

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 10월 12일 (12.10.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/175985 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 495/04 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 491/048 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 209/56 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2017/002821
- (22) 국제출원일: 2017년 3월 16일 (16.03.2017)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2016-0042331 2016년 4월 6일 (06.04.2016) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김홍석 (KIM, Hongsuk); 16858 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR).
라종규 (LA, Jonggyu); 16858 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 윤여광 (YOON, Yu Kwang) 등; 03737 서울시 서대문구 충정로 7, 구세군빌딩 15층, 위더피플법률사무소, 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, KH, 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:

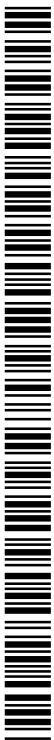
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE DEVICE COMPRISING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic compound and an organic electroluminescence device comprising same, and the compound according to the present invention is used in an organic layer, and desirably, in a light-emitting layer in the organic electroluminescence device, thereby improving the light-emitting efficiency, the driving voltage, and life, among other characteristics, of the organic electroluminescence device.

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



WO 2017/175985 A1

명세서

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

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

배경기술

- [2] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 상기 유기물층에 포함되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [3] 상기 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색의 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색의 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한 색순도의 증가와 에너지 전이를 통해 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [4] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이때 인광 도판트는 이론적으로 형광 도판트에 비해 최대 4배의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에 인광 도판트뿐만 아니라 인광 호스트에 대한 연구가 많이 진행되고 있다.
- [5] 현재 발광층에 사용되는 형광 도판트/호스트 물질로는 안트라센 유도체들이 알려져 있다. 또한 발광층에 사용되는 인광 도판트 물질로는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등의 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 알려져 있고, 인광 호스트 물질로는 4,4-dicarbazolybiphenyl(CBP)가 알려져 있다.
- [6] 그러나 기존의 재료들은 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 좋지 않아 유기 전계 발광 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있으며, 발광 특성 측면에서도 여전히 개선이 필요하다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [7] 본 발명은 발광능, 정공 수송능 및 정공 주입능 등이 우수하여 유기물층의 재료로 사용될 수 있는 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [8] 또, 본 발명은 상기 유기 화합물을 포함하여 구동전압이 낮고, 발광 효율이 높으며, 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것도 목적으로 한다.

[19] 상기 A의 5원 고리화, 상기 Ar₁의 아릴기 및 헤테로아릴기와, 상기 L₁ 및 L₂의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, 상기 R₁ 내지 R₇의 아릴기 및 헤테로아릴기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₂~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수

있다.

- [20] 또한, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나가 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [21] 한편, 본 발명에서 알킬은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [22] 본 발명에서 아릴은 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. 이의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [23] 본 발명에서 헤테로아릴은 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. 이의 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-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [24] 본 발명에서 아릴옥시는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60의 아릴을 의미한다. 이의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [25] 본 발명에서 알킬옥시는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [26] 본 발명에서 아릴아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [27] 본 발명에서 시클로알킬은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [28] 본 발명에서 헤테로시클로알킬은 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. 이의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [29] 본 발명에서 알킬실릴은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, 아릴실릴은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

발명의 효과

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

발명의 실시를 위한 형태

- [32] 이하, 본 발명에 대해 설명한다.

[33]

[34] 1. 신규 유기 화합물

- [35] 본 발명의 유기 화합물은 '피리미딘과 5원 고리(A)가 축합된 모이어티'에 카바졸 모이어티, 디메틸플루오렌(dimethylfluorene) 모이어티, 디벤조티오펜(dibenzothiophene) 모이어티, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 모이어티, 디메틸아크리딘(dimethylacridine) 모이어티, 티안트렌(thianthrene) 모이어티, 디벤조디옥사인(dibenzodioxin) 모이어티, 스피로플루오렌(spirofluorene) 등이 결합된 구조를 기본 골격으로 가지는 화합물로, 상기 화학식 1로 표시된다.

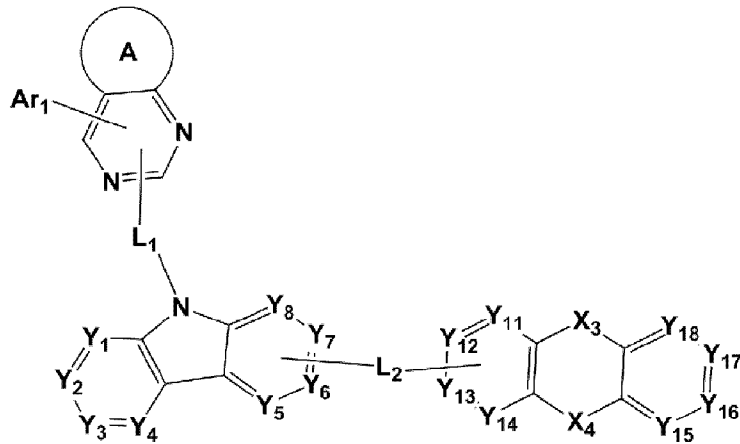
- [36] 보다 구체적으로, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 피리미딘에 사이클로펜탄, 퓨란, 피라졸, 이미다졸, 옥사졸, 싸이오펜 등과 같은 5원 고리(A)가 결합되는데, 퀴나졸린과 유사한 에너지 준위를 갖기 때문에 도펀트의 에너지 준위에 비해 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있고, 퀴나졸린이 결합된 구조 보다 높은 삼중항 에너지를 가지기 때문에 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료로 사용시 우수한 효율 상승을 기대할 수 있다. 특히, 피리미딘에 싸이오펜이 결합된 화합물은 피리미딘에 다른 5원 고리가 결합된 화합물에 비해 장파장을 나타낼 수 있다. 또한, 상기 5원 고리(A)에 아릴기(예컨대, 페닐, 비페닐)가 도입될 경우, 반응 위치를 막아서 열안정성이 향상된다.

- [37] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 분자량 및 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수하다. 또한 좁은 밴드갭과 유기물층의 호스트 재료에 적합한 HOMO, LUMO 에너지 준위를 가지기 때문에 캐리어 수송성 및 발광 특성도 우수하다. 더불어, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 기본

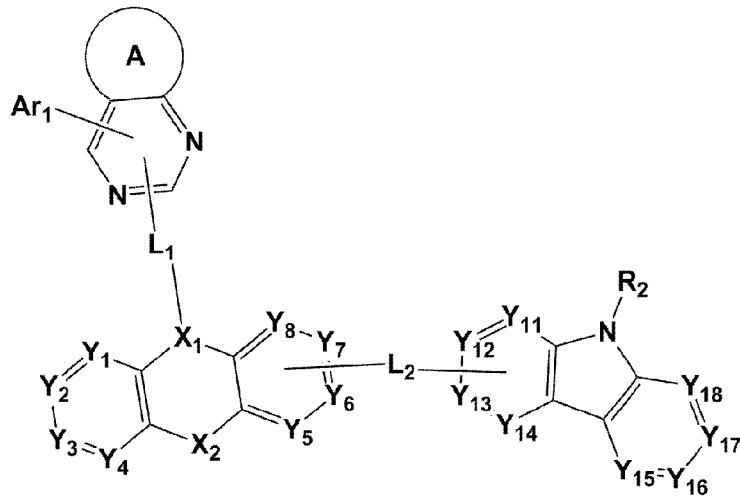
골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주개기(EDG)가 결합되기 때문에 유기물층의 재료로 사용할 경우, 정공의 주입 및 수송을 원활히 이루어지게 할 수 있다.

- [38] 따라서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료 및 정공 수송/주입층 재료, 발광 보조층 재료, 수명 개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광 보조층 재료, 수명 개선층 재료로 유용하게 사용될 수 있다.
- [39] 한편, 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. 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 갖는 인다졸, 이미다졸, 옥사졸 및 싸이오펜 등의 모이어티가 결합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기가 도입되어 있어 에너지 준위가 도펀트보다 높기 때문에 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [40] 또한, 본 발명의 화합물은 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자 수송층 또는 정공 수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 존재하는 유기물층(발광 보조층)을 형성할 경우, 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다.
- [41] 또한, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 존재하는 유기물층(수명 개선층)을 형성할 경우에도, 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에 유기 전계 발광 소자의 내구성, 안정성 및 수명이 개선될 수 있다.
- [42] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 5로 표시되는 화합물로 구체화될 수 있다.

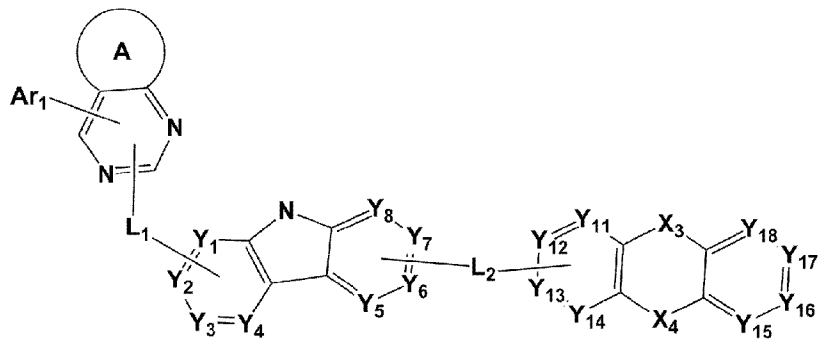
[43] [화학식2]



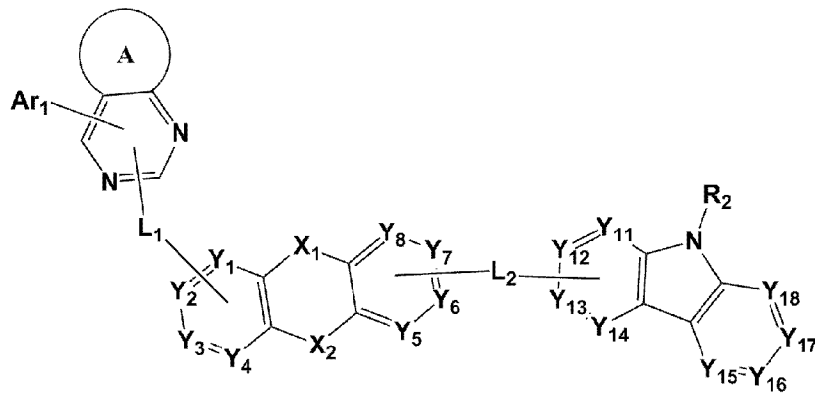
[44] [화학식3]



[45] [화학식4]



[46] [화학식5]

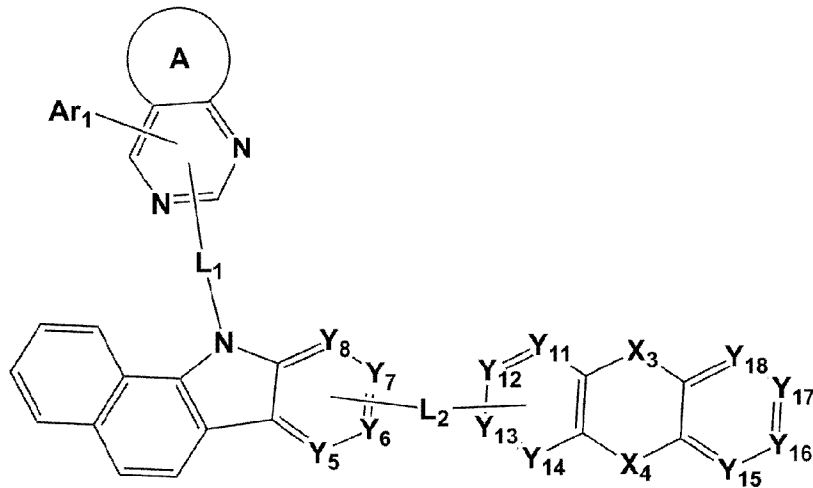


[47] 상기 화학식 2 내지 5에서,

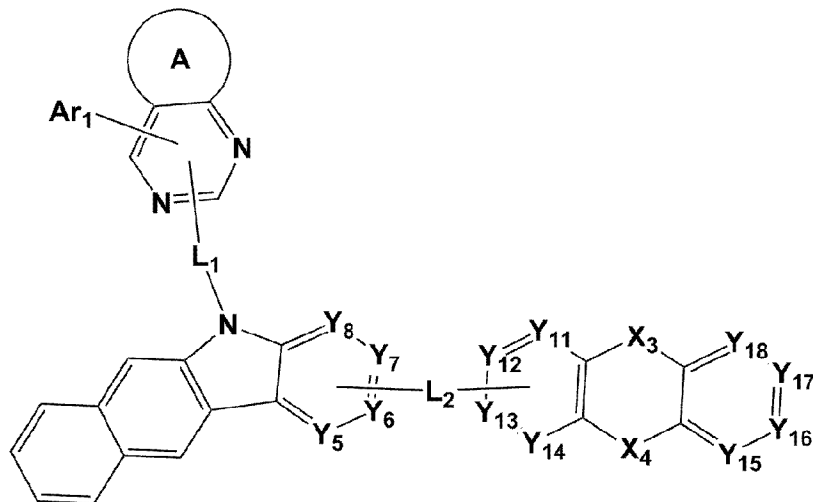
[48] A, Ar₁, X₁ 내지 X₄, Y₁ 내지 Y₈, Y₁₁ 내지 Y₁₈, L₁, L₂ 및 R₂에 대한 설명은 상기 화학식 1에 대해서 정의한 바와 같다.

[49] 구체적으로, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 6 내지 8로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

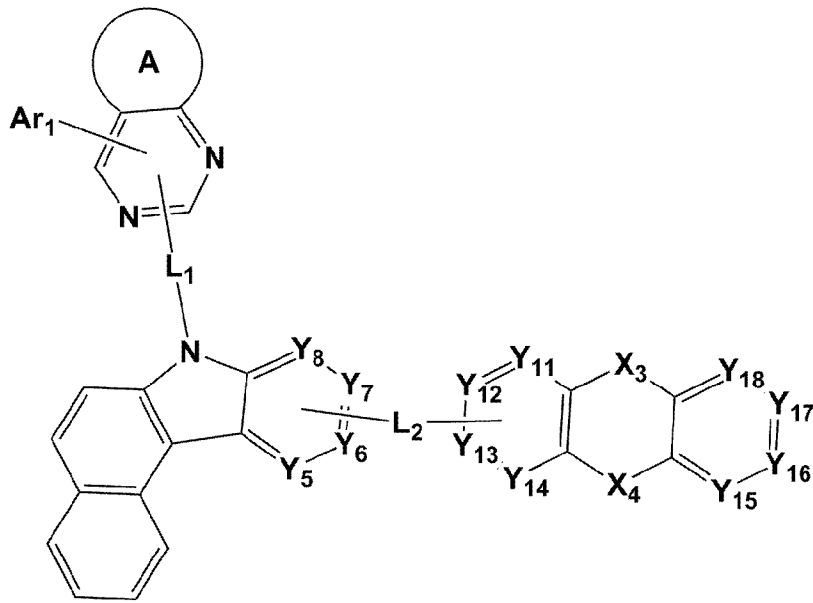
[50] [화학식6]



[51] [화학식7]



[52] [화학식8]

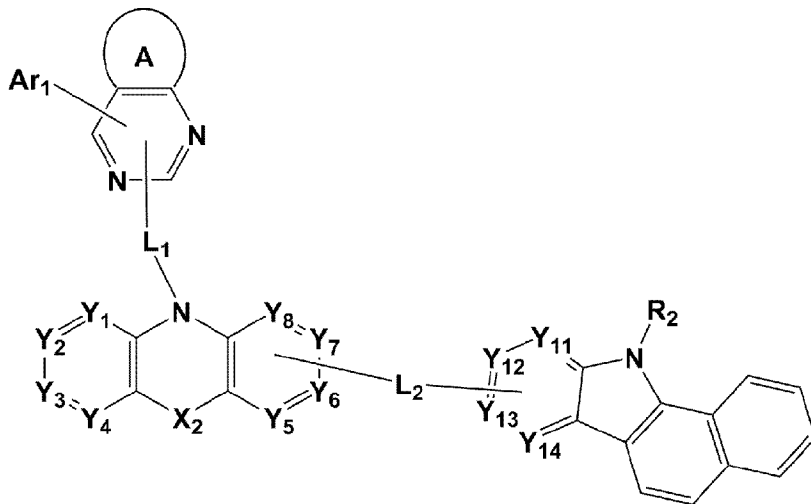


[53] 상기 화학식 6 내지 8에서,

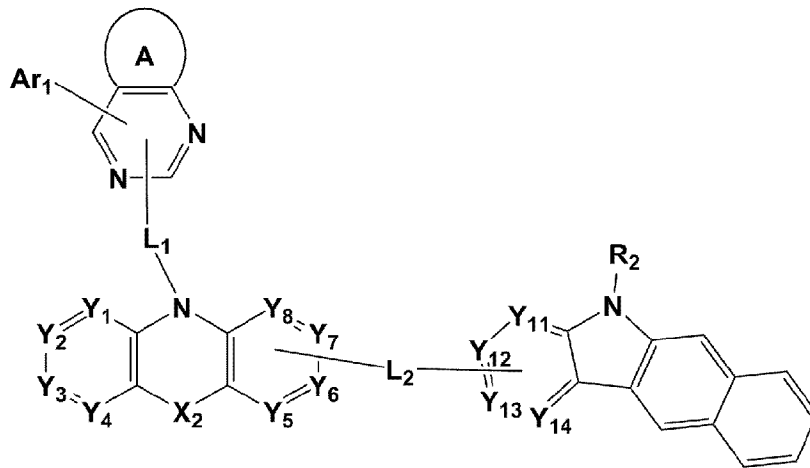
[54] A, Ar₁, X₃, X₄, Y₅ 내지 Y₈, L₁, L₂ 및 Y₁₁ 내지 Y₁₈에 대한 설명은 상기 화학식 1에 대해서 정의한 바와 같다.

[55] 또한, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 9 내지 11로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

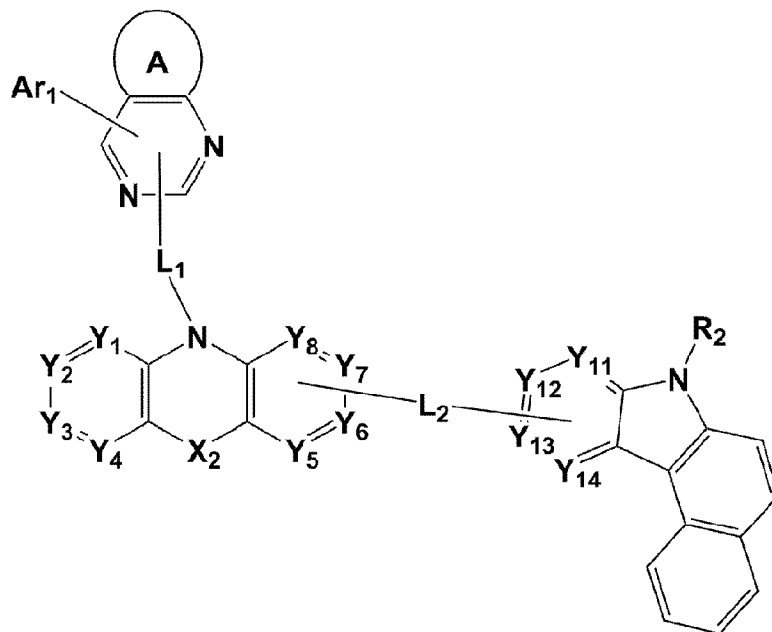
[56] [화학식9]



[57] [화학식 10]



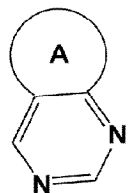
[58] [화학식 11]



[59] 상기 화학식 9 내지 11에서,

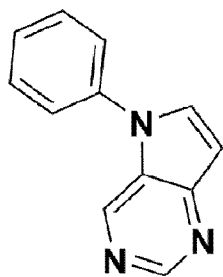
[60] A, Ar₁, X₁, X₂, Y₅ 내지 Y₈, Y₁₁ 내지 Y₁₈, L₁, L₂ 및 R₂에 대한 설명은 상기 화학식 1에 대해서 정의한 바와 같다.

[61] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물에서,

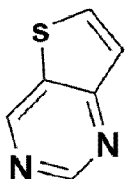


로 표시되는 모이어티는 하기 S-1 내지 S-8로 표시되는 모이어티로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

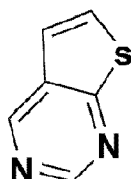
[62]



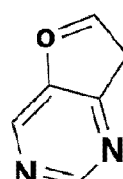
S-1



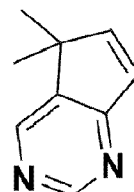
S-2



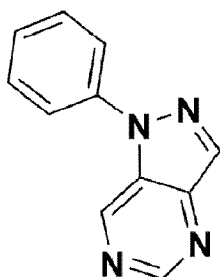
S-3



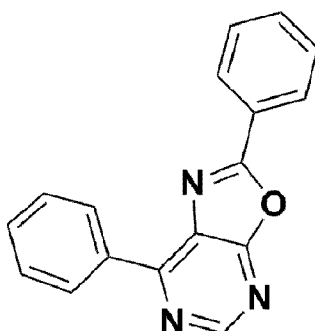
S-4



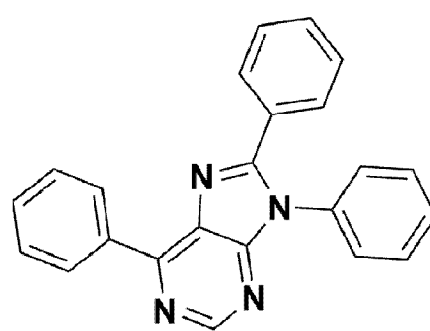
S-5



S-6



S-7

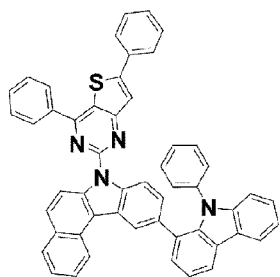


S-8

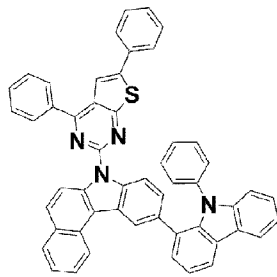
[63]

이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 R1 내지 R620으로 구체화될 수 있으나, 이들로 한정되는 것은 아니다.

