화합물

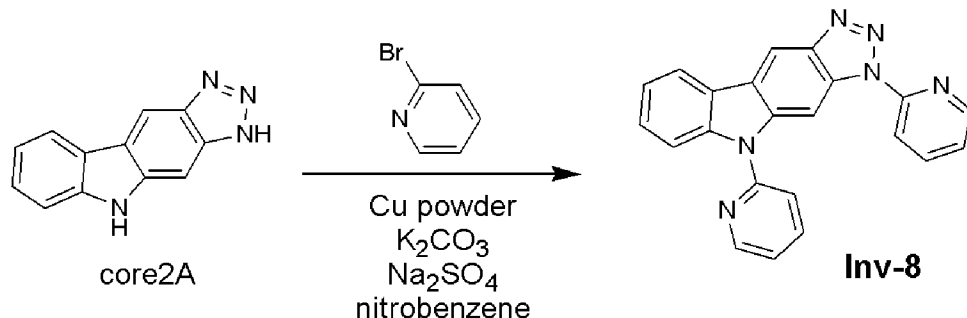
Inv-7 (3.24 g, 수율: 75 %)를 얻었다.

[268] GC-Mass (이론치: 360.41 g/mol, 측정치: 360 g/mol)

[269]

[270] [합성 예 8] 화합물 **Inv-8**의 합성

[271]



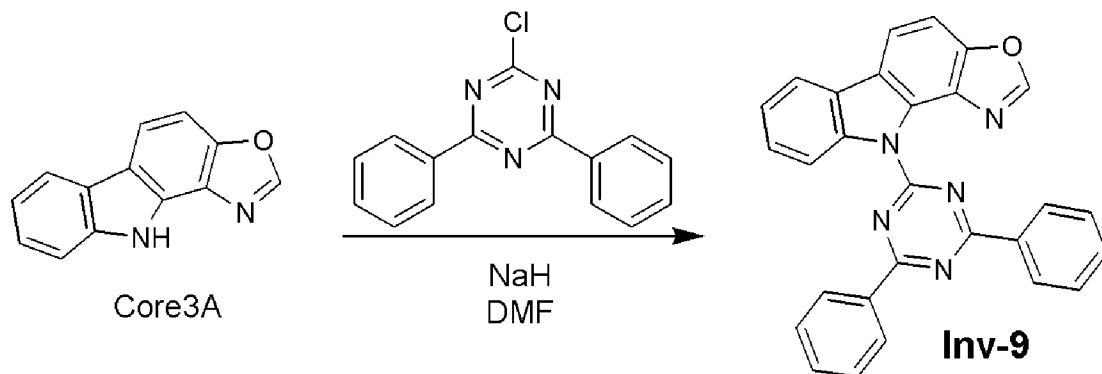
[272] 합성에 4에서 사용된 화합물 Core1B 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 Core2A 2.48g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 4와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-8 (3.26g, 수율: 75 %)를 얻었다.

[273] GC-Mass (이론치: 362.39 g/mol, 측정치: 362 g/mol)

[274]

[275] [합성 예 9] 화합물 **Inv-9**의 합성

[276]



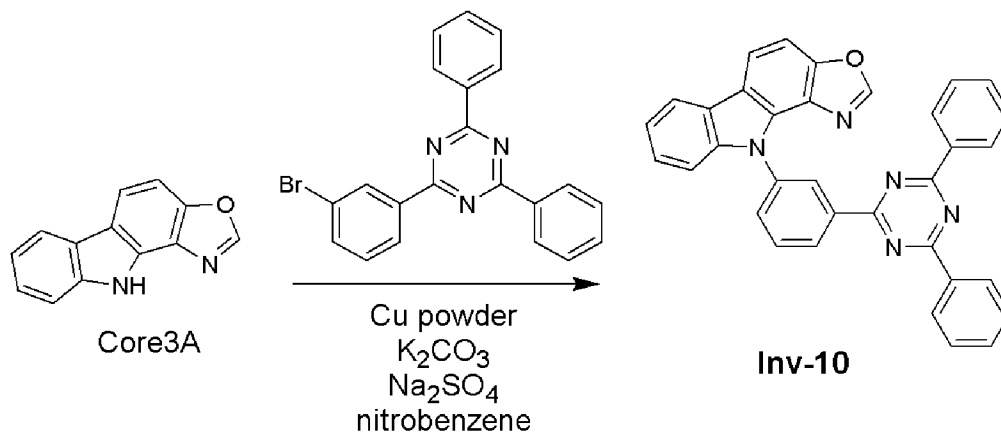
[277] 질소 기류 하에서 준비예 3에서 합성된 화합물 Core3A (2.50 g, 12.00 mmol)을 DMF 100 ml에 녹이고, 여기에 NaH (0.43 g, 18.00 mmol)를 넣고 1 시간 동안 교반하여 반응 혼합물을 얻었다. 이후, DMF 100ml에 녹인 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.84 g, 14.40 mmol)을 상기 반응 혼합물에 천천히 첨가하였다. 이후, 3 시간 동안 교반한 다음, 반응을 종료시키고, 혼합물을 실리카 필터링하고 물과 메탄올로 씻은 후 용매를 제거하였다. 용매가 제거된 고체를 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 1:1 (v/v))로 정제하여 화합물 Inv-9 (3.74 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[278] GC-Mass (이론치: 439.47 g/mol, 측정치: 439 g/mol)

[279]

[280] [합성 예 10] 화합물 **Inv-10**의 합성

[281]



[282] 질소 기류 하에서 준비예 3에서 합성된 화합물 Core3A (2.50 g, 12.00 mmol)을, 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (5.59 g, 14.40 mmol), Cu powder(0.08 g, 1.20 mmol), K₂CO₃(1.66 g, 1.20 mmol), Na₂SO₄(1.71 g, 12.00 mmol) 및 nitrobenzene(100 ml)과 혼합한 다음, 190 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

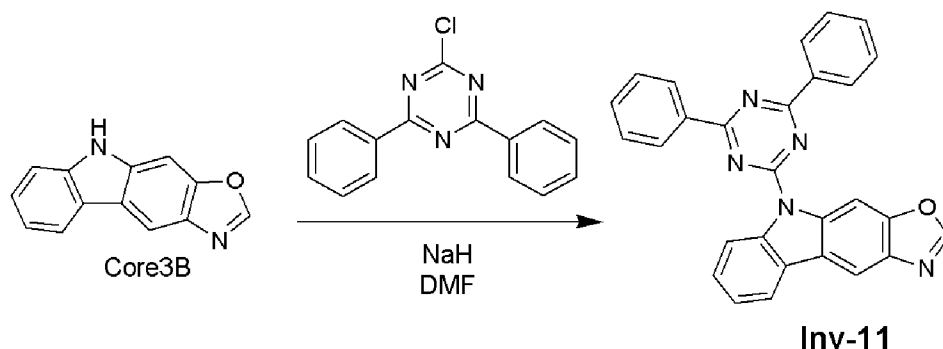
[283] 반응이 종결된 후, nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 유기층에서 용매를 제거한 다음, 컬럼 크로마토그래피(Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 화합물 Inv-10 (4.45 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[284] GC-Mass (이론치: 515.56 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[285]

[286] [합성예 11] 화합물 Inv-11의 합성

[287]



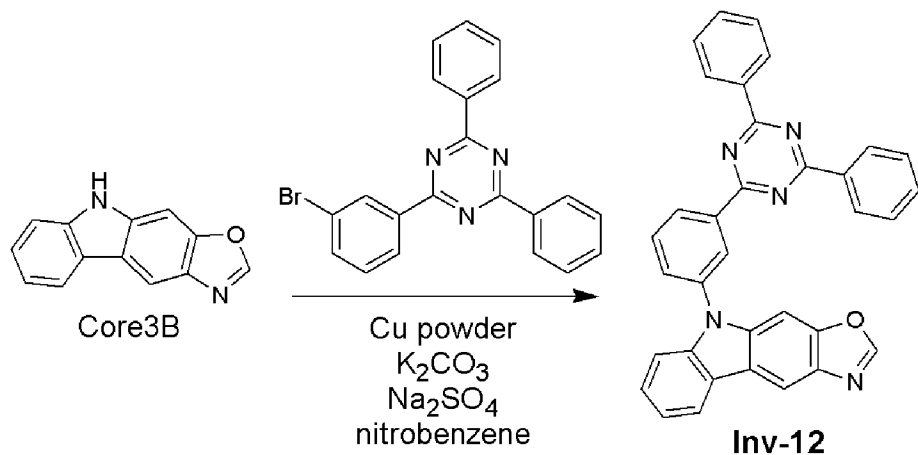
[288] 합성예 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 3에서 합성된 화합물 Core3B 2.43g을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-11 (3.69 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[289] GC-Mass (이론치: 439.47 g/mol, 측정치: 439 g/mol)

[290]

[291] [합성예 12] 화합물 Inv-12의 합성

[292]



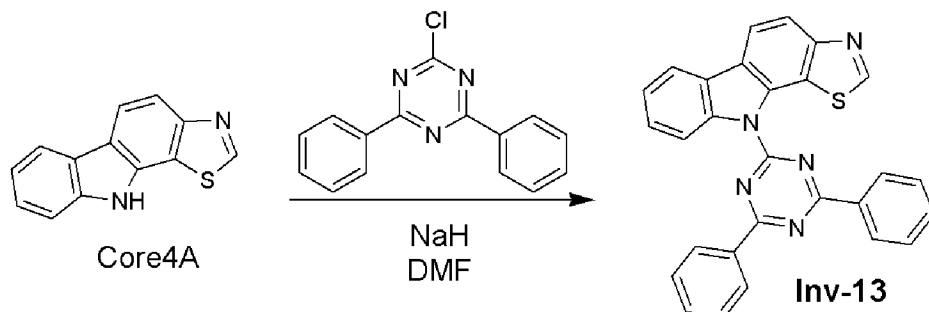
[293] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 3에서 합성된 화합물 Core3B 2.5g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-12 (4.39 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[294] GC-Mass (이론치: 515.56 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[295]

[296] [합성예 13] 화합물 Inv-13의 합성

[297]



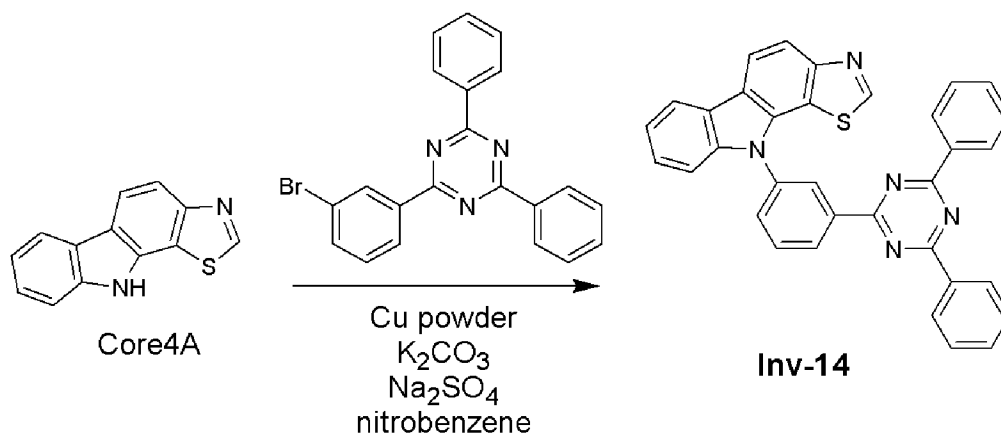
[298] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 Core4A 2.68g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-13 (3.82 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[299] GC-Mass (이론치: 455.53 g/mol, 측정치: 455 g/mol)

[300]

[301] [합성예 14] 화합물 Inv-14의 합성

[302]



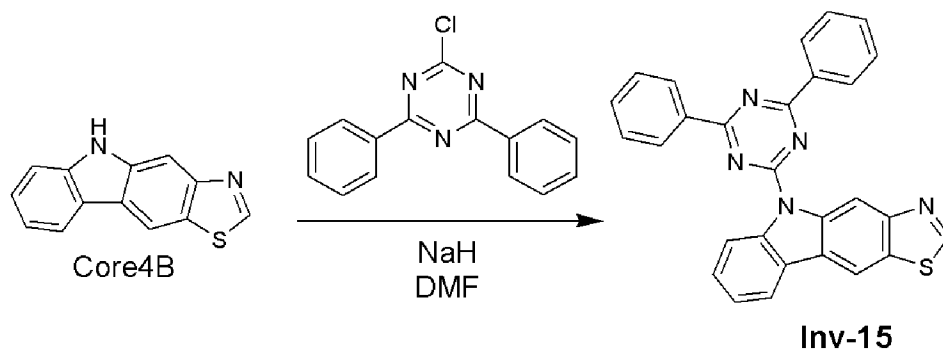
[303] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 Core4A 2.68g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-12 (4.46 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[304] GC-Mass (이론치: 531.63 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[305]

[306] [합성예 15] 화합물 Inv-15의 합성

[307]



