(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015 년 8 월 27 일 (27.08.2015)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2015/126156 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 403/14 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2015/001625

(22) 국제출원일: 2015 년 2 월 17 일 (17.02.2015)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2014-0019935 2014 년 2 월 20 일 (20.02.2014) KR

(71) 출원인: **주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)** [KR/KR]; 100-730 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: **김영배 (KIM, Young Bae)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **조현종 (JO, Hyunjong)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **이창준 (LEE, Chang Jun)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **신진용 (SHIN, Jinyong)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **김회문 (KIM, Hoe Moon)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **백영미 (BEAK, Youngmi)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR). **김태형 (KIM, Tae Hyung)**; 448-795 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (두산기술원), Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: **특허법인 한빗 (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, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

WO 2015/126156 A1

(54) **Title**: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE COMPRISING SAME

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

(57) **Abstract**: The present invention relates to a novel compound and an organic electroluminescent device comprising same, the compound, according to the present invention, being used in an organic layer, preferably in a light-emitting layer, of an organic electroluminescent device, thereby enabling improvement in the luminous efficiency, driving voltage, lifespan, etc., of the organic electroluminescent device.

(57) **요약서**: 본 발명은 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게는 발광층에 사용됨에 따라 유기 전계 발광 소자의 발광효율, 구동 전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

기술분야

[1] 본 발명은 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[2] 유기 전계 발광 소자는 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 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 상기 유기물층에 포함되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[3] 상기 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색의 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색의 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한 색순도의 증가와 에너지 전이를 통해 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[4] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이때 인광 도판트는 이론적으로 형광 도판트에 비해 최대 4배의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트에 대한 연구가 많이 진행되고 있다.

[5] 현재 발광층에 사용되는 형광 도판트/호스트 물질로는 안트라센 유도체들이 알려져 있다. 또한 발광층에 사용되는 인광 도판트 물질로는 Firpic, $Ir(ppy)_3$, $(acac)Ir(btp)_2$ 등의 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 알려져 있고, 인광 호스트 물질로는 4,4-dicarbazolybiphenyl(CBP)가 알려져 있다.

[6] 그러나, 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 떨어지기 때문에 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

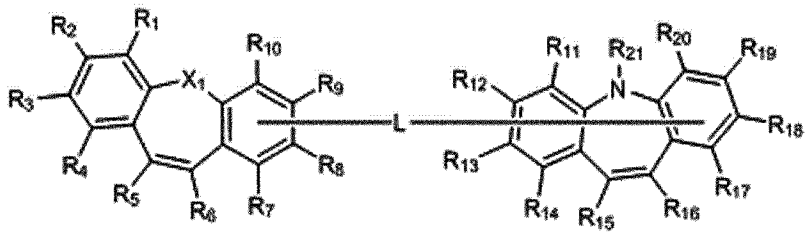
[7] 본 발명은 유리 전이온도가 높으며 열적 안정성이 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[8] 또, 본 발명은 상기 유기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[9] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[10] 화학식 1



[11] 상기 화학식 1에서,

[12] X_1은 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 이루어진 군에서 선택되고;

[13] L은 단일 결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{60}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며,

[14] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않고;

[15] Ar_1 내지 Ar_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되고;

[16] R_1 내지 R_{21}은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[17] 이때, 상기 L의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_{21}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기, 아릴실릴기 및 축합 고리는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[18] 또한, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[19] 본 발명의 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함하는데, 이때 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 정송수송층 또는 발광층(바람직하게는 인광 발광층)이다.

[20] 또, 본 발명의 다른 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광보조층이다.

[21] 또한, 본 발명의 또 다른 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 수명 개선층, 전자수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 수명 개선층이다.

발명의 효과

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

발명의 실시를 위한 형태

[23] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[24] <신규 유기 화합물>

[25] 본 발명의 신규 화합물은 디벤조아제핀 모이어티(dibenzo[b,f]azepine moiety)에 디벤조아제핀(5H-dibenzo[b,f]azepine), 디벤조옥세핀(dibenzo[b,f]oxepine), 디벤조싸이에핀(dibenzo[b,f]thiepine), 디벤조실레핀(5H-dibenzo[b,f]silepine), 또는 디벤조싸이클로헵텐(5H-dibenzo[a,d]cycloheptene)이 직접결합되거나 또는 링커(예컨대, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기)를 통해 결합되어 기본 골격을 이루며, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[26] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질은 호스트의 삼중항 에너지 갭이 도펀트보다 높아야 한다. 즉, 도펀트로부터 효과적으로 인광 발광을 제공하기 위해서는 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높아야 한다. 그런데, 상기 화학식 1의 화합물은 2.3 eV 이상의 높은 삼중항에너지를 갖고 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 디벤조아제핀 유도체에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.

[27] 또한, 본 발명의 화합물은 전술한 바와 같이 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자수송층 또는 정공수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 유기물층(이하, '발광 보조층'이라 함)을 형성할 경우, 상기 화합물에 의해서 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 상기 제1 엑시톤 확산 방지층을 포함하지 않은 종래의 유기 전계 발광 소자와 달리, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 유기물층(이하, '수명 개선층'이라 함)을 형성할 경우에도, 상기 화학식 1의 화합물에 의해 엑시톤의 확산이 방지됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 안정성이 향상될 수 있고, 이로 인해 소자의 반감 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트 이외, 발광 보조층 재료 또는 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.

[28] 또한, 상기 화학식 1의 화합물에서, 디벤조 아제핀 모이어티(dibenzo[b,f]azepine moiety)는 정공 수송능이 우수하기 때문에, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층(구체적으로, 정공 수송층)에 적용할 경우, 소자의 성능을 향상시킬 수 있다.

[29] 또, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고, 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수

있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성을 나타낼 수 있어, 유기 전계 발광 소자의 전자주입/수송층 재료, 또는 수명개선층 재료로 유용하게 적용할 수 있다. 한편, 상기 화학식 1의 화합물이 상기 기본 골격에 전자 공여성이 큰 전자 주게기(EDG)가 결합될 경우, 정공주입/수송층 재료, 또는 발광보조층 재료로 유용하게 적용할 수 있다.

[30] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 유기물층 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제 효과도 있다.

[31] 이와 같이, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 적용할 경우 유기 전계 발광 소자의 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있다. 또한, 이러한 유기 전계 발광 소자 수명 향상은 풀 칼라 유기 발광 패널의 성능을 극대화시킬 수 있다.

[32]

[33] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물에서, X_1은 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 $N(Ar_1)$일 수 있다.

[34] 상기 Ar_1 내지 Ar_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

[35] 바람직하게 Ar_1 내지 Ar_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[36] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 상기 L은 2가(divalent)의 연결기(linker)로서, 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[37] 상기 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기의 비제한적인 예로는 페닐렌기, 비페닐렌기,

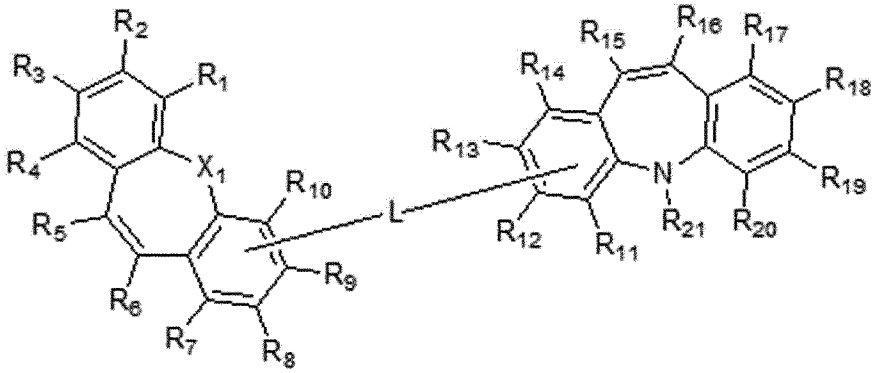
나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 인데닐렌기, 피란트레닐렌기, 카르바졸릴렌기, 티오페닐렌기, 인돌일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 피롤일렌기, 이미다졸릴렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 피리디닐렌기, 피리미디닐렌기 등이 있다.

[38] 바람직하게 상기 L은 단일결합이거나, 또는 페닐렌기, 또는 비페닐렌기일 수 있다.

[39] 이때, 상기 L은 화학식 1의 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 화학식 1의 R_{11} 내지 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결된다. 다만, L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않는다.

[40] 일례로, 상기 L이 화학식 1의 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결됨과 동시에, 화학식 1의 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결될 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 화합물일 수 있다.

[41] 화학식 2



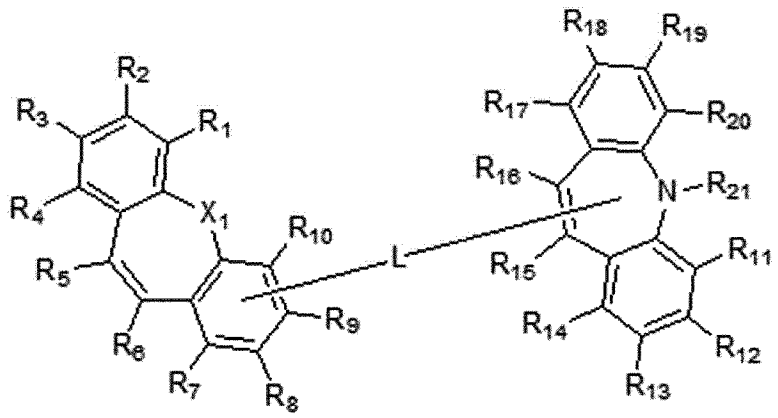
[42] 상기 화학식 2에서,

[43] X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[44] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않는다.

[45] 다른 일례로, 상기 L이 화학식 1의 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결됨과 동시에, 화학식 1의 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결될 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물일 수 있다.

[46] 화학식 3



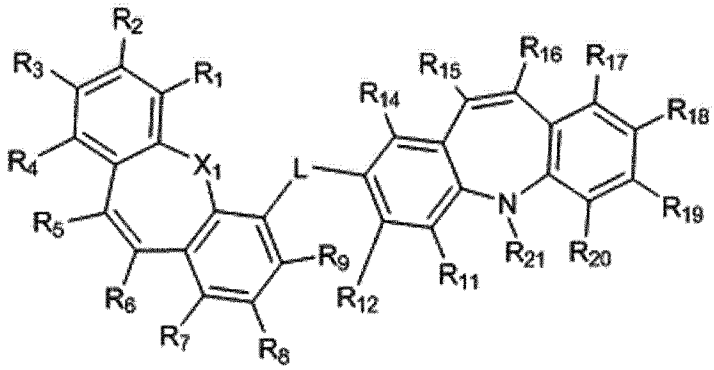
[47] 상기 화학식 3에서,

[48] X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

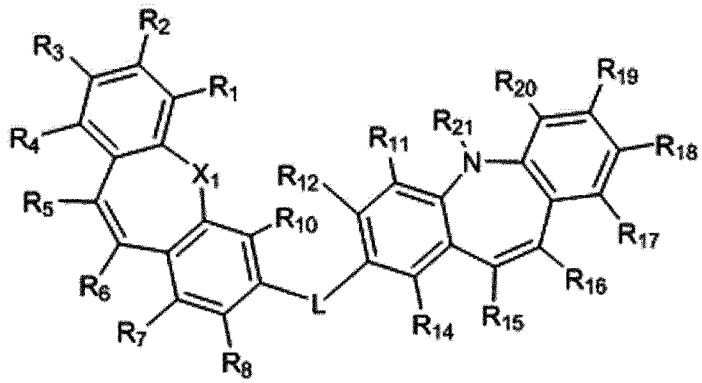
[49] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않는다.

[50] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 4 내지 화학식 9로 표시되는 화합물로 구체화 될 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

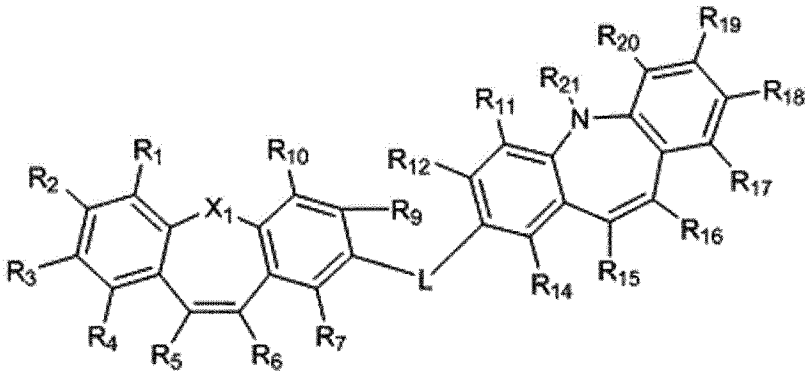
[51] 화학식 4



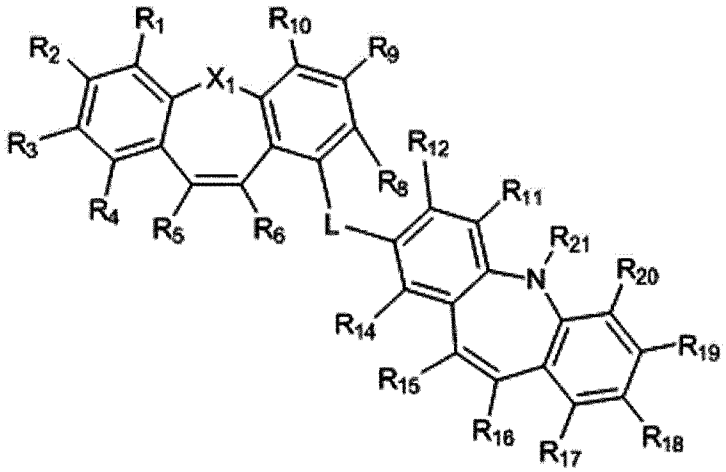
[52] 화학식 5



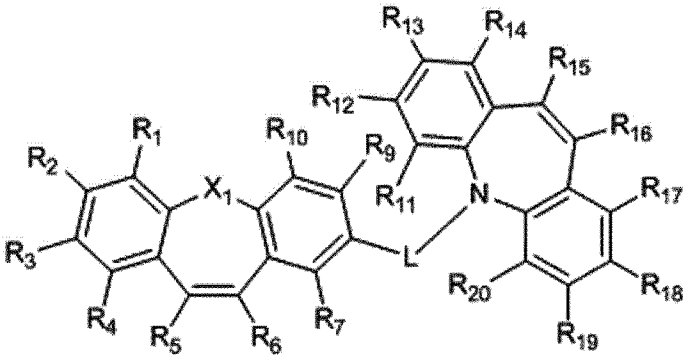
[53] 화학식 6



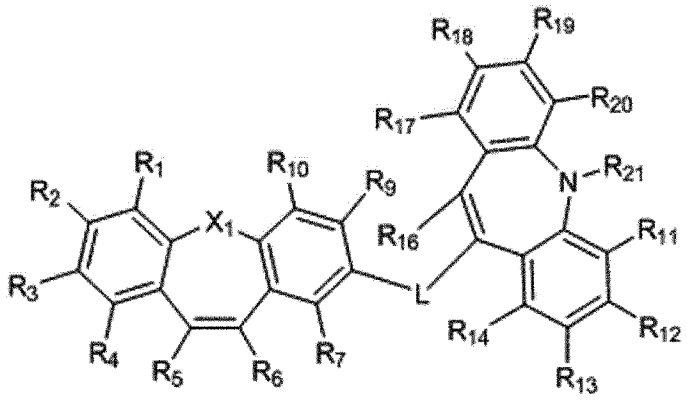
[54] 화학식 7



[55] 화학식 8



[56] 화학식 9



[57] 상기 화학식 4 내지 화학식 9에서

[58] X_1, L, R_1 내지 R_{21}은 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[59] 상기 화학식 1의 화합물에서, R_1 내지 R_{21}은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

[60] 바람직하게 상기 R_1 내지 R_{21}은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

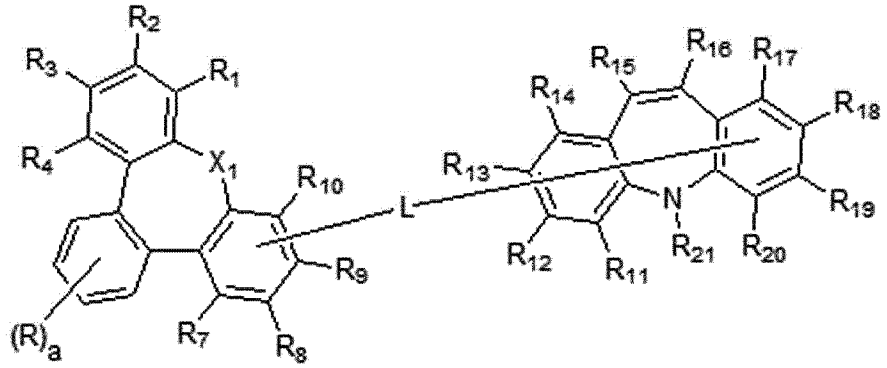
[61] 예를 들어, R_1과 R_2, R_2와 R_3, R_3와 R_4, R_5와 R_6, R_7와 R_8, R_8과 R_9, R_9와 R_{10}, R_{11}과 R_{12}, R_{12}와 R_{13}, R_{13}과 R_{14}, R_{15}와 R_{16}, R_{17}과 R_{18}, R_{18}과 R_{19}, R_{19}와 R_{20} 중에서 어느 하나가 서로 결합하여 축합 방향족 고리를 형성할 수 있다. 일례에 따르면, R_5 및 R_6는 서로 결합하여 C_6~C_{20}의 축합 방향족 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게 축합 벤젠 고리를 형성할 수 있다.

[62] 이때, 상기 축합 고리(바람직하게 축합 방향족 고리)는 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}

의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[63] 이와 같이, 상기 R_5와 R_6이 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 축합 방향족 고리를 형성할 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 10으로 표시될 수 있다.

[64] 화학식 10



[65] 상기 화학식 10에서,

[66] X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[67] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않고;

[68] a는 0 내지 4의 정수로서, a가 0이면 수소가 치환기 R로 치환되지 않는 것을 의미하며, a가 1 내지 4의 정수이면, R은 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

[69] 다만 R이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

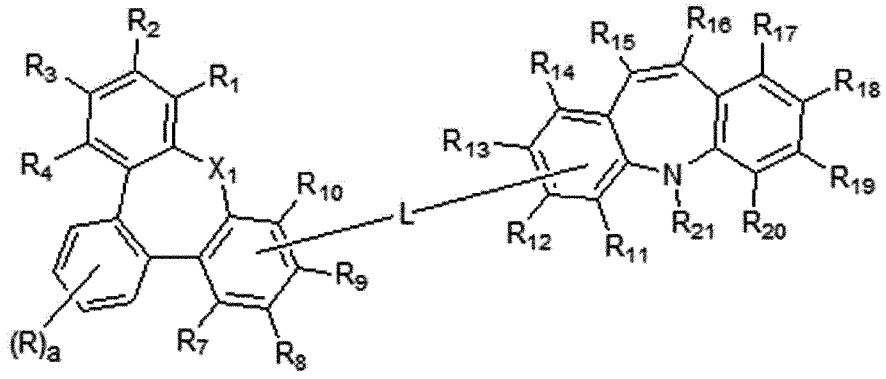
[70] 이때, 상기 R의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및

아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[71] 바람직하게 상기 화학식 10에서, a가 1 내지 4의 정수인 경우, R은 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 이때 R의 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[72] 구체적인 일례로, 상기 R_5 및 R_6이 서로 결합하여 축합 벤젠 고리를 형성하고, 상기 L이 화학식 1의 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결됨과 동시에, 화학식 1의 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결될 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 11로 표시되는 화합물일 수 있다.

[73] 화학식 11



[74] 상기 화학식 11에서,

[75] X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

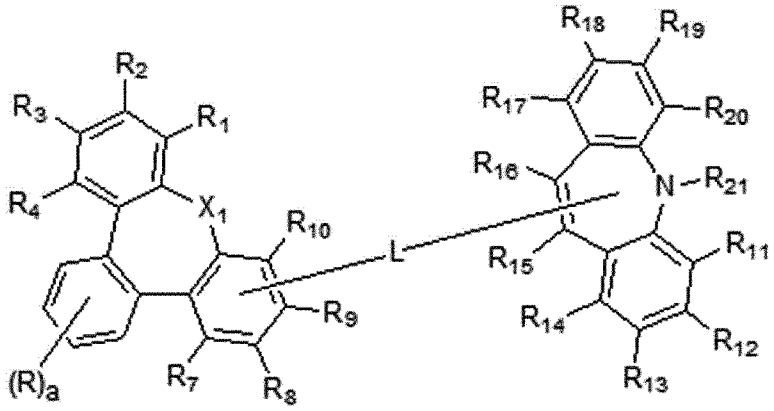
[76] R 및 a는 각각 상기 화학식 10에서 정의한 바와 같으며,

[77] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와

동시에 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않는다.

[78] 다른 구체적인 일례로, 상기 R_5 및 R_6이 서로 결합하여 축합 벤젠 고리를 형성하고, 상기 L이 화학식 1의 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결됨과 동시에, 화학식 1의 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결될 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 12로 표시되는 화합물일 수 있다.

[79] 화학식 12



[80] 상기 화학식 12에서,

[81] X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[82] R 및 a는 각각 상기 화학식 10에서 정의한 바와 같으며,

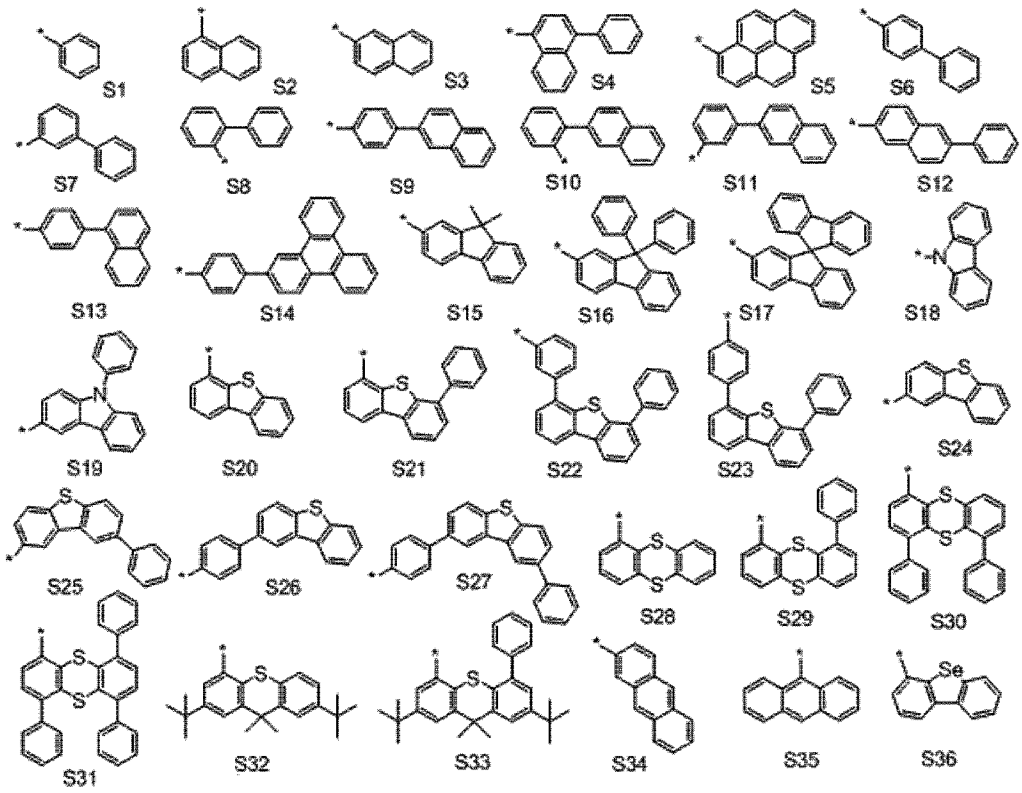
[83] 이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않는다.

[84] 상기 화학식 1에서, 상기 L의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_{21}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 이때, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

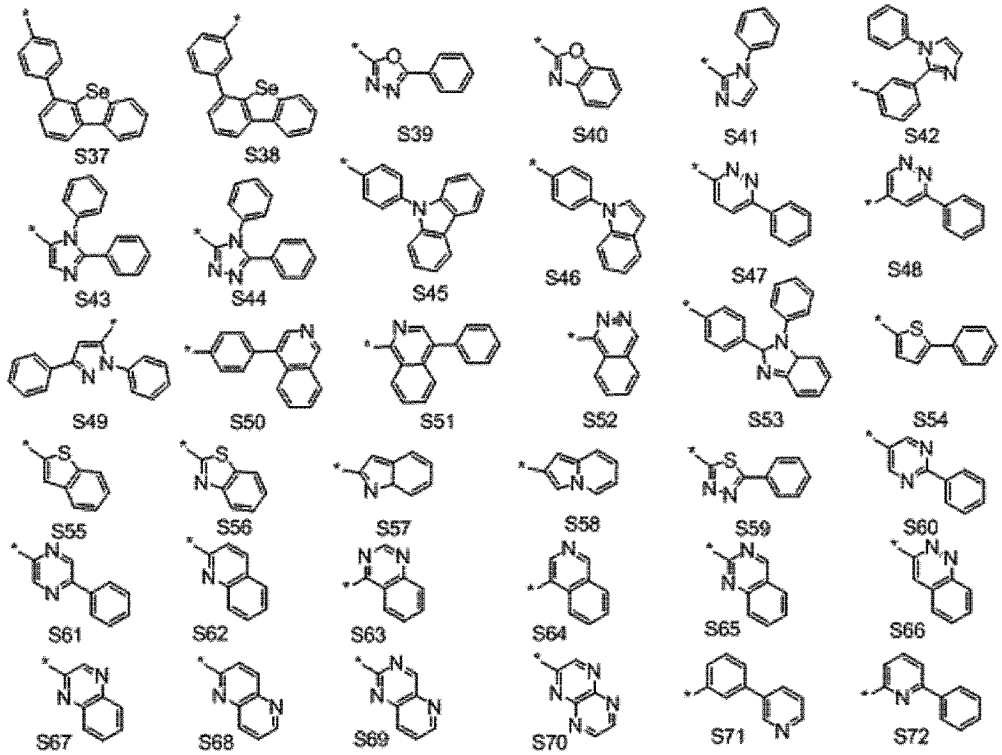
[85] 바람직하게 상기 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_{21}은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소 혹은 하기 치환체 S1 내지 S204로 이루어진 군에서 선택될 수

있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

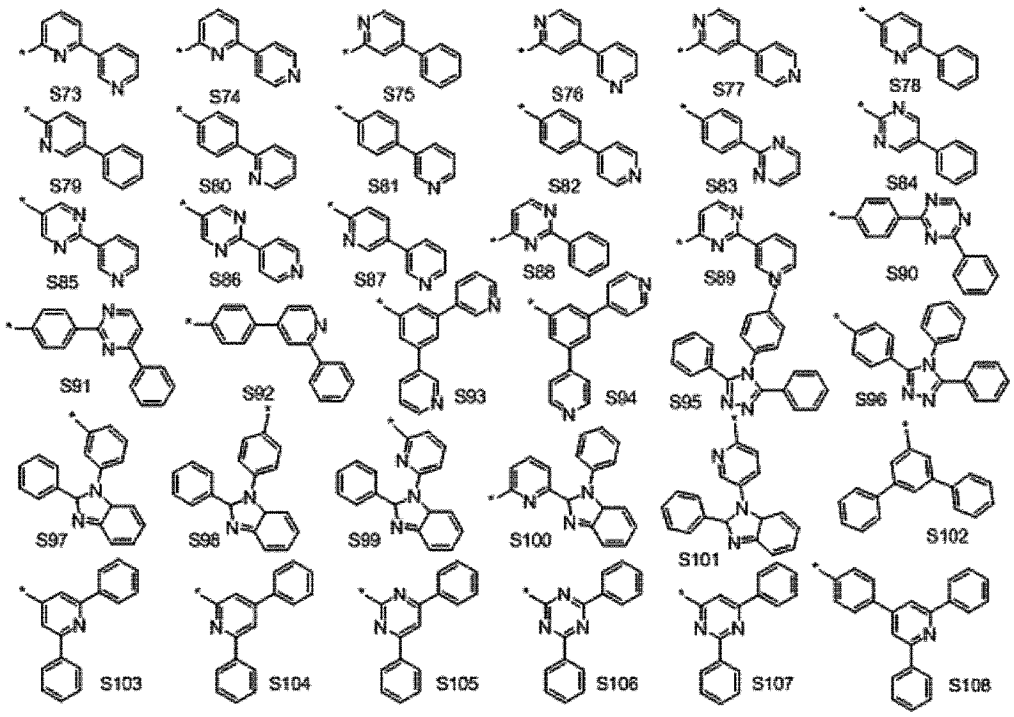
[86]



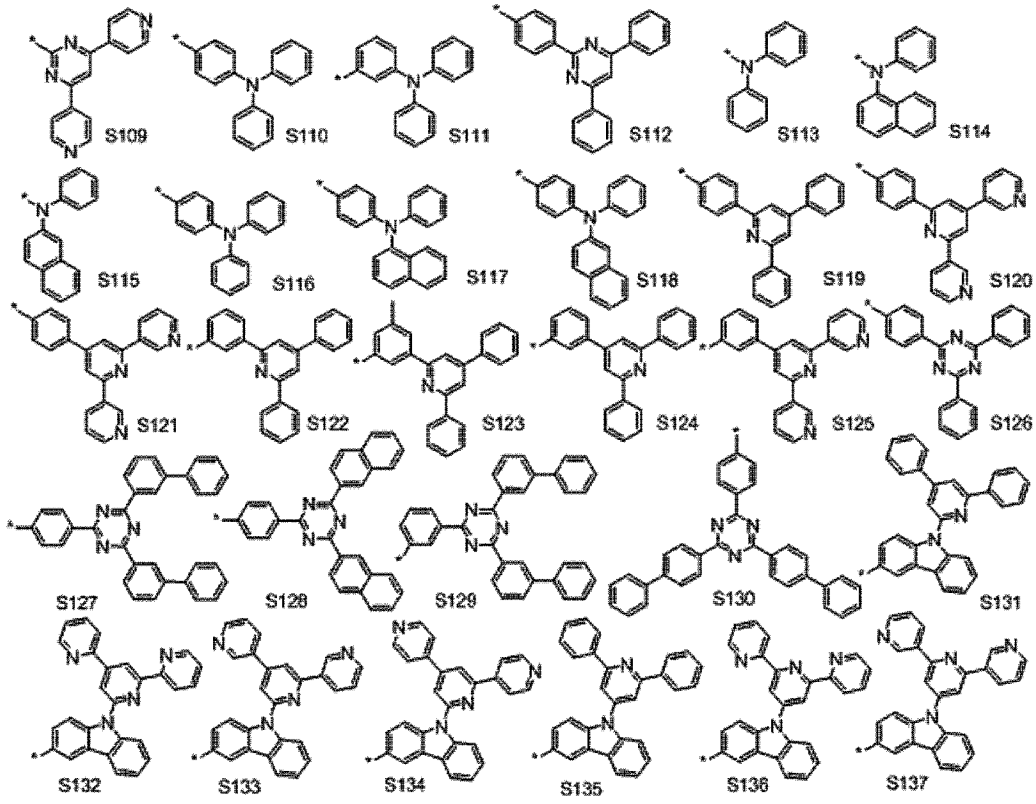
[87]



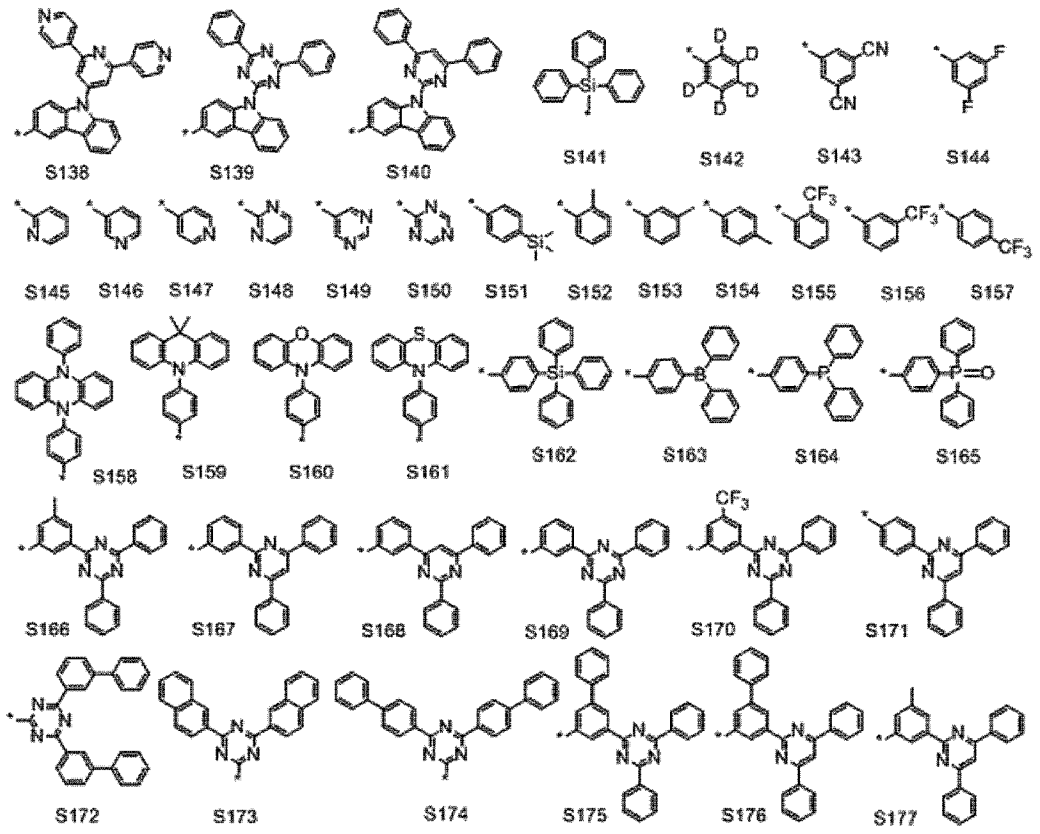
[88]


S73
S74
S75
S76
S77
S78
S79
S80
S81
S82
S83
S84
S85
S86
S87
S88
S89
S90
S91
S92
S93
S94
S95
S96
S97
S98
S99
S100
S101
S102
S103
S104
S105
S106
S107
S108

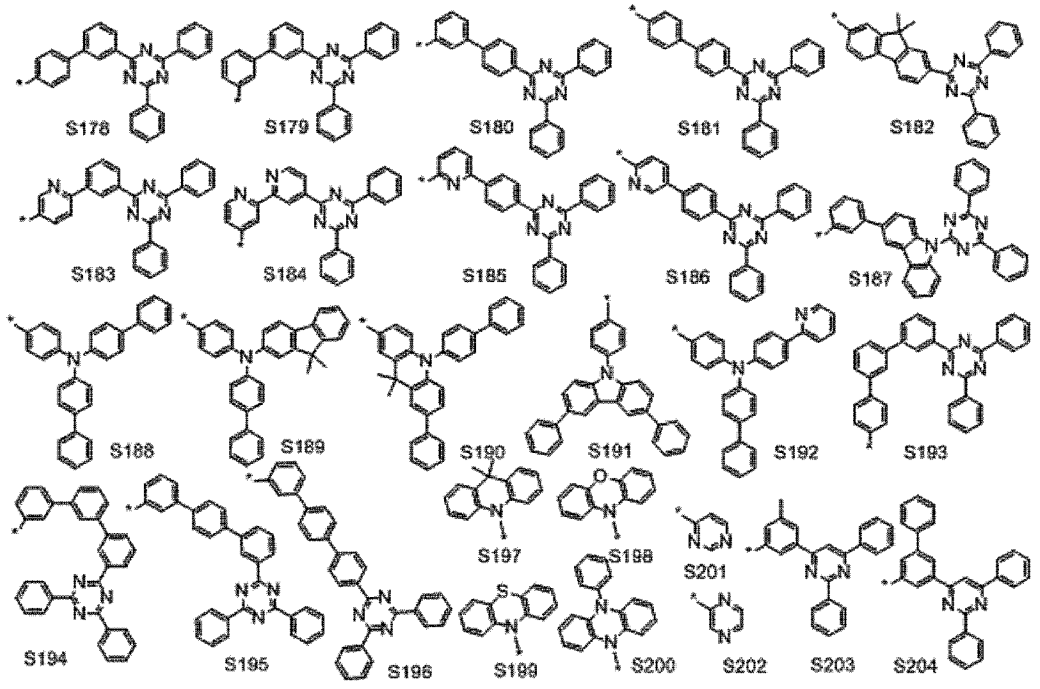
[89]


S109
S110
S111
S112
S113
S114
S115
S116
S117
S118
S119
S120
S121
S122
S123
S124
S125
S126
S127
S128
S129
S130
S131
S132
S133
S134
S135
S136
S137

[90]

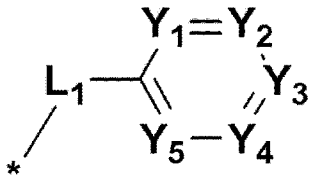


[91]



[92] 더 바람직하게 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_{21} 중 적어도 하나는 하기 화학식 13으로 표시되는 치환체일 수 있는데, 이 경우 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 성능을 더 향상시킬 수 있다.