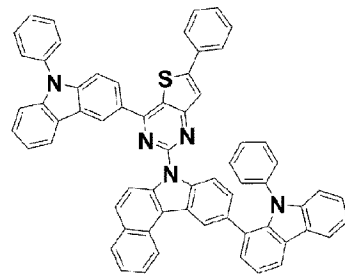
[64]



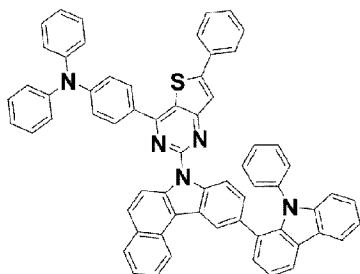
R1



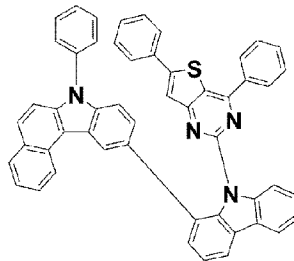
R2



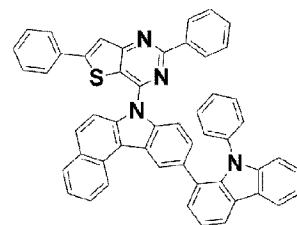
R3



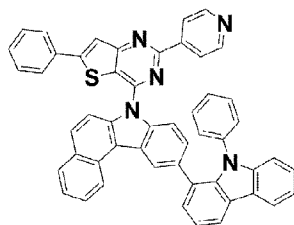
R4



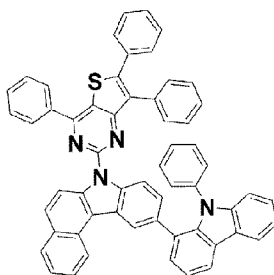
R5



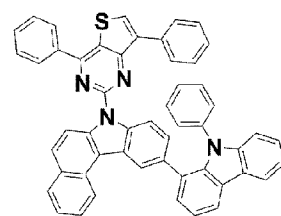
R6



R7

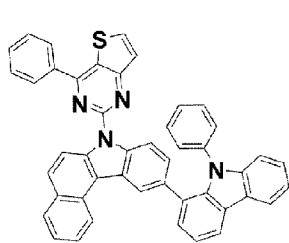


R8

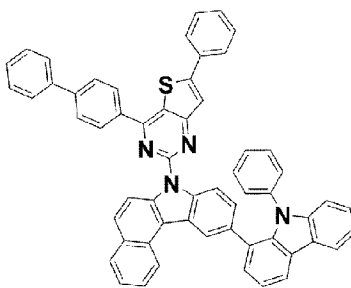


R9

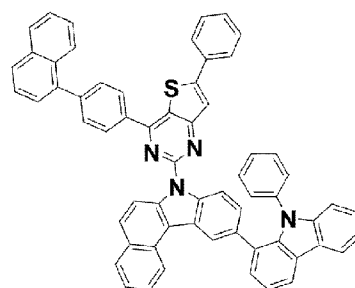
[65]



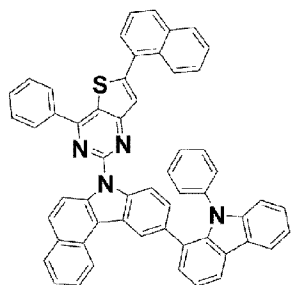
R10



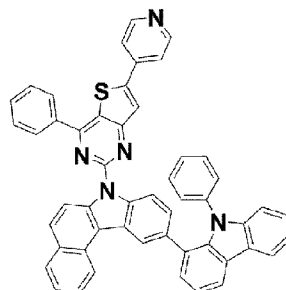
R11



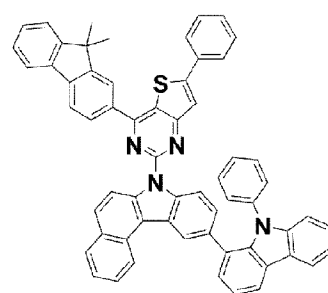
R12



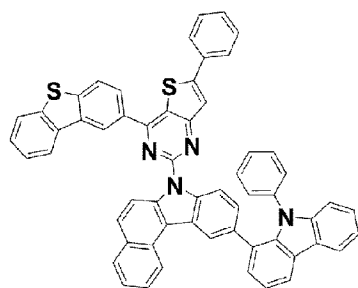
R13



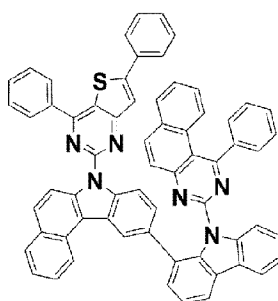
R14



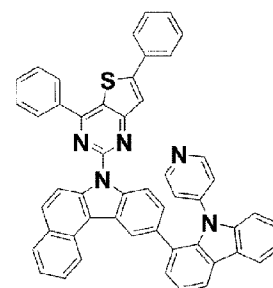
R15



R16

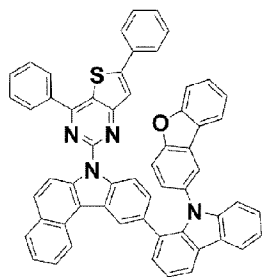


R17

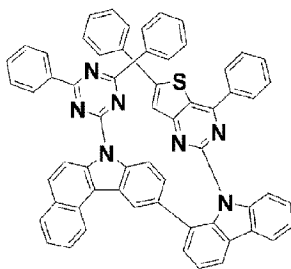


R18

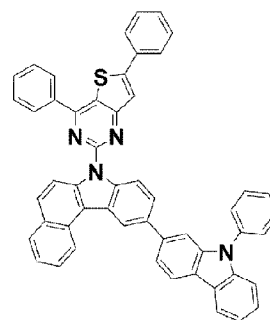
[66]



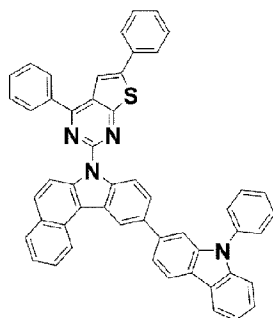
R19



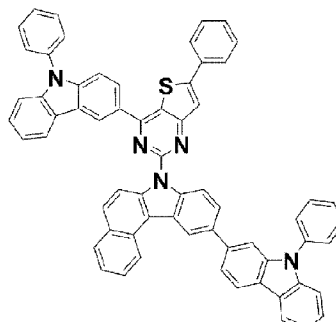
R20



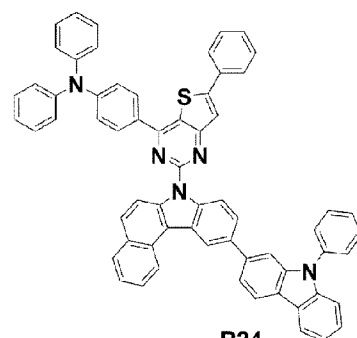
R21



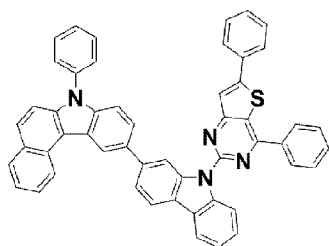
R22



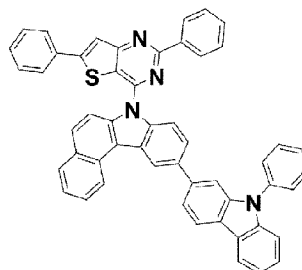
R23



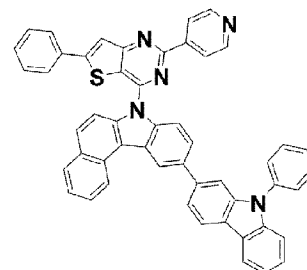
R24



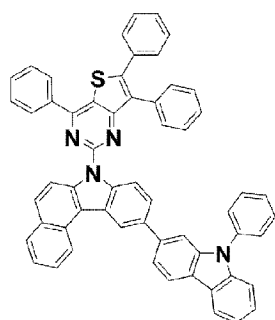
R25



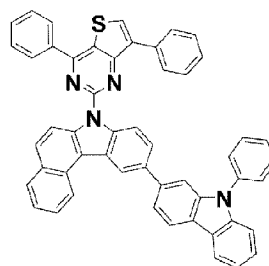
R26



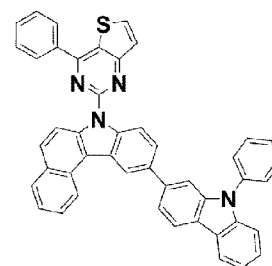
R27



R28

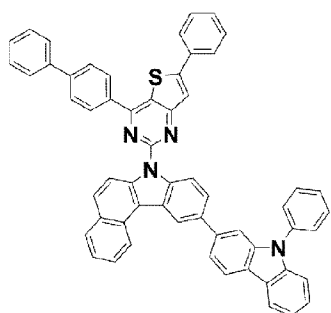


R29

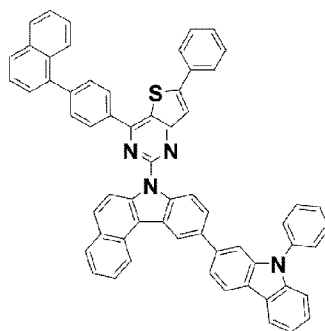


R30

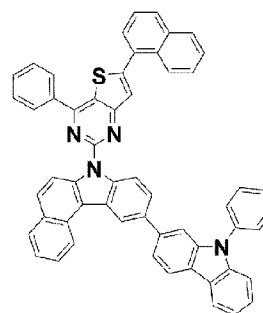
[67]



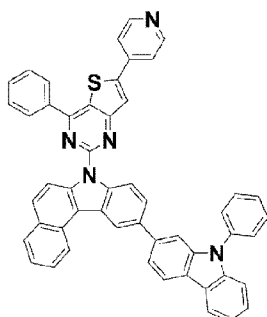
R31



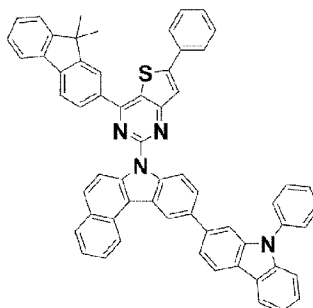
R32



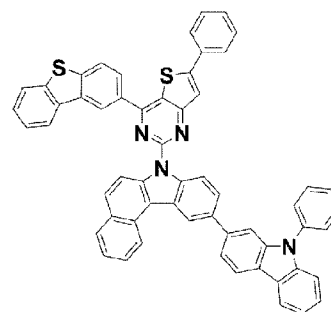
R33



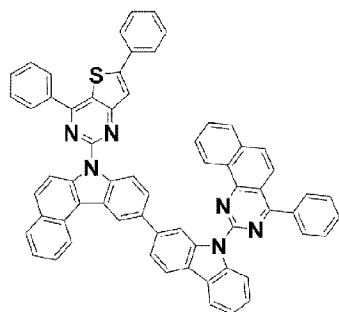
R34



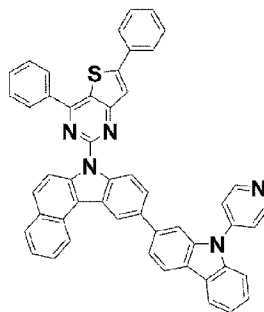
R35



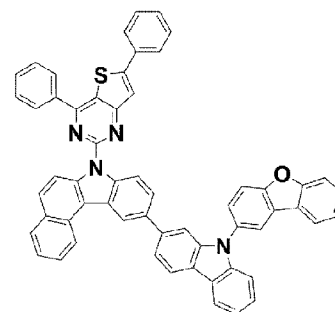
R36



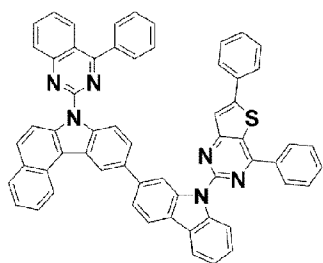
R37



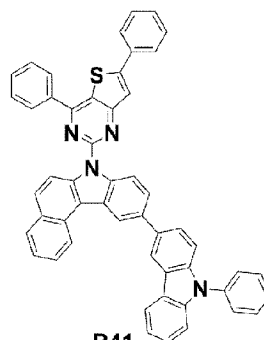
R38



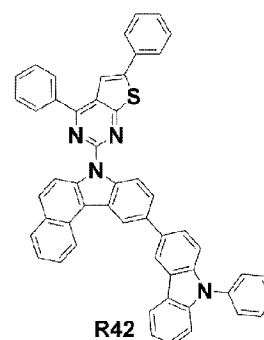
R39



R40

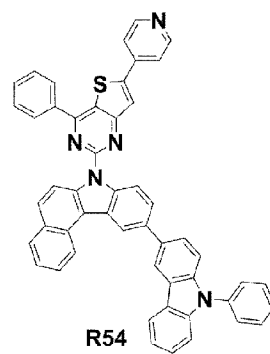
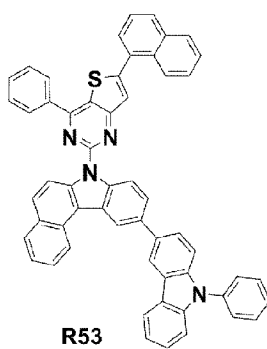
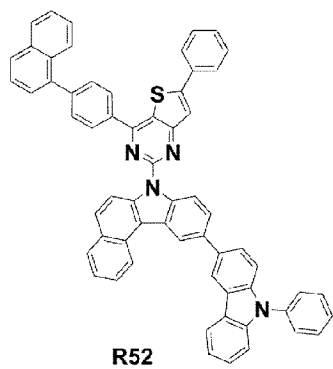
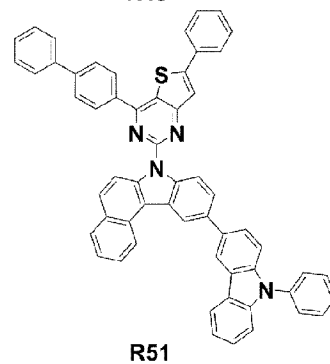
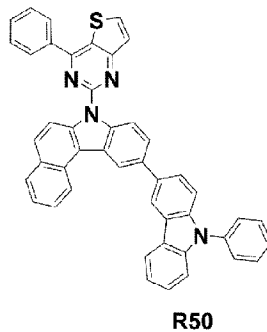
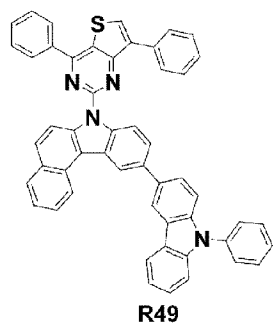
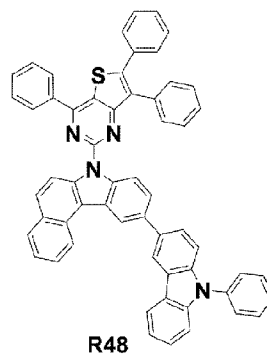
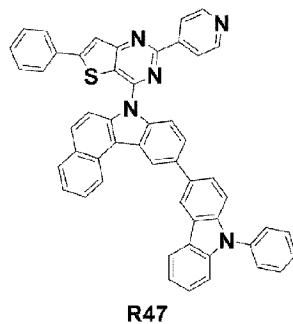
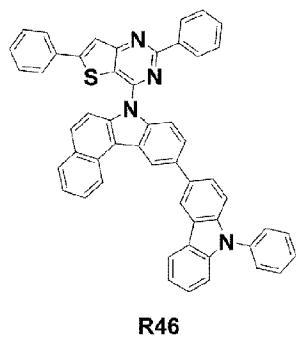
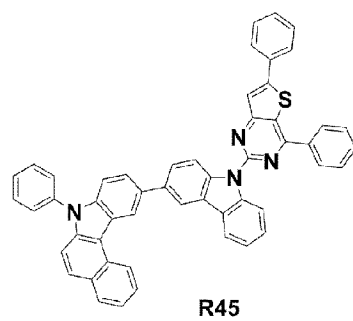
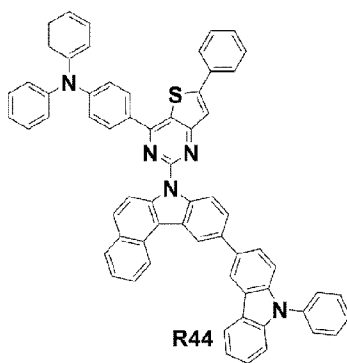
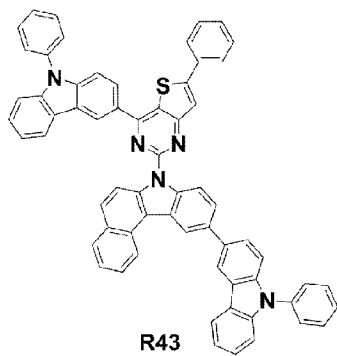


R41

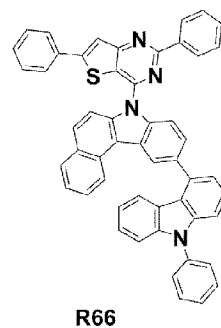
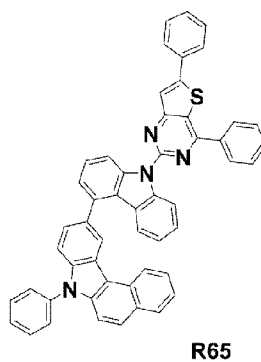
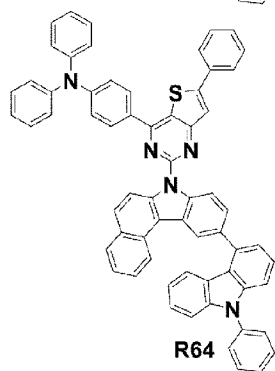
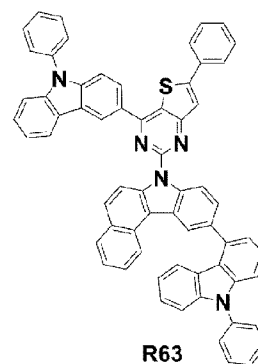
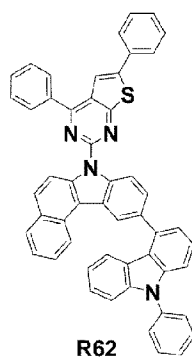
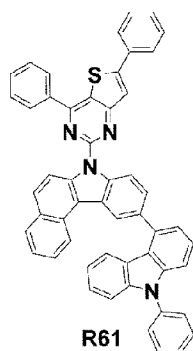
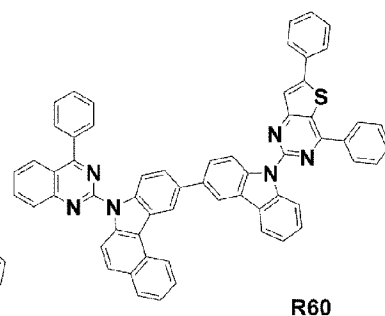
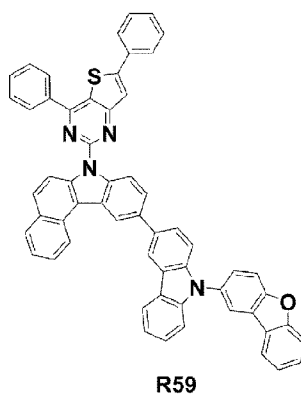
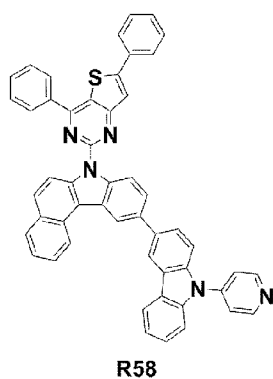
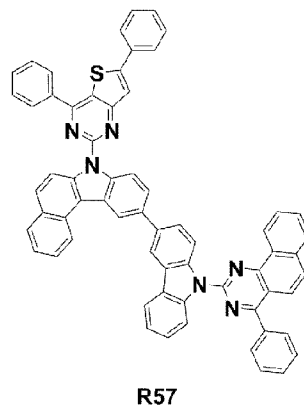
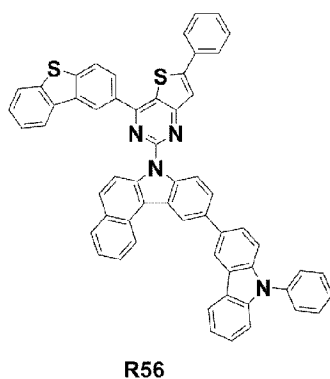
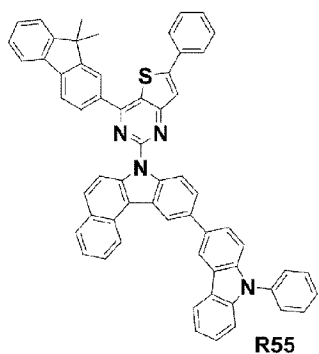


R42

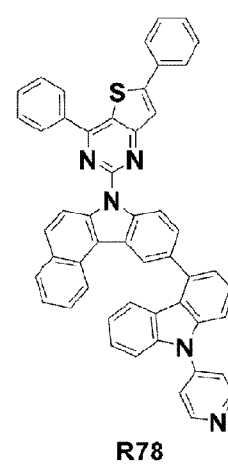
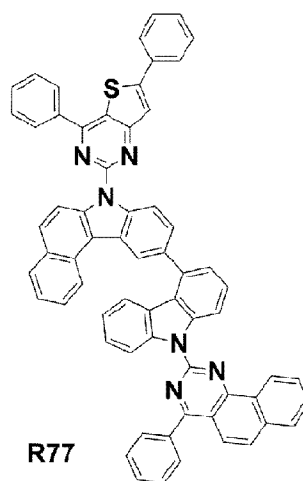
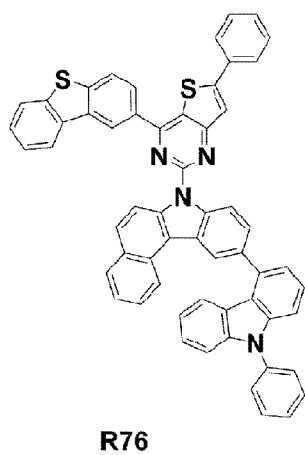
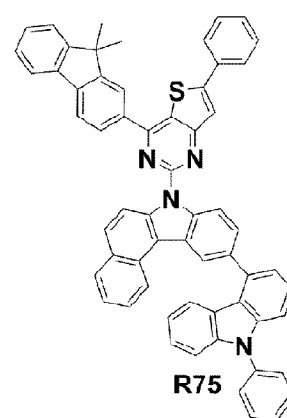
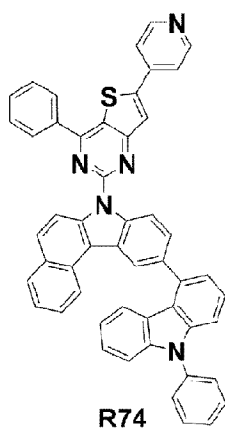
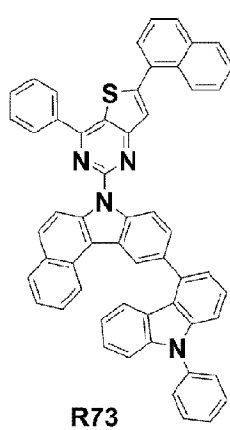
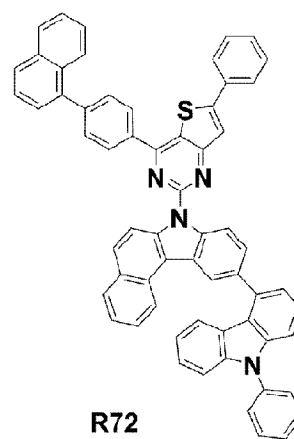
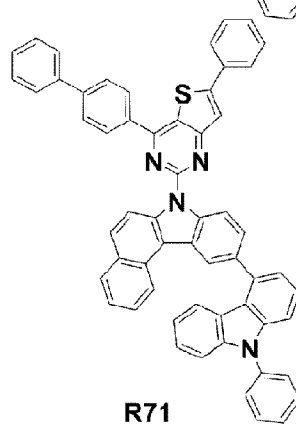
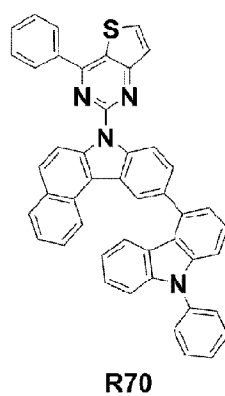
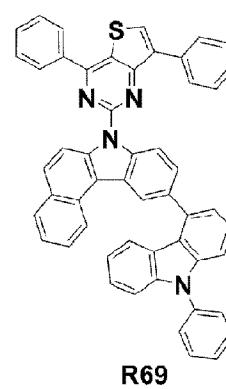
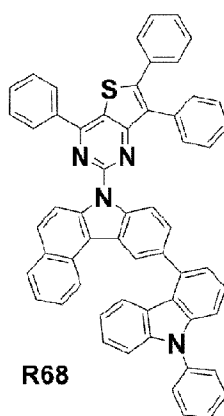
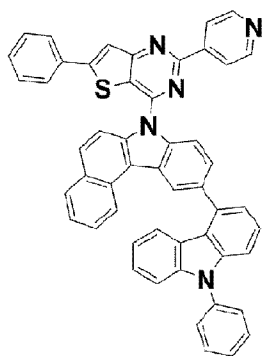
[68]