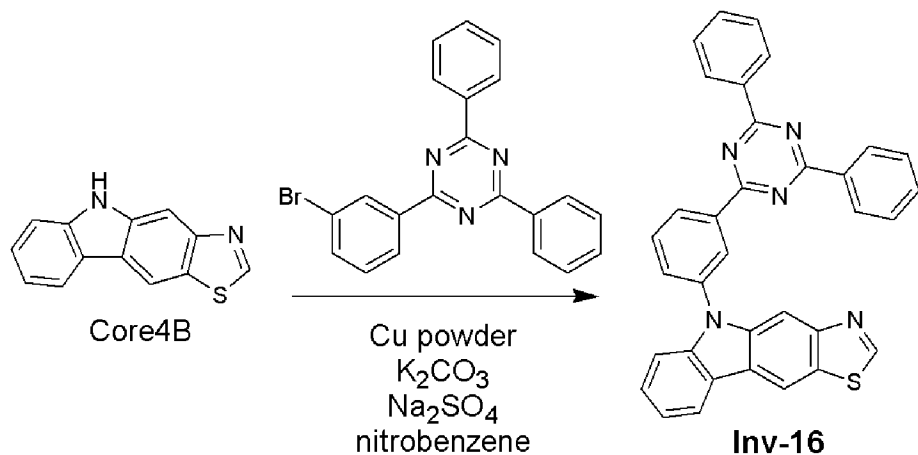
[308] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 Core4B 2.68g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-15 (3.76 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[309] GC-Mass (이론치: 455.53 g/mol, 측정치: 455 g/mol)

[310]

[311] [합성예 16] 화합물 Inv-16의 합성

[312]



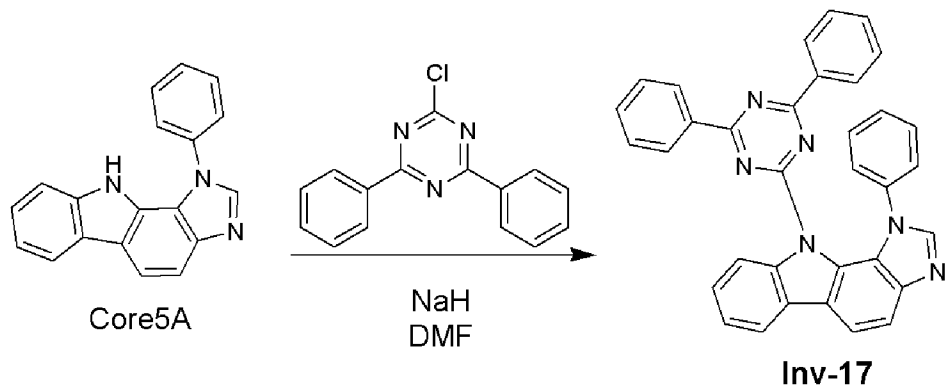
[313] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 Core4B 2.68g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-16 (4.46 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[314] GC-Mass (이론치: 531.63 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[315]

[316] [합성예 17] 화합물 Inv-17의 합성

[317]



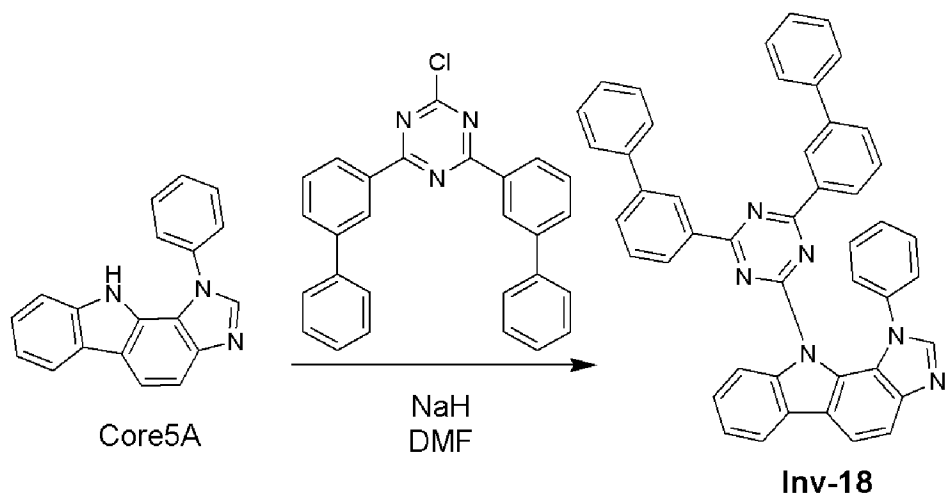
[318] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 5에서 합성된 화합물 Core5A 3.69g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-17 (4.63 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[319] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[320]

[321] [합성예 18] 화합물 Inv-18의 합성

[322]



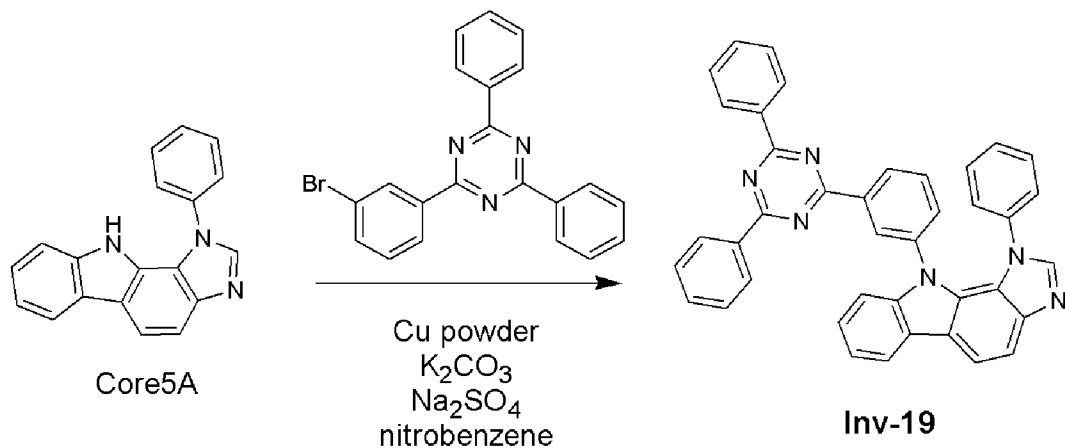
[323] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 5에서 합성된 화합물 Core5A 3.39g을 사용하고, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-chloro-1,3,5-triazine 6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-18 (5.43 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[324] GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[325]

[326] [합성예 19] 화합물 Inv-19의 합성

[327]



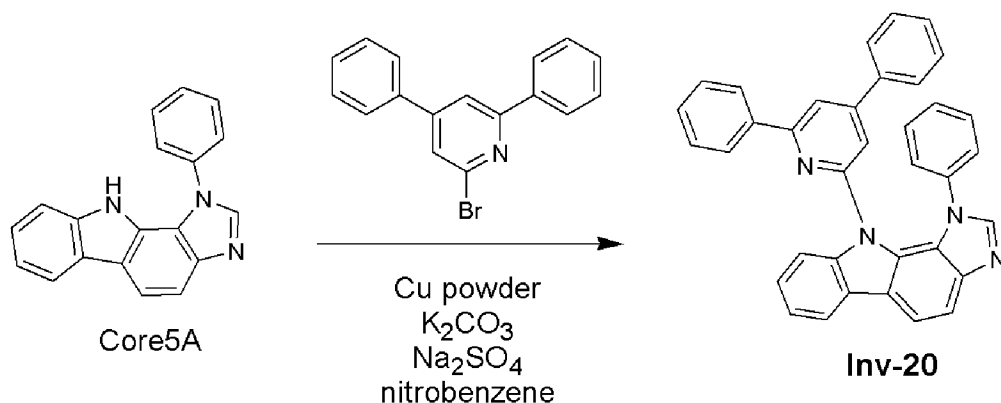
[328] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 5에서 합성된 화합물 Core5A 3.39g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-19 (4.95 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[329] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[330]

[331] [합성예 20] 화합물 Inv-20의 합성

[332]



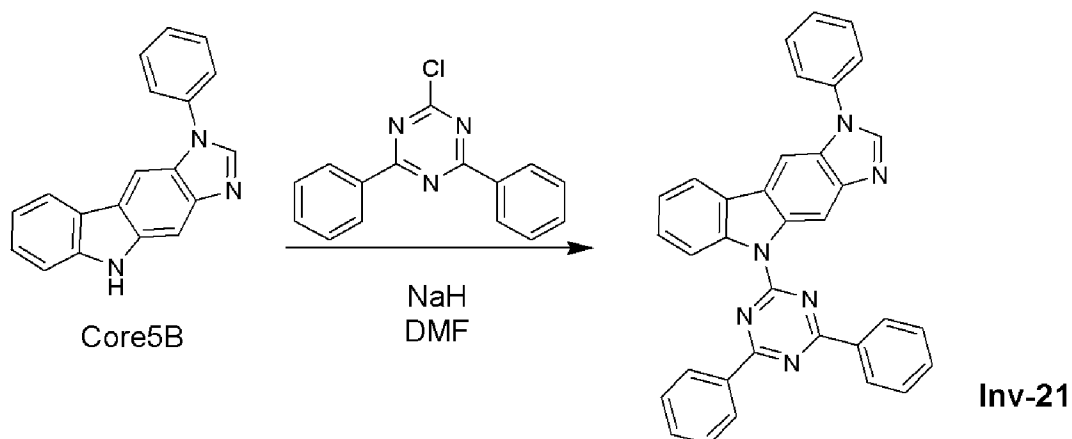
[333] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 5에서 합성된 Core5A를 사용하고, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-bromo-6-phenylpyridine 5.56g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-20 (4.17 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[334] GC-Mass (이론치: 512.60 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[335]

[336] [합성예 21] 화합물 Inv-21의 합성

[337]



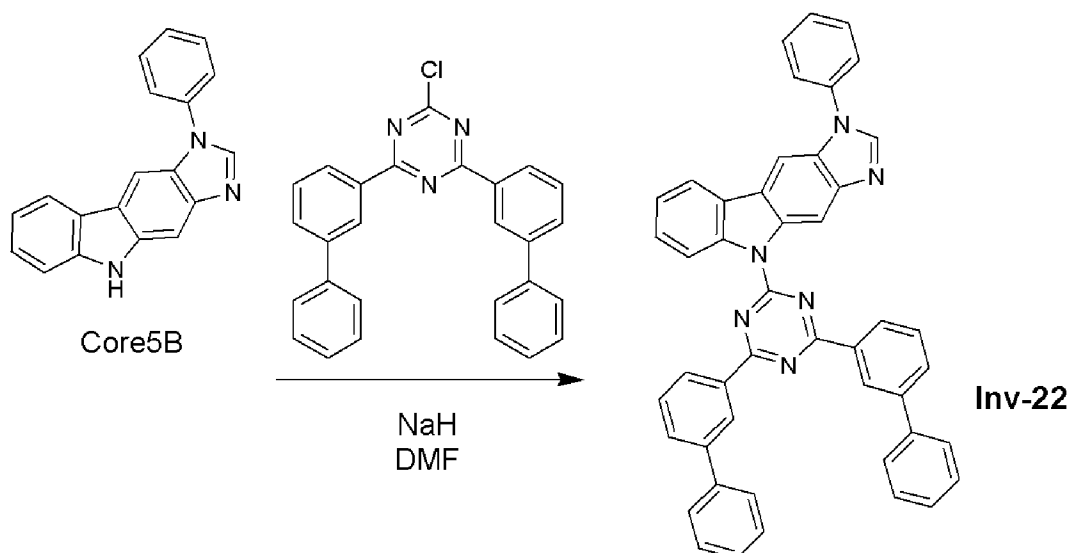
[338] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 5에서 합성된 화합물 Core5B 3.39g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-21 (4.01 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[339] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[340]

[341] [합성예 22] 화합물 Inv-22의 합성

[342]



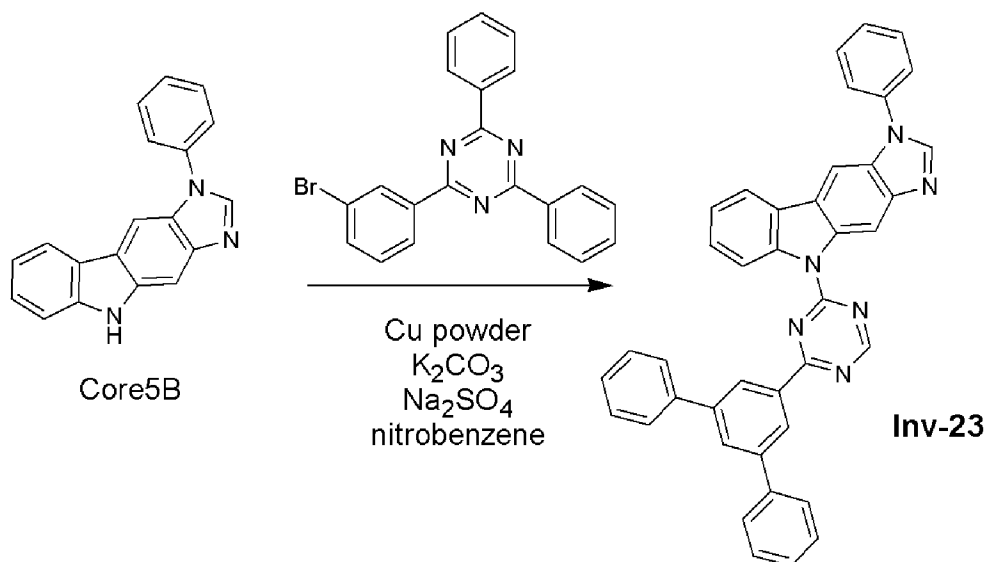
[343] 합성에 18에서 사용된 화합물 **Core5A** 대신 준비예 5에서 합성된 화합물 **Core5B** 3.39g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 **Inv-22** (5.43 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[344] GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[345]

[346] [합성예 23] 화합물 **Inv-23**의 합성

[347]