[93] 화학식 13



[94] 상기 화학식 13에서,

[95] 별표(*)는 질소(N)과 결합되는 부위를 의미하며,

[96] L_1은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합이거나, 또는 페닐렌기, 또는 비페닐렌기일 수 있으며;

[97] Y_1 내지 Y_5는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{22})$이며, 바람직하게는 Y_1 내지 Y_5 중 적어도 하나는 N이고, 나머지는 $C(R_{22})$일 수 있으며, 이때 R_{22}가 복수인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

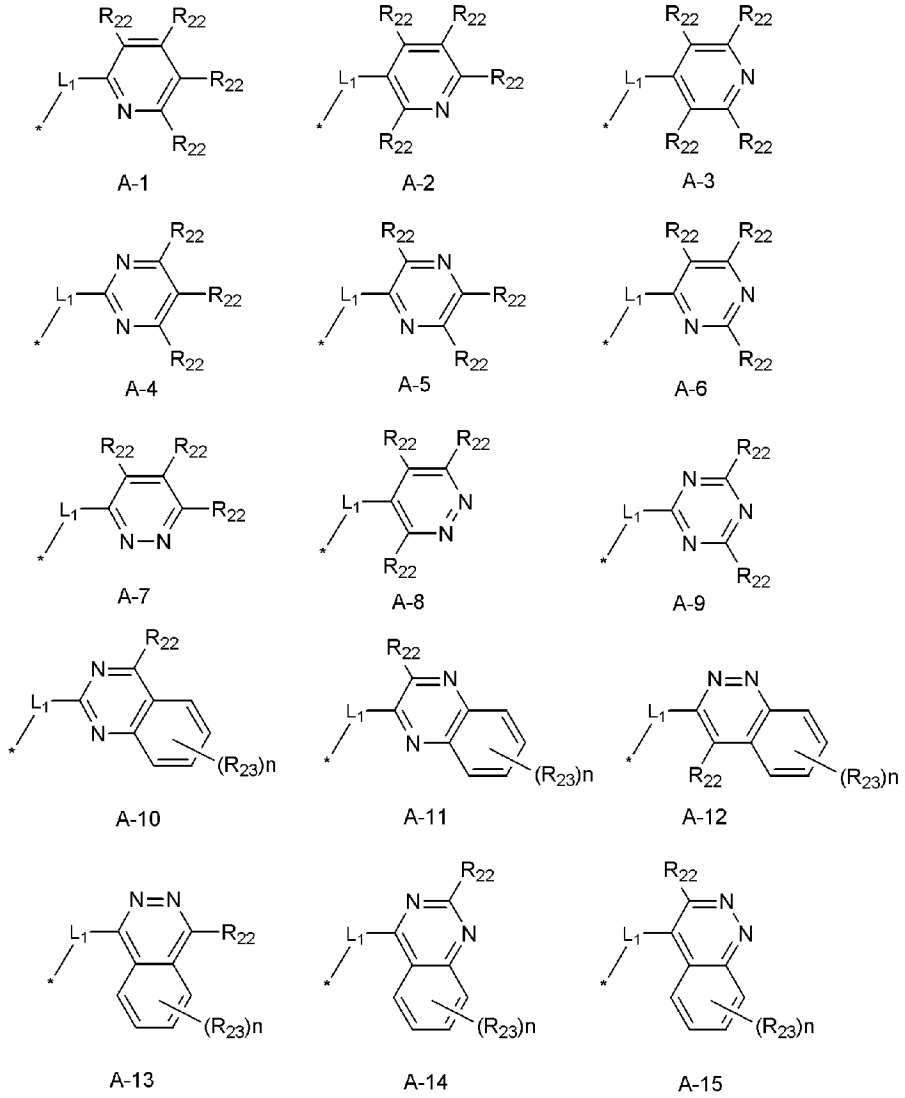
[98] R_{22}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

[99] 상기 L_1의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기와, R_{22}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되며, 이때, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[100] 상기 화학식 13으로 표시되는 치환체의 예로는 하기 화학식 A-1 내지 A-15로

표시되는 치환체 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[101]



[102] 상기 A-1 내지 A-15 에서,

[103] L_1은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

[104] R_{22}가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,

[105] R_{22}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환

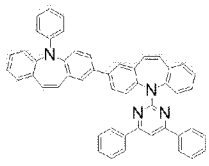
또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

[106] n은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 0이면 수소가 치환기 R_{23}으로 치환되지 않는 것을 의미하며, 상기 n이 1 내지 4인 경우, R_{23}는 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,

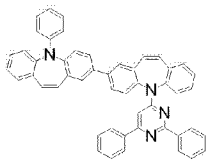
[107] 상기 L_1의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기와, R_{22} 및 R_{23}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되며,상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[108] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 예시된 화합물들로 구체화될 수 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.

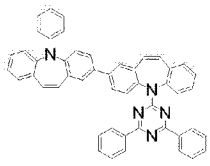
[109]



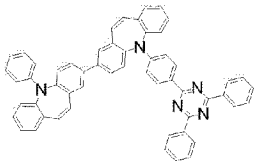
A-1



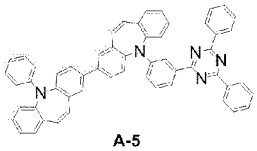
A-2



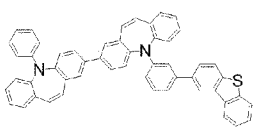
A-3



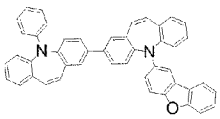
A-4



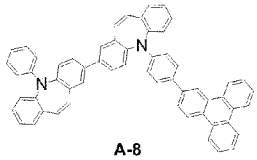
A-5



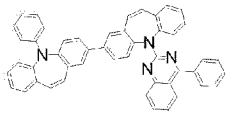
A-6



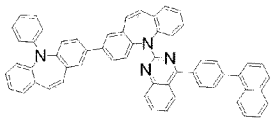
A-7



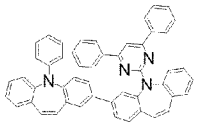
A-8



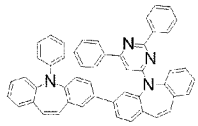
A-9



A-10

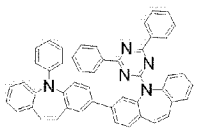


B-1

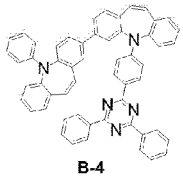


B-2

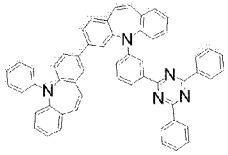
[110]



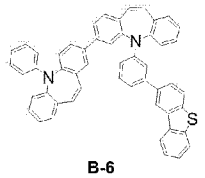
B-3



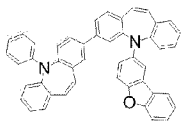
B-4



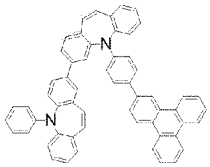
B-5



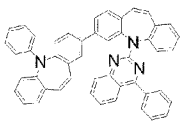
B-6



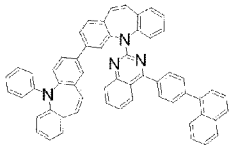
B-7



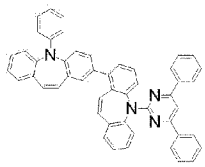
B-8



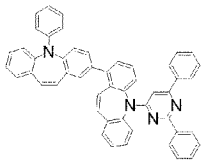
B-9



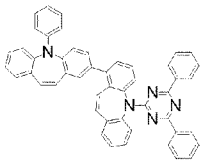
B-10



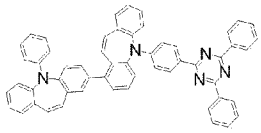
C-1



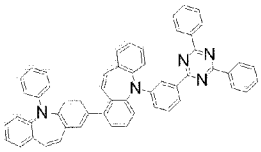
C-2



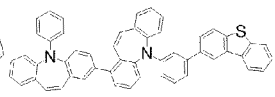
C-3



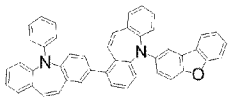
C-4



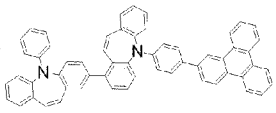
C-5



C-6

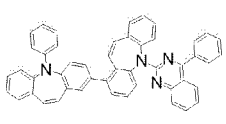


C-7

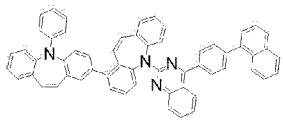


C-8

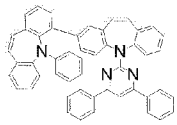
[111]



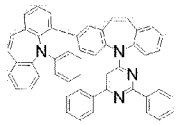
C-9



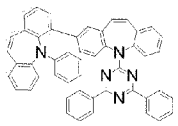
C-10



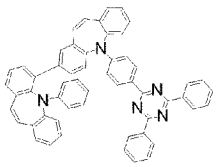
D-1



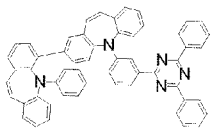
D-2



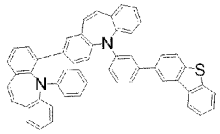
D-3



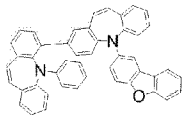
D-4



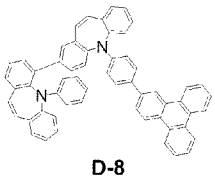
D-5



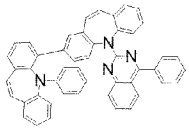
D-6



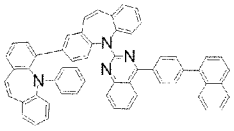
D-7



D-8

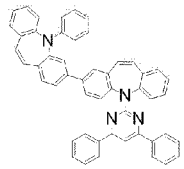


D-9

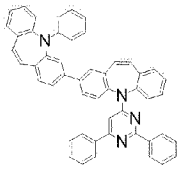


D-10

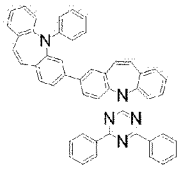
[112]



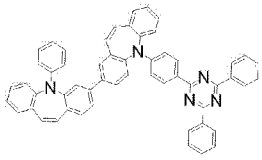
E-1



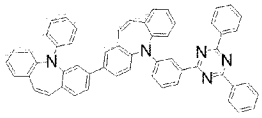
E-2



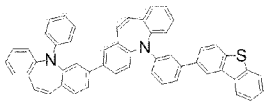
E-3



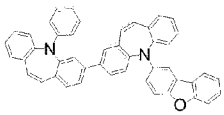
E-4



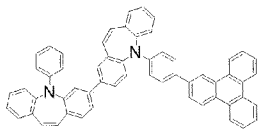
E-5



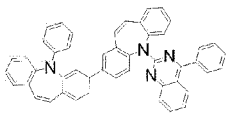
E-6



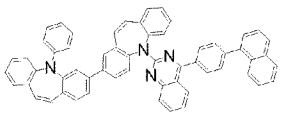
E-7



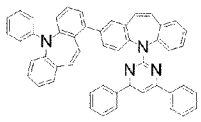
E-8



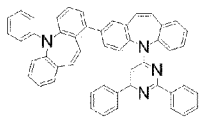
E-9



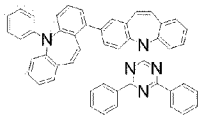
E-10



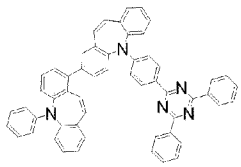
F-1



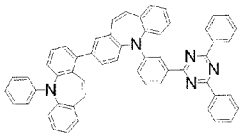
F-2



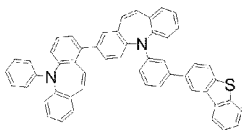
F-3



F-4

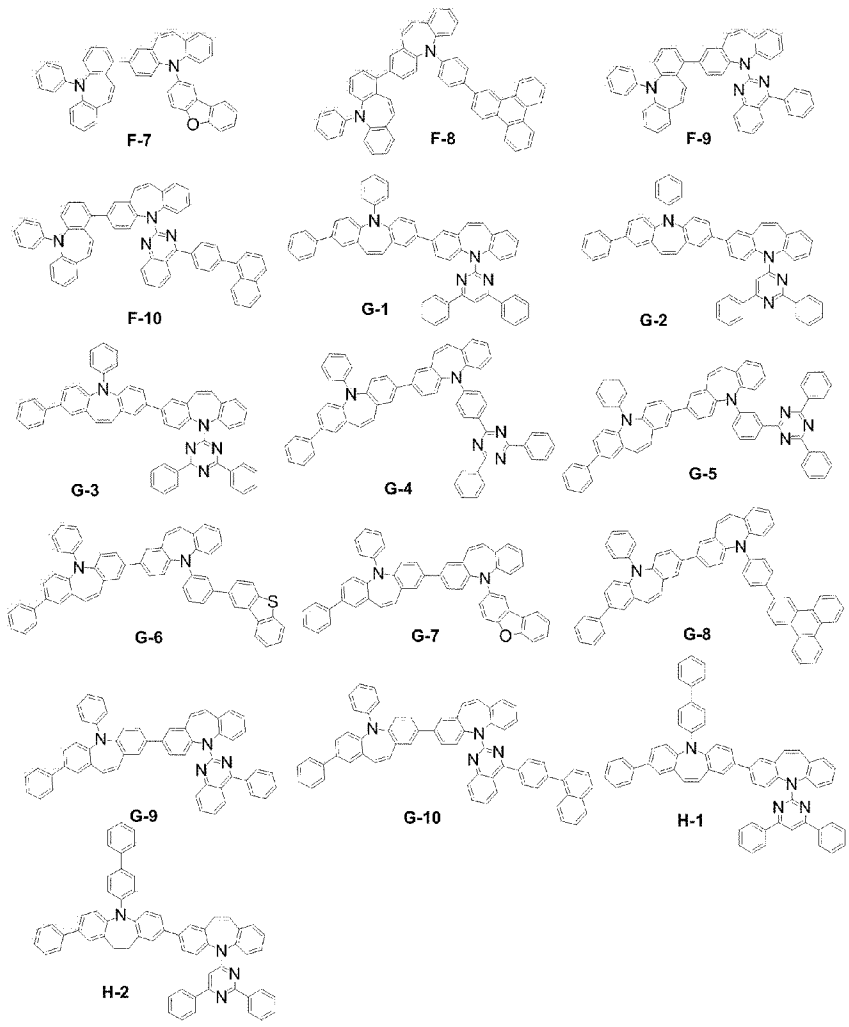


F-5

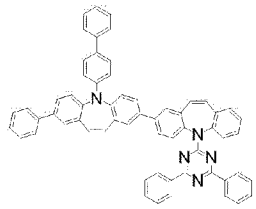


F-6

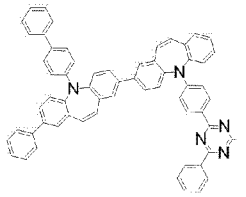
[113]



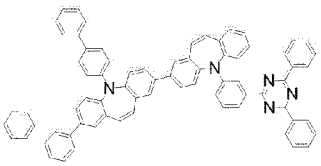
[114]



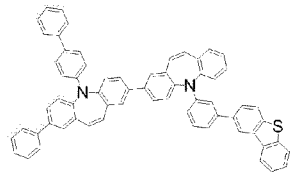
H-3



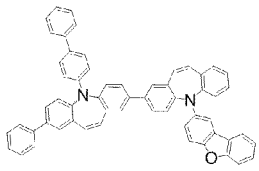
H-4



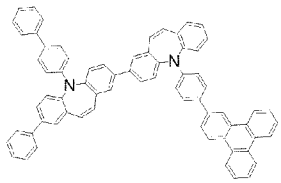
H-5



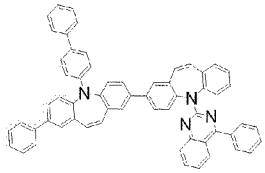
H-6



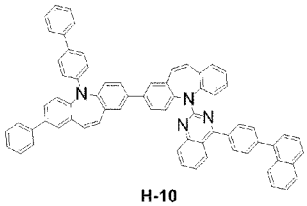
H-7



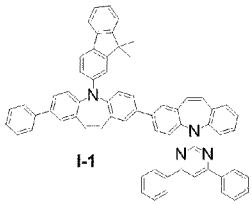
H-8



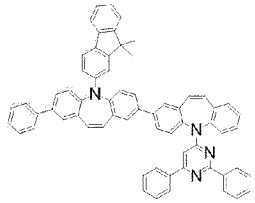
H-9



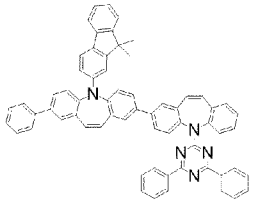
H-10



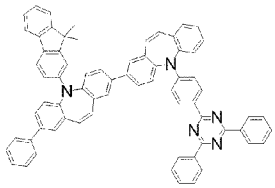
I-1



I-2

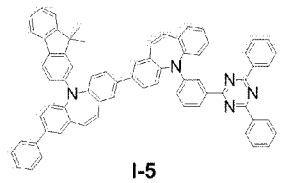


I-3

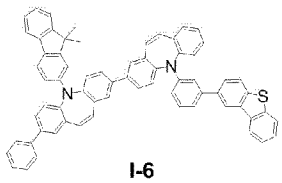


I-4

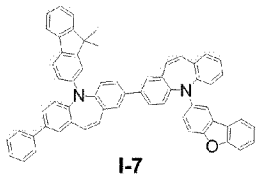
[115]



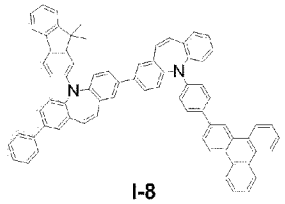
I-5



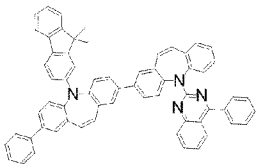
I-6



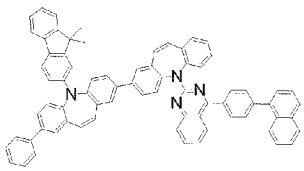
I-7



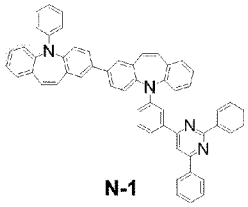
I-8



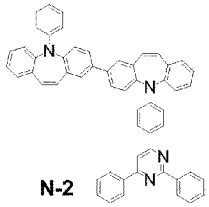
I-9



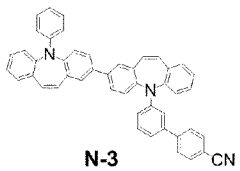
I-10



N-1

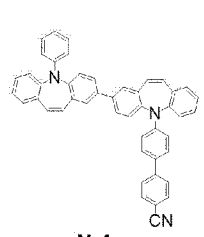


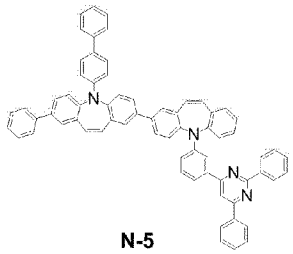
N-2

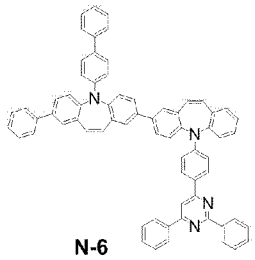


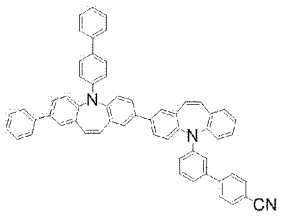
N-3

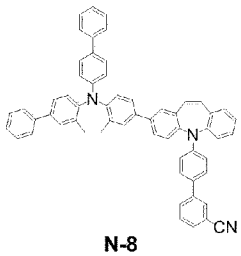
[116]

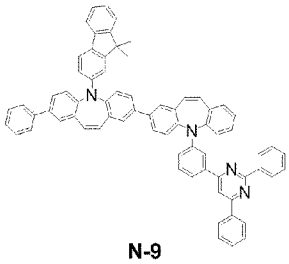

N-4

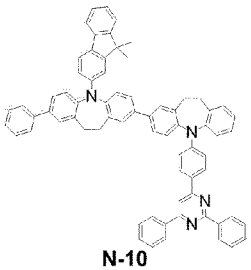

N-5

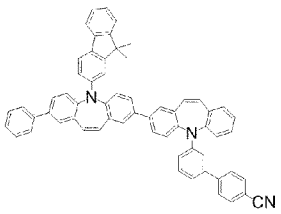

N-6

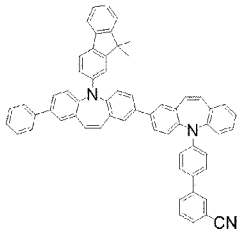

N-7


N-8

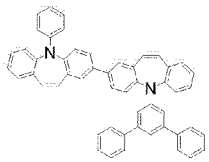

N-9

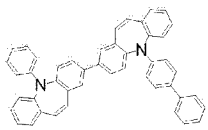

N-10

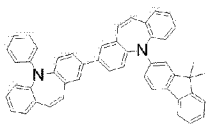

N-11

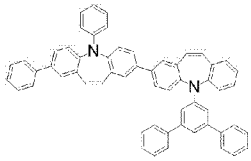

N-12

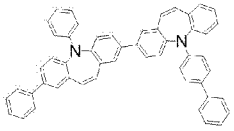
[117]

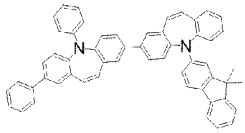

J-1

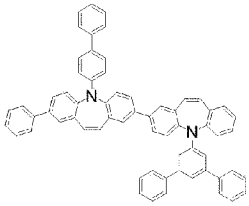

J-2

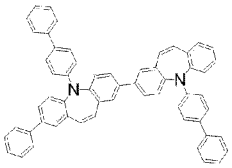

J-3

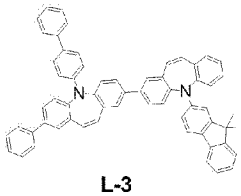

K-1

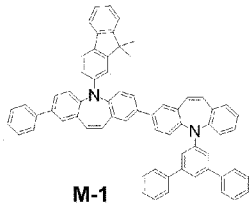

K-2

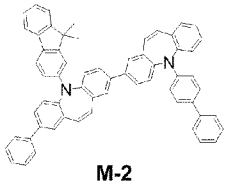

K-3

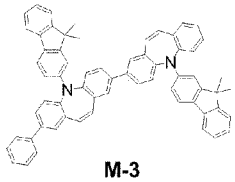

L-1


L-2

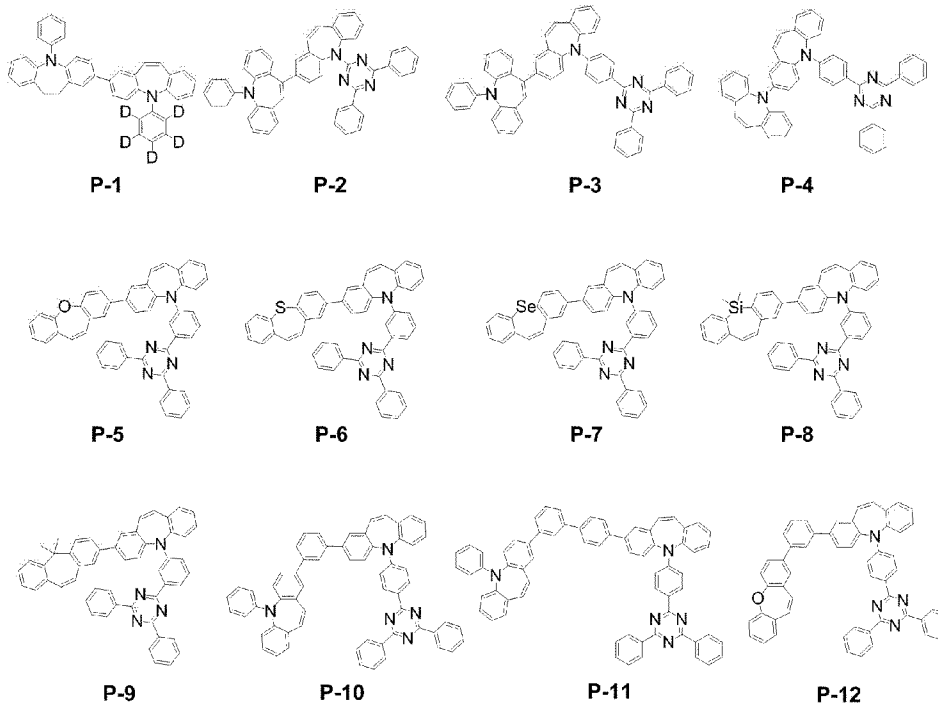

L-3


M-1

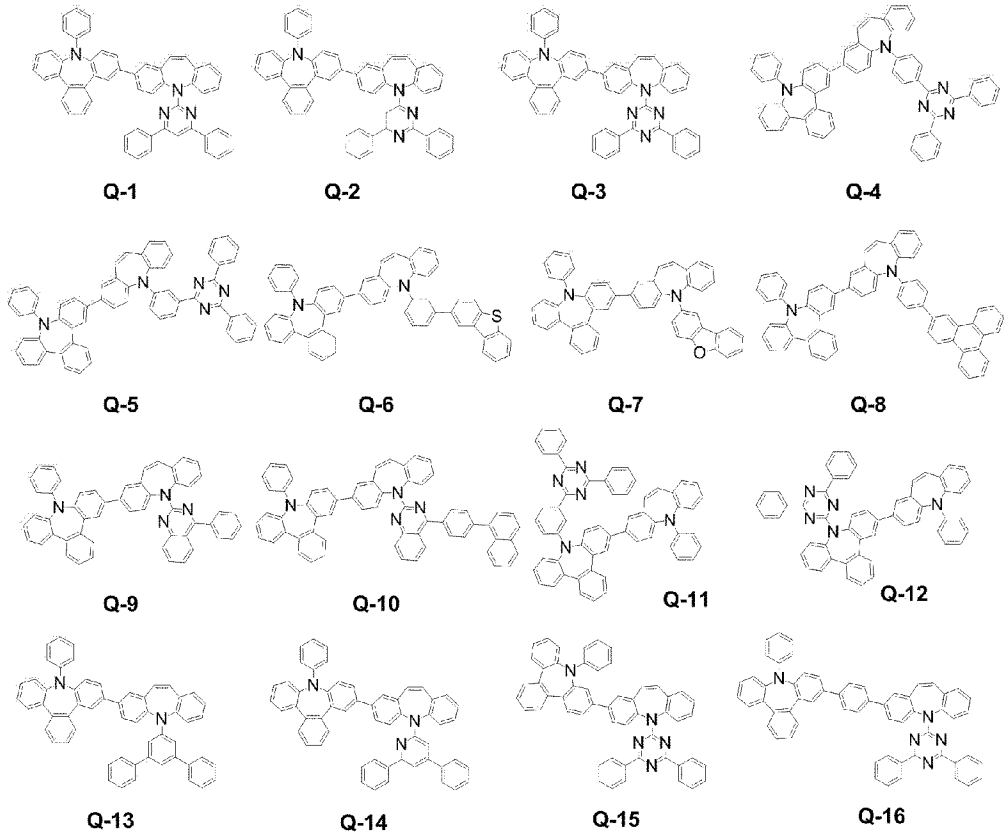

M-2

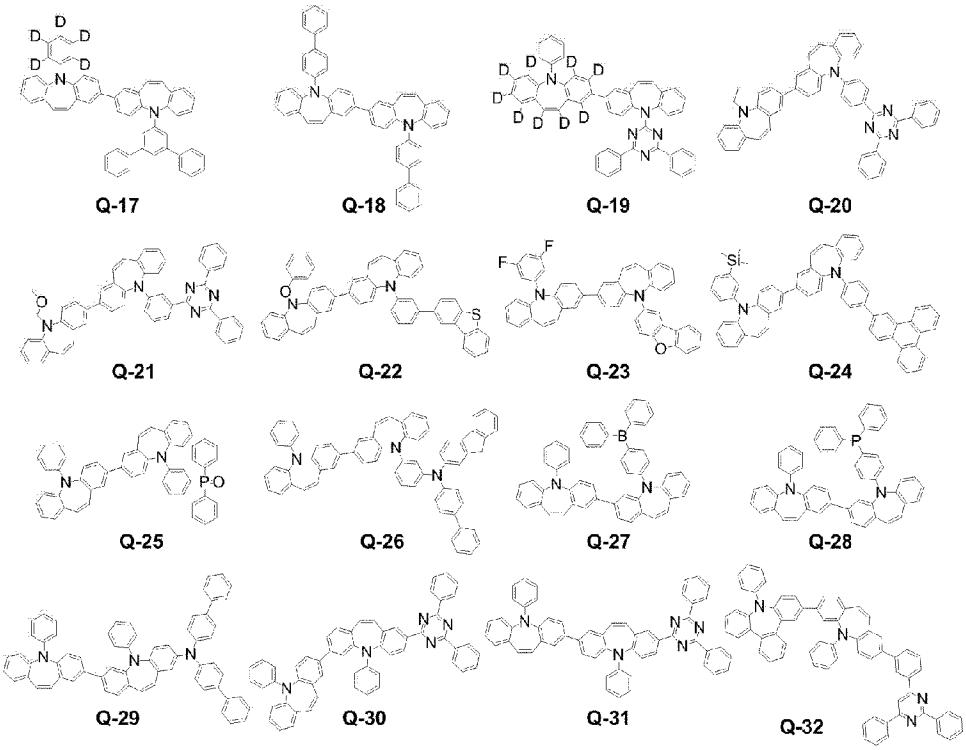

M-3

[118]


P-1
P-2
P-3
P-4
P-5
P-6
P-7
P-8
P-9
P-10
P-11
P-12

[119]


Q-1
Q-2
Q-3
Q-4
Q-5
Q-6
Q-7
Q-8
Q-9
Q-10
Q-11
Q-12
Q-13
Q-14
Q-15
Q-16

[120] 

[121] 본 발명에서의 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[122] 본 발명에서의 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[123] 본 발명에서의 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[124] 본 발명에서의 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[125] 본 발명에서의 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜,

피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indolizinyl), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(purinyl), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[126] 본 발명에서의 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로 상기 R은 탄소수 6 내지 60의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[127] 본 발명에서의 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로 상기 R'는 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 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 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[128] 본 발명에서의 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[129] 본 발명에서의 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 놀보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[130] 본 발명에서의 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[131] 본 발명에서의 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[132] 본 발명에서 "알킬보론기"는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 보론기를 의미하며, "아릴보론기"는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 보론기를 의미하고, "아릴포스핀기"는 탄소수 1 내지 60의 아릴로 치환된 포스핀기를 의미하고, "아릴포스핀옥사이드기" 탄소수 1 내지 60의 아릴로 치환된 포스핀옥사이드기를 의미한다.

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

[134] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 합성예를 참조하여 다양하게 합성할 수 있다.

[135]

[136] **<유기 전계 발광 소자>**

[137] 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[138] 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 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[139] 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 또는 정공수송층일 수 있고, 더 바람직하게는 발광층일 수 있다. 예를 들어, 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 청색, 녹색, 적색의 인광 호스트 재료로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등을 향상시킬 수 있다.

[140] 다른 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있는데, 이때 적어도 하나의 유기물층, 바람직하게는 발광 보조층이 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.

