

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 6월 1일 (01.06.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/090901 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 487/04 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2016/012227

(22) 국제출원일: 2016년 10월 28일 (28.10.2016)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:

10-2015-0167445 2015년 11월 27일 (27.11.2015) KR

(71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: 김홍석 (KIM, Hongsuk); 13613 경기도 성남시 분당구 정자일로 55, 109-1601 (두산위브트레이움), Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 특허법인 한벗 (HANBEOT PATENT & LAW FIRM); 03737 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 15층, 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, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: ORGANIC LIGHT EMITTING COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT USING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic electroluminescent compound and an organic electroluminescent element using the same and, more specifically, to a novel compound having excellent hole injection ability, hole transport ability, and light emitting ability, and to an organic electroluminescent element having improved characteristics, such as high light emitting efficiency, a low driving voltage, and long lifetime, by containing the novel compound in at least one organic material layer.

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입능 및 수송능, 발광능이 우수한 신규 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써, 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 긴 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2017/090901 A1

명세서

발명의 명칭: 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 기술분야

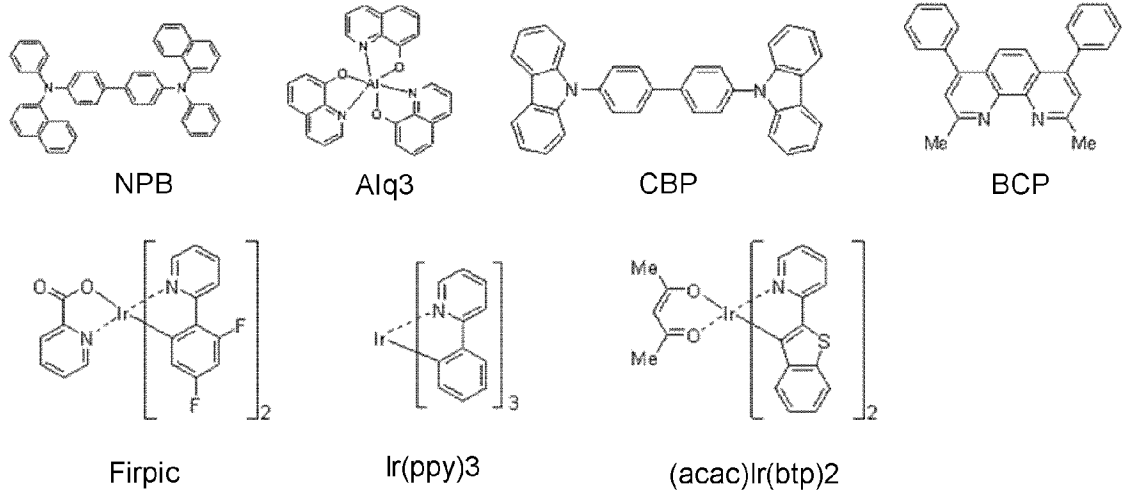
- [1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입능 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써, 발광효율, 구동전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 전계 발광 소자에서는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 유기 EL 소자의 발광층 형성재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광재료로 노란색 및 주황색 발광재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다.
- [5] 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.
- [6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로 사용되는 물질은, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 물질로는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 도펀트 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체

화합물이 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[7]



[8] 그러나, 종래 발광 물질들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 우수한 성능을 가지는 발광 물질의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

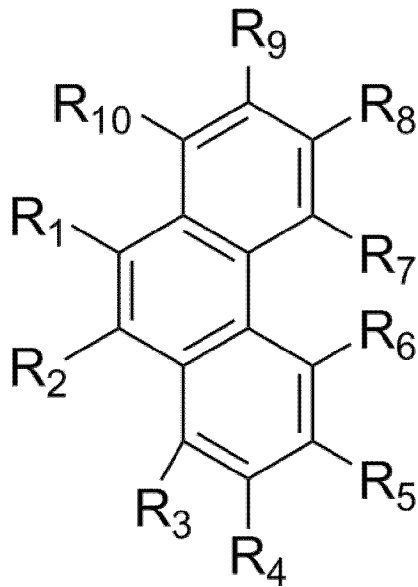
[9] 상기한 문제점을 해결하기 위해, 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 정공 주입능 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[10] 또한, 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동전압과 높은 발광효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

과제 해결 수단

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

[12] [화학식1]

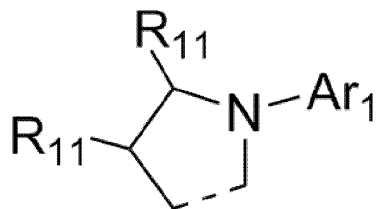


[13] 상기 화학식 1에서,

[14] R_1 과 R_2 , R_2 과 R_3 , R_3 과 R_4 , R_4 과 R_5 , R_5 과 R_6 , R_6 과 R_7 , R_7 과 R_8 , R_8 과 R_9 , R_9 과 R_{10} 및 R_{10} 과 R_1 중 적어도 하나 이상은 하기 화학식 2와 축합고리를 형성하고;

[15] 축합고리를 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{10} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

[16] [화학식2]

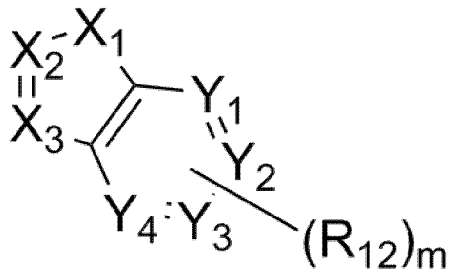


[17] 상기 화학식 2에서,

[18] 점선은 화학식 1과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며;

[19] R_{11} 는 하기 화학식 3의 R_{12} 와 결합하여 축합고리를 형성하고;

[20] [화학식3]



- [21] X₁ 내지 X₃는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar₂), C(Ar₃)(Ar₄) 및 Si(Ar₅)(Ar₆)로 이루어진 군에서 선택되고;
- [22] Y₁ 내지 Y₄는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C이고;
- [23] m은 2 내지 4의 정수이며;
- [24] R₁₂는 각각 R₁₁과 서로 결합하여 축합고리를 형성하고;
- [25] 축합고리를 비(非)형성하는 R₁₂는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;
- [26] Ar₁ 내지 Ar₆는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,
- [27] 상기 R₁ 내지 R₁₀, R₁₂ 및 Ar₁ 내지 Ar₆의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은

서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

- [28] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

- [29] 여기서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광층, 전자 수송층 및 정공 수송층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

발명의 효과

- [30] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다.

- [31] 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료뿐만 아니라 전자수송 재료 및 정공수송 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트, 전자수송 및 정공수송 재료에 비해 낮은 구동전압, 높은 효율 및 긴 수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [32] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[33]

[34] 1. 신규 유기 화합물

- [35] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 ‘화학식 1로 표시되는 페난트렌 모이어티’에 적어도 하나 이상의 ‘화학식 3으로 표시되는 방향족 고리와 결합하는 화학식 2로 표시되는 5원의 헤테로 고리’가 축합되어 기본 골격을 이루고, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 도입되는 것을 특징으로 한다. 보다 구체적으로, 상기 화학식 2의 화합물은 ‘5원의 헤테로 고리’가 ‘인다졸, 벤즈이미다졸, 벤조옥사졸 및 벤조싸이오펜 모이어티의 벤젠 고리’와 축합된 구조일 수 있다.

- [36] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 전계 발광 소자용 재료[예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, ‘CBP’라 함)]보다 높은 분자량을 갖기 때문에, 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라 캐리어 수송능, 발광능 등이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층인 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 어느 하나의 재료로 사용될 경우, 소자의 구동전압, 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

- [37] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 다양한 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있으며, 넓은 밴드갭뿐만 아니라 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다.

- [38] 예를 들어, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 질소-함유 헤테로고리(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기 등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 전자 끌개기(EWG)가 도입되어 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성을 나타내기 때문에 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외, 전자주입층/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다.
- [39] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주개기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에 발광층 재료 이외, 정공주입층/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다.
- [40] 이러한 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송층/주입층 재료 및 정공 수송층/주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명 개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.
- [41] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.
- [42] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서는 호스트 물질의 삼중항 에너지 갭이 도펀트 물질의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 향상될 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 갖는 인다졸, 벤즈이미다졸, 벤조옥사졸 및 벤조싸이오펜 모이어티가 축합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [43] 또한, 본 발명의 화합물은 전술한 바와 같이 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자 수송층 또는 정공 수송층으로 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.

[44]

[45] 본 발명에 따른 신규 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 '페난트렌'과 적어도 하나 이상의 상기 화학식 2로 표시되는 '5원의 헤테로 고리'가 축합하여 형성된다.

[46] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, R_1 과 R_2 , R_2 과 R_3 , R_3 과 R_4 , R_4 과 R_5 , R_5 과 R_6 , R_6 과 R_7 , R_7 과 R_8 , R_8 과 R_9 , R_9 과 R_{10} 및 R_{10} 과 R_1 중 적어도 하나 이상은 각각 상기 화학식 2와 축합고리를 형성한다. 예를 들어, 상기 R_1 과 R_2 이 상기 화학식 2로 표시되는 5원의 헤테로 고리와 결합할 경우, 하기 화학식 C-1 내지 C-40 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 형성된다.

[47] 축합고리를 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{10} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다. 바람직하게는, 상기 축합고리를 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{10} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[48] 상기 화학식 2로 표시되는 화합물에서, 점선은 상기 화학식 1과 축합이 이루어지는 부위를 의미한다.

[49] R_{11} 는 상기 화학식 3의 R_{12} 와 결합하여 축합고리를 형성한다.

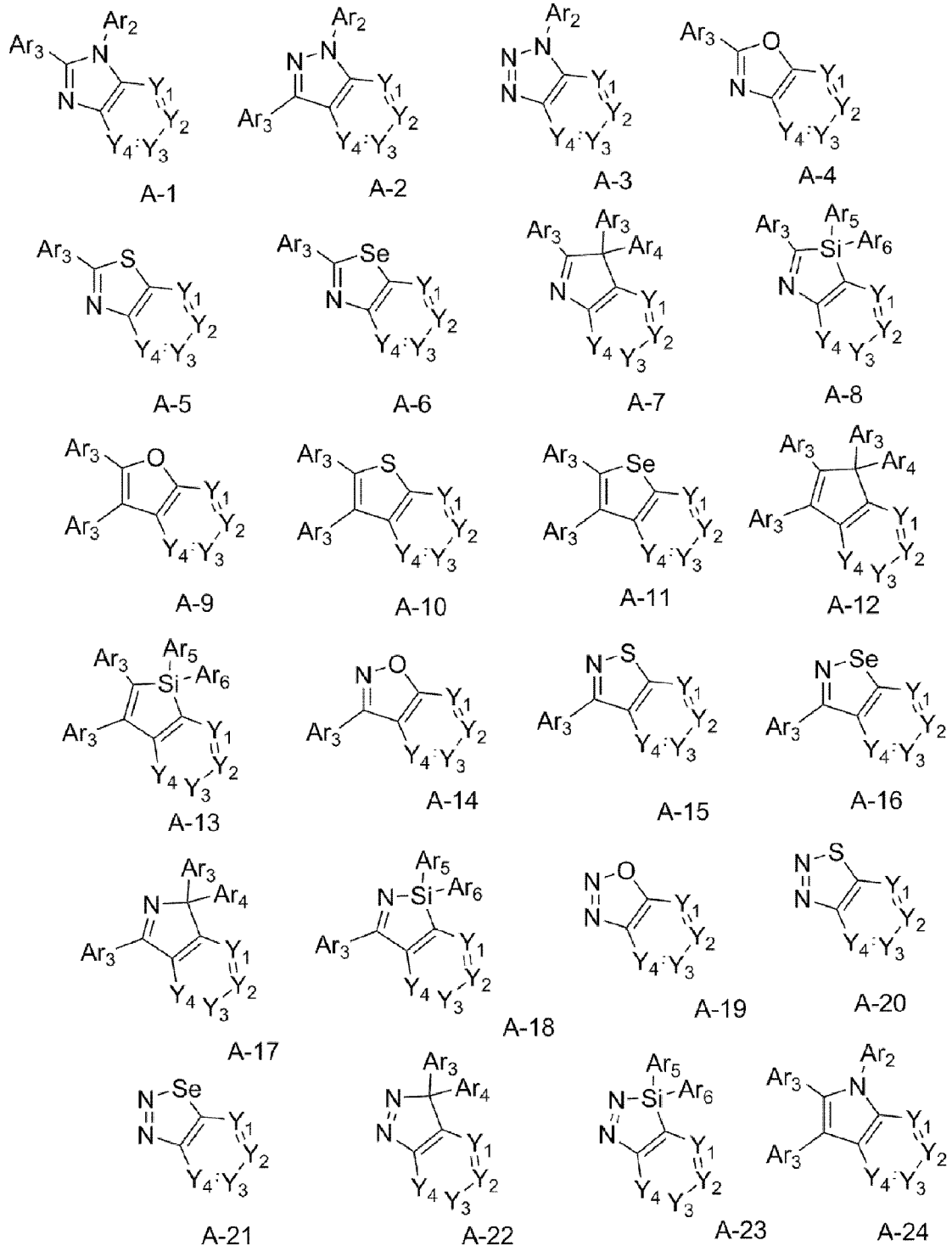
[50] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물에서, X_1 내지 X_3 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_2), C(Ar_3)(Ar_4) 및 Si(Ar_5)(Ar_6)로 이루어진 군에서 선택된다. 바람직하게는, 상기 X_1 내지 X_3 중 하나는 N(Ar_1)이며, 나머지는 O, S, Se, N(Ar_2), C(Ar_3)(Ar_4) 및 Si(Ar_5)(Ar_6)로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

- [51] Y_1 내지 Y_4 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C이다. 다만, Y_1 내지 Y_4 중 적어도 두 개는 C이다. 바람직하게는, 상기 Y_1 내지 Y_4 는 모두 C일 수 있다.
- [52] m 은 2 내지 4의 정수이며, R_{12} 는 각각 상기 화학식 2의 R_{11} 과 서로 결합하여 축합고리를 형성한다.
- [53] 축합고리를 비(非)형성하는 R_{12} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [54] Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다. 바람직하게는, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [55] 이때, 상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다. 바람직하게는, 상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의

알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있고, 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

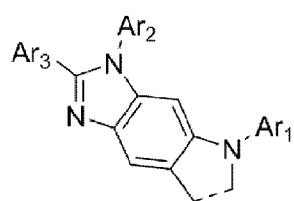
[56] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 A-1 내지 A-24 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다.

[57]

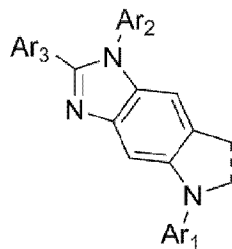


- [58] 상기 화학식 A-1 내지 A-24에서,
- [59] Y_1 내지 Y_4 및 Ar_1 내지 Ar_6 는 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.
- [60] 이러한 화학식 3의 화합물과 화학식 2의 화합물이 결합하여 형성되는 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-72 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다.

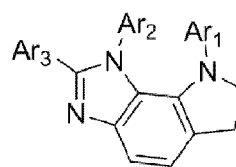
[61]



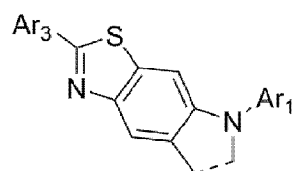
B-1



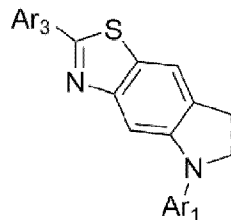
B-2



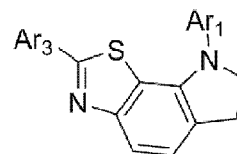
B-3



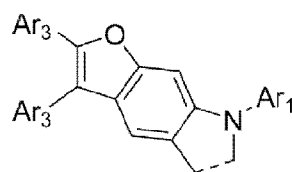
B-4



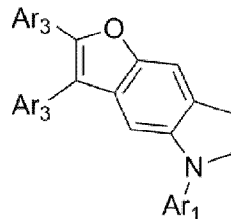
B-5



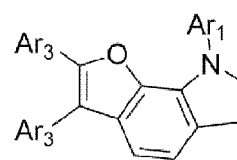
B-6



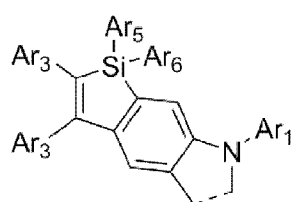
B-7



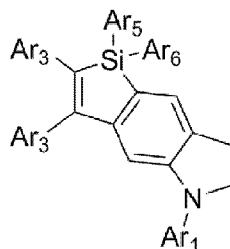
B-8



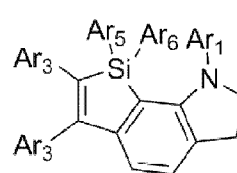
B-9



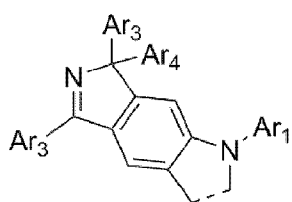
B-10



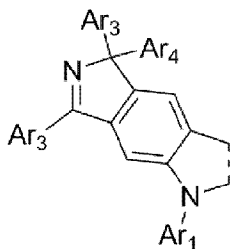
B-11



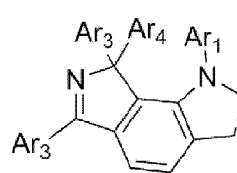
B-12



B-13

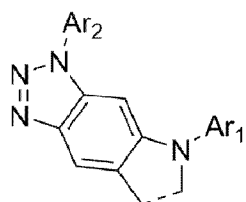


B-14

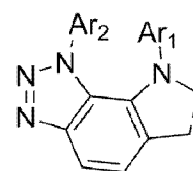


B-15

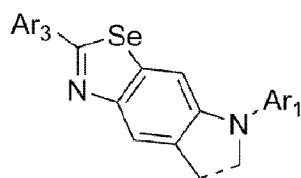
B-18



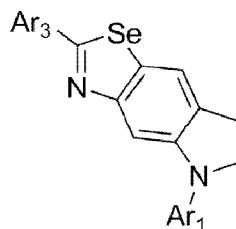
B-20



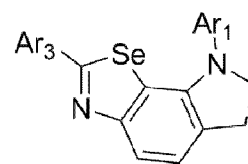
B-21



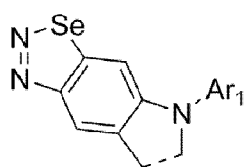
B-22



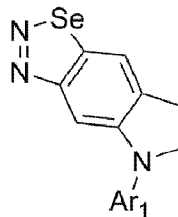
B-23



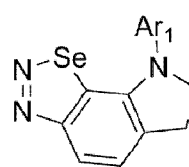
B-24



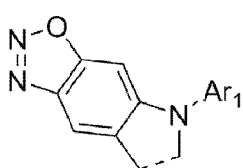
B-25



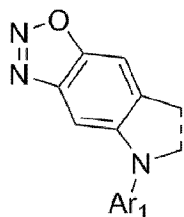
B-26



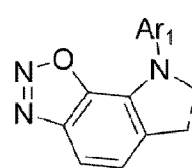
B-27



B-28

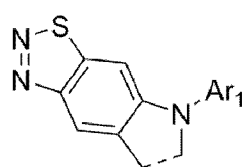


B-29

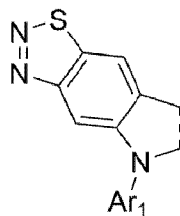


B-30

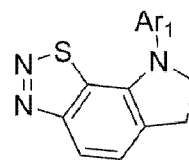
[63]



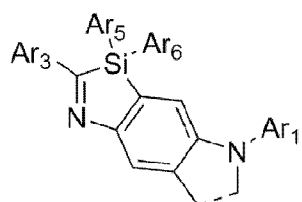
B-31



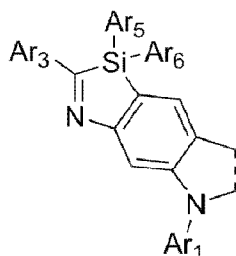
B-32



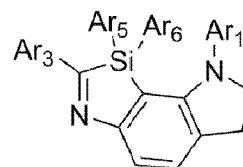
B-33



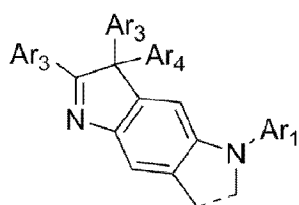
B-34



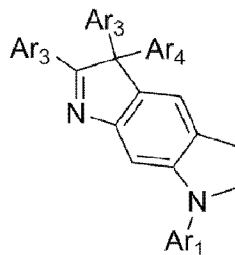
B-35



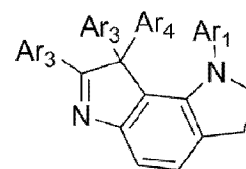
B-36



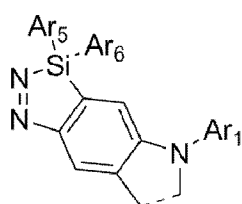
B-37



B-38



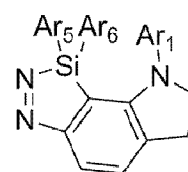
B-39



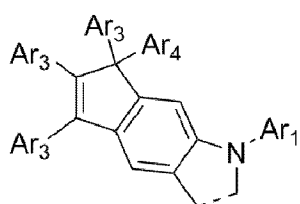
B-40



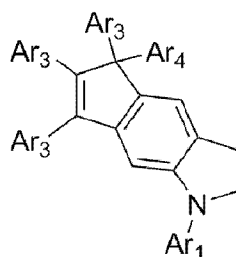
B-41



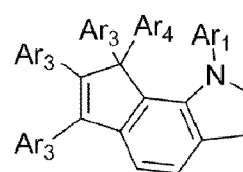
B-42



B-43

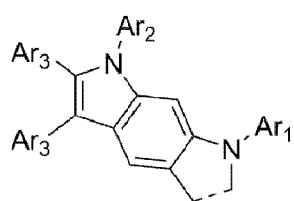


B-44

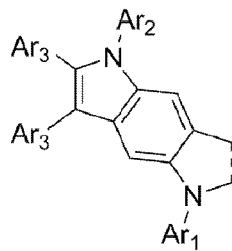


B-45

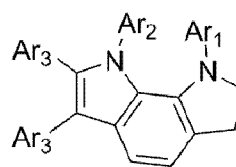
[64]



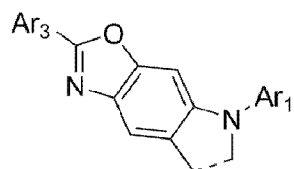
B-46



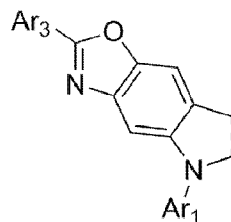
B-47



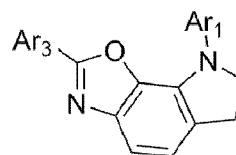
B-48



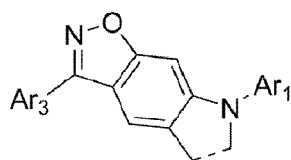
B-49



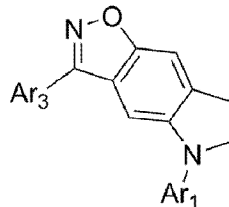
B-50



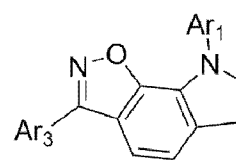
B-51



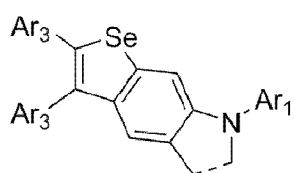
B-52



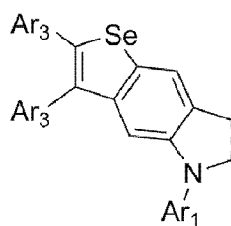
B-53



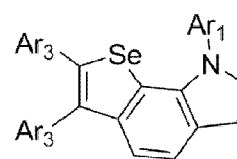
B-54



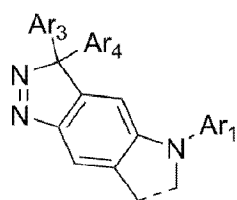
B-55



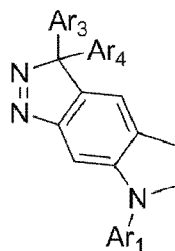
B-56



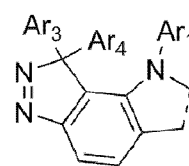
B-57



B-58

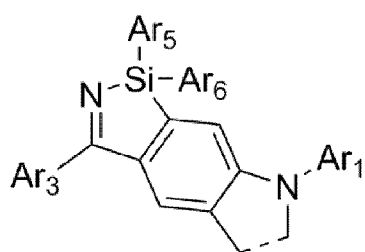


B-59

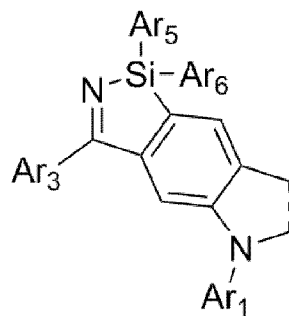


B-60

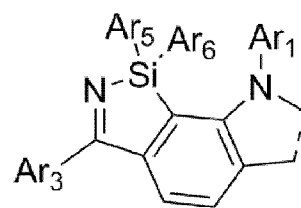
[65]



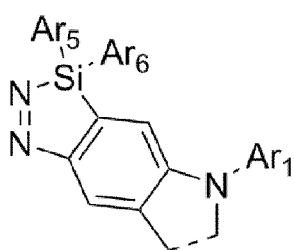
B-61



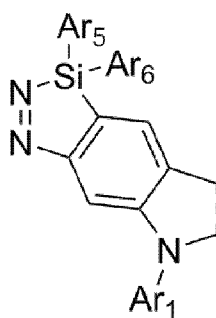
B-62



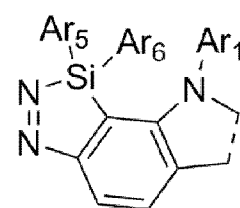
B-63



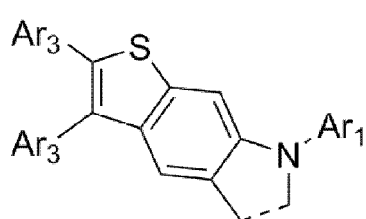
B-64



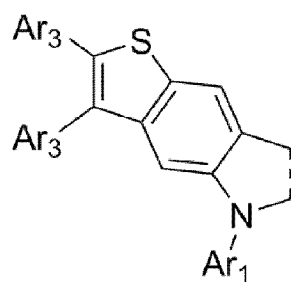
B-65



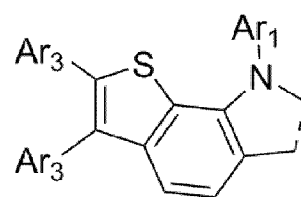
B-66



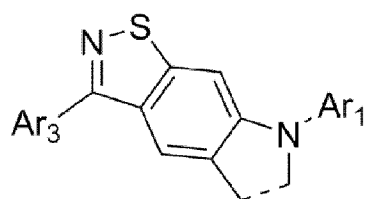
B-67



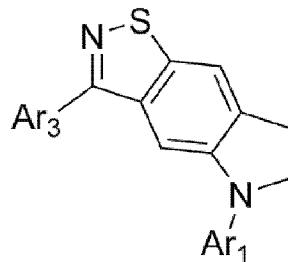
B-68



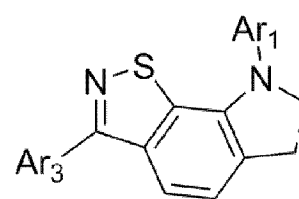
B-69



B-70



B-71

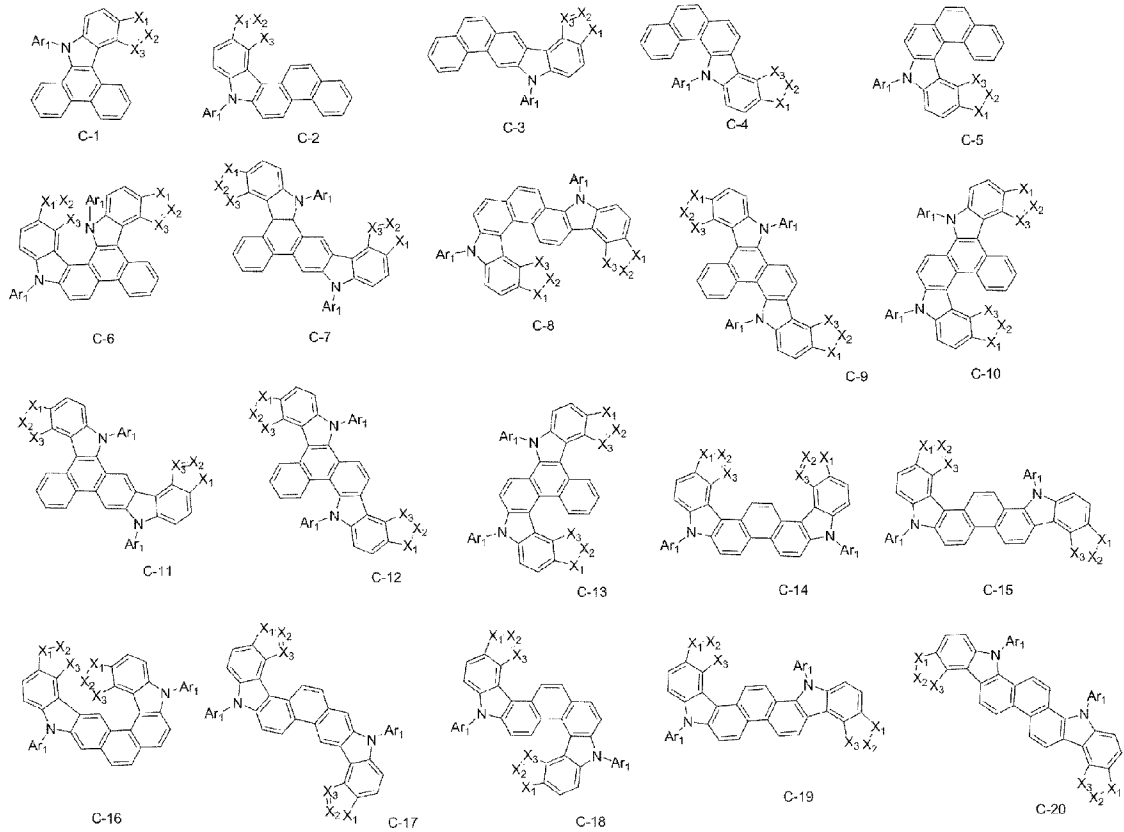


B-72

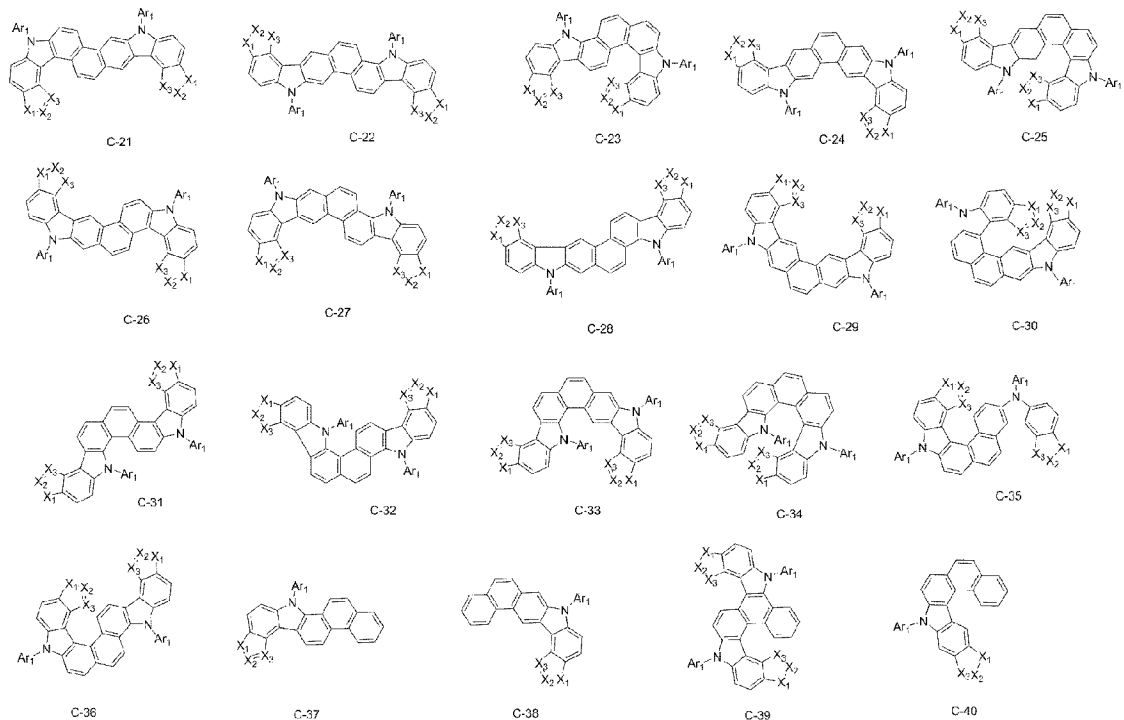
[66] 상기 화학식 B-1 내지 B-72에서,

- [67] Ar₁ 내지 Ar₆는 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.
- [68] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 하나 이상의 상기 화학식 2로 표시되는 화합물이 축합하여 형성된 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-40 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다.