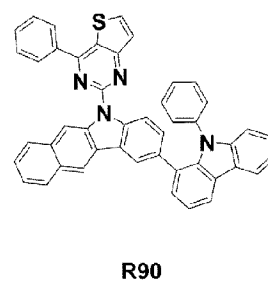
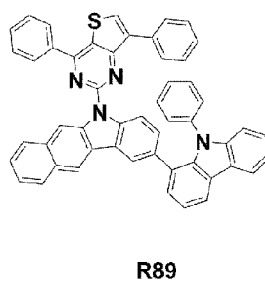
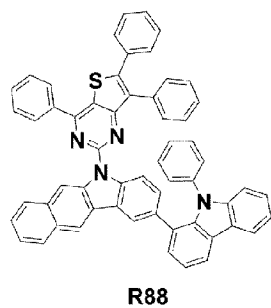
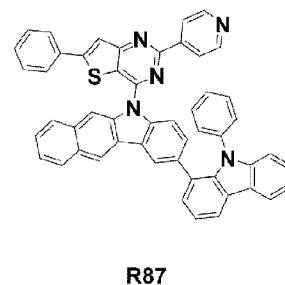
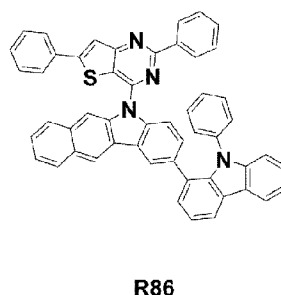
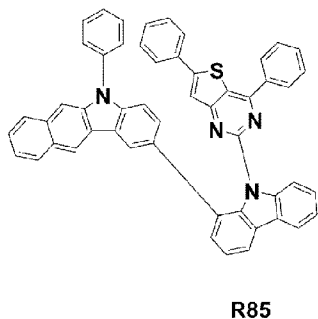
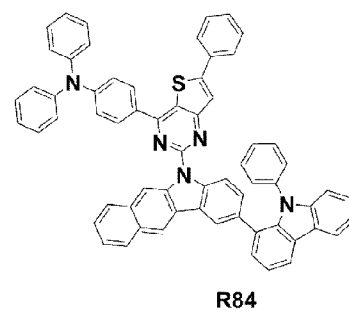
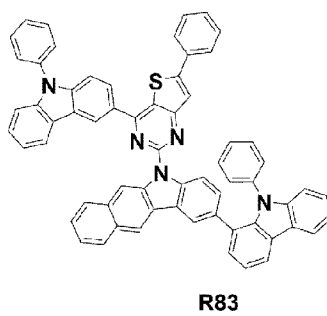
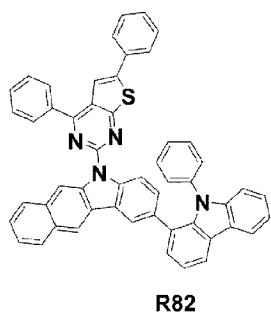
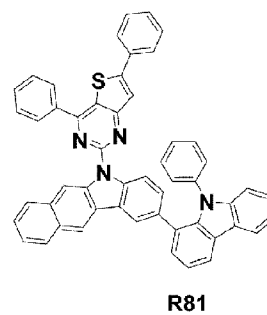
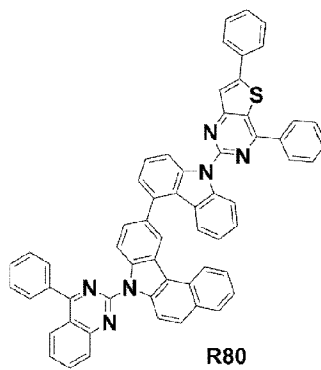
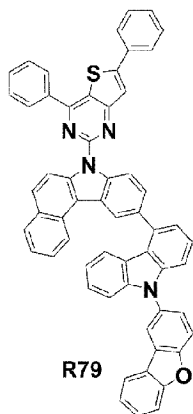
[69]



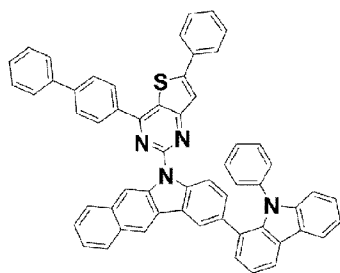
[70]



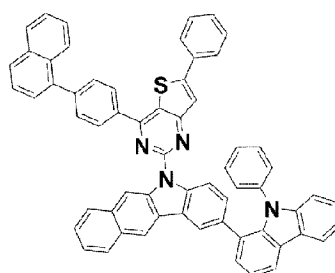
[71]



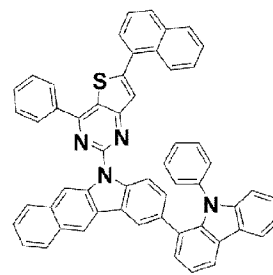
[72]



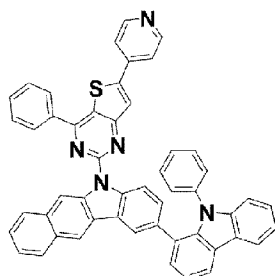
R91



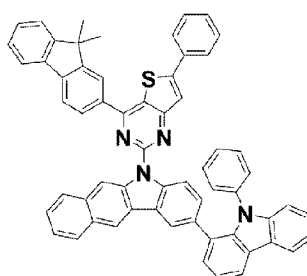
R92



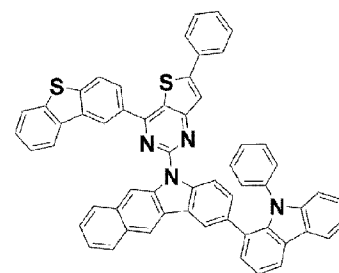
R93



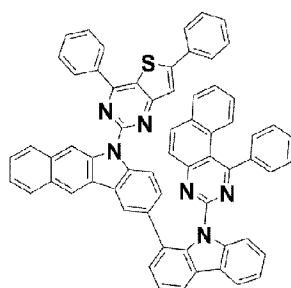
R94



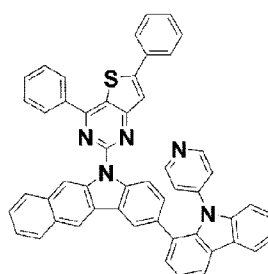
R95



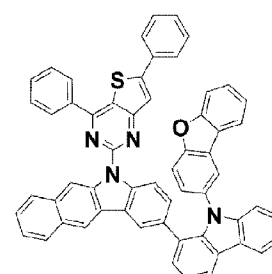
R96



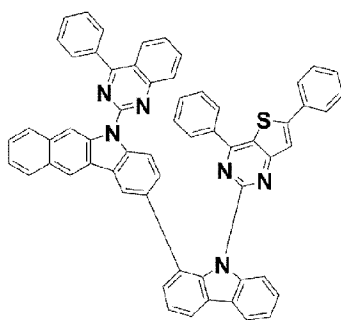
R97



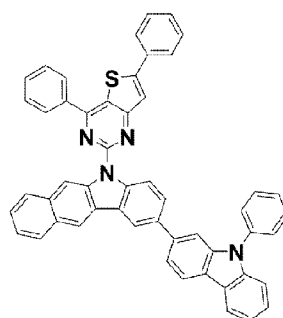
R98



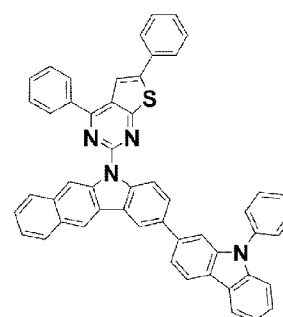
R99



R100

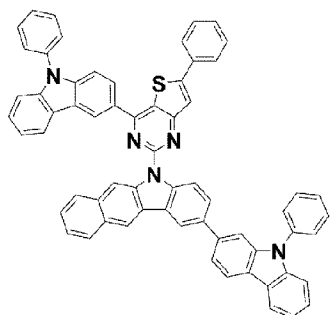


R101

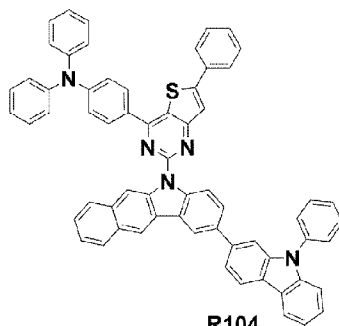


R102

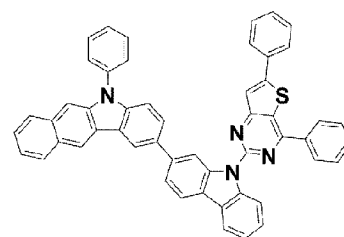
[73]



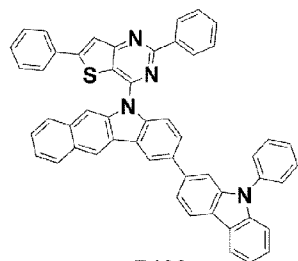
R103



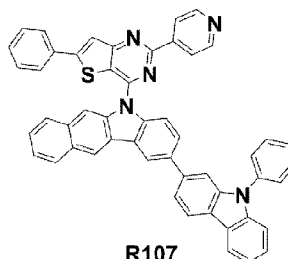
R104



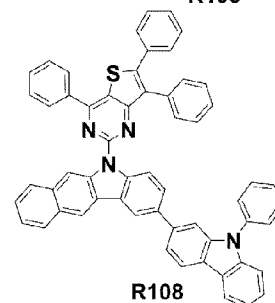
R105



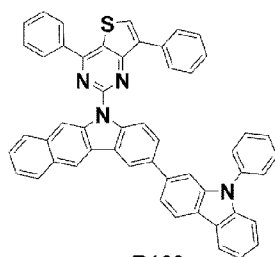
R106



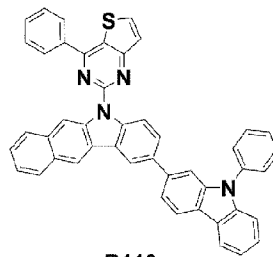
R107



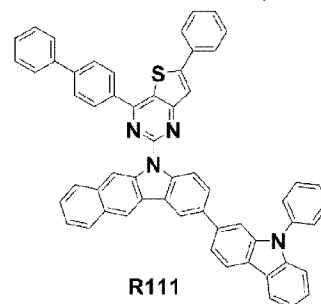
R108



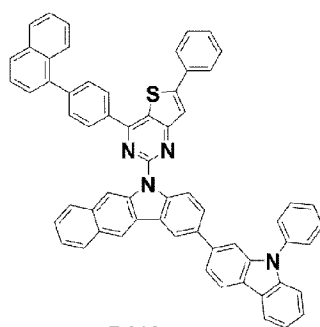
R109



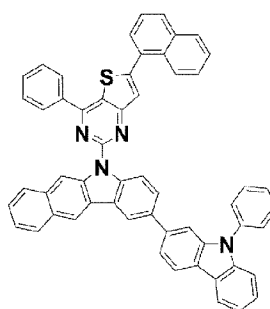
R110



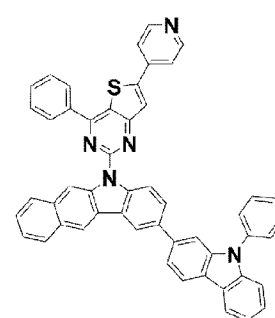
R111



R112

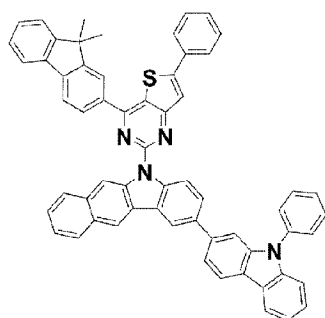


R113

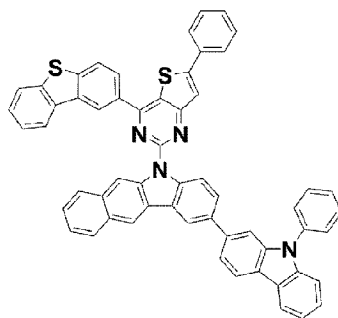


R114

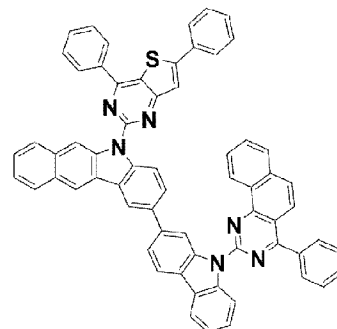
[74]



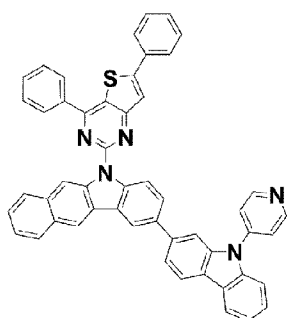
R115



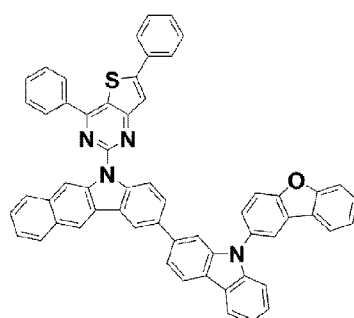
R116



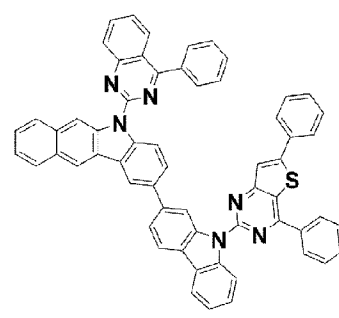
R117



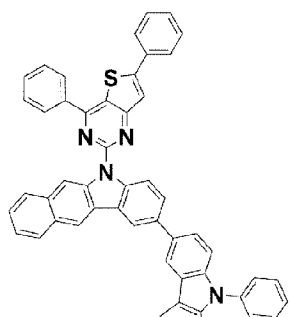
R118



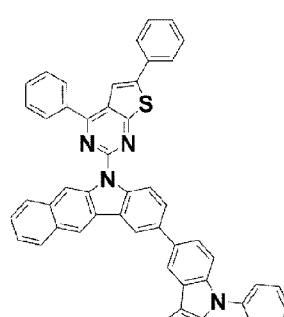
R119



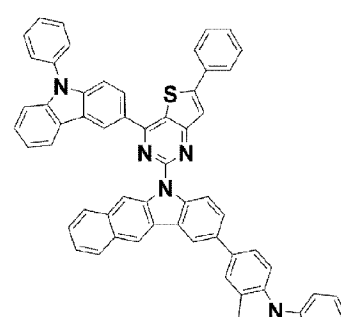
R120



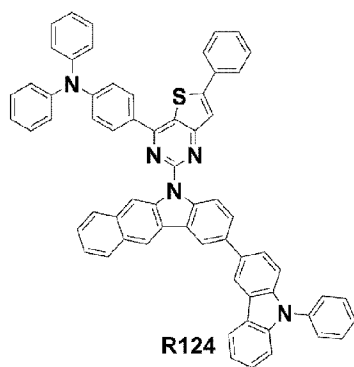
R121



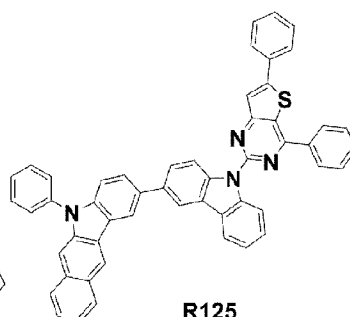
R122



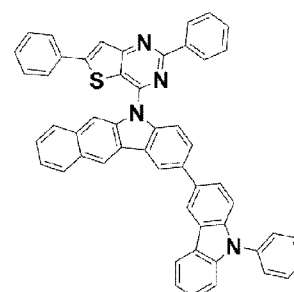
R123



R124

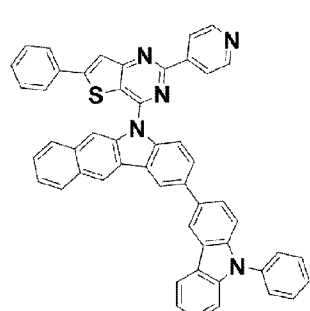


R125

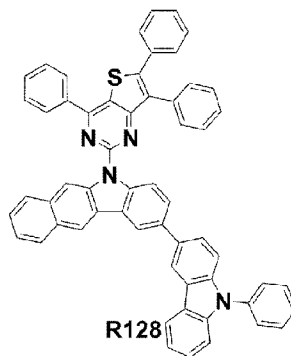


R126

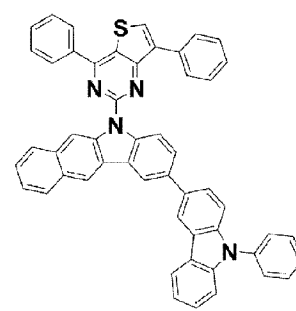
[75]



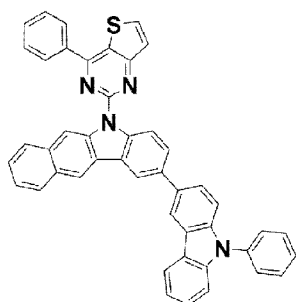
R127



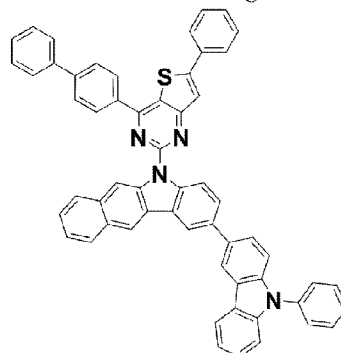
R128



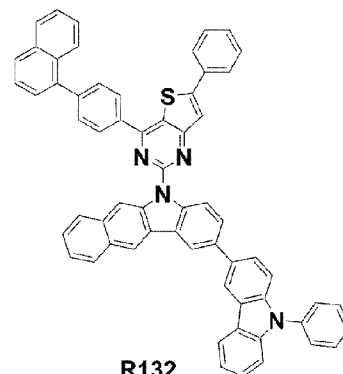
R129



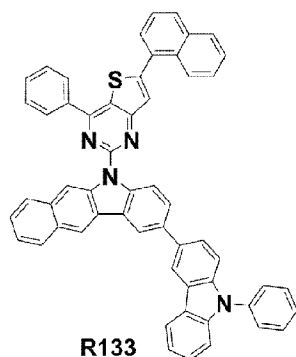
R130



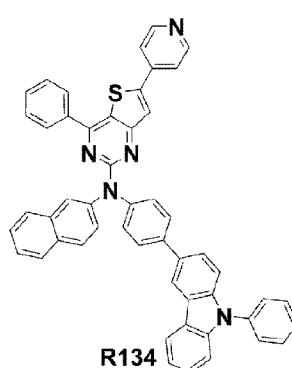
R131



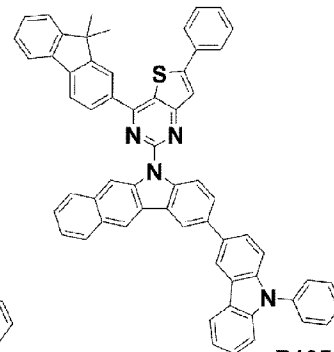
R132



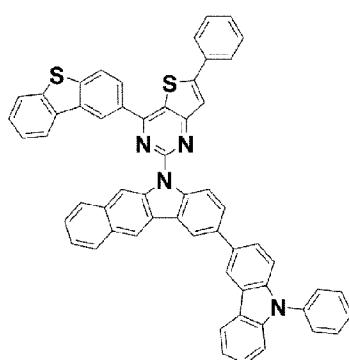
R133



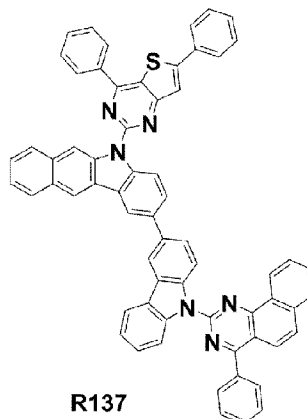
R134



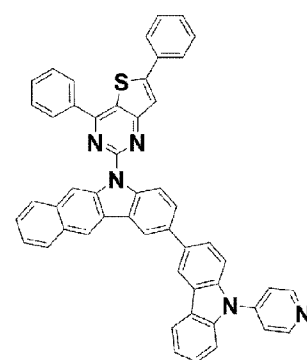
R135



R136

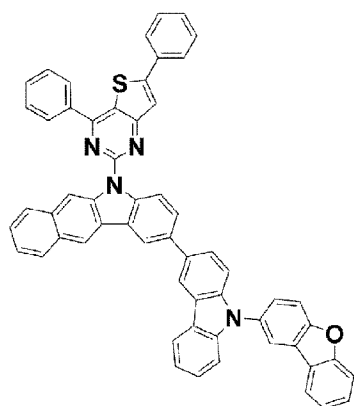


R137

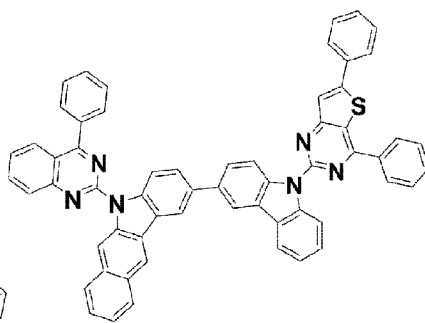


R138

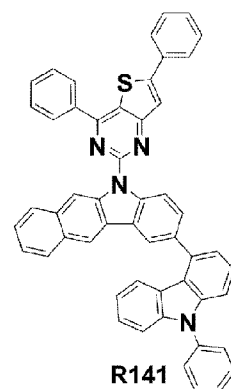
[76]