[141] 또 다른 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 수명 개선층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있는데, 이때 적어도 하나의 유기물층, 바람직하게는 수명 개선층이 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.

[142] 전술한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기판 위에, 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[143] 구체적으로, 상기 유기 전계 발광 소자의 구조는 기판 위에, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 선택적으로, 상기 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 개재(介在)될 수 있고, 또는 상기 발광층과 전자수송층 사이에 수명 개선층이 개재될 수 있다. 이때, 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 정공수송층, 발광보조층, 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 한편 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로

적층될 수 있다.

[144] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상(바람직하게는 발광층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[145] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[146] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 있다.

[147] 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 SnO_2:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[148] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[149] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

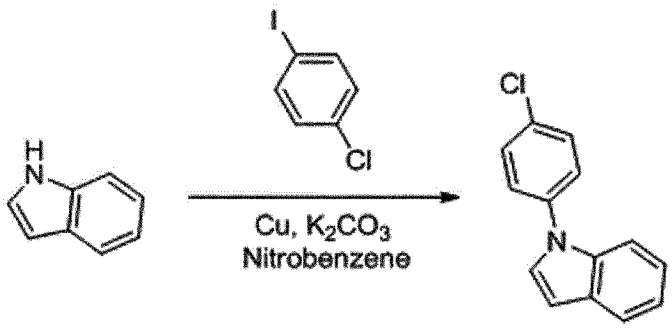
[150]

[151] 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.

[152] **[준비예 1] CAz-1 의 합성**

[153] <단계 1> 1-(4-chlorophenyl)-1H-indole 의 합성

[154]



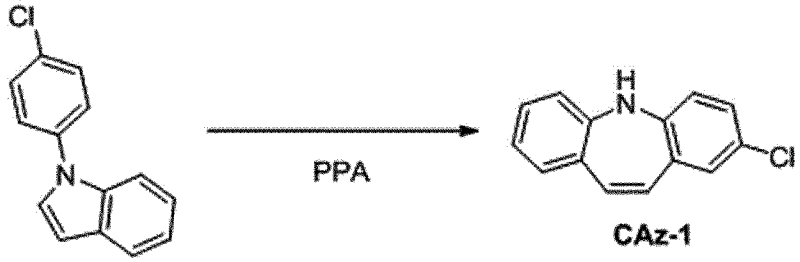
[155] 질소 기류 하에서 1H-indole (100g, 854.0 mmol), 1-chloro-4-iodobenzene (244.3 g, 1024.8 mmol), Cu (27.2 g, 427.0 mmol), K_2CO_3 (236.1 g, 1.70 mol) 및 nitrobenzene (3000 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[156] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 유기물층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을

제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 1-(4-chlorophenyl)-1H-indole (163.3 g, 수율 84%)을 얻었다.

[157] ^{1}H-NMR: δ 6.52 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.33-7.37 (m, 3H), 7.49 (d, 2H), 7.60 (d, 1H), 7.93-7.94 (m, 2H)

[158] <단계 2> CAz-1 의 합성

[159] 

CAz-1

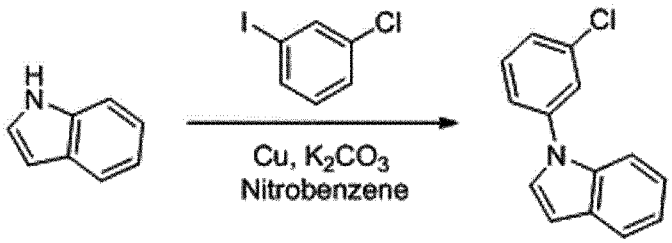
[160] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 1-(4-chlorophenyl)-1H-indole (163.3g, 717.4 mmol), polyphosphoric acid (817 g)를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 물에서 유기물을 추출한 다음, 여과하여 CAz-1 (49 g, 수율 30%)을 얻었다.

[161] CAz-1 의 ^{1}H-NMR: δ 6.57 (d, 1H), 6.81 (dd, 1H), 6.99-7.09 (m, 4H), 7.17 (s, 1H), 7.25 (d, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.42 (b, 1H)

[162]

[163] **[준비예 2] CAz-2 및 CAz-3 의 합성**

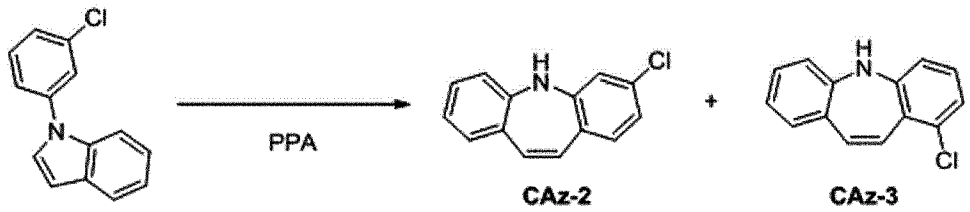
[164] <단계 1> 1-(3-chlorophenyl)-1H-indole 의 합성

[165] 

[166] 질소 기류 하에서 1H-indole (100g, 854.0 mmol), 1-chloro-3-iodobenzene (244.3 g, 1024.8 mmol), Cu (27.2 g, 427.0 mmol), K_2CO_3 (236.1 g, 1.70 mol) 및 nitrobenzene (3000 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기물층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 1-(3-chlorophenyl)-1H-indole (171.0 g, 수율 88%)을 얻었다.

[167] ^{1}H-NMR: δ 6.52 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.33-7.39 (m, 3H), 7.49 (d, 1H), 7.60 (d, 1H), 7.81 (s, 1H), 7.93-7.94 (m, 2H)

[168] <단계 2> CAz-2 및 CAz-3 의 합성

[169] 

[170] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 1-(3-chlorophenyl)-1H-indole (171.0 g, 751.2 mmol), polyphosphoric acid (855.2 g)를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 물에서 유기물층을 추출한 다음, 여과하여 CAz-2 (21.6 g, 수율 12.6 %)와 CAz-3 (8.4 g, 14.4 %)을 얻었다.

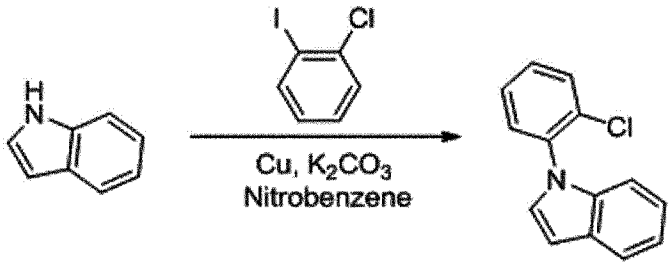
[171] CAz-2 의 ^{1}H-NMR: δ 6.81-6.85 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.19-7.25 (m, 2H), 8.21 (d, 1H), 8.42 (b, 1H)

[172] CAz-3 의 ^{1}H-NMR: δ 6.81-6.85 (m, 2H), 6.99-7.05 (m, 4H), 7.25 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.42 (b, 1H)

[173]

[174] **[준비예 3] CAz-4 의 합성**

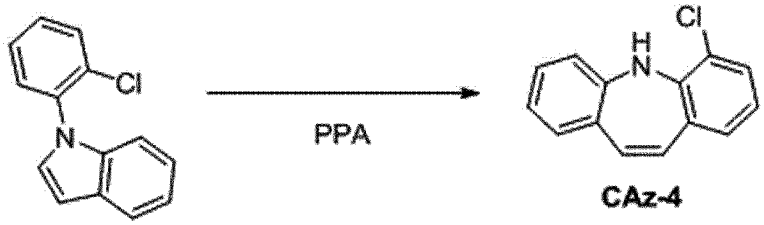
[175] <단계 1> 1-(2-chlorophenyl)-1H-indole 의 합성

[176] 

[177] 질소 기류 하에서 1H-indole (100g, 854.0 mmol), 1-chloro-3-iodobenzene (244.3 g, 1024.8 mmol), Cu (27.2 g, 427.0 mmol), K_2CO_3 (236.1 g, 1.70 mol) 및 nitrobenzene (3000 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기물층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 1-(2-chlorophenyl)-1H-indole (167.1 g, 수율 86%)을 얻었다.

[178] ^{1}H-NMR: δ 6.52 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.33-7.60 (m, 6H), 7.93-7.94 (m, 2H)

[179] <단계 2> CAz-4 의 합성

[180] 

[181] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 1-(2-chlorophenyl)-1H-indole (171.0 g, 751.2 mmol), polyphosphoric acid (855.2 g)를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 물에서 유기물층을 추출한 다음, 여과하여 CAz-4

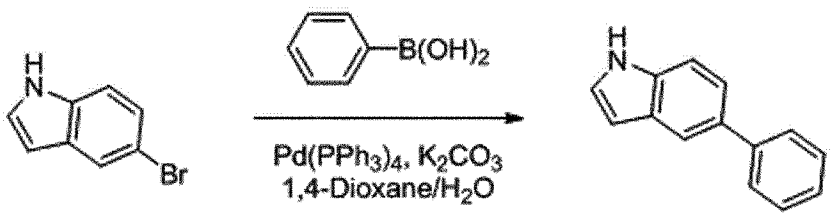
(51.8 g, 31 %) 를 얻었다.

[182] CAz-4 의 ^{1}H-NMR: δ 6.75-6.81 (m, 2H), 6.99-7.05 (m, 4H), 7.25-7.26 (m, 2H), 8.21 (d, 1H), 8.42 (b, 1H)

[183]

[184] **[준비예 4] CAz-5 의 합성**

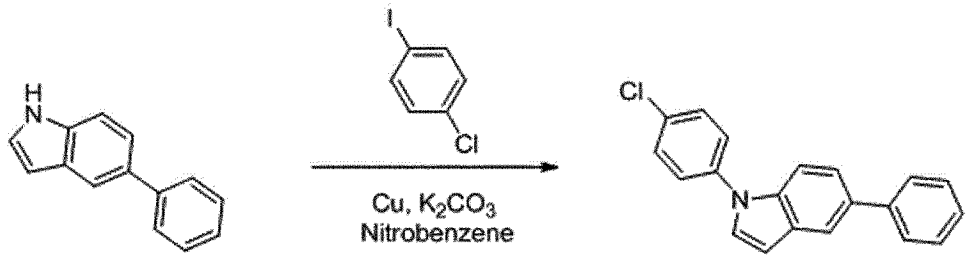
[185] <단계 1> 5-phenyl-1H-indole 의 합성

[186] 

[187] 질소 기류 하에서 5-bromo-1H-indole (100 g, 439.2 mmol), phenylboronic acid (64.3 g, 527.0 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (25.4 g, 22.0 mmol), K_2CO_3 (121.4 g, 878 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (200 ml/50 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 후, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 5-phenyl-1H-indole (70.4 g, 수율 83%)을 얻었다.

[188] ^{1}H-NMR: δ 6.45 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.41-7.52 (m, 5H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 10.1 (b, 1H)

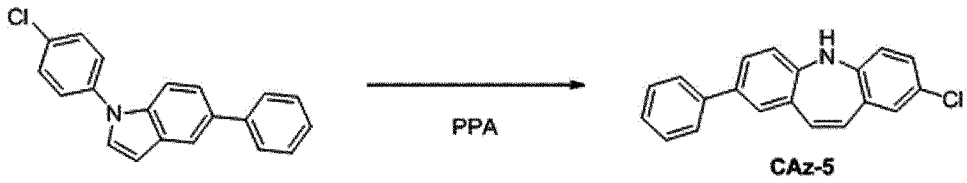
[189] <단계 2> 1-(4-chlorophenyl)-5-phenyl-1H-indole의 합성

[190] 

[191] 질소 기류 하에서 <단계 1>에서 얻은 5-phenyl-1H-indole (70.4g, 364.0 mmol), 1-chloro-4-iodobenzene (104.3 g, 437.4 mmol), Cu (11.6 g, 182.2 mmol), K_2CO_3 (100.8 g, 729.1 mmol) 및 nitrobenzene (2000 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 1-(4-chlorophenyl)-5-phenyl-1H-indole (88.6 g, 수율 80%)을 얻었다.

[192] ^{1}H-NMR: δ 6.52 (d, 1H), 7.37-7.52 (m, 9H), 7.60 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.18 (d, 1H)

[193] <단계 3> CAz-5 의 합성

[194] 

CAz-5

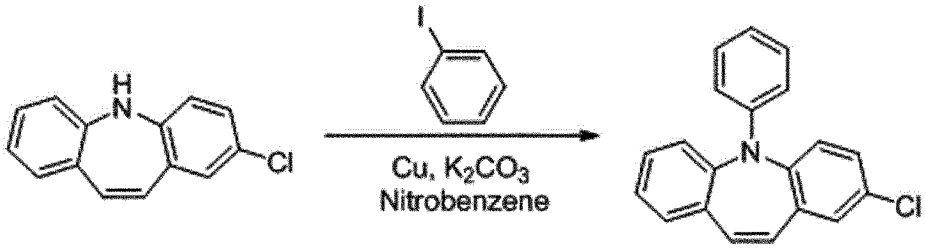
[195] 질소 기류 하에서 <단계 2>에서 얻은 1-(4-chlorophenyl)-5-phenyl-1H-indole (88.6 g, 291.6 mmol), polyphosphoric acid (442.9 g)를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물에서 유기층을 추출한 다음, 여과하여 CAz-5 (29 g, 수율 33%)를 얻었다.

[196] CAz-5 의 ^{1}H-NMR: δ 6.57 (d, 1H), 6.69 (d, 1H), 6.99-7.00 (m, 2H), 7.09 (d, 1H), 7.17 (s, 1H), 7.39-7.52 (m, 6H), 7.82 (s, 1H), 8.42 (b, 1H)

[197]

[198] **[준비예 5] BAz-1 의 합성**

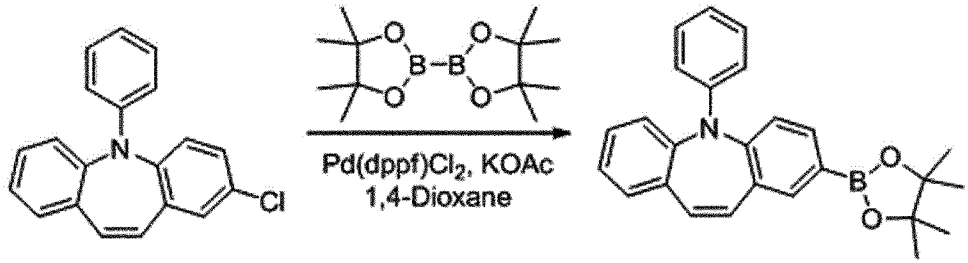
[199] <단계 1> 2-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[200] 

[201] 질소 기류 하에서 상기 준비예 1에서 합성된 CAz-1 (49 g, 215.2 mmol), iodobenzene (52.7 g, 258.1 mmol), Cu (6.8 g, 107.6 mmol), K_2CO_3 (59.5 g, 430 mmol) 및 nitrobenzene (1000 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 2-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (52.3 g, 수율 80%)을 얻었다.

[202] ^{1}H-NMR: δ 6.57-6.63 (m, 4H), 6.80-6.81 (m, 2H), 6.99-7.09 (m, 4H), 7.17-7.25 (m, 4H)

[203] <단계 2>
5-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[204] 

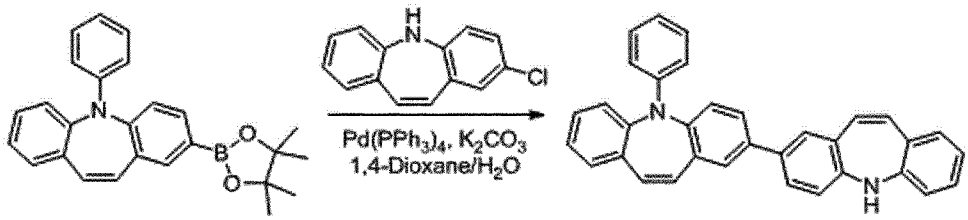
[205] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 2-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (52.3 g, 172.2 mmol), 4,4,4',4',5,5, 5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (48.1

g, 189.4 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (15.1 g, 17.2 mmol), KOAc (48.6 g, 516.5 mmol) 및 1,4-Dioxane (500 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 5-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (48.3 g, 수율 71%)을 얻었다.

[206] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.61-6.63 (m, 4H), 6.81-6.83 (m, 2H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.20-7.25 (m, 3H), 7.35-7.36 (m, 2H)

[207] <단계 3> BAz-1 의 합성

[208]



BAz-1

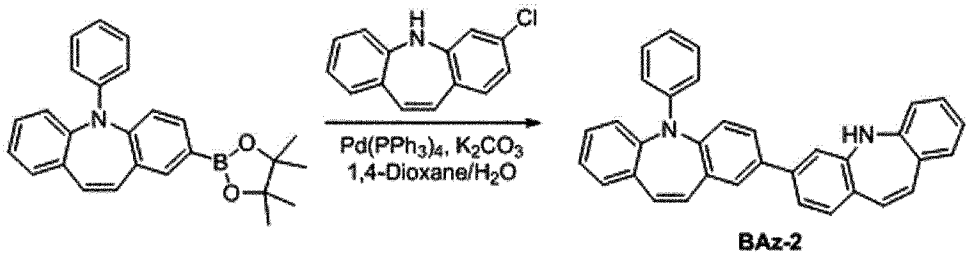
[209] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (48.3 g, 122.2 mmol), CAz-1 (33.4 g, 146.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.1 g, 6.1 mmol), K_2CO_3 (33.8 g, 244.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-1 (42.2 g, 수율 75%)을 얻었다.

[210] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 5H), 6.80-6.81 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 6H), 7.20-7.25 (m, 4H), 7.39-7.40 (m, 2H), 7.80-7.82 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[211]

[212] **[준비예 6] BAz-2 의 합성**

[213]



BAz-2

[214] 질소 기류 하에서 준비예 5의 상기 <단계 2>에서 합성된 5-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (48.3 g, 122.2 mmol), 준비예 2에서 합성된 CAz-2 (33.4 g, 146.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.1 g, 6.1 mmol), K_2CO_3 (33.8 g, 244.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후,

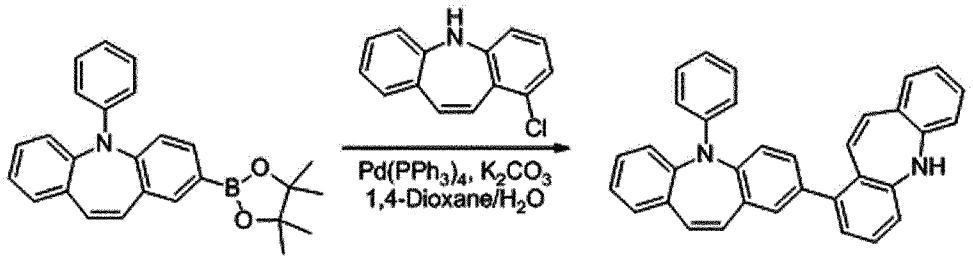
메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-2 (40.0 g, 수율 71%)를 얻었다.

[215] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 4H), 6.80-6.81 (m, 3H), 6.89 (s, 1H), 6.99-7.05 (m, 7H), 7.20-7.31 (m, 5H), 7.39 (d, 1H), 7.82 (s, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[216]

[217] **[준비예 7] BAz-3 의 합성**

[218]



BAz-3

[219] 질소 기류 하에서 준비예 5의 상기 <단계 2>에서 얻은 5-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (48.3 g, 122.2 mmol), 준비예 2에서 합성된 CAz-3 (33.4 g, 146.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.1 g, 6.1 mmol), K_2CO_3 (33.8 g, 244.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-3 (36.6 g, 수율 65%)를 얻었다.

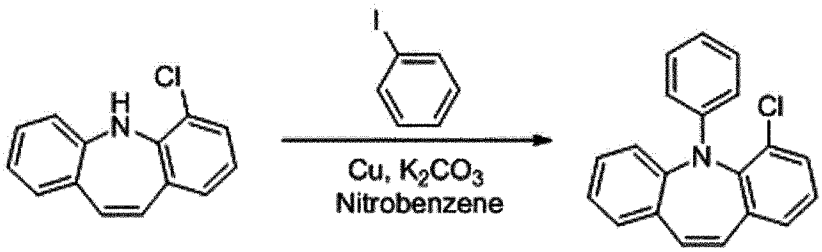
[220] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 4H), 6.80-6.81 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 6H), 7.20-7.29 (m, 5H), 7.39 (d, 1H), 7.70 (d, 1H), 7.82 (s, 1H), 8.17-8.21 (m, 2H), 8.43 (b, 1H)

[221]

[222] **[준비예 8] BAz-4 의 합성**

[223] <단계 1> 4-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[224]



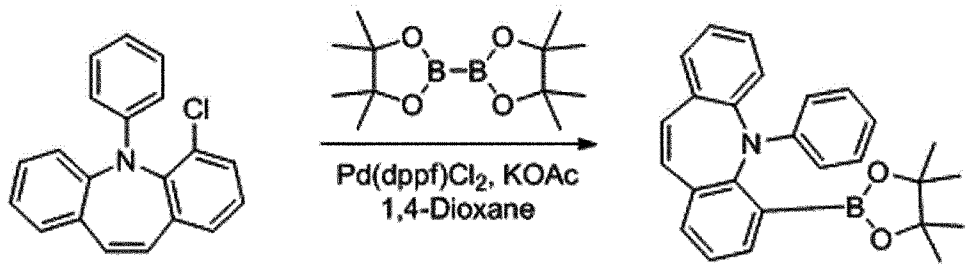
[225] 질소 기류 하에서 준비예 3에서 합성된 CAz-4 (45 g, 197.6 mmol), iodobenzene (48.4 g, 237.2 mmol), Cu (6.3 g, 98.8 mmol), K_2CO_3 (54.6 g, 395.3 mmol) 및 nitrobenzene (1000 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 4-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (49.2 g, 수율 82%)을 얻었다.

[226] ^{1}H-NMR: δ 6.58-6.62 (m, 3H), 6.75-6.81 (m, 3H), 6.99-7.25 (m, 8H)

[227] <단계 2>

5-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[228]



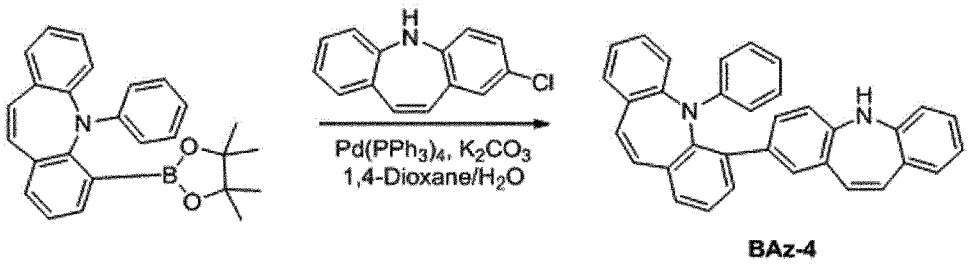
[229] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 4-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (49.2 g, 162.1 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (45.3 g, 178.3 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (14.2 g, 16.2 mmol), KOAc (45.8 g, 486.2 mmol) 및 1,4-Dioxane (500 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[230] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 5-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (47.4 g, 수율 74%)을 얻었다.

[231] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.61-6.63 (m, 3H), 6.81-6.83 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.20-7.25 (m, 4H), 7.35 (d, 1H)

[232] <단계 3> BAz-4 의 합성

[233]



BAz-4

[234] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (47.4 g, 119.9 mmol), 준비예 1에서 합성된 CAz-1 (32.8 g, 143.9 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (6.9 g, 6.0 mmol), K_2CO_3 (33.2 g, 239.9 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 4:1 (v/v))로 정제하여 BAz-4 (38.1 g, 수율 69%)을 얻었다.

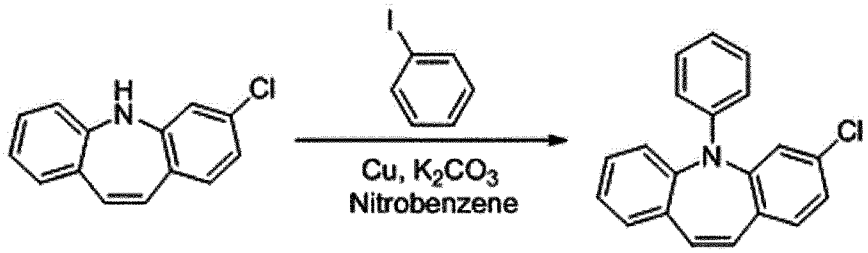
[235] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 4H), 6.81-6.87 (m, 4H), 6.99-7.05 (m, 6H), 7.20-7.25 (m, 5H), 7.39-7.40 (m, 2H), 7.82 (s, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[236]

[237] **[준비예 9] BAz-5 의 합성**

[238] <단계1> 3-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[239]

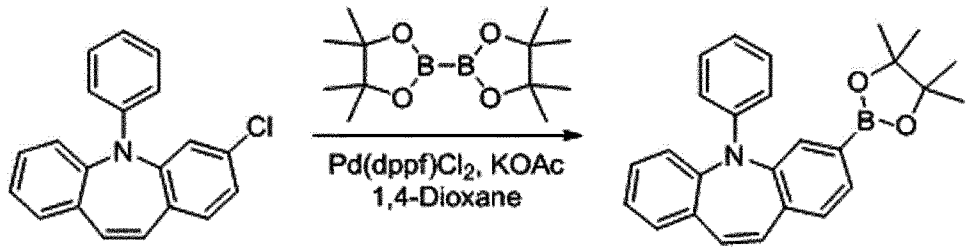


[240] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 CAz-2 (35.9 g, 157.7 mmol), iodobenzene (38.6 g, 189.3 mmol), Cu (5.0 g, 78.9 mmol), K_2CO_3 (43.6 g, 315.5 mmol) 및 nitrobenzene (1000 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 3-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (35.9 g, 수율 75%)을 얻었다.

[241] ^{1}H-NMR: δ 6.60-6.63 (m, 3H), 6.81-6.83 (m, 4H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.19-7.24 (m, 4H)

[242] <단계 2> 5-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[243]

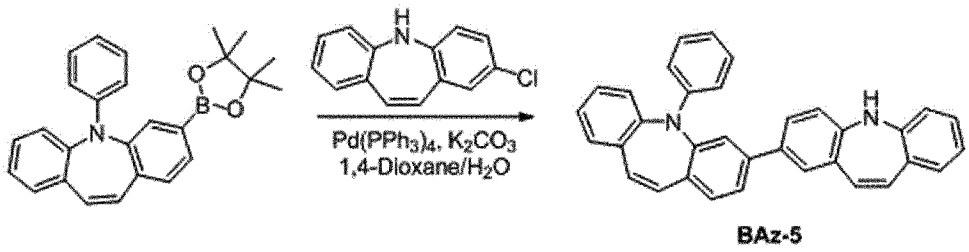


[244] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 3-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (35.9 g, 118.3 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (33.0 g, 130.1 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (10.4 g, 11.8 mmol), KOAc (33.4 g, 354.8 mmol) 및 1,4-Dioxane (400 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 5-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (36.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[245] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.61-6.69 (m, 4H), 6.81-6.83 (m, 2H), 6.99-7.11 (m, 4H), 7.20-7.25 (m, 4H)

[246] <단계 3> BAz-5 의 합성

[247]



BAz-5

[248] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (36.5 g, 92.2 mmol), CAz-1 (25.2 g, 110.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.3 g, 4.6 mmol), K_2CO_3 (25.5 g, 184.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (300 ml/70 ml)를 혼합하고, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[249] 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-5 (28.5 g, 수율 67%)을 얻었다.

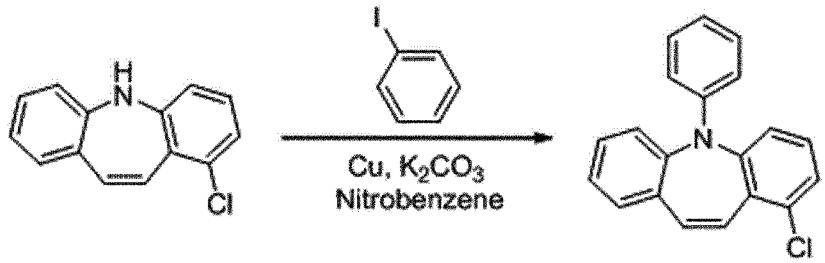
[250] ^{1}H-NMR: δ 6.61-6.69 (m, 4H), 6.81-6.83 (m, 3H), 6.89 (s, 1H), 6.99-7.05 (m, 7H), 7.20-7.31 (m, 5H), 7.39 (d, 1H), 7.82 (s, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[251]

[252] **[준비예 10] BAz-6 의 합성**

[253] <단계 1> 1-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[254]



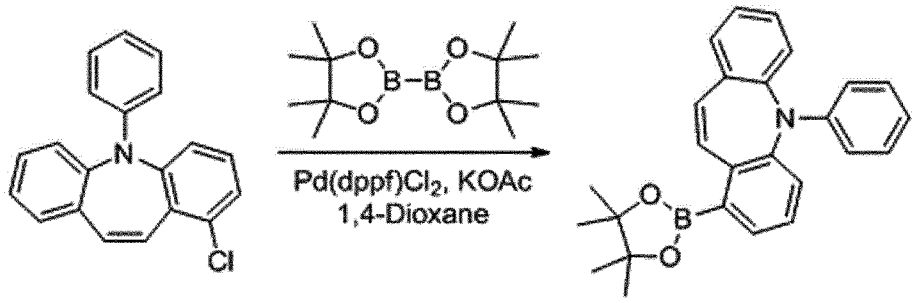
[255] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 CAz-3 (32 g, 140.5 mmol), iodobenzene (34.4 g, 168.7 mmol), Cu (4.5 g, 70.3 mmol), K_2CO_3 (38.8 g, 281.1 mmol) 및 nitrobenzene (500 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[256] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 1-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (34.6 g, 수율 81%)을 얻었다.

[257] ^{1}H-NMR: δ 6.51 (d, 1H), 6.61-6.63 (m, 3H), 6.81-6.85 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 4H), 7.20-7.25 (m, 3H)

[258] <단계 2> 5-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[259]



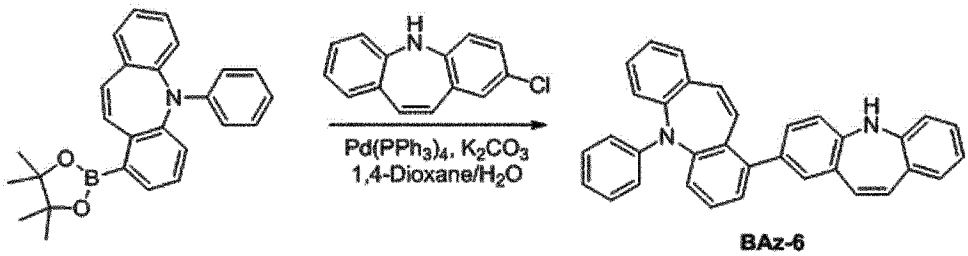
[260] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 1-chloro-5-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (34.6 g, 113.8 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (31.8 g, 125.2 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (10.0 g, 11.4 mmol), KOAc (32.2 g, 341.5 mmol) 및 1,4-Dioxane (300 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[261] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 5-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (48.3 g, 수율 71%)을 얻었다.

[262] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.61-6.63 (m, 4H), 6.81-6.82 (m, 2H), 6.99-7.11 (m, 5H), 7.20-7.25 (m, 3H)

[263] <u><단계 3> BAz-6 의 합성</u>

[264]



BAz-6

[265] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (33.8 g, 85.4 mmol), CAz-1 (23.3 g, 102.5 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (4.9 g, 4.3 mmol), K_2CO_3 (23.6 g, 170.1 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (300 ml/70 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-6 (24.8 g, 수율 63%)을 얻었다.

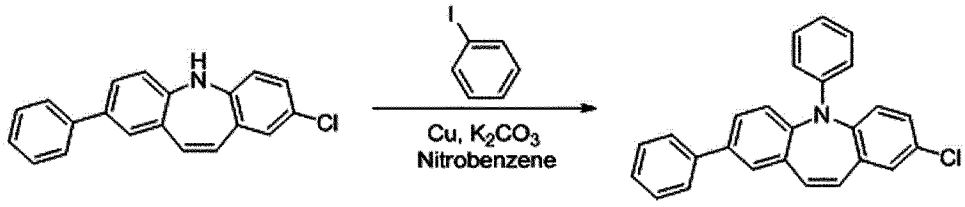
[266] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 5H), 6.80-6.81 (m, 3H), 6.99-7.05 (m, 6H), 7.20-7.29 (m, 5H), 7.39 (d, 1H), 7.70 (d, 1H), 7.82 (s, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[267]

[268] **<u>[준비예 11] BAz-7 의 합성</u>**

[269] <u><단계 1> 2-chloro-5,8-diphenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성</u>

[270]



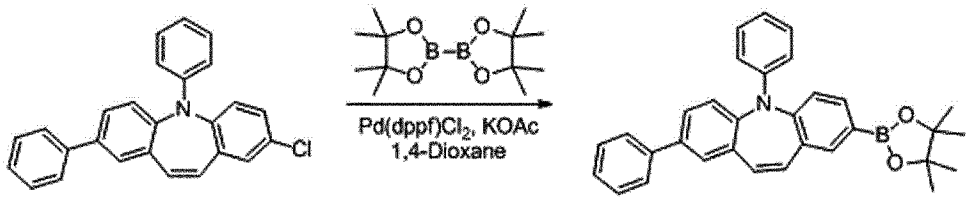
[271] 질소 기류 하에서 준비예 4에서 얻은 CAz-5 (50 g, 164.6 mmol), iodobenzene (40.3 g, 197.5 mmol), Cu (5.2 g, 82.3 mmol), K_2CO_3 (45.5 g, 329.2 mmol) 및 nitrobenzene (500 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 2-chloro-5,8-diphenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (46.9 g, 수율 75%)을 얻었다.