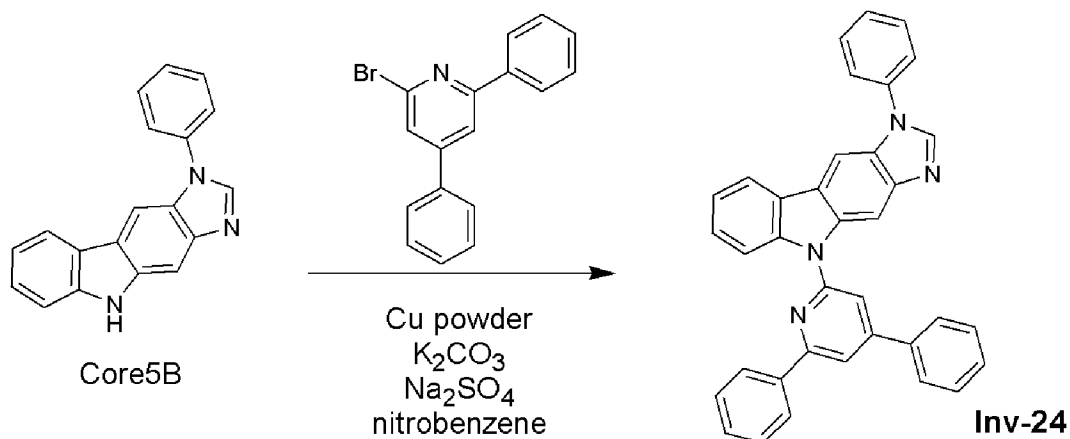
[348] 합성에 10에서 사용된 화합물 **Core3A** 대신 준비예 5에서 합성된 화합물 **Core5B** 3.39g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 **Inv-23** (4.88 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[349] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[350]

[351] [합성예 24] 화합물 **Inv-24**의 합성

[352]



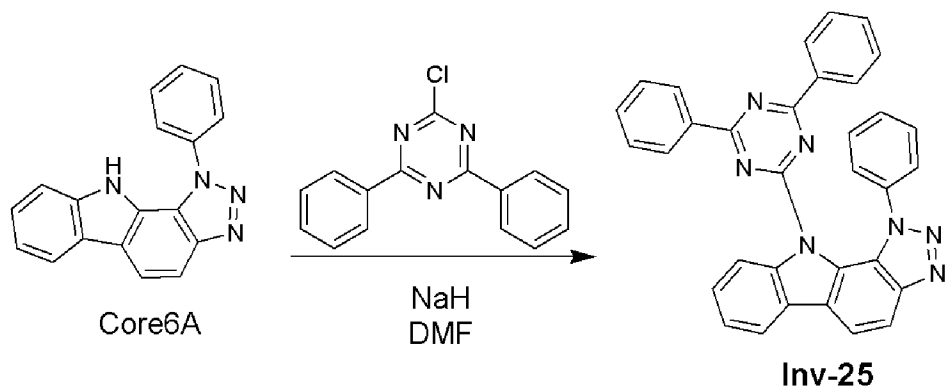
[353] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 5에서 합성된 화합물 Core5B 3.39g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-24 (3.99 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[354] GC-Mass (이론치: 512.60 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[355]

[356] [합성예 25] 화합물 Inv-25의 합성

[357]



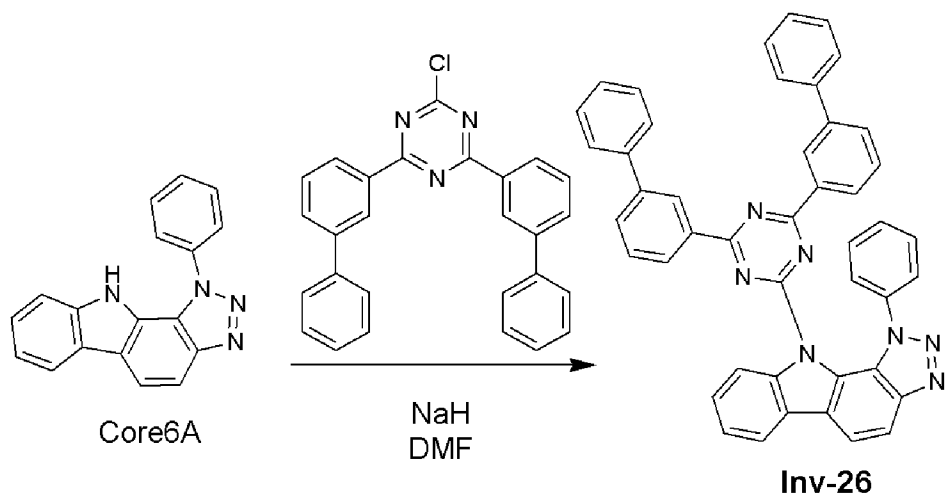
[358] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 6에서 합성된 화합물 Core6A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-25 (4.20 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[359] GC-Mass (이론치: 515.57 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[360]

[361] [합성예 26] 화합물 Inv-26의 합성

[362]



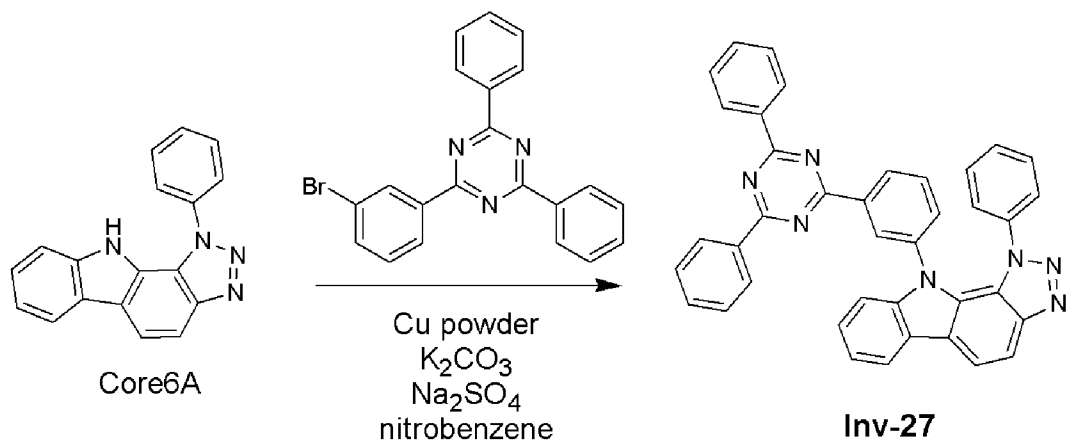
[363] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 6에서 합성된 화합물 Core6A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-26 (5.20 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[364] GC-Mass (이론치: 667.76 g/mol, 측정치: 667 g/mol)

[365]

[366] [합성예 27] 화합물 Inv-27의 합성

[367]



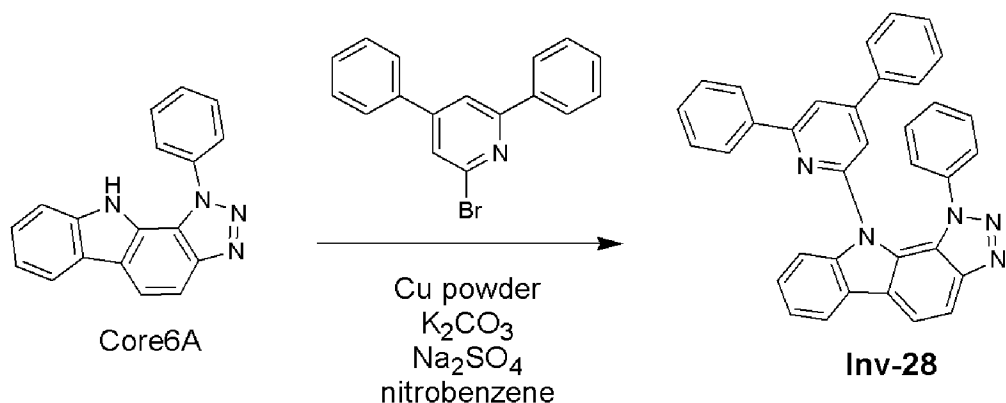
[368] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 6에서 합성된 화합물 Core6A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-27 (4.68 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[369] GC-Mass (이론치: 591.66 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[370]

[371] [합성예 28] 화합물 Inv-28의 합성

[372]



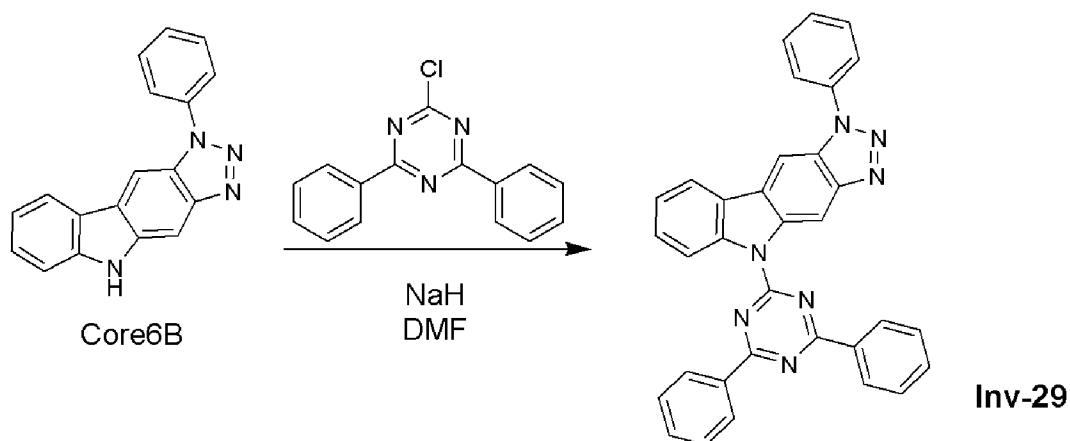
[373] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 6에서 합성된 화합물 Core6A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-28 (4.00 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[374] GC-Mass (이론치: 513.59 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[375]

[376] [합성예 29] 화합물 Inv-29의 합성

[377]



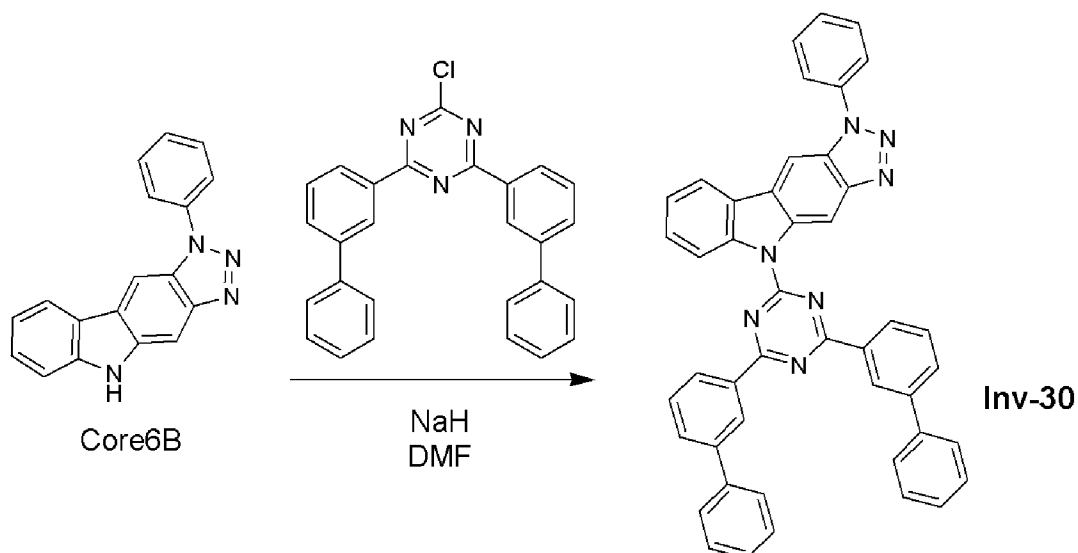
[378] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 6에서 합성된 화합물 Core6B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-29 (4.14 g, 수율: 67 %)를 얻었다.