[69]

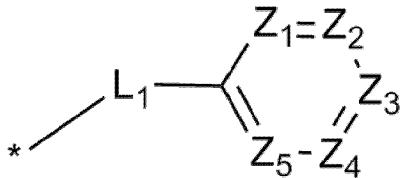


[70]



- [71] 상기 화학식 C-1 내지 C-40에서,

- [72] X_1 내지 X_3 및 Ar_1 는 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.
- [73] 이와 같이, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 갖는 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함함으로써, 에너지 준위가 높게 조절될 수 있는 인광 호스트 재료로서의 장점이 있다.
- [74] 본 발명의 바람직한 일례에 따르면, 상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 5로 표시되는 치환체일 수 있다.
- [75] [화학식5]



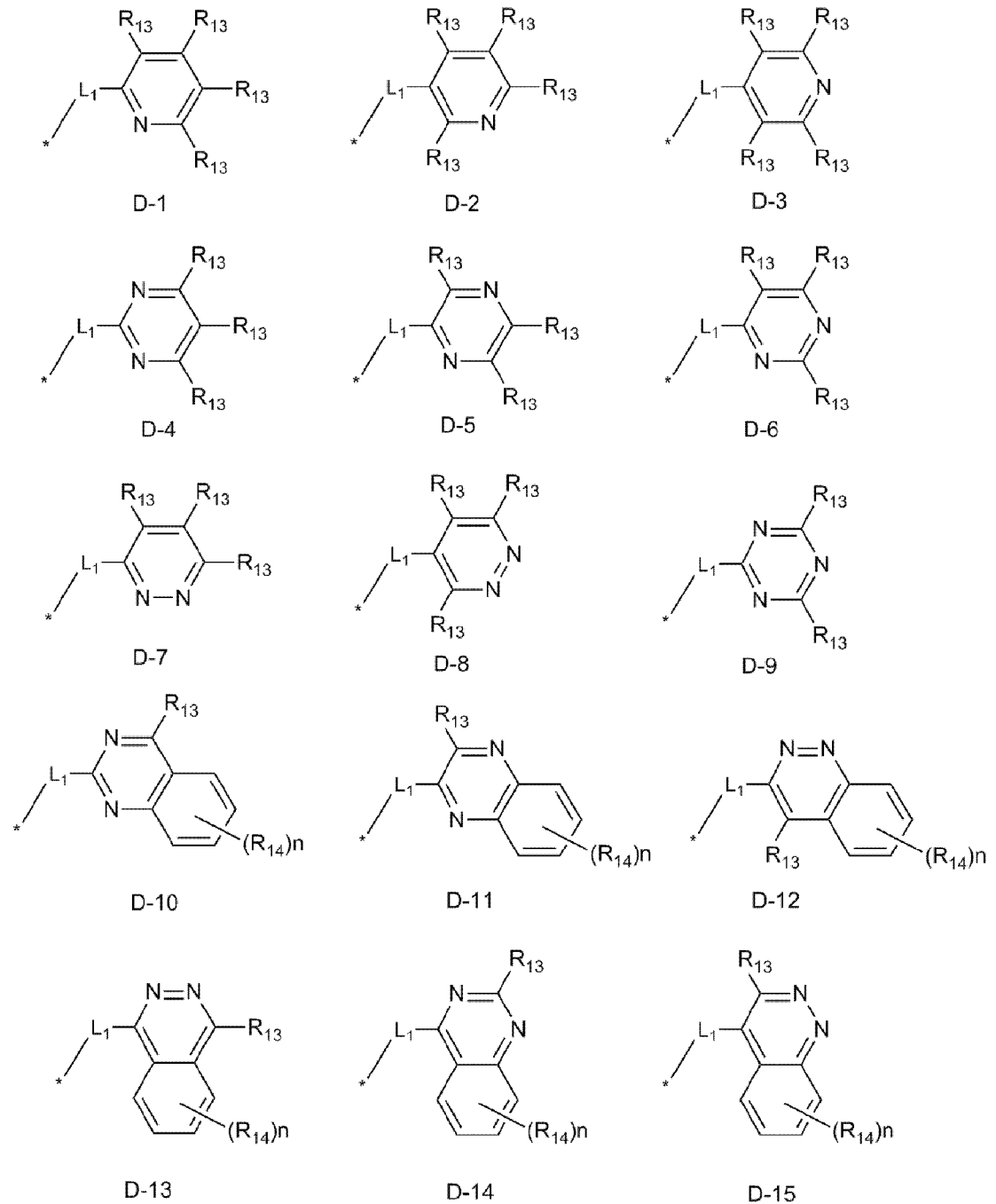
- [76] 상기 화학식 5에서, *는 상기 화학식 1 내지 3에 결합되는 부분을 의미한다.
- [77] L_1 은 단일결합이거나, 또는 $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [78] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{13})$ 이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 상기 R_{13} 가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [79] R_{13} 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{13} 은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.
- [80] 이때, 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_{13} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우,

이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

[81] 더욱 바람직하게는, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 상기 화학식 5로 표시되는 치환체일 수 있다.

[82] 상기 화학식 5로 표시되는 치환체는 하기 화학식 D-1 내지 D-15로 표시되는 치환체 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다.

[83]



[84] 상기 화학식 D-1 내지 D-15에서, L_1 및 R_{13} 은 각각 상기 화학식 5에서 정의한 바와 같다.

[85] n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{13} 로 치환되지

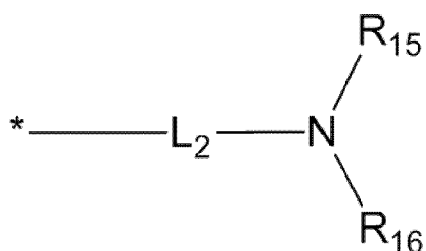
않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{13} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{13} 이 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

- [86] R_{14} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{14} 은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하다.

- [87] 이때, 상기 R_{14} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

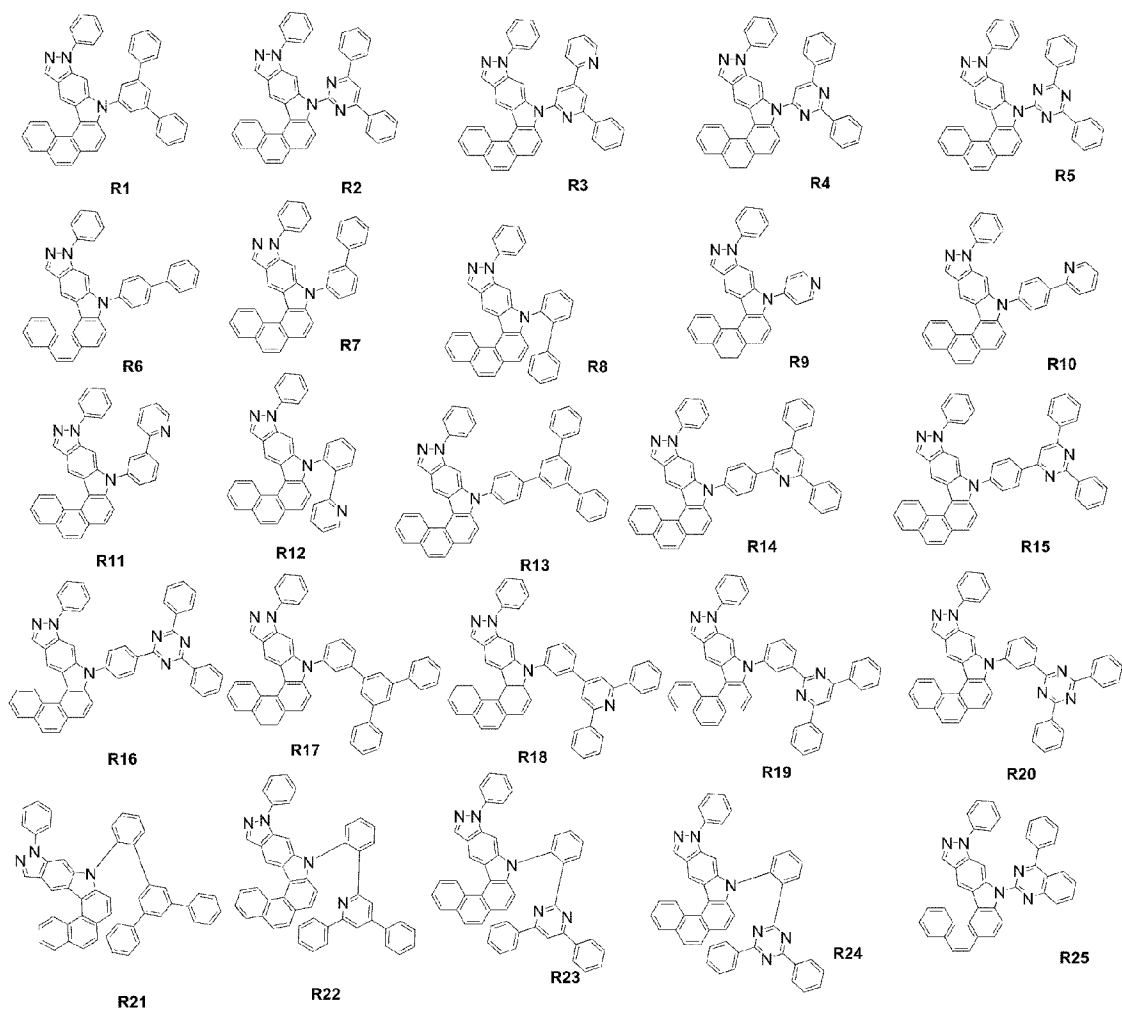
- [88] 또한, 본 발명의 바람직한 일례에 따르면, 상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 6으로 표시되는 치환체일 수 있다.

- [89] [화학식6]

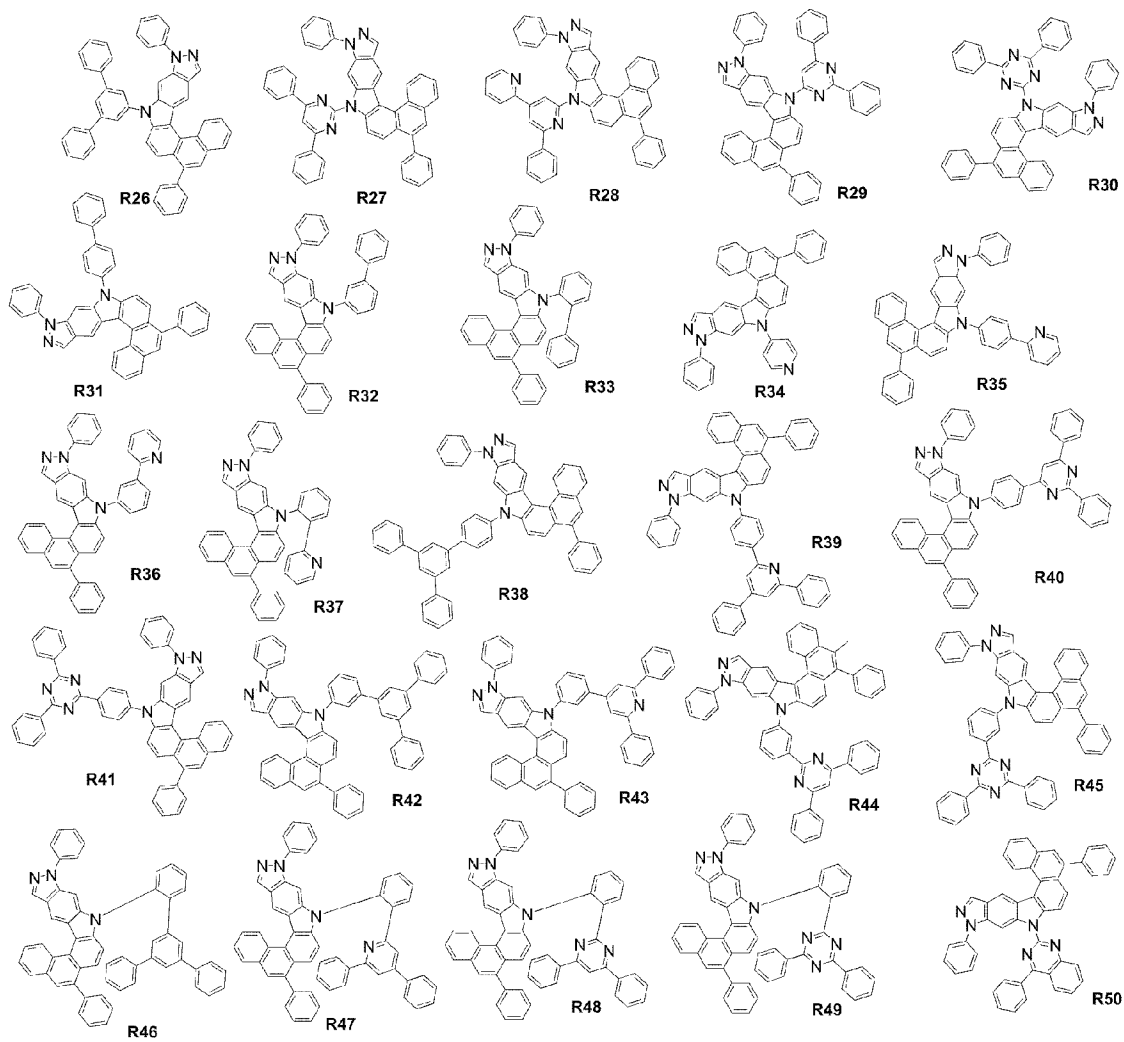


- [90] 상기 화학식 6에서, *는 상기 화학식 1 내지 3에 결합되는 부분을 의미한다.
- [91] L_2 은 단일결합이거나, 또는 $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [92] R_{15} 및 R_{16} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 R_{15} 및 R_{16} 가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.
- [93] 이때, 상기 L_2 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_{15} 및 R_{16} 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.
- [94] 더욱 바람직하게는, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 상기 화학식 6으로 표시되는 치환체일 수 있다.
- [95]
- [96] 이상에서 설명한 본 발명의 화합물은 하기 예시되는 화학식 R1 내지 R325 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.

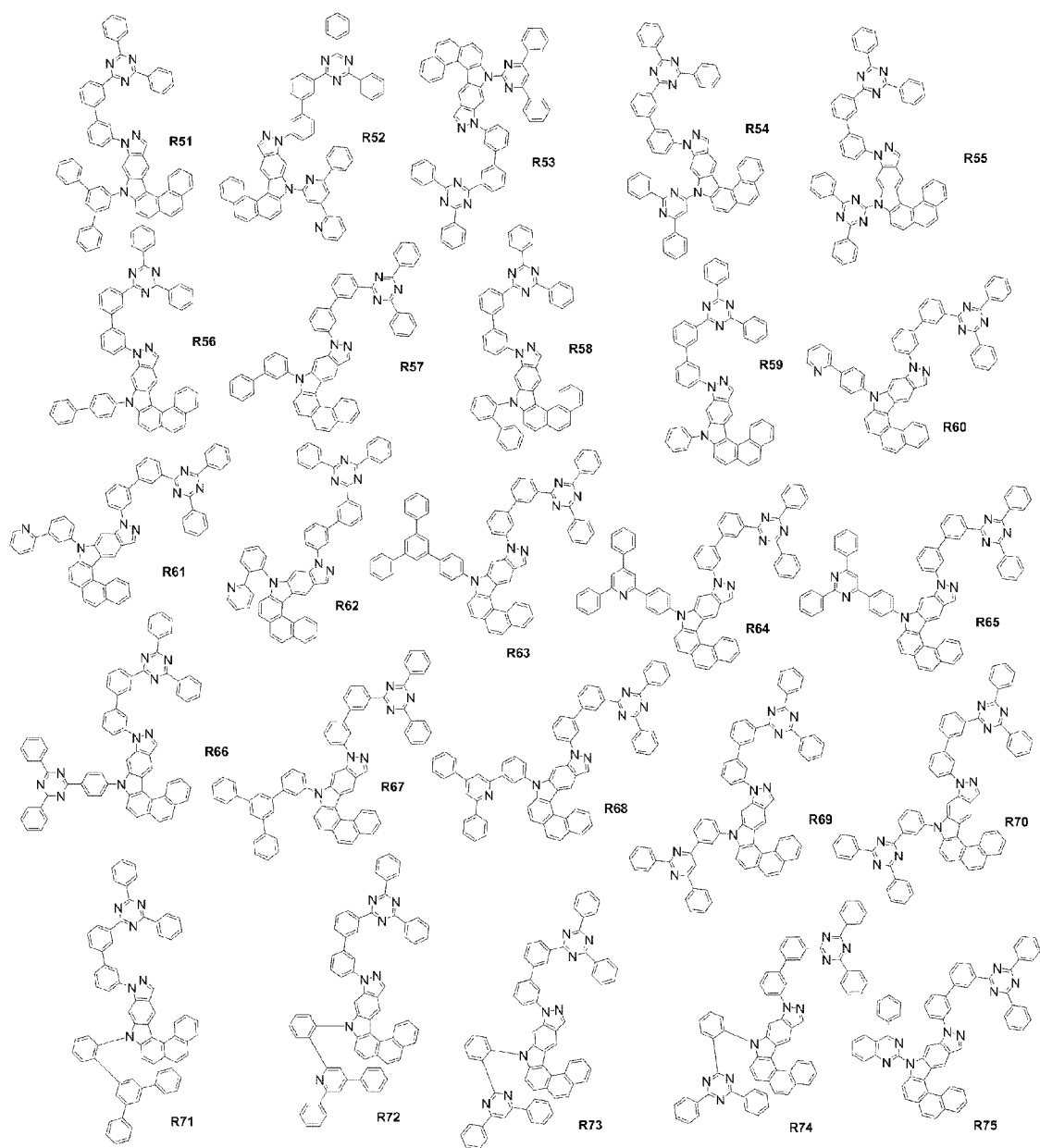
[97]



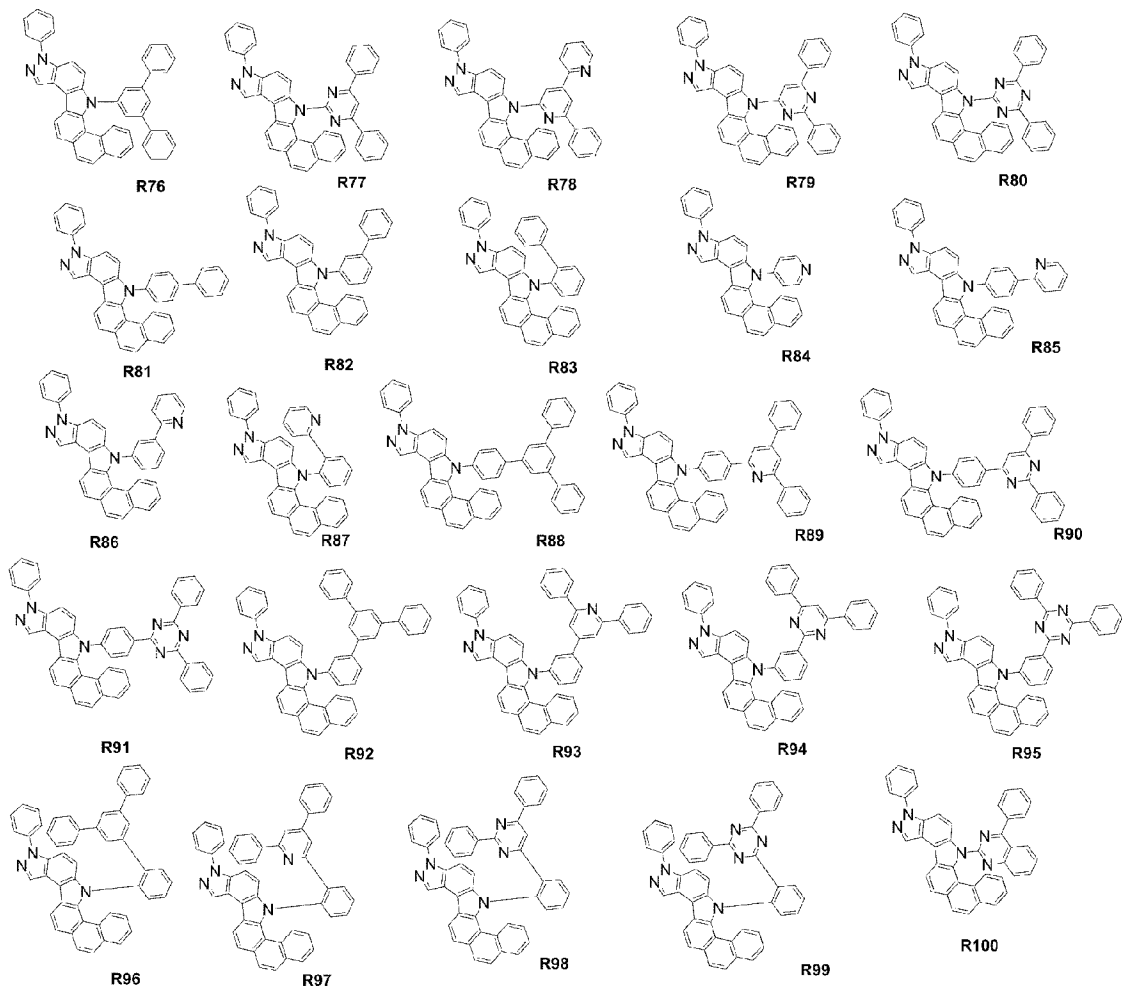
[98]



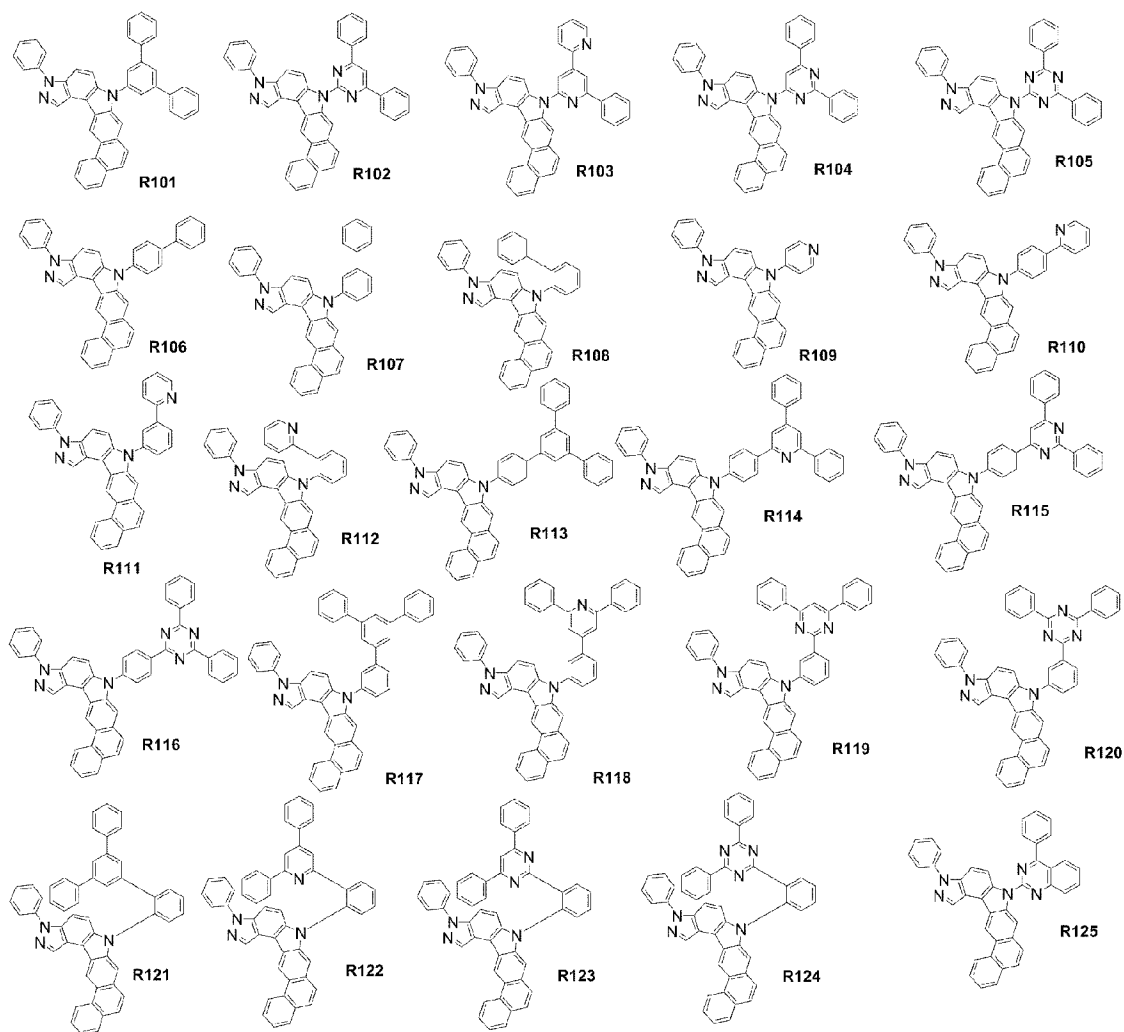
[99]



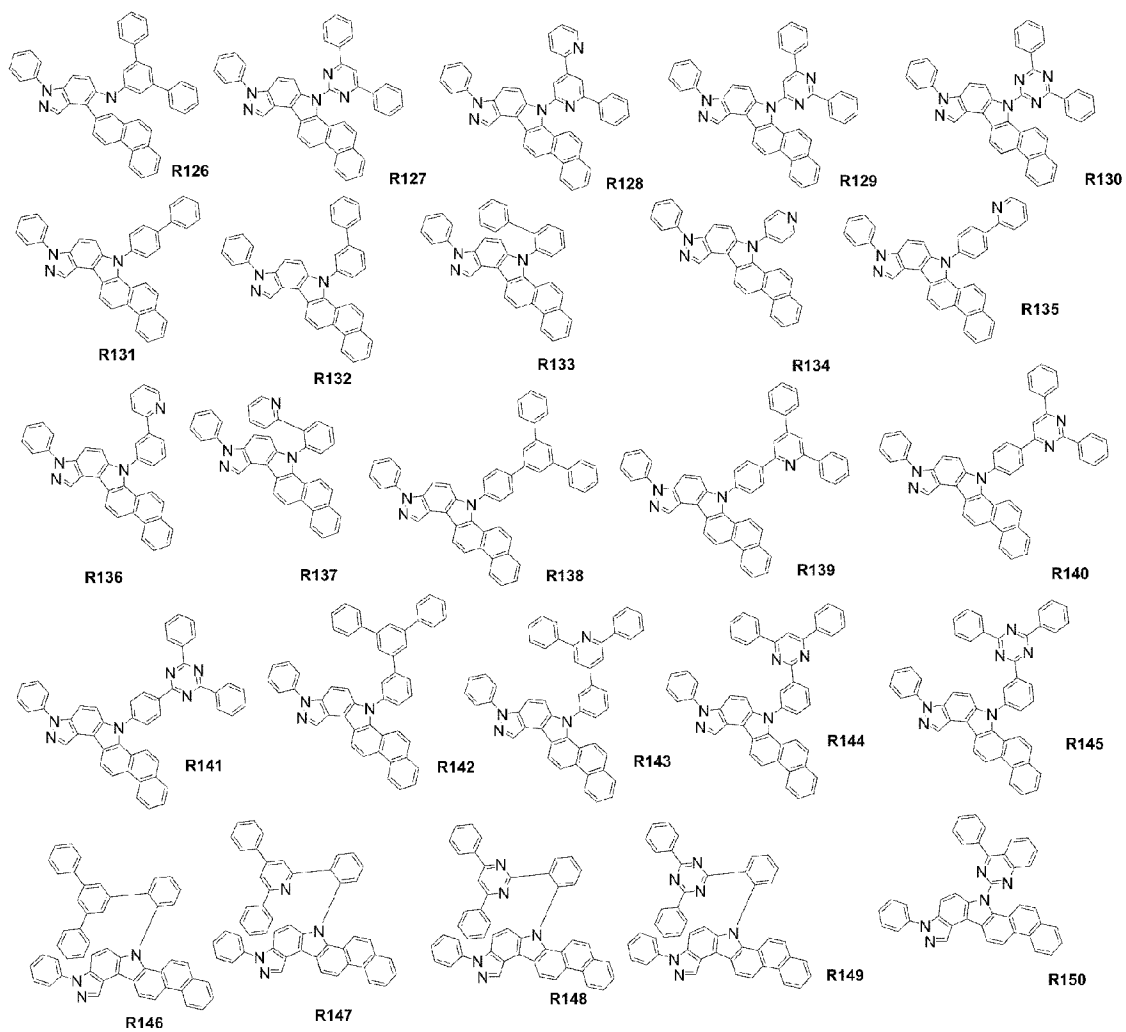
[100]



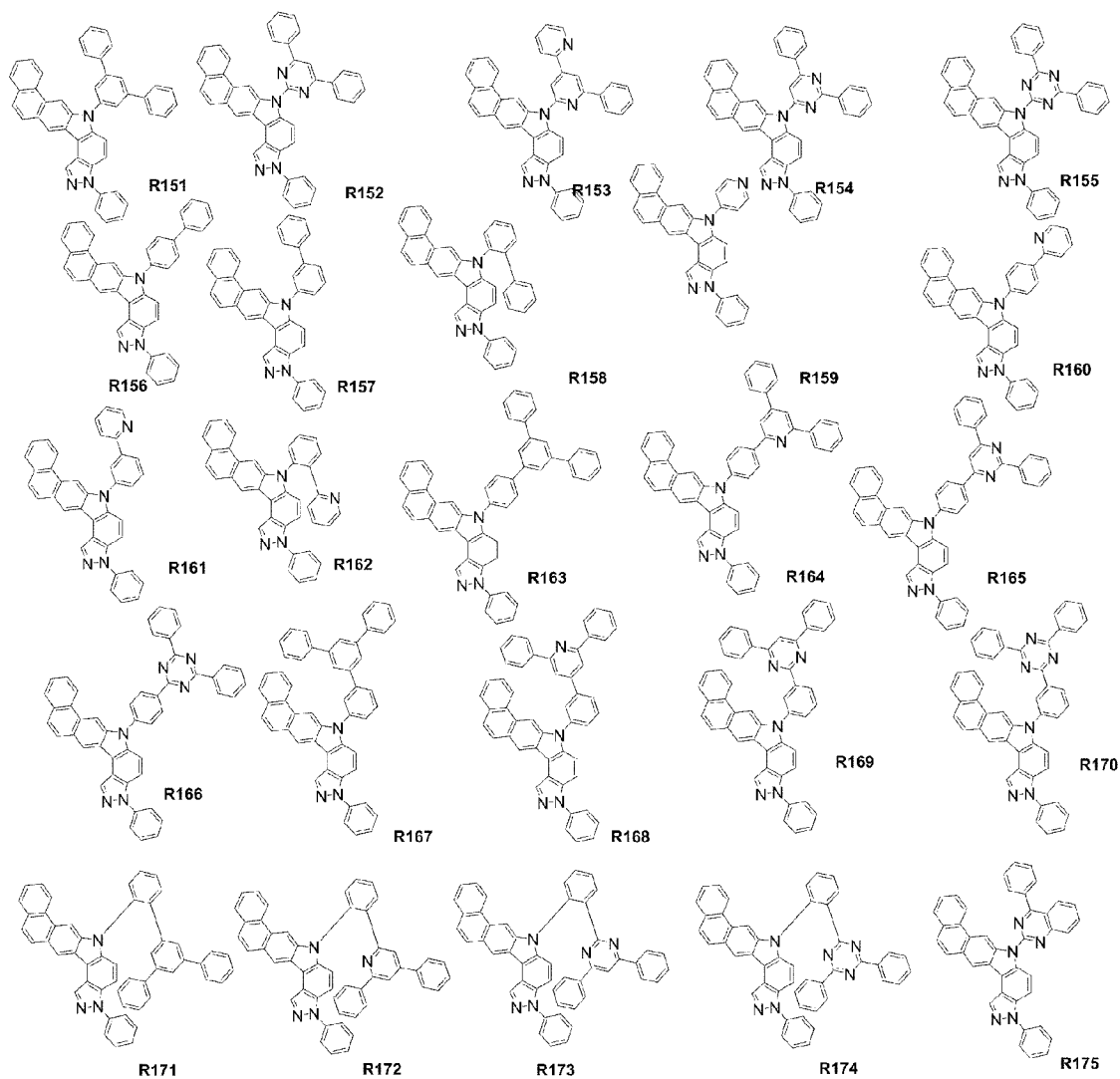
[101]