[272] ^{1}H-NMR: δ 6.57-6.69 (m, 4H), 6.81 (t, 1H), 6.99-7.00 (m, 2H), 7.09 (d, 1H), 7.17-7.20 (m, 3H), 7.39-7.52 (m, 6H), 7.82 (s, 1H)

[273] <u><단계 2></u>

<u>2,5-diphenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine의 합성</u>

[274]

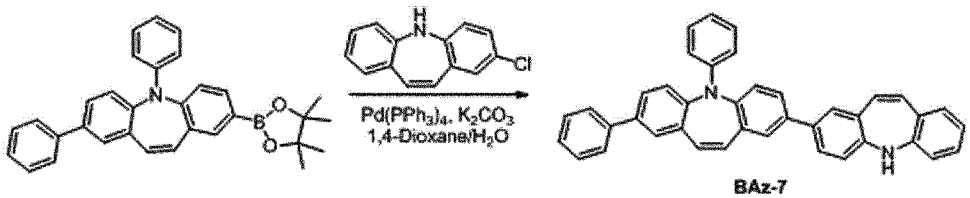


[275] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 2-chloro-5,8-diphenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (46.9 g, 123.4 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (34.5 g, 135.8 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (10.8 g, 12.3 mmol), KOAc (34.9 g, 370.3 mmol) 및 1,4-Dioxane (500 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 2,5-diphenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (41.3 g, 수율 71%)을 얻었다.

[276] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.61-6.69 (m, 4H), 6.81-6.99 (m, 3H), 7.20 (t, 2H), 7.35-7.41 (m, 4H), 7.51-7.52 (m, 4H), 7.82 (s, 1H)

[277] <u><단계 3> BAz-7 의 합성</u>

[278]



[279] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은

2,5-diphenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (41.3 g, 87.6 mmol), CAz-1 (23.9 g, 105.2 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.1 g, 4.4 mmol), K_2CO_3 (24.2 g, 175.3 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-7 (29.2 g, 수율 62%)을 얻었다.

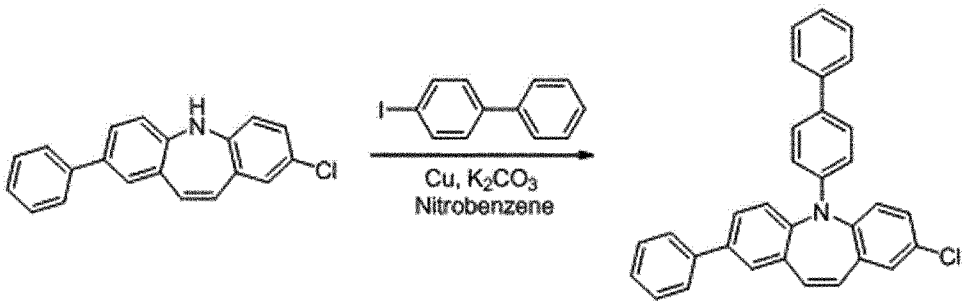
[280] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 5H), 6.80-6.81 (m, 2H), 6.99-7.05 (m, 5H), 7.20-7.25 (m, 3H), 7.39-7.52 (m, 8H), 7.79-7.82 (m, 3H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[281]

[282] **[준비예 12] BAz-8 의 합성**

[283] <단계 1> 5-(biphenyl-4-yl)-2-chloro-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[284]

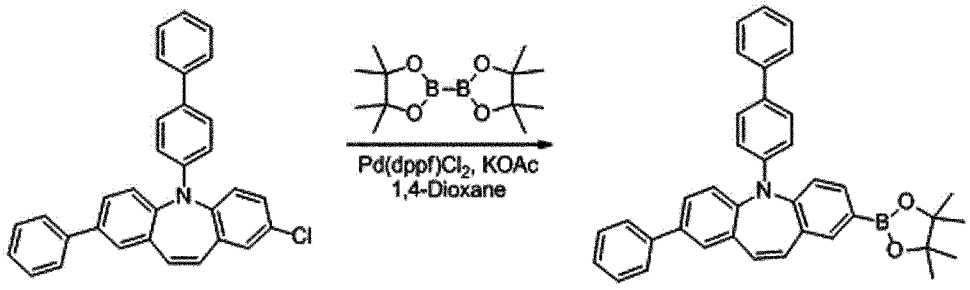


[285] 질소 기류 하에서 준비예 4에서 얻은 CAz-5 (50 g, 164.6 mmol), 4-iodobiphenyl (55.3 g, 197.5 mmol), Cu (5.2 g, 82.3 mmol), K_2CO_3 (45.5 g, 329.2 mmol) 및 nitrobenzene (500 ml)를 혼합하고, 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 5-(biphenyl-4-yl)-2-chloro-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (53.3 g, 수율 71%)을 얻었다.

[286] ^{1}H-NMR: δ 6.57 (d, 1H), 6.67-6.69 (m, 3H), 6.99-7.01 (m, 2H), 7.09 (d, 1H), 7.17 (s, 1H), 7.39-7.54 (m, 13H), 7.82 (s, 1H)

[287] <단계 2> 5-(biphenyl-4-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[288]



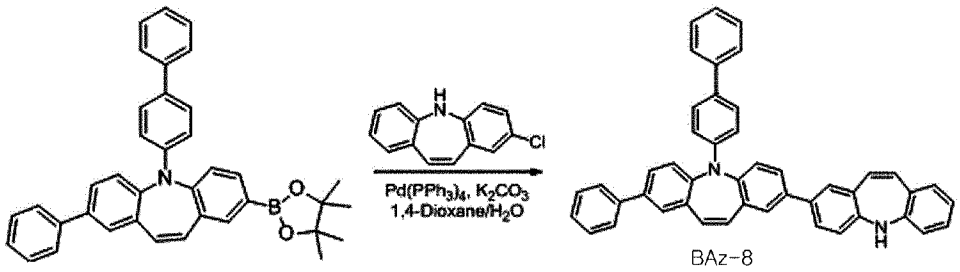
[289] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은

5-(biphenyl-4-yl)-2-chloro-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (53.3 g, 116.9 mmol), 4,4,4',4',5,5, 5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (32.6 g, 128.5 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (10.2 g, 11.7 mmol), KOAc (33.0 g, 350.6 mmol) 및 1,4-Dioxane (500 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 5-(biphenyl-4-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (47.3 g, 수율 74%)을 얻었다.

[290] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.63-6.69 (m, 4H), 6.97-6.99 (m, 2H), 7.35-7.41 (m, 5H), 7.51-7.54 (m, 10H), 7.82 (s, 1H)

[291] <단계 3> BAz-8 의 합성

[292]



[293] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-(biphenyl-4-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (47.3 g, 86.4 mmol), CAz-1 (23.6 g, 103.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.0 g, 4.3 mmol), K_2CO_3 (23.9 g, 173.0 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-8 (33.4 g, 수율 63%)을 얻었다.

[294] ^{1}H-NMR: δ 6.65-6.68 (m, 5H), 6.81 (t, 1H), 6.99-7.05 (m, 5H), 7.25 (d, 1H), 7.39-7.54 (m, 15H), 7.78-7.81 (m, 3H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

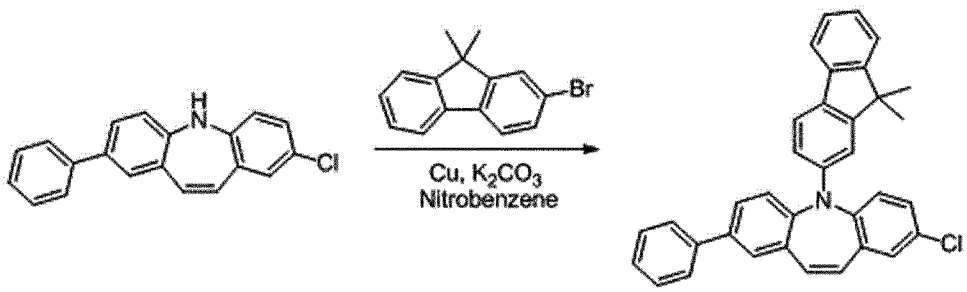
[295]

[296] **[준비예 13] BAz-9 의 합성**

[297] <단계1>

2-chloro-5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[298]



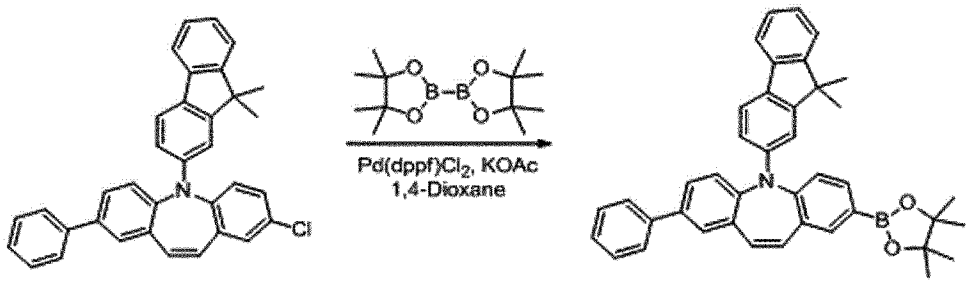
[299] 질소 기류 하에서 준비예 4에서 합성된 CAz-5 (50 g, 164.6 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (54.0 g, 197.5 mmol), Cu (5.2 g, 82.3 mmol), K_2CO_3 (45.5 g, 329.2 mmol) 및 nitrobenzene (500 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 2-chloro-5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (61.2 g, 수율 75%)을 얻었다.

[300] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H), 6.57-6.58 (m, 2H), 6.69 (d, 1H), 6.75 (s, 1H), 6.99-7.00 (m, 2H), 7.09 (d, 1H), 7.17 (s, 1H), 7.28 (t, 1H), 7.38-7.41 (m, 3H), 7.51-7.55 (m, 5H), 7.62 (d, 1H), 7.82-7.87 (m, 2H)

[301] <단계 2>

5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine 의 합성

[302]

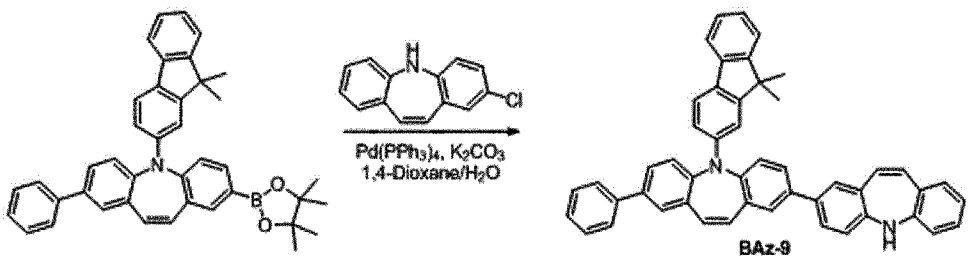


[303] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 2-chloro-5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-8-phenyl-5H-dibenzo[b,f]azepine (61.2 g, 123.4 mmol), 4,4,4',4',5,5, 5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (34.5 g, 135.8 mmol), Pd(dppf)Cl_2 (10.8 g, 12.3 mmol), KOAc (34.9 g, 370.3 mmol) 및 1,4-Dioxane (500 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (52.2 g, 수율 72%)을 얻었다.

[304] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 1.72 (s, 6H), 6.58-6.69 (m, 3H), 6.75 (s, 1H), 6.97-6.99 (m, 2H), 7.28-7.41 (m, 6H), 7.51-7.55 (m, 5H), 7.62 (d, 1H), 7.82-7.87 (m, 2H)

[305] <단계 3> BAz-9 의 합성

[306]



[307] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 5-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,f]azepine (52.2 g, 88.9 mmol), CAz-1 (24.3 g, 106.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.1 g, 4.4 mmol), K_2CO_3 (24.6 g, 177.8 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (500 ml/125 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 BAz-9 (38.3 g, 수율 66%)을 얻었다.

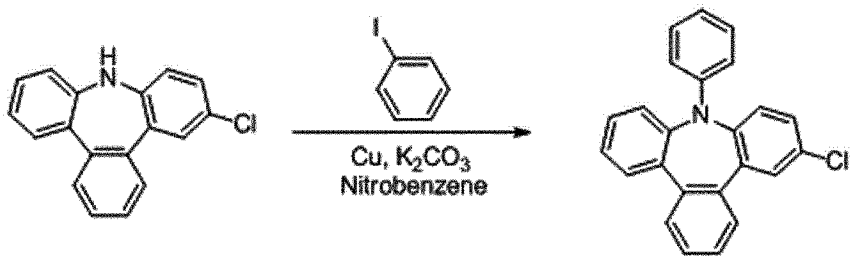
[308] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H), 6.58 (d, 1H), 6.69-6.81 (m, 5H), 6.99-7.05 (m, 5H), 7.25-7.28 (m, 2H), 7.39-7.55 (m, 11H), 7.82-7.87 (m, 4H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[309]

[310] **[준비예 14] BAz-10 의 합성**

[311] <단계 1> 6-chloro-9-phenyl-9H-tribenzo[b,d,f]azepine 합성

[312]



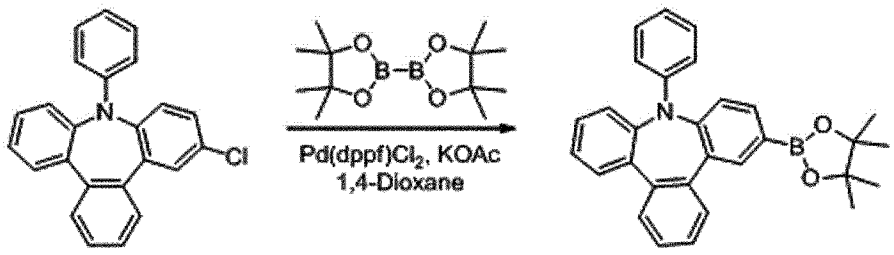
[313] 질소 기류 하에서 6-chloro-9H-tribenzo[b,d,f]azepine (40 g, 144.0 mmol), iodobenzene (35.3 g, 172.8 mmol), Cu (4.5 g, 72.0 mmol), K_2CO_3 (39.8 g, 288.0 mmol) 및 nitrobenzene (400 ml)를 혼합하고 210℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[314] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 6-chloro-9-phenyl-9H-tribenzo[b,d,f]azepine (35.2 g, 수율 69%)을 얻었다.

[315] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 4H), 6.81-6.87 (m, 2H), 7.16-7.20 (m, 4H), 7.47-7.54 (m, 3H), 7.76 (s, 1H), 7.82-7.84 (m, 2H)

[316] <단계 2> 9-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-tribenzo[b,d,f]azepine 의 합성

[317]



[318] 질소 기류 하에서 상기 <단계 1>에서 얻은 6-chloro-9-phenyl-9H-tribenzo[b,d,f]azepine (35.2 g, 99.4 mmol), 4,4,4',4',5,5,

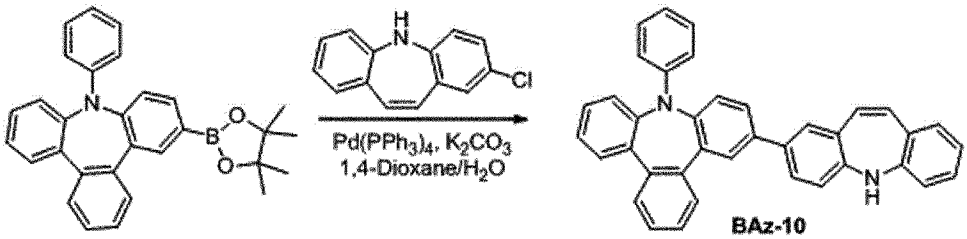
5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (27.8 g, 109.3 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (8.7 g, 9.9 mmol), KOAc (28.1 g, 298.1 mmol) 및 1,4-Dioxane (300 ml)를 혼합하고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[319] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 9-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-tribenzo[b,d,f]azepine (32.7 g, 수율 74%)을 얻었다.

[320] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.63-6.69 (m, 4H), 6.81-6.87 (m, 2H), 7.16-7.20 (m, 3H), 7.41-7.47 (m, 4H), 7.54 (d, 1H), 7.83-7.85 (m, 2H)

[321] <단계 3> BAz-10 의 합성

[322]



[323] 질소 기류 하에서 상기 <단계 2>에서 얻은 9-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-tribenzo[b,d,f]azepine (32.7 g, 73.5 mmol), CAz-1 (20.1 g, 88.2 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (4.2 g, 3.7 mmol), K_2CO_3 (20.3 g, 147.1 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다.

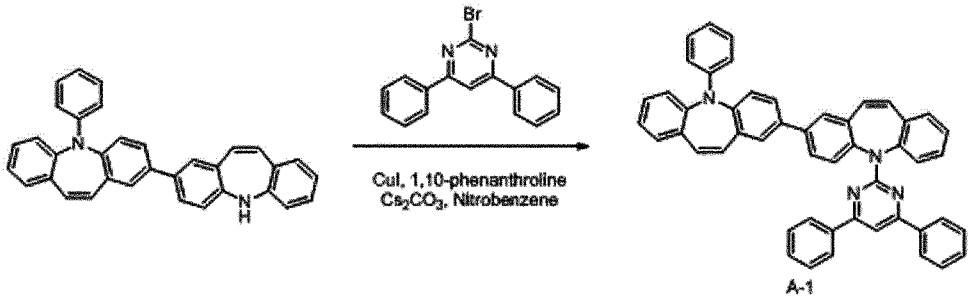
[324] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 4:1 (v/v))로 정제하여 BAz-10 (27.4 g, 수율 73%)을 얻었다.

[325] ^{1}H-NMR: δ 6.69-6.87 (m, 8H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.16-7.25 (m, 4H), 7.39-7.54 (m, 6H), 7.82-7.85 (m, 3H), 8.21 (d, 1H), 8.43 (b, 1H)

[326]

[327] **[합성예 1] A-1의 합성**

[328]



[329] 질소 기류 하에서 준비예 5에서 합성된 BAz-1 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후,

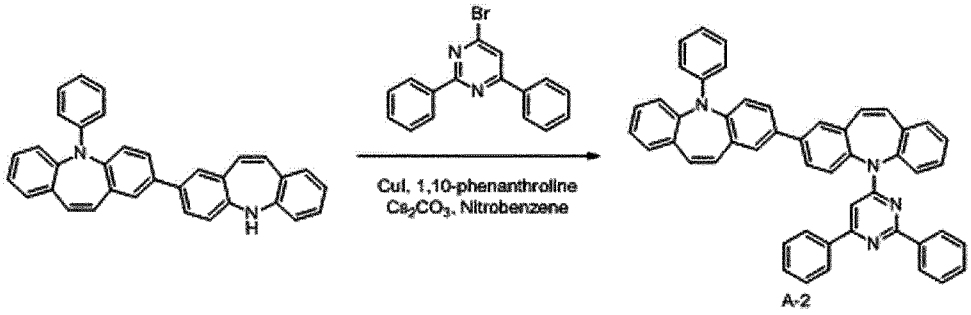
고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-1 (3.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[330] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[331]

[332] **[합성예 2] A-2의 합성**

[333]



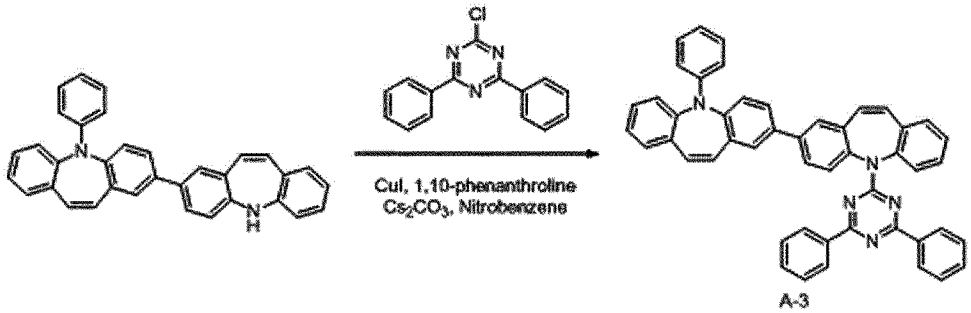
[334] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-2 (3.1 g, 수율 66%)를 얻었다.

[335] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[336]

[337] **[합성예 3] A-3의 합성**

[338]



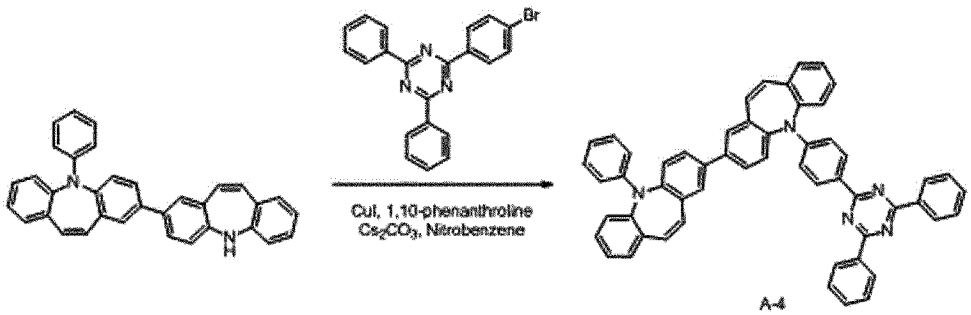
[339] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-3 (2.9 g, 수율 63%)을 얻었다.

[340] Mass (이론치: 691.27, 측정치: 691 g/mol)

[341]

[342] **[합성예 4] A-4의 합성**

[343]



A-4

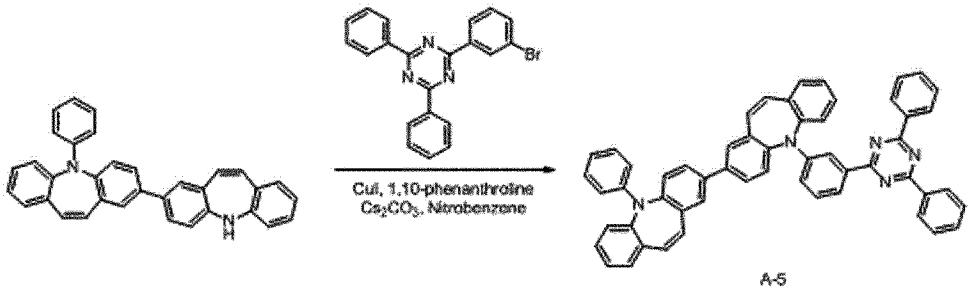
[344] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-4 (3.5 g, 수율 68%)를 얻었다.

[345] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[346]

[347] **[합성예 5]A-5의 합성**

[348]



A-5

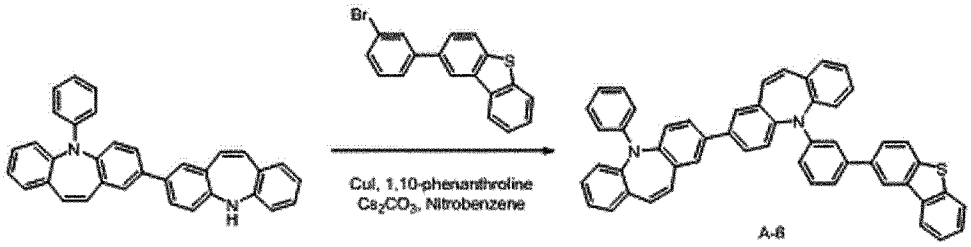
[349] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-5 (3.7 g, 수율 71%)를 얻었다.

[350] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[351]

[352] **[합성예 6] A-6의 합성**

[353]



A-6

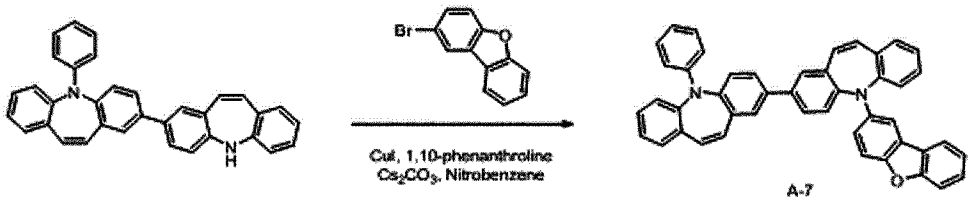
[354] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-6 (2.9 g, 수율 61%)을 얻었다.

[355] Mass (이론치: 718.24, 측정치: 718 g/mol)

[356]

[357] **[합성예 7] A-7의 합성**

[358]



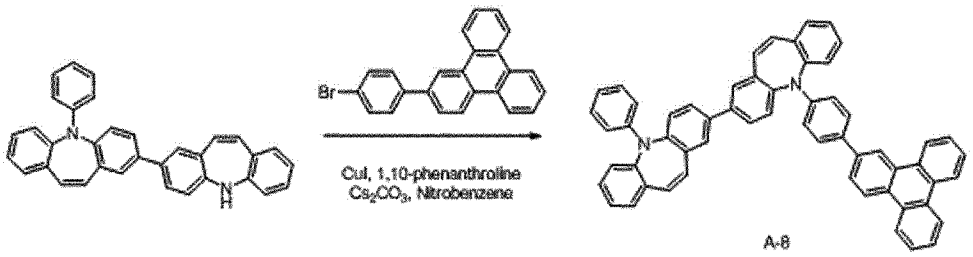
[359] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-7 (2.8 g, 수율 67%)을 얻었다.

[360] Mass (이론치: 626.23, 측정치: 626 g/mol)

[361]

[362] **[합성예 8] A-8의 합성**

[363]



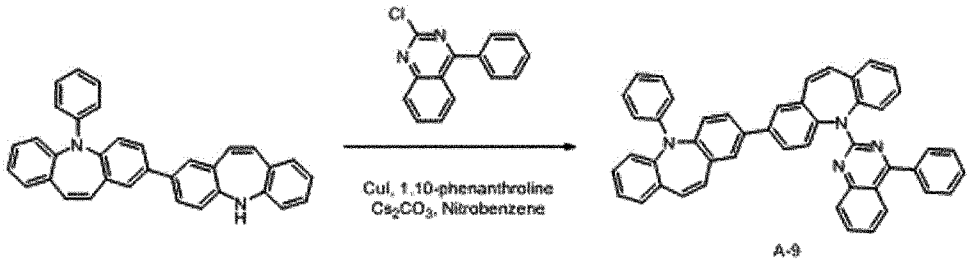
[364] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-8 (3.3 g, 수율 64%)을 얻었다.

[365] Mass (이론치: 762.30, 측정치: 762 g/mol)

[366]

[367] **[합성예 9] A-9의 합성**

[368]



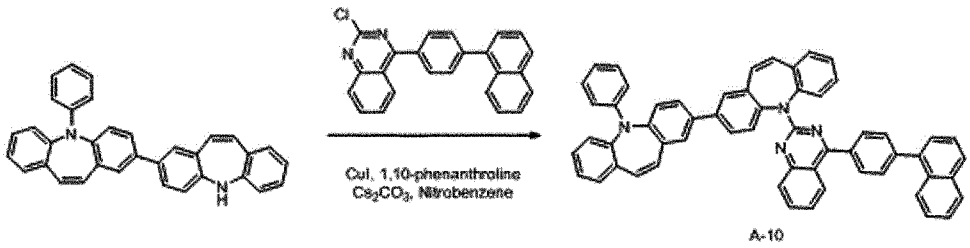
[369] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-9 (2.9 g, 수율 66%)을 얻었다.

[370] Mass (이론치: 664.26, 측정치: 664 g/mol)

[371]

[372] **[합성예 10] A-10의 합성**

[373]



A-10

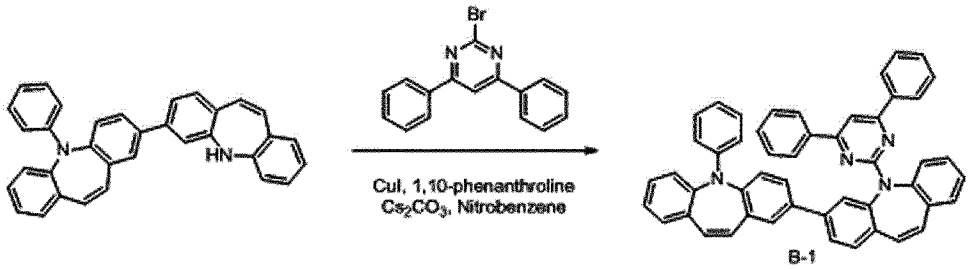
[374] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-10 (3.9 g, 수율 73%)을 얻었다.

[375] Mass (이론치: 790.30, 측정치: 790 g/mol)

[376]

[377] **[합성예 11] B-1의 합성**

[378]



B-1

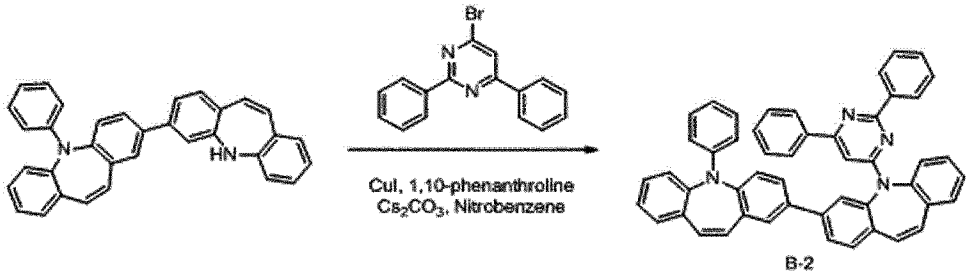
[379] 질소 기류 하에서 준비예 6에서 합성된 BAz-2 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B-1 (3.1 g, 수율 66%)을 얻었다.

[380] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[381]

[382] **[합성예 12] B-2의 합성**

[383]



B-2

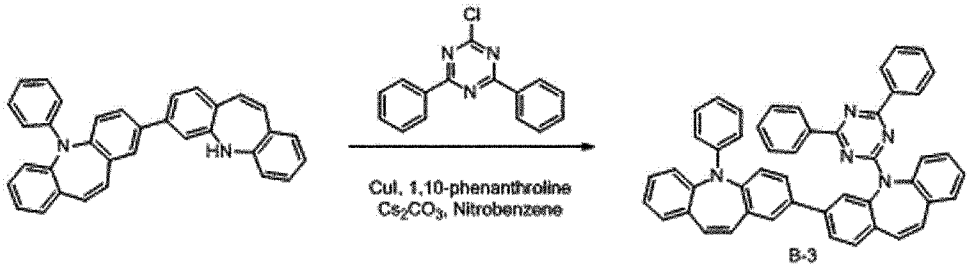
[384] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-2 (3.0 g, 수율 64%)를 얻었다.

[385] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[386]

[387] **[합성예 13] B-3의 합성**

[388]



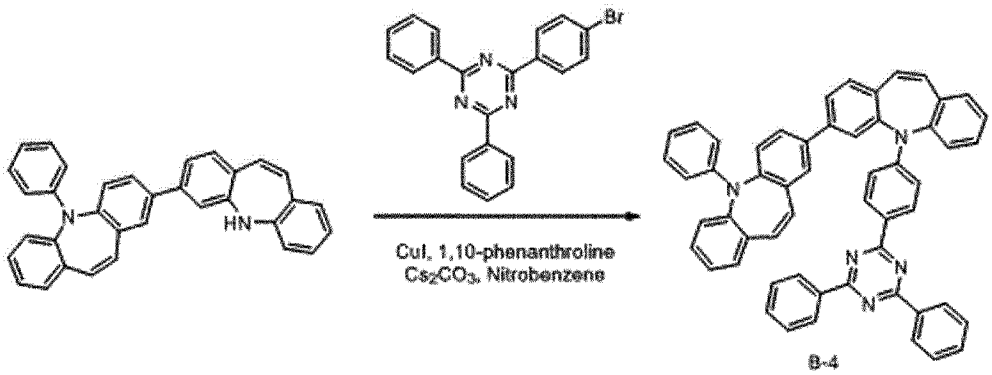
[389] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-3 (2.8 g, 수율 61%)을 얻었다.

[390] Mass (이론치: 691.27, 측정치: 691 g/mol)

[391]

[392] **[합성예 14] B-4의 합성**

[393]



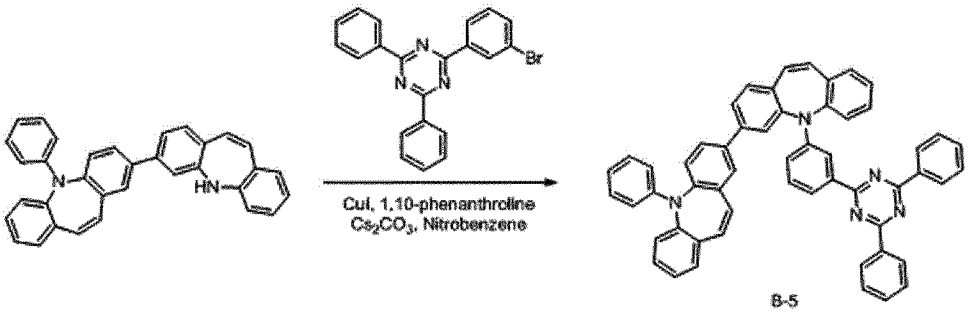
[394] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-4 (3.5 g, 수율 69%)를 얻었다.

[395] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[396]

[397] **[합성예 15] B-5의 합성**

[398]



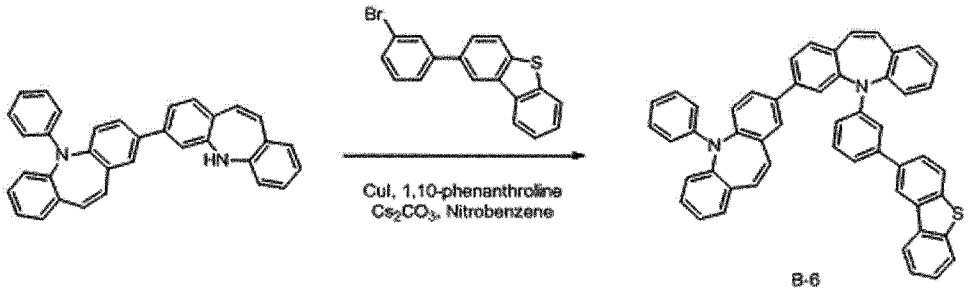
[399] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-5 (3.3 g, 수율 65%)를 얻었다.

[400] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[401]

[402] **[합성예 16] B-6의 합성**

[403]



B-6

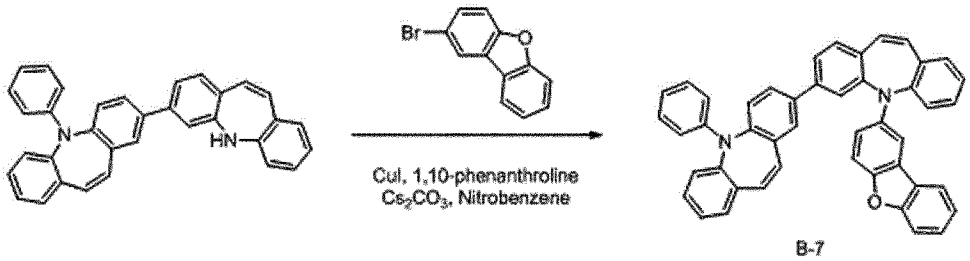
[404] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-6 (3.2 g, 수율 66%)을 얻었다.