[379] GC-Mass (이론치: 515.57 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[380]

[381] [합성예 30] 화합물 Inv-30의 합성

[382]



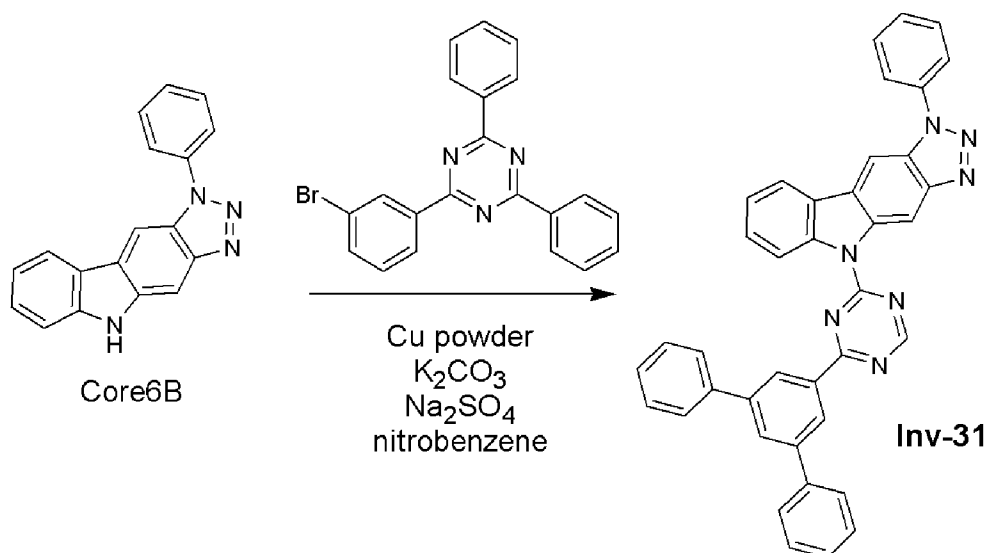
[383] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 6에서 합성된 화합물 Core6B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-30 (5.28 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[384] GC-Mass (이론치: 667.76 g/mol, 측정치: 667 g/mol)

[385]

[386] [합성예 31] 화합물 Inv-31의 합성

[387]



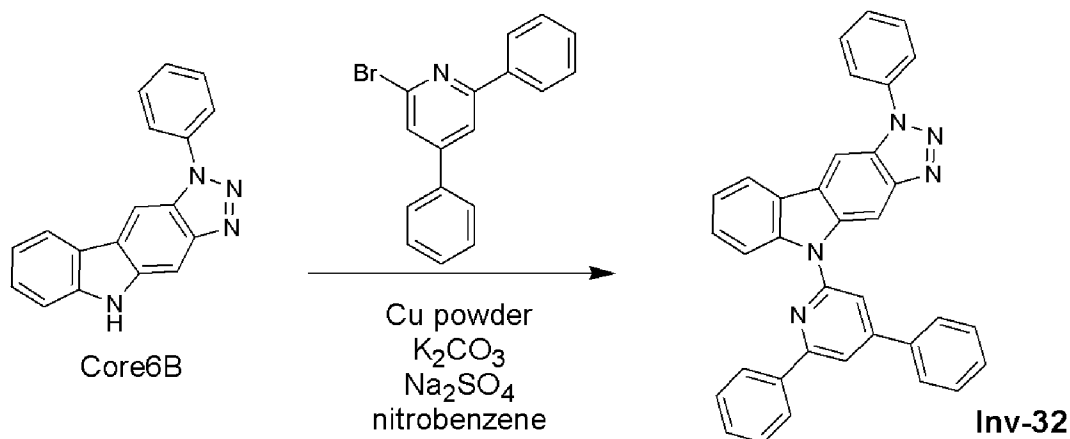
[388] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 6에서 합성된 화합물 Core6B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-31 (4.89 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[389] GC-Mass (이론치: 591.66 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[390]

[391] [합성예 32] 화합물 Inv-32의 합성

[392]



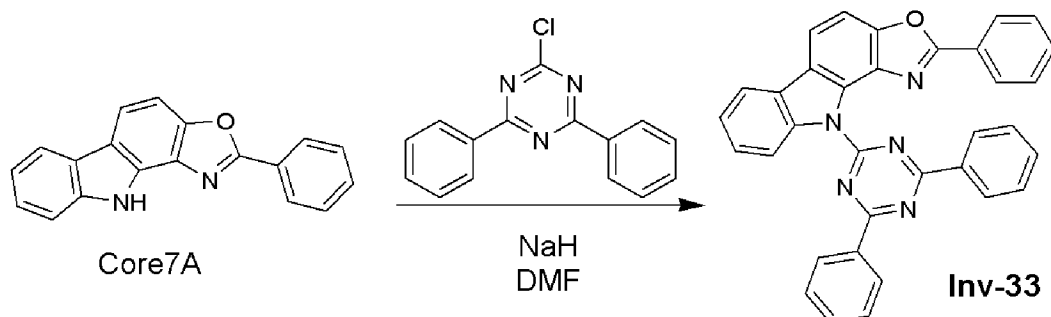
[393] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 6에서 합성된 화합물 Core6B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-32 (4.31 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[394] GC-Mass (이론치: 513.59 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[395]

[396] [합성예 33] 화합물 Inv-33의 합성

[397]



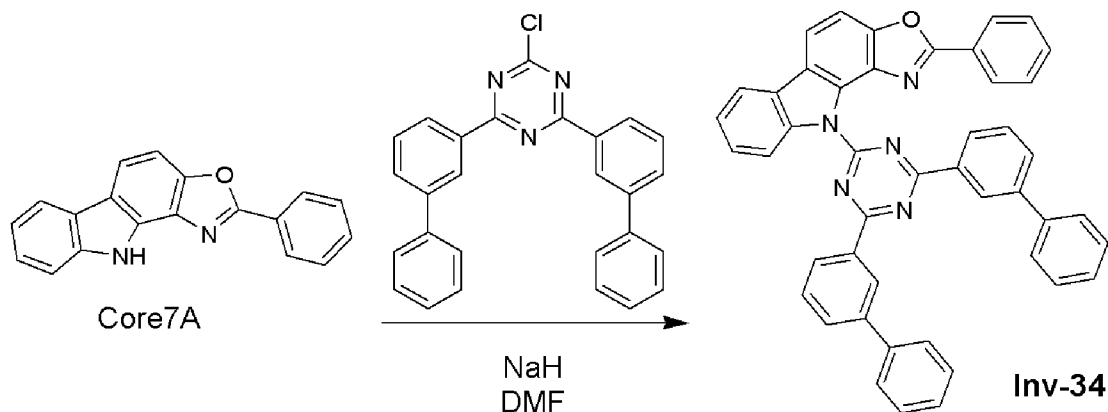
[398] 합성에 9에서 합성된 화합물 Core3A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 Core7A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-33 (4.07 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[399] GC-Mass (이론치: 515.56 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[400]

[401] [합성예 34] 화합물 Inv-34의 합성

[402]



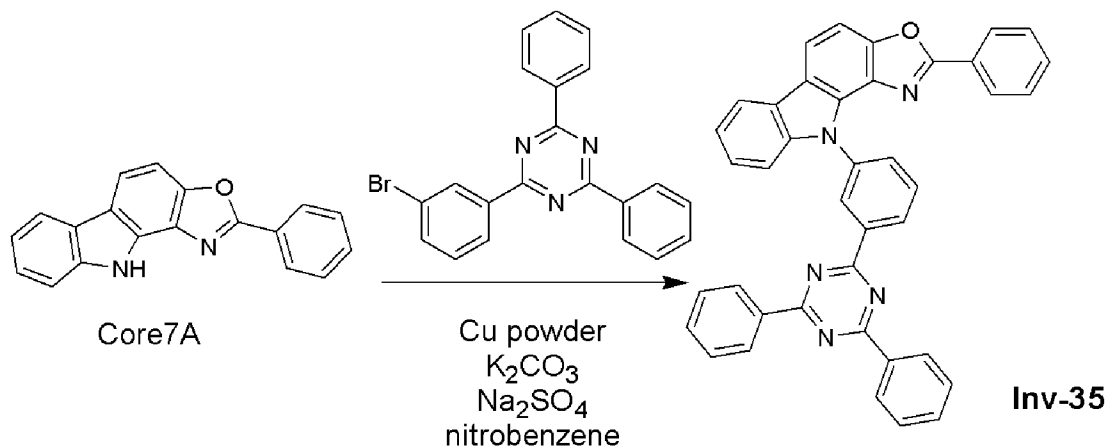
[403] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 Core7A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-34 (5.12 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

[404] GC-Mass (이론치: 667.76 g/mol, 측정치: 667 g/mol)

[405]

[406] [합성예 35] 화합물 Inv-35의 합성

[407]



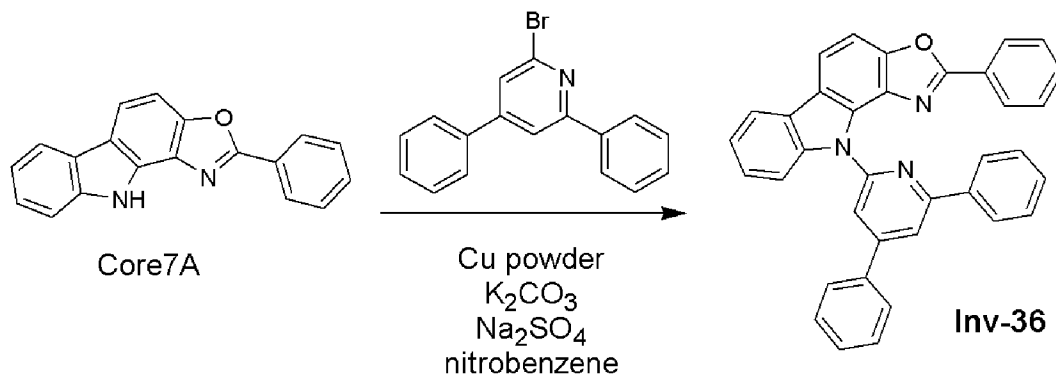
[408] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 Core7A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-35 (4.60 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[409] GC-Mass (이론치: 591.66 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[410]

[411] [합성예 36] 화합물 Inv-36의 합성

[412]



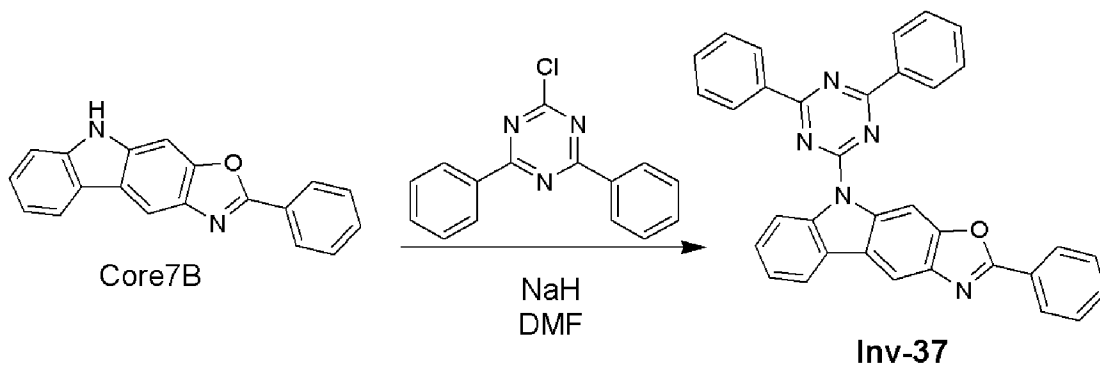
[413] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 Core7A 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-36 (3.69 g, 수율: 60 %)를 얻었다.

[414] GC-Mass (이론치: 513.59 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[415]

[416] [합성예 37] 화합물 Inv-37의 합성

[417]



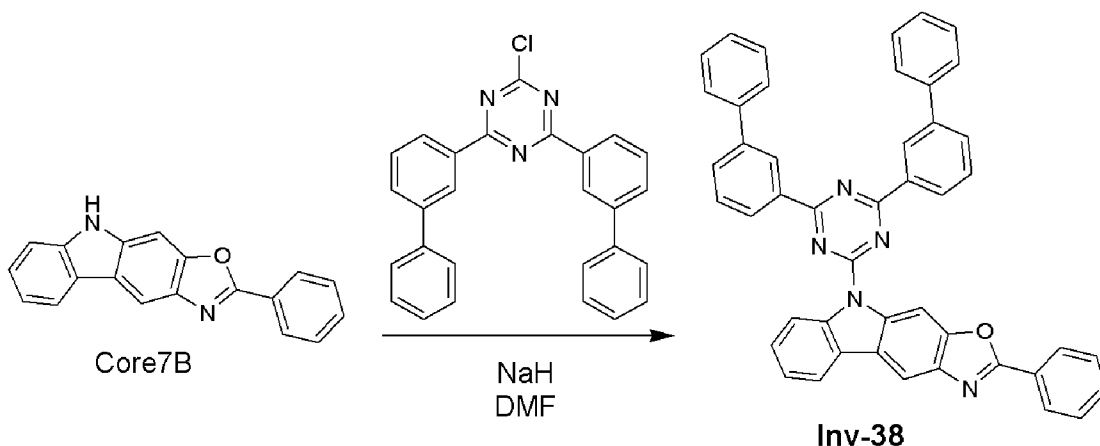
[418] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 core7B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-37 (4.14 g, 수율 67 %)를 얻었다.

[419] GC-Mass (이론치: 515.56 g/mol, 측정치: 515 g/mol)

[420]

[421] [합성예 38] 화합물 Inv-38의 합성

[422]



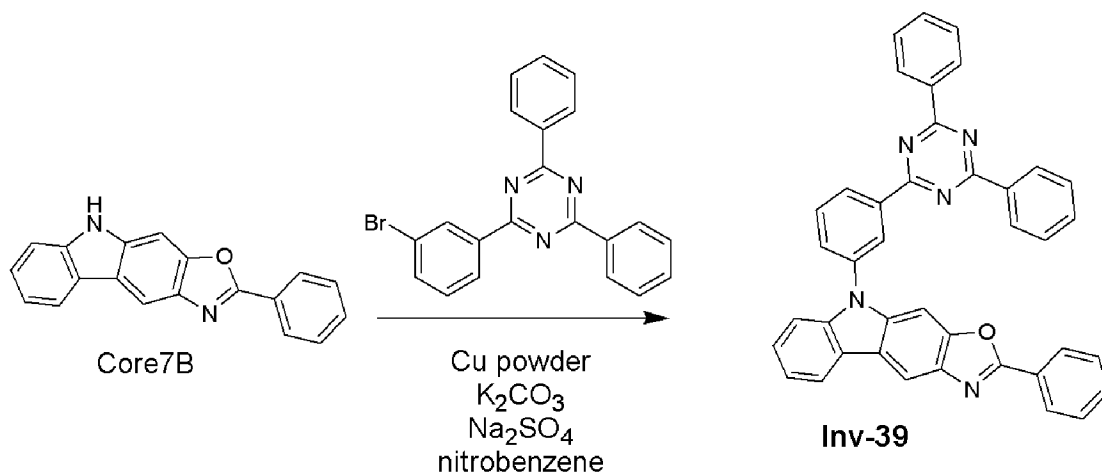
[423] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 7에서 합성된 화합물 Core7B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-38 (4.96 g, 수율: 62 %)를 얻었다.