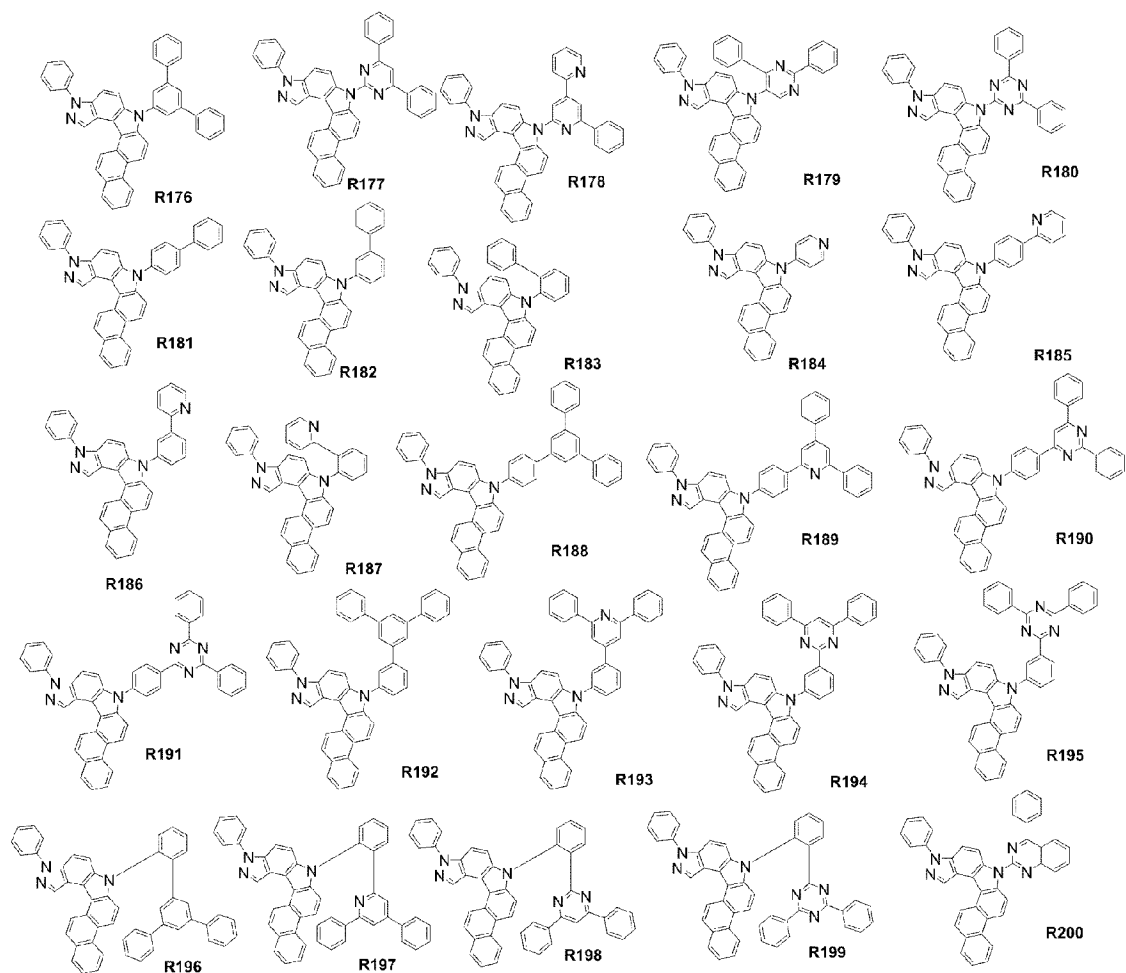
[102]



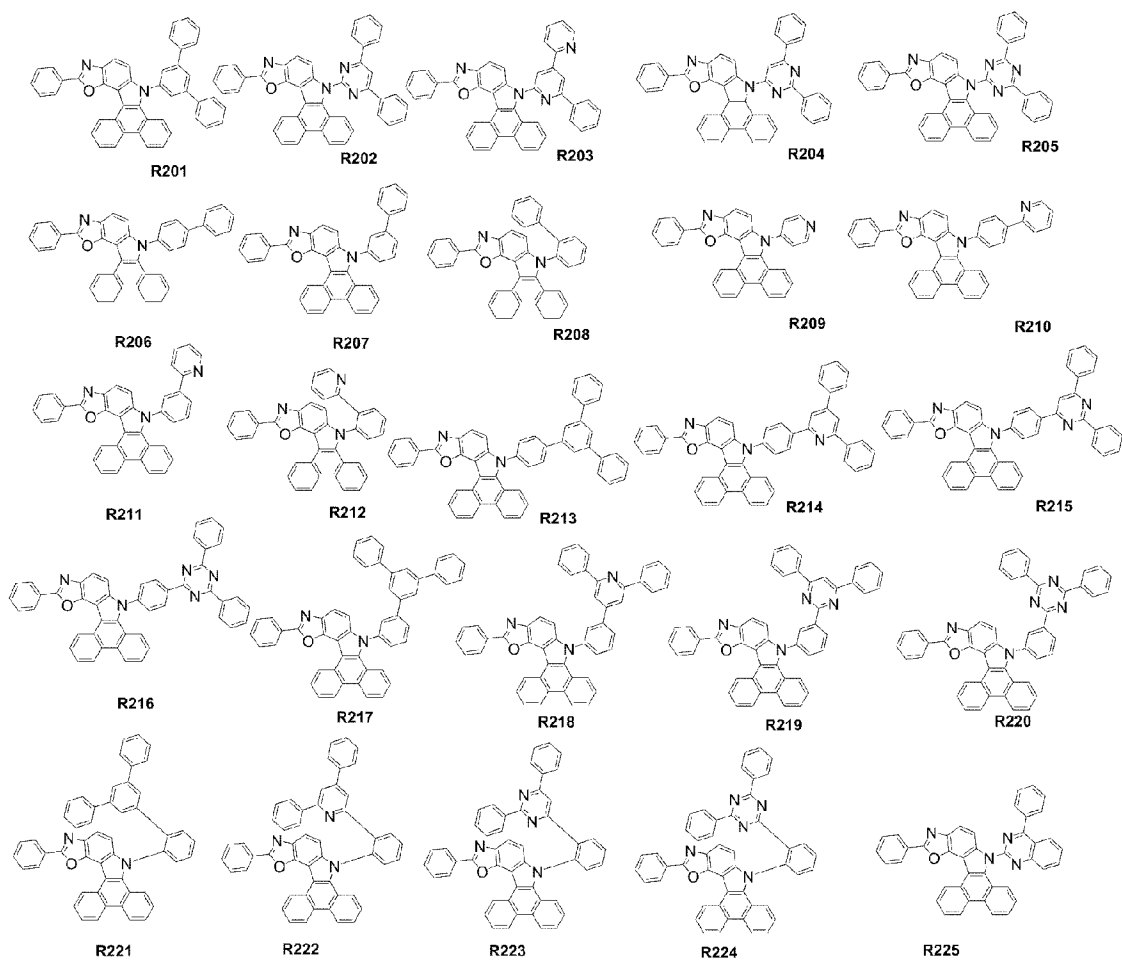
[103]



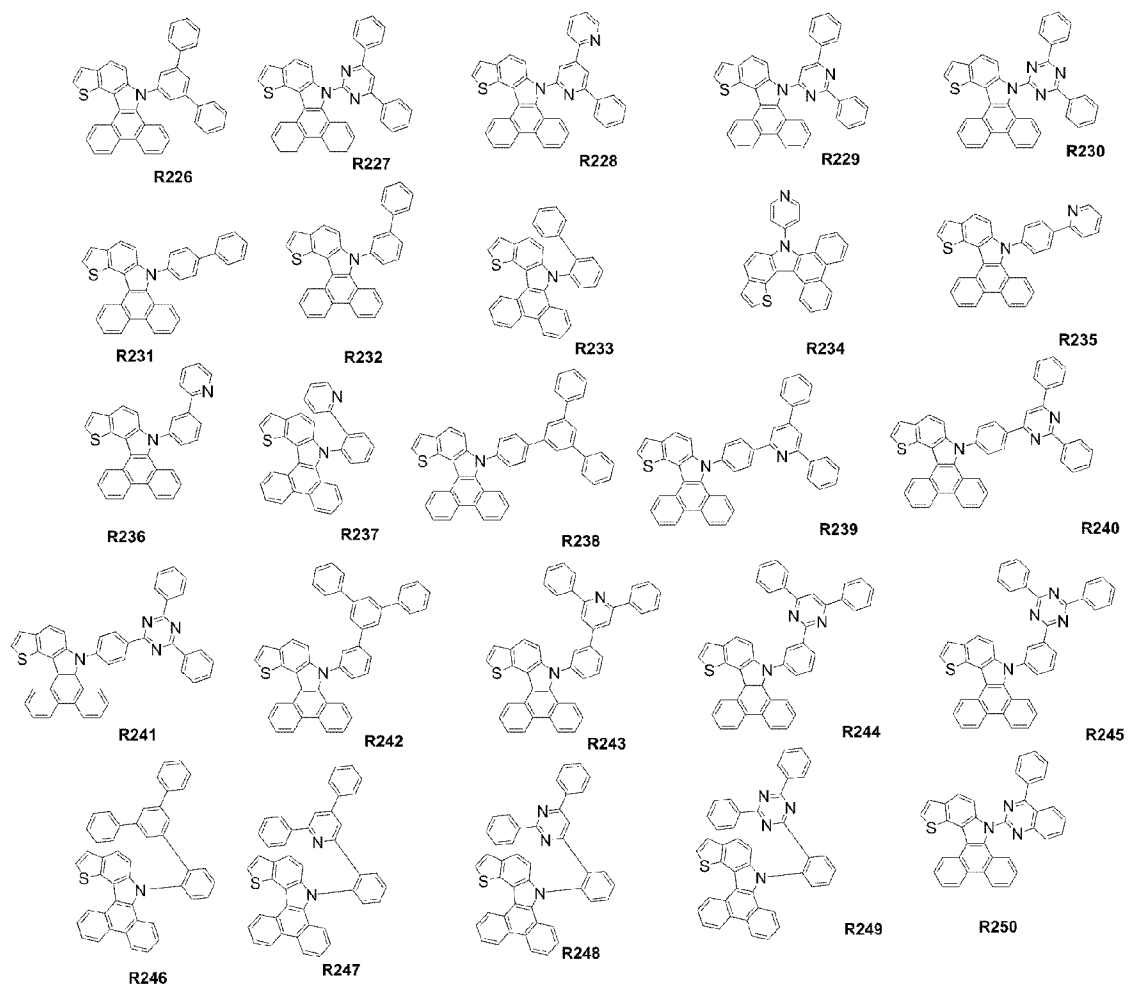
[104]



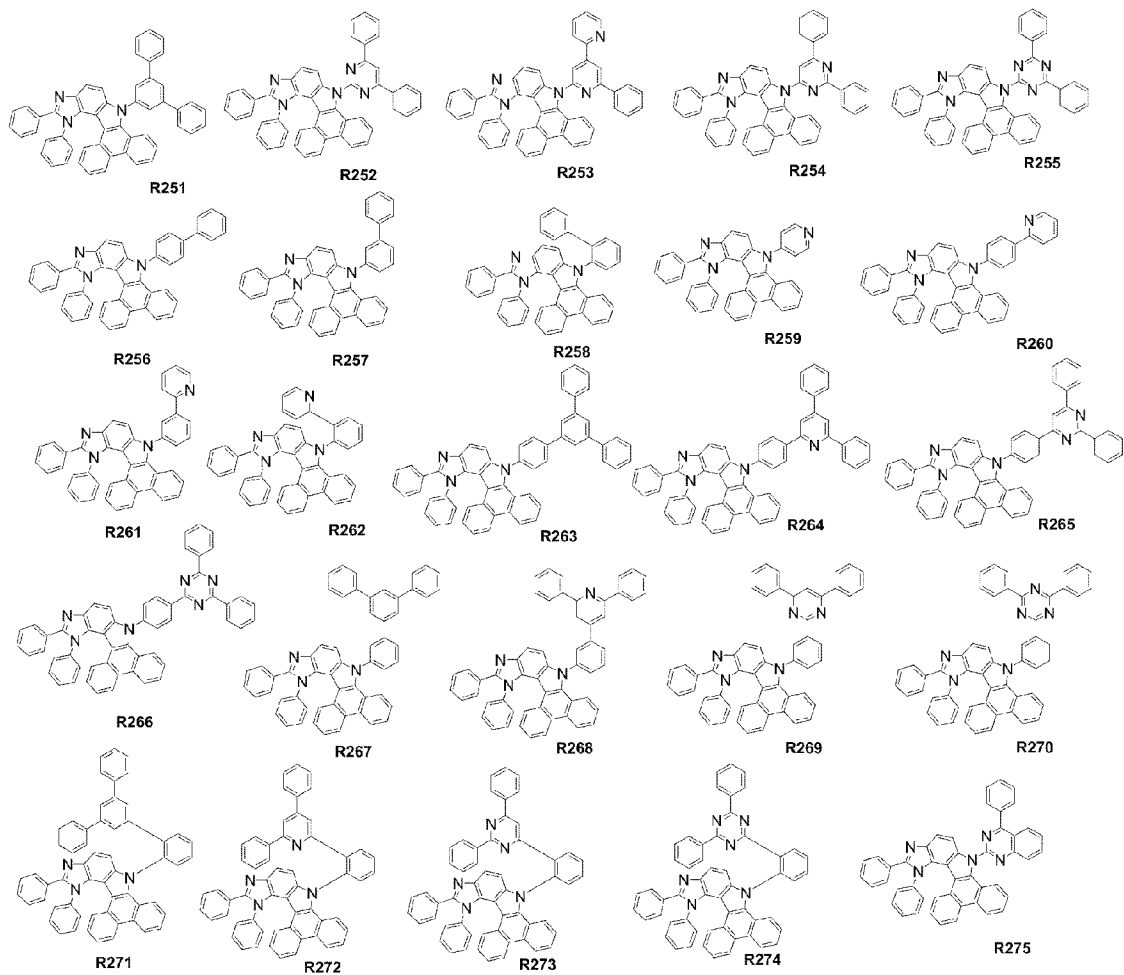
[105]



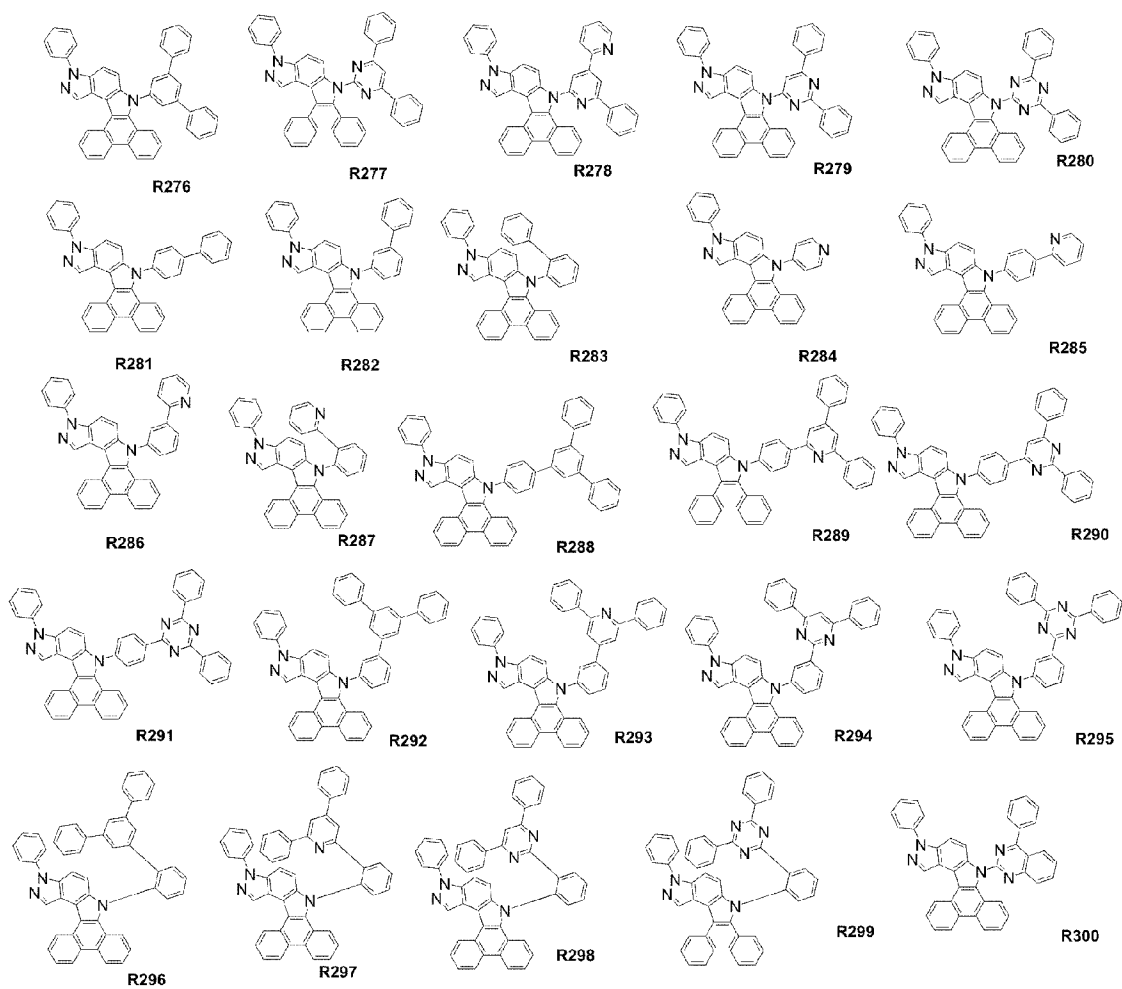
[106]



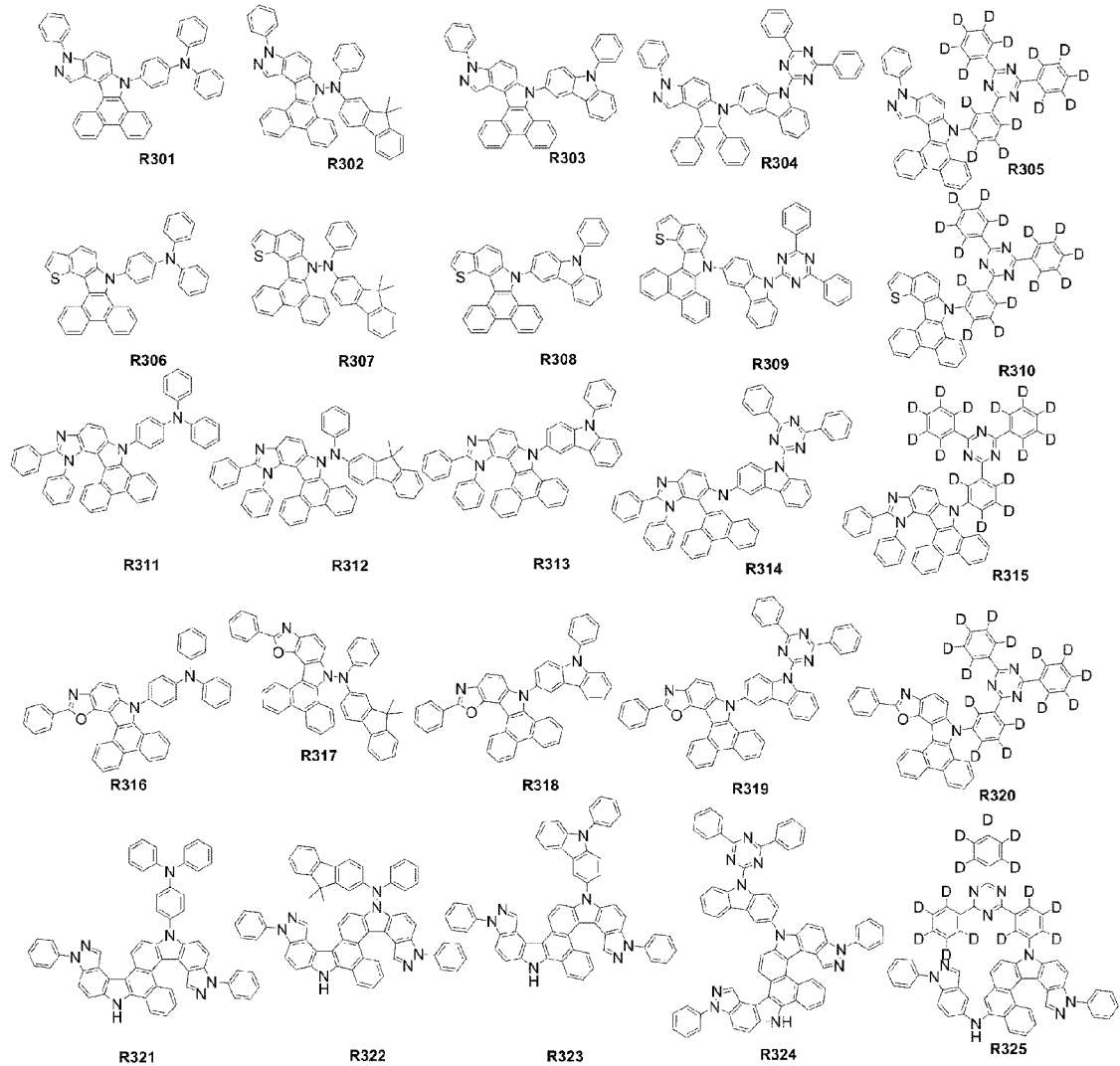
[107]



[108]



[109]



[110] 본 발명에서 “알킬”은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 알킬의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[111] 본 발명에서 “알케닐(alkenyl)”은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 알케닐의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[112] 본 발명에서 “알키닐(alkynyl)”은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 알키닐의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[113] 본 발명에서 “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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [114] 본 발명에서 “헤테로아릴”은 핵원자수 5 내지 60의 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, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [115] 본 발명에서 “아릴옥시”는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [116] 본 발명에서 “알킬옥시”는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미한다. 이러한 알킬옥시는 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있고, 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [117] 본 발명에서 “아릴아민”은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [118] 본 발명에서 “시클로알킬”은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [119] 본 발명에서 “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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [120] 본 발명에서 “알킬실릴”은 탄소수 3 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, “아릴실릴”은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [121] 본 발명에서 “축합고리”는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를

의미한다.

[122]

[123] 이와 같은 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 실시예의 합성과정을 참고하여 다양하게 합성할 수 있다.

[124]

[125] **2. 유기 전계 발광 소자**

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

[127]

보다 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.

[128]

상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층, 정공 수송층인 것이 바람직하다.

[129]

본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료(바람직하게는, 인광 호스트 재료)를 포함할 수 있는데, 이때, 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[130]

이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 비제한적인 예로 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 정공 수송층, 전자 저지층, 발광 보조층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있다. 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[131]

한편, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[132]

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

[133]

본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조시 사용되는 기판은 특별히 한정되지

않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.

[134] 또한, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[135] 또한, 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 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

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

[137]

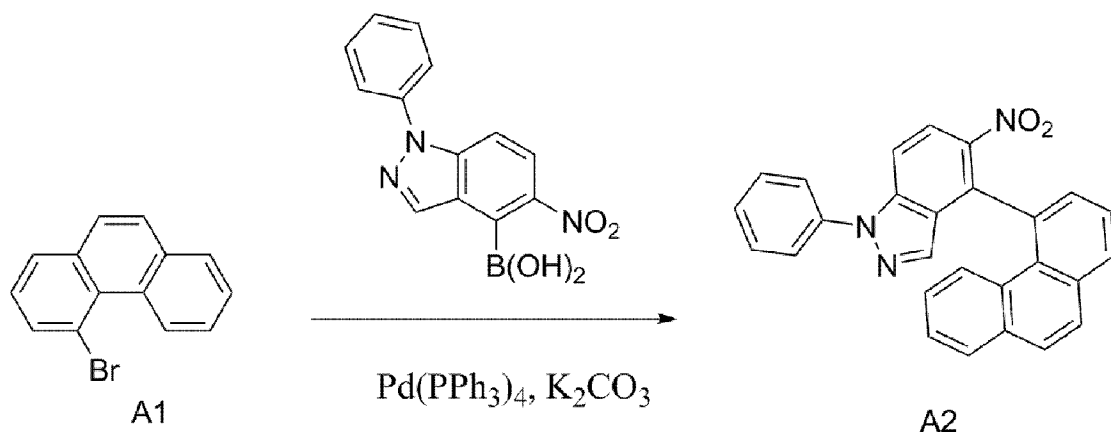
[138] 이하, 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[139]

[140] [준비에 1] A3의 합성

[141] <단계 1> A2의 합성

[142]



[143] 질소 기류 하에서 A1 2.8g (10.8 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 3.0g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄ 및 potassium carbonate 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[144] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A2 (3.6g, 4.5 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

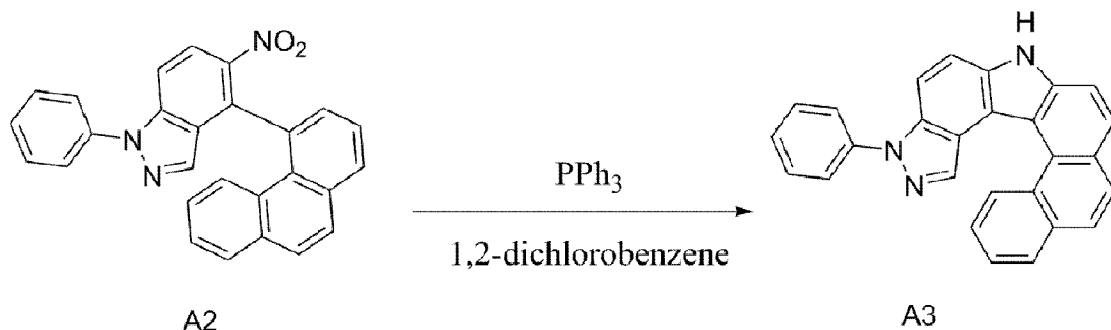
[145] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[146] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.61(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.82~7.87(m, 3H), 8.05~8.11(m, 3H), 8.31(s, 1H), 8.35(s, 1H), 8.55(s, 1H), 8.90(s, 1H)

[147]

[148] <단계 2> A3의 합성

[149]



[150] 질소 기류 하에서 A2 3.6g (8.7 mmol)과 triphenylphosphine 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A3 (2.5g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[151] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

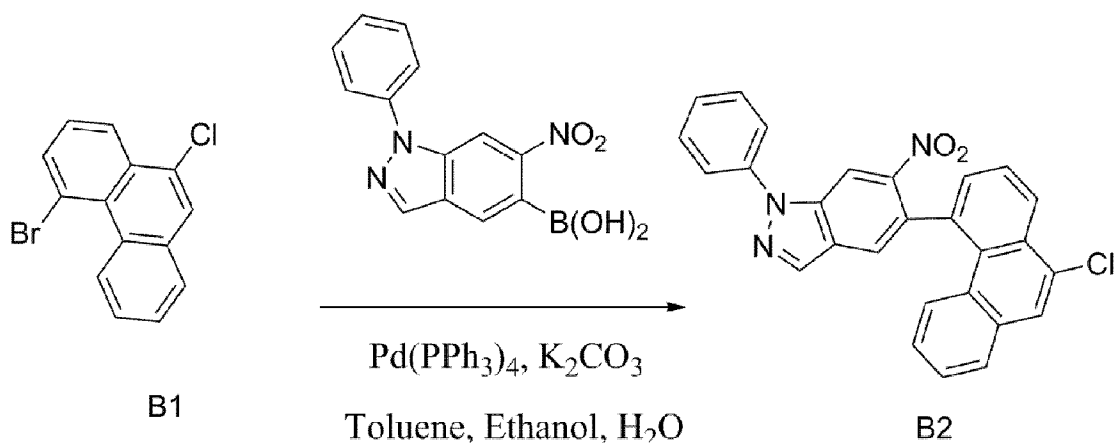
[152] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.69(d, 2H), 7.82~7.86(m, 3H), 8.04~8.11(m, 2H), 8.31(s, 1H), 8.35(s, 1H), 8.55(s, 1H), 8.90(s, 1H), 10.1(s, 1H)

[153]

[154] [준비예 2] B4의 합성

[155] <단계 1> B2의 합성

[156]



[157] 질소 기류 하에서 B1 2.0g (6.9 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 2.0g (6.9 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 2.9g (20.7 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안

교반하였다.

[158] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B2 (2.5g, 5.6 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

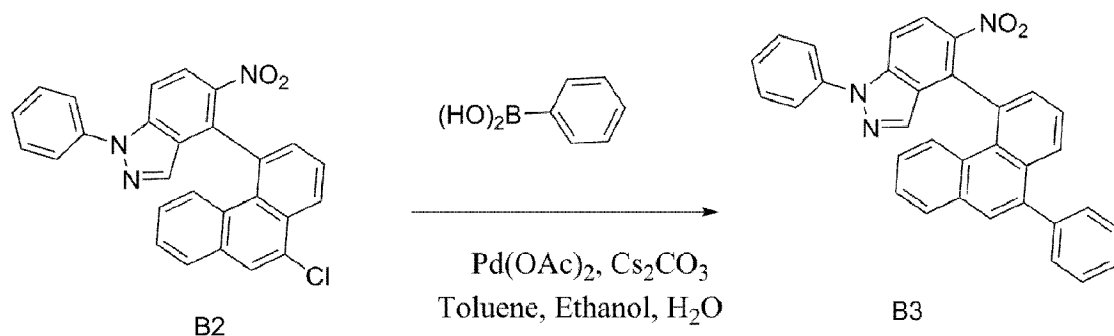
[159] GC-Mass (이론치: 449.89g/mol, 측정치: 449g/mol)

[160] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.70(s, 1H), 7.82~7.87(m, 3H), 8.05~8.09(m, 3H), 8.31(s, 1H), 8.34(s, 1H), 8.54(s, 1H), 8.88(s, 1H)

[161]

[162] <단계 2> B3의 합성

[163]



[164] 질소 기류 하에서 B2 2.5g (5.6 mmol), Phenylboronic acid 0.7g (5.6 mmol), 0.1g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$, XPhos 0.3g (0.6 mmol), cesium carbonate 5.5g (16.7 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 5시간 동안 교반하였다.

[165] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B3 (2.2g, 4.5 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[166] GC-Mass (이론치: 491.54g/mol, 측정치: 491/mol)

[167] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.43~7.62(m, 10H), 7.70(s, 1H), 7.82~7.87(m, 3H), 8.05~8.09(m, 3H), 8.31(s, 1H), 8.34(s, 1H), 8.54(s, 1H), 8.88(s, 1H)

[168]

[169] <단계 3> B4의 합성

[170]



[171] 질소 기류 하에서 B3 2.2g (4.5 mmol)과 triphenylphosphine 3.0g (11.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 20 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후

1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B4 (1.6g, 3.5 mmol, 수율 78%)을 얻었다.