[405] Mass (이론치: 718.24, 측정치: 718 g/mol)

[406]

[407] **[합성예 17] B-7의 합성**

[408]



B-7

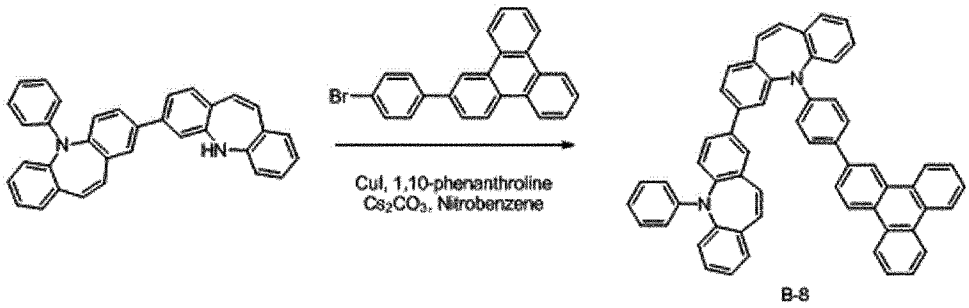
[409] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-7 (2.7 g, 수율 64%)을 얻었다.

[410] Mass (이론치: 626.23, 측정치: 626 g/mol)

[411]

[412] **[합성예 18] B-8의 합성**

[413]



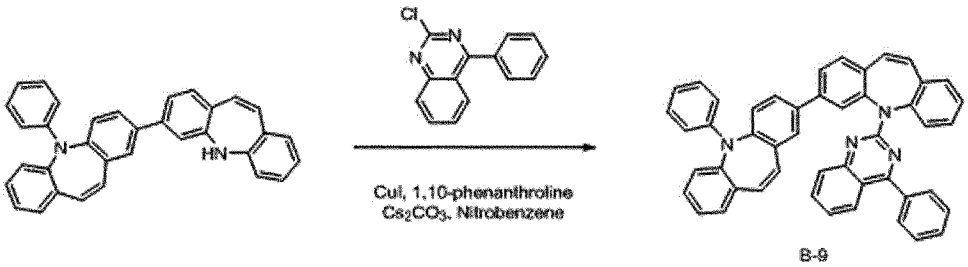
[414] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-8 (3.5 g, 수율 68%)을 얻었다.

[415] Mass (이론치: 762.30, 측정치: 762 g/mol)

[416]

[417] **[합성예 19] B-9의 합성**

[418]



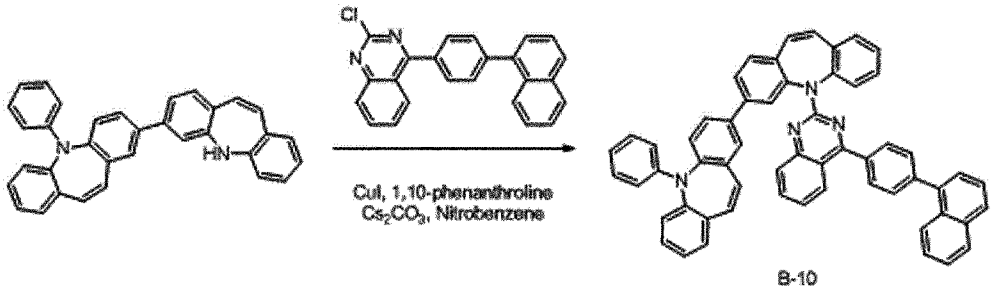
[419] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-9 (3.1 g, 수율 69%)을 얻었다.

[420] Mass (이론치: 664.26, 측정치: 664 g/mol)

[421]

[422] **[합성예 20] B-10의 합성**

[423]



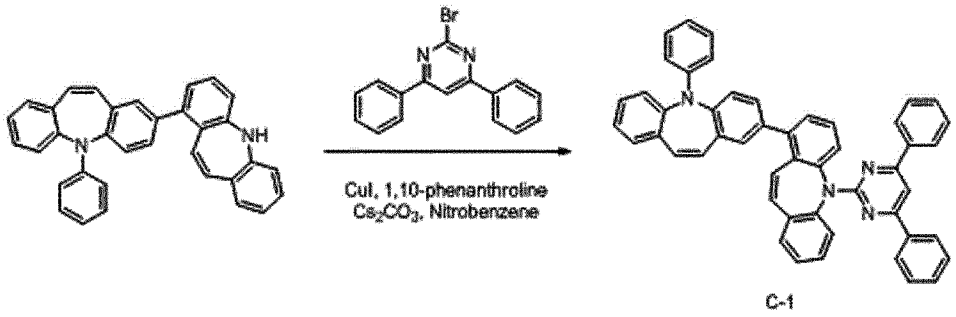
[424] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-10 (3.7 g, 수율 70%)을 얻었다.

[425] Mass (이론치: 790.30, 측정치: 790 g/mol)

[426]

[427] **[합성예 21] C-1의 합성**

[428]



C-1

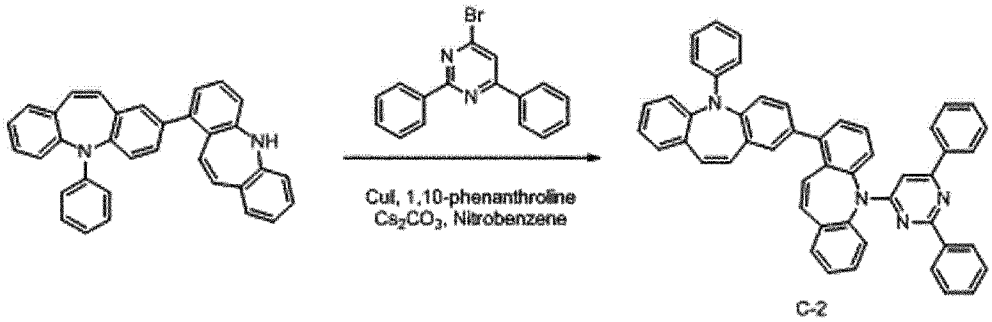
[429] 질소 기류 하에서 준비예 7에서 합성된 BAz-3 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C-1 (3.0 g, 수율 64%)을 얻었다.

[430] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[431]

[432] **[합성예 22] C-2의 합성**

[433]



C-2

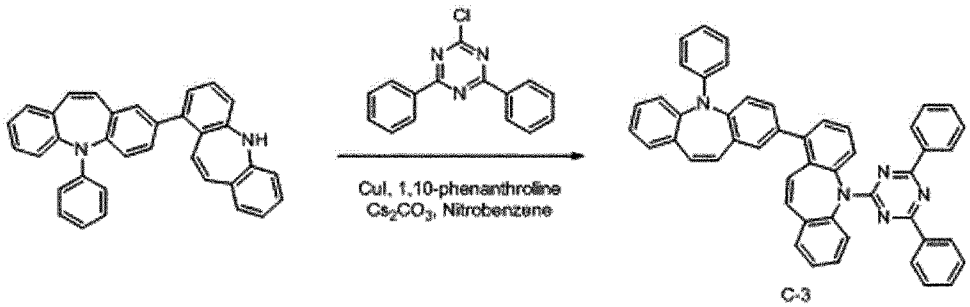
[434] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-2 (3.1 g, 수율 67%)를 얻었다.

[435] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[436]

[437] **[합성예 23] C-3의 합성**

[438]



C-3

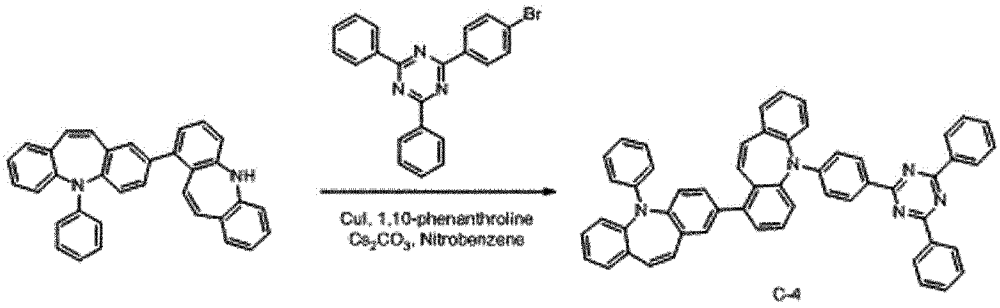
[439] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-3 (3.4 g, 수율 73%)을 얻었다.

[440] Mass (이론치: 691.27, 측정치: 691 g/mol)

[441]

[442] **[합성예 24] C-4의 합성**

[443]



C-4

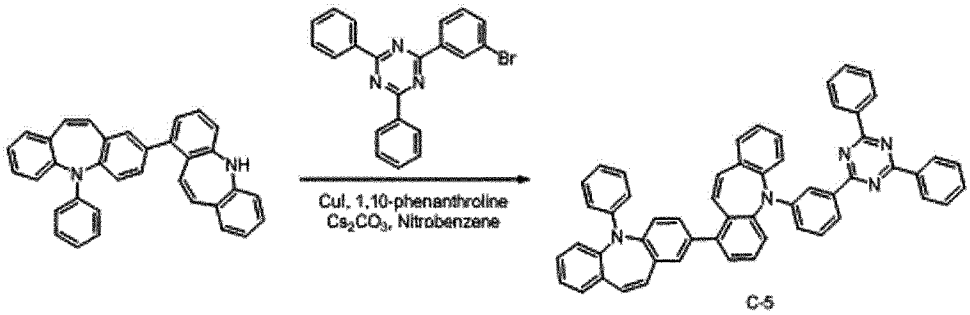
[444] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-4 (3.6 g, 수율 70%)를 얻었다.

[445] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[446]

[447] **[합성예 25]C-5의 합성**

[448]



C-5

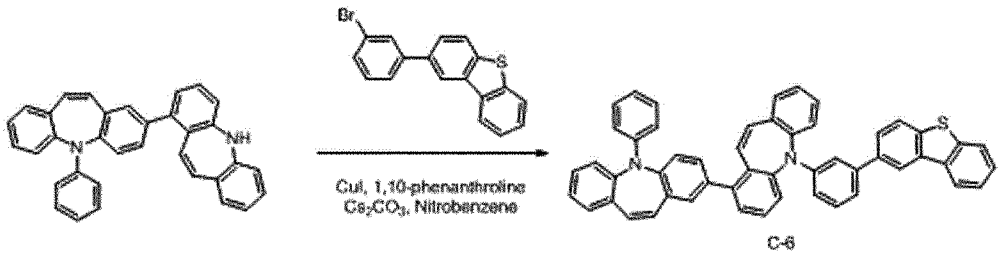
[449] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-5 (3.1 g, 수율 61%)를 얻었다.

[450] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[451]

[452] **[합성예 26] C-6의 합성**

[453]



C-6

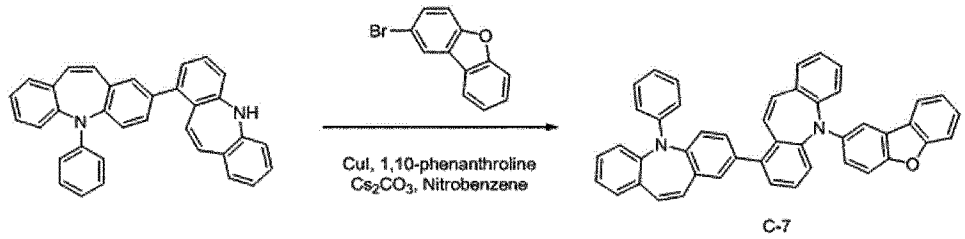
[454] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-6 (3.3 g, 수율 68%)를 얻었다.

[455] Mass (이론치: 718.24, 측정치: 718 g/mol)

[456]

[457] **[합성예 27] C-7의 합성**

[458]



C-7

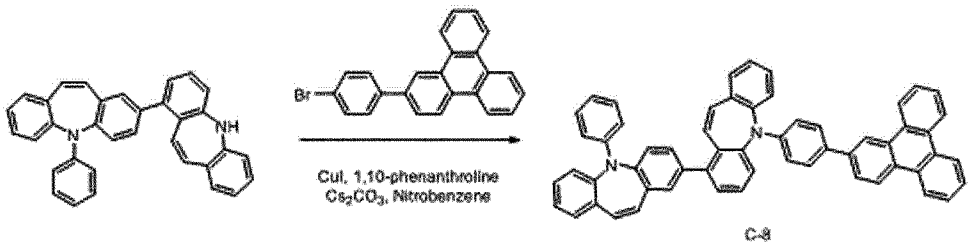
[459] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-7 (2.7 g, 수율 65%)을 얻었다.

[460] Mass (이론치: 626.23, 측정치: 626 g/mol)

[461]

[462] **[합성예 28] C-8의 합성**

[463]



C-8

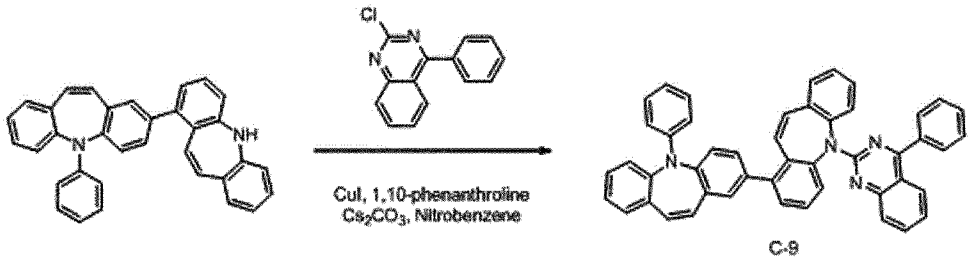
[464] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-8 (3.1 g, 수율 61%)을 얻었다.

[465] Mass (이론치: 762.30, 측정치: 762 g/mol)

[466]

[467] **[합성예 29] C-9의 합성**

[468]



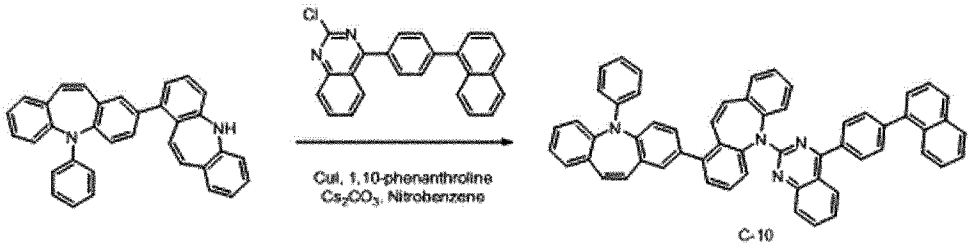
[469] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-9 (3.1 g, 수율 67%)을 얻었다.

[470] Mass (이론치: 664.26, 측정치: 664 g/mol)

[471]

[472] **[합성예 30] C-10의 합성**

[473]



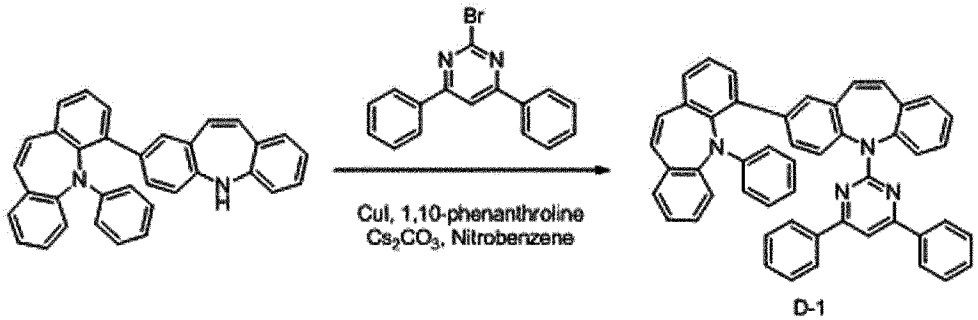
[474] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-10 (3.7 g, 수율 70%)을 얻었다.

[475] Mass (이론치: 790.30, 측정치: 790 g/mol)

[476]

[477] **[합성예 31] D-1의 합성**

[478]



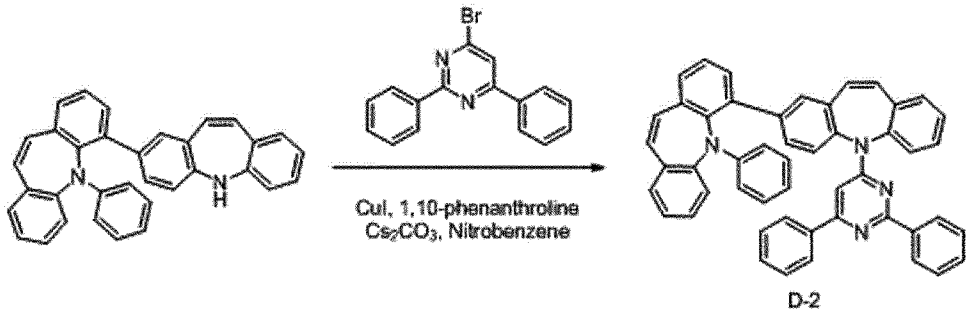
[479] 질소 기류 하에서 준비예 8에서 합성된 BAz-4 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D-1 (3.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[480] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[481]

[482] **[합성예 32] D-2의 합성**

[483]



D-2

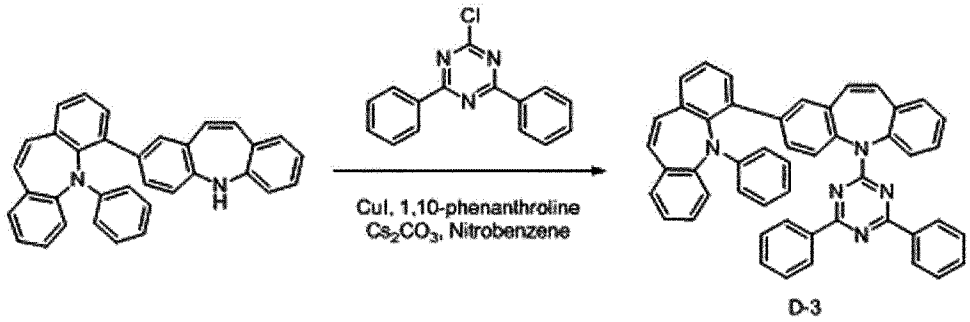
[484] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-2 (3.3 g, 수율 72%)를 얻었다.

[485] Mass (이론치: 690.27, 측정치: 690 g/mol)

[486]

[487] **[합성예 33] D-3의 합성**

[488]



D-3

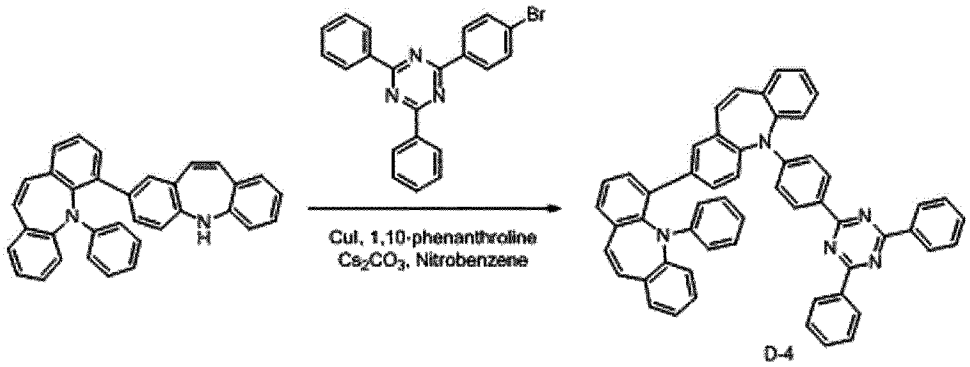
[489] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-3 (2.8 g, 수율 61%)을 얻었다.

[490] Mass (이론치: 691.27, 측정치: 691 g/mol)

[491]

[492] **[합성예 34] D-4의 합성**

[493]



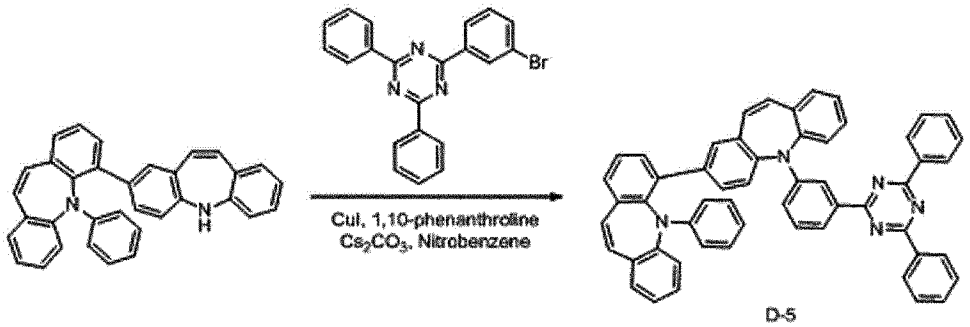
[494] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-4 (3.4 g, 수율 66%)를 얻었다.

[495] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[496]

[497] **[합성예 35] D-5의 합성**

[498]



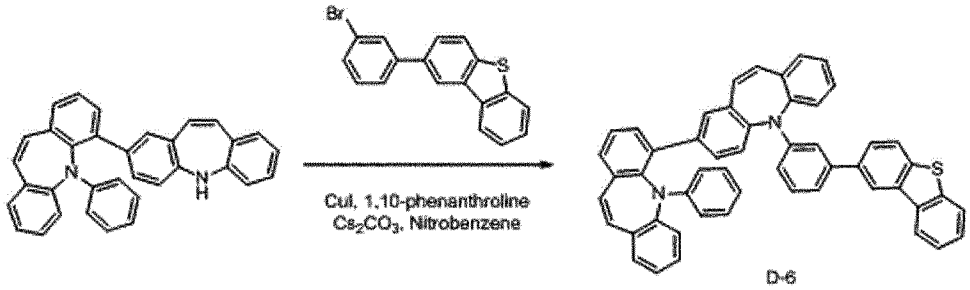
[499] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-5 (3.8 g, 수율 75%)를 얻었다.

[500] Mass (이론치: 767.30, 측정치: 767 g/mol)

[501]

[502] **[합성예 36] D-6의 합성**

[503]



[504] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을

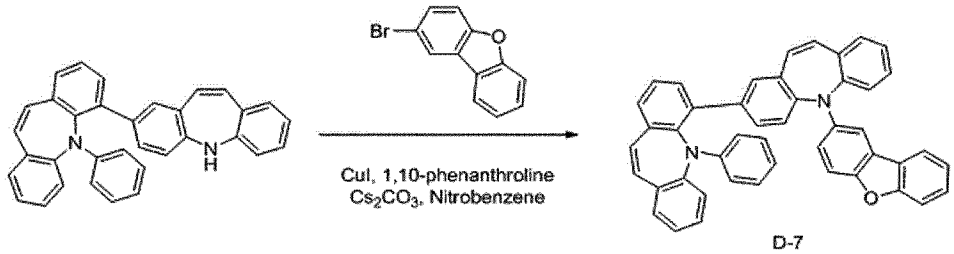
제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-6 (2.9 g, 수율 61%)을 얻었다.

[505] Mass (이론치: 718.24, 측정치: 718 g/mol)

[506]

[507] **[합성예 37] D-7의 합성**

[508]



D-7

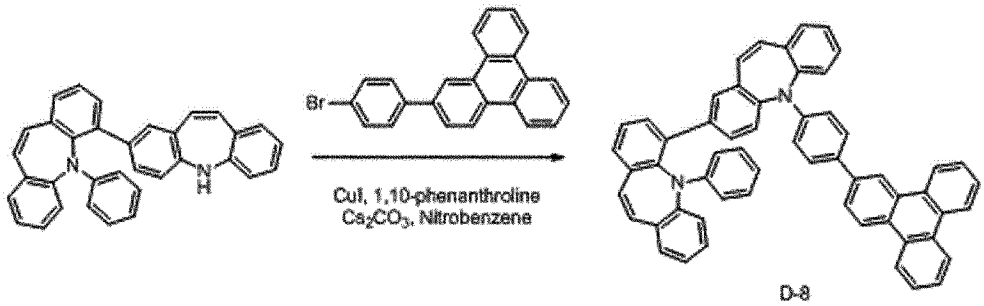
[509] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-7 (2.8 g, 수율 66%)을 얻었다.

[510] Mass (이론치: 626.23, 측정치: 626 g/mol)

[511]

[512] **[합성예 38] D-8의 합성**

[513]



D-8

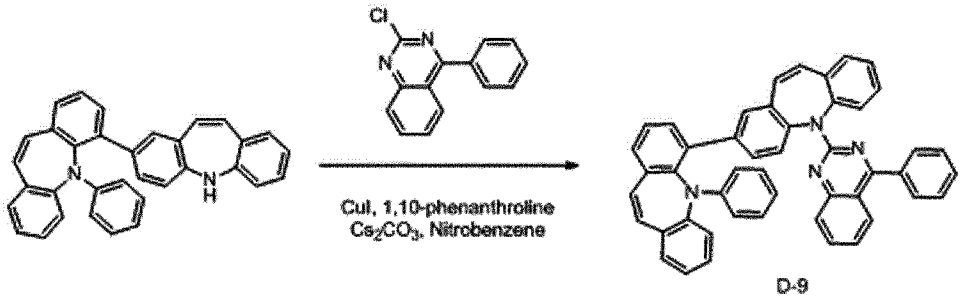
[514] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-8 (3.5 g, 수율 68%)을 얻었다.

[515] Mass (이론치: 762.30, 측정치: 762 g/mol)

[516]

[517] **[합성예 39] D-9의 합성**

[518]



D-9

[519] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

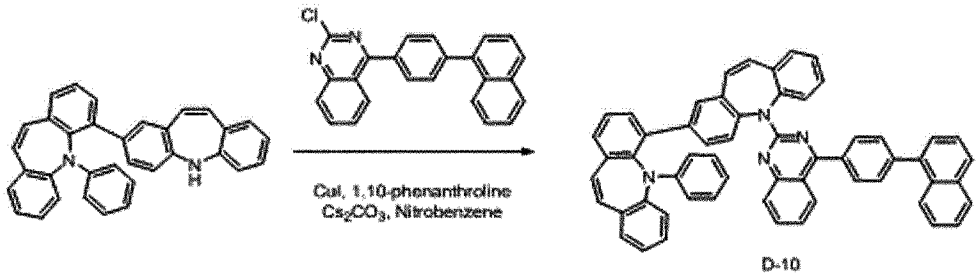
2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-9 (2.8 g, 수율 64%)을 얻었다.

[520] Mass (이론치: 664.26, 측정치: 664 g/mol)

[521]

[522] **[합성예 40] D-10의 합성**

[523]



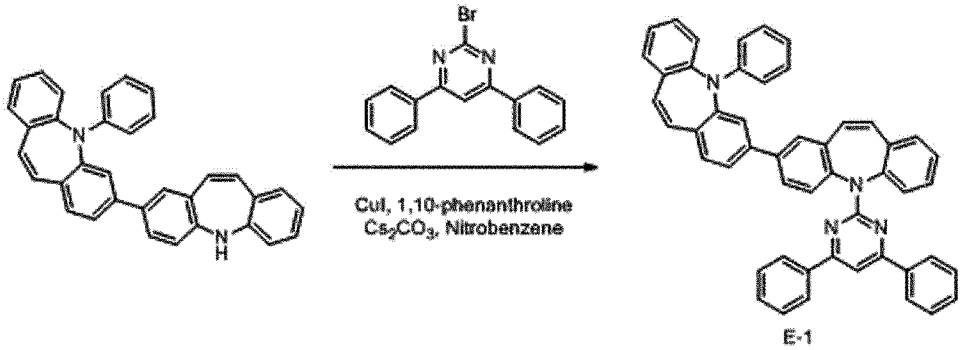
[524] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-10 (4.0 g, 수율 76%)을 얻었다.

[525] Mass (이론치: 790.30, 측정치: 790 g/mol)

[526]

[527] **[합성예 41] E-1의 합성**

[528]



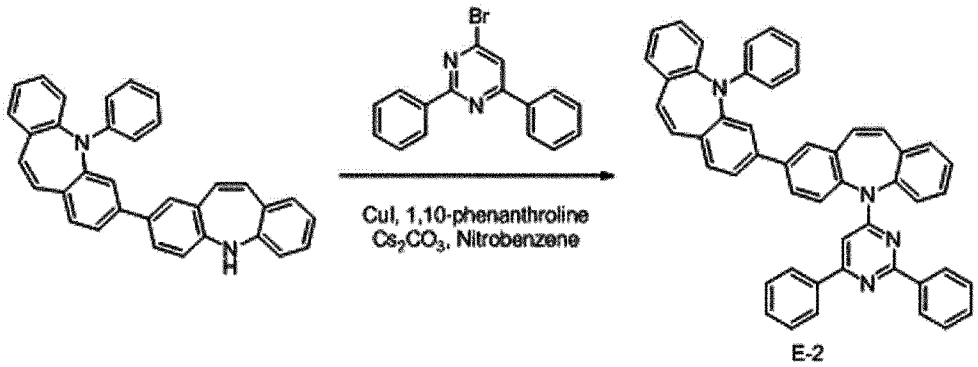
[529] 질소 기류 하에서 준비예 9에서 합성된 BAz-5 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E-1 (2.9 g, 수율 63%)을 얻었다.

[530] Mass (이론치: 690.27 g/mol, 측정치: 690 g/mol)

[531]

[532] **[합성예 42] E-2의 합성**

[533]



E-2

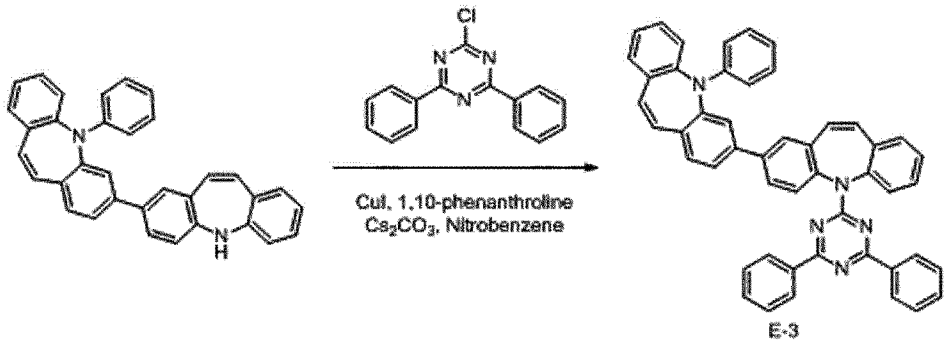
[534] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-2 (3.2 g, 수율 69%)를 얻었다.

[535] Mass (이론치: 690.27 g/mol, 측정치: 690 g/mol)

[536]

[537] **[합성예 43] E-3의 합성**

[538]



E-3

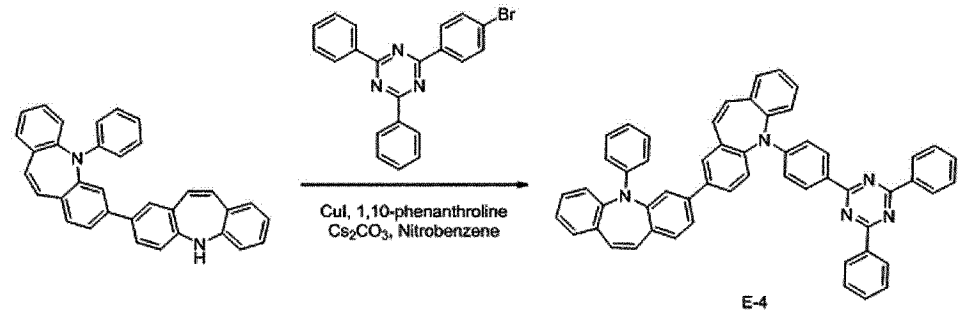
[539] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-3 (3.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[540] Mass (이론치: 691.27 g/mol, 측정치: 691 g/mol)

[541]

[542] **[합성예 44] E-4의 합성**

[543]



E-4

[544] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

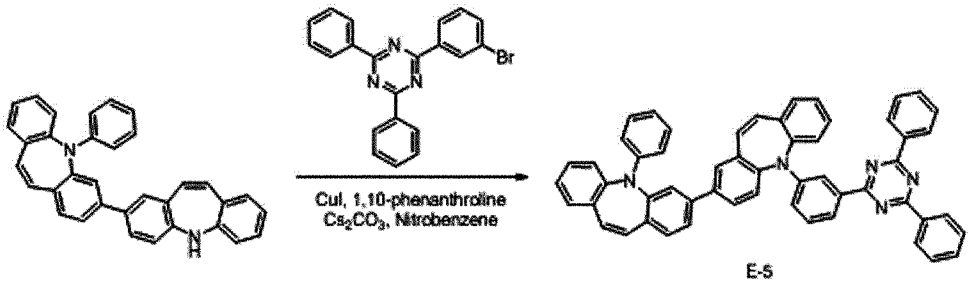
2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-4 (3.7 g, 수율 71%)를 얻었다.

[545] Mass (이론치: 767.30 g/mol, 측정치: 767 g/mol)

[546]

[547] **[합성예 45] E-5의 합성**

[548]



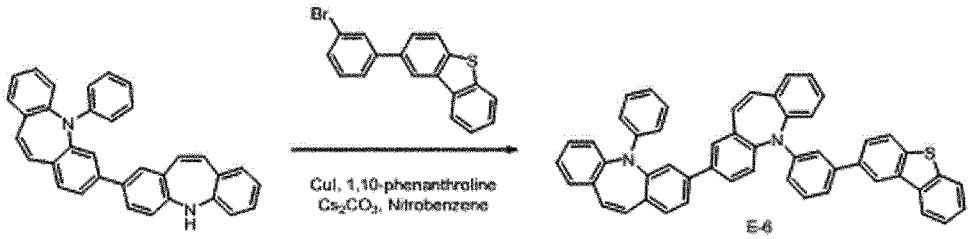
[549] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-5 (3.8 g, 수율 75%)를 얻었다.