[424] GC-Mass (이론치: 667.76 g/mol, 측정치: 667 g/mol)

[425]

[426] [합성예 39] 화합물 Inv-39의 합성

[427]



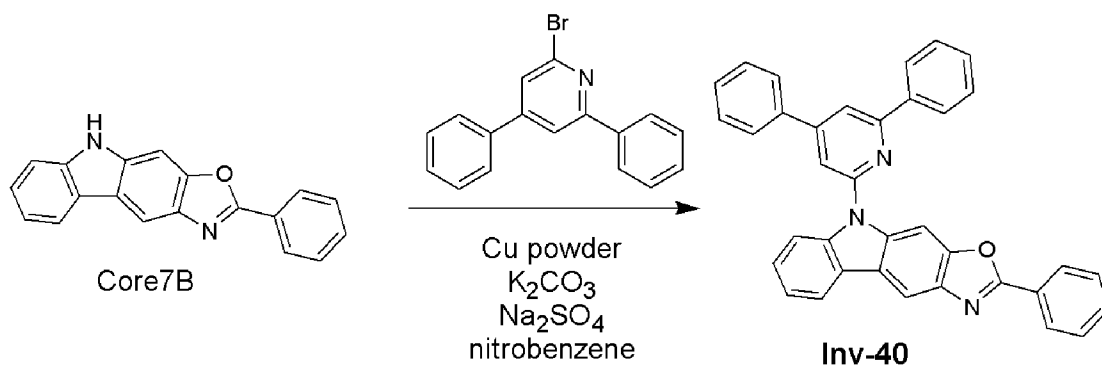
[428] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 7에서 합성된 화합물 Core7B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-39 (4.82 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[429] GC-Mass (이론치: 591.66 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[430]

[431] [합성예 40] 화합물 Inv-40의 합성

[432]



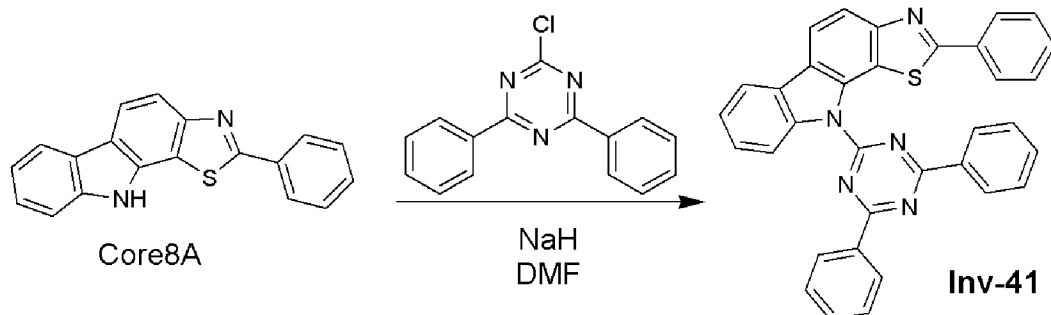
[433] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 7에서 합성된 화합물 Core7B 3.4g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-40 (4.00 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[434] GC-Mass (이론치: 513.59 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[435]

[436] [합성예 41] 화합물 Inv-41의 합성

[437]



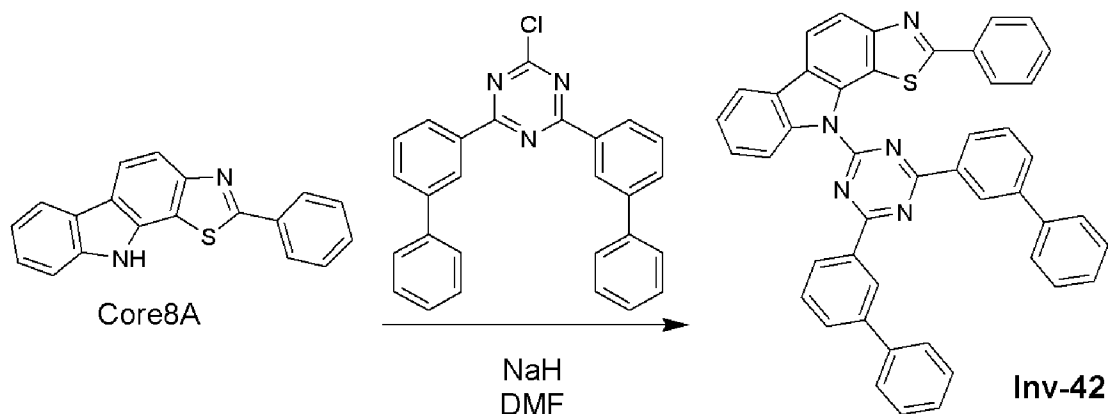
[438] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 8에서 합성된 화합물 Core8A 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-41 (4.07 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

[439] GC-Mass (이론치: 531.63 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[440]

[441] [합성 예 42] 화합물 Inv-42의 합성

[442]



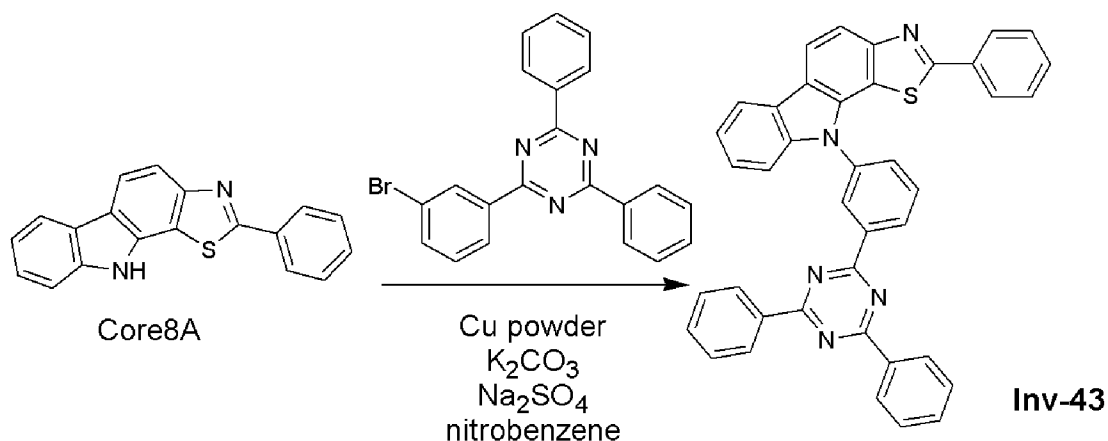
[443] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 8에서 합성된 화합물 Core8A 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-42 (4.99 g, 수율: 61 %)를 얻었다.

[444] GC-Mass (이론치: 683.82 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[445]

[446] [합성 예 43] 화합물 Inv-43의 합성

[447]



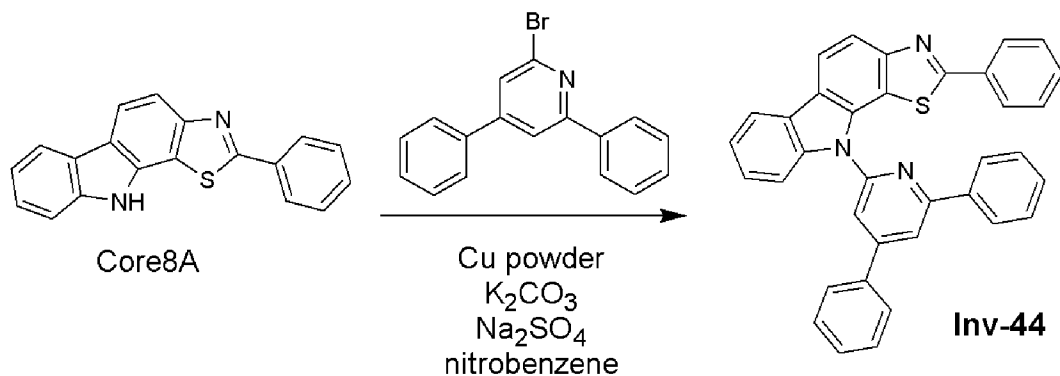
[448] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 8에서 합성된 화합물 Core8A 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-43 (4.51 g, 수율: 62 %)를 얻었다.

[449] GC-Mass (이론치: 607.73 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[450]

[451] [합성 예 44] 화합물 Inv-44의 합성

[452]



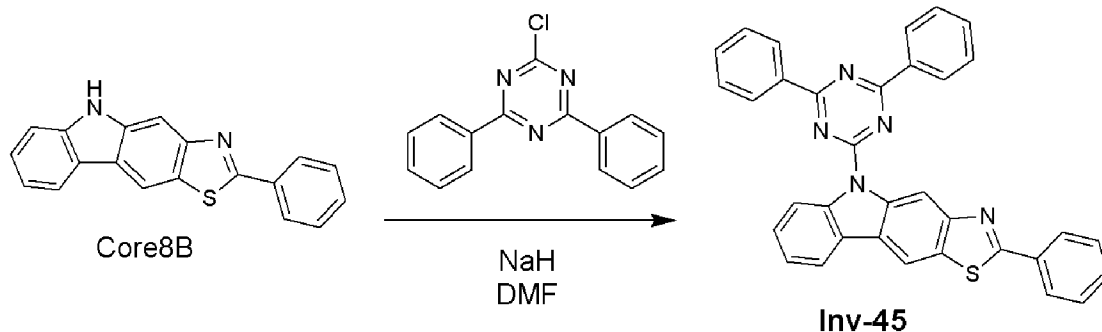
[453] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 8에서 합성된 화합물 Core8A 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-44 (4.12 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[454] GC-Mass (이론치: 529.65 g/mol, 측정치: 529 g/mol)

[455]

[456] [합성예 45] 화합물 Inv-45의 합성

[457]



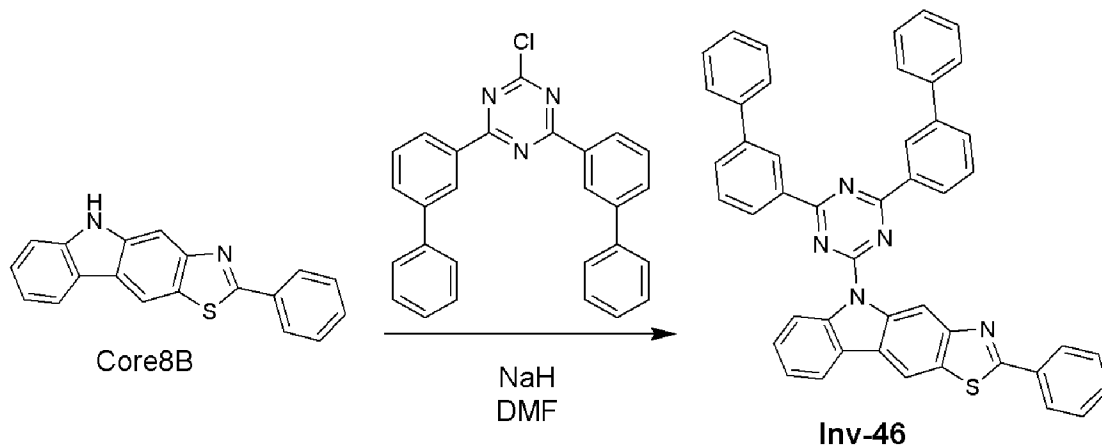
[458] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 8에서 합성된 화합물 Core8B 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-45 (4.33 g, 수율 66 %)를 얻었다.

[459] GC-Mass (이론치: 531.63 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[460]

[461] [합성예 46] 화합물 Inv-46의 합성

[462]



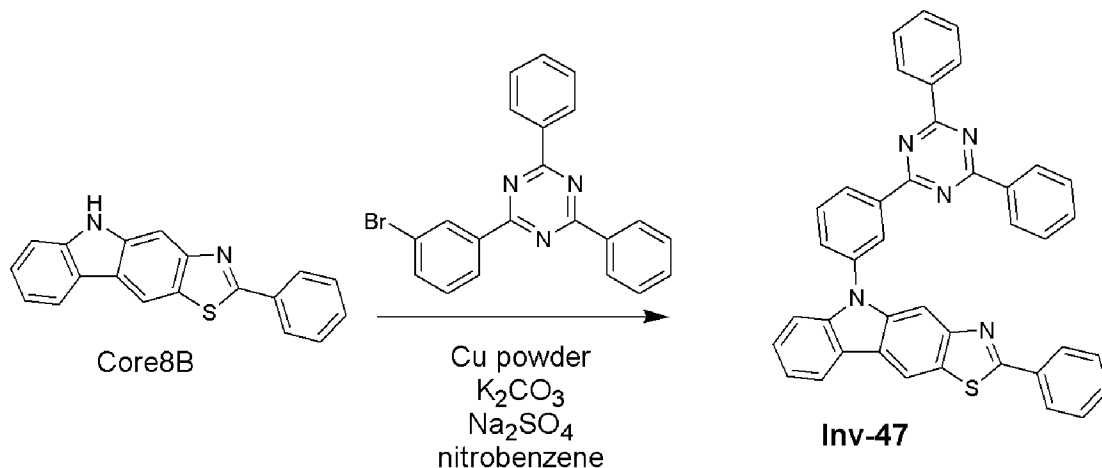
[463] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 8에서 합성된 화합물 Core8B 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-46 (5.41 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[464] GC-Mass (이론치: 683.82 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[465]

[466] [합성예 47] 화합물 Inv-47의 합성

[467]



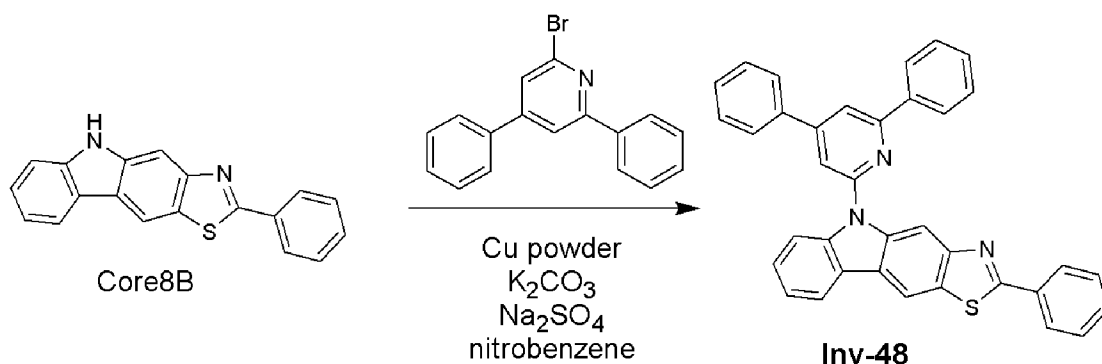
[468] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 8에서 합성된 화합물 Core8B 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-47 (4.59 g, 수율: 63 %)를 얻었다.