[172] GC-Mass (이론치: 459.54g/mol, 측정치: 459g/mol)

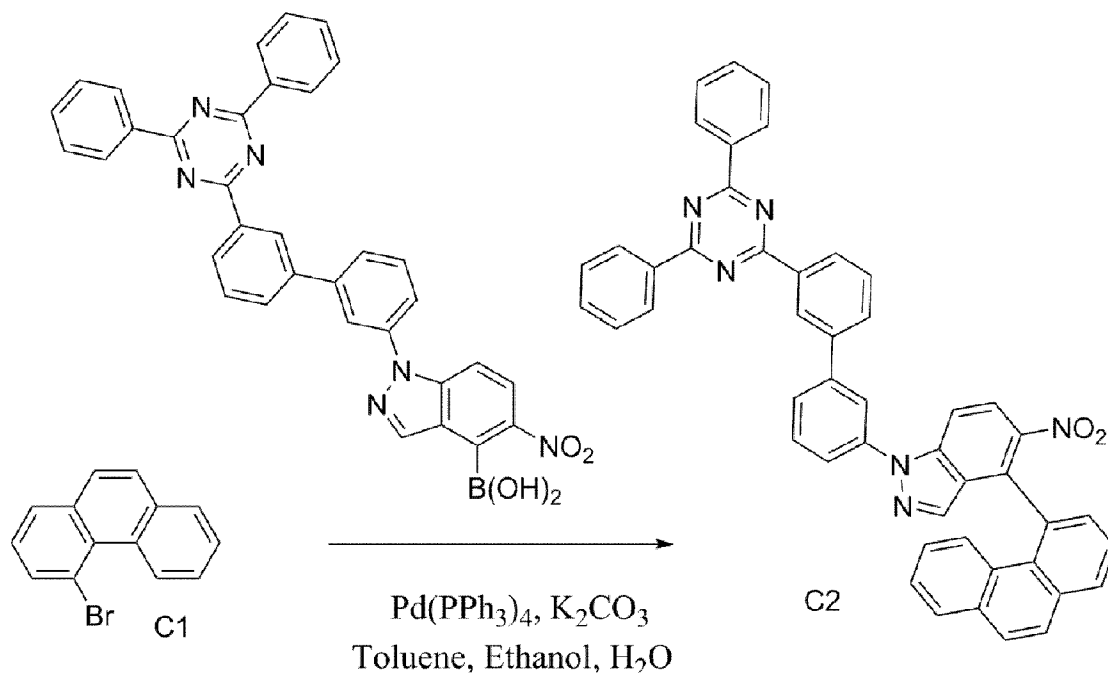
[173] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.44~7.62(m, 10H), 7.70(s, 1H), 7.82~7.86(m, 3H), 8.05~8.07(d, 2H), 8.31(s, 1H), 8.33(s, 1H), 8.53(s, 1H), 8.87(s, 1H), 10.0(s, 1H)

[174]

[175] [준비예 3] C3의 합성

[176] <단계 1> C2의 합성

[177]



[178] 질소 기름 하에서 C1 2.0g (7.7 mmol),

1-(3'-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)biphenyl-3-yl)-5-nitro-1H-indazol-4-ylboronic acid 4.6g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol을 넣고 110°C 에서 4시간 동안 교반하였다.

[179] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C2 (4.4g, 6.1mmol, 수율 79%)을 얻었다.

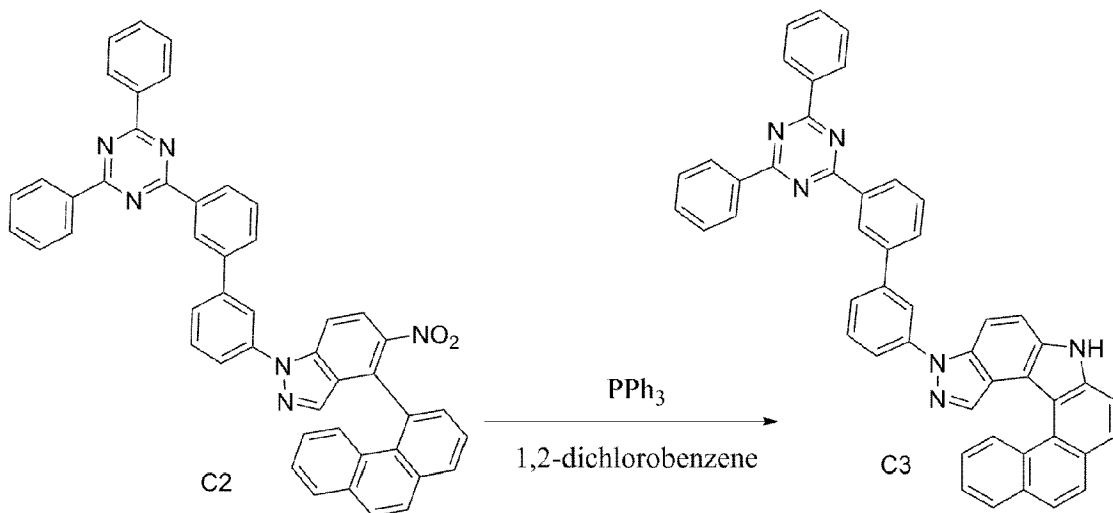
[180] GC-Mass (이론치: 772.79g/mol, 측정치: 772g/mol)

[181] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.41~7.58(m, 13H), 7.71(d, 2H), 7.82~7.87(m, 3H), 8.10(d, 2H), 8.12(d, 1H), 8.08(s, 1H), 8.24(d, 1H), 8.27~8.28(m, 4H), 8.37(s, 1H), 8.58(s, 1H), 8.92(d, 1H)

[182]

[183] <단계 2> C3의 합성

[184]



[185] 질소 기류 하에서 C2 4.4g (6.1 mmol)과 triphenylphosphine 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C3 (3.2g, 4.6 mmol, 수율 76%)을 얻었다.

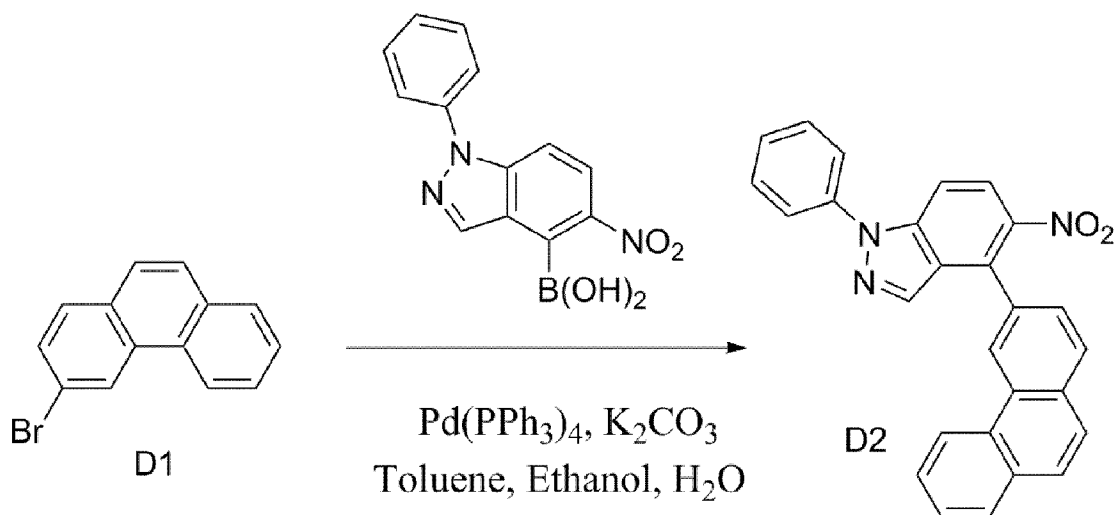
[186] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[187] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.41~7.57(m, 13H), 7.71(d, 2H), 7.82~7.86(m, 3H), 8.09(d, 2H), 8.08(s, 1H), 8.24(d, 1H), 8.27~8.28(m, 4H), 8.36(s, 1H), 8.58(s, 1H), 8.92(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[188]

[189] **[준비예 4] D3, D4의 합성**[190] <단계 1> D2의 합성

[191]



[192] 질소 기류 하에서 D1 2.8g (10.8 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 3.0g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 4.5g (32.3

mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[193] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D2 (3.6g, 4.5 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

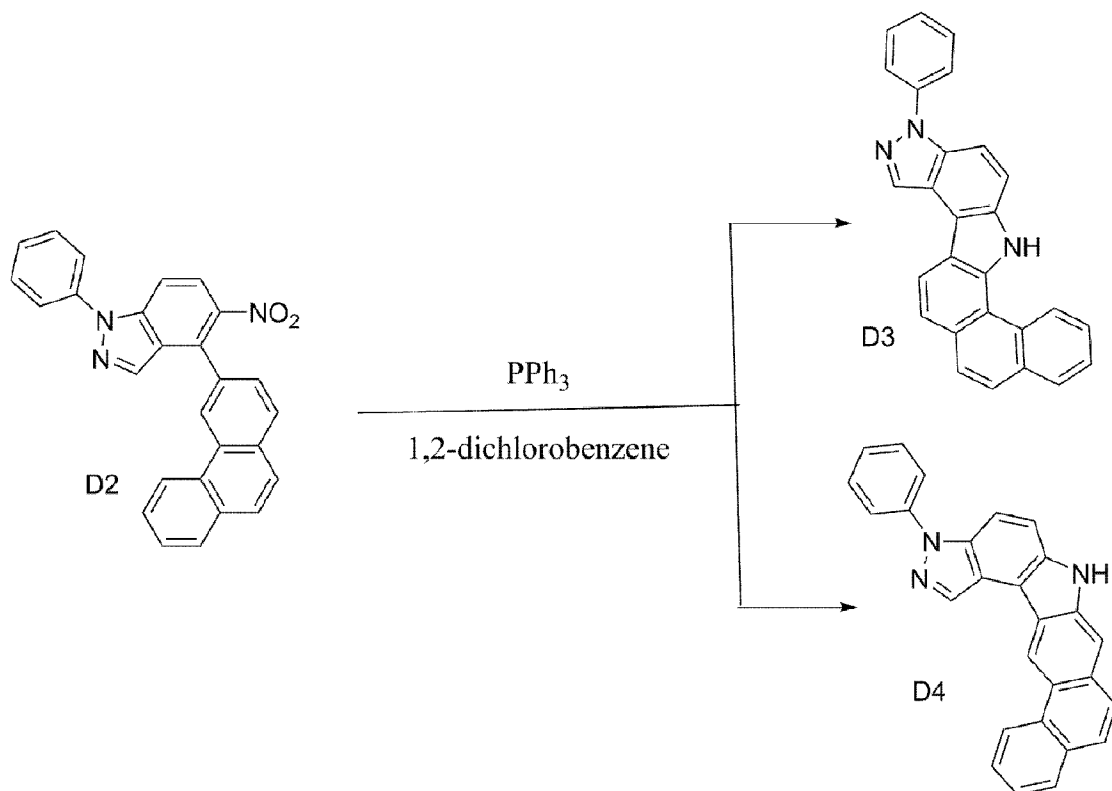
[194] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[195] ¹H-NMR: δ 7.45~7.61(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.82~7.86(d, 2H), 8.05(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.32(s, 1H), 8.38(d, 1H), 8.54(d, 1H), 8.90(d, 1H), 9.15(s, 1H)

[196]

[197] <단계 2> D3, D4의 합성

[198]



[199] 질소 기류 하에서 D2 3.6g (8.7 mmol)과 triphenylphosphine 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D3 (1.1g, 2.8 mmol, 수율 32%)를 얻었다.

[200] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

[201] ¹H-NMR: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.82~7.85(d, 2H), 8.05(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.31(s, 1H), 8.38(d, 1H), 8.54(d, 1H), 8.91(d, 1H), 10.0(s, 1H)

[202] 또한, 상기와 동일한 방법으로 목적 화합물인 D4 (1.1g, 2.8 mmol, 수율 32%)를 얻었다.

[203] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

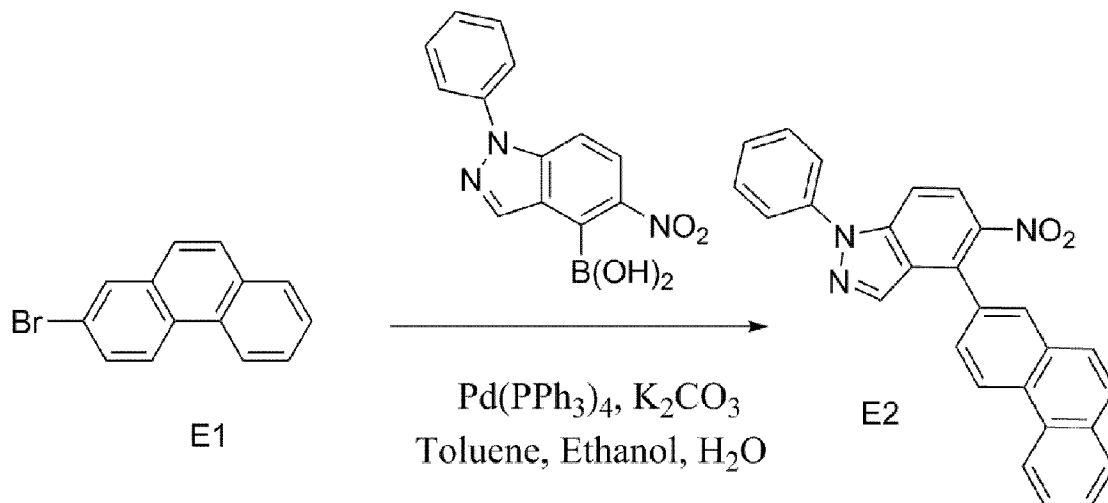
[204] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.48~7.62(m, 5H), 7.71(d, 2H), 7.84~7.86(d, 2H), 8.15(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.32(s, 1H), 8.34(d, 1H), 8.54(d, 1H), 8.90(d, 1H), 9.02(s, 1H), 10.0(s, 1H)

[205]

[206] [준비예 5] E3, E4의 합성

[207] <단계 1> E2의 합성

[208]



[209] 질소 기류 하에서 E1 2.0g (7.7 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 2.2g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[210] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E2 (2.5g, 6.1 mmol, 수율 79%)을 얻었다.

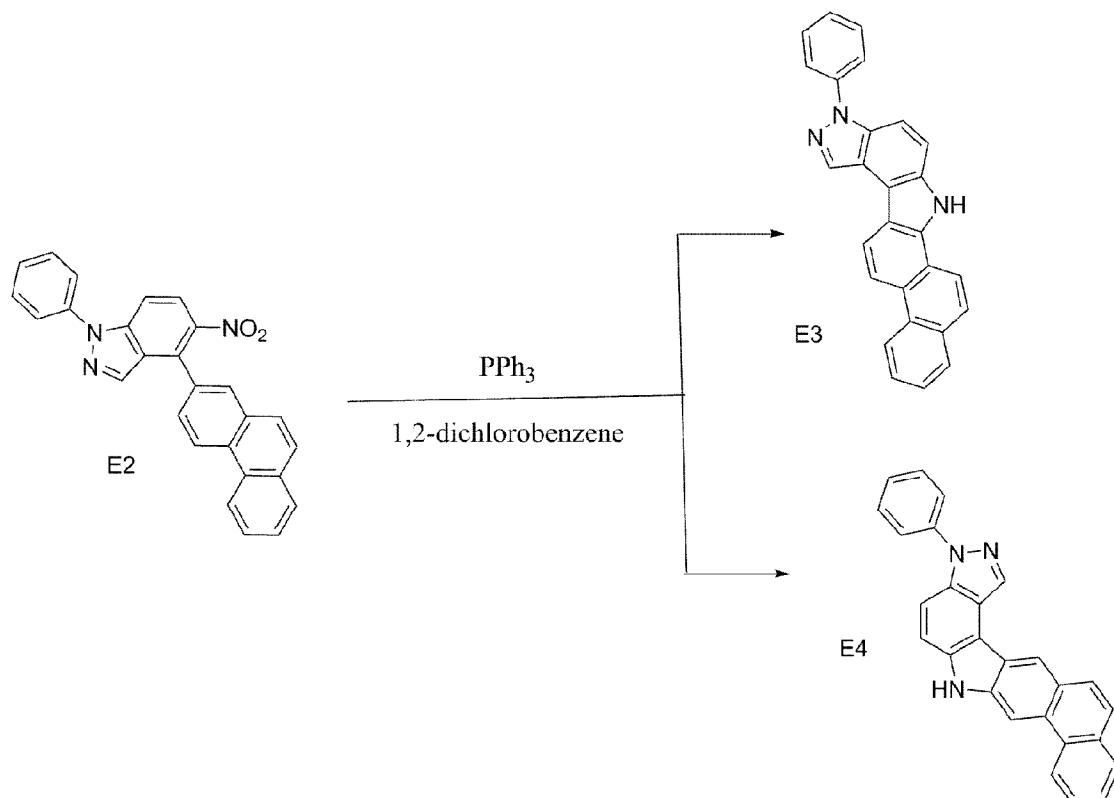
[211] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[212] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.61(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.84~7.86(m, 2H), 8.10(d, 1H), 8.12(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.32(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.54(d, 1H), 8.91(d, 1H), 8.95(d, 1H)

[213]

[214] <단계 2> E3, E4의 합성

[215]



[216] 질소 기류 하에서 E2 2.5g (6.1 mmol)과 triphenylphosphine 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 30 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E3 (0.7g, 1.8 mmol, 수율 29%)를 얻었다.

[217] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

[218] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.71(d, 2H), 7.84~7.85(m, 2H), 8.10(d, 1H), 8.11(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.32(d, 1H), 8.54(d, 1H), 8.91(d, 1H), 8.95(d, 1H), 10.0(s, 1H)

[219] 또한, 상기와 동일한 방법으로 목적 화합물인 E4 (0.7g, 1.8 mmol, 수율 29%)을 얻었다.

[220] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

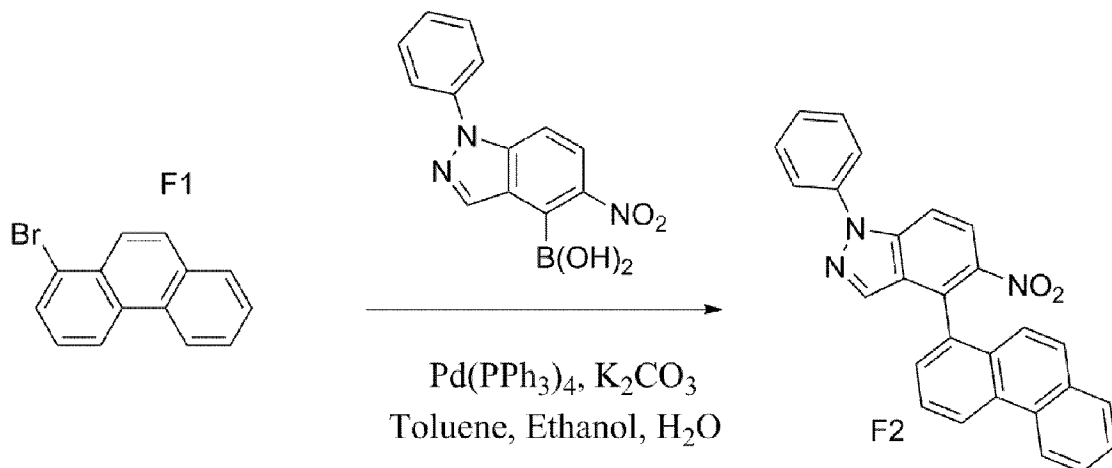
[221] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.71(d, 2H), 7.84~7.86(m, 2H), 8.12(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.32(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.54(d, 1H), 8.91(d, 1H), 8.96(s, 1H), 10.1(s, 1H)

[222]

[223] [준비예 6] F3의 합성

[224] <단계 1> F2의 합성

[225]



[226] 질소 기류 하에서 F1 2.8g (10.8 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 3.0g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[227] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F2 (3.6g, 8.7 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

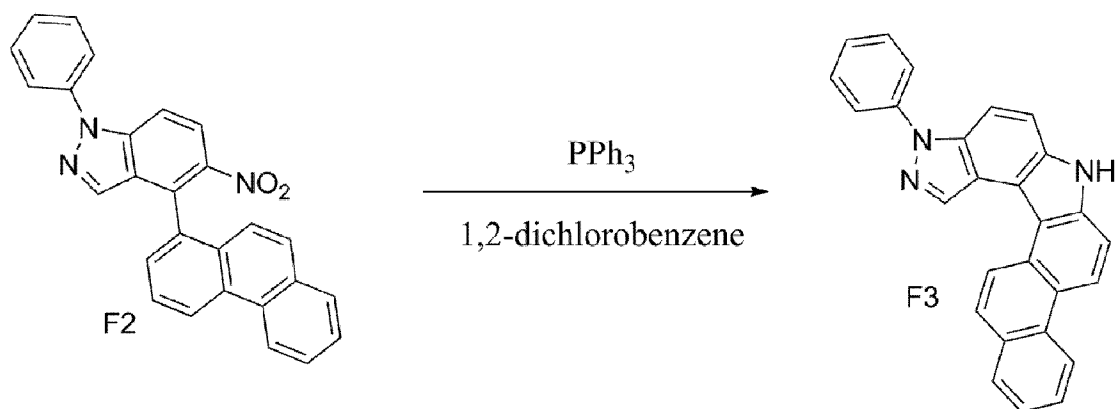
[228] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[229] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.61(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.84~7.86(m, 2H), 7.95(m, 1H), 8.04(d, 1H), 8.12(d, 1H), 8.33(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.54(d, 1H), 8.87(d, 1H), 8.91(d, 1H)

[230]

[231] <단계 2> F3의 합성

[232]



[233] 질소 기류 하에서 F2 3.6g (8.7 mmol)과 triphenylphosphine 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F3 (2.5g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[234] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

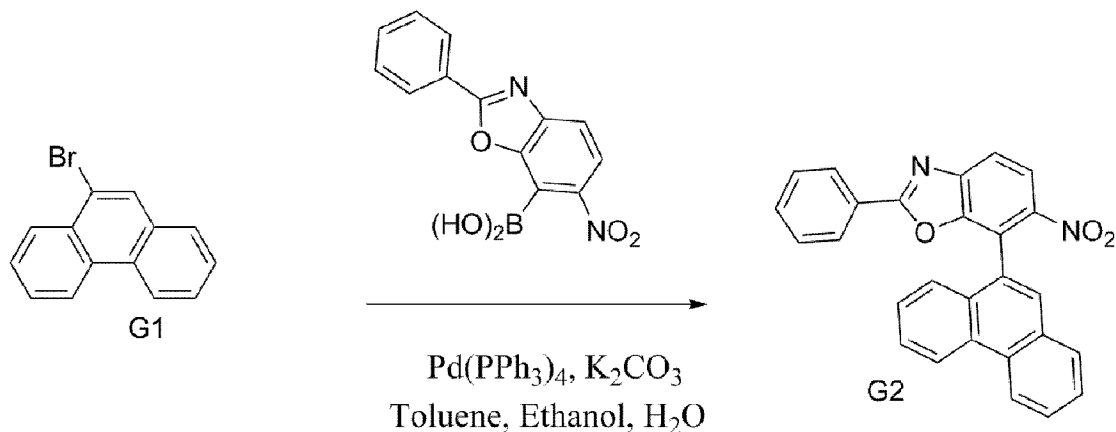
[235] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.61(m, 5H), 7.70(d, 2H), 7.84~7.86(m, 2H), 7.95(d, 1H), 8.12(d, 1H), 8.33(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.54(d, 1H), 8.87(d, 1H), 8.91(d, 1H), 10.0(s, 1H)

[236]

[237] [준비예 7] G3의 합성

[238] <단계 1> G2의 합성

[239]



[240] 질소 기류 하에서 G1 2.8g (10.8 mmol),

6-nitro-2-phenylbenzo[d]oxazol-7-ylboronic acid 3.1g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C 에서 5시간 동안 교반하였다.

[241] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G2 (3.6g, 8.7 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

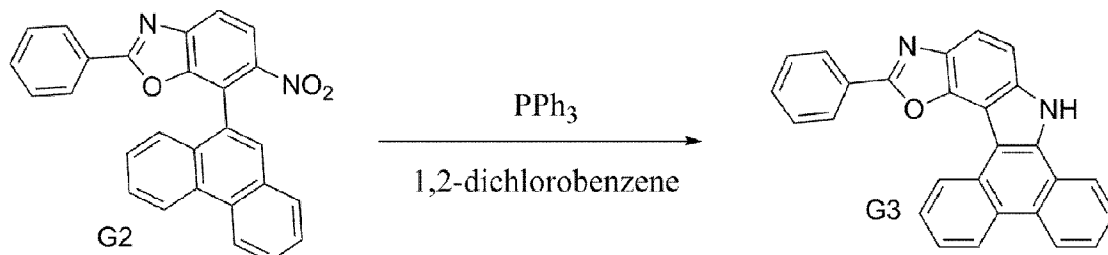
[242] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[243] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.65(m, 5H), 7.82(d, 1H), 7.82~7.87(m, 4H), 7.95(s, 1H), 8.12(d, 2H), 8.32(d, 1H), 8.91(d, 2H)

[244]

[245] <단계 2> G3의 합성

[246]



[247] 질소 기류 하에서 G2 3.6g (8.7 mmol)과 triphenylphosphine 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후

컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G3 (2.5g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[248] GC-Mass (이론치: 384.43g/mol, 측정치: 384g/mol)

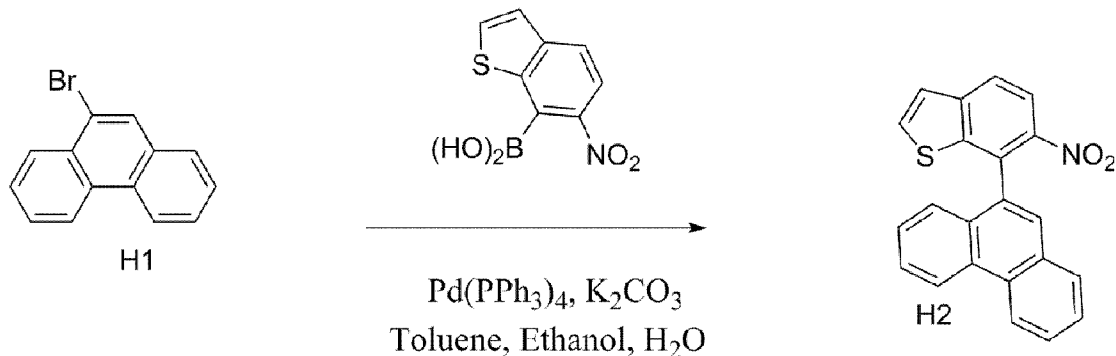
[249] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.64(m, 5H), 7.82(d, 1H), 7.82~7.86(m, 4H), 8.12(d, 2H), 8.32(d, 1H), 8.91(d, 2H), 10.0(s, 1H)

[250]

[251] **[준비예 8] H3의 합성**

[252] <단계 1> H2의 합성

[253]



[254] 질소 기류 하에서 H1 2.0g (7.7 mmol), 6-nitrobenzo[b]thiophen-7-ylboronic acid 1.7g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[255] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 H2 (2.2g, 6.1 mmol, 수율 79%)을 얻었다.

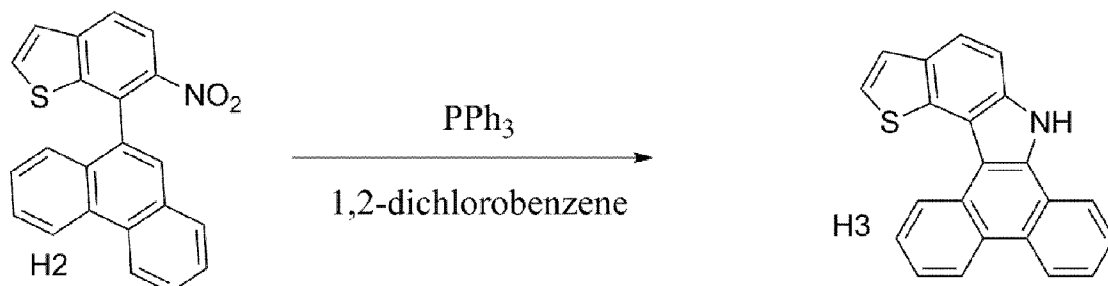
[256] GC-Mass (이론치: 355.41g/mol, 측정치: 355g/mol)

[257] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.66(d, 1H), 7.78(d, 1H), 7.82~7.87(m, 4H), 7.95(s, 1H), 8.12(d, 2H), 8.27(d, 1H), 8.58(d, 1H), 8.91(d, 2H)

[258]

[259] <단계 2> H3의 합성

[260]



[261] 질소 기류 하에서 H2 2.2g (6.1 mmol)과 triphenylphosphine 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 20 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을

분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 H3 (1.5g, 4.6 mmol, 수율 76%)을 얻었다.

[262] GC-Mass (이론치: 323.41g/mol, 측정치: 323g/mol)

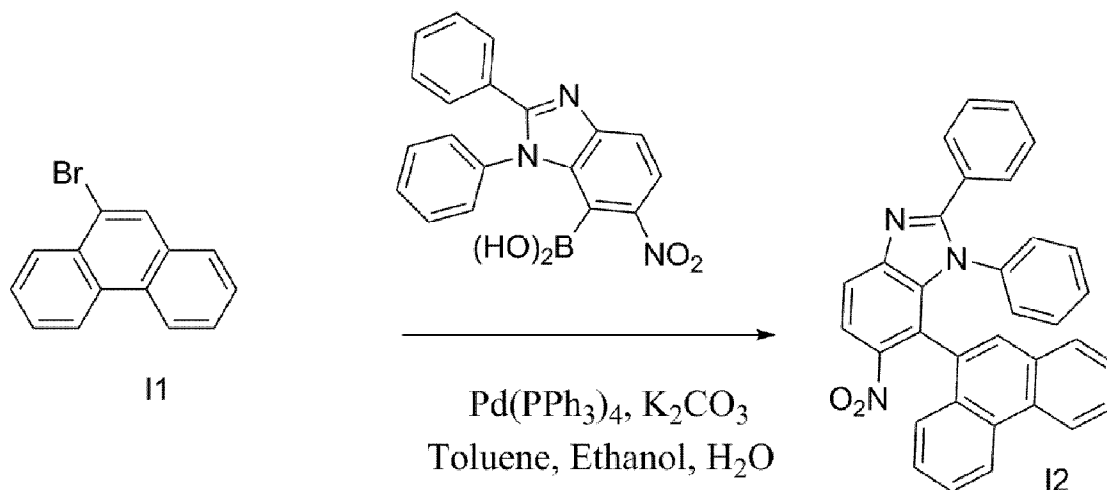
[263] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.67(d, 1H), 7.78(d, 1H), 7.82~7.86(m, 4H), 8.12(d, 2H), 8.27(d, 1H), 8.57(d, 1H), 8.91(d, 2H), 10.01(s, 1H)

[264]

[265] [준비예 9] I3의 합성

[266] <단계 1> I2의 합성

[267]



[268] 질소 기류 하에서 I1 2.0g (7.7 mmol), 6-nitro-1,2-diphenyl-1H-benzo[d]imidazol-7-ylboronic acid 2.8g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[269] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 I2 (3.0g, 6.1 mmol, 수율 79%)을 얻었다.