[550] Mass (이론치: 767.30 g/mol, 측정치: 767 g/mol)

[551]

[552] **[합성예 46] E-6의 합성**

[553]



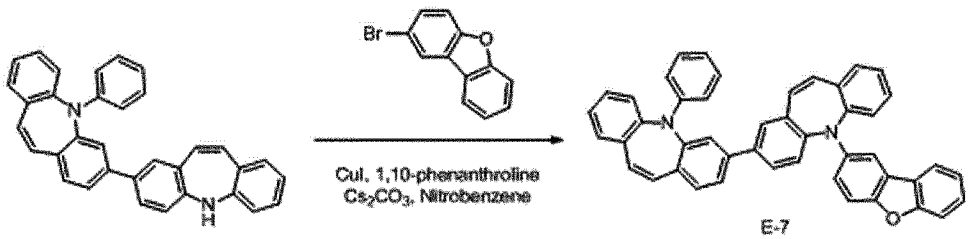
[554] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-6 (3.1 g, 수율 64%)을 얻었다.

[555] Mass (이론치: 718.24 g/mol, 측정치: 718 g/mol)

[556]

[557] **[합성예 47] E-7의 합성**

[558]



[559] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

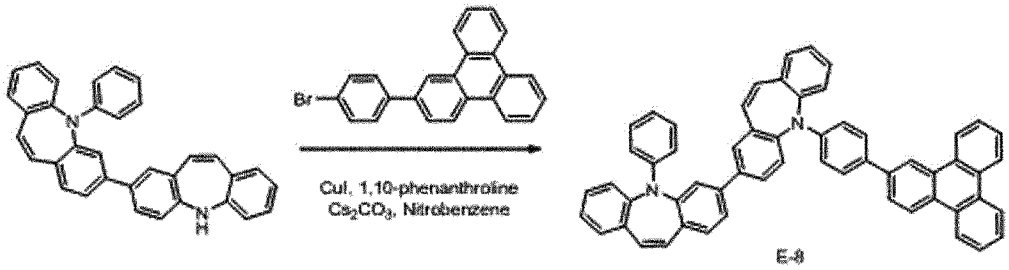
2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-7 (2.6 g, 수율 61%)을 얻었다.

[560] Mass (이론치: 626.23 g/mol, 측정치: 626 g/mol)

[561]

[562] **[합성예 48] E-8의 합성**

[563]



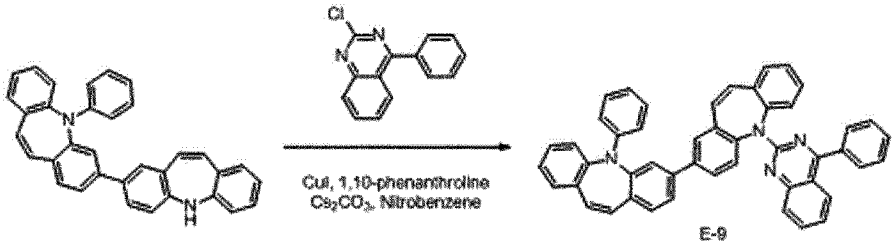
[564] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-8 (3.1 g, 수율 60%)을 얻었다.

[565] Mass (이론치: 762.3 g/mol, 측정치: 762 g/mol)

[566]

[567] **[합성예 49] E-9의 합성**

[568]



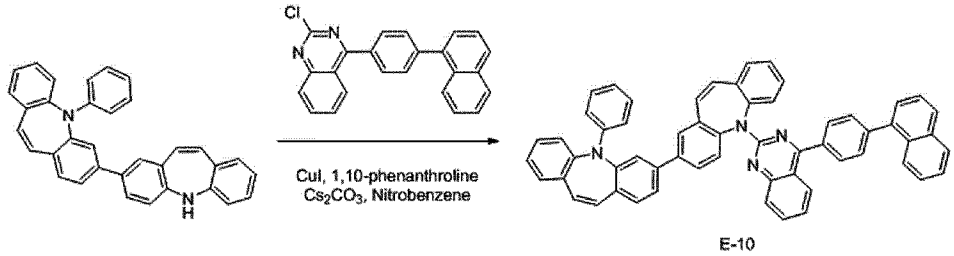
[569] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.93 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-9 (2.8 g, 수율 62%)을 얻었다.

[570] Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[571]

[572] **[합성예 50] E-10의 합성**

[573]



[574] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

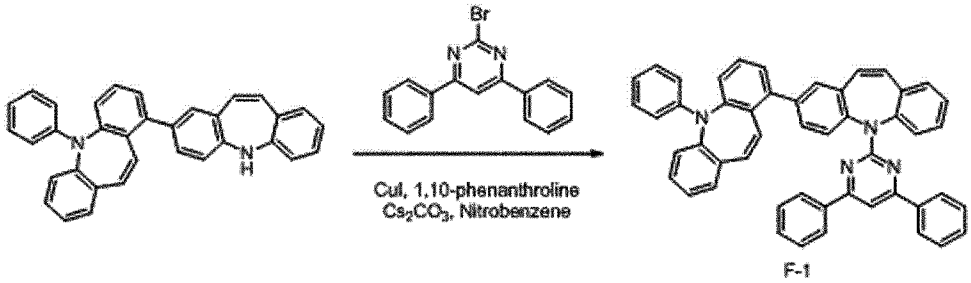
2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-10 (3.7 g, 수율 69%)을 얻었다.

[575] Mass (이론치: 790.30 g/mol, 측정치: 790 g/mol)

[576]

[577] **[합성예 51] F-1의 합성**

[578]



F-1

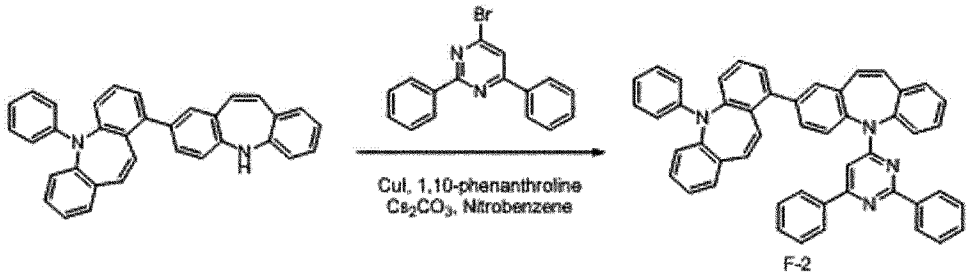
[579] 질소 기류 하에서 준비예 10에서 합성된 BAz-6 (3.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F-1 (3.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[580] Mass (이론치: 690.27 g/mol, 측정치: 690 g/mol)

[581]

[582] **[합성예 52] F-2의 합성**

[583]



F-2

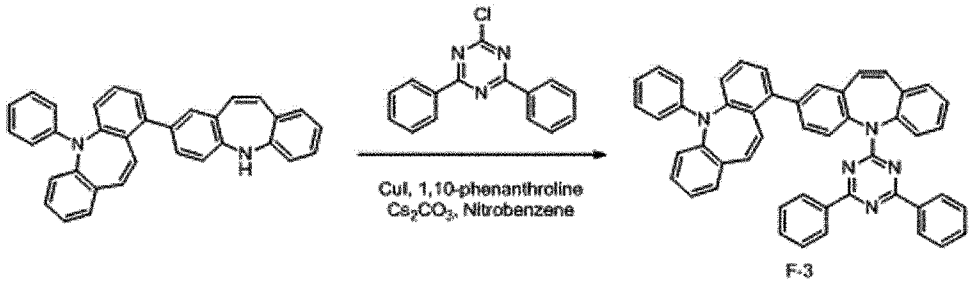
[584] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-2 (2.9 g, 수율 62%)를 얻었다.

[585] Mass (이론치: 690.27 g/mol, 측정치: 690 g/mol)

[586]

[587] **[합성예 53] F-3의 합성**

[588]



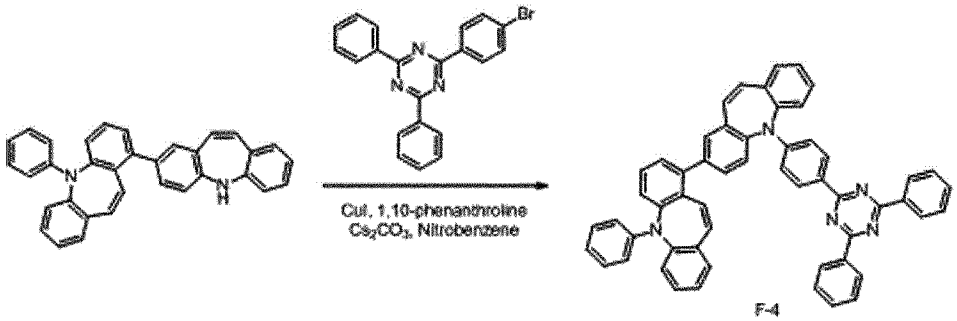
[589] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-3 (3.2 g, 수율 70%)을 얻었다.

[590] Mass (이론치: 691.27 g/mol, 측정치: 691 g/mol)

[591]

[592] **[합성예 54] F-4의 합성**

[593]



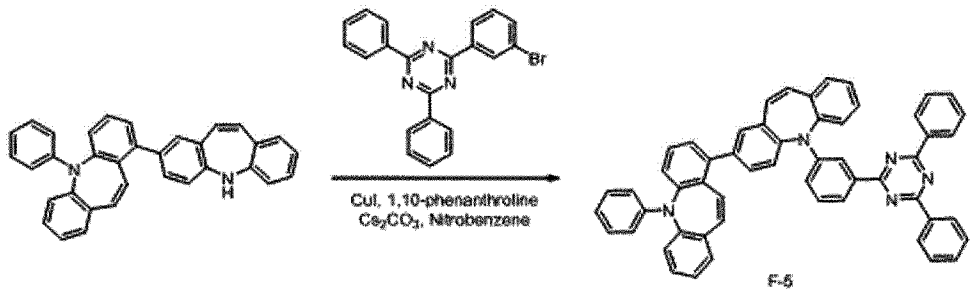
[594] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-4 (3.3 g, 수율 64%)를 얻었다.

[595] Mass (이론치: 767.30 g/mol, 측정치: 767 g/mol)

[596]

[597] **[합성예 55]F-5의 합성**

[598]



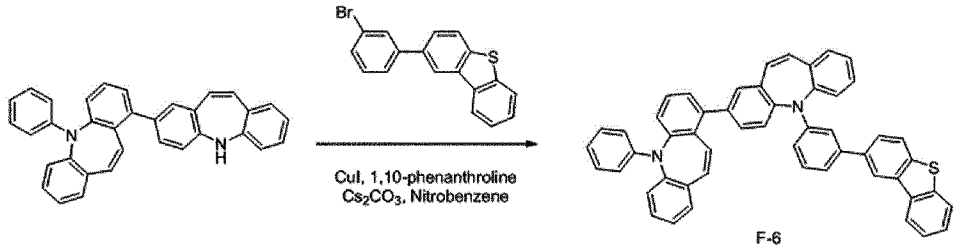
[599] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-5 (3.7 g, 수율 71%)를 얻었다.

[600] Mass (이론치: 767.30 g/mol, 측정치: 767 g/mol)

[601]

[602] **[합성예 56] F-6의 합성**

[603]



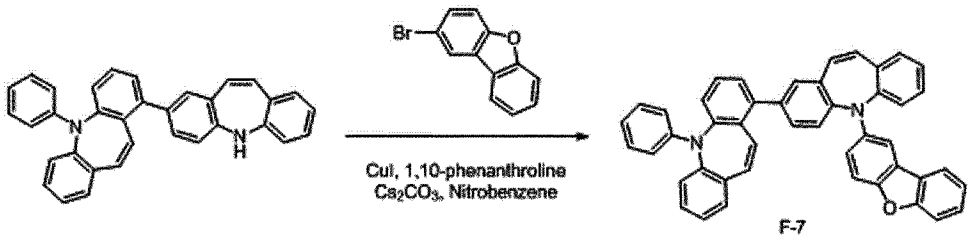
[604] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-6 (3.3 g, 수율 68%)을 얻었다.

[605] Mass (이론치: 718.24 g/mol, 측정치: 718 g/mol)

[606]

[607] **[합성예 57] F-7의 합성**

[608]



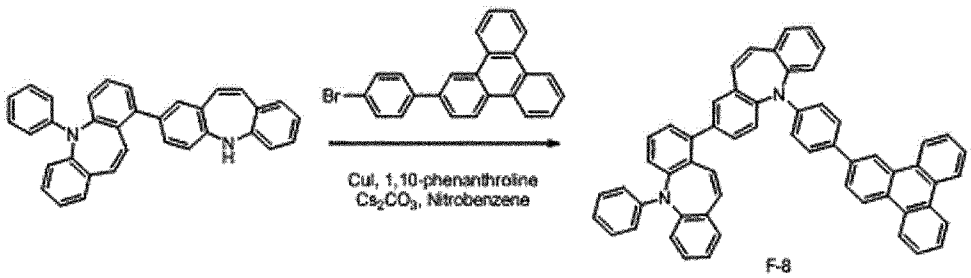
[609] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-7 (2.5 g, 수율 60%)을 얻었다.

[610] Mass (이론치: 626.23 g/mol, 측정치: 626 g/mol)

[611]

[612] **[합성예 58] F-8의 합성**

[613]



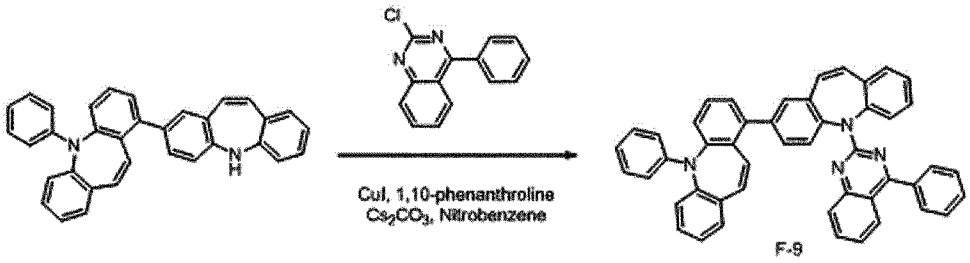
[614] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-8 (3.2 g, 수율 62%)을 얻었다.

[615] Mass (이론치: 762.30 g/mol, 측정치: 762 g/mol)

[616]

[617] **[합성예 59] F-9의 합성**

[618]



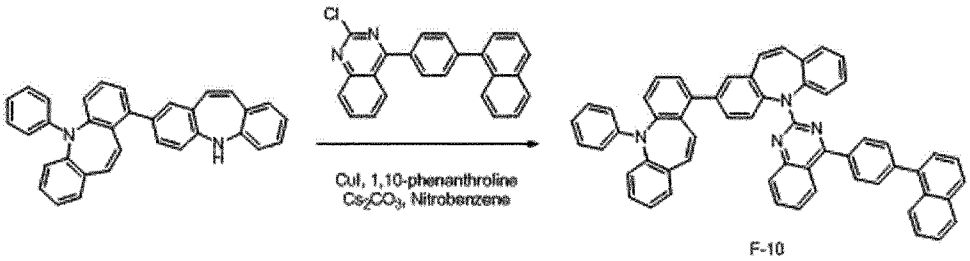
[619] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-9 (3.2 g, 수율 72%)을 얻었다.

[620] Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[621]

[622] **[합성예 60] F-10의 합성**

[623]



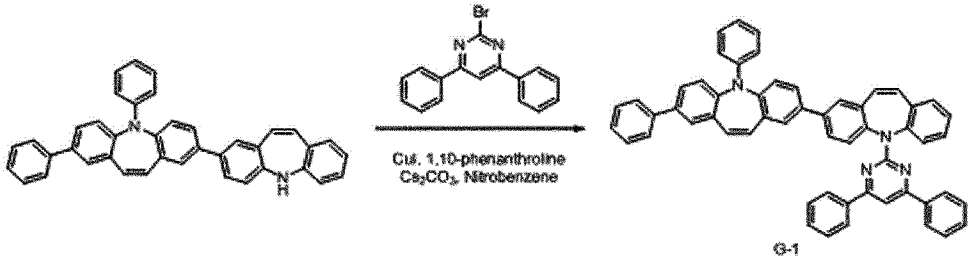
[624] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-10 (3.6 g, 수율 68%)을 얻었다.

[625] Mass (이론치: 790.30 g/mol, 측정치: 790 g/mol)

[626]

[627] **[합성예 61] G-1의 합성**

[628]



[629] 질소 기류 하에서 준비예 11에서 합성된 BAz-7 (3.6 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G-1 (3.2

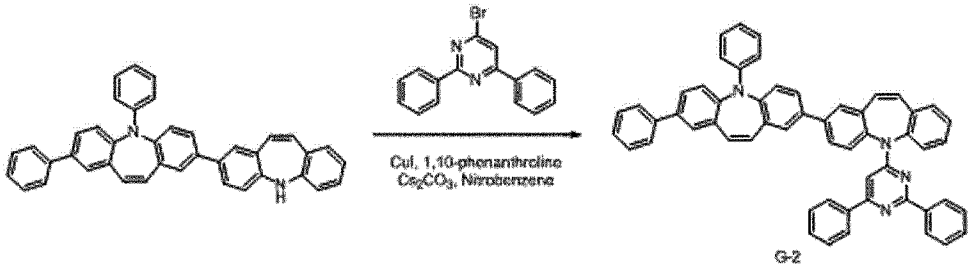
g, 수율 63%)을 얻었다.

[630] Mass (이론치: 766.31 g/mol, 측정치: 766 g/mol)

[631]

[632] **[합성예 62] G-2의 합성**

[633]



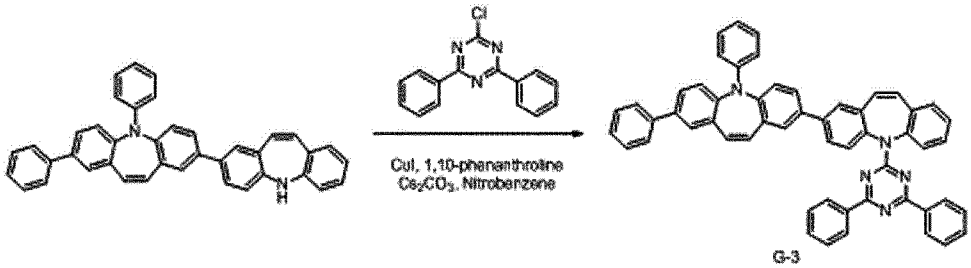
[634] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-2 (3.1 g, 수율 61%)를 얻었다.

[635] Mass (이론치: 766.31 g/mol, 측정치: 766 g/mol)

[636]

[637] **[합성예 63] G-3의 합성**

[638]



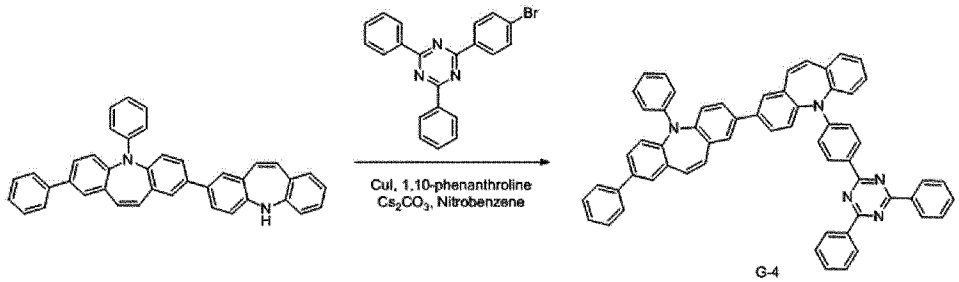
[639] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-3 (3.3 g, 수율 65%)을 얻었다.

[640] Mass (이론치: 767.31 g/mol, 측정치: 767 g/mol)

[641]

[642] **[합성예 64] G-4의 합성**

[643]



[644] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을

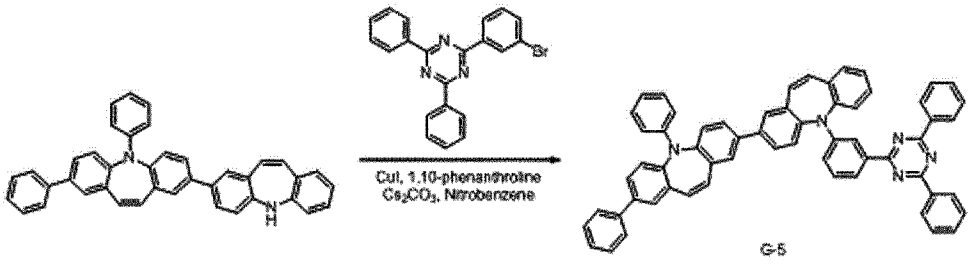
제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-4 (3.7 g, 수율 66%)를 얻었다.

[645] Mass (이론치: 843.34 g/mol, 측정치: 843 g/mol)

[646]

[647] **[합성예 65]G-5의 합성**

[648]



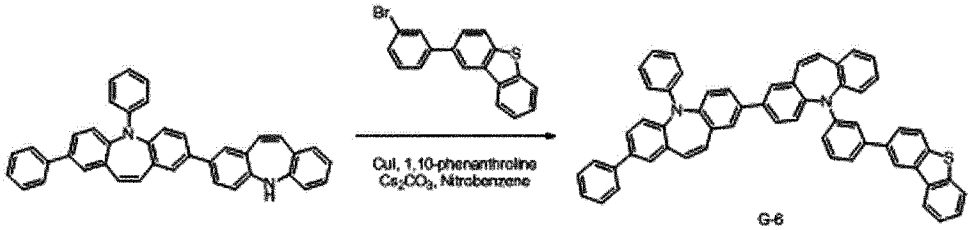
[649] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-5 (3.6 g, 수율 64%)를 얻었다.

[650] Mass (이론치: 843.34 g/mol, 측정치: 843 g/mol)

[651]

[652] **[합성예 66] G-6의 합성**

[653]



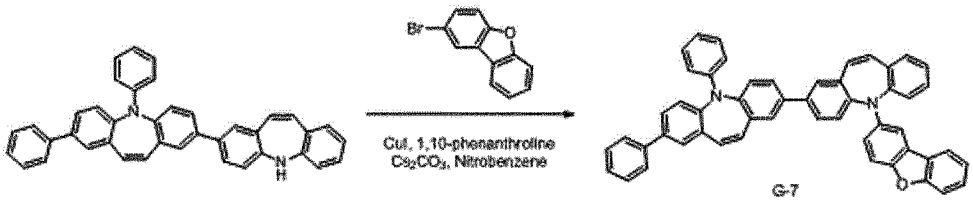
[654] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-6 (3.8 g, 수율 71%)을 얻었다.

[655] Mass (이론치: 794.28 g/mol, 측정치: 794 g/mol)

[656]

[657] **[합성예 67] G-7의 합성**

[658]



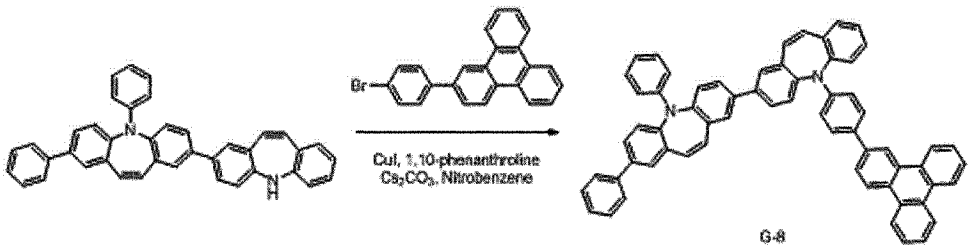
[659] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-7 (3.5 g, 수율 74%)을 얻었다.

[660] Mass (이론치: 702.27 g/mol, 측정치: 702 g/mol)

[661]

[662] **[합성예 68] G-8의 합성**

[663]



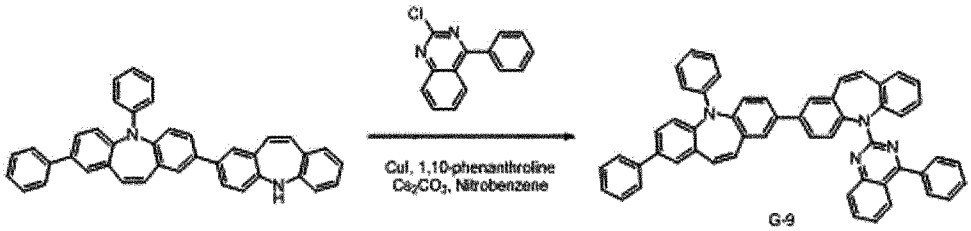
[664] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-8 (3.4 g, 수율 60%)을 얻었다.

[665] Mass (이론치: 838.34 g/mol, 측정치: 838 g/mol)

[666]

[667] **[합성예 69] G-9의 합성**

[668]



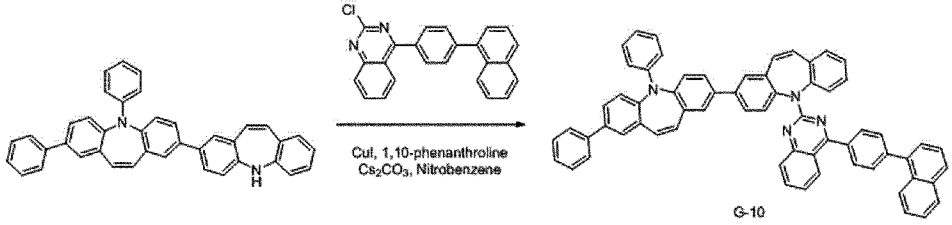
[669] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-9 (3.4 g, 수율 68%)을 얻었다.

[670] Mass (이론치: 740.30 g/mol, 측정치: 740 g/mol)

[671]

[672] **[합성예 70] G-10의 합성**

[673]



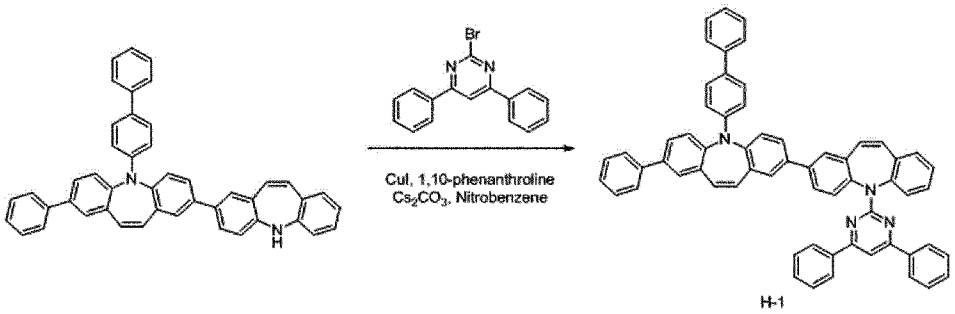
[674] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-10 (4.2 g, 수율 73%)을 얻었다.

[675] Mass (이론치: 866.34 g/mol, 측정치: 866 g/mol)

[676]

[677] **[합성예 71] H-1의 합성**

[678]



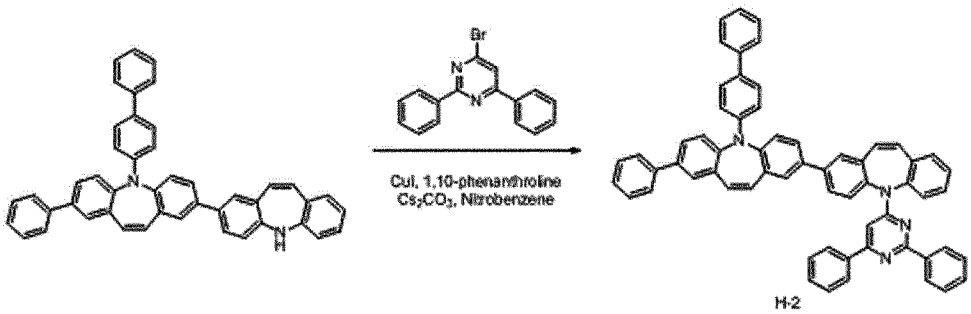
[679] 질소 기류 하에서 준비예 12에서 합성된 BAz-8 (4.1 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 H-1 (3.7 g, 수율 65%)을 얻었다.

[680] Mass (이론치: 842.34 g/mol, 측정치: 842 g/mol)

[681]

[682] **[합성예 72] H-2의 합성**

[683]



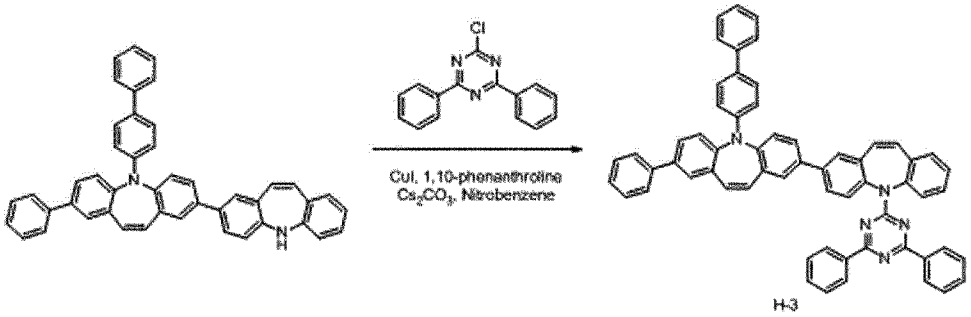
[684] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-2 (3.7 g, 수율 66%)를 얻었다.

[685] Mass (이론치: 842.34 g/mol, 측정치: 842 g/mol)

[686]

[687] **[합성예 73] H-3의 합성**

[688]



H-3

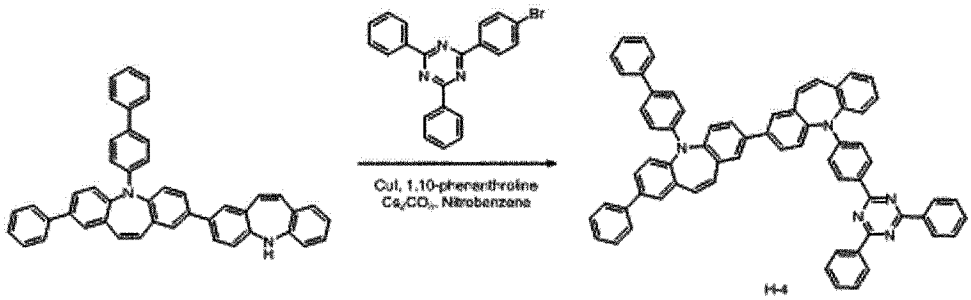
[689] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-3 (3.5 g, 수율 62%)을 얻었다.

[690] Mass (이론치: 843.34 g/mol, 측정치: 843 g/mol)

[691]

[692] **[합성예 74] H-4의 합성**

[693]



H-4

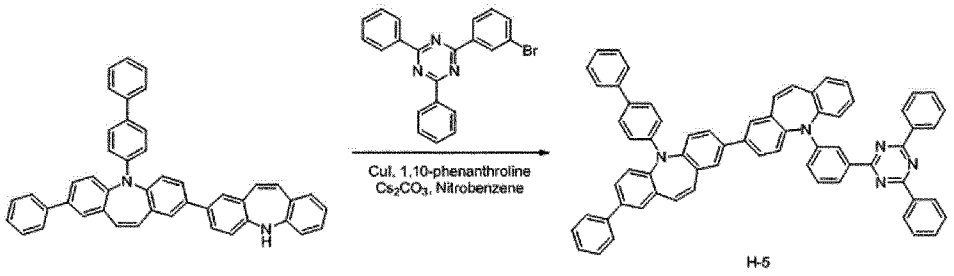
[694] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-4 (3.9 g, 수율 64%)를 얻었다.

[695] Mass (이론치: 919.37 g/mol, 측정치: 919 g/mol)

[696]

[697] **[합성예 75]H-5의 합성**

[698]



H-5

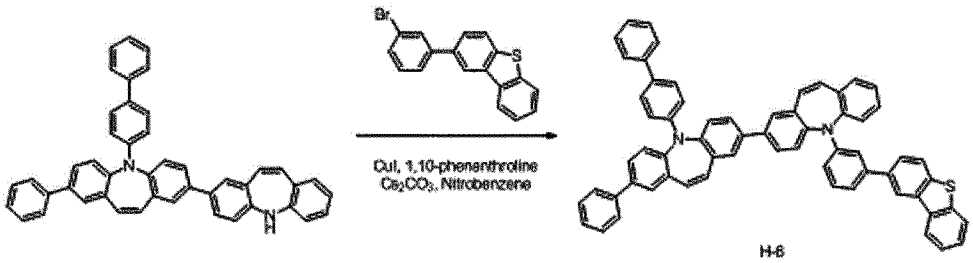
[699] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-5 (4.4 g, 수율 71%)를 얻었다.

[700] Mass (이론치: 919.37 g/mol, 측정치: 919 g/mol)

[701]

[702] **[합성예 76] H-6의 합성**

[703]



H-6

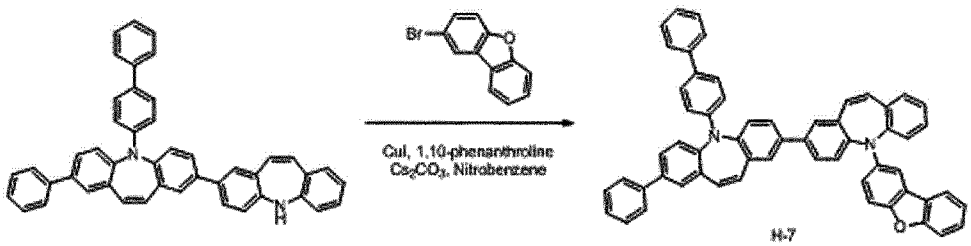
[704] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-6 (3.8 g, 수율 66%)을 얻었다.

[705] Mass (이론치: 870.31 g/mol, 측정치: 870 g/mol)

[706]

[707] **[합성예 77] H-7의 합성**

[708]



H-7

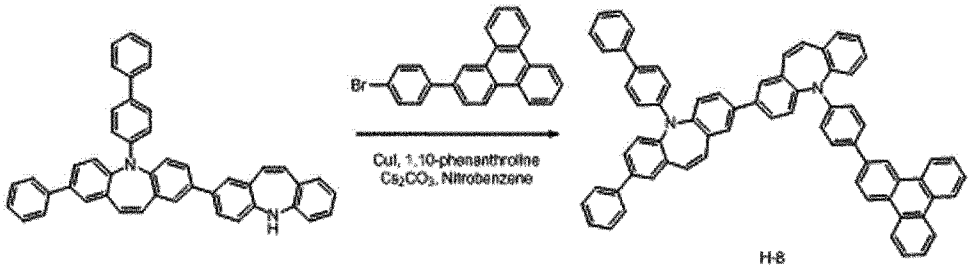
[709] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-7 (3.7 g, 수율 70%)을 얻었다.