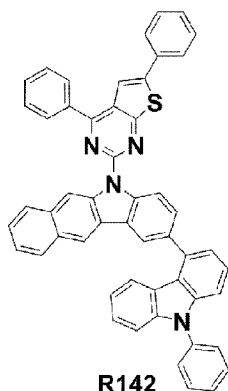
R139



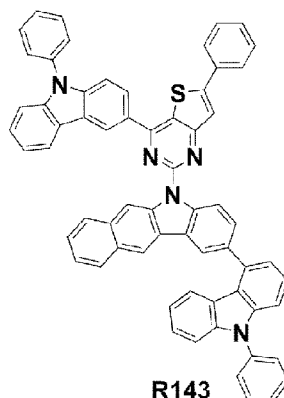
R140



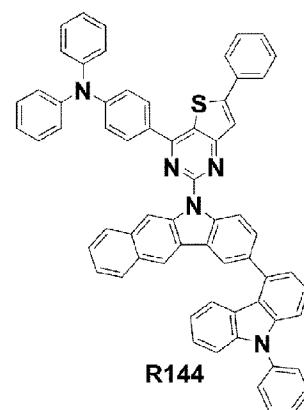
R141



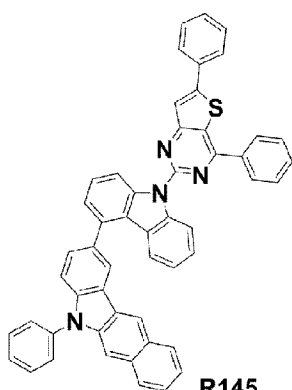
R142



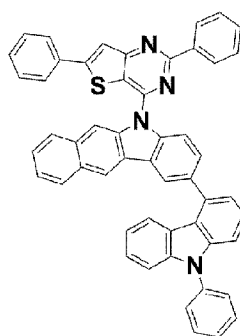
R143



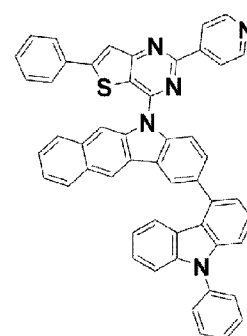
R144



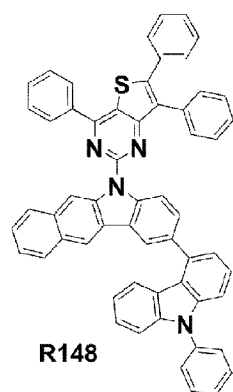
R145



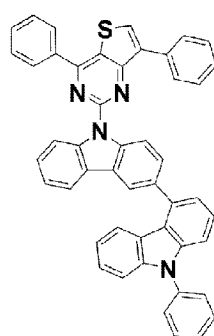
R146



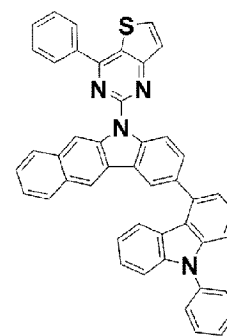
R147



R148

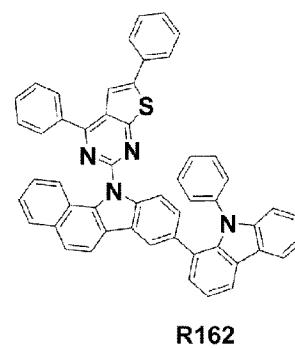
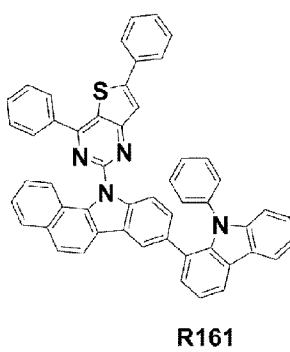
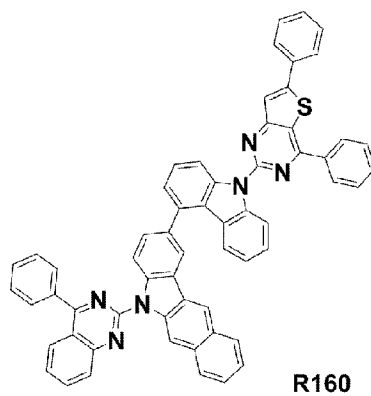
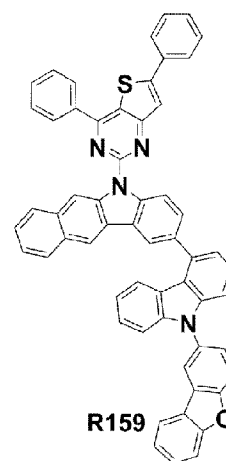
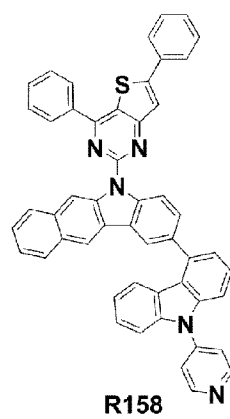
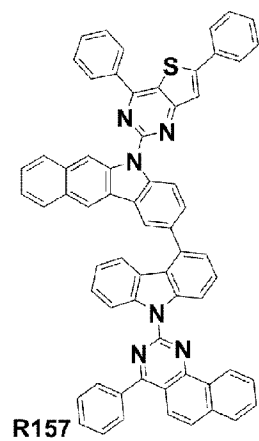
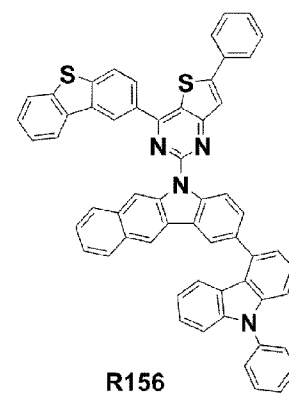
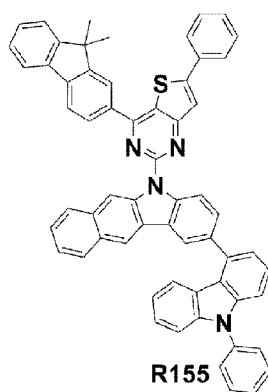
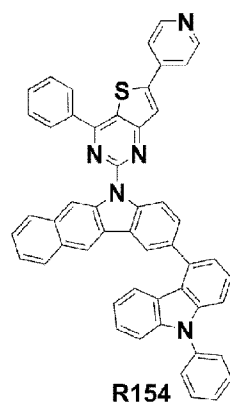
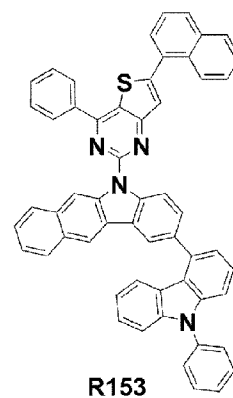
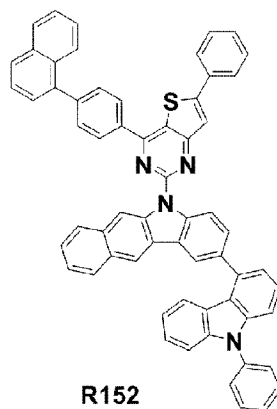
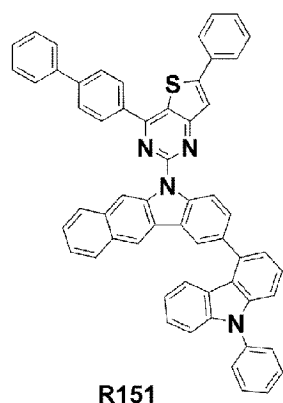


R149

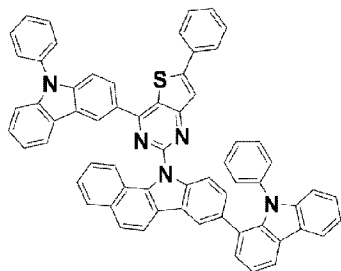


R150

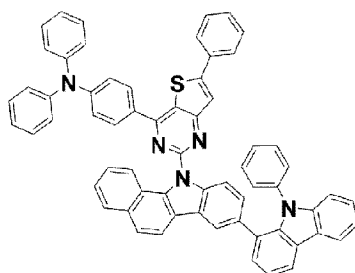
[77]



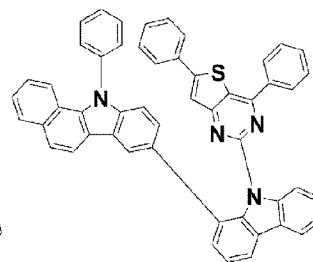
[78]



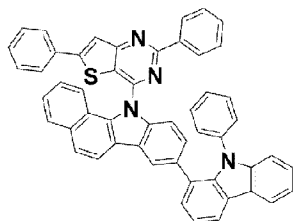
R163



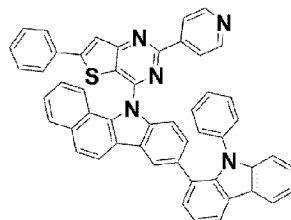
R164



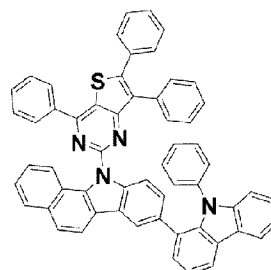
R165



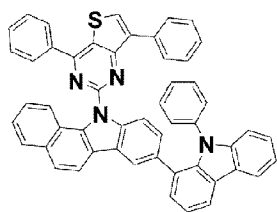
R166



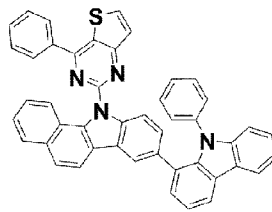
R167



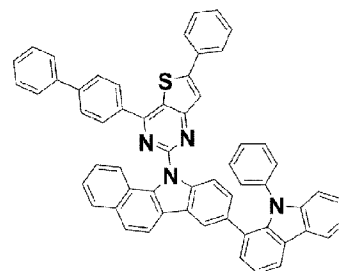
R168



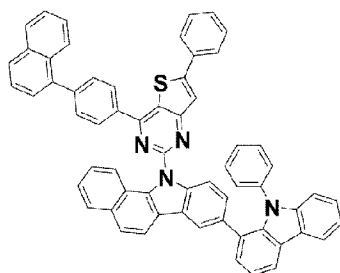
R169



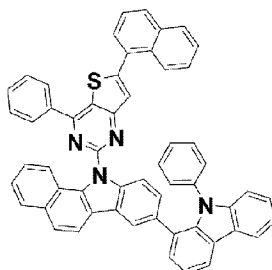
R170



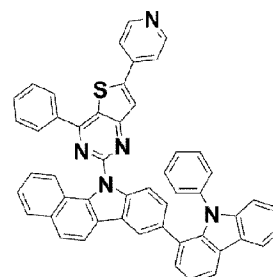
R171



R172

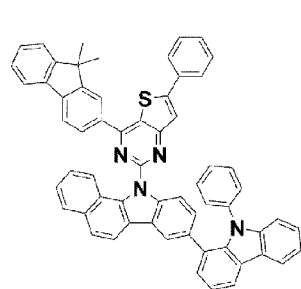


R173

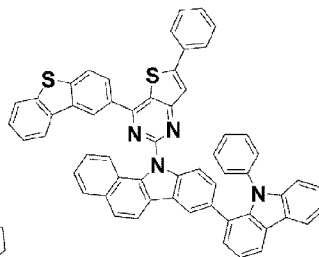


R174

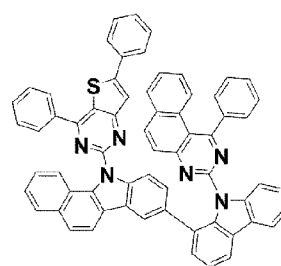
[79]



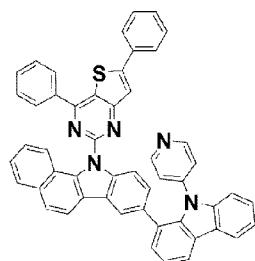
R175



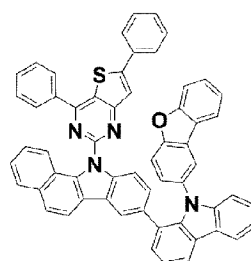
R176



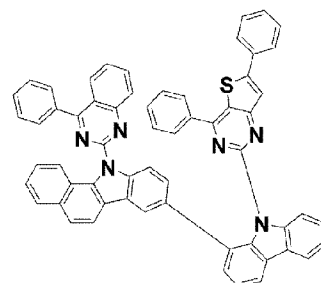
R177



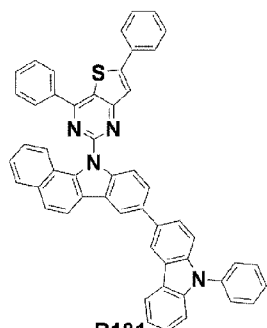
R178



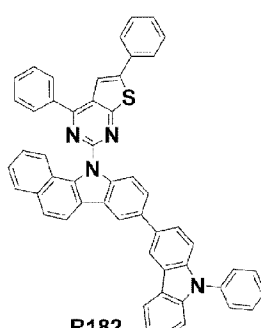
R179



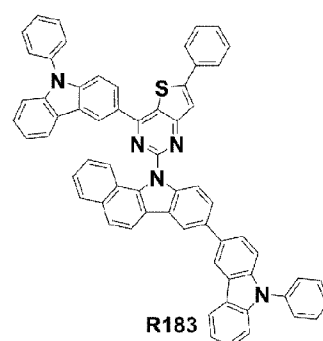
R180



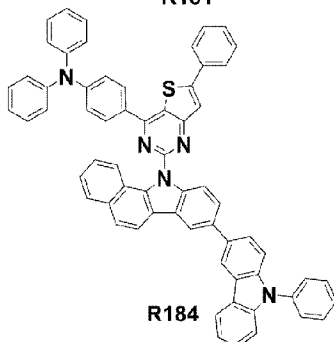
R181



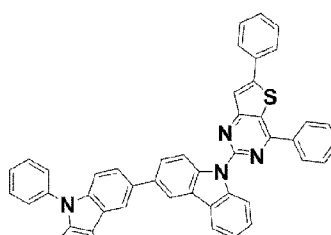
R182



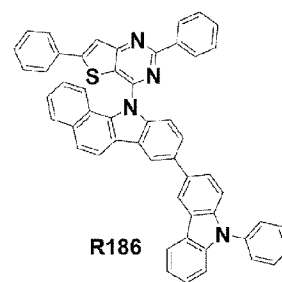
R183



R184

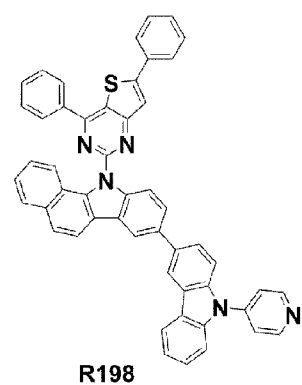
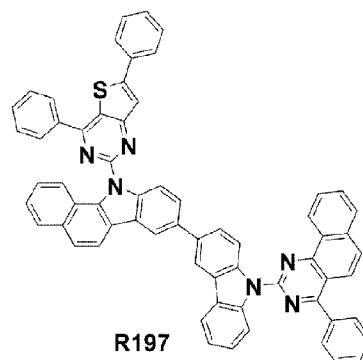
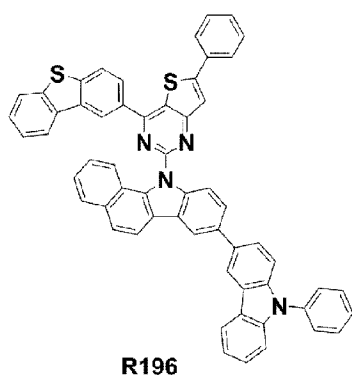
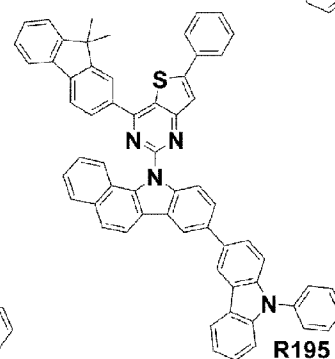
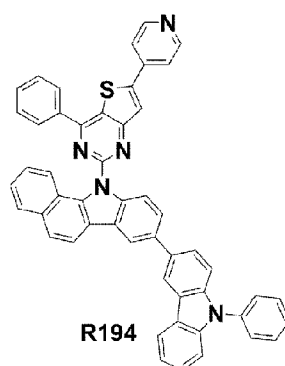
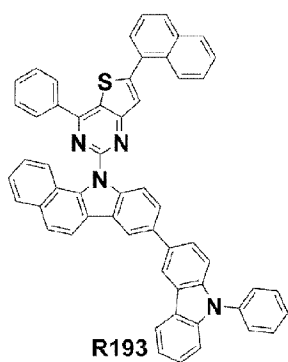
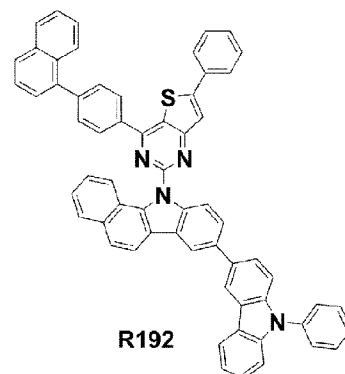
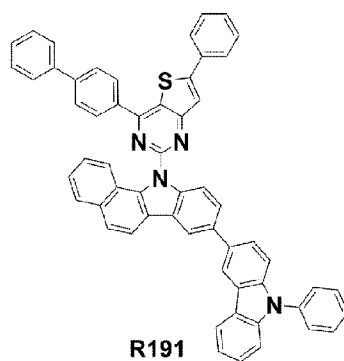
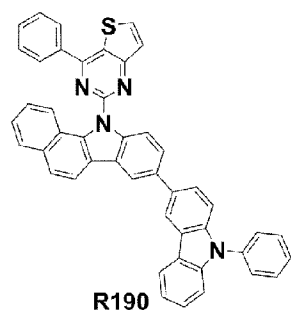
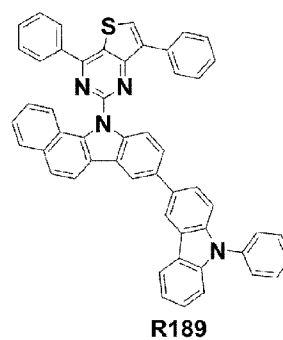
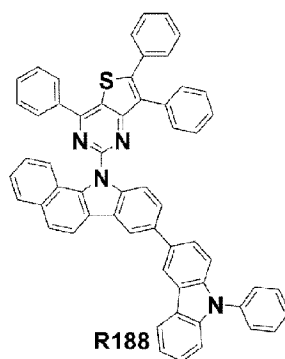
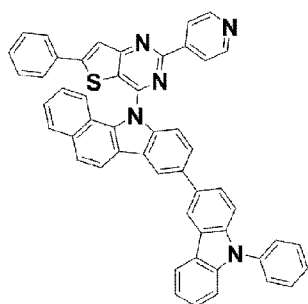


R185

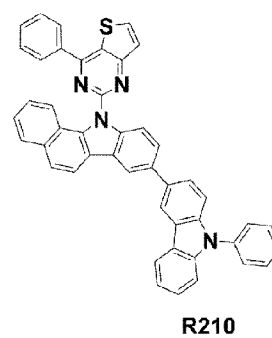
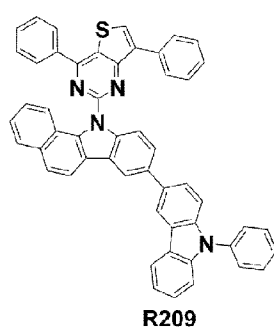
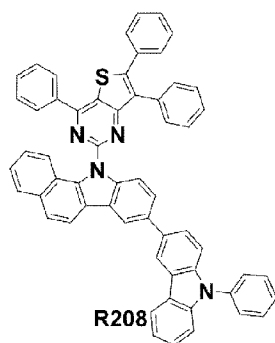
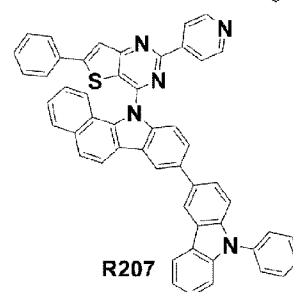
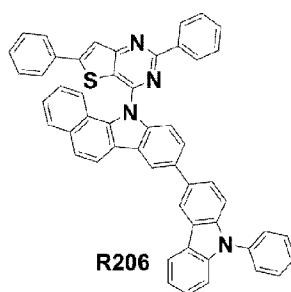
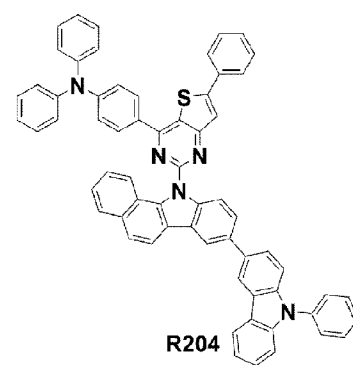
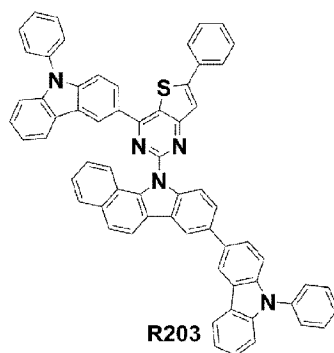
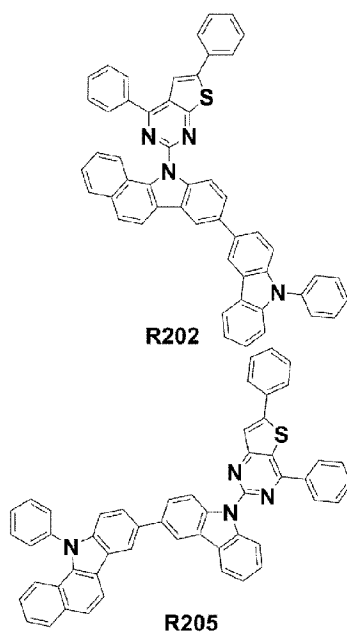
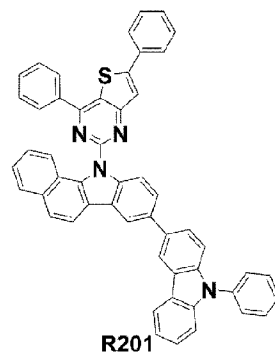
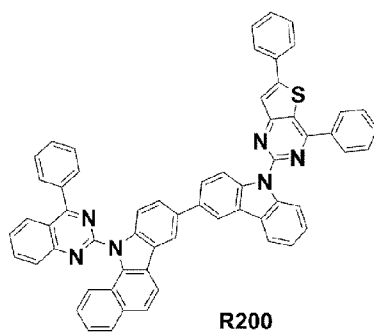
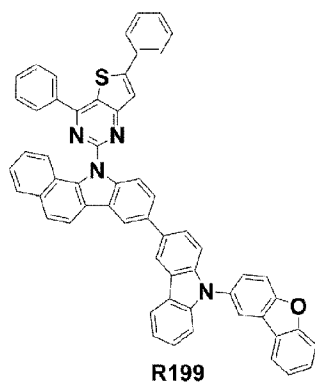