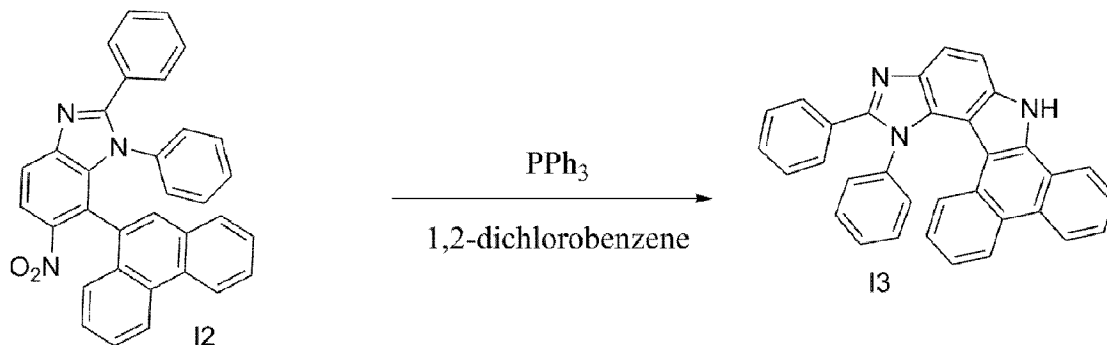
[270] GC-Mass (이론치: 491.54g/mol, 측정치: 491g/mol)

[271] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.41~7.93(m, 9H), 7.80~7.88(m, 5H), 8.12~8.16(m, 3H), 8.27(d, 2H), 8.91(d, 2H)

[272]

[273] <단계 2> I3의 합성

[274]



[275] 질소 기류 하에서 I2 3.5g (8.5 mmol)과 triphenylphosphine 5.6g (5.6 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 I3 (2.4g, 6.3 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[276] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

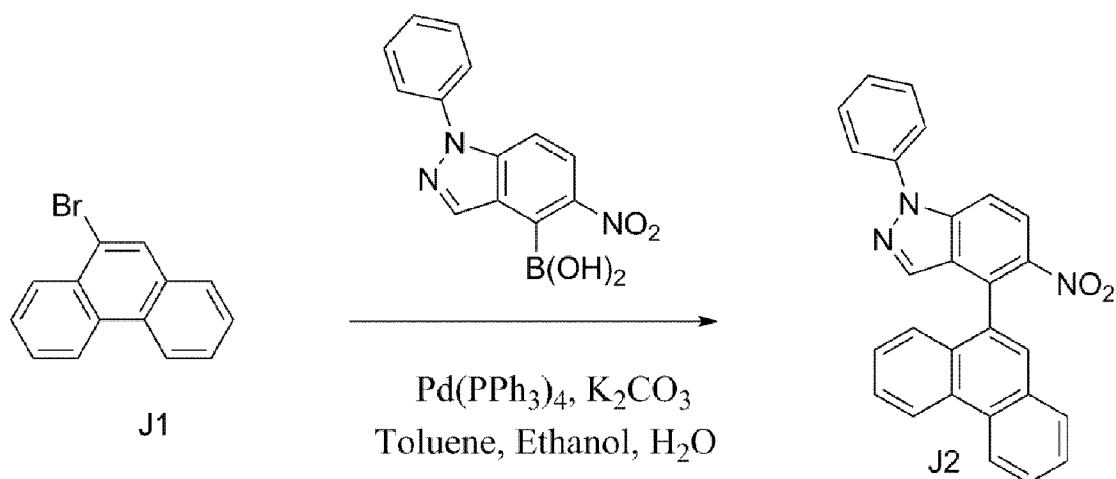
[277] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.41~7.93(m, 9H), 7.80~7.88(m, 4H), 8.12~8.16(m, 3H), 8.27(d, 2H), 8.91(d, 2H), 10.01(s, 1H)

[278]

[279] [준비예 10] J3의 합성

[280] <단계 1> J2의 합성

[281]



[282] 질소 기류 하에서 J1 2.8g (10.8 mmol), 5-nitro-1-phenyl-1H-indazol-4-ylboronic acid 3.0g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[283] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 J2 (3.5g, 8.5 mmol, 수율 79%)을 얻었다.

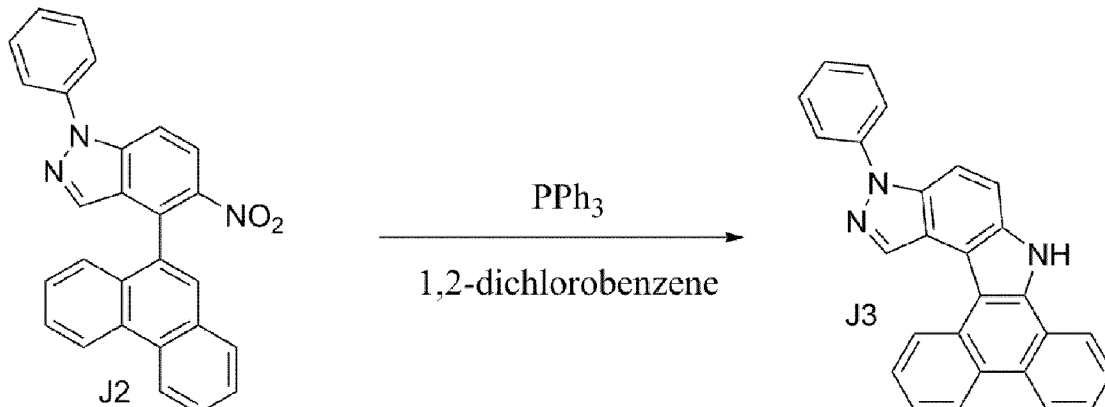
[284] GC-Mass (이론치: 415.44g/mol, 측정치: 415g/mol)

[285] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.60(m, 5H), 7.82~7.87(m, 4H), 7.95(s, 1H), 8.12(d, 2H), 8.33(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.58(d, 1H), 8.91(d, 2H)

[286]

[287] <단계 2> J3의 합성

[288]



[289] 질소 기류 하에서 J2 3.0g (6.1 mmol)과 triphenylphosphine 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 30 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 J3 (2.1g, 4.5 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

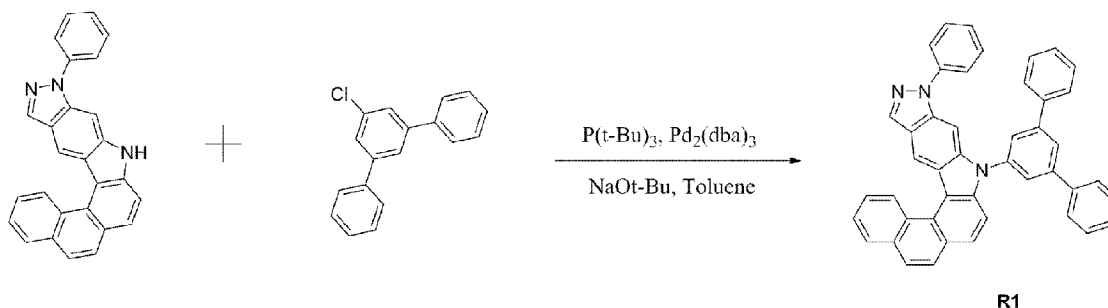
[290] GC-Mass (이론치: 459.54g/mol, 측정치: 459g/mol)

[291] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.59(m, 5H), 7.82~7.87(m, 4H), 8.11(d, 2H), 8.33(d, 1H), 8.35(s, 1H), 8.58(d, 1H), 8.90(d, 2H), 10.0(s, 1H)

[292]

[293] [합성에 1] R1의 합성

[294]



[295] 질소 기류 하에서 A3 2.5g(6.4mmol), 5'-chloro-1,1':3,1''-Terphenyl 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

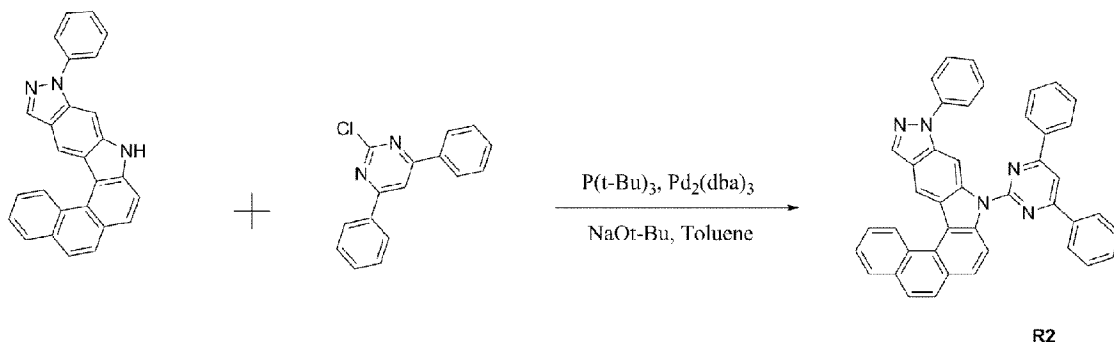
[296] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R1 2.3g (4.0mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[297] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[298]

[299] [합성예 2] R2의 합성

[300]



[301] 질소 기류 하에서 A3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

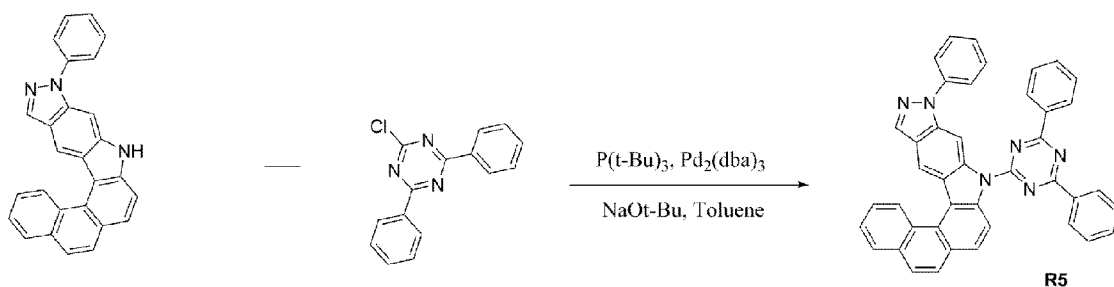
[302] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R2 2.5g (4.1mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[303] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[304]

[305] [합성예 3] R5의 합성

[306]



[307] 질소 기류 하에서 A3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

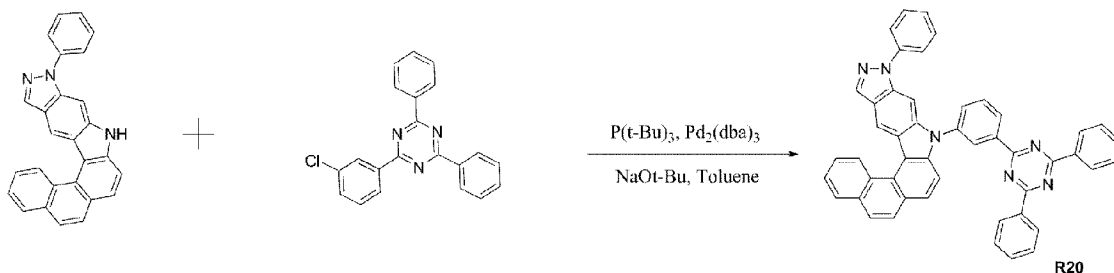
[308] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R5 2.5g(4.1mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[309] GC-Mass (이론치: 614.70g/mol, 측정치: 614g/mol)

[310]

[311] [합성예 4] R20의 합성

[312]



[313] 질소 기류 하에서 A3 2.5g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 2.4g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

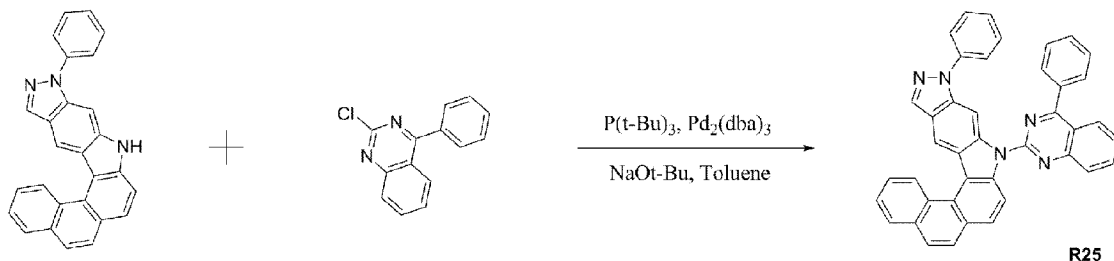
[314] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R20 2.8g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[315] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[316]

[317] [합성예 5] R25의 합성

[318]



[319] 질소 기류 하에서 A3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.7g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

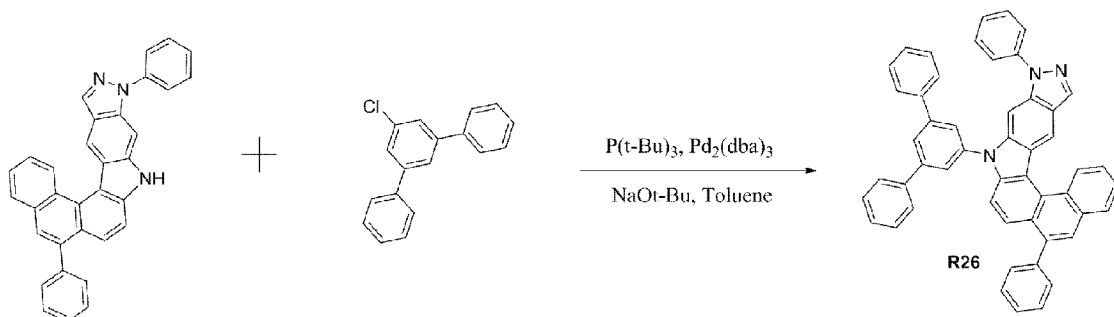
[320] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R25 2.4g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[321] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[322]

[323] [합성예 6] R26의 합성

[324]



[325] 질소 기류 하에서 B4 1.6g(3.5mmol), 5'-chloro-1,1':3,1''-Terphenyl 1.0g(3.9mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.0g(10.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

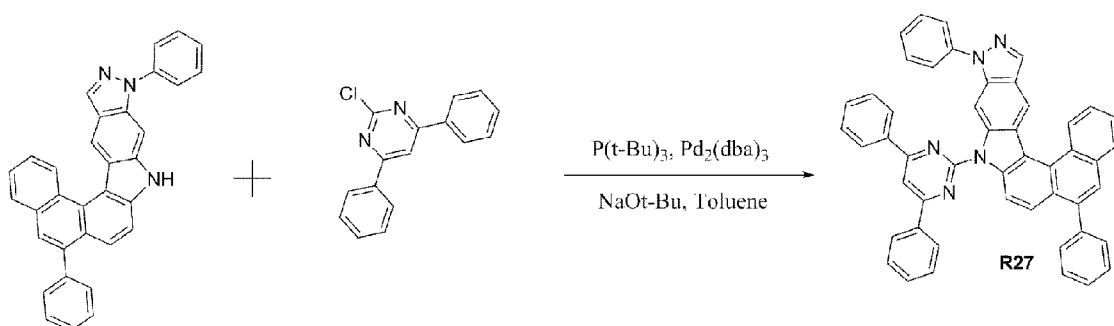
[326] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R26 1.5g(2.2mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[327] GC-Mass (이론치: 687.83g/mol, 측정치: 687g/mol)

[328]

[329] [합성예 7] R27의 합성

[330]



[331] 질소 기류 하에서 B4 1.6g(3.5mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.0g(3.9mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.0g(10.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

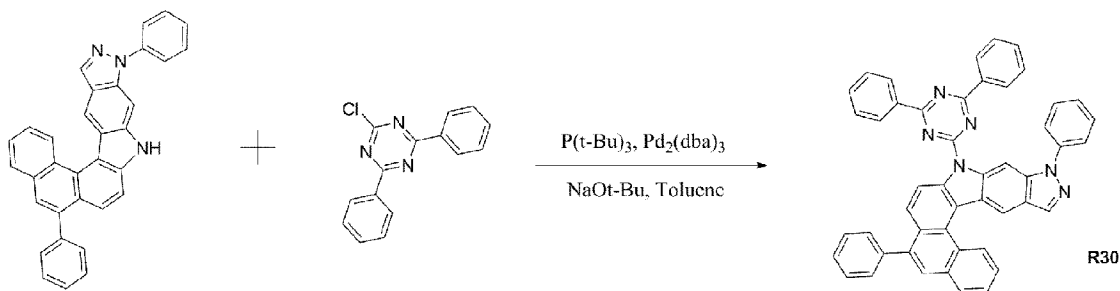
[332] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R27 1.6g(2.3mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[333] GC-Mass (이론치: 687.83g/mol, 측정치: 687g/mol)

[334]

[335] [합성예 8] R30의 합성

[336]



[337] 질소 기류 하에서 B4 1.6g(3.5mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.0g(3.9mmol), 0.2g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.0g(10.6mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

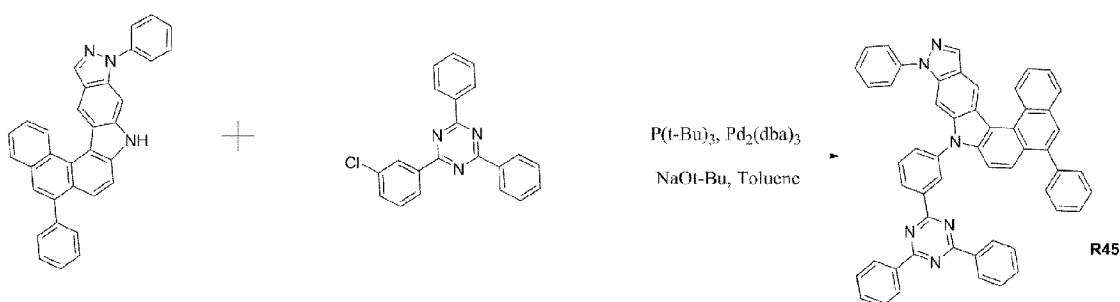
[338] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R30 1.6g(2.3mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[339] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[340]

[341] [합성예 9] R45의 합성

[342]



[343] 질소 기류 하에서 B4 1.6g(3.5mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.3g(3.9mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.0g(10.6mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

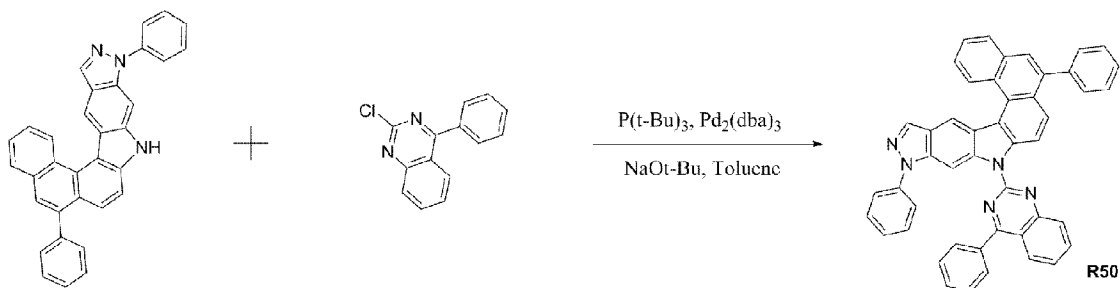
[344] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R45 1.7g(2.2mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[345] GC-Mass (이론치: 766.89g/mol, 측정치: 766g/mol)

[346]

[347] [합성예 10] R50의 합성

[348]



[349] 질소 기류 하에서 B4 1.6g(3.5mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 0.9g(3.9mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.0g(10.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

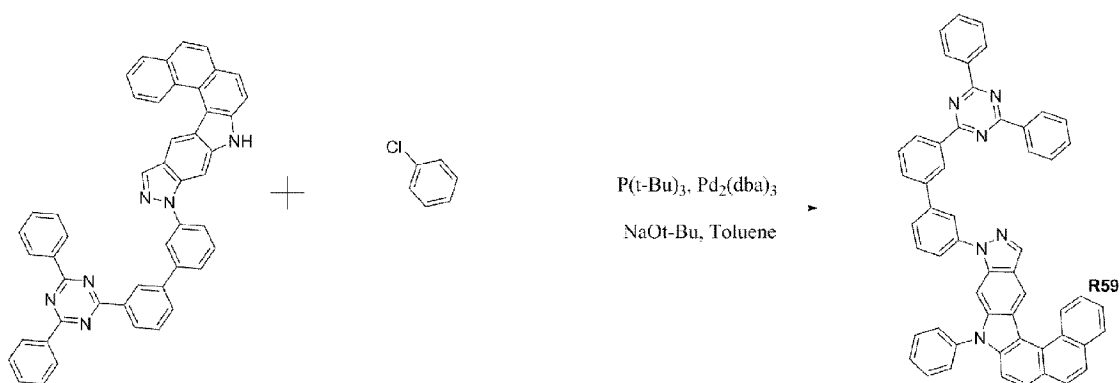
[350] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R50 1.5g(2.2mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[351] GC-Mass (이론치: 663.77g/mol, 측정치: 663g/mol)

[352]

[353] [합성예 11] R59의 합성

[354]



[355] 질소 기류 하에서 C3 3.2g(4.6mmol), chlorobenzene 1.4g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

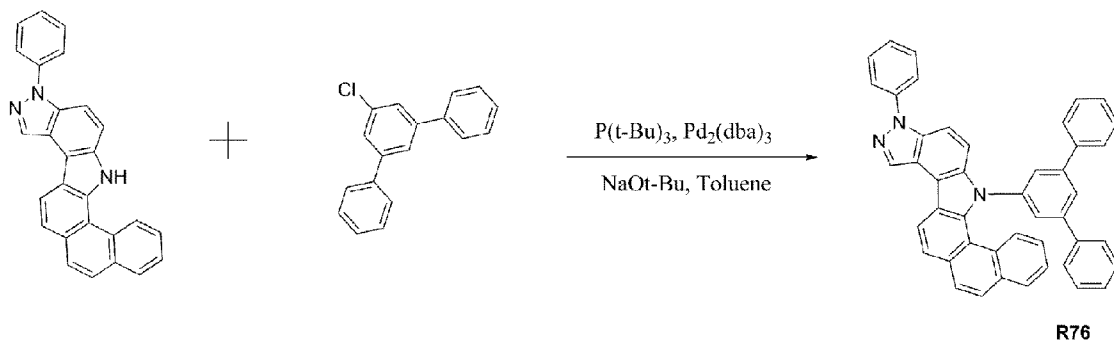
[356] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R59 2.2g(2.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[357] GC-Mass (이론치: 766.89g/mol, 측정치: 766g/mol)

[358]

[359] [합성예 12] R76의 합성

[360]



[361] 질소 기류 하에서 D3 1.1g(2.8mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

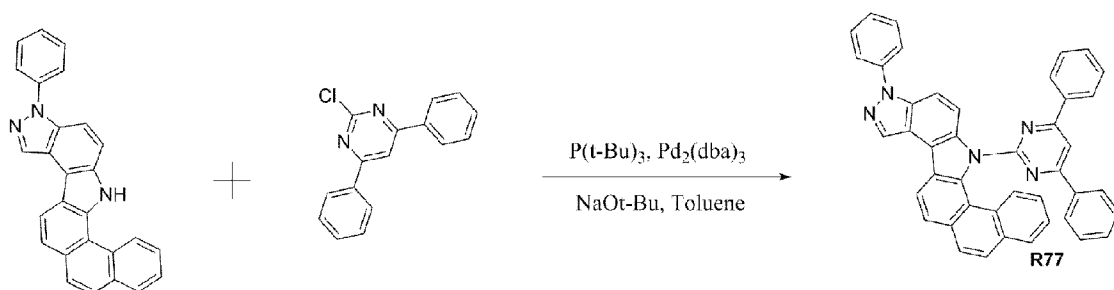
[362] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R76 1.1g(1.8mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[363] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[364]

[365] [합성예 13] R77의 합성

[366]



[367] 질소 기류 하에서 D3 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

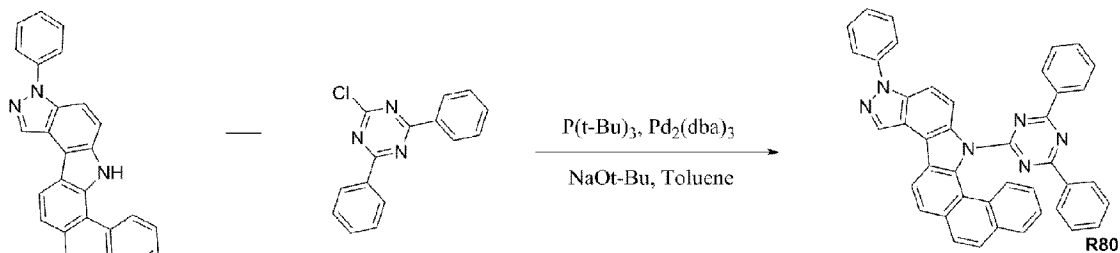
[368] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R77 1.1g(1.8mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[369] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[370]

[371] [합성예 14] R80의 합성

[372]



[373] 질소 기류 하에서 D3 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

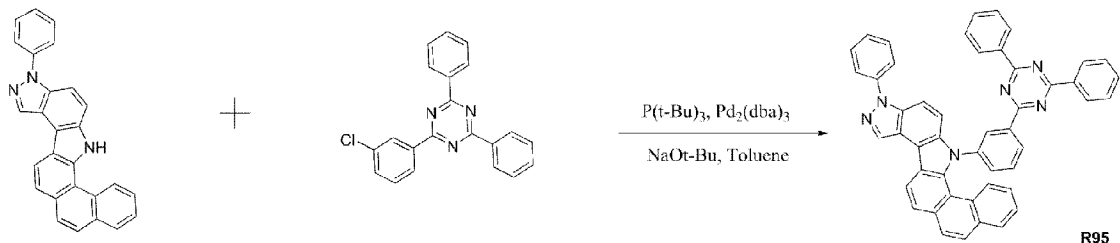
[374] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R80 1.1g(1.8mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[375] GC-Mass (이론치: 614.7g/mol, 측정치: 614g/mol)

[376]

[377] [합성예 15] R95의 합성

[378]



[379] 질소 기류 하에서 D3 1.1g(2.8mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.1g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

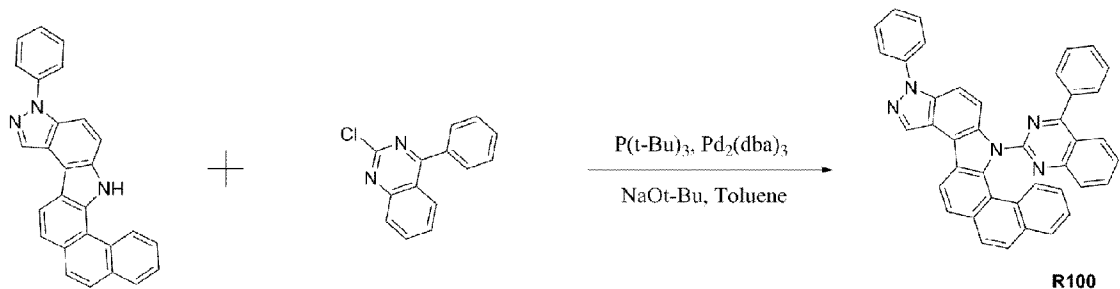
[380] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R95 1.2g(1.8mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[381] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[382]

[383] [합성예 16] R100의 합성

[384]



[385] 질소 기류 하에서 D3 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 0.7g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

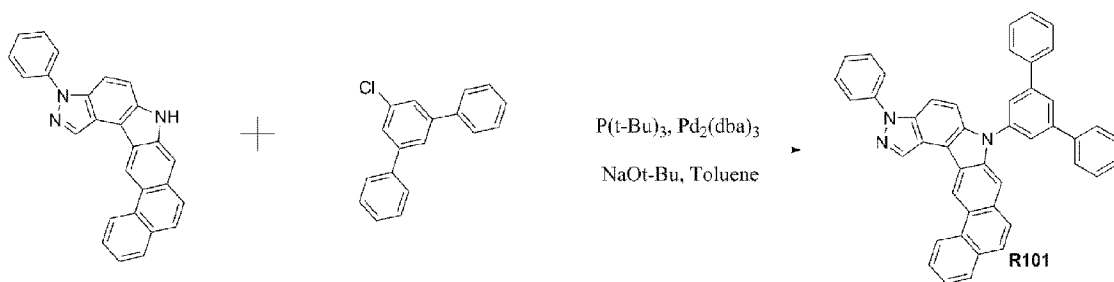
[386] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R100 1.0g(1.8mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[387] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[388]

[389] [합성예 17] R101의 합성

[390]



[391] 질소 기류 하에서 D4 1.1g(2.8mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

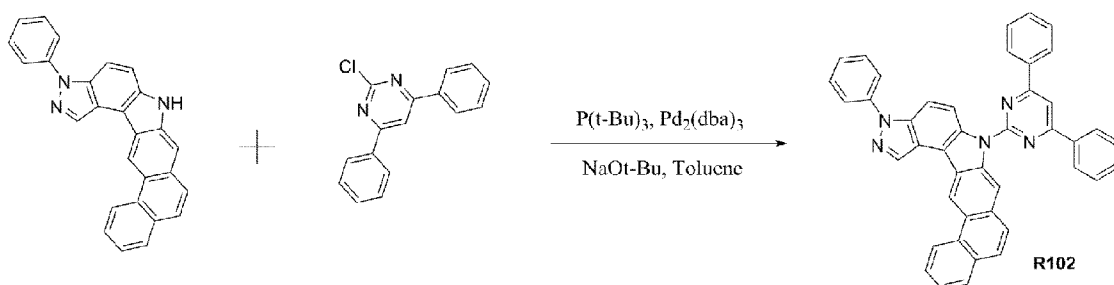
[392] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R101 1.1g(1.8mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[393] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[394]

[395] [합성예 18] R102의 합성

[396]



[397] 질소 기류 하에서 D4 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

[398] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를

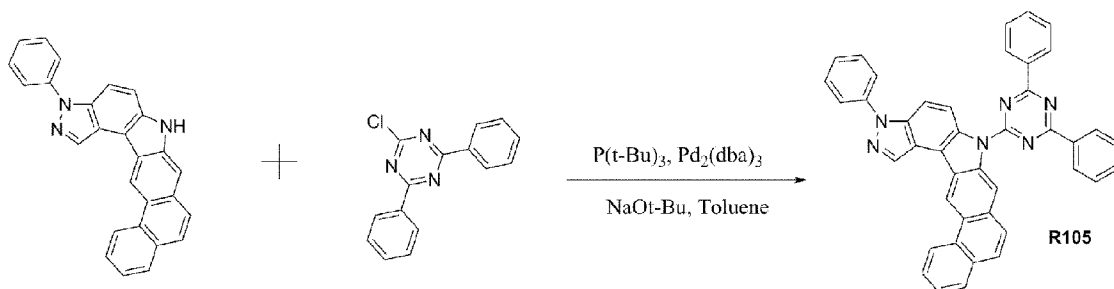
사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R102 1.1g(1.8mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[399] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[400]

[401] [합성예 19] R105의 합성

[402]



[403] 질소 기류 하에서 D4 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.8g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

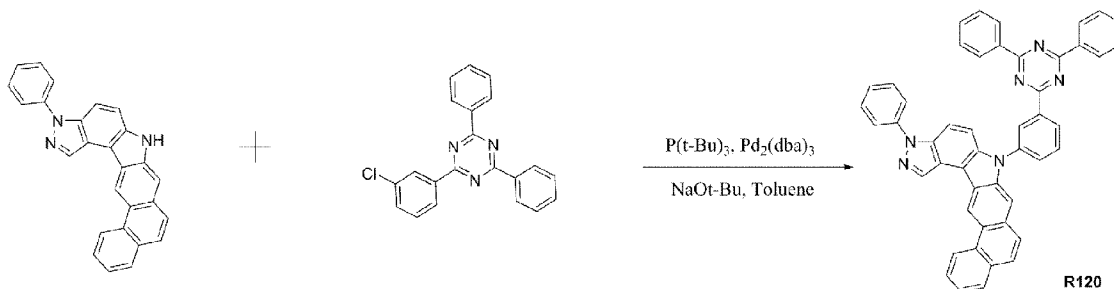
[404] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R105 1.1g(1.7mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[405] GC-Mass (이론치: 614.7g/mol, 측정치: 614g/mol)

[406]

[407] [합성예 20] R120의 합성

[408]



[409] 질소 기류 하에서 D4 1.1g(2.8mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.1g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

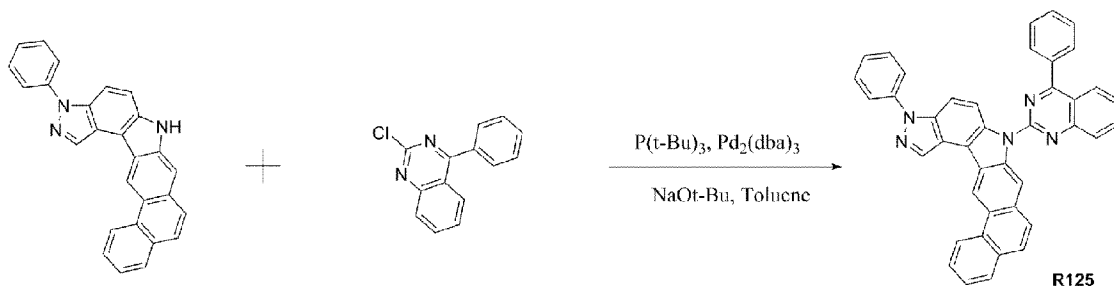
[410] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R120 1.2g(1.8mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[411] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[412]