[710] Mass (이론치: 778.30 g/mol, 측정치: 778 g/mol)

[711]

[712] **[합성예 78] H-8의 합성**

[713]



H-8

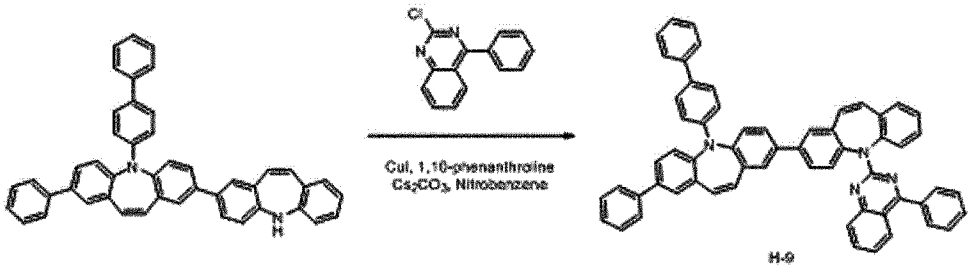
[714] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-8 (4.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[715] Mass (이론치: 914.37 g/mol, 측정치: 914 g/mol)

[716]

[717] **[합성예 79] H-9의 합성**

[718]



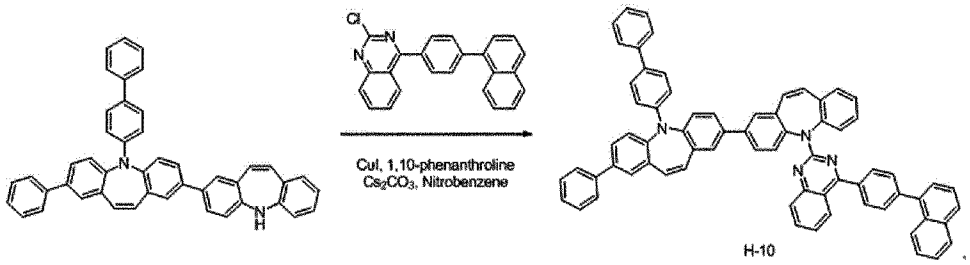
[719] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-9 (3.7 g, 수율 67%)을 얻었다.

[720] Mass (이론치: 816.33 g/mol, 측정치: 816 g/mol)

[721]

[722] **[합성예 80] H-10의 합성**

[723]



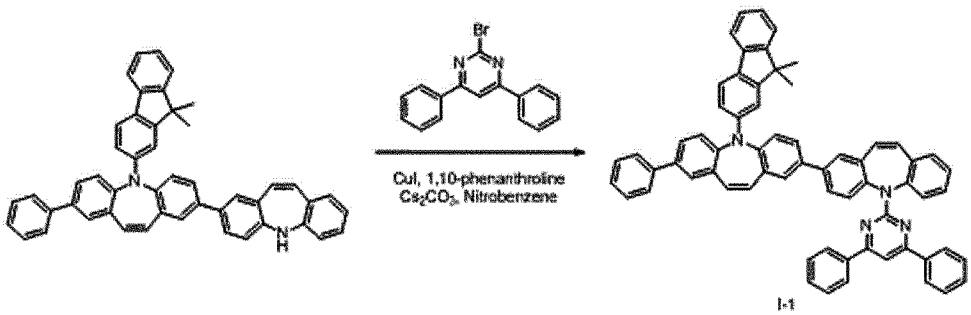
[724] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-10 (4.5 g, 수율 72%)을 얻었다.

[725] Mass (이론치: 942.37 g/mol, 측정치: 942 g/mol)

[726]

[727] **[합성예 81] I-1의 합성**

[728]



[729] 질소 기류 하에서 준비예 13에서 합성된 BAz-9 (4.4 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene

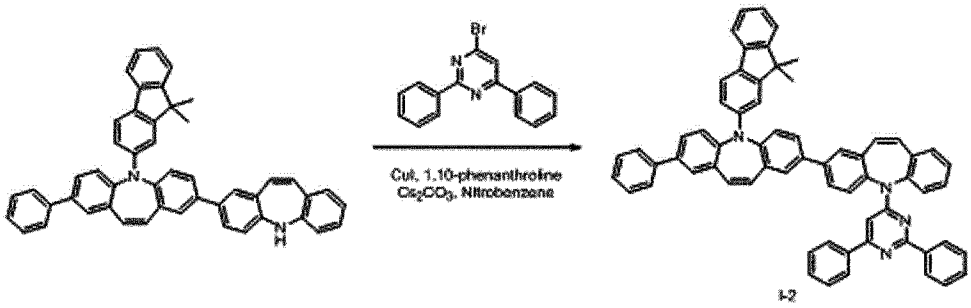
(25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 I-1 (3.7 g, 수율 63%)을 얻었다.

[730] Mass (이론치: 882.37 g/mol, 측정치: 882 g/mol)

[731]

[732] **[합성예 82] I-2의 합성**

[733]



I-2

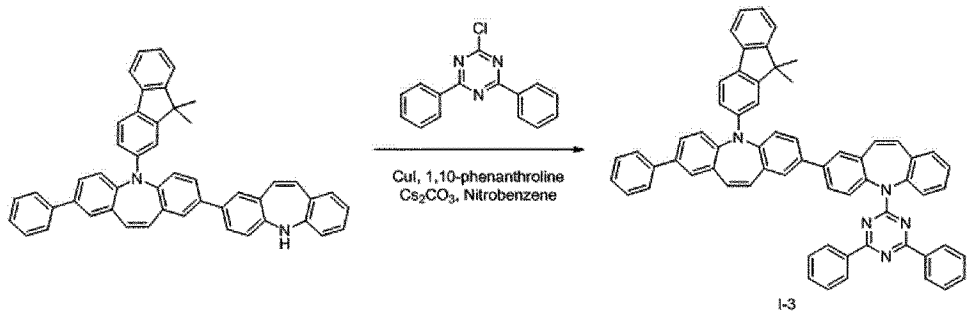
[734] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-2 (4.0 g, 수율 67%)를 얻었다.

[735] Mass (이론치: 882.37 g/mol, 측정치: 882 g/mol)

[736]

[737] **[합성예 83] I-3의 합성**

[738]



I-3

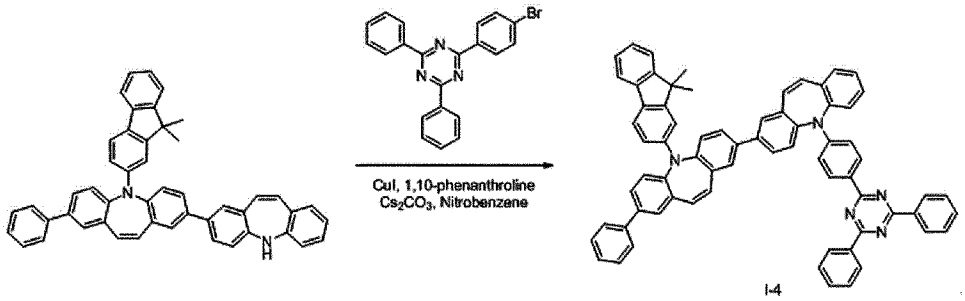
[739] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-3 (3.6 g, 수율 60%)을 얻었다.

[740] Mass (이론치: 883.37 g/mol, 측정치: 883 g/mol)

[741]

[742] **[합성예 84] I-4의 합성**

[743]



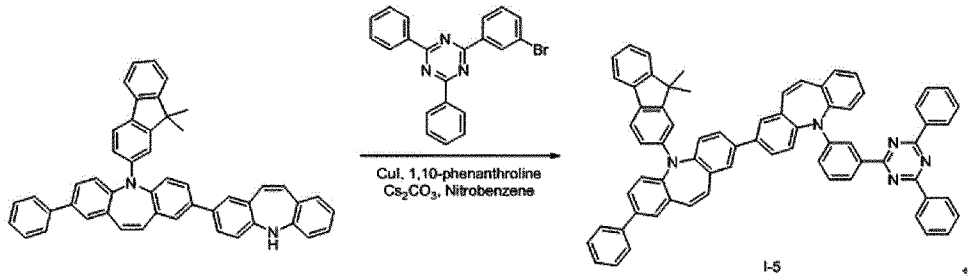
[744] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-4 (4.4 g, 수율 68%)를 얻었다.

[745] Mass (이론치: 959.40 g/mol, 측정치: 959 g/mol)

[746]

[747] **[합성예 85] I-5의 합성**

[748]



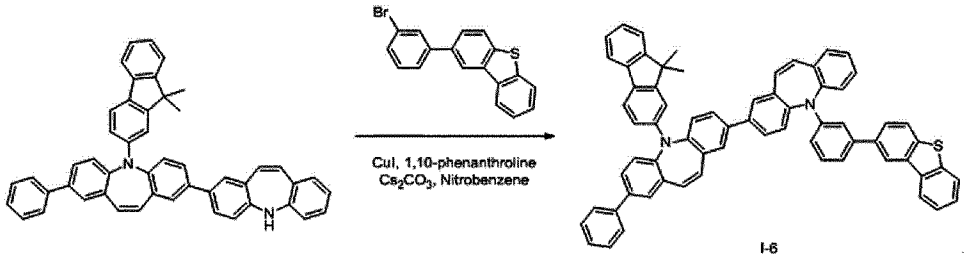
[749] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-5 (4.7 g, 수율 73%)를 얻었다.

[750] Mass (이론치: 959.40 g/mol, 측정치: 959 g/mol)

[751]

[752] **[합성예 86] I-6의 합성**

[753]



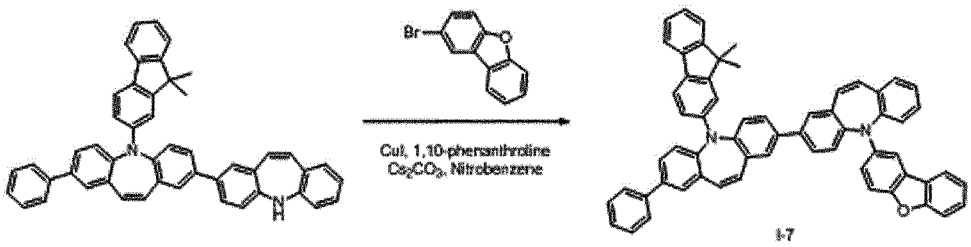
[754] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-6 (4.6 g, 수율 75%)을 얻었다.

[755] Mass (이론치: 910.34 g/mol, 측정치: 910 g/mol)

[756]

[757] **[합성예 87] I-7의 합성**

[758]



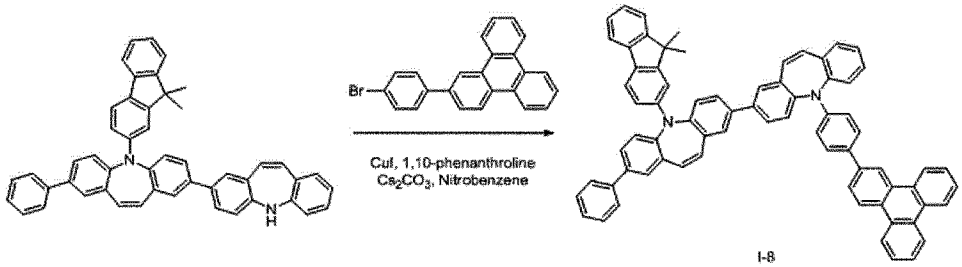
[759] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-7 (3.9 g, 수율 72%)을 얻었다.

[760] Mass (이론치: 818.33 g/mol, 측정치: 818 g/mol)

[761]

[762] **[합성예 88] I-8의 합성**

[763]



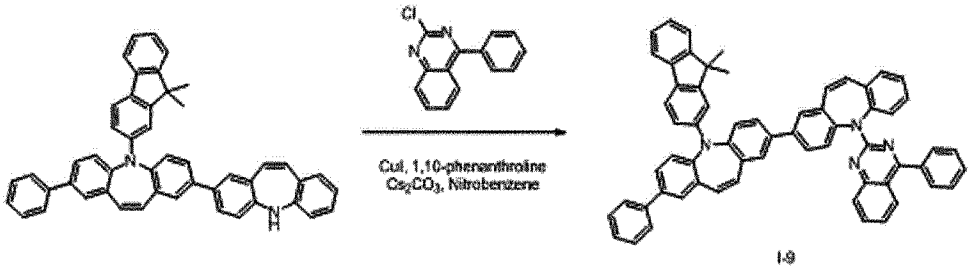
[764] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-8 (4.2 g, 수율 65%)을 얻었다.

[765] Mass (이론치: 954.40 g/mol, 측정치: 954 g/mol)

[766]

[767] **[합성예 89] I-9의 합성**

[768]



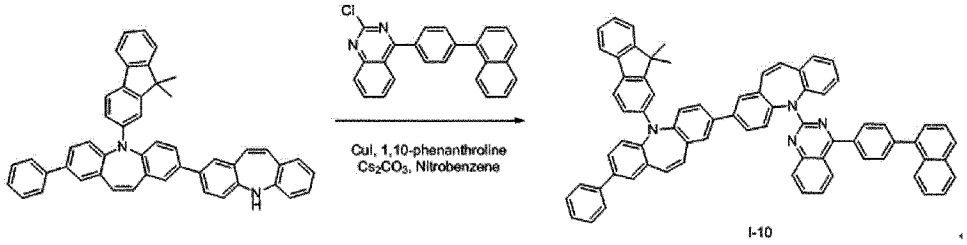
[769] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-9 (3.8 g, 수율 66%)을 얻었다.

[770] Mass (이론치: 856.36 g/mol, 측정치: 856 g/mol)

[771]

[772] **[합성예 90] I-10의 합성**

[773]



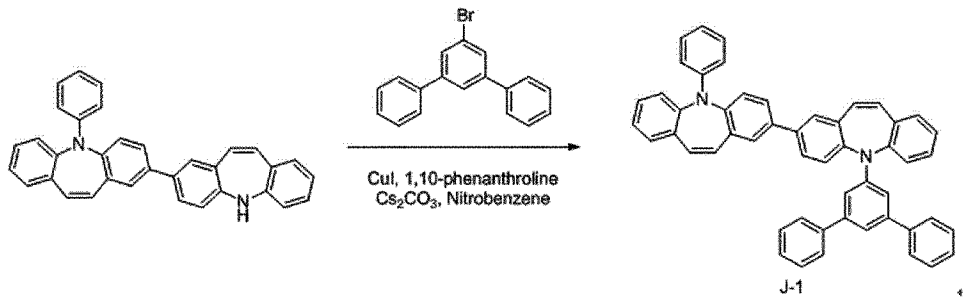
[774] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 I-10 (4.7 g, 수율 71%)을 얻었다.

[775] Mass (이론치: 982.40 g/mol, 측정치: 982 g/mol)

[776]

[777] **[합성예 91] J-1의 합성**

[778]



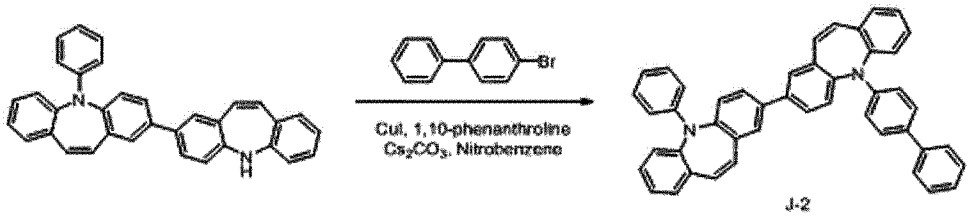
[779] 질소 기류 하에서 준비예 5에서 합성된 BAz-1 (3.1 g, 6.7 mmol), 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 다음, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 J-1 (3.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

[780] Mass (이론치: 688.28, 측정치: 688 g/mol)

[781]

[782] **[합성예 92] J-2의 합성**

[783]



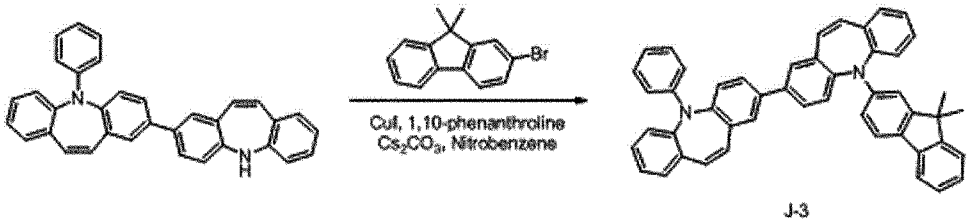
[784] 합성예 91에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 4-bromobiphenyl (1.90 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-2 (3.0 g, 수율 72%)를 얻었다.

[785] Mass (이론치: 612.25, 측정치: 612 g/mol)

[786]

[787] **[합성예 93] J-3의 합성**

[788]



J-3

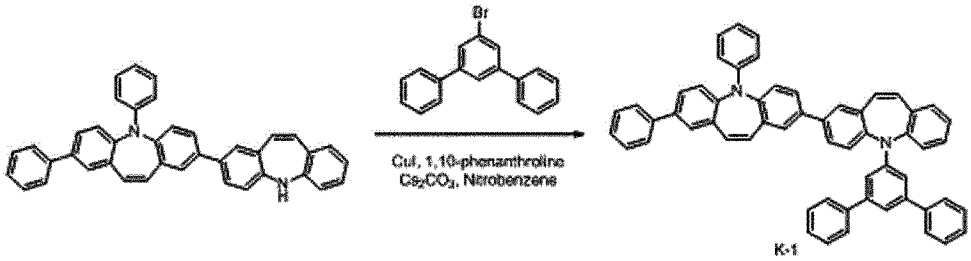
[789] 합성예 91에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (2.18 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-3 (3.1 g, 수율 70%)을 얻었다.

[790] Mass (이론치: 652.28, 측정치: 652 g/mol)

[791]

[792] **[합성예 94] K-1의 합성**

[793]



K-1

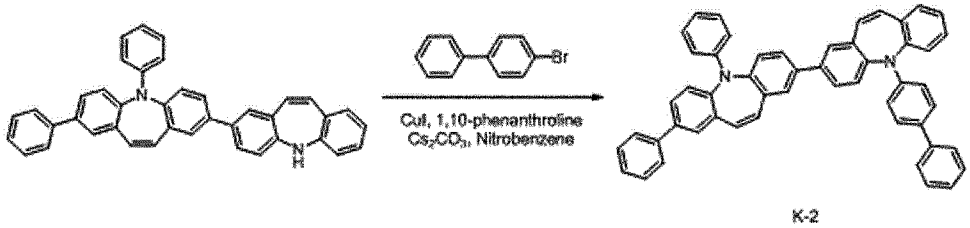
[794] 질소 기류 하에서 준비예 11에서 합성된 BAz-7 (3.6 g, 6.7 mmol), 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 다음, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 K-1 (3.5 g, 수율 68%)을 얻었다.

[795] Mass (이론치: 764.32, 측정치: 764 g/mol)

[796]

[797] **[합성예 95] K-2의 합성**

[798]



K-2

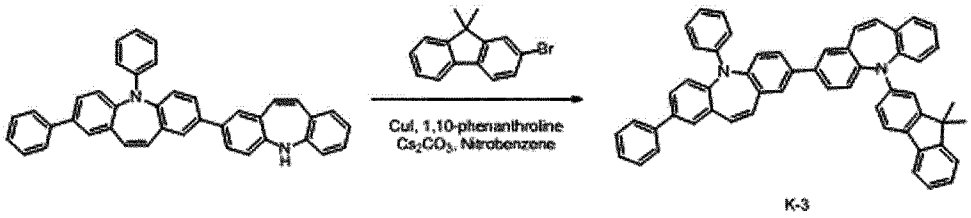
[799] 합성예 94에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 4-bromobiphenyl (1.90 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 94와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 K-2 (3.0 g, 수율 65%)를 얻었다.

[800] Mass (이론치: 688.29, 측정치: 688 g/mol)

[801]

[802] **[합성예 96] K-3의 합성**

[803]



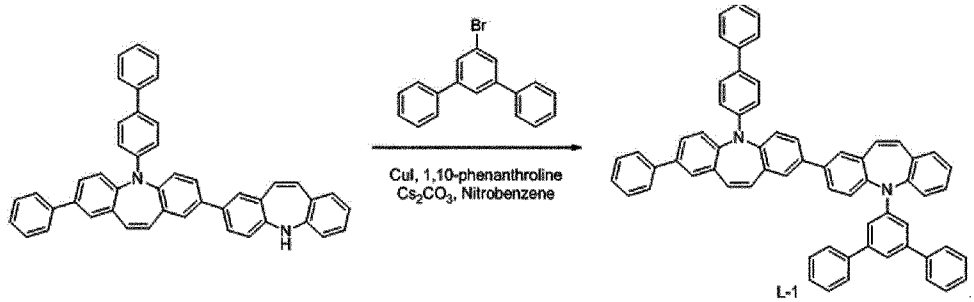
[804] 합성예 94에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (2.18 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 94와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 K-3 (3.0 g, 수율 61%)을 얻었다.

[805] Mass (이론치: 728.32, 측정치: 728 g/mol)

[806]

[807] **[합성예 97] L-1의 합성**

[808]



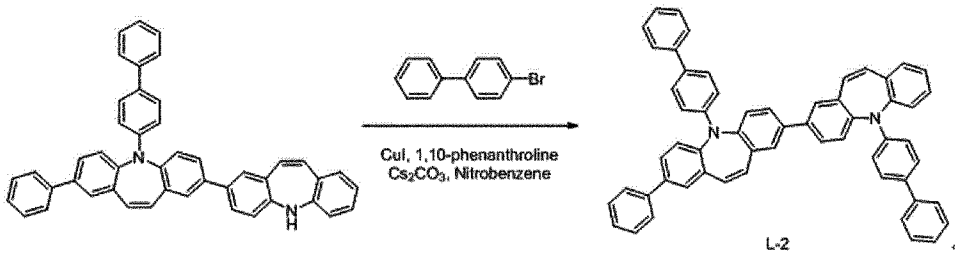
[809] 질소 기류 하에서 준비예 12에서 합성된 BAz-8 (4.1 g, 6.7 mmol), 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 다음, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 L-1 (3.7 g, 수율 65%)을 얻었다.

[810] Mass (이론치: 840.35, 측정치: 840 g/mol)

[811]

[812] **[합성예 98] L-2의 합성**

[813]



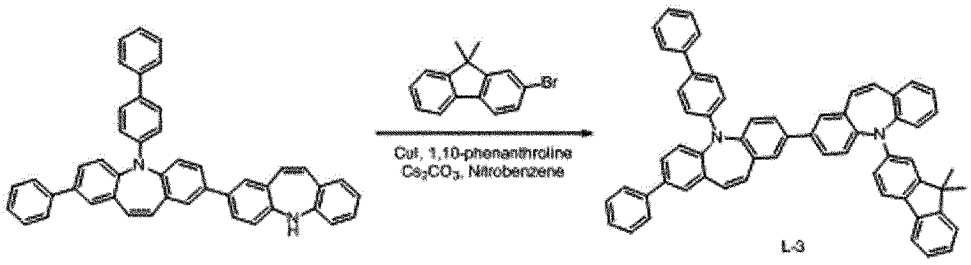
[814] 합성예 97에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 4-bromobiphenyl (1.90 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 97과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 L-2 (3.3 g, 수율 64%)를 얻었다.

[815] Mass (이론치: 764.32, 측정치: 764 g/mol)

[816]

[817] **[합성예 99] L-3의 합성**

[818]



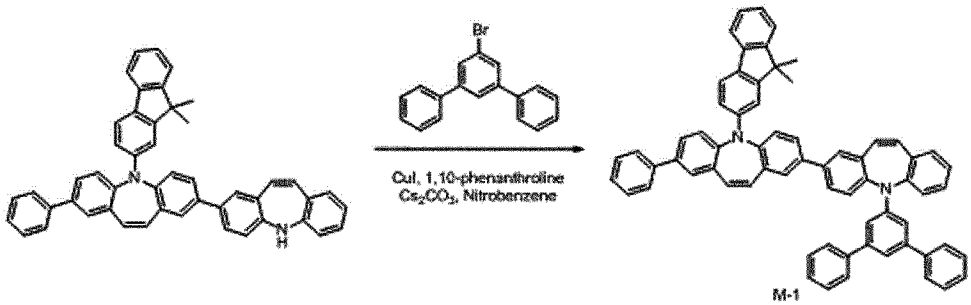
[819] 합성예 97에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (2.18 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 97과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 L-3 (3.3 g, 수율 61%)을 얻었다.

[820] Mass (이론치: 804.35, 측정치: 804 g/mol)

[821]

[822] **[합성예 100] M-1의 합성**

[823]



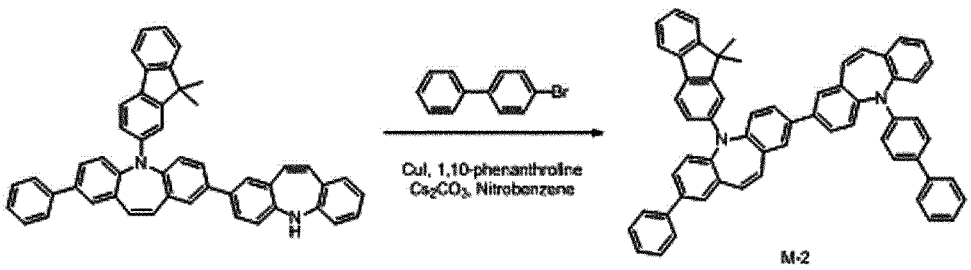
[824] 질소 기류 하에서 준비예 13에서 합성된 BAz-9 (4.4 g, 6.7 mmol), 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, 고체염을 필터링한 다음, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 M-1 (3.8 g, 수율 64%)을 얻었다.

[825] Mass (이론치: 880.38, 측정치: 880 g/mol)

[826]

[827] **[합성예 101] M-2의 합성**

[828]



[829] 합성예 100에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 4-bromobiphenyl (1.90 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 100과 동일한 과정을 수행하여

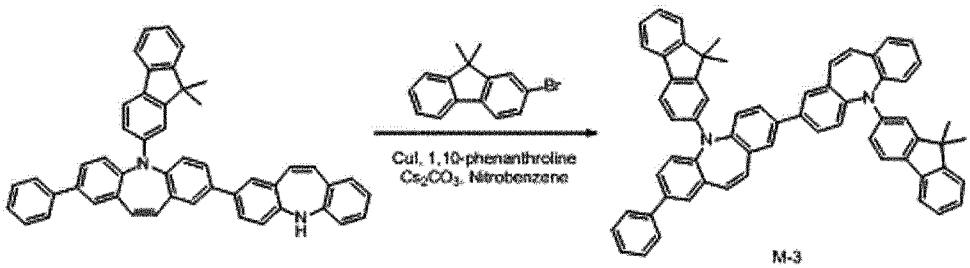
목적 화합물인 M-2 (3.8 g, 수율 70%)를 얻었다.

[830] Mass (이론치: 804.35, 측정치: 804 g/mol)

[831]

[832] **[합성예 102] M-3의 합성**

[833]



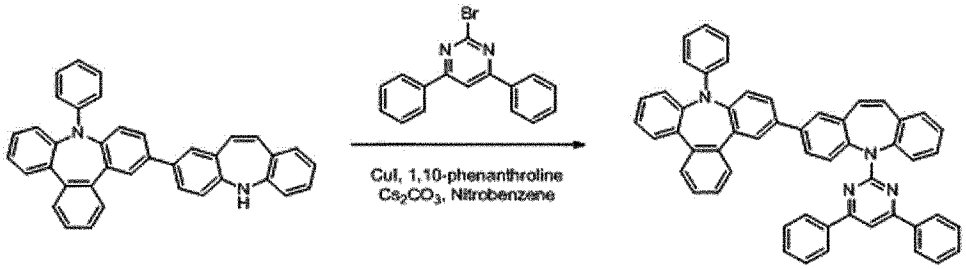
[834] 합성예 100에서 사용된 5'-bromo-(1,1',3',1")terphenyl 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (2.18 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 100과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 M-3 (4.1 g, 수율 73%)을 얻었다.

[835] Mass (이론치: 844.38, 측정치: 844 g/mol)

[836]

[837] **[합성예 103] Q-1의 합성**

[838]



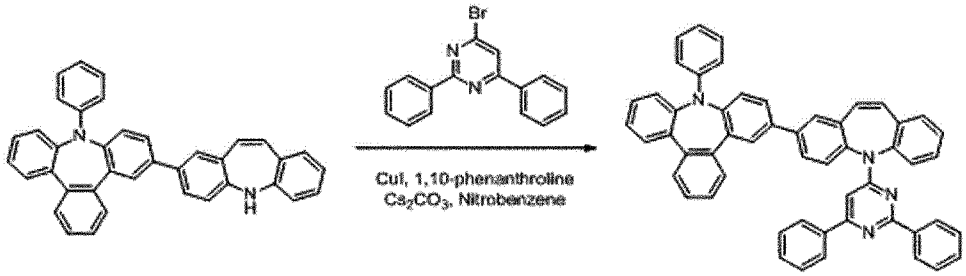
[839] 질소 기류 하에서 준비예 14에서 합성된 BAz-10 (3.4 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 filter한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 Q-1 (3.2 g, 수율 65%)을 얻었다.

[840] Mass (이론치: 740.71, 측정치: 740 g/mol)

[841]

[842] **[합성예 104] Q-2의 합성**

[843]



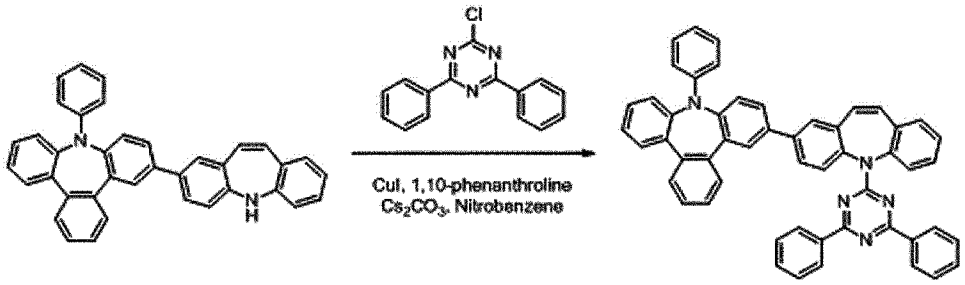
[844] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-2 (3.1 g, 수율 62%)를 얻었다.

[845] Mass (이론치: 740.71, 측정치: 740 g/mol)

[846]

[847] **[합성예 105] Q-3의 합성**

[848]



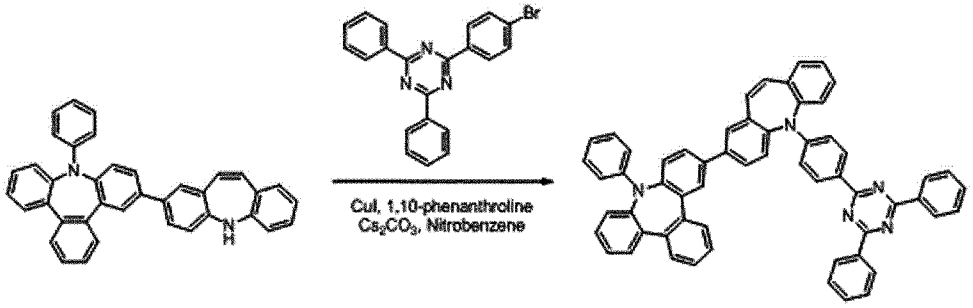
[849] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-3 (3.2 g, 수율 64%)을 얻었다.

[850] Mass (이론치: 741.71, 측정치: 741 g/mol)

[851]

[852] **[합성예 106] Q-4의 합성**

[853]



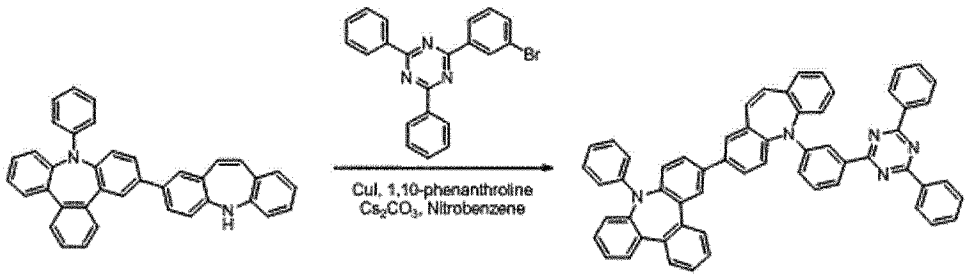
[854] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-4 (3.9 g, 수율 71%)를 얻었다.

[855] Mass (이론치: 817.7, 측정치: 817 g/mol)

[856]

[857] **[합성예 107] Q-5의 합성**

[858]



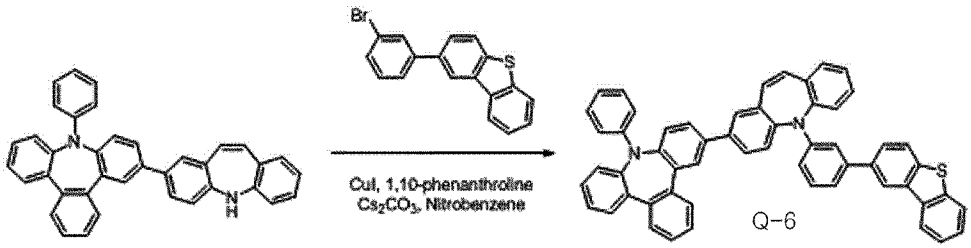
[859] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-5 (4.1 g, 수율 75%)를 얻었다.

[860] Mass (이론치: 817.7, 측정치: 817 g/mol)

[861]

[862] **[합성예 108] Q-6의 합성**

[863]



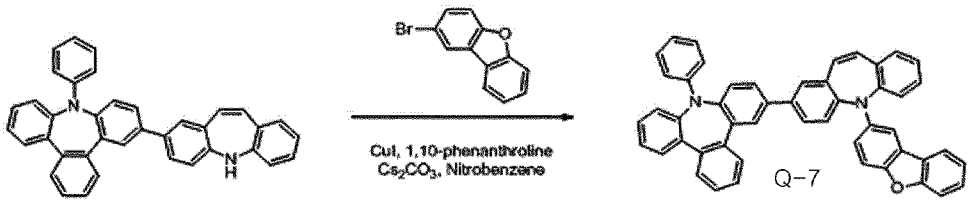
[864] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-6 (3.6 g, 수율 70%)을 얻었다.