R186

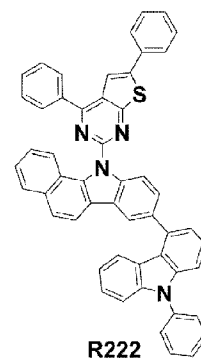
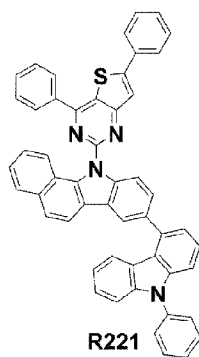
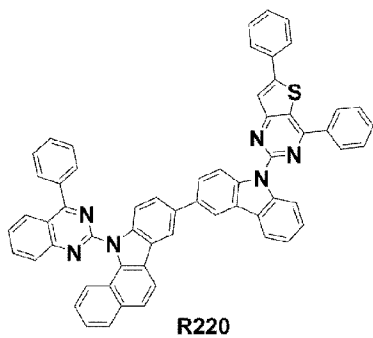
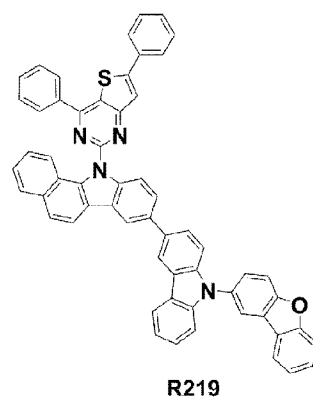
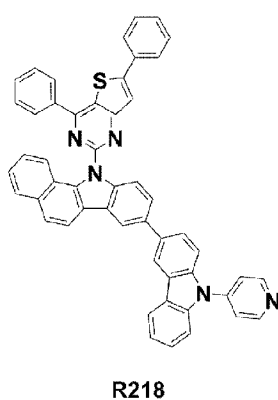
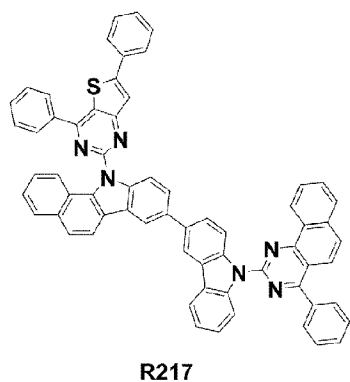
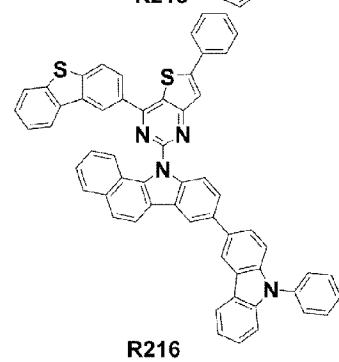
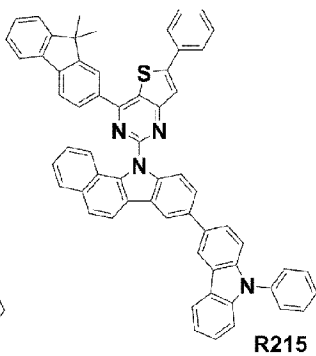
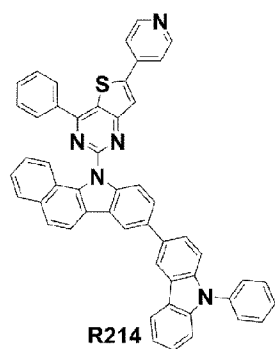
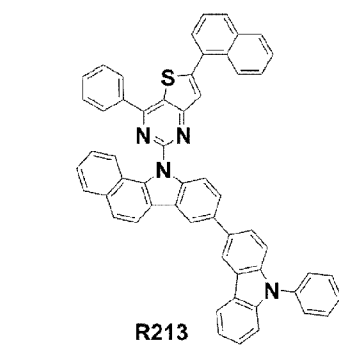
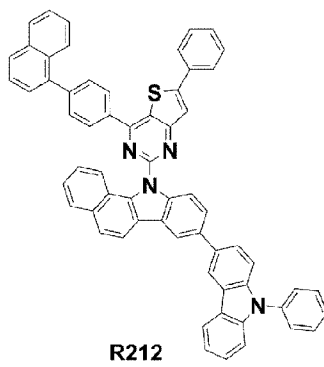
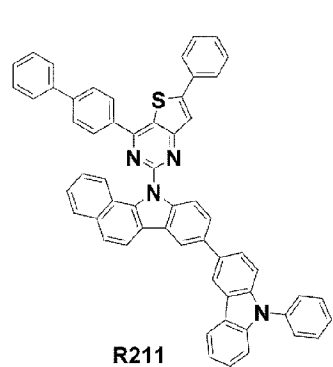
[80]



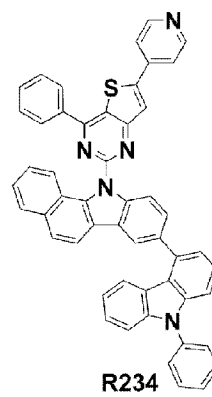
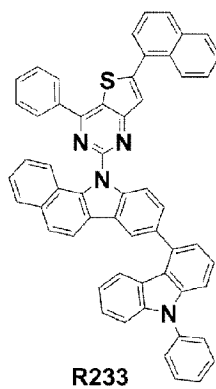
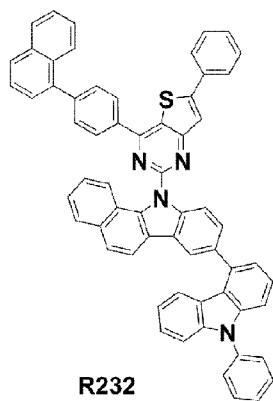
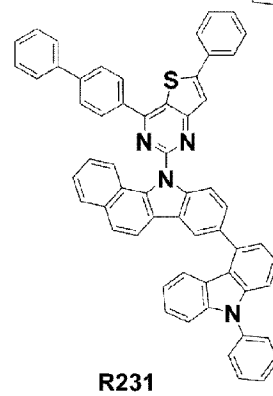
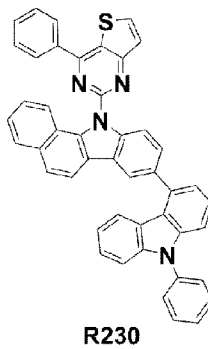
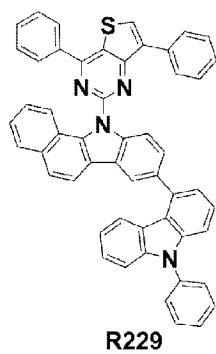
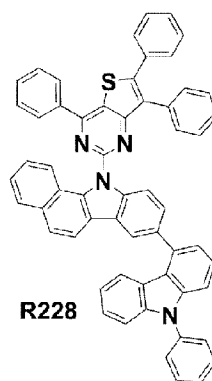
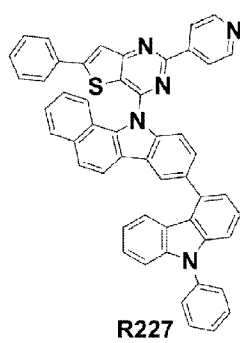
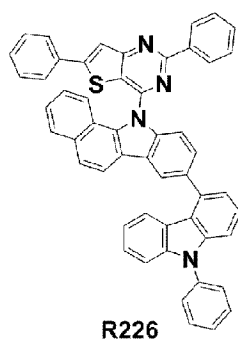
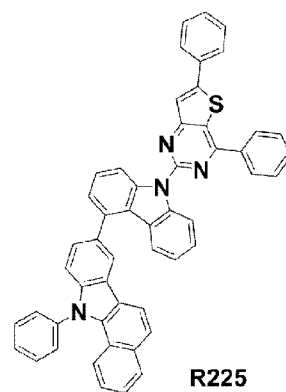
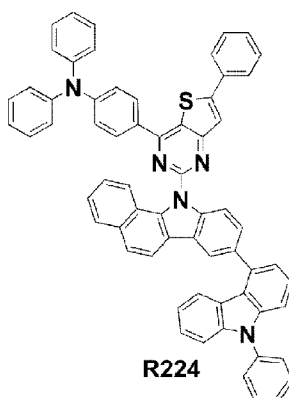
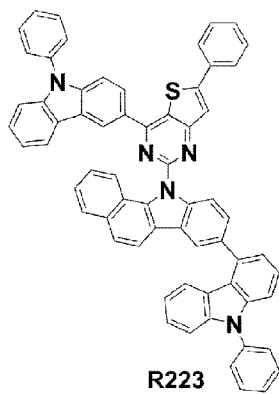
[81]



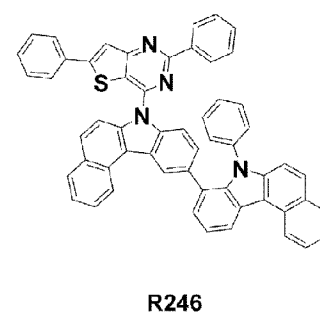
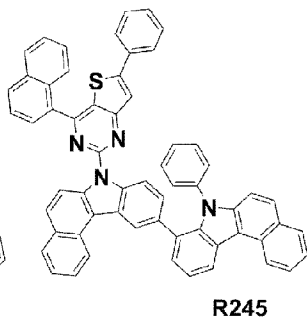
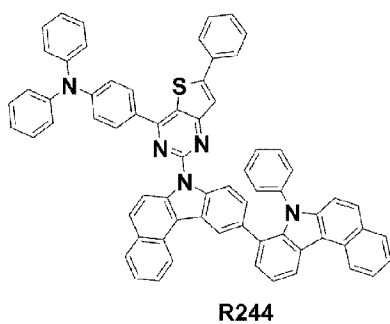
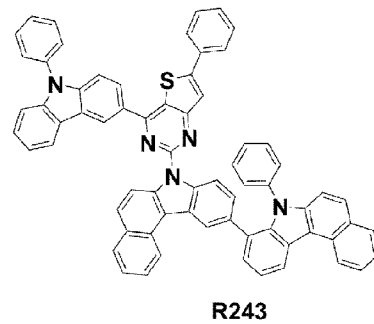
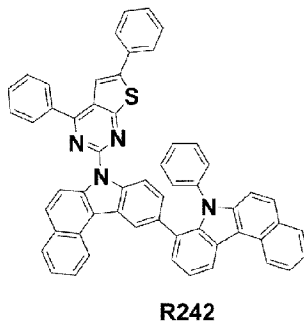
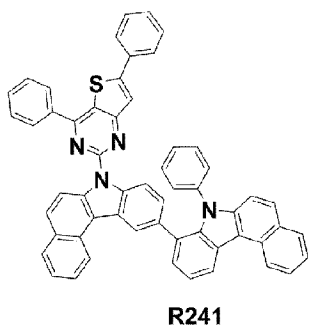
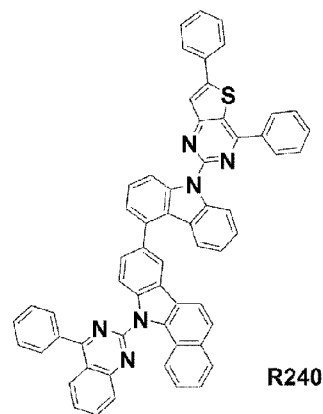
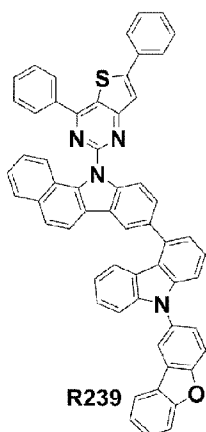
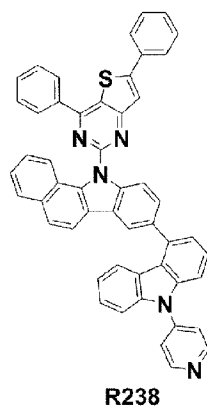
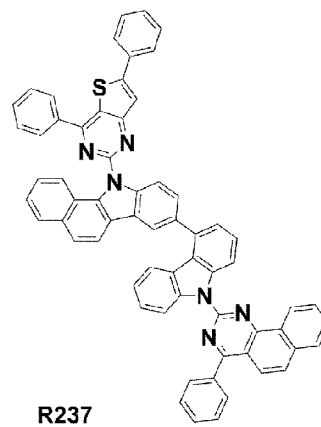
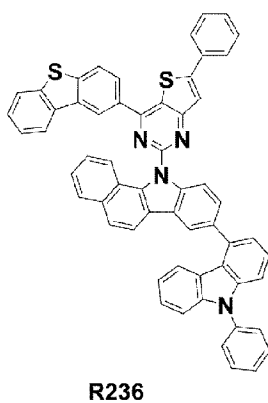
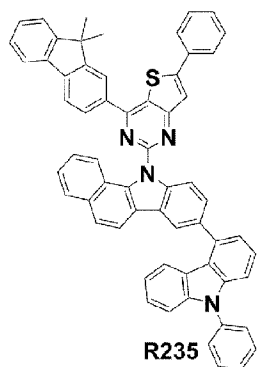
[82]



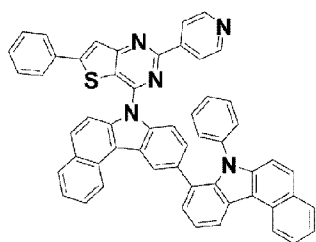
[83]



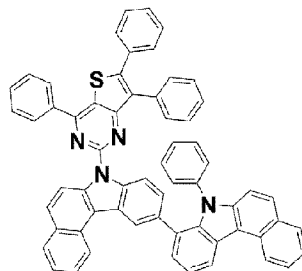
[84]



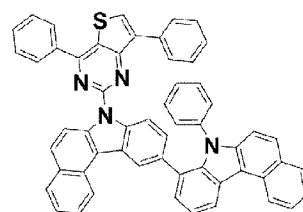
[85]



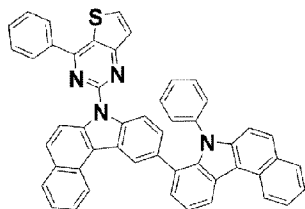
R247



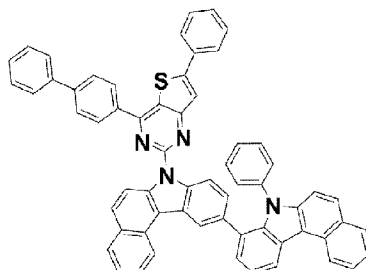
R248



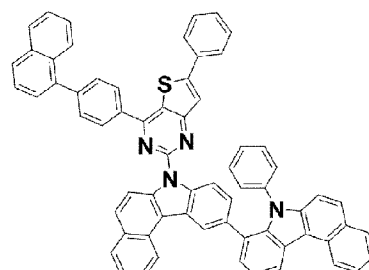
R249



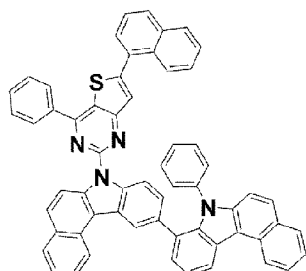
R250



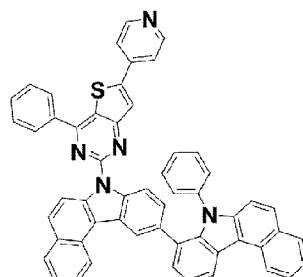
R251



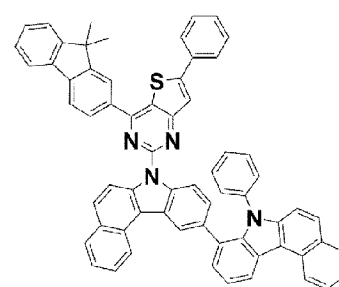
R252



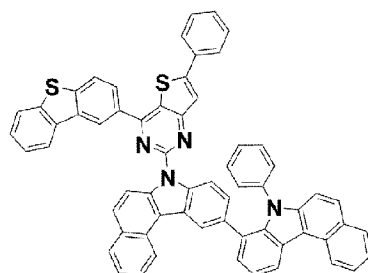
R253



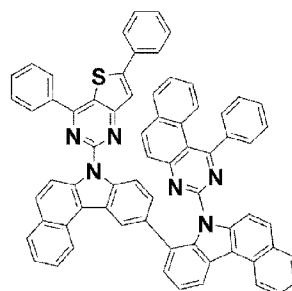
R254



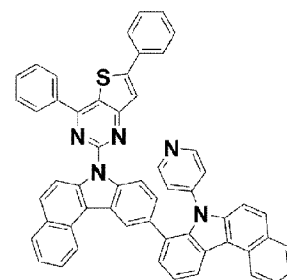
R255



R256

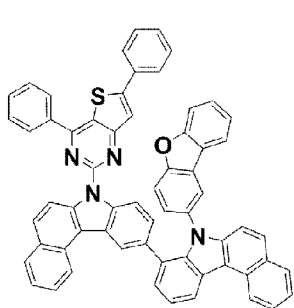


R257

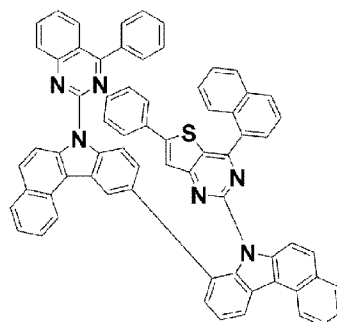


R258

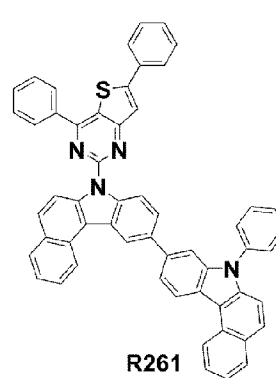
[86]