[413] [합성예 21] R125의 합성

[414]



[415] 질소 기류 하에서 D4 1.1g(2.8mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 0.7g(3.1mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.8g(8.4mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

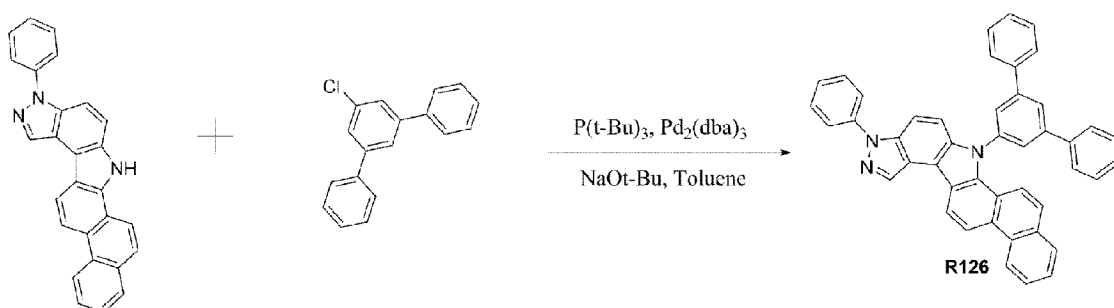
[416] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R125 1.0g(1.8mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[417] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[418]

[419] [합성예 22] R126의 합성

[420]



[421] 질소 기류 하에서 E3 0.7g(1.8mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

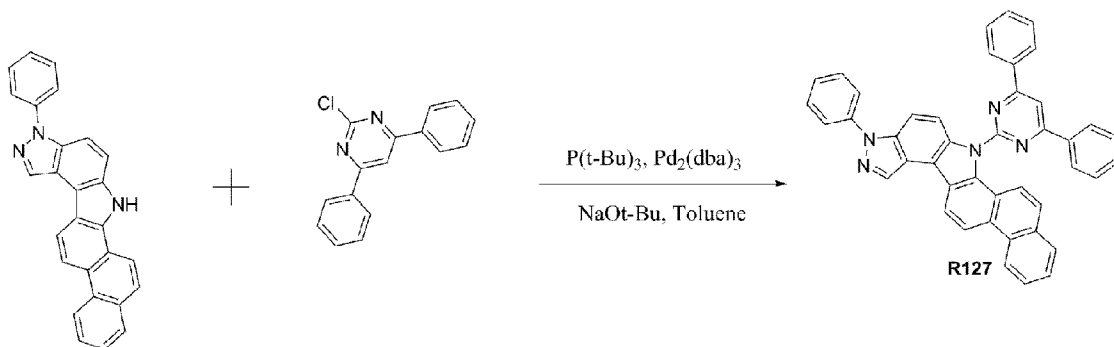
[422] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R126 0.7g(1.2mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[423] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[424]

[425] [합성예 23] R127의 합성

[426]



[427] 질소 기류 하에서 E3 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

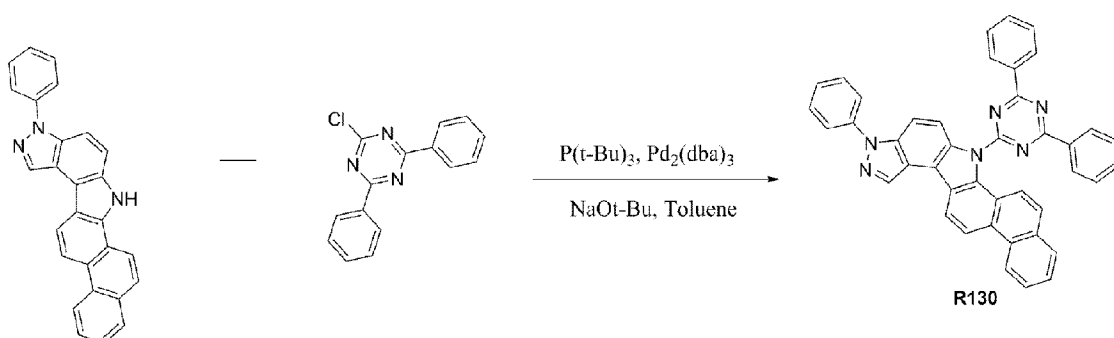
[428] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R127 0.7g(1.1mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[429] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[430]

[431] [합성예 24] R130의 합성

[432]



[433] 질소 기류 하에서 E3 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

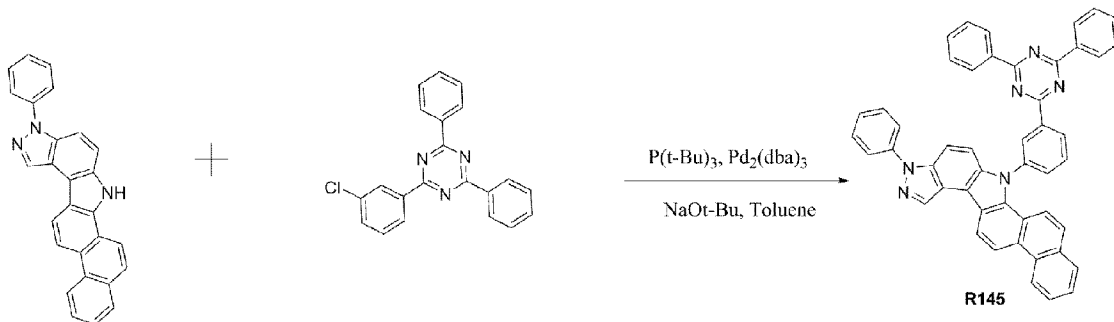
[434] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R130 0.7g(1.1mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[435] GC-Mass (이론치: 614.70g/mol, 측정치: 614g/mol)

[436]

[437] [합성예 25] R145의 합성

[438]



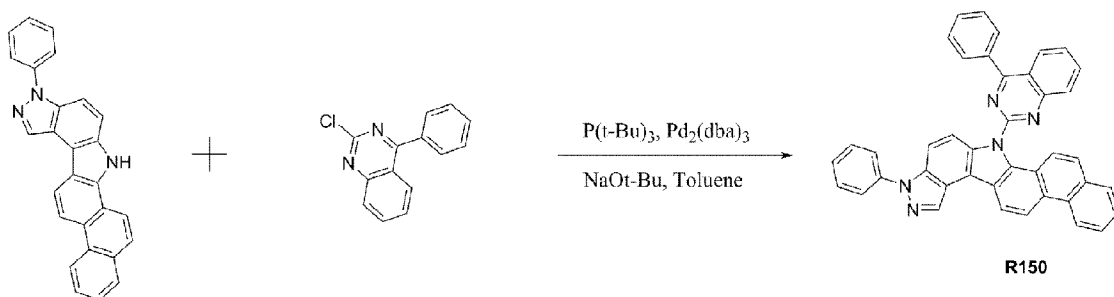
- [439] 질소 기류 하에서 E3 0.7g(1.8mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.7g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.
- [440] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R145 0.7g(1.1mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[441] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[442]

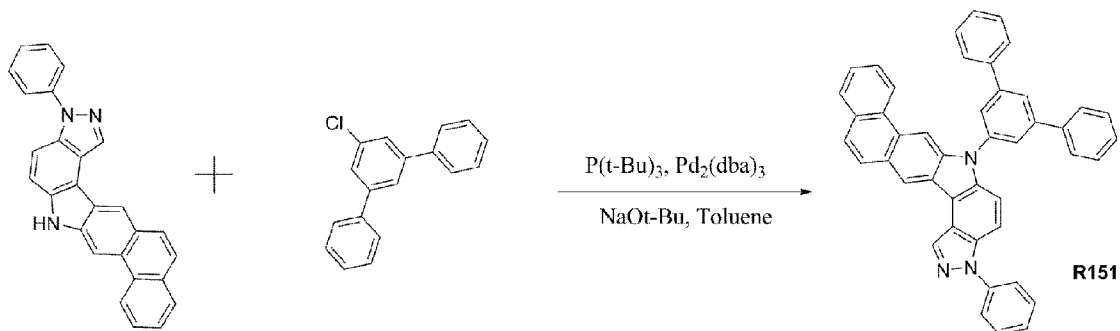
[443] [합성예 26] R150의 합성

[444]



- [445] 질소 기류 하에서 E3 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidin 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.
- [446] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R150 0.7g(1.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.
- [447] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)
- [448]
- [449] [합성예 27] R151의 합성

[450]



[451] 질소 기류 하에서 E4 0.7g(1.8mmol), 5'-chloro-1,1':3,1''-Terphenyl 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

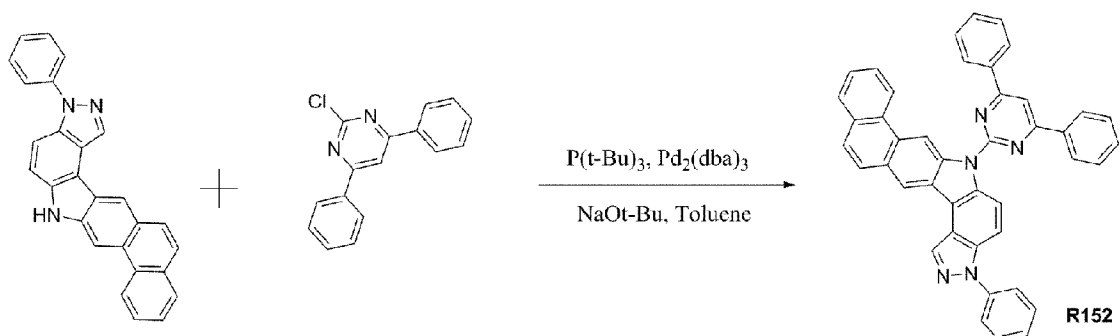
[452] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R151 0.7g(1.2mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[453] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[454]

[455] [합성예 28] R152의 합성

[456]



[457] 질소 기류 하에서 E4 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

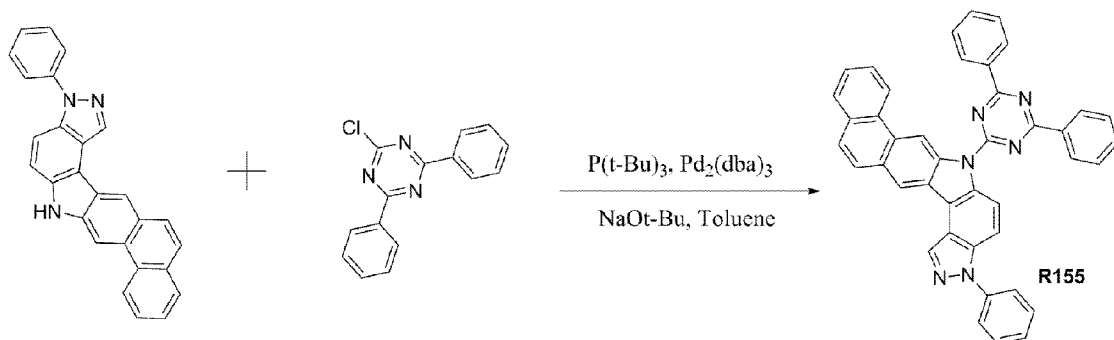
[458] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R152 0.7g(1.1mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[459] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[460]

[461] [합성예 29] R155의 합성

[462]



[463] 질소 기류 하에서 E4 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

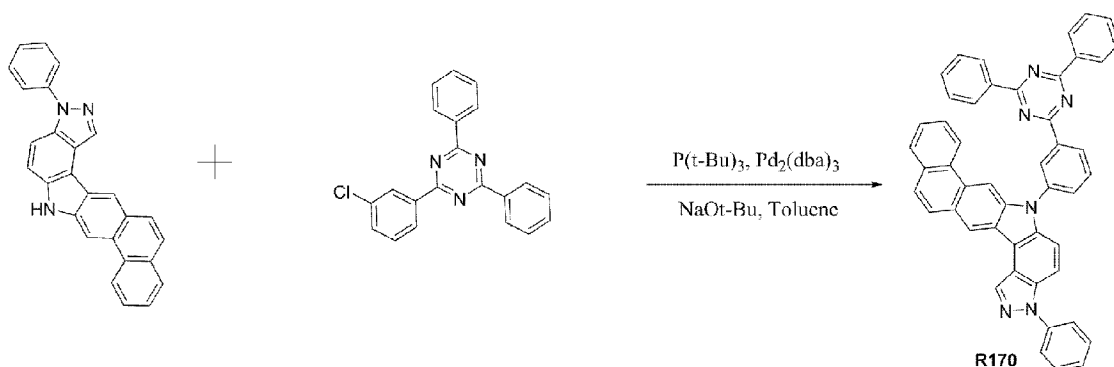
[464] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R155 0.7g(1.2mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[465] GC-Mass (이론치: 614.70g/mol, 측정치: 614g/mol)

[466]

[467] [합성예 30] R170의 합성

[468]



[469] 질소 기류 하에서 E4 0.7g(1.8mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 0.7g(1.9mmol), 0.1g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

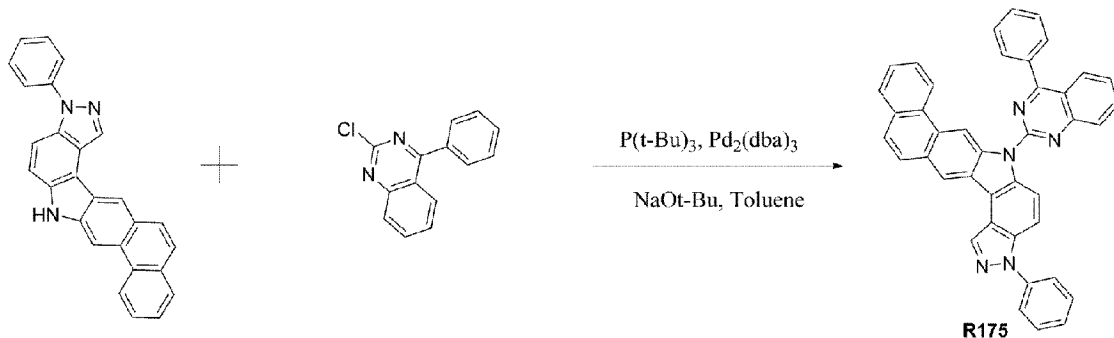
[470] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R170 0.7g(1.1mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[471] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[472]

[473] [합성예 31] R175의 합성

[474]



[475] 질소 기류 하에서 E4 0.7g(1.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidin 0.5g(1.9mmol), 0.1g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.1mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 0.5g(5.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

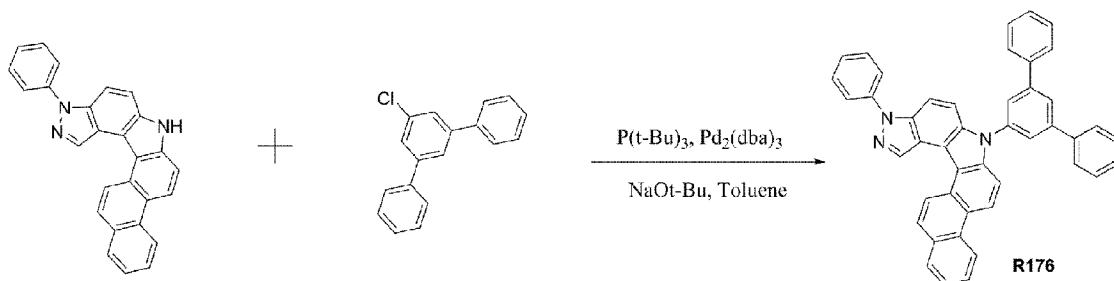
[476] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R175 0.7g(1.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[477] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[478]

[479] [합성예 32] R176의 합성

[480]



[481] 질소 기류 하에서 F3 2.5g(6.4mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

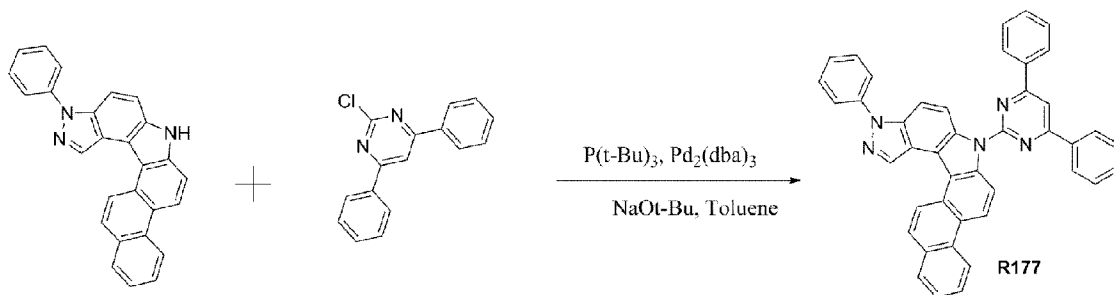
[482] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R176 2.6g(4.3mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[483] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[484]

[485] [합성예 33] R177의 합성

[486]



[487] 질소 기류 하에서 F3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

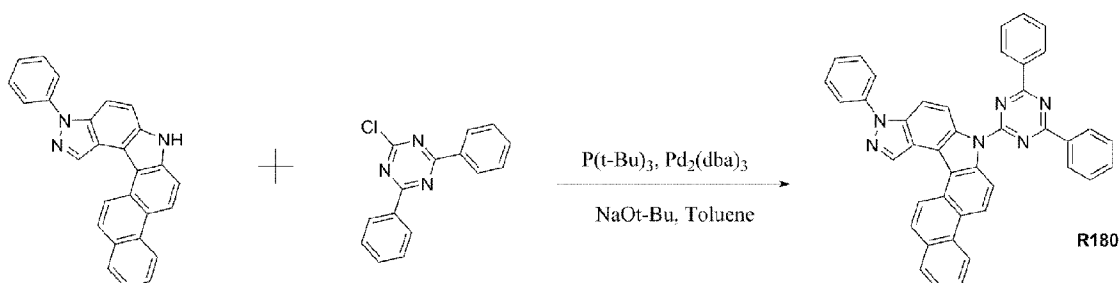
[488] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R177 2.7g(4.4mmol, 수율 68%)을 얻었다.

[489] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[490]

[491] [합성예 34] R180의 합성

[492]



[493] 질소 기류 하에서 F3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

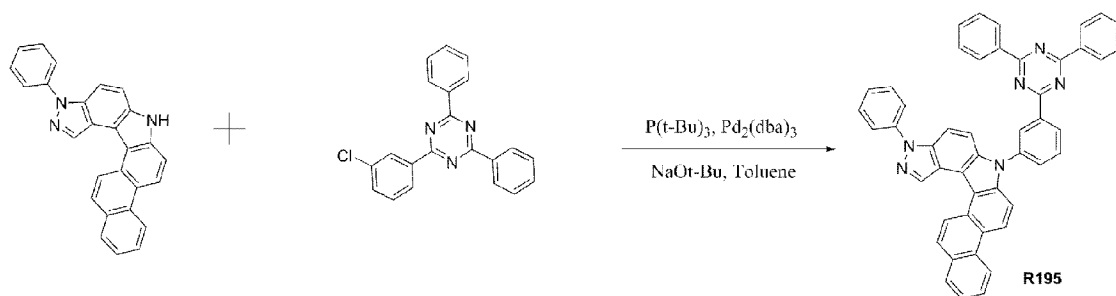
[494] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R180 2.6g(4.2mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[495] GC-Mass (이론치: 614.70g/mol, 측정치: 614g/mol)

[496]

[497] [합성예 35] R195의 합성

[498]



[499] 질소 기류 하에서 F3 2.5g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 2.4g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

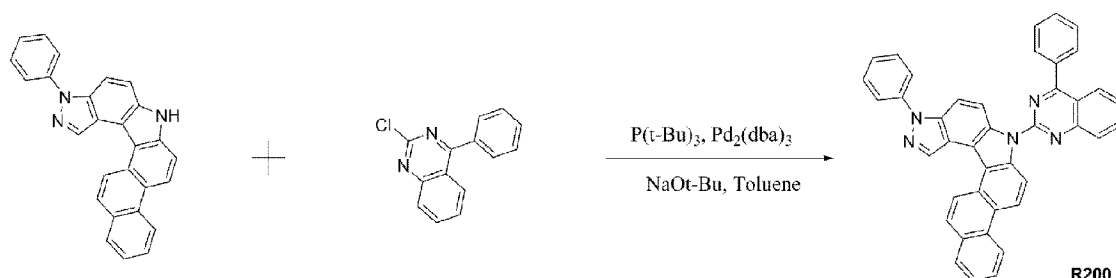
[500] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R195 2.8g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[501] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[502]

[503] [합성예 36] R200의 합성

[504]



[505] 질소 기류 하에서 F3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.7g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

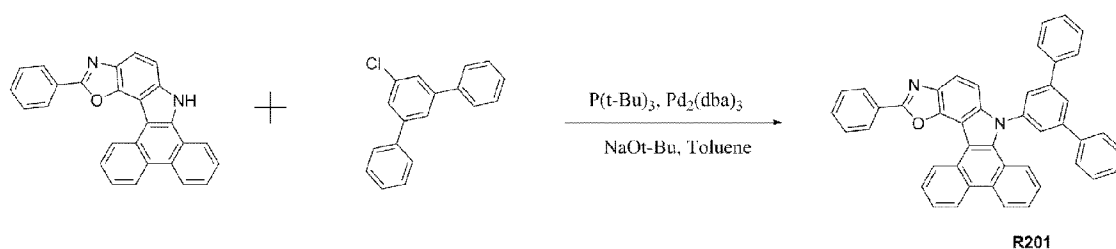
[506] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R200 2.5g(4.2mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[507] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[508]

[509] [합성예 37] R201의 합성

[510]



[511] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

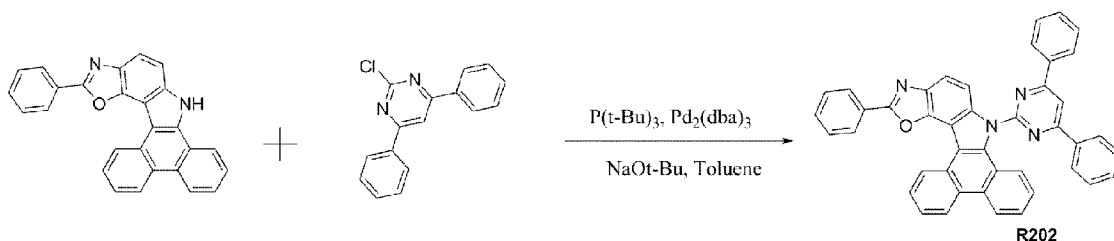
[512] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R201 2.6g(4.3mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[513] GC-Mass (이론치: 612.72g/mol, 측정치: 612g/mol)

[514]

[515] [합성예 38] R202의 합성

[516]



[517] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

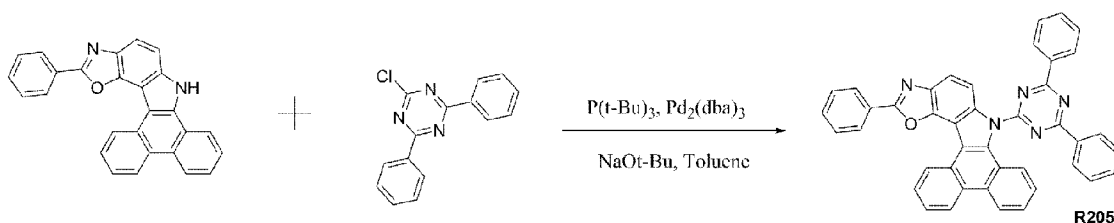
[518] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R202 2.7g(4.4mmol, 수율 68%)을 얻었다.

[519] GC-Mass (이론치: 614.69g/mol, 측정치: 614g/mol)

[520]

[521] [합성예 39] R205의 합성

[522]



[523] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.9g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

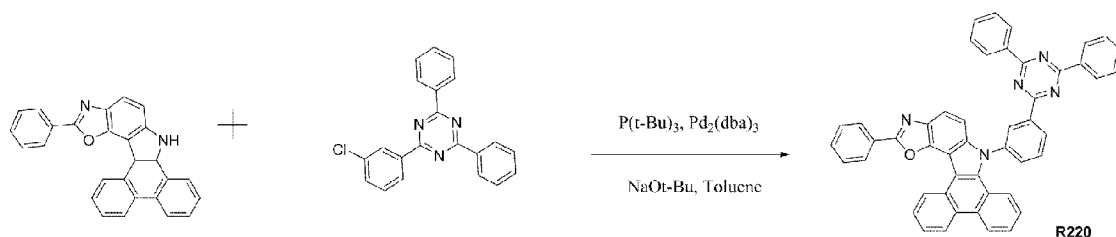
[524] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R205 2.5g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[525] GC-Mass (이론치: 615.68g/mol, 측정치: 615g/mol)

[526]

[527] [합성예 40] R220의 합성

[528]



[529] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 2.4g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

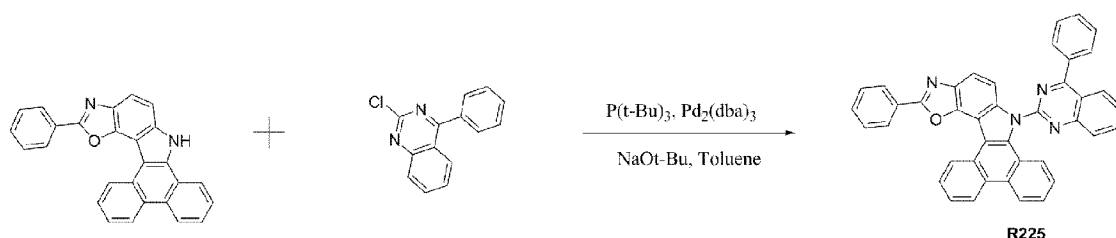
[530] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R220 2.8g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[531] GC-Mass (이론치: 690.78g/mol, 측정치: 690g/mol)

[532]

[533] [합성예 41] R225의 합성

[534]



[535] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.7g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

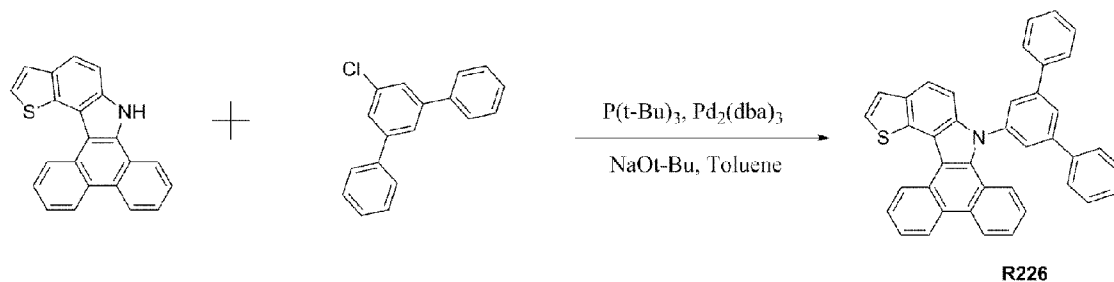
[536] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R225 2.5g(4.2mmol, 수율 68%)을 얻었다.

[537] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[538]

[539] [합성예 42] R226의 합성

[540]



[541] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 1.4g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

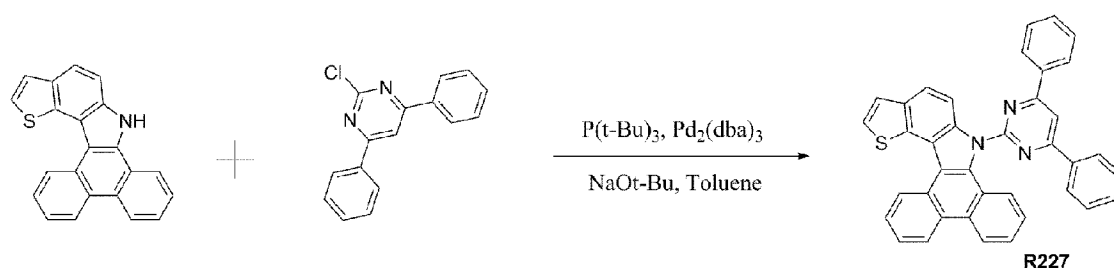
[542] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R226 1.7g(3.1mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[543] GC-Mass (이론치: 551.70g/mol, 측정치: 551g/mol)

[544]

[545] [합성예 43] R227의 합성

[546]



[547] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.4g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

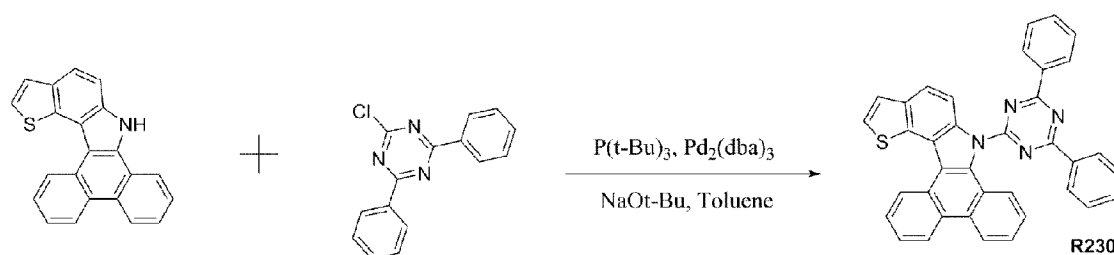
[548] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R227 1.9g(3.2mmol, 수율 68%)을 얻었다.