[865] Mass (이론치: 768.68, 측정치: 768 g/mol)

[866]

[867] **[합성예 109] Q-7의 합성**

[868]



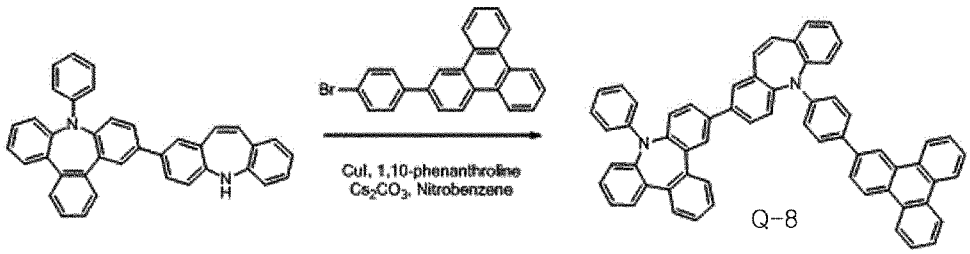
[869] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-7 (3.0 g, 수율 67%)을 얻었다.

[870] Mass (이론치: 676.67, 측정치: 676 g/mol)

[871]

[872] **[합성예 110] Q-8의 합성**

[873]



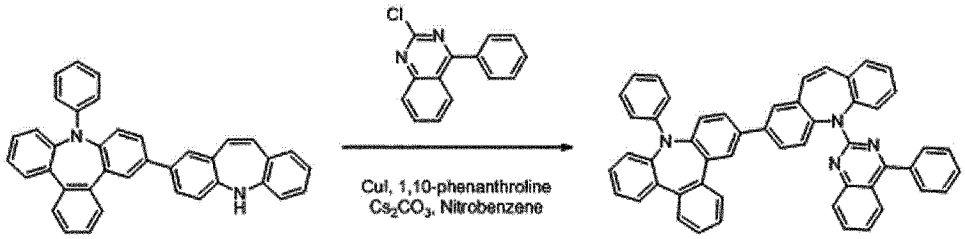
[874] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-8 (3.3 g, 수율 60%)을 얻었다.

[875] Mass (이론치: 812.74, 측정치: 812 g/mol)

[876]

[877] **[합성예 111] Q-9의 합성**

[878]



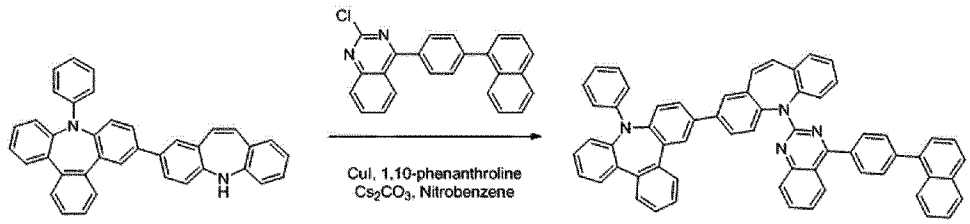
[879] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-9 (3.1 g, 수율 65%)을 얻었다.

[880] Mass (이론치: 714.7, 측정치: 714 g/mol)

[881]

[882] **[합성예 112] Q-10의 합성**

[883]



[884] 합성예 103에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 103과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Q-10 (3.7 g, 수율 66%)을 얻었다.

[885] Mass (이론치: 840.74, 측정치: 840 g/mol)

[886]

[887] **[실시예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[888] 상기 합성예 1에서 합성된 화합물 A-1를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도

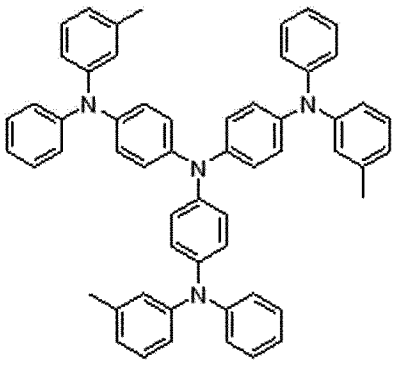
승화정제를 한 후, 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[889] 먼저, 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.

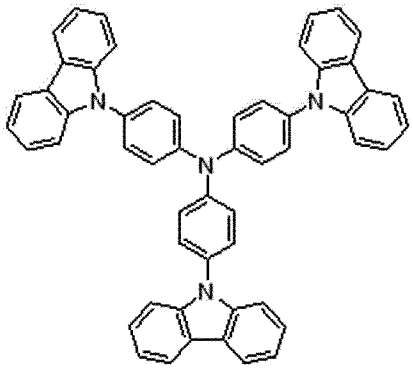
[890] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90% 화합물 A-1 + 10 % $Ir(ppy)_3$ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[891] 이때, 사용된 m-MTDATA, TCTA, $Ir(ppy)_3$, 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

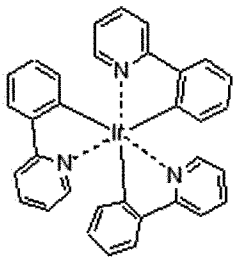
[892]



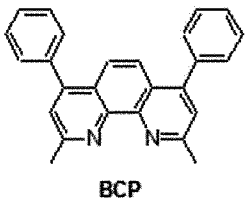
m-MTDATA



TCTA



$Ir(ppy)_3$



BCP

[893]

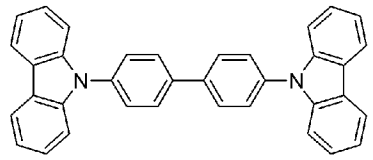
[894] **[실시예 2] ~ [실시예 80] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[895] 실시예 1에서 발광층 형성시 호스트 물질로 사용된 화합물 A-1 대신 하기 표 1에 기재된 각 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[896]

[897] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[898] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 A-1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[899] 

CBP

[900]

[901] **[평가예 1]**

[902] 실시예 1 내지 80 및 비교예 1에서 각각 제작된 녹색 유기 EL 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[903] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	A-1	6.48	517	41.3
실시예 2	A-2	6.86	518	41.3
실시예 3	A-3	6.77	517	43.1
실시예 4	A-4	6.66	515	43.5
실시예 5	A-5	6.65	518	41.4
실시예 6	A-6	6.65	518	42.2
실시예 7	A-7	6.7	518	42
실시예 8	A-8	6.66	515	41.8
실시예 9	B-1	6.65	518	41.3
실시예 10	B-2	6.65	517	41.2
실시예 11	B-3	6.71	515	41.2
실시예 12	B-4	6.65	518	41.4
실시예 13	B-5	6.71	518	41.4
실시예 14	B-6	6.72	518	41.9
실시예 15	B-7	6.72	517	41.6
실시예 16	B-8	6.73	518	41.5
실시예 17	C-1	6.73	517	39.2
실시예 18	C-2	6.73	515	41.3
실시예 19	C-3	6.48	518	39.7
실시예 20	C-4	6.86	518	38.9
실시예 21	C-5	6.77	518	41.3
실시예 22	C-6	6.66	518	39.7
실시예 23	C-7	6.65	518	38.9
실시예 24	C-8	6.65	515	41.3
실시예 25	D-1	6.64	518	41.3
실시예 26	D-2	6.64	518	41.3
실시예 27	D-3	6.64	517	41.2
실시예 28	D-4	6.63	518	41.2
실시예 29	D-5	6.72	517	41.3

실시예 30	D-6	6.73	515	41.3
실시예 31	D-7	6.73	518	41.3
실시예 32	D-8	6.73	518	41.2
실시예 33	E-1	6.48	518	41.2
실시예 34	E-2	6.86	517	41.4
실시예 35	E-3	6.77	518	42.2
실시예 36	E-4	6.66	517	42
실시예 37	E-5	6.77	515	41.8
실시예 38	E-6	6.66	518	42
실시예 39	E-7	6.66	518	42.5
실시예 40	E-8	6.81	517	41.3
실시예 41	F-1	6.66	515	41.3
실시예 42	F-2	6.81	518	39.7
실시예 43	F-3	6.68	518	38.9
실시예 44	F-4	6.66	518	41.3
실시예 45	F-5	6.7	517	41.3
실시예 46	F-6	6.7	515	43.1
실시예 47	F-7	6.51	518	41.3
실시예 48	F-8	6.77	518	41.3
실시예 49	G-1	6.46	518	41.2
실시예 50	G-2	6.81	517	41.2
실시예 51	G-3	6.68	515	41.4
실시예 52	G-4	6.66	518	42.2
실시예 53	G-5	6.73	518	42
실시예 54	G-6	6.73	517	41.2
실시예 55	G-7	6.73	515	41.4
실시예 56	G-8	6.48	518	43.1
실시예 57	H-1	6.86	518	43.5
실시예 58	H-2	6.77	517	41.4
실시예 59	H-3	6.66	515	42.2
실시예 60	H-4	6.77	518	41.9

실시예 61	H-5	6.66	517	41.8
실시예 62	H-6	6.73	515	41.4
실시예 63	H-7	6.73	518	42.2
실시예 64	H-8	6.48	518	42.0
실시예 65	I-1	6.70	518	43.5
실시예 66	I-2	6.75	517	41.4
실시예 67	I-3	6.60	517	42.0
실시예 68	I-4	6.70	518	42.1
실시예 69	I-5	6.65	517	41.6
실시예 70	I-6	6.72	515	41.4
실시예 71	I-7	6.70	518	42.0
실시예 72	I-8	6.50	518	41.9
실시예 73	Q-1	6.66	518	41.2
실시예 74	Q-2	6.60	518	42.1
실시예 75	Q-3	6.60	518	41.8
실시예 76	Q-4	6.60	517	42.1
실시예 77	Q-5	6.70	515	42.0
실시예 78	Q-6	6.64	518	41.5
실시예 79	Q-7	6.50	518	41.9
실시예 80	Q-8	6.55	518	42.6
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[904] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-1 ~ Q-8)을 발광층의 호스트로 사용한 실시예 1 내지 80의 녹색 유기 EL 소자는 종래 CBP를 사용한 비교예 1의 녹색 유기 EL 소자에 비해 전류효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

[905]

[906] **[실시예 81] 적색 유기 EL 소자의 제조**

[907] 상기 합성예 9에서 합성된 화합물 A-9를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

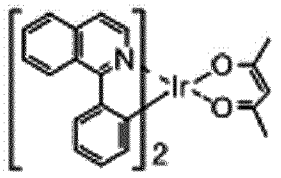
[908] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기 (Power

sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[909] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm) / 90% 화합물 A-9 + 10 % $(piq)_2Ir(acac)$ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[910] 이때, 사용된 m-MTDATA, TCTA 및 BCP의 구조는 실시예1에 기재된 바와 같고, $(piq)_2Ir(acac)$의 구조는 하기와 같다.

[911]



(piq)2Ir(acac)

[912]

[913] **[실시예 82] ~ [실시예 100] 적색 유기 EL 소자의 제작**

[914] 실시예 81에서 발광층 형성시 호스트 물질로 사용된 화합물 A-9 대신 하기 표 2에 기재된 각 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 81과 동일하게 수행하여 적색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[915]

[916] **[비교예 2]**

[917] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로 사용된 화합물 A-9 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 81과 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 이때, 사용된 CBP의 구조는 비교예 1에 기재된 바와 같다.

[918]

[919] **[평가예 2]**

[920] 실시예 81 내지 100 및 비교예 2 에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[921] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트	구동 전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 81	A-9	4.91	12.1
실시예 82	A-10	4.55	12.4
실시예 83	B-9	4.67	8.6
실시예 84	B-10	4.87	13.7
실시예 85	C-9	4.78	12.1
실시예 86	C-10	4.91	9.1
실시예 87	D-9	4.52	9.2
실시예 88	D-10	4.87	13.7
실시예 89	E-9	4.78	12.1
실시예 90	E-10	4.55	9.1
실시예 91	F-9	4.87	12.1
실시예 92	F-10	4.78	9.1
실시예 93	G-9	4.78	9.2
실시예 94	G-10	4.91	8.9
실시예 95	H-9	4.52	8.6
실시예 96	H-10	4.87	12.1
실시예 97	I-9	4.78	9.1
실시예 98	I-10	4.91	9.2
실시예 99	Q-9	4.80	10.8
실시예 100	Q-10	4.90	11.0
비교예 2	CBP	5.25	8.2

[922] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-9~Q-10)을 발광층의 호스트로 사용한 실시예 81내지 100의 적색 유기 전계 발광 소자는 종래 CBP를 사용한 비교예 2의 적색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

[923]

[924] **[실시예 101] 녹색 유기 EL 소자의 제조**

[925] 상기 합성예 91에서 합성된 화합물 J-1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[926] 먼저, 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.

[927] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/화합물 J-1 (80 nm) / 90% CBP + 10 % $Ir(ppy)_3$ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[928]

[929] **[실시예 102] ~ [실시예 112] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[930] 실시예 101에서 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 J-1 대신 하기 표 3에 기재된 각 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 101과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[931]

[932] **[비교예 3]**

[933] 정공 수송층 물질로서 사용된 화합물 J-1 대신 TCTA를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 101과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 이때, 사용된 TCTA의 구조는 실시예 1에 기재된 바와 같다.

[934]

[935] **[평가예 3]**

[936] 실시예 101 내지 112 및 비교예 3에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[937] 표 3

[Table 3]

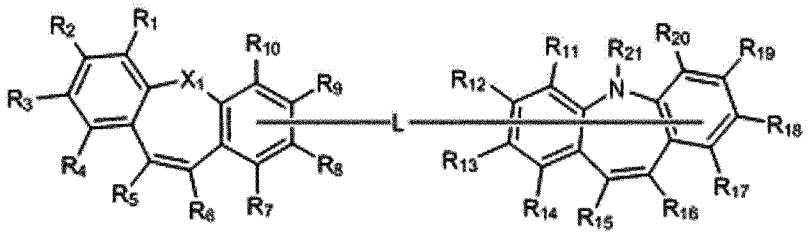
샘플	정공수송층 물질	구동 전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 101	J-1	6.50	40.9
실시예 102	J-2	6.45	41.9
실시예 103	J-3	6.50	41.9
실시예 104	K-1	6.55	41.5
실시예 105	K-2	6.60	42.0
실시예 106	K-3	6.45	42.3
실시예 107	L-1	6.50	40.9
실시예 108	L-2	6.60	41.3
실시예 109	L-3	6.65	41.8
실시예 110	M-1	6.60	42.1
실시예 111	M-2	6.70	41.6
실시예 112	M-3	6.55	41.8
비교예 3	TCTA	6.93	38.2

[938] 상기 표 3에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(J-1~M-3)을 정공수송층 재료로 사용한 실시예 101 내지 112의 녹색 유기 전계 발광 소자는 종래 TCTA를 사용한 비교예 3의 녹색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

X_1은 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$로 이루어진 군에서 선택되고,

L은 단일 결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{60}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며,

이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않고;

Ar_1 내지 Ar_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되고;

R_1 내지 R_{21}은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의

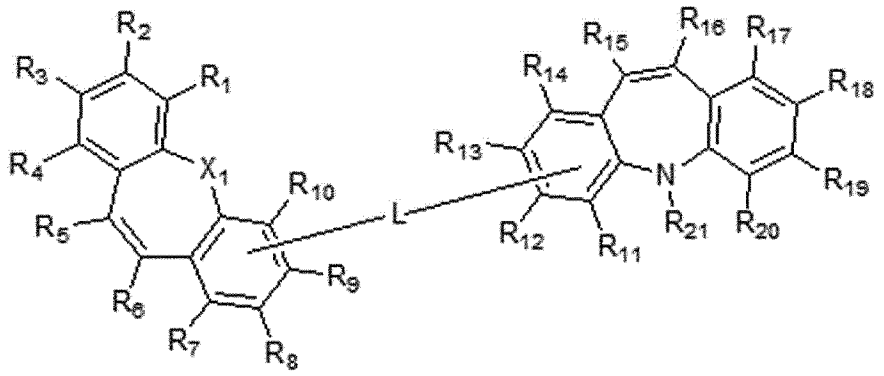
알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

상기 L의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_{21}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기, 아릴실릴기 및 축합 고리는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

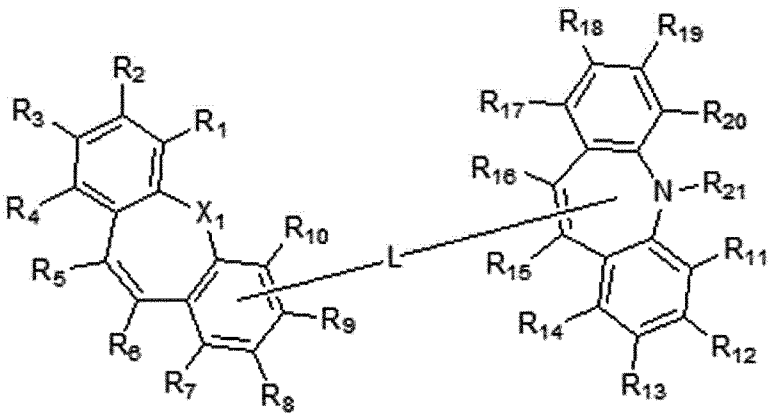
[청구항 2] 제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 것이 특징인 화합물:

[화학식 2]



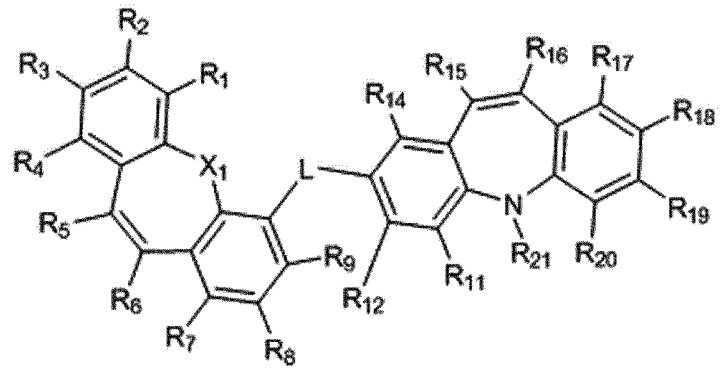
[화학식 3]



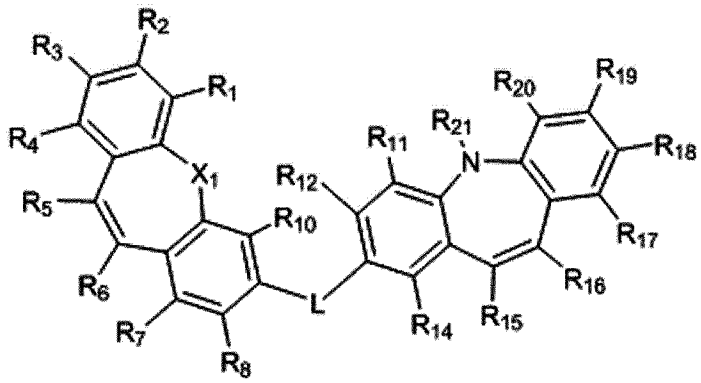
(상기 화학식 2 및 3에서,
X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,
다만, 화학식 2의 L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않으며,
화학식 3의 L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않음).

[청구항 3] 상기 화합물은 하기 화학식 4 내지 화학식 9 중 어느 하나로 표시되는 것이 특징인 화합물:

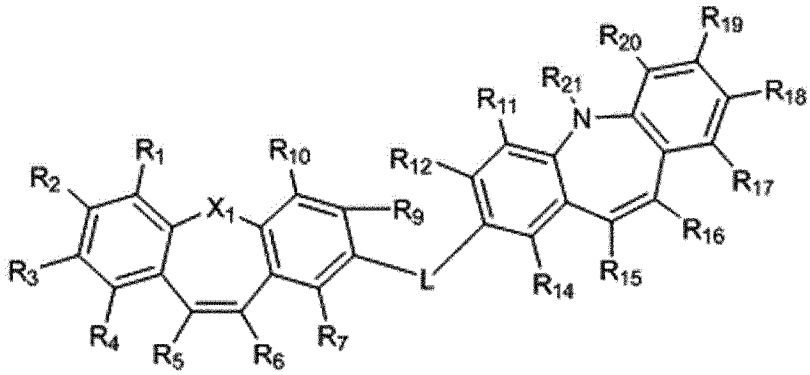
[화학식 4]



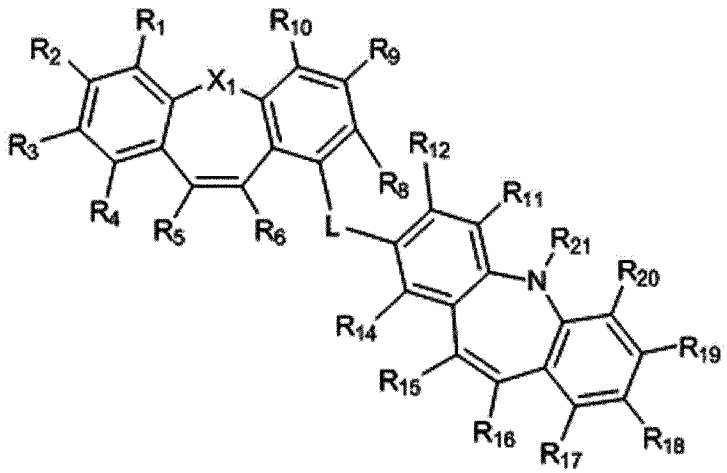
[화학식 5]



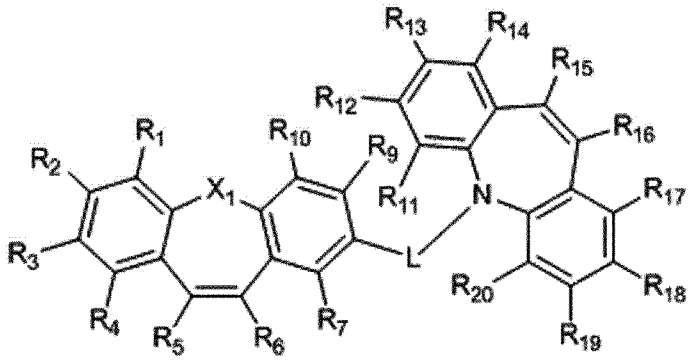
[화학식 6]



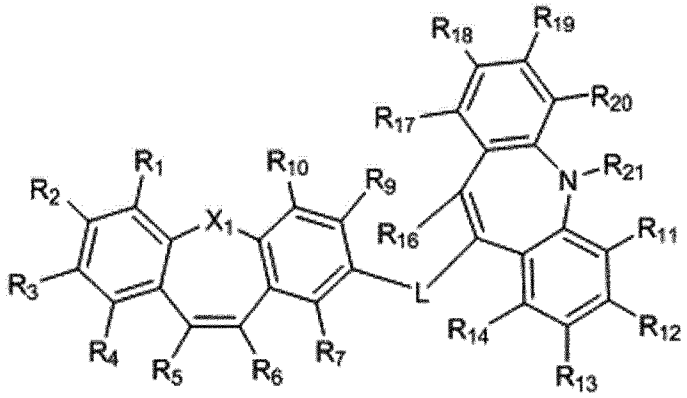
[화학식 7]



[화학식 8]



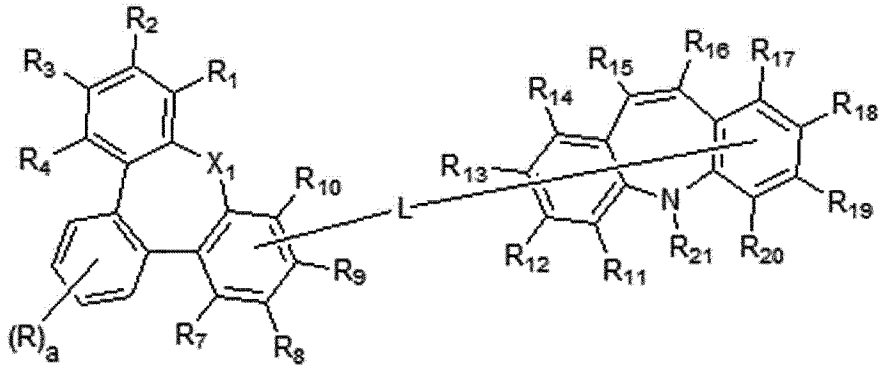
[화학식 9]



(상기 화학식 4 내지 화학식 9에서
X_1, L, R_1 내지 R_{21}은 각각 제1항에서 정의한 바와 같음).

[청구항 4] 제1항에 있어서,
상기 R_5와 R_6은 서로 결합하여 C_6~C_{20}의 축합 방향족 고리를 형성하고,
상기 축합 방향족 고리는 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있는 것이 특징인 화합물.

[청구항 5] 제1항에 있어서,
상기 화합물은 하기 화학식 10으로 표시되는 것이 특징인 화합물:
[화학식 10]



상기 화학식 10에서,

X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,

이때, L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않고;

a는 0 내지 4의 정수로서, a가 1 내지 4의 정수인 경우, R은 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

다만 R이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

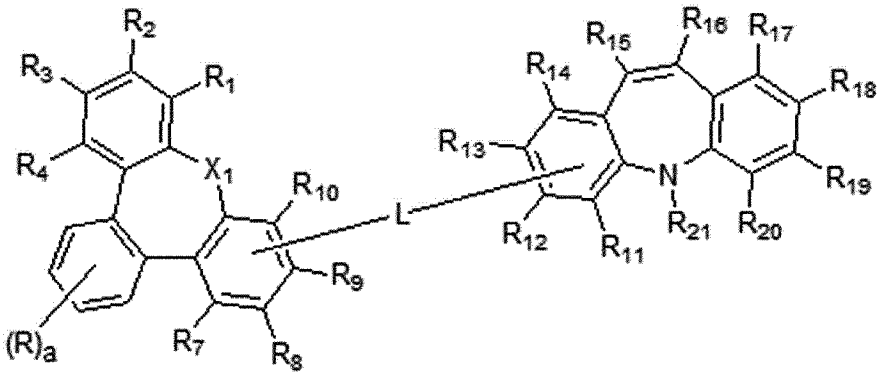
이때, 상기 R의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기,

C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

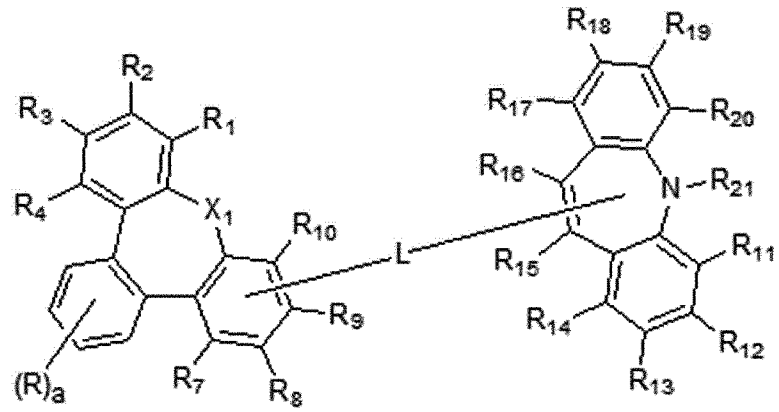
[청구항 6] 제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 11 또는 12로 표시되는 것이 특징인 화합물:

[화학식 11]



[화학식 12]



(상기 화학식 11 및 12에서,

X_1, L, 및 R_1 내지 R_{21}은 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,

다만, 화학식 11의 L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{11} 내지 R_{14} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않으며,

화학식 12의 L은 R_7 내지 R_{10} 위치 중에서 선택된 하나의 탄소와 연결되고, 이와 동시에 R_{15}, R_{16} 및 R_{21} 위치 중에서 선택된 하나의

탄소 또는 질소와 연결되며, 다만 L과 연결되는 위치의 치환기는 존재하지 않으며;

a는 0 내지 4의 정수로서, a가 1 내지 4의 정수인 경우, R은 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

다만 R이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

이때, 상기 R의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

[청구항 7] 제1항에 있어서,

X_1은 $N(Ar_1)$이고,

Ar_1은 제1항에서 정의한 바와 같은 것이 특징인 화합물.

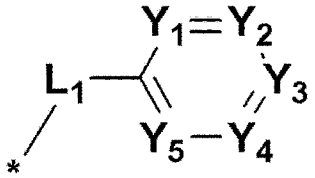
[청구항 8] 제1항에 있어서,

Ar_1 내지 Ar_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의

아릴기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,
이때, 상기 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있는 것이 특징인 화합물.

[청구항 9] 제1항에 있어서,
Ar_1 내지 Ar_5 및 R_{21}중 적어도 하나는 하기 화학식 13으로 표시되는 치환체인 것이 특징인 화합물:

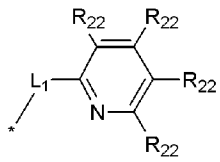
[화학식 13]



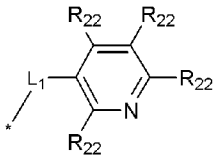
(상기 화학식 13에서,
L_1은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,
Y_1 내지 Y_5는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{22})$이며, 이때 R_{22}가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,
R_{22}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는

비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
상기 L_1의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기와, R_{22}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

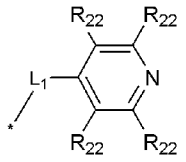
[청구항 10] 제1항에 있어서,
Ar_1 내지 Ar_5 및 R_{21} 중에서 적어도 하나는 하기 화학식 A-1 내지 A-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:



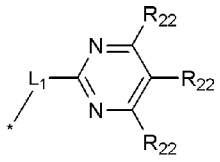
A-1



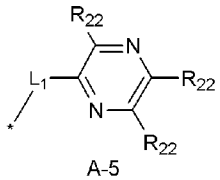
A-2



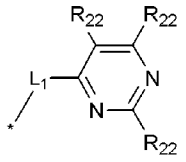
A-3



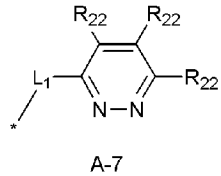
A-4



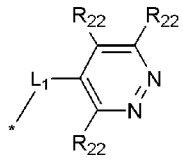
A-5



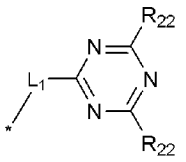
A-6



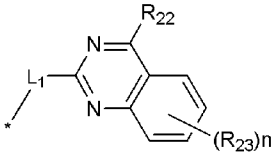
A-7



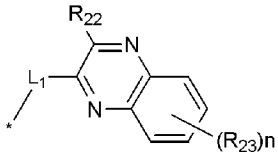
A-8



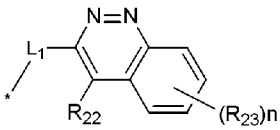
A-9



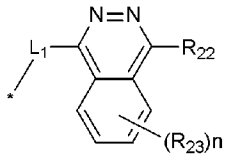
A-10



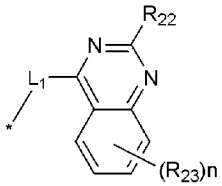
A-11



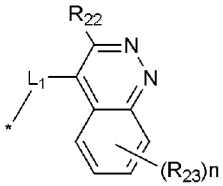
A-12



A-13



A-14



A-15

(상기 화학식 A-1 내지 A-15 에서,

L_1은 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

R_{22}가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,

R_{22}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는

비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

n은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 1 내지 4인 경우, R_{23}는 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2~C_{40}의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C_1~C_{40}의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,

상기 L_1의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기와, R_{22} 및 R_{23}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

[청구항 11] 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,

상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 12] 제11항에 있어서,
상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 인광 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함하고,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공수송층 또는 인광 발광층인 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2015/001625

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 403/14(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 403/14; C09K 11/06; H05B 33/14; C09K 11/06; H05B 33/14; C07D 223/26; C07D 413/14; C07D 223/14; C07D 223/26; C09K 11/06; H05B 33/14; 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) & Keywords: benzo stilbene, benzo azepine, 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.
X	JP 11-026163A (TORAY IND INC) 29 January 1999 See claims 1 to 12, [0025] drawing 17, drawing 18 compound	1-12
X	JP 2000-113985 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD et al.) 21 April 2000 See compounds 1-33 to 1-36 of [drawing 26], compounds 1-37, 38 of [drawing 27]	1-12
A	JP 2004-217592 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 05 August 2004 See the entire description	1-12
A	JP 10-059943A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 03 March 1998 See the entire description	1-12
A	JP 2005-243394 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 08 September 2005 See the entire description	1-12

☐ 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	Date of mailing of the international search report
26 MAY 2015 (26.05.2015)	**26 MAY 2015 (26.05.2015)**
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.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2015/001625

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 11-026163A	29/01/1999	JP 3893672 B2	14/03/2007
JP 2000-113985 A	21/04/2000	JP 03-753293B2 US 6436558 B1	08/03/2006 20/08/2002
JP 2004-217592 A	05/08/2004	NONE	
JP 10-059943A	03/03/1998	JP 03-798080B2 US 05929235 A	19/07/2006 27/07/1999
JP 2005-243394 A	08/09/2005	NONE	

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2015/001625

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 403/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 403/14; C09K 11/06; H05B 33/14; C09K 11/06; H05B 33/14; C07D 223/26; C07D 413/14; C07D 223/14; C07D 223/26; C09K 11/06; H05B 33/14; 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) & 키워드:벤조스틸벤,벤조아제핀,유기발광소자

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	JP 11-026163A (TORAY IND INC) 1999.01.29 청구항 제1항 내지 제12항, [0025] 화17,화18 화합물 참고	1-12
X	JP 2000-113985 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD 외 1명) 2000.04.21 [화26]의 화합물 1-33 내지 1-36, [화27]의 1-37,38 화합물 참고	1-12
A	JP 2004-217592 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 2004.08.05 전체 명세서 참조	1-12
A	JP 10-059943A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 1998.03.03 전체 명세서 참조	1-12
A	JP 2005-243394 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 2005.09.08 전체 명세서 참조	1-12

☐ 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	국제조사보고서 발송일
2015년 05월 26일 (26.05.2015)	2015년 05월 26일 (26.05.2015)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관
신창훈
전화번호 +82-42-481-8406

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2015/001625

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 11-026163A	1999/01/29	JP 3893672 B2	2007/03/14
JP 2000-113985 A	2000/04/21	JP 03-753293B2 US 6436558 B1	2006/03/08 2002/08/20
JP 2004-217592 A	2004/08/05	없음	
JP 10-059943A	1998/03/03	JP 03-798080B2 US 05929235 A	2006/07/19 1999/07/27
JP 2005-243394 A	2005/09/08	없음	