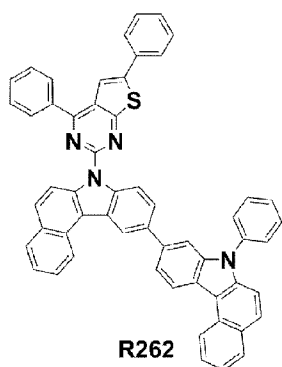
R259



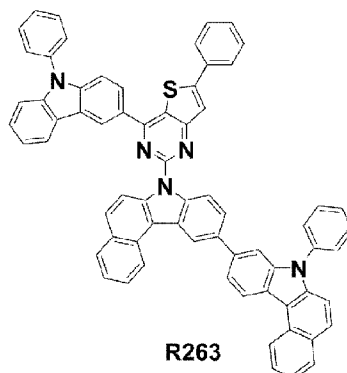
R260



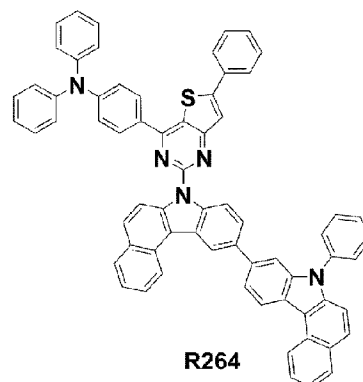
R261



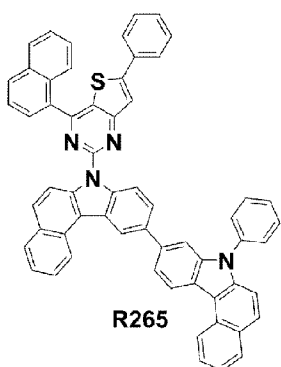
R262



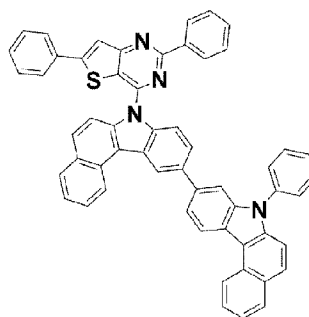
R263



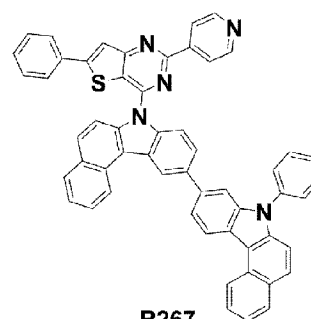
R264



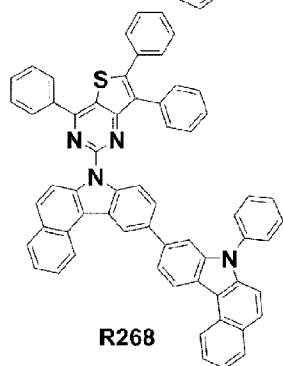
R265



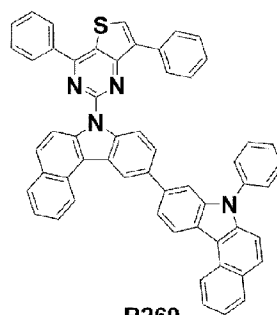
R266



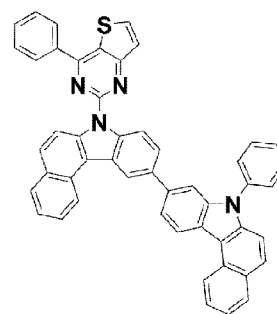
R267



R268

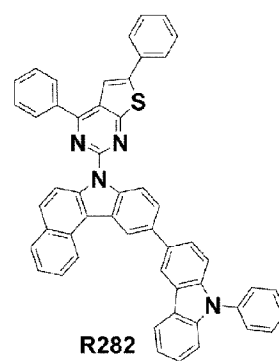
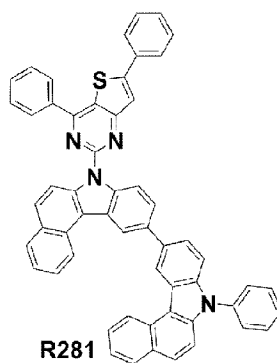
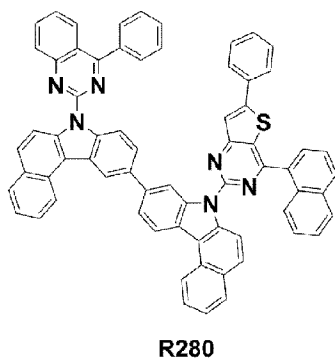
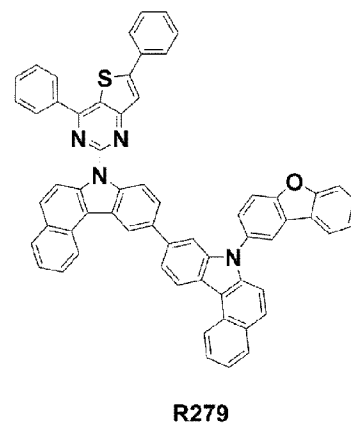
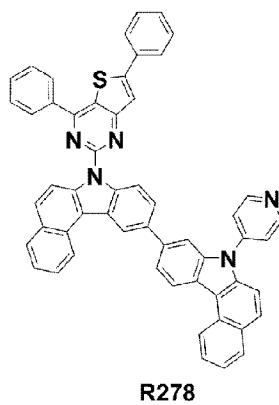
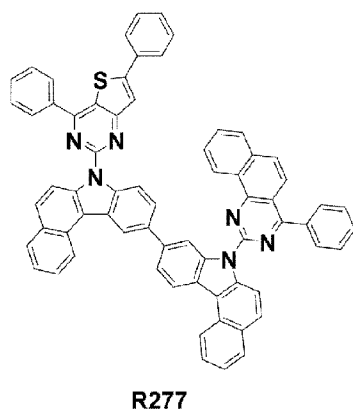
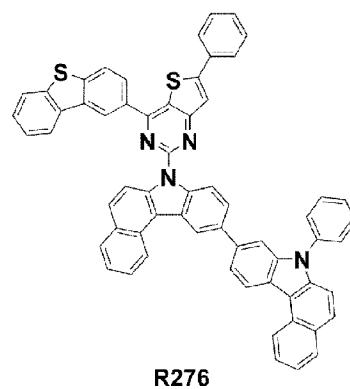
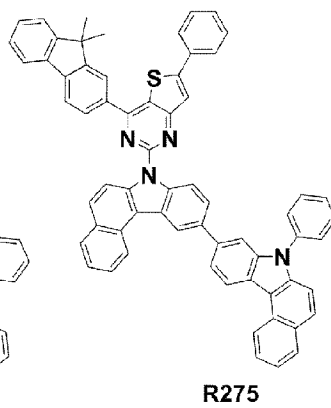
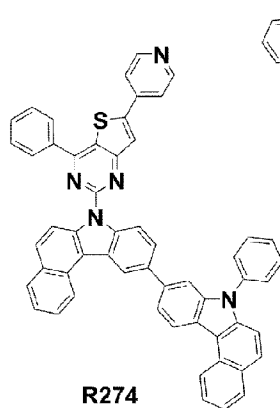
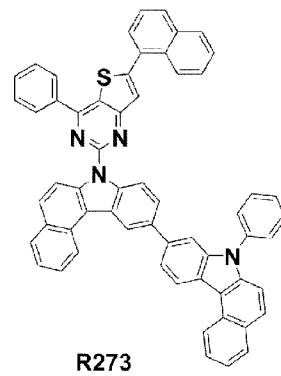
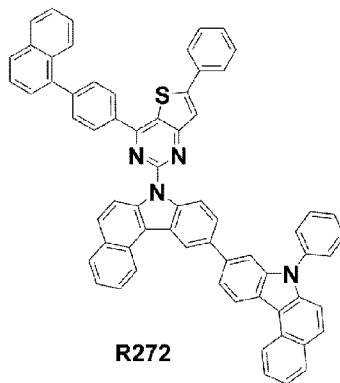
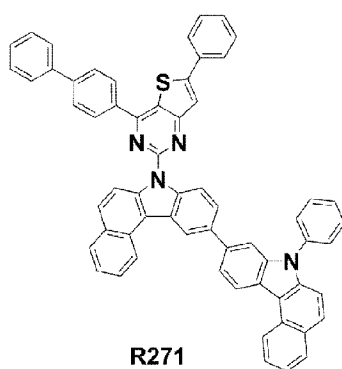


R269

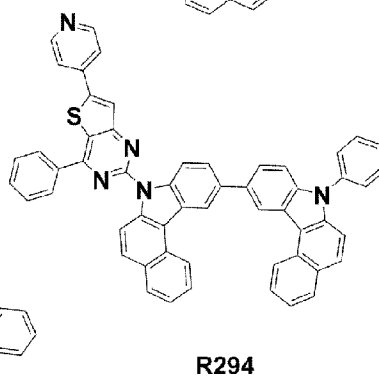
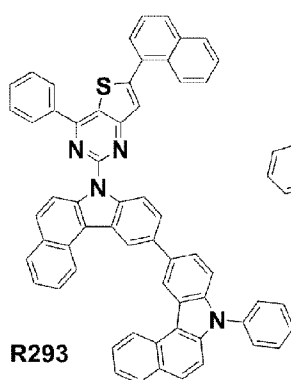
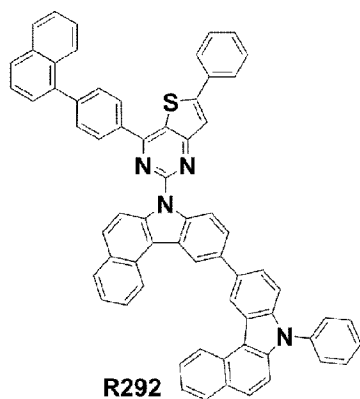
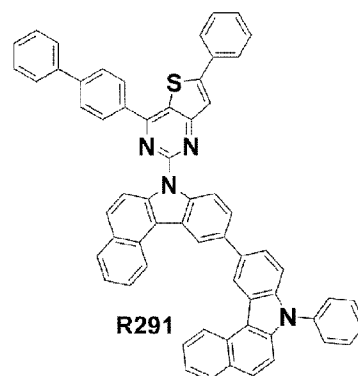
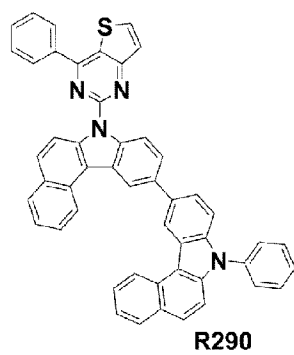
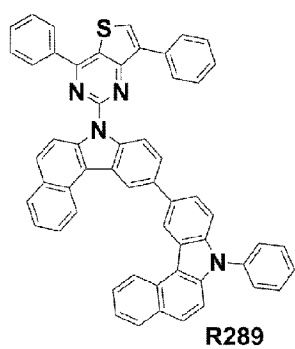
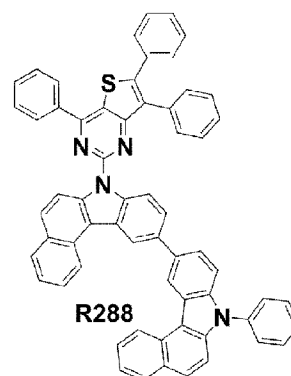
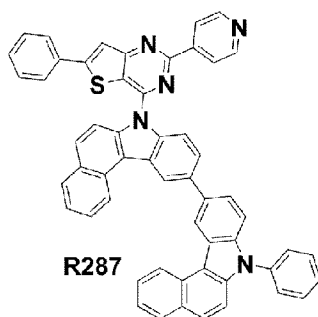
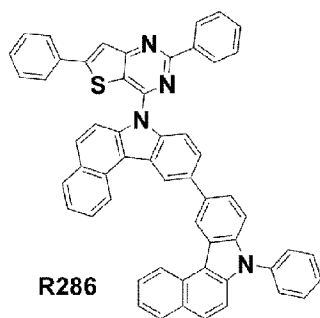
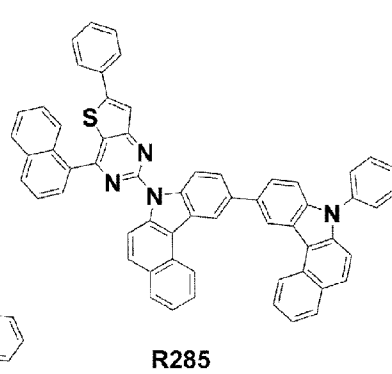
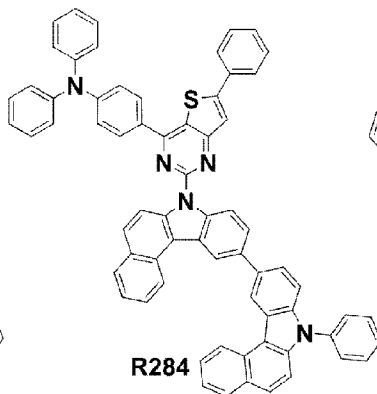
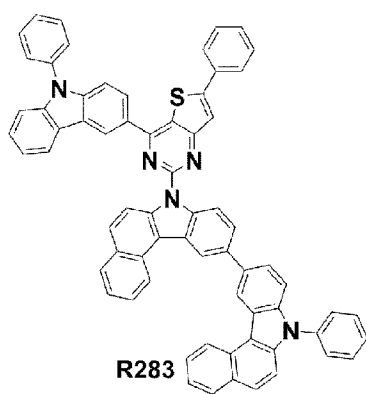


R270

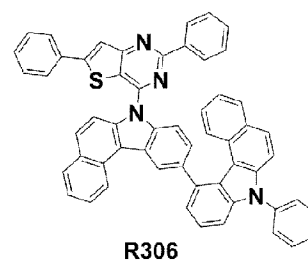
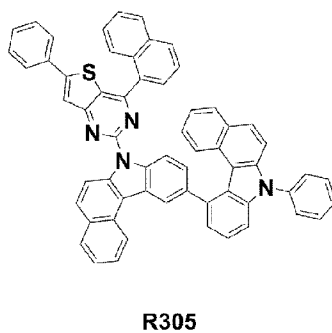
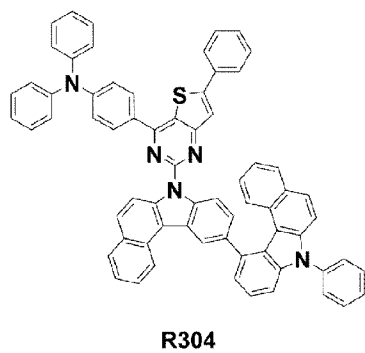
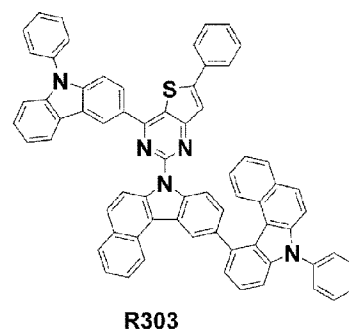
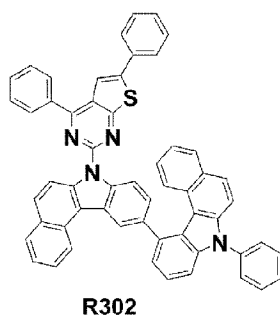
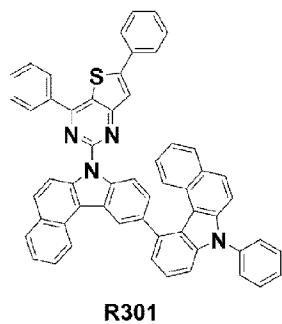
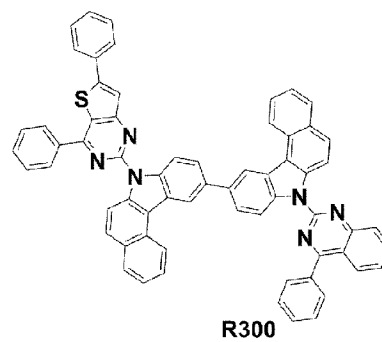
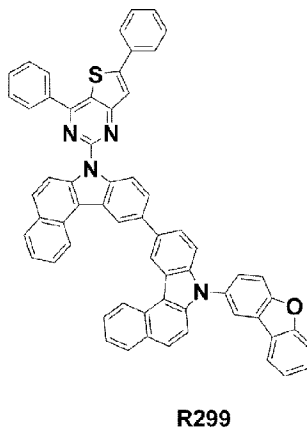
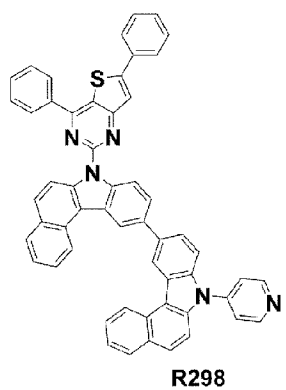
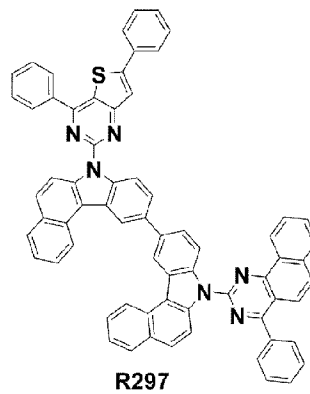
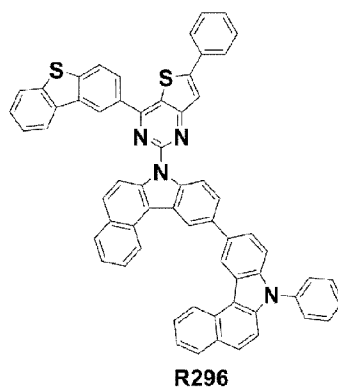
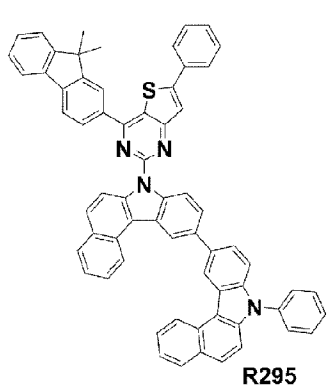
[87]



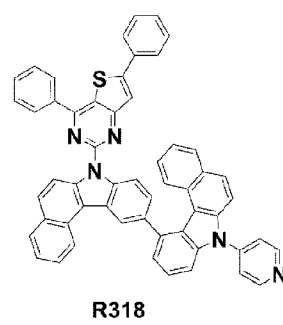
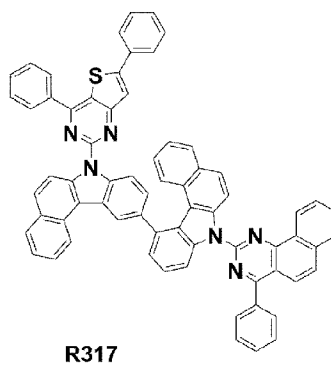
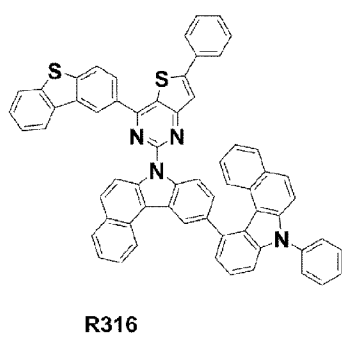
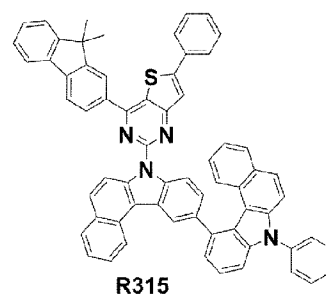
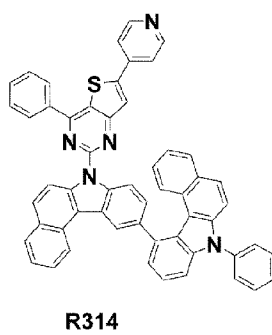
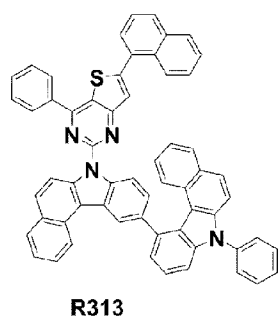
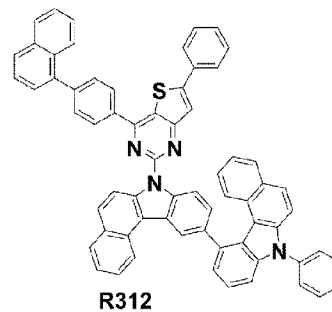
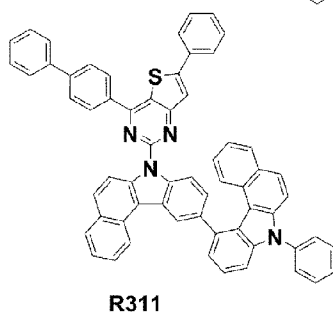
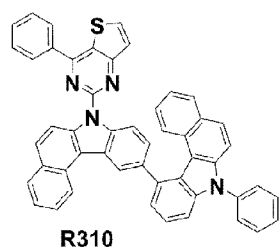
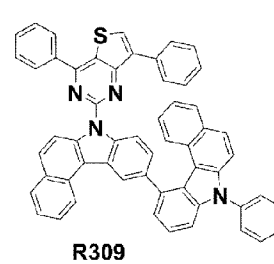
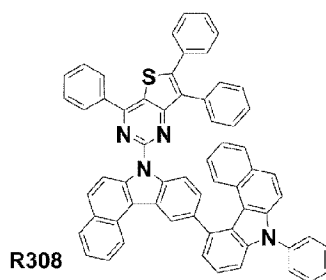
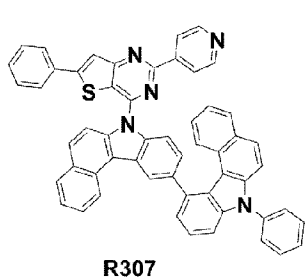
[88]



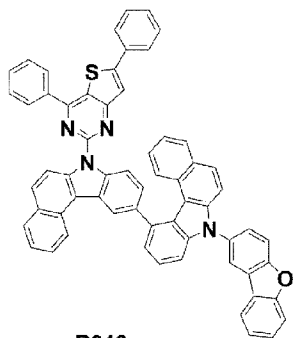
[89]



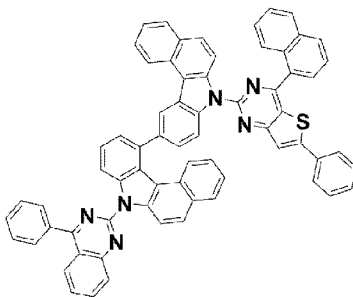
[90]



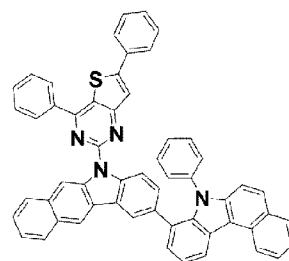
[91]



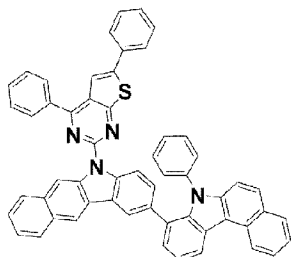
R319



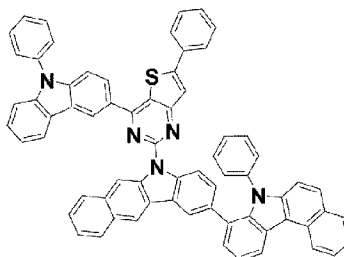
R320



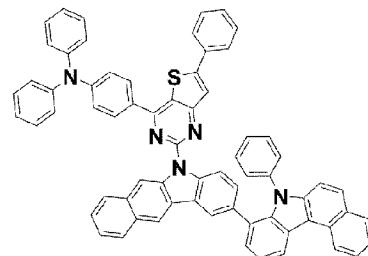
R321



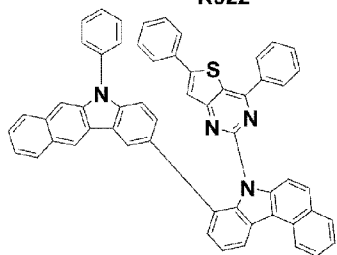
R322



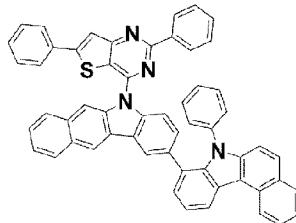
R323



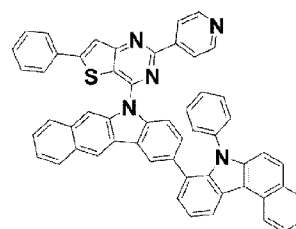
R324



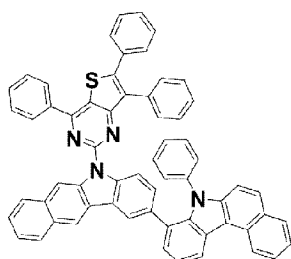
R325



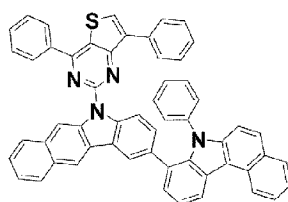
R326



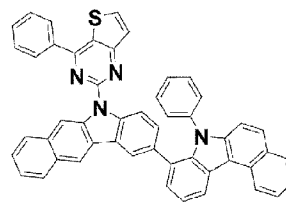
R327



R328

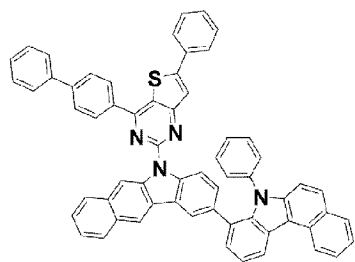


R329

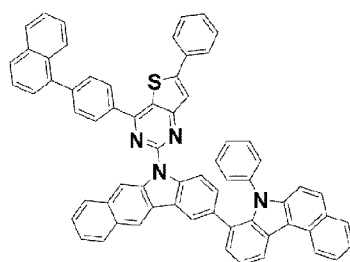


R330

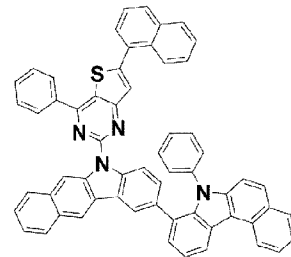
[92]



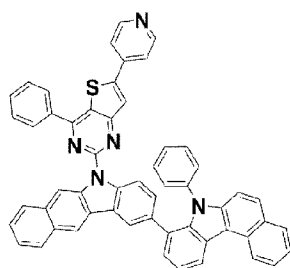
R331



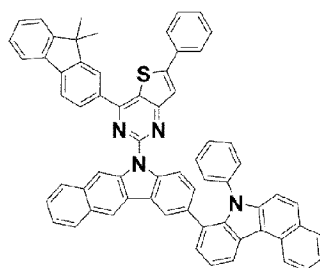
R332



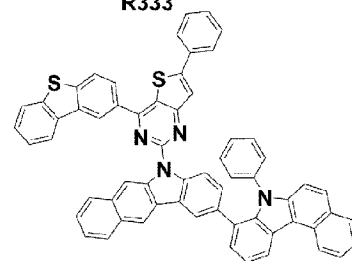
R333



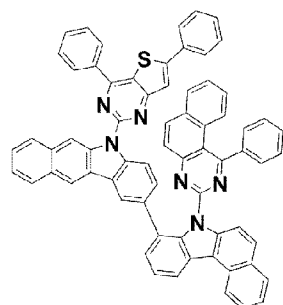
R334



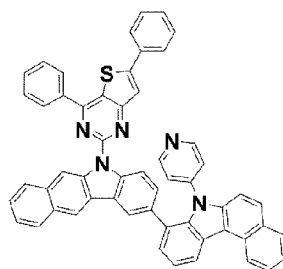
R335



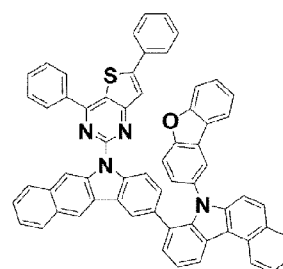
R336



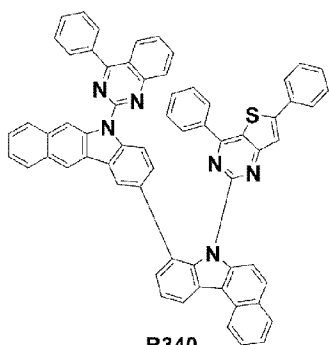
R337



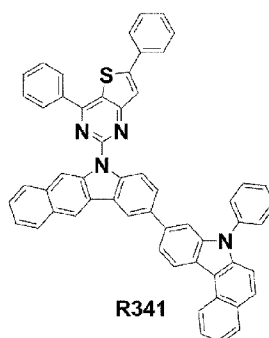
R338



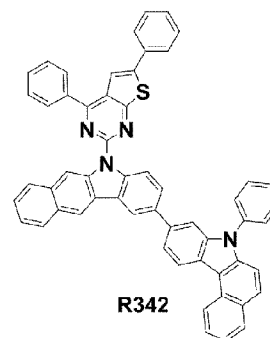
R339



R340

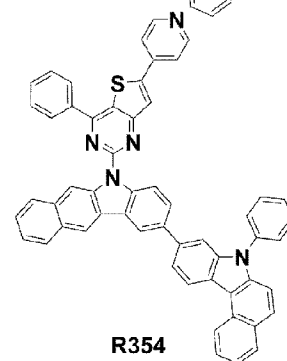
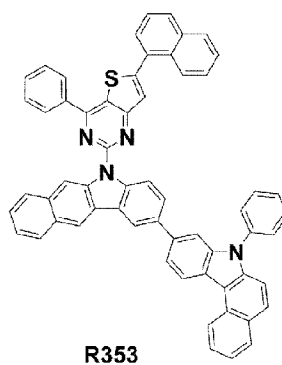
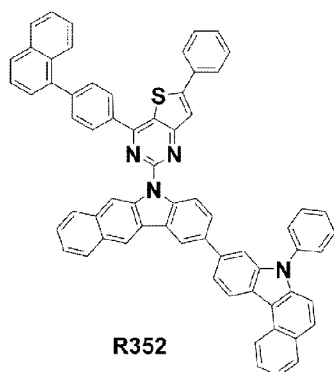
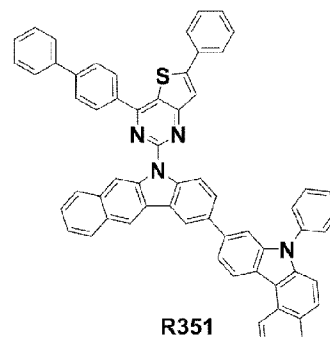
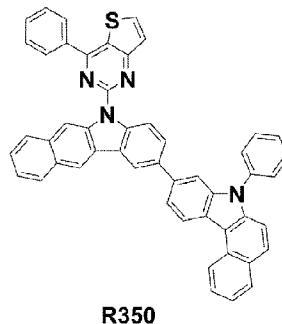
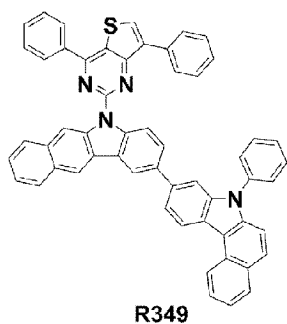
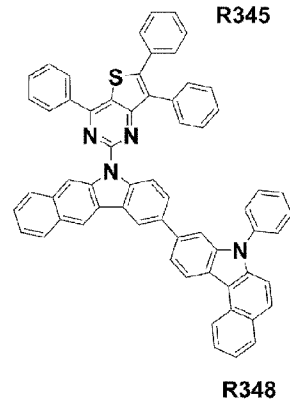
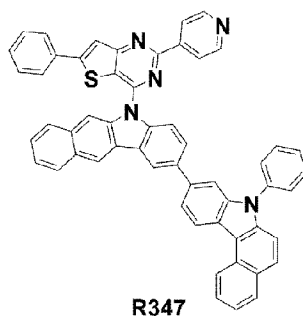
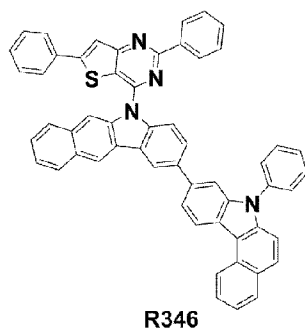
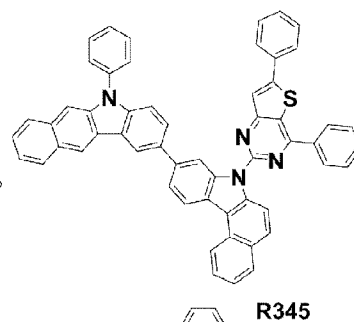
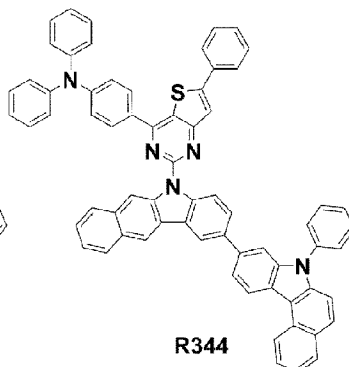
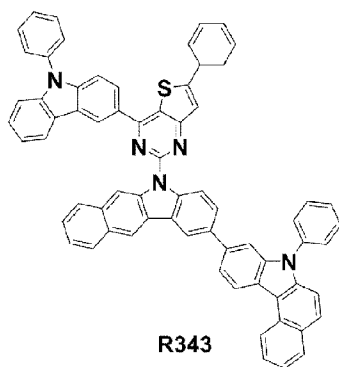


R341

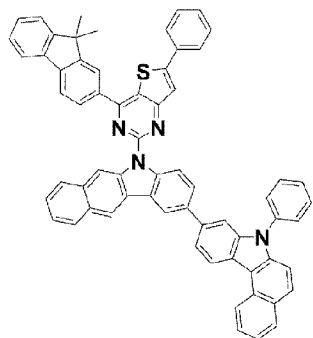


R342

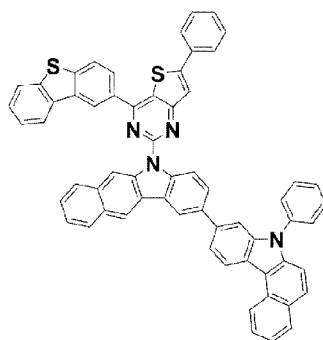
[93]



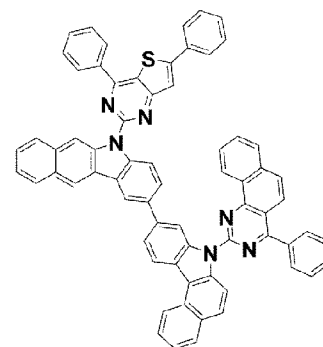
[94]



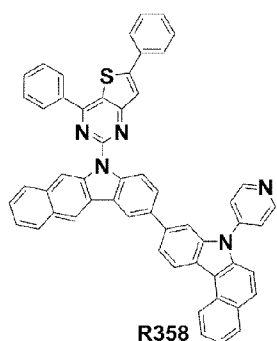
R355



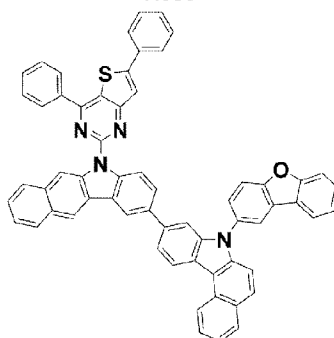
R356



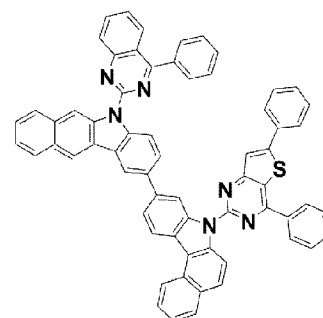
R357



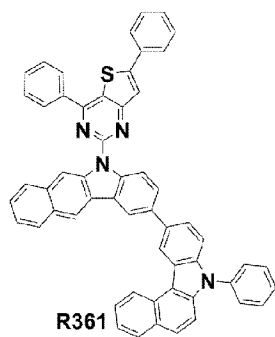
R358



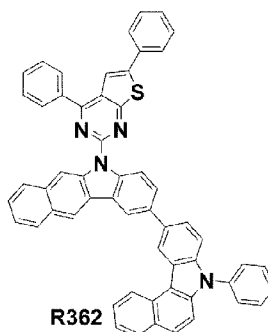
R359



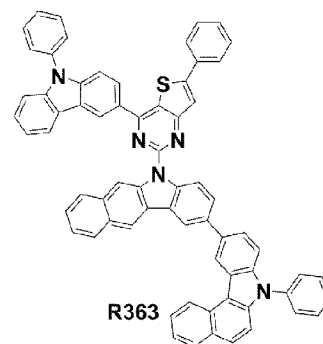
R360



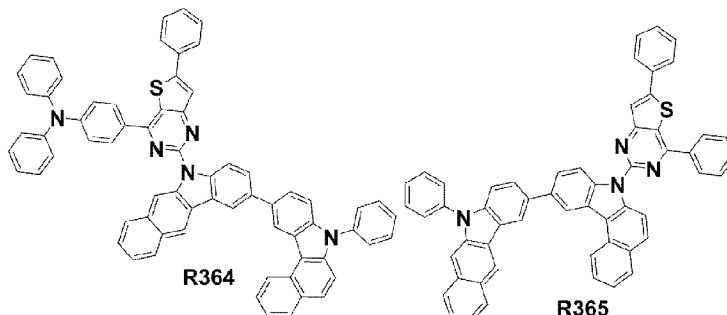
R361



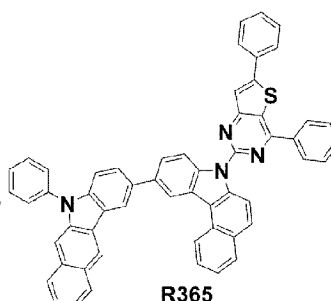
R362



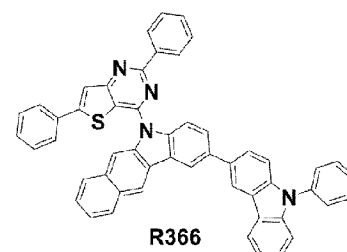
R363



R364

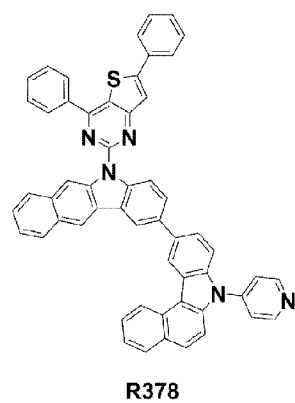
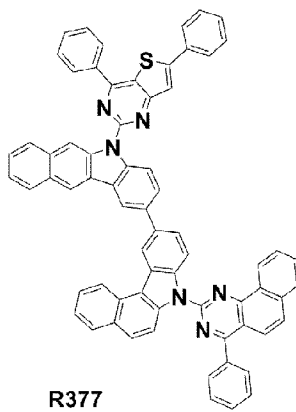
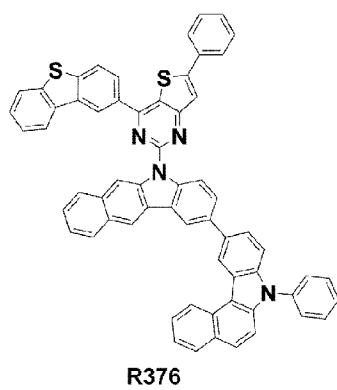
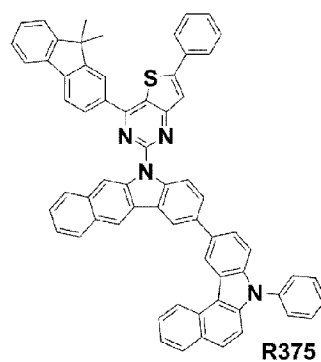
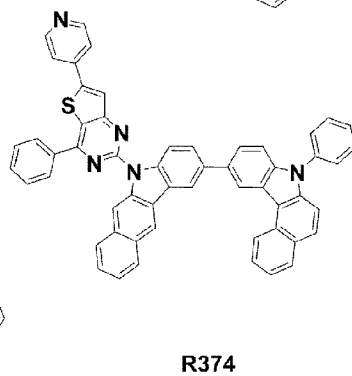
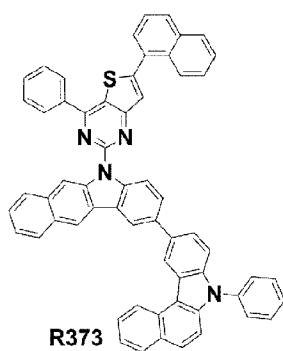
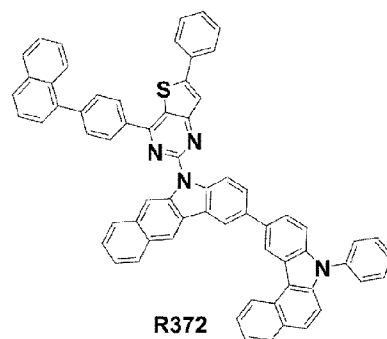
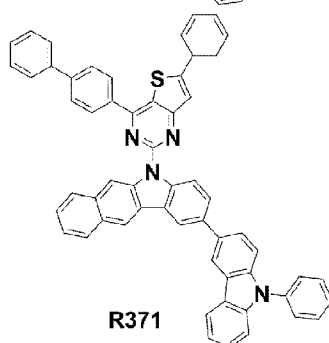
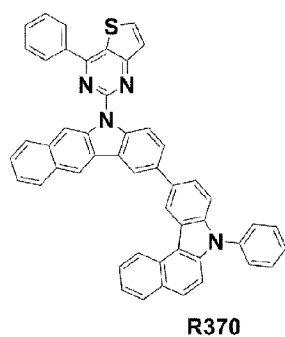
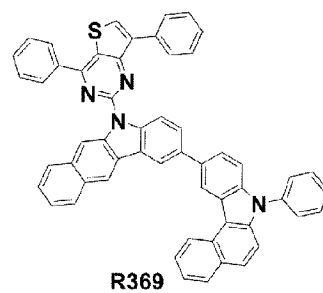
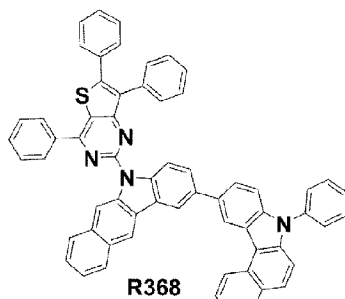
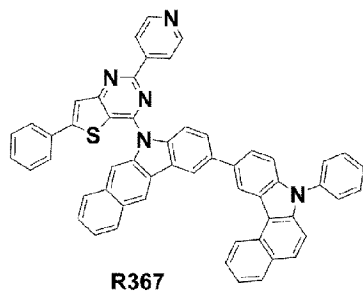


R365

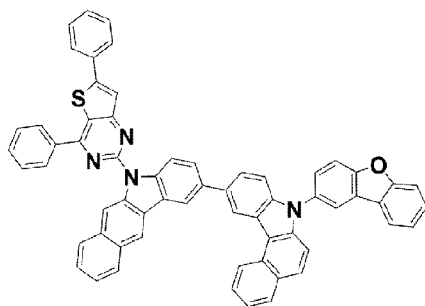


R366

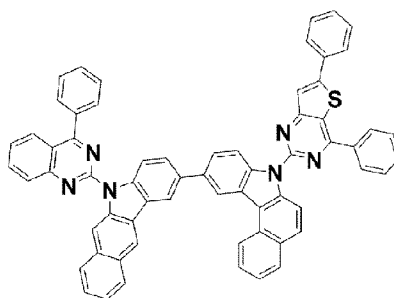
[95]



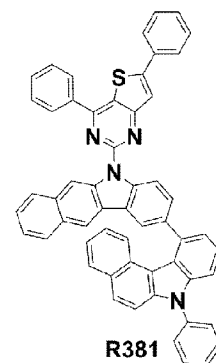
[96]



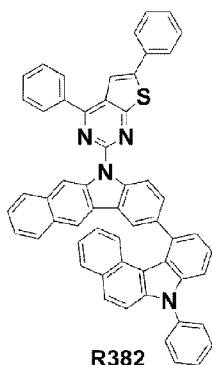
R379



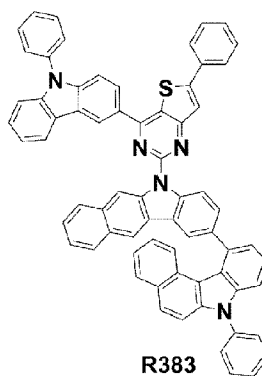
R380



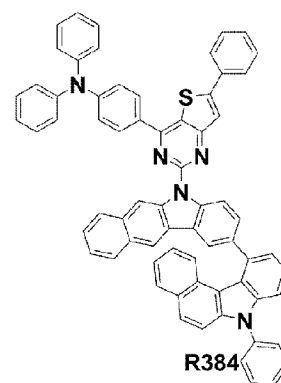
R381



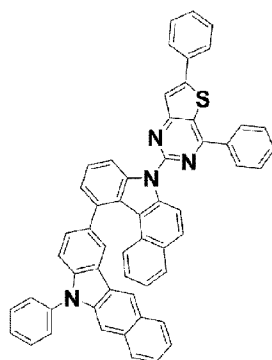
R382



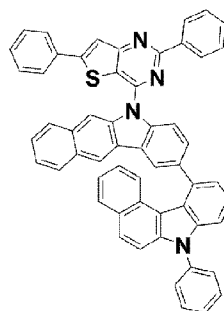
R383



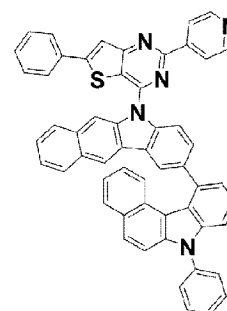
R384



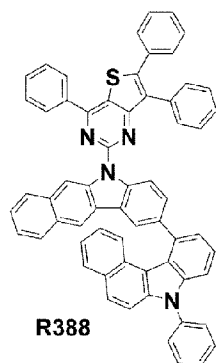
R385



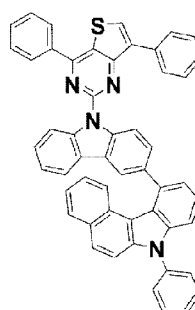
R386



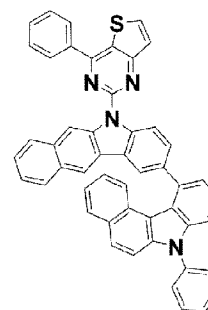
R387



R388

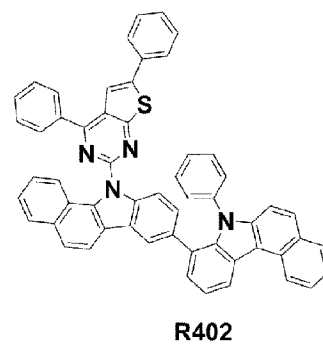
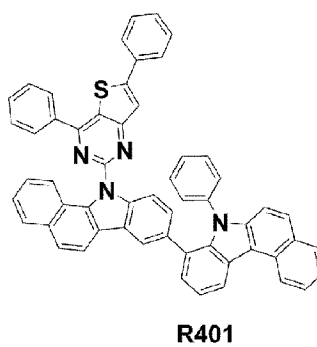
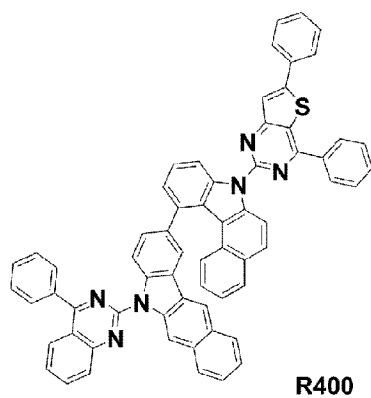
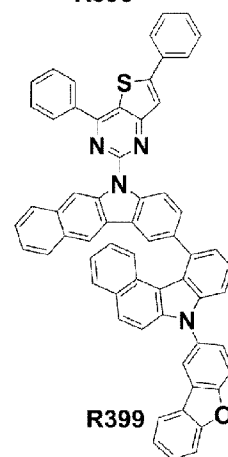
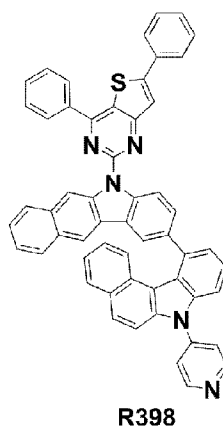
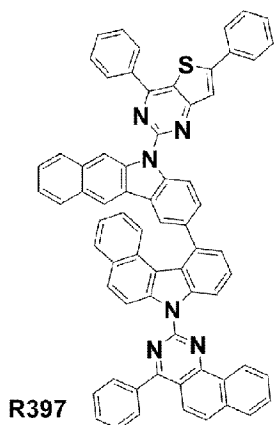
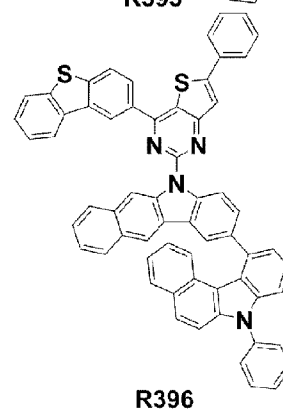
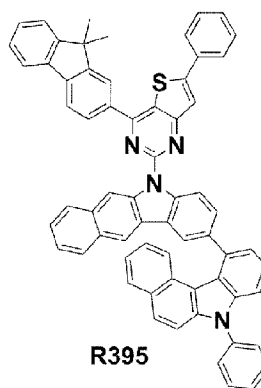
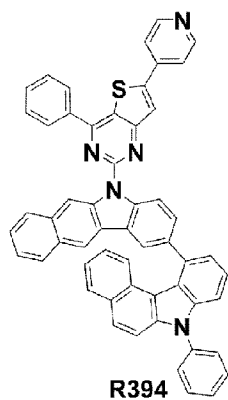
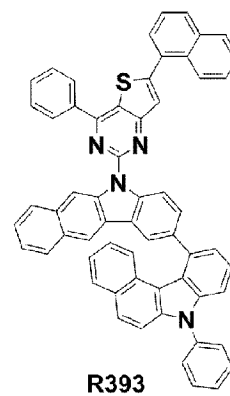
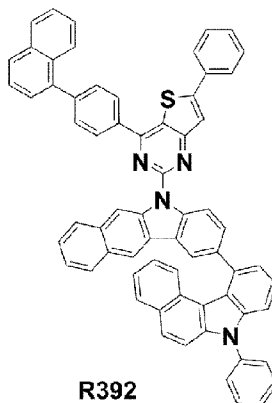
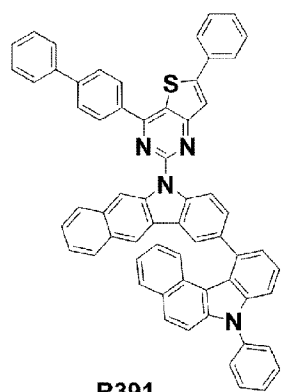