[549] GC-Mass (이론치: 614.69g/mol, 측정치: 614g/mol)

[550]

[551] [합성예 44] R230의 합성

[552]



[553] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.4g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

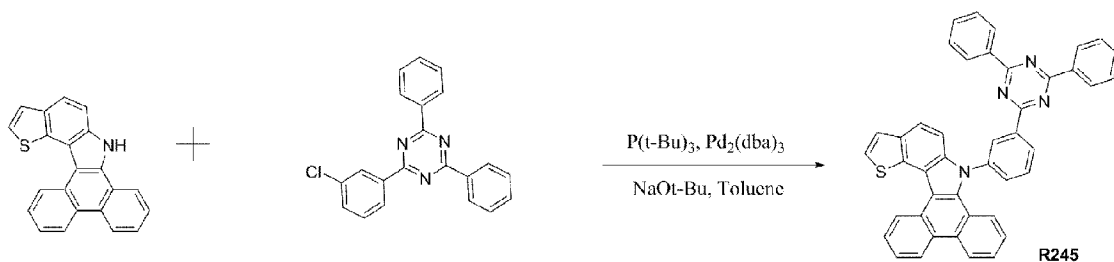
[554] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R230 1.6g(2.9mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[555] GC-Mass (이론치: 554.66g/mol, 측정치: 554g/mol)

[556]

[557] [합성예 45] R245의 합성

[558]



[559] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.8g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

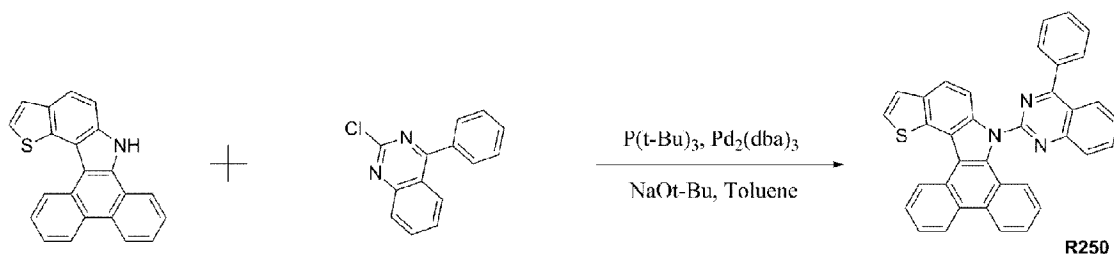
[560] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R245 2.0g(2.9mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[561] GC-Mass (이론치: 691.78g/mol, 측정치: 691g/mol)

[562]

[563] [합성예 46] R250의 합성

[564]



[565] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.2g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

[566] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인

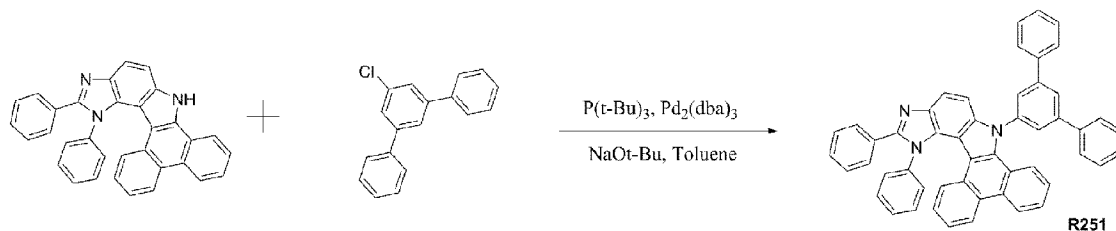
R250 1.6g(3.0mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[567] GC-Mass (이론치: 551.70g/mol, 측정치: 551g/mol)

[568]

[569] [합성예 47] R251의 합성

[570]



[571] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 1.3g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

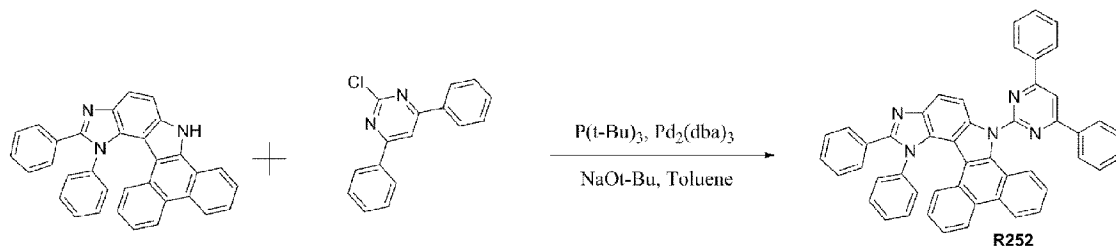
[572] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R251 1.3g(2.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[573] GC-Mass (이론치: 459.54g/mol, 측정치: 459g/mol)

[574]

[575] [합성예 48] R252의 합성

[576]



[577] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.3g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

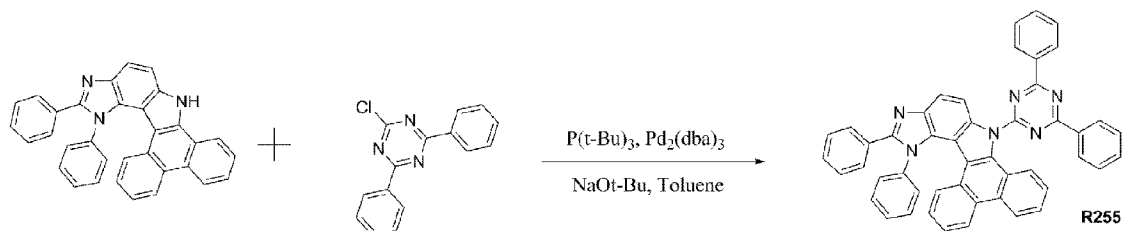
[578] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R252 2.1g(3.0mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[579] GC-Mass (이론치: 689.80g/mol, 측정치: 689g/mol)

[580]

[581] [합성예 49] R255의 합성

[582]



[583] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.3g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

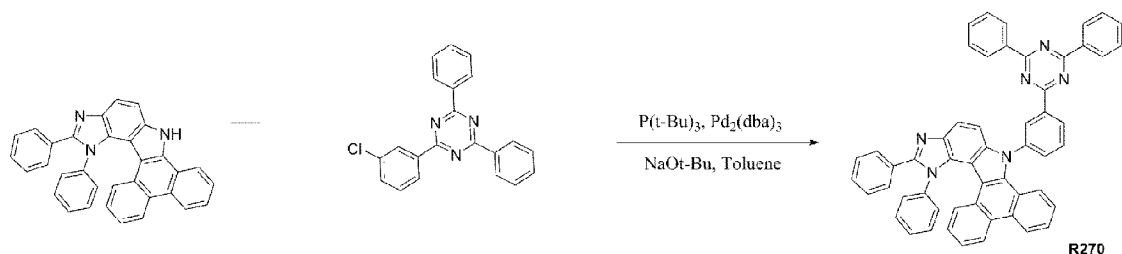
[584] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R255 2.0g(2.8mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[585] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[586]

[587] [합성예 50] R270의 합성

[588]



[589] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.7g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

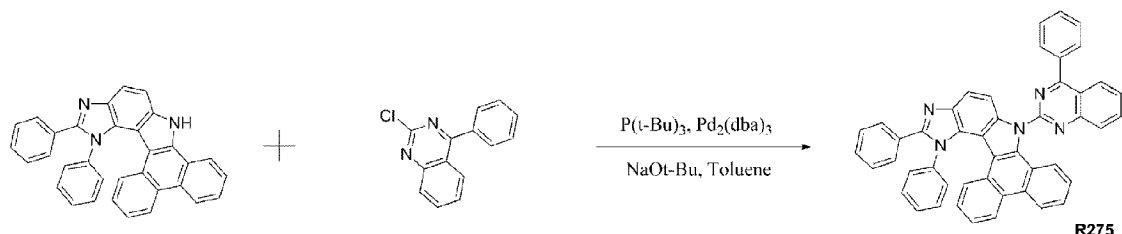
[590] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R270 2.3g(2.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[591] GC-Mass (이론치: 766.89g/mol, 측정치: 766g/mol)

[592]

[593] [합성예 51] R275의 합성

[594]



[595] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.2g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium

tert-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

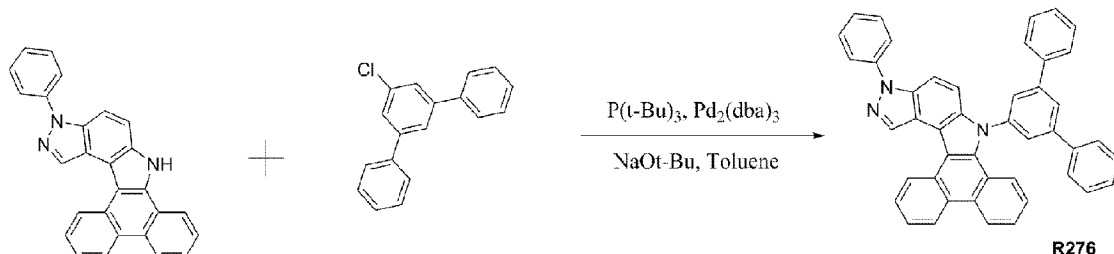
[596] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R275 1.9g(2.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[597] GC-Mass (이론치: 663.77g/mol, 측정치: 663g/mol)

[598]

[599] [합성예 52] R276의 합성

[600]



[601] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl 1.8g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

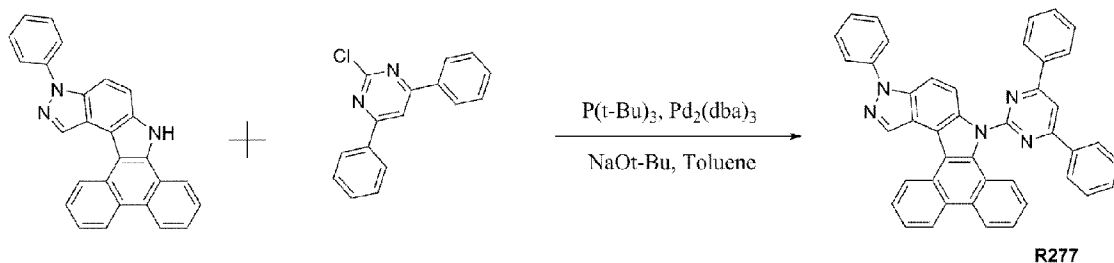
[602] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R276 2.6g(4.2mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[603] GC-Mass (이론치: 611.73g/mol, 측정치: 611g/mol)

[604]

[605] [합성예 53] R277의 합성

[606]



[607] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 1.8g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

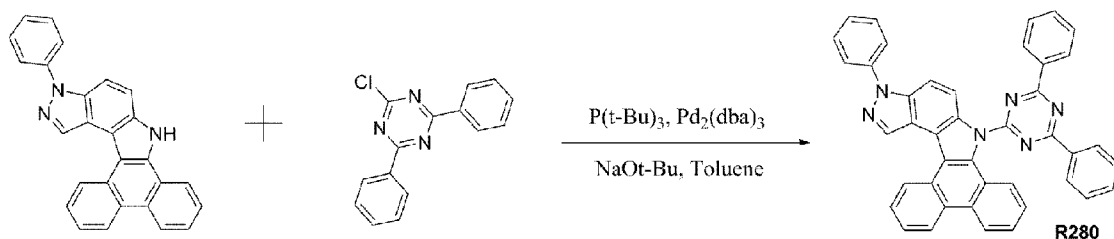
[608] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R277 2.5g(4.0mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[609] GC-Mass (이론치: 613.71g/mol, 측정치: 613g/mol)

[610]

[611] [합성예 54] 280의 합성

[612]



[613] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.8g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

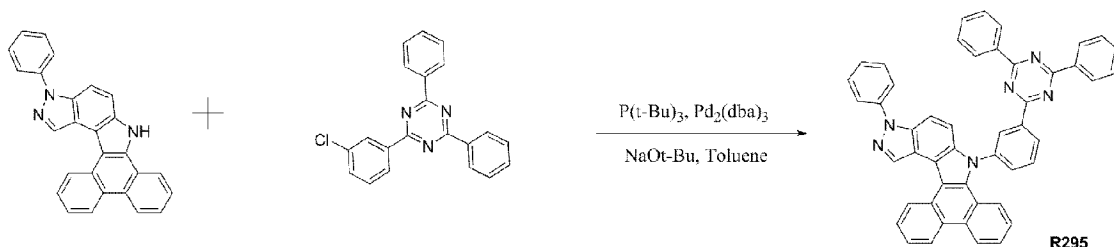
[614] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R280 2.5g(4.1mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[615] GC-Mass (이론치: 614.70g/mol, 측정치: 614g/mol)

[616]

[617] [합성예 55] R295의 합성

[618]



[619] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 2.4g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

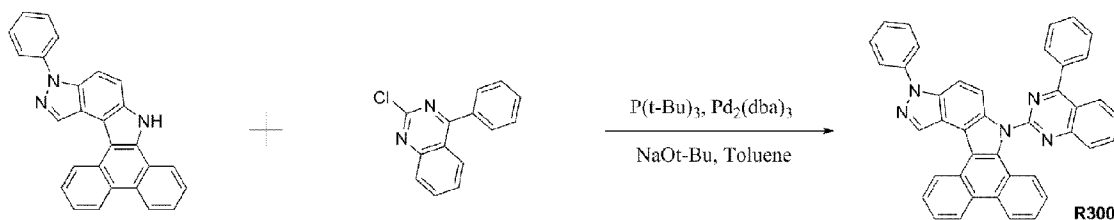
[620] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R295 2.6g(3.8mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[621] GC-Mass (이론치: 690.79g/mol, 측정치: 690g/mol)

[622]

[623] [합성예 56] R300의 합성

[624]



[625] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.7g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

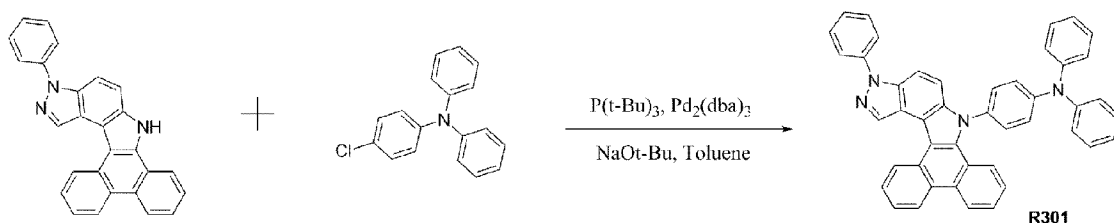
[626] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R300 2.3g(4.0mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[627] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[628]

[629] [합성예 57] R301의 합성

[630]



[631] 질소 기류 하에서 J3 2.4g(6.3mmol), 4-chloro-N,N-diphenylaniline 1.9g(6.9mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.8g(18.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

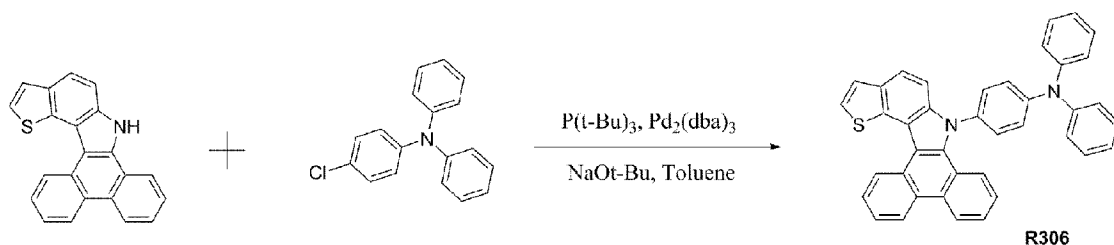
[632] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R301 2.6g(4.2mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[633] GC-Mass (이론치: 626.75g/mol, 측정치: 626g/mol)

[634]

[635] [합성예 58] 306의 합성

[636]



[637] 질소 기류 하에서 H3 1.5g(4.6mmol), 4-chloro-N,N-diphenylaniline 1.4g(5.1mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

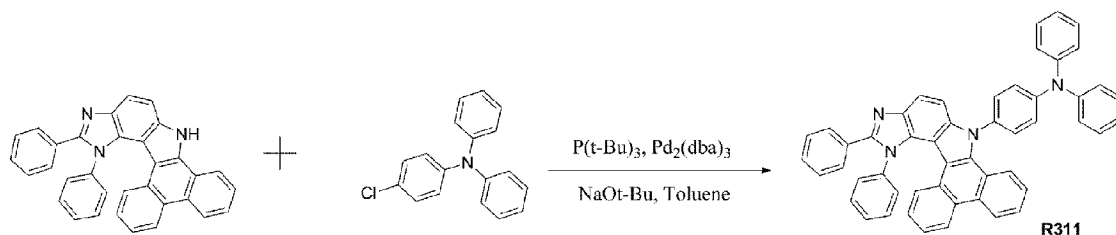
[638] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R306 1.7g(3.0mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[639] GC-Mass (이론치: 566.71g/mol, 측정치: 566g/mol)

[640]

[641] [합성예 59] R311의 합성

[642]



[643] 질소 기류 하에서 I3 2.1g(4.5mmol), 4-chloro-N,N-diphenylaniline 1.4g(5.0mmol), 0.2g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.3g(13.6mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

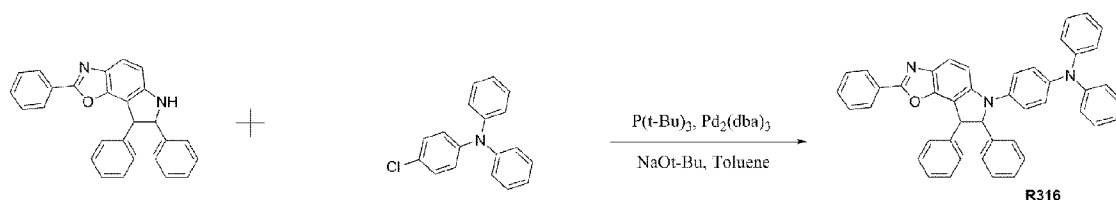
[644] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R311 2.1g(2.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[645] GC-Mass (이론치: 702.84g/mol, 측정치: 702g/mol)

[646]

[647] [합성예 60] R316의 합성

[648]



[649] 질소 기류 하에서 G3 2.5g(6.4mmol), 4-chloro-N,N-diphenylaniline 2.0g(7.1mmol), 0.3g(5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다.

[650] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R316 2.5g(4.1mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[651] GC-Mass (이론치: 627.73g/mol, 측정치: 627g/mol)

[652]

[653] [실시예 1 내지 34] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[654] 합성예에서 합성한 화합물 R2, R5, R20, R27, R30, R45, R59, R77, R80, R95, R102, R105, R120, R127, R130, R145, R152, R155, R170, R177, R180, R195, R202, R205, R220, R227, R230, R245, R252, R255, R270, R277, R280, R295을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[655] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 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.

[656] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/각각의 화합물 R2, R5, R20, R27, R30, R45, R59, R77, R80, R95, R102, R105, R120, R127, R130, R145, R152, R155, R170, R177, R180, R195, R202, R205, R220, R227, R230, R245, R252, R255, R270, R277, R280, R295 + 10 % Ir(ppy)₃ (300 nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[657]

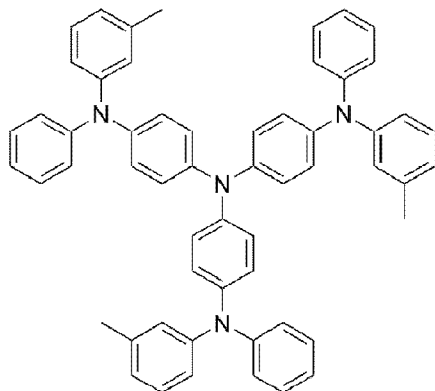
[658] [비교예 1] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[659] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 R2 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

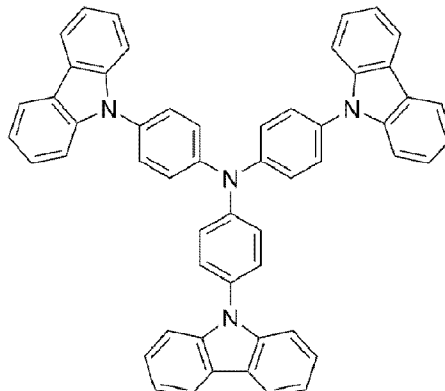
[660]

[661] 상기 실시예 1 내지 34 및 비교예 1에서 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP, BCP 및 Alq₃의 구조는 다음과 같다.

[662]

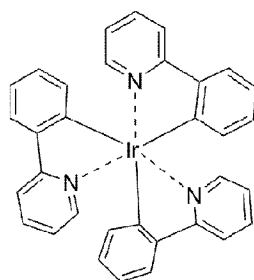


m-MTDATA

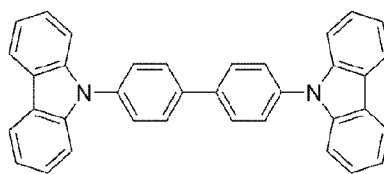


TCTA

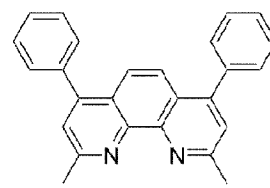
[663]



Ir(ppy)₃

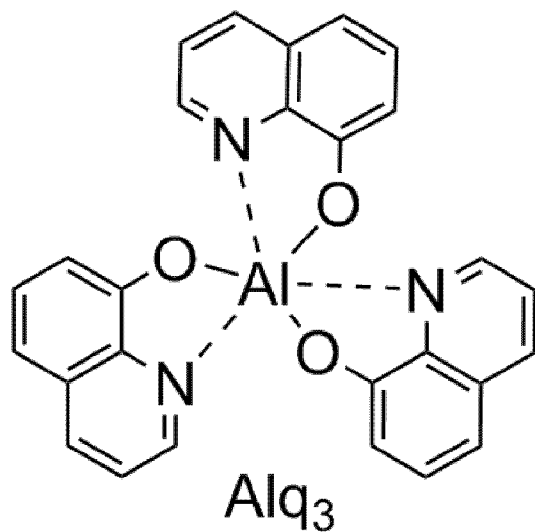


CBP



BCP

[664]



[665]

[666] **[평가예1]**

[667] 실시예 1 내지 34 및 비교예 1에서 각각 제작된 녹색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[668]

[669] [표1]

샘플	호스트	구동전압 (V)	발광피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	R2	5.7	515	45.5
실시예 2	R5	5.5	515	44.5
실시예 3	R20	5.8	515	45.1
실시예 4	R27	6.1	515	45.0
실시예 5	R30	6.2	515	44.6
실시예 6	R45	5.9	515	44.8
실시예 7	R59	4.8	515	42.7
실시예 8	R77	5.2	515	41.5
실시예 9	R80	5.4	515	43.2
실시예 10	R95	5.5	515	44.1
실시예 11	R102	5.3	515	45.1
실시예 12	R105	5.6	515	44.4
실시예 13	R120	5.5	515	48.7
실시예 14	R127	5.3	515	49.5
실시예 15	R130	5.0	515	46.7
실시예 16	R145	5.1	515	44.3
실시예 17	R152	5.2	515	42.3
실시예 18	R155	5.4	515	42.8
실시예 19	R170	5.5	515	42.9
실시예 20	R177	5.1	515	43.5
실시예 21	R180	5.0	515	44.6
실시예 22	R195	5.2	515	45.6
실시예 23	R202	3.9	515	45.1
실시예 24	R205	3.5	514	44.2
실시예 25	R220	3.4	515	45.3
실시예 26	R227	6.0	516	48.2
실시예 27	R230	6.2	516	49.5
실시예 28	R245	6.1	516	50.1

실시예 29	R252	3.8	515	49.5
실시예 30	R255	3.7	515	48.7
실시예 31	R270	3.8	515	49.6
실시예 32	R277	5.8	515	55.2
실시예 33	R280	5.7	515	53.9
실시예 34	R295	5.5	515	54.8
비교예 1	CBP	7.3	517	36.0

[670] 상기 표1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층에 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(실시예 1 내지 34)는 종래 CBP를 발광층에 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(비교예1)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[671]

[672] [실시예 35 내지 67] 적색 유기 전계 발광 소자의 제작

[673] 합성예에서 합성한 화합물 R2, R5, R25, R27, R30, R50, R77, R80, R100, R102, R105, R125, R127, R130, R150, R152, R155, R175, R177, R180, R200, R202, R205, R225, R227, R230, R250, R252, R255, R275, R277, R280, R300을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[674] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 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.

[675] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/각각의 화합물 R2, R5, R25, R27, R30, R50, R77, R80, R100, R102, R105, R125, R127, R130, R150, R152, R155, R175, R177, R180, R200, R202, R205, R225, R227, R230, R250, R252, R255, R275, R277, R280, R300 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (300 nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[676]

[677] [비교예2]

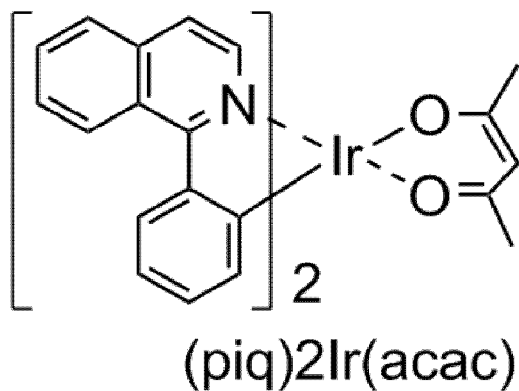
[678] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 R6 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 11과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[679]

[680] 상기 실시예 35 내지 67 및 비교예 2에서 사용된 m-MTDATA, TCTA, CBP, BCP

및 Alq₃의 구조는 상기와 같고, (piq)₂Ir(acac)의 구조는 다음과 같다.

[681]



[682]

[683] [평가예2]

[684] 실시예 35 내지 67 및 비교예 2에서 각각 제작된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 발광피크 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[685]

[686] [표2]

샘플	호스트	구동전압 (V)	발광피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 35	R2	4.2	621	15.4
실시예 36	R5	4.3	621	15.2
실시예 37	R25	4.1	621	15.7
실시예 38	R27	4.5	621	15.8
실시예 39	R30	4.5	621	14.8
실시예 40	R50	4.3	621	14.9
실시예 41	R77	4.2	621	15.3
실시예 42	R80	4.3	621	15.4
실시예 43	R100	4.4	621	15.3
실시예 44	R102	4.3	621	15.5
실시예 45	R105	4.2	621	15.7
실시예 46	R125	4.5	621	16.1
실시예 47	R127	4.2	621	15.8
실시예 48	R130	4.2	621	15.9
실시예 49	R150	4.1	621	16.3
실시예 50	R152	4.4	621	14.5
실시예 51	R155	4.2	621	15.7
실시예 52	R175	4.0	621	16.1
실시예 53	R177	4.1	621	16.3
실시예 54	R180	4.8	621	15.7
실시예 55	R200	4.2	621	15.9
실시예 56	R202	3.5	621	14.8
실시예 57	R205	3.3	621	15.7
실시예 58	R225	3.5	621	15.2
실시예 59	R227	4.3	621	17.5
실시예 60	R230	4.4	623	16.6
실시예 61	R250	4.5	621	16.8
실시예 62	R252	3.6	621	15.1

실시예 63	R255	3.3	621	15.3
실시예 64	R275	3.5	621	15.4
실시예 65	R277	4.0	621	17.2
실시예 66	R280	4.2	621	16.8
실시예 67	R300	4.1	621	18.5
비교예 2	CBP	5.7	622	9.2

[687] 상기 표2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층에 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(실시예 35 내지 67)는 종래 CBP를 발광층에 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(비교예2)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[688]

[689] [실시예 68 내지 71] 정공 수송층 유기 전계 발광 소자의 제작

[690] 합성예에서 합성된 화합물 R301, R306, R311, R316을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[691] 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 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[692] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/각각의 화합물 R301, R306, R311, R316 (80 nm)/DS-H522 + 5% DS-501 (주)두산전자, 300 nm)/BCP (10 nm)/ Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순서로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[693]

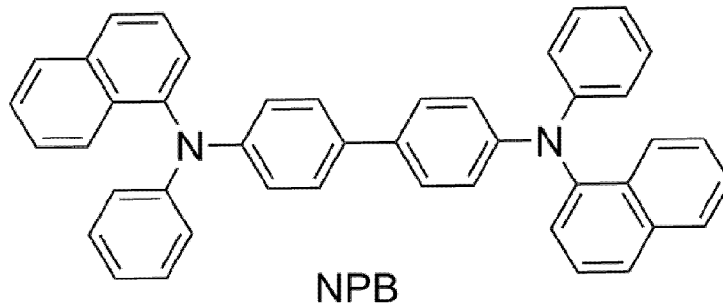
[694] [비교예 3]

[695] 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 R301 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 68과 동일한 과정으로 정공 수송층 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[696]

[697] 상기 실시예 68 내지 71 및 비교예 3에 사용된 m-MTDATA, CBP, BCP 및 Alq₃의 구조는 상기와 같고, NPB의 구조는 다음과 같다.

[698]



[699]

[700] [평가예 3]

[701] 실시예 68 내지 71 및 비교예 3에서 각각 제작한 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[702] [표3]

샘플	정공 수송층	구동전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 68	R301	4.4	22.7
실시예 69	R306	4.4	22.9
실시예 70	R311	4.3	24.5
실시예 71	R316	3.7	21.3
비교예 3	NPB	5.3	18.1

[703] 상기 표3에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 정공 수송층에 사용한 유기 전계 발광 소자(실시예 68 내지 71)는 종래 NPB를 정공 수송층에 사용한 유기 전계 발광 소자(비교예3)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[704]

[705] [실시예 72 내지 96] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[706] 합성예에서 합성된 화합물 R1, R20, R26, R50, R59, R76, R95, R101, R120, R126, R145, R151, R170, R176, R195, R201, R220, R226, R245, R251, R270, R276, R295, R301, R316을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[707] 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.

[708] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (주)두산전자, 80 nm)/NPB (15 nm)/ADN + 5 % DS-405 (주)두산전자, 30 nm)/각각의 화합물 R1, R20, R26, R50,

R59, R76, R95, R101, R120, R126, R145, R151, R170, R176, R195, R201, R220, R226, R245, R251, R270, R276, R295, R301, R316/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[709]

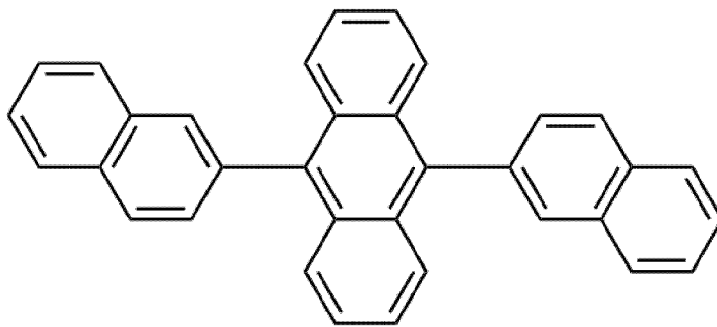
[710] **[비교예 4] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[711] 수명 개선층을 포함하지 않고, 전자 수송층 물질인 Alq₃을 30nm로 증착하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 72과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[712]

[713] 상기 실시예 72 내지 96 및 비교예 4에서 사용된 NPB 및 Alq₃의 구조는 상기과 같고, ADN의 구조는 다음과 같다.