[469] GC-Mass (이론치: 607.73 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[470]

[471] [합성예 48] 화합물 Inv-48의 합성

[472]



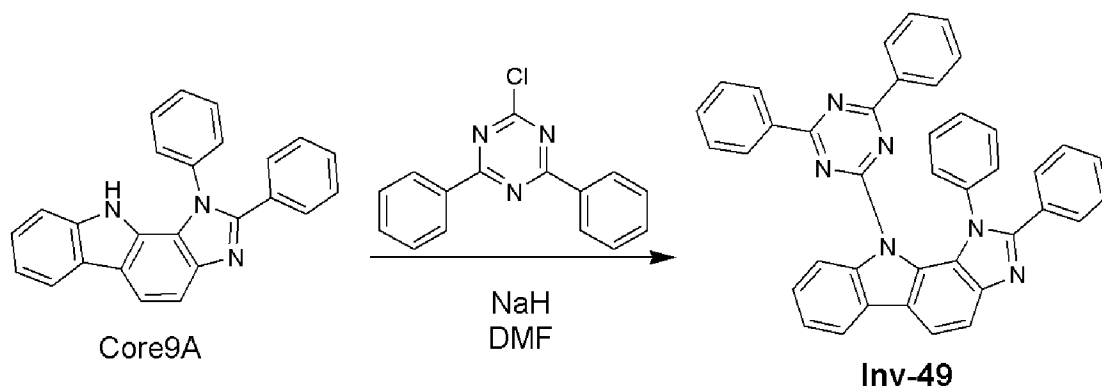
[473] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 8에서 합성된 화합물 Core8B 3.6g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-48 (4.25 g, 수율: 67 %)를 얻었다.

[474] GC-Mass (이론치: 529.65 g/mol, 측정치: 529 g/mol)

[475]

[476] [합성예 49] 화합물 Inv-49의 합성

[477]



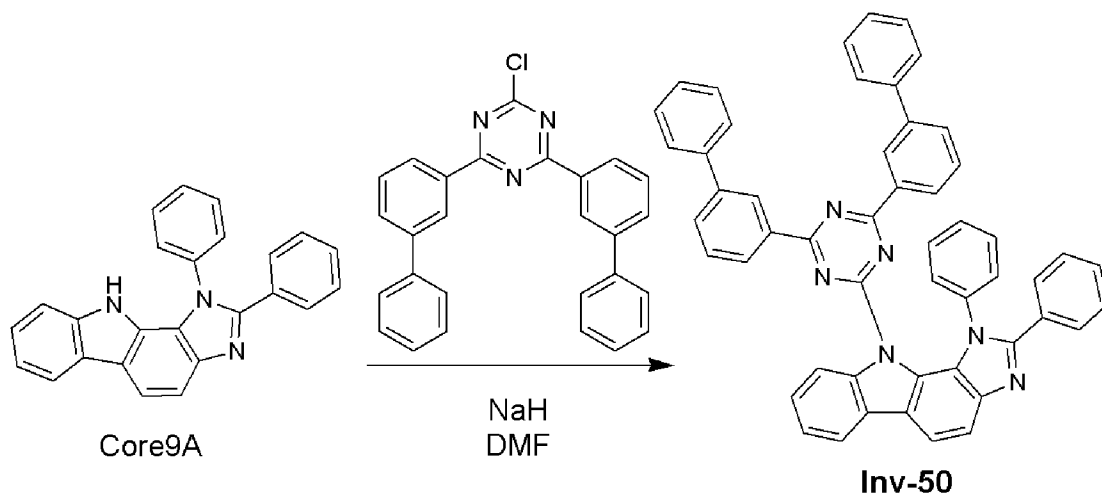
[478] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9A 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-49 (4.60 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[479] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[480]

[481] [합성 예 50] 화합물 Inv-50의 합성

[482]



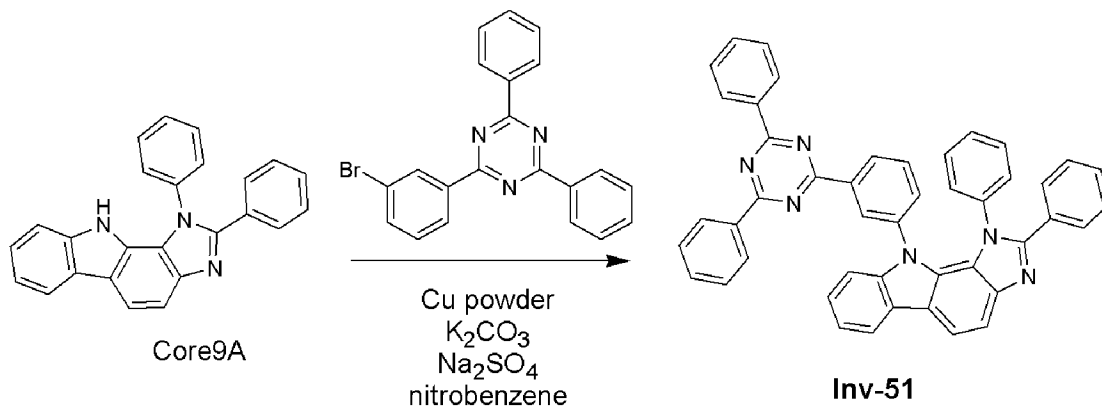
[483] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9A 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물인 Inv-50 (5.34 g, 수율: 60 %)를 얻었다.

[484] GC-Mass (이론치: 742.87 g/mol, 측정치: 742 g/mol)

[485]

[486] [합성 예 51] 화합물 Inv-51의 합성

[487]



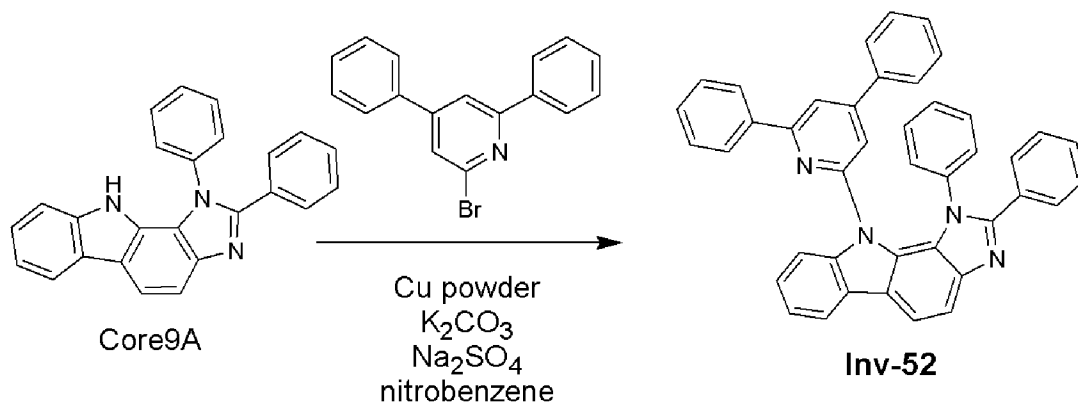
[488] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9A 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-51 (5.11 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

[489] GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[490]

[491] [합성 예 52] 화합물 Inv-52의 합성

[492]



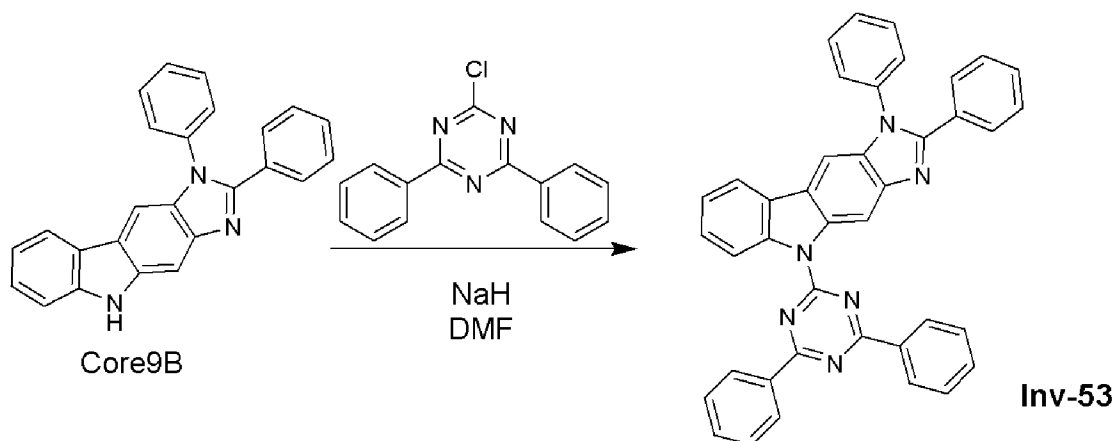
[493] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9A 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-52 (4.58 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[494] GC-Mass (이론치: 588.70 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[495]

[496] [합성 예 53] 화합물 Inv-53의 합성

[497]



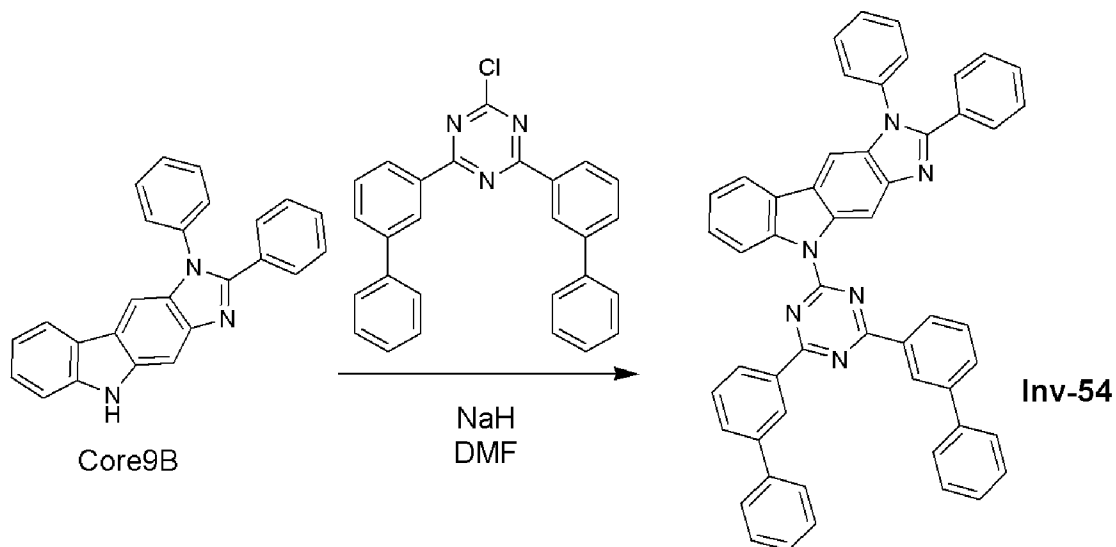
[498] 합성에 9에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9B 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 9와 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-53 (4.60 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[499] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[500]

[501] [합성예 54] 화합물 Inv-54의 합성

[502]



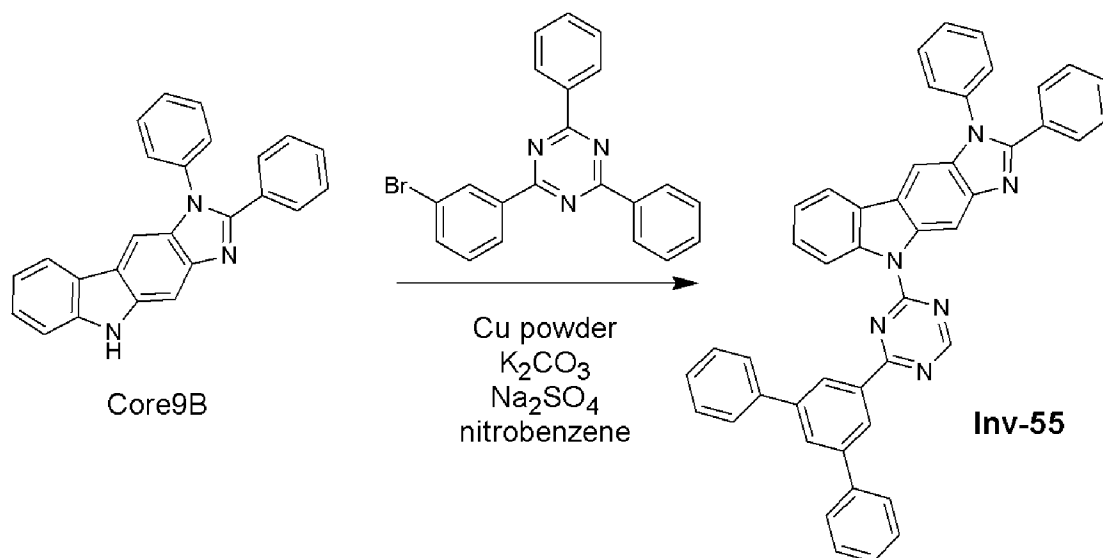
[503] 합성에 18에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비에 9에서 합성된 화합물 Core9B 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 18과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-54 (5.43 g, 수율: 61 %)를 얻었다.