R389

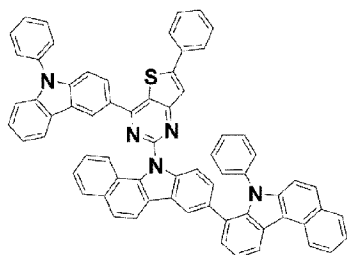


R390

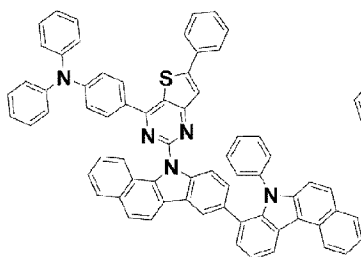
[97]



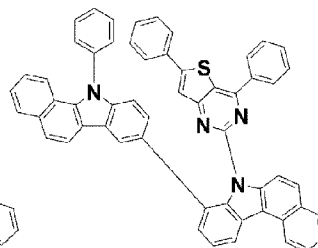
[98]



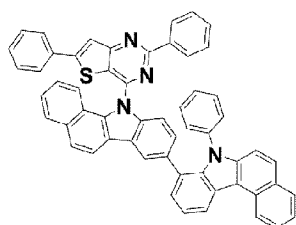
R403



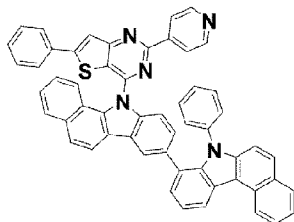
R404



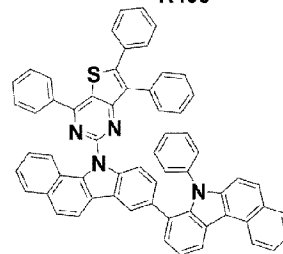
R405



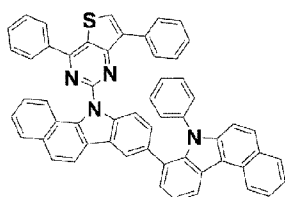
R406



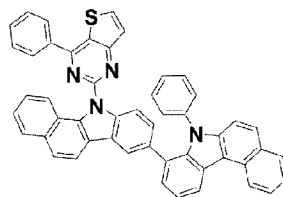
R407



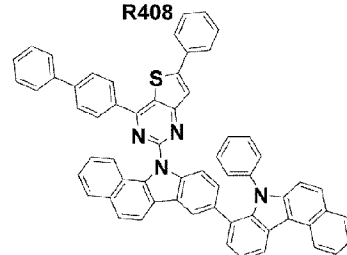
R408



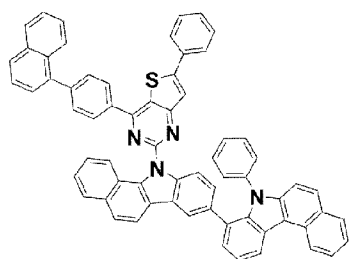
R409



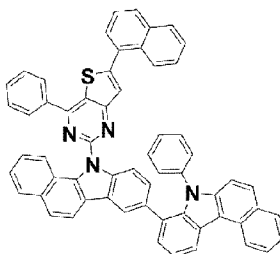
R410



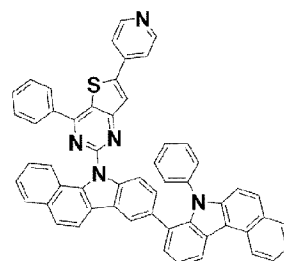
R411



R412

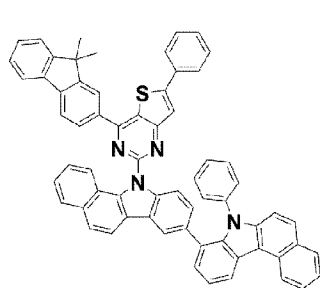


R413

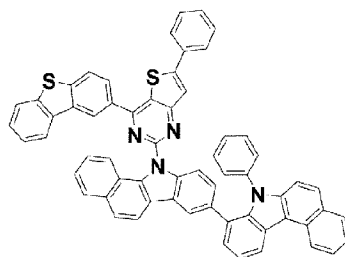


R414

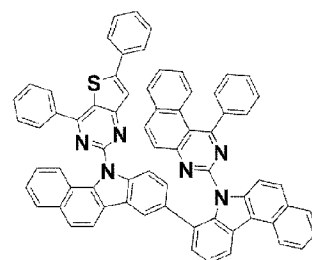
[99]



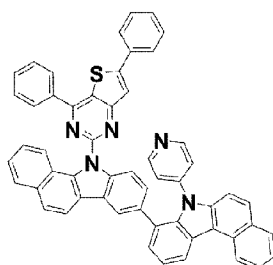
R415



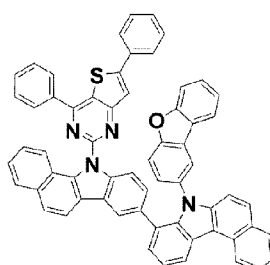
R416



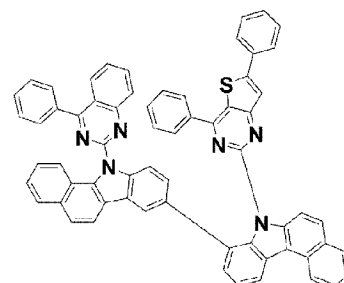
R417



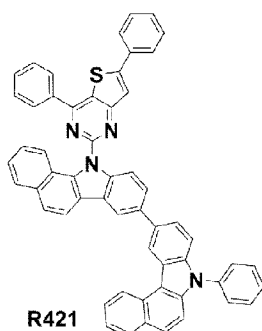
R418



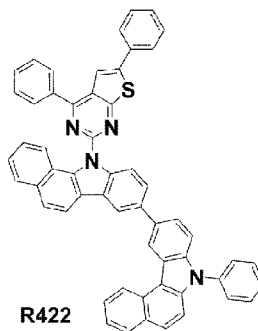
R419



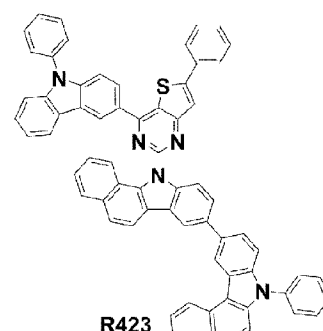
R420



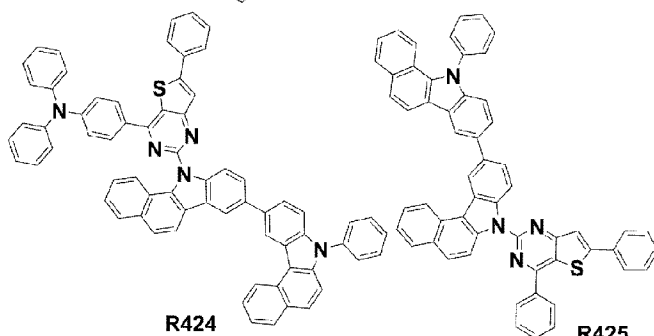
R421



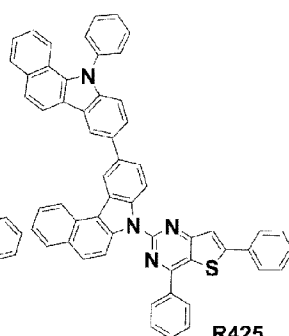
R422



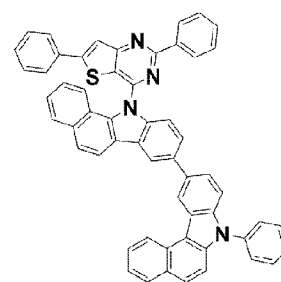
R423



R424

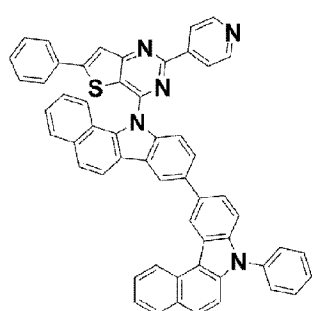


R425

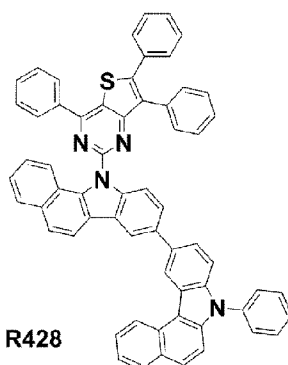


R426

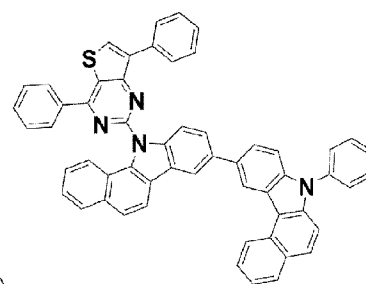
[100]



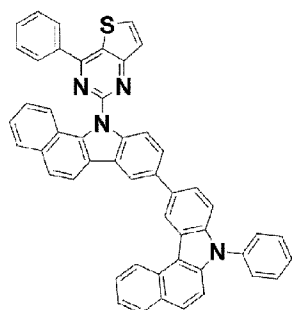
R427



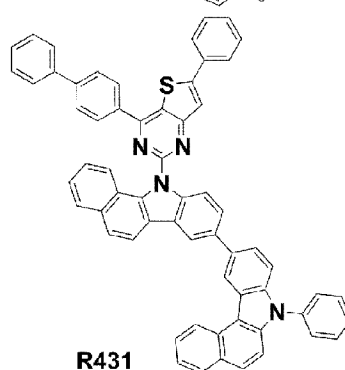
R428



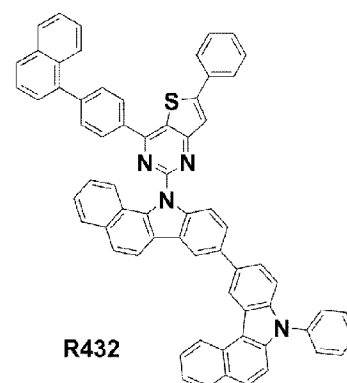
R429



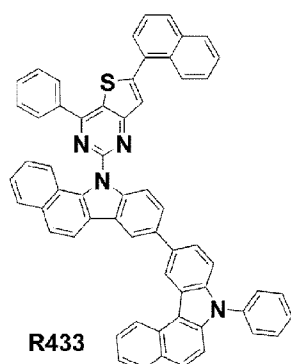
R430



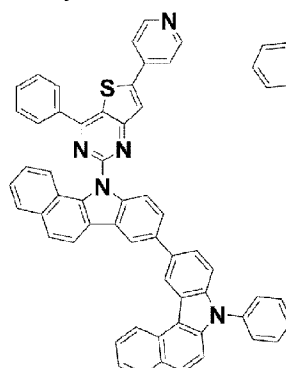
R431



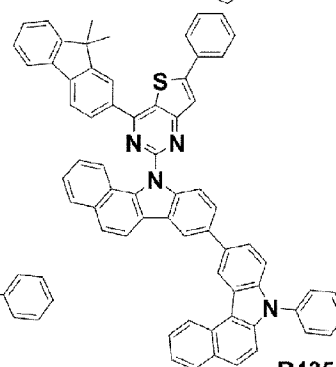
R432



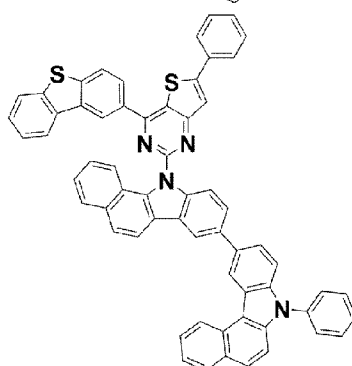
R433



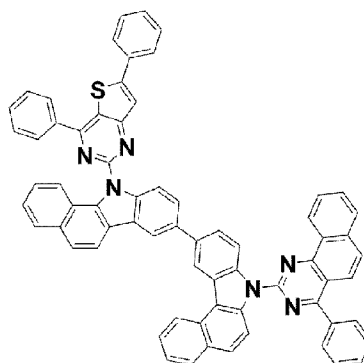
R434



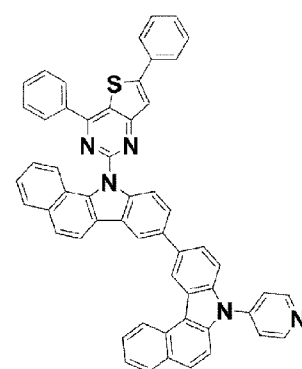
R435



R436

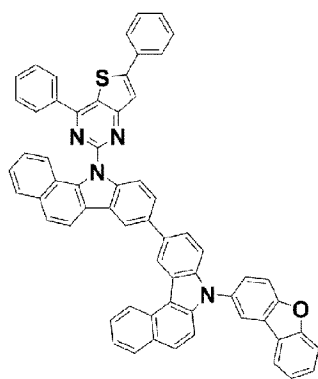


R437

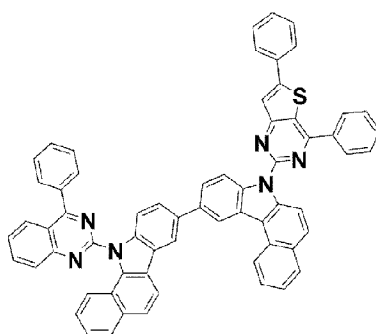


R438

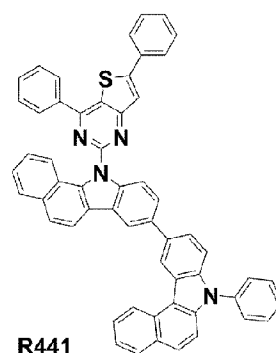
[101]



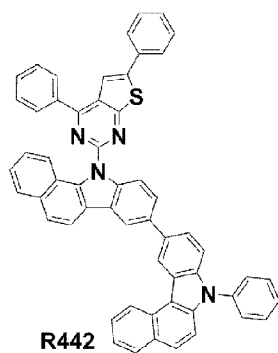
R439



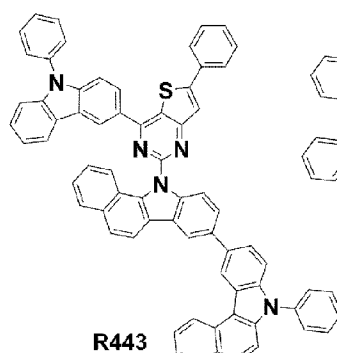
R440



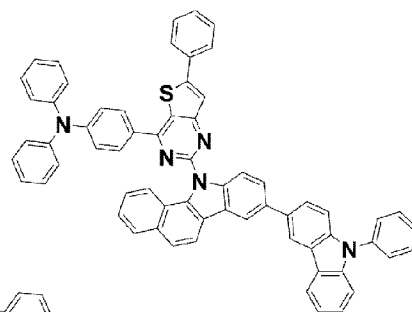
R441



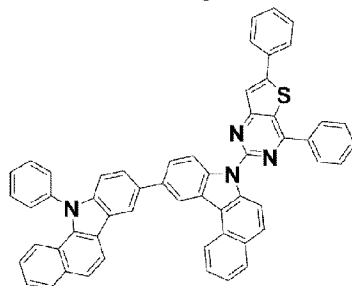
R442



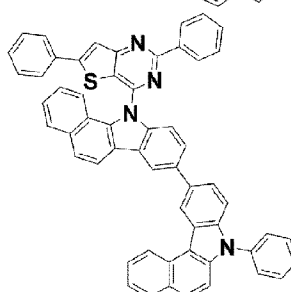
R443



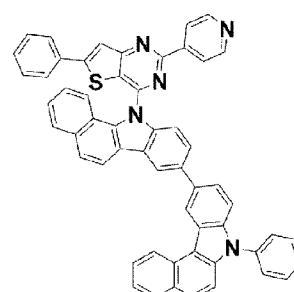
R444



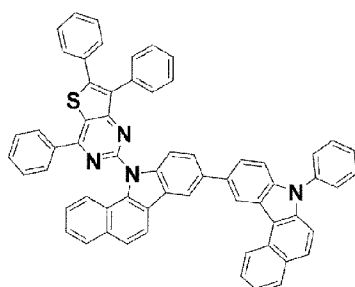
R445



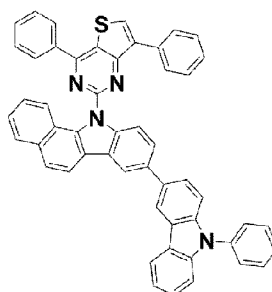
R446



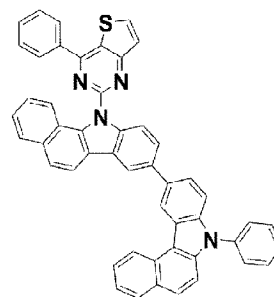
R447



R448

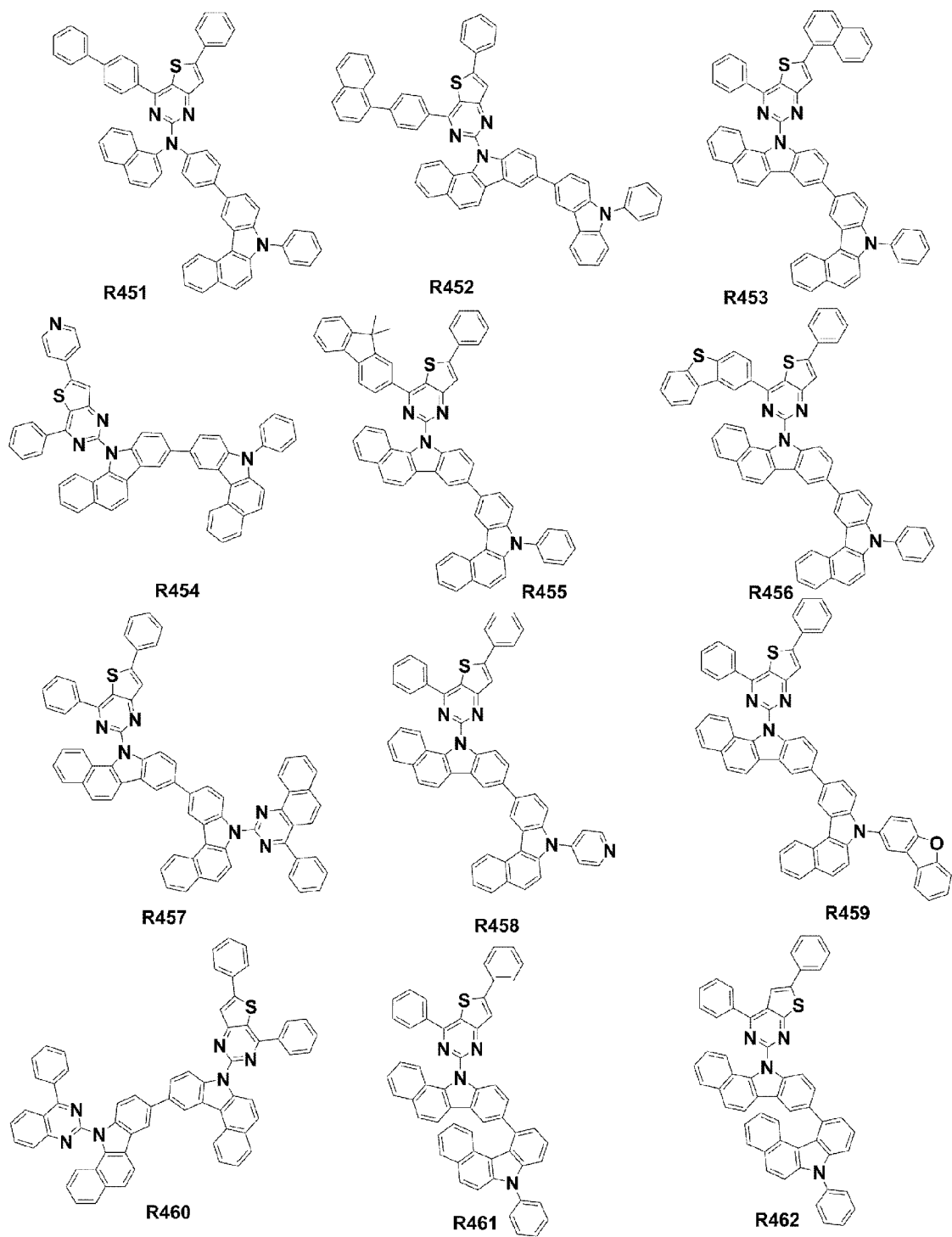


R449

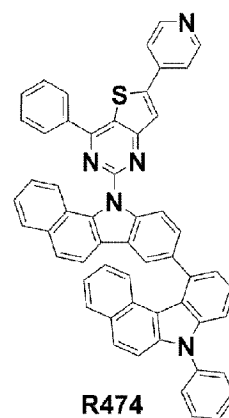
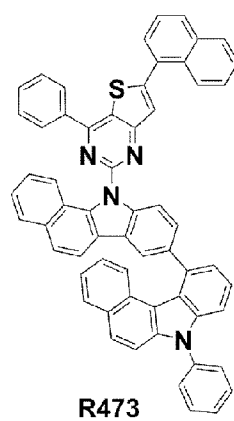
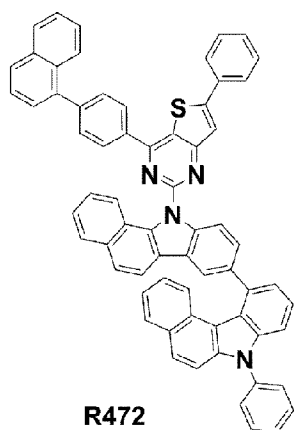
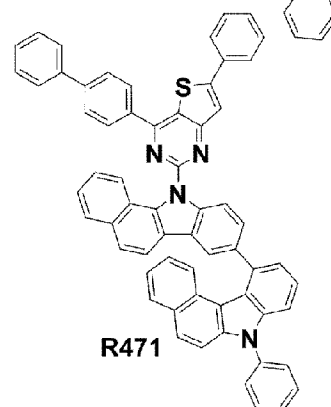
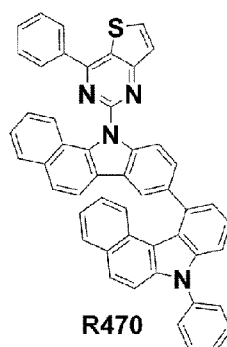