[714]



ADN

[715]

[716] **[평가예 4]**

[717] 실시예 72 내지 96 및 비교예 4에서 각각 제작된 청색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

[718] [표4]

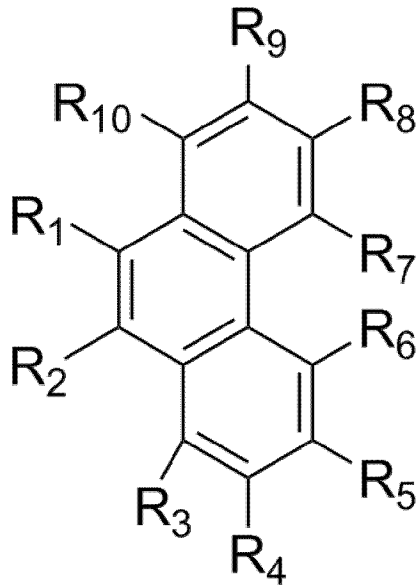
샘플	전자 수송층	구동전압 (V)	전류효율 (cd/A)	발광피크 (nm)
실시예 72	R1	3.9	9.3	456
실시예 73	R20	3.6	7.5	458
실시예 74	R26	3.8	8.3	458
실시예 75	R50	3.3	6.9	458
실시예 76	R59	3.3	8.8	458
실시예 77	R76	4.0	6.7	459
실시예 78	R95	3.5	8.0	458
실시예 79	R101	3.9	6.9	458
실시예 80	R120	3.2	7.8	458
실시예 81	R126	3.8	6.5	458
실시예 82	R145	3.1	7.9	456
실시예 83	R151	3.9	7.1	458
실시예 84	R170	3.2	7.8	458
실시예 85	R176	3.8	7.5	458
실시예 86	R195	3.3	7.7	459
실시예 87	R201	3.9	7.1	458
실시예 88	R220	3.2	7.2	458
실시예 89	R226	4.0	7.4	457
실시예 90	R245	3.2	8.1	458
실시예 91	R251	3.9	6.5	458
실시예 92	R270	3.1	7.6	458
실시예 93	R276	3.8	6.9	458
실시예 94	R295	3.3	7.8	459
실시예 95	R301	3.9	6.9	456
실시예 96	R316	3.3	7.1	458
비교예 4	Alq ₃	4.7	5.6	458

[719] 상기 표4에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 전자 수송층에 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(실시예 72 내지 96)는 종래 Alq₃를 전자 수송층에

사용한 청색 유기 전계 발광 소자(비교예4)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:
[화학식 1]

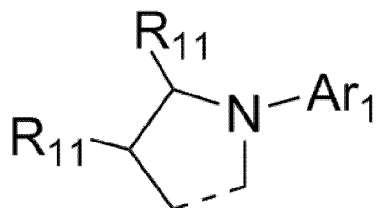


상기 화학식 1에서,

R_1 과 R_2 , R_2 과 R_3 , R_3 과 R_4 , R_4 과 R_5 , R_5 과 R_6 , R_6 과 R_7 , R_7 과 R_8 , R_8 과 R_9 , R_9 과 R_{10} 및 R_{10} 과 R_1 중 적어도 하나 이상은 하기 화학식 2와 축합고리를 형성하고;

축합고리를 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{10} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

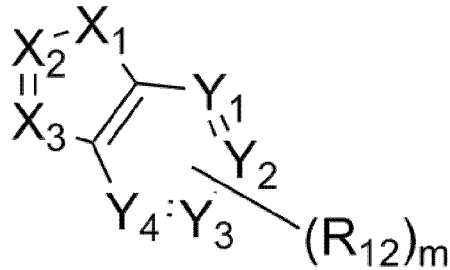
[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 화학식 1과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며;

R_{11} 는 하기 화학식 3의 R_{12} 와 결합하여 축합고리를 형성하고;
[화학식 3]



X_1 내지 X_3 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_2), C(Ar_3)(Ar_4) 및 Si(Ar_5)(Ar_6)로 이루어진 군에서 선택되고;

Y_1 내지 Y_4 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C이고;

m 은 2 내지 4의 정수이며;

R_{12} 는 각각 R_{11} 과 서로 결합하여 축합고리를 형성하고;

축합고리를 비(非)형성하는 R_{12} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

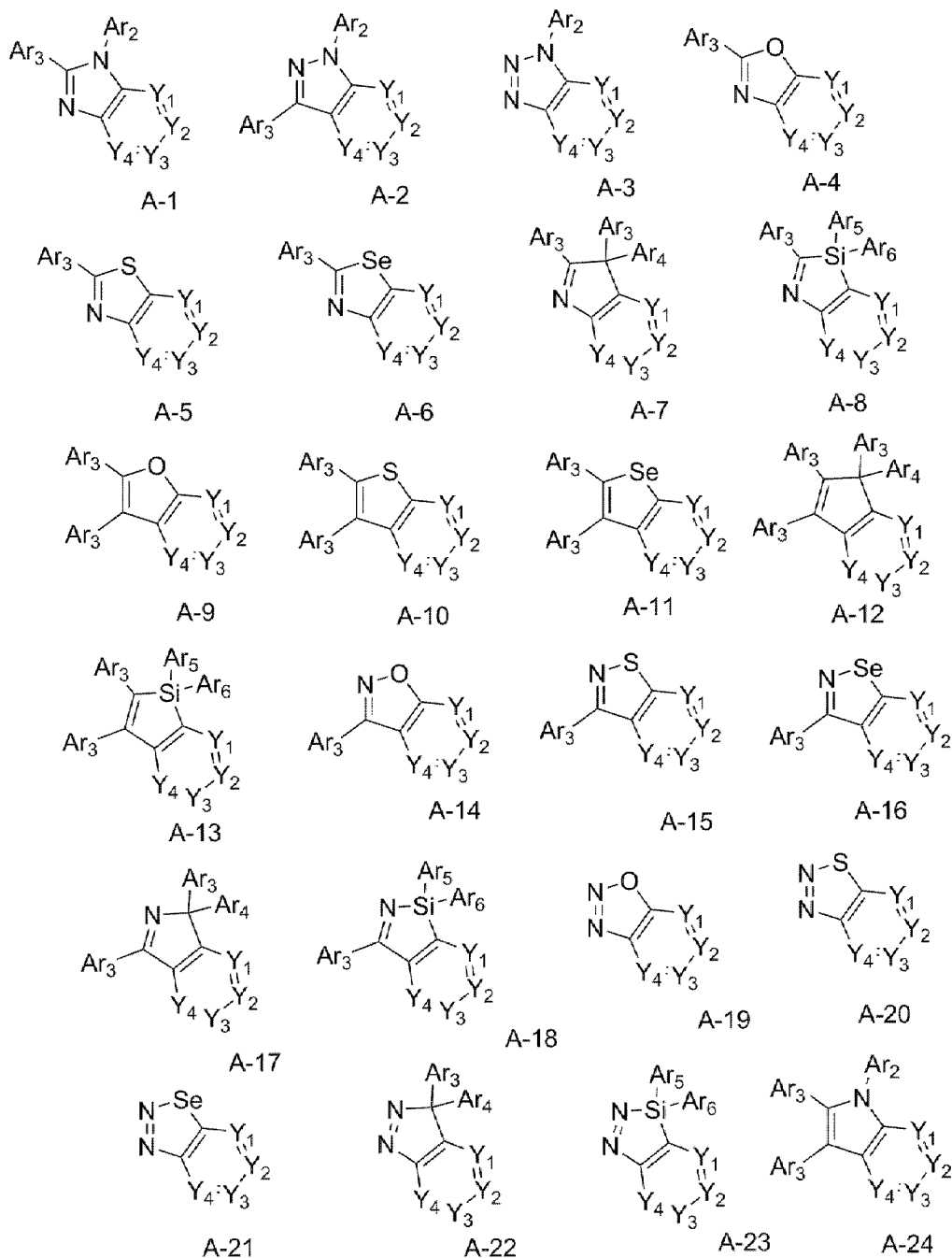
상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$

의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

[청구항 2]

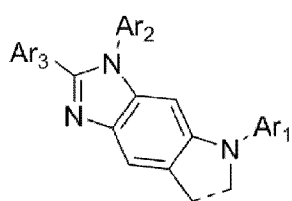
제1항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-24 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

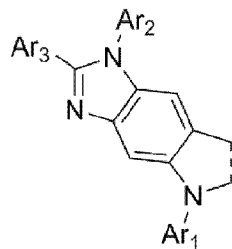


상기 화학식 A-1 내지 A-24에서,

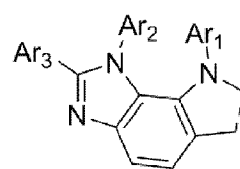
[청구항 3] Y_1 내지 Y_4 및 Ar_1 내지 Ar_6 는 각각 제1항에서 정의한 바와 같다.
제1항에 있어서,
상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-72 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.



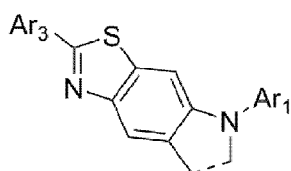
B-1



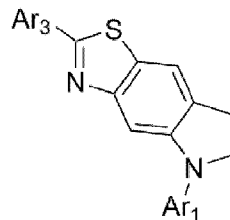
B-2



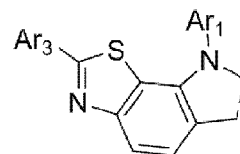
B-3



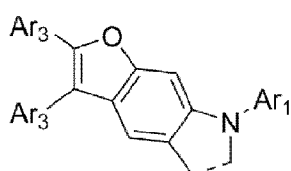
B-4



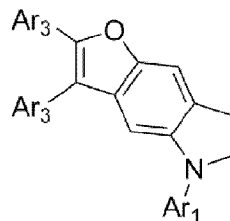
B-5



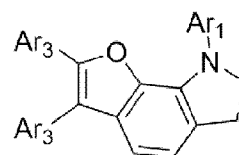
B-6



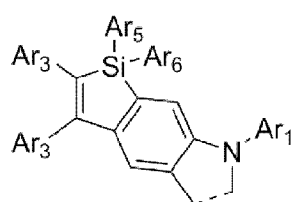
B-7



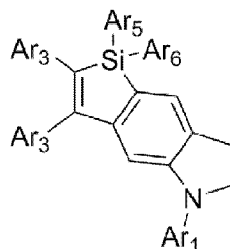
B-8



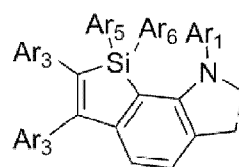
B-9



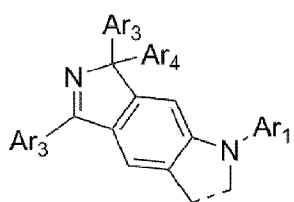
B-10



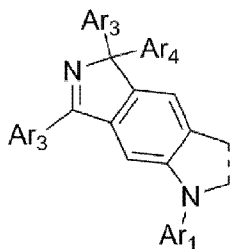
B-11



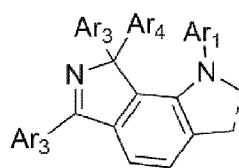
B-12



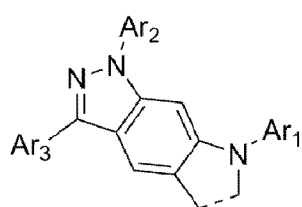
B-13



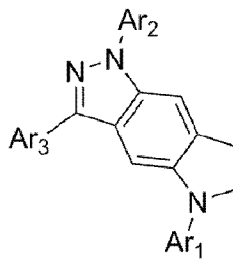
B-14



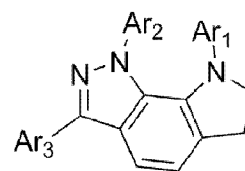
B-15



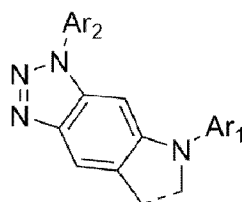
B-16



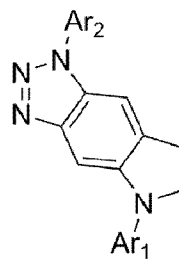
B-17



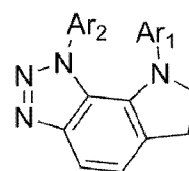
B-18



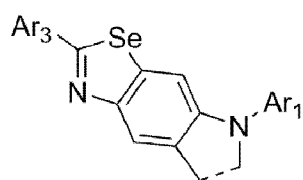
B-19



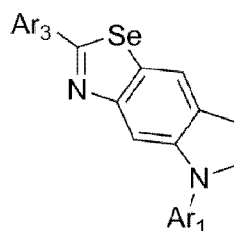
B-20



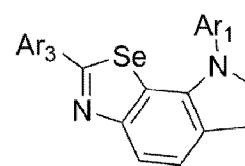
B-21



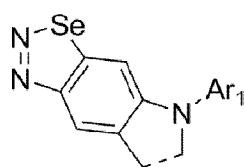
B-22



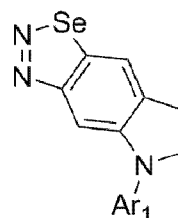
B-23



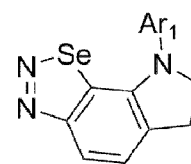
B-24



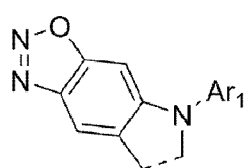
B-25



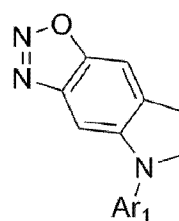
B-26



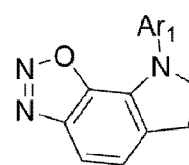
B-27



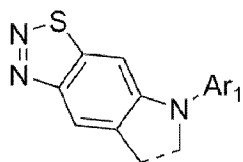
B-28



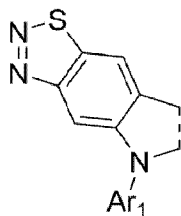
B-29



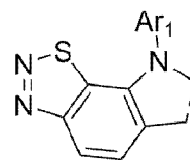
B-30



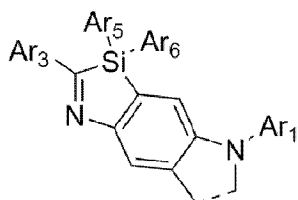
B-31



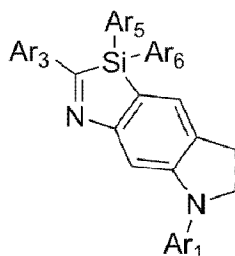
B-32



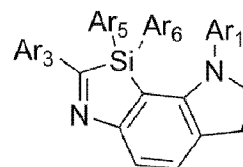
B-33



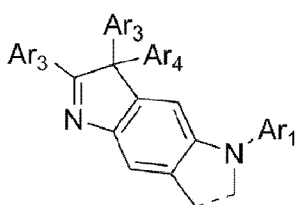
B-34



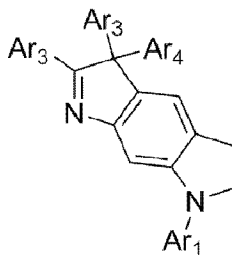
B-35



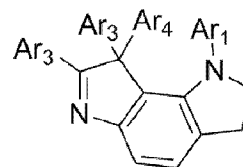
B-36



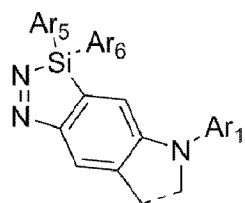
B-37



B-38



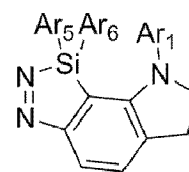
B-39



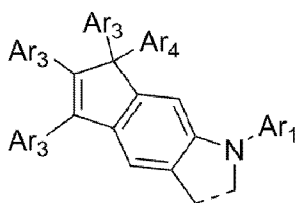
B-40



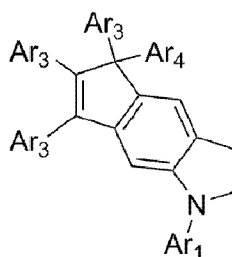
B-41



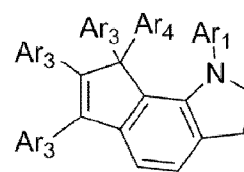
B-42



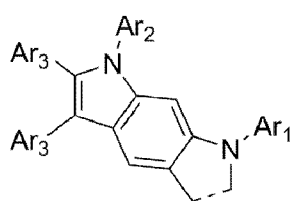
B-43



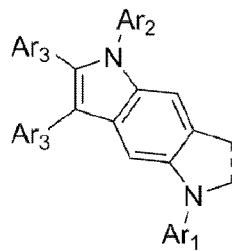
B-44



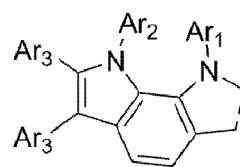
B-45



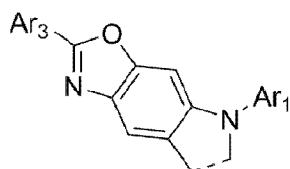
B-46



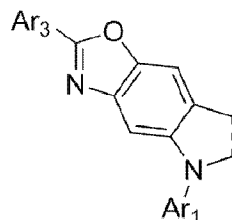
B-47



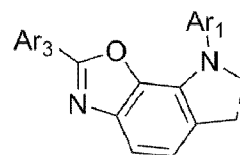
B-48



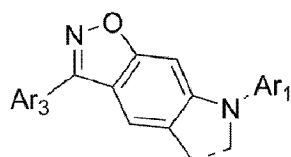
B-49



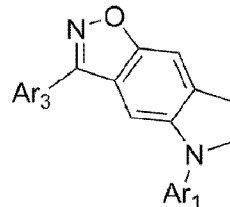
B-50



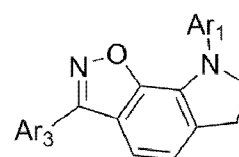
B-51



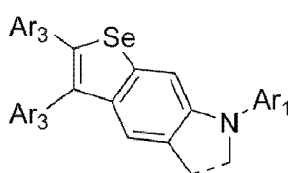
B-52



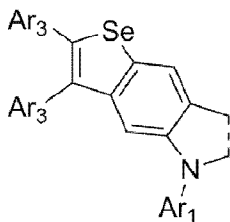
B-53



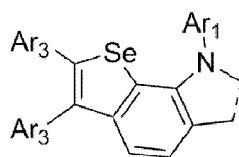
B-54



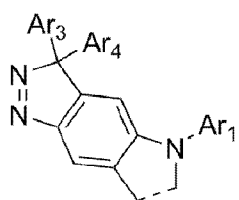
B-55



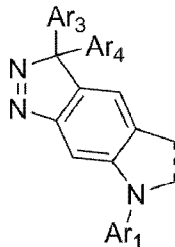
B-56



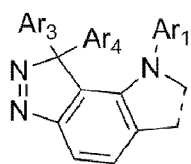
B-57



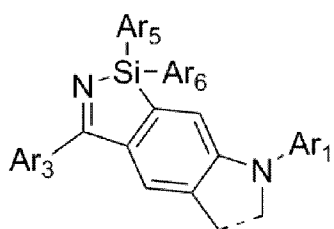
B-58



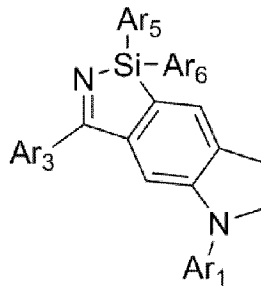
B-59



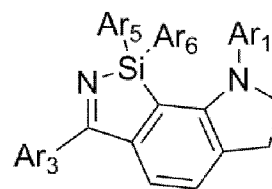
B-60



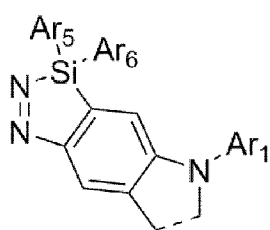
B-61



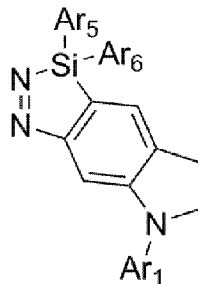
B-62



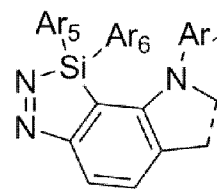
B-63



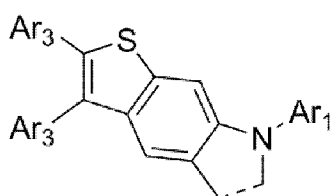
B-64



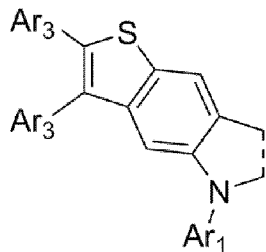
B-65



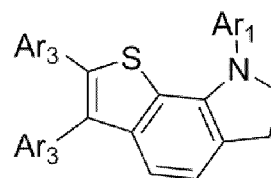
B-66



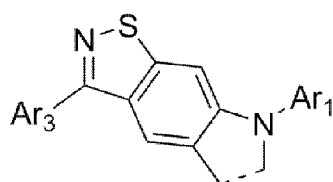
B-67



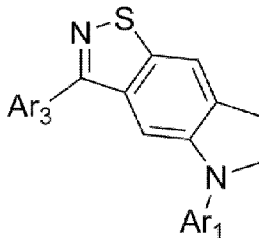
B-68



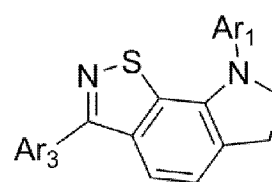
B-69



B-70



B-71



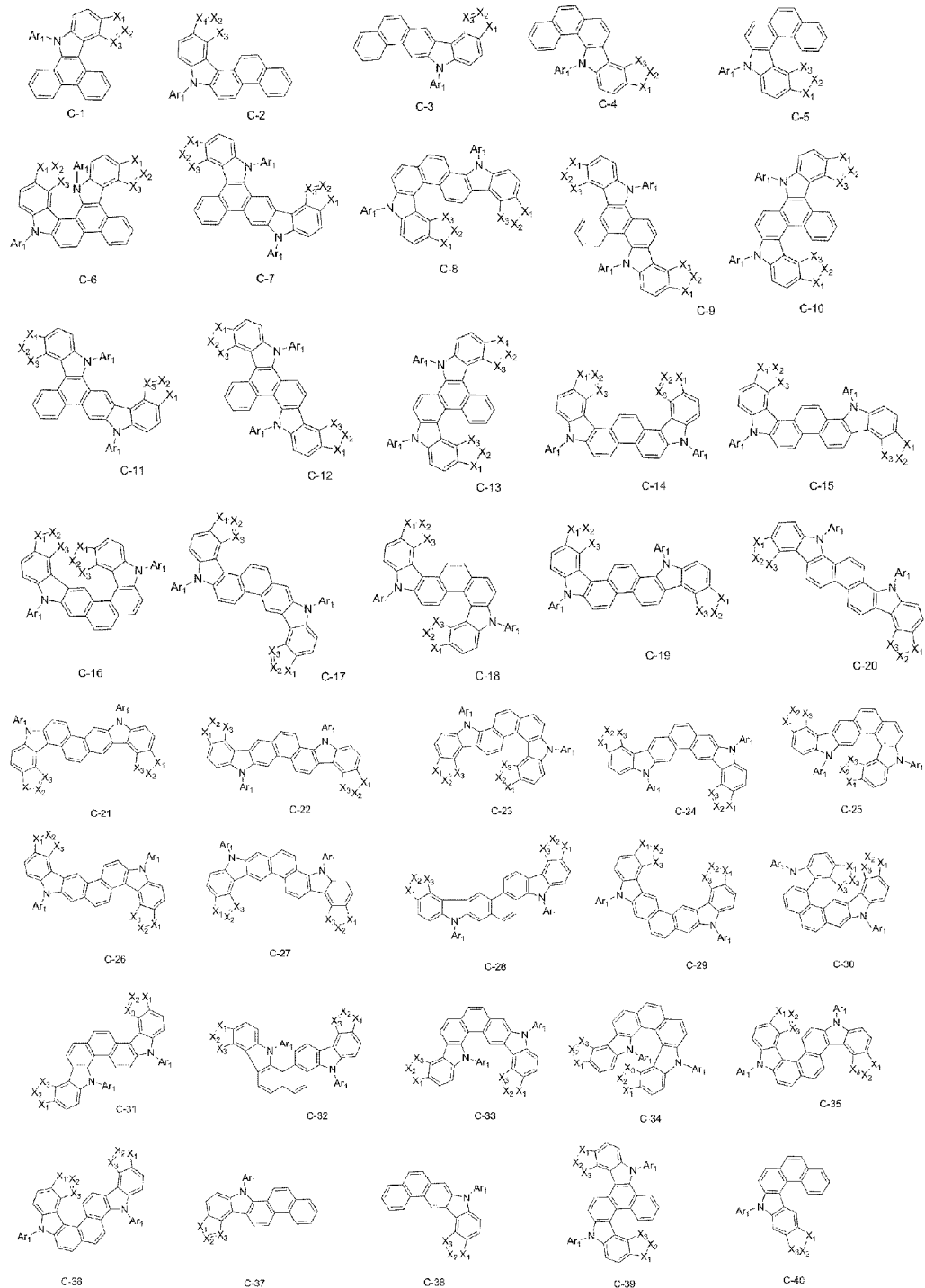
B-72

상기 화학식 B-1 내지 B-72에서,
Ar₁ 내지 Ar₆는 각각 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 4]

제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-40 중 어느

하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.



상기 화학식 C-1 내지 C-40에서,

X₁ 내지 X₃ 및 Ar₁는 각각 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 5]

제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₁₀ 및 R₁₂는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

상기 Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

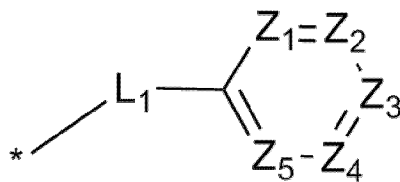
상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 5로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

*는 상기 화학식 1 내지 3에 결합되는 부분을 의미하고;

L_1 은 단일결합이거나, 또는 $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 C(R_{13})이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 상기 R_{13} 가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하고;

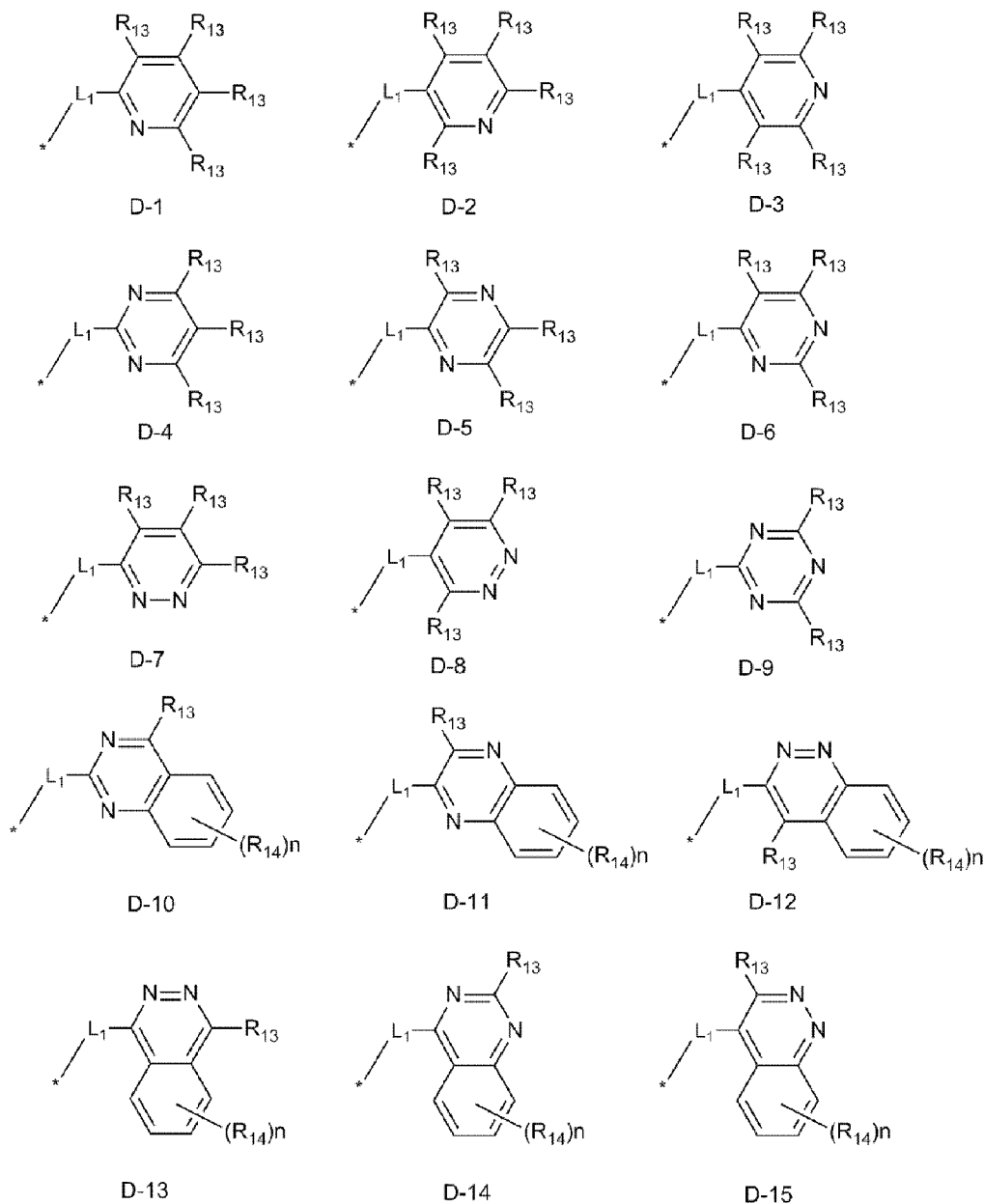
R_{13} 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{13} 은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_{13} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기,

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

[청구항 7]

제6항에 있어서,
상기 화학식 5의 치환체는 하기 화학식 D-1 내지 D-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.



상기 화학식 D-1 내지 D-15에서,

L_1 은 및 R_{13} 은 각각 제6항에서 정의한 바와 같고;

n 은 0 내지 4의 정수이며;

R_{14} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{14} 은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 이때 상기 R_{13} 가

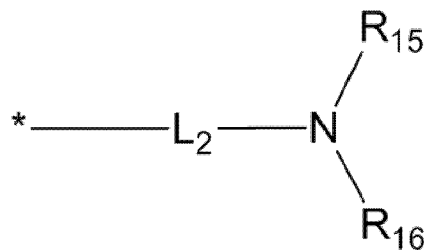
복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
 상기 R_{14} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기,
 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,
 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기,
 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소,
 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$
 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$
 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의
 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의
 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나
 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나
 또는 상이할 수 있다.

[청구항 8]

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{10} , R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 6으로
 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 6]



상기 화학식 6에서,

*는 상기 화학식 1 내지 3에 결합되는 부분을 의미하고;

L_2 은 단일결합이거나, 또는 $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의
 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

R_{15} 및 R_{16} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의
 알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의
 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 R_{15} 및 R_{16} 가 서로
 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

상기 L_2 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_{15} 및 R_{16} 의 알킬기, 아릴기,
 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠,
 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의
 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의
 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의

알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

- [청구항 9] 제1항에 있어서,
상기 X_1 내지 X_3 중 하나는 $N(Ar_1)$ 이며, 나머지는 O, S, Se, $N(Ar_2)$, $C(Ar_3)(Ar_4)$ 및 $Si(Ar_5)(Ar_6)$ 로 이루어진 군에서 선택되고;
상기 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 제1항에서 정의한 바와 같은 것을 특징으로 하는 화합물.
- [청구항 10] (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,
상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 11] 제10항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층의 인광 호스트로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 12] 제10항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층 및 정공 수송층인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/012227

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 487/04(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 487/04; C07D 513/04; C07D 417/04; C07D 209/82; C07D 403/04; C07D 401/04; C07D 403/10; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus, Marpat), Google & Keywords: OLED, organic light device, phosphorescence host, phenanthrene

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2014-0080683 A (DOOSAN CORP.) 01 July 2014 See abstract; chemical formula 1; compounds 61-70, 141-150, 201-210; and claims 1-9.	1-12
X	Chemical Abstract compounds, STN express, RN 1535963-48-4 (Entered STN: 03 February 2014) See structure.	1,2,4,8,9
X	KR 10-2014-0006201 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 16 January 2014 See abstract; chemical formula 1; compounds 2-24, 2-25, 4-24, 4-25, 5-24, 6-24, 6-25; paragraph [0184]; and claims 1-8.	1-12
X	KR 10-2013-0139412 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 23 December 2013 See abstract; chemical formulas 4, 7, 9; paragraph [0250]; and claims 1-12.	1-12
X	Chemical Abstract compounds, STN express, RNs 1454566-18-7, 1454565-71-9 (Entered STN: 30 September 2013); and RNs 1454283-40-9, 1454283-39-6 (Entered STN: 27 September 2013) See structure.	1,2,4,9



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

07 FEBRUARY 2017 (07.02.2017)

Date of mailing of the international search report

07 FEBRUARY 2017 (07.02.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/012227

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2014-0080683 A	01/07/2014	KR 10-1577101 B1 WO 2014-092478 A1	14/12/2015 19/06/2014
KR 10-2014-0006201 A	16/01/2014	WO 2014-003336 A1	03/01/2014
KR 10-2013-0139412 A	23/12/2013	KR 10-2013-0092939 A KR 10-2013-0093460 A KR 10-2013-0093541 A KR 10-2014-0064463 A WO 2013-122364 A2 WO 2013-122364 A3	21/08/2013 22/08/2013 22/08/2013 28/05/2014 22/08/2013 10/10/2013

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 487/04(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 401/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 487/04; C07D 513/04; C07D 417/04; C07D 209/82; C07D 403/04; C07D 401/04; C07D 403/10; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/00; 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 내부검색 시스템), STN (Registry, Caplus, Marpat), Google & 키워드: OLED, 유기광소자, 인광 호스트, 페난트렌

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2014-0080683 A (주식회사 두산) 2014.07.01 요약; 화학식 1; 화합물 61-70, 141-150, 201-210; 및 청구항 1-9 참조.	1-12
X	Chemical Abstract 화합물, STN express, RN 1535963-48-4 (Entered STN: 2014.02.03) 구조 참조.	1,2,4,8,9
X	KR 10-2014-0006201 A (덕산하이메탈(주)) 2014.01.16 요약; 화학식 1; 화합물 2-24, 2-25, 4-24, 4-25, 5-24, 5-25, 6-24, 6-25; 단락 [0184]; 및 청구항 1-8 참조.	1-12
X	KR 10-2013-0139412 A (덕산하이메탈(주)) 2013.12.23 요약; 화학식 4, 7, 9; 단락 [0250]; 및 청구항 1-12 참조.	1-12
X	Chemical Abstract 화합물, STN express, RNs 1454566-18-7, 1454565-71-9 (Entered STN: 2013.09.30.); 및 RNs 1454283-40-9, 1454283-39-6 (Entered STN: 2013.09.27) 구조 참조.	1,2,4,9

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 02월 07일 (07.02.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 02월 07일 (07.02.2017)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

박정민

전화번호 +82-42-481-3516



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2014-0080683 A	2014/07/01	KR 10-1577101 B1 WO 2014-092478 A1	2015/12/14 2014/06/19
KR 10-2014-0006201 A	2014/01/16	WO 2014-003336 A1	2014/01/03
KR 10-2013-0139412 A	2013/12/23	KR 10-2013-0092939 A KR 10-2013-0093460 A KR 10-2013-0093541 A KR 10-2014-0064463 A WO 2013-122364 A2 WO 2013-122364 A3	2013/08/21 2013/08/22 2013/08/22 2014/05/28 2013/08/22 2013/10/10