[504] GC-Mass (이론치: 742.87 g/mol, 측정치: 742 g/mol)

[505]

[506] [합성예 55] 화합물 Inv-55의 합성

[507]



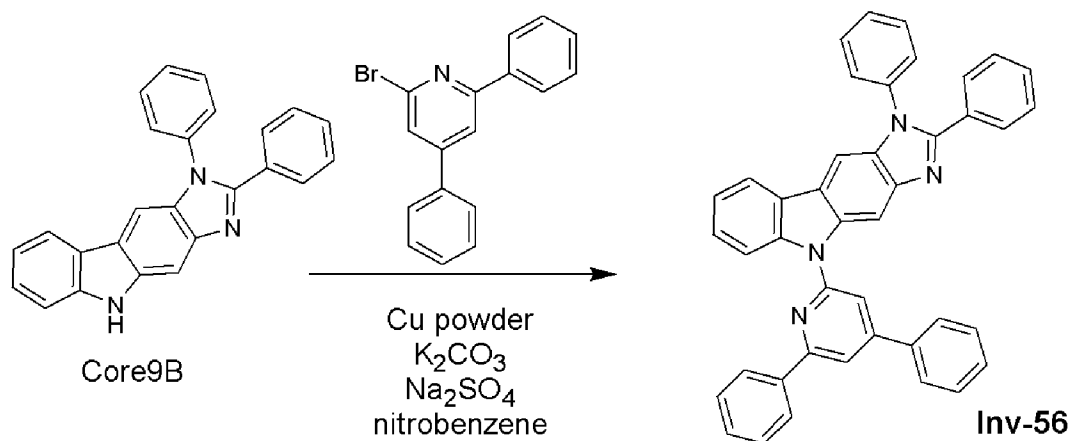
[508] 합성에 10에서 사용된 화합물 Core3A 대신 준비예 9에서 합성된 화합물 Core9B 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-55 (5.11 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

[509] GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[510]

[511] [합성예 56] 화합물 Inv-56의 합성

[512]



[513] 합성에 20에서 사용된 화합물 Core5A 대신 준비예 9에서 합성된 화합물 Core9B 4.3g을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 20과 동일한 방법으로 수행하여 화합물 Inv-56 (4.44 g, 수율: 63 %)를 얻었다.

[514] GC-Mass (이론치: 588.70 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[515]

[516] [실시예 1] 유기 EL 소자의 제조

[517] 합성에 1에서 합성된 화합물 Inv-1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 유기 EL 소자를 제작하였다.

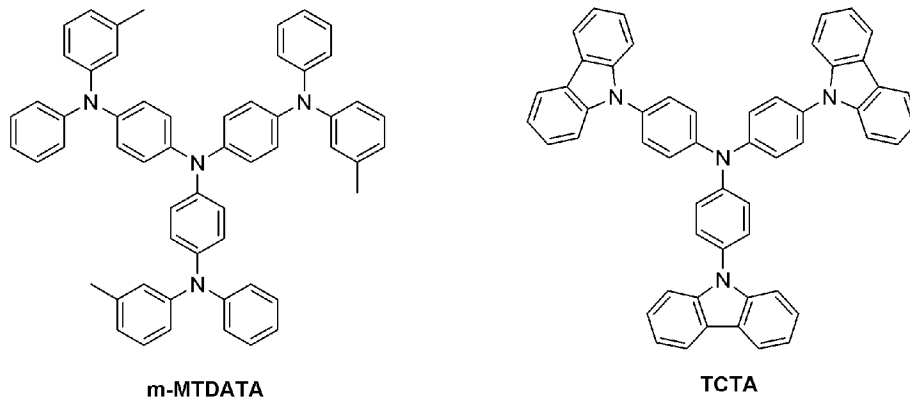
[518] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤,

메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

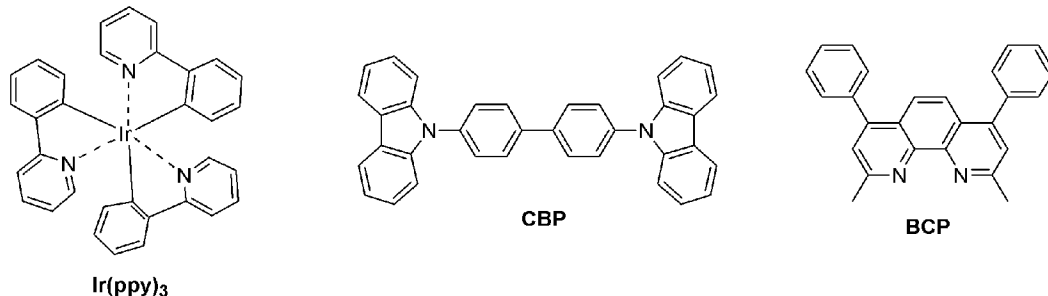
[519] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/화합물 Inv-1 + 10 % Ir(ppy)₃ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[520] 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[521]



[522]



[523]

[실시예 2 ~ 56] 유기 EL 소자의 제조

[524] 실시예 1에서 발광층 형성시 호스트 물질로 사용된 화합물 Inv-1 대신 합성에 2 내지 56에서 각각 합성된 화합물 Inv-2 ~ Inv-56을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[526]

[비교예 1] 유기 EL 소자의 제조

[527] 실시예 1에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로 사용된 화합물 Inv-1 대신 CBP (4,4'-dicarbazolybiphenyl)를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 과정으로 유기 EL 소자를 제작하였다. 사용된 CBP의 구조는 실시예 1에 기재된 바와 같다.

[529]

[평가예]

[530] 실시예 1 내지 56, 및 비교예 1에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그

결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[532] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A)
실시예 1	Inv-1	6.60	42.4
실시예 2	Inv-2	6.55	42.3
실시예 3	Inv-3	6.60	42.5
실시예 4	Inv-4	6.62	41.2
실시예 5	Inv-5	6.68	41.6
실시예 6	Inv-6	6.70	42.0
실시예 7	Inv-7	6.59	41.5
실시예 8	Inv-8	6.60	41.6
실시예 9	Inv-9	6.70	41.3
실시예 10	Inv-10	6.65	42.2
실시예 11	Inv-11	6.71	41.1
실시예 12	Inv-12	6.60	42.3
실시예 13	Inv-13	6.65	43.2
실시예 14	Inv-14	6.63	41.5
실시예 15	Inv-15	6.60	43.2
실시예 16	Inv-16	6.58	42.3
실시예 17	Inv-17	6.50	41.5
실시예 18	Inv-18	6.55	41.6
실시예 19	Inv-19	6.60	41.3
실시예 20	Inv-20	6.65	40.8
실시예 21	Inv-21	6.66	40.2
실시예 22	Inv-22	6.72	42.5
실시예 23	Inv-23	6.60	41.2
실시예 24	Inv-24	6.63	41.1
실시예 25	Inv-25	6.65	40.9
실시예 26	Inv-26	6.51	40.1
실시예 27	Inv-27	6.59	41.5
실시예 28	Inv-28	6.51	40.9
실시예 29	Inv-29	6.60	41.1

실시예 30	Inv-30	6.65	40.2
실시예 31	Inv-31	6.70	42.0
실시예 32	Inv-32	6.65	42.3
실시예 33	Inv-33	6.62	41.2
실시예 34	Inv-34	6.63	42.3
실시예 35	Inv-35	6.61	41.7
실시예 36	Inv-36	6.60	41.5
실시예 37	Inv-37	6.55	40.6
실시예 38	Inv-38	6.60	41.3
실시예 39	Inv-39	6.65	41.8
실시예 40	Inv-40	6.58	40.2
실시예 41	Inv-41	6.70	41.5
실시예 42	Inv-42	6.60	42.2
실시예 43	Inv-43	6.63	41.1
실시예 44	Inv-44	6.65	40.9
실시예 45	Inv-45	6.53	40.1
실시예 46	Inv-46	6.55	41.5
실시예 47	Inv-47	6.50	40.9
실시예 48	Inv-48	6.70	41.1
실시예 49	Inv-49	6.60	41.2
실시예 50	Inv-50	6.72	42.0
실시예 51	Inv-51	6.70	41.3
실시예 52	Inv-52	6.62	42.2
실시예 53	Inv-53	6.63	41.3
실시예 54	Inv-54	6.60	42.7
실시예 55	Inv-55	6.65	41.5
실시예 56	Inv-56	6.60	41.9
비교예 1	CBP	6.93	38.2

[533] 상기 표1에서 알 수 있는 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(화합물 Inv-1 ~ 화합물 Inv-56)을 발광층 재료(호스트 물질)로 사용한 녹색 유기 EL 소자(실시예 1 내지 56에서 각각 제조된 유기 EL 소자)는, 종래 CBP를 호스트 물질로 사용한

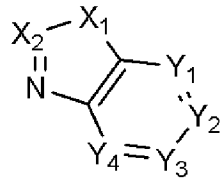
녹색 유기 EL 소자(비교예1의 유기 EL 소자)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

X_1 은 NR_1 , O, S, Se, SiR_2R_3 , 및 CR_4R_5 로 이루어진 군에서 선택되고;

X_2 는 N 또는 CR_6 이며;

Y_1 내지 Y_4 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이고, 이때 복수개의 CR_7 은 서로 동일하거나 상이하며,

단, Y_1 내지 Y_4 중에서 적어도 하나는 CR_7 이고, 이는 인접하는 기와 축합하여 하기 화학식 2로 표현된 축합고리를 형성하며;

R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의

시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의

헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환

또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는

비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의

아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는

비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의

알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는

비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의

아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의

아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와

축합고리를 형성하는 기이고,

이때 R_1 내지 R_7 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기,

아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기,

아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기,

아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소,

할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,

핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기,

핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$

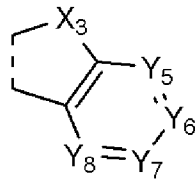
의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, C_1

$\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, C_6

$\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의

아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된
군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 화학식 1의 화합물과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며;

X_3 는 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 로 이루어진
군에서 선택되며;

Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의
알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는
비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는
비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지
60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,
치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_3
 $\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,
치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6
 $\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기,
치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는
비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,
이때 상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 시클로알킬기,
헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기,
아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기,
아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각
독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의
시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$
의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의
알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보레인기, $C_6 \sim C_{60}$
의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$
의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, C_6
 $\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된
군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며;
 Y_5 내지 Y_8 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_8 이고, 이때 복수개의 CR_8
은 서로 동일하거나 상이하며;
 R_8 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의

알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 축합고리를 형성하는 기이고,

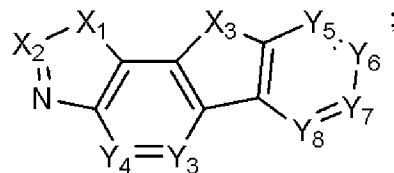
이때 R_8 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[청구항 2]

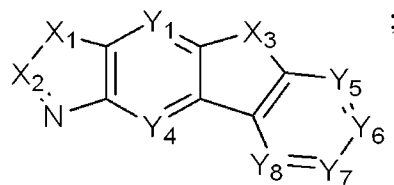
제1항에 있어서,

하기 화학식 3 내지 화학식 12로 이루어진 군에서 선택된 것으로 표시되는 화합물:

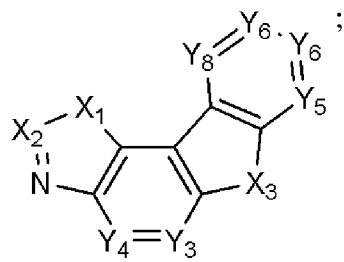
[화학식 3]



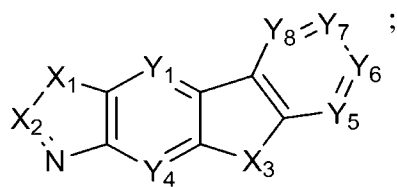
[화학식 4]



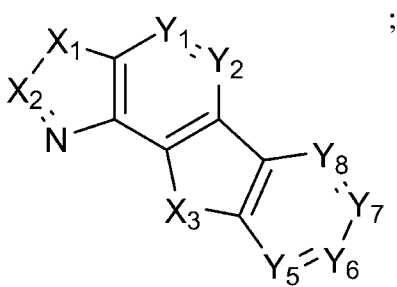
[화학식 5]



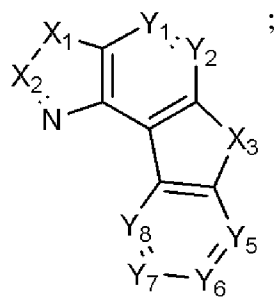
[화학식 6]



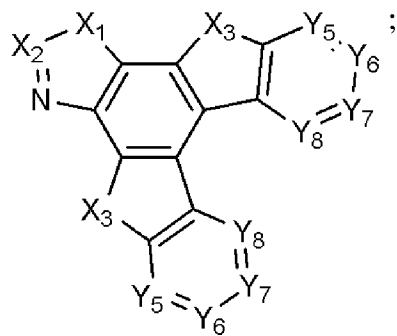
[화학식 7]



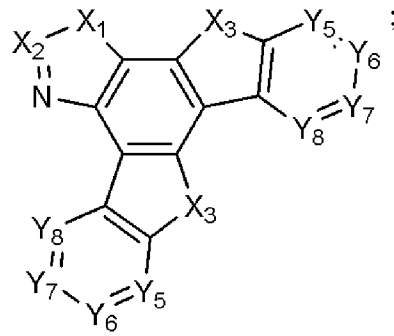
[화학식 8]



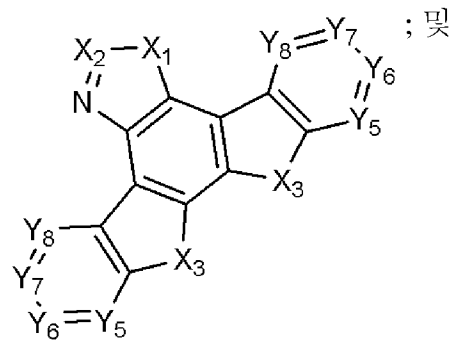
[화학식 9]



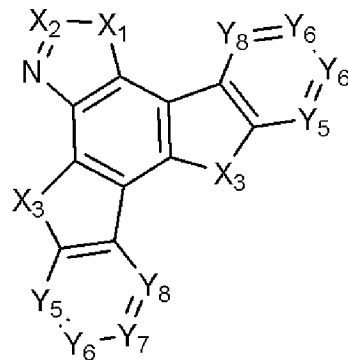
[화학식 10]



[화학식 11]



[화학식 12]



(상기 화학식 3 내지 12에서,

X_1 내지 X_3 는 각각 독립적으로 제1항에서 정의한 바와 동일하고,

이때 복수개의 X_3 는 서로 동일하거나 상이하며,

Y_1 내지 Y_4 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이고, 이때 복수개의 CR_7 은 서로 동일하거나 상이하며,

R_7 은 제1항에서 정의한 바와 동일하고,

Y_5 내지 Y_8 은 각각 독립적으로 제1항에서 정의한 바와 동일하며,

이때 복수개의 Y_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 복수개의 Y_6 은

서로 동일하거나 상이하며, 복수개의 Y_7 은 서로 동일하거나

상이하고, 복수개의 Y_8 은 서로 동일하거나 상이함).

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 X_3 는 $N(Ar_1)$ 이고,

상기 Ar_1 은 제1항에서 정의한 바와 같은 것이 특징인 화합물.

[청구항 4]

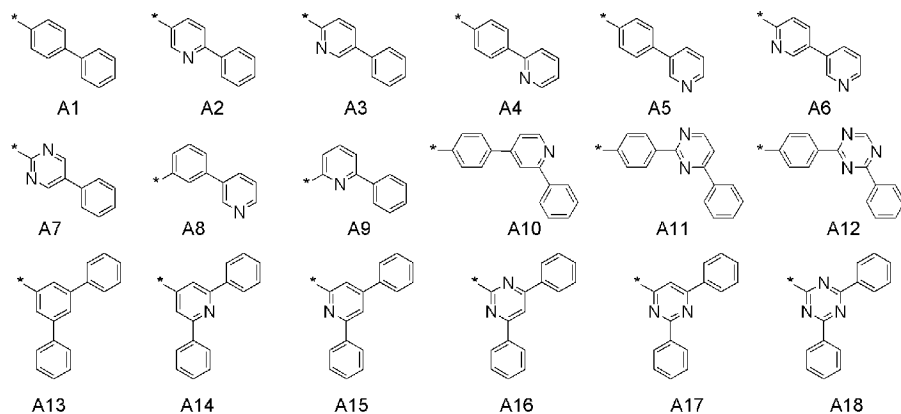
제1항에 있어서,
 상기 X_1 은 NR_1 이고,
 상기 X_3 는 $N(Ar_1)$ 이며,
 상기 R_1 및 Ar_1 은 각각 제1항에서 정의한 바와 동일한 것이 특징인 화합물.

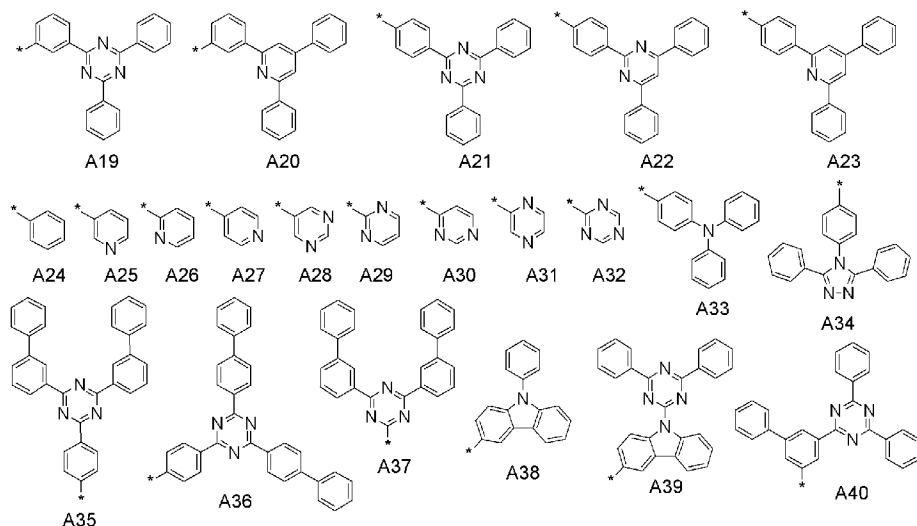
[청구항 5]

제1항에 있어서,
 상기 R_1 내지 R_8 , 및 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되고;
 상기 R_1 내지 R_8 , 및 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보레인지, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있는 것이 특징인 화합물.

[청구항 6]

제1항에 있어서,
 상기 R_1 내지 R_8 , 및 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 및 하기 치환기 A1 내지 A40으로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:





[청구항 7]

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,
상기 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 8]

제7항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 9]

제8항에 있어서,
상기 화합물은 발광층의 호스트인 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/001819

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

3. ☐ Claims Nos.:
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

Invention 1: A part of the invention as in claims 1-9 relates to a compound represented by chemical formula 3, or to an organic electroluminescent element including the same.

Invention 2: A part of the invention as in claims 1-9 relates to a compound represented by chemical formula 4, or to an organic electroluminescent element including the same.

Invention 3: A part of the invention as in claims 1-9 relates to a compound represented by chemical formula 6, or to an organic electroluminescent element including the same.

Invention 4: A part of the invention as in claims 1-9 relates to a compound represented by chemical formula 7, or to an organic electroluminescent element including the same.

Invention 5: A part of the invention as in claims 1-9 relates to a compound represented by chemical formula 1 which does not correspond to chemical formulae 3, 4, 6 and 7, or to an organic electroluminescent element including the same.

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:

4. ☒ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:
A part of claims 1 to 9 (Invention 1)

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/001819**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C07D 487/04(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i***

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 487/04; C07D 409/12; C09B 23/00; B41M 5/00; C07D 209/82; C07D 333/76; C09K 11/06; C07D 401/14; H01L 51/50

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN, google, Keywords: indenoindole, carbazole, fluorene, organic light emitting device

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2000-273331 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 03 October 2000 See the entire document	1-9
A	GUO, Jian-Guang et al., "New Fluorene derivatives based on 3,9-dihydrofluorene [3, 2-d] imidazole(FI): Characterization and influence of substituents on photoluminescence", Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, vol. 219, pp. 42-49 (2011) See the entire document	1-9
A	KR 10-2010-0131271 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 15 December 2010 See the entire document	1-9
A	VIII, Mayavan et al., RuCl ₃ /SnCl ₂ mediated synthesis of pyrrolo[2,3-c] carbazoles and consequent preparation of indolo[2,3-c] carbazoles, Tetrahedron, vol. 68, pp. 2453-2458 (2012) (Published online 31 January 2012) See the entire document	1-9
A	KR 10-2011-0117549 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 27 October 2011 See the entire document	1-9



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 AUGUST 2013 (30.08.2013)

Date of mailing of the international search report

30 AUGUST 2013 (30.08.2013)

Name and mailing address of the ISA/KR



Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2013/001819

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 2000-273331 A	03/10/2000	NONE	
KR 10-2010-0131271 A	15/12/2010	CN102482279 A	30/05/2012
		EP 2415773 A2	08/02/2012
		JP 2012-521418A	13/09/2012
		KR 10-1072812 B1	14/10/2011
		KR 10-1077839 B1	31/10/2011
		KR 10-2011-0092264 A	17/08/2011
		US 2012-0018717 A1	26/01/2012
		WO 2010-114267 A2	07/10/2010
KR 10-2011-0117549 A	27/10/2011	WO 2010-114267 A3	24/02/2011
		KR 10-2012-0101620 A	14/09/2012

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 487/04(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 487/04; C07D 409/12; C09B 23/00; B41M 5/00; C07D 209/82; C07D 333/76; C09K 11/06; C07D 401/14; H01L 51/50 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN, google, 키워드: 인테노인돌, 카바졸, 플루오렌, 유기 전계 발광 소자		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	JP 2000-273331 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 2000.10.03 문서 전체 참조	1-9
A	Jian-Guang Guo 외 4인, 'New Fluorene derivatives based on 3,9-dihydrofluorene [3,2-d]imidazole(FI): Characterization and influence of substituents on photoluminescence', Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Vol. 219, pp. 42-49 (2011) 문서 전체 참조	1-9
A	KR 10-2010-0131271 A (덕산하이메탈(주)) 2010.12.15 문서 전체 참조	1-9
A	Mayavan Viji 외 1인, RuCl3/SnCl2 mediated synthesis of pyrrolo[2,3-c]carbazoles and consequent preparation of indolo[2,3-c]carbazoles, Tetrahedron, Vol. 68, pp. 2453-2458 (2012) (Published online 2012.01.31) 문서 전체 참조	1-9
A	KR 10-2011-0117549 A (덕산하이메탈(주)) 2011.10.27 문서 전체 참조	1-9
☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: "A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 "E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 "L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 "O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 "P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 "T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 "X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. "Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. "&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2013년 08월 30일 (30.08.2013)		국제조사보고서 발송일 2013년 08월 30일 (30.08.2013)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-472-7140		심사관 김병숙 전화번호 +82-42-481-3342 

제2기재란 일부 청구항을 조사할 수 없는 경우의 의견(첫 번째 용지의 2의 계속)

PCT 제17조(2)(a)의 규정에 따라 다음과 같은 이유로 일부 청구항에 대하여 본 국제조사보고서가 작성되지 아니하였습니다.

1. ☐ 청구항:
이 청구항은 본 기관이 조사할 필요가 없는 대상에 관련됩니다. 즉,
2. ☐ 청구항:
이 청구항은 유효한 국제조사를 수행할 수 없을 정도로 소정의 요건을 충족하지 아니하는 국제출원의 부분과 관련됩니다. 구체적으로는,
3. ☐ 청구항:
이 청구항은 종속청구항이나 PCT규칙 6.4(a)의 두 번째 및 세 번째 문장의 규정에 따라 작성되어 있지 않습니다.

제3기재란 발명의 단일성이 결여된 경우의 의견(첫 번째 용지의 3의 계속)

본 국제조사기관은 본 국제출원에 다음과 같이 다수의 발명이 있다고 봅니다.

제1발명: 청구항 1부터 9까지의 발명의 일부는 화학식 3으로 표시되는 화합물, 또는 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 발명이고,
제2발명: 청구항 1부터 9까지의 발명의 일부는 화학식 4로 표시되는 화합물, 또는 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 발명이고,
제3발명: 청구항 1부터 9까지의 발명의 일부는 화학식 6으로 표시되는 화합물, 또는 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 발명이고,
제4발명: 청구항 1부터 9까지의 발명의 일부는 화학식 7로 표시되는 화합물, 또는 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 발명이고,
제5발명: 청구항 1부터 9까지의 발명의 일부는 화학식 1로 표시되는 화합물 중 화학식 3,4,6,7에 해당되지 않는 화합물, 또는 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 발명입니다.

1. ☐ 출원인이 모든 추가수수료를 기간 내에 납부하였으므로, 본 국제조사보고서는 모든 조사 가능한 청구항을 대상으로 합니다.
2. ☐ 추가수수료 납부를 요구하지 않고도 모든 조사 가능한 청구항을 조사할 수 있었으므로, 본 기관은 추가수수료 납부를 요구하지 아니하였습니다.
3. ☐ 출원인이 추가수수료의 일부만을 기간 내에 납부하였으므로, 본 국제조사보고서는 수수료가 납부된 청구항만을 대상으로 합니다. 구체적인 청구항은 아래와 같습니다.
4. ☒ 출원인이 기간 내에 추가수수료를 납부하지 아니하였습니다. 따라서 본 국제조사보고서는 청구범위에 처음 기재된 발명에 한정되어 있으며, 해당 청구항은 아래와 같습니다.
청구항 1부터 9까지의 일부(제1발명)

이의신청에
관한 기재

- ☐ 출원인의 이의신청 및 이의신청료 납부(해당하는 경우)와 함께 추가수수료가 납부되었습니다.
- ☐ 출원인의 이의신청과 함께 추가수수료가 납부되었으나 이의신청료가 보정요구서에 명시된 기간 내에 납부되지 아니하였습니다.
- ☐ 이의신청 없이 추가수수료가 납부되었습니다.

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2000-273331 A	2000/10/03	없음	
KR 10-2010-0131271 A	2010/12/15	CN102482279 A EP 2415773 A2 JP 2012-521418A KR 10-1072812 B1 KR 10-1077839 B1 KR 10-2011-0092264 A US 2012-0018717 A1 WO 2010-114267 A2 WO 2010-114267 A3	2012/05/30 2012/02/08 2012/09/13 2011/10/14 2011/10/31 2011/08/17 2012/01/26 2010/10/07 2011/02/24
KR 10-2011-0117549 A	2011/10/27	KR 10-2012-0101620 A	2012/09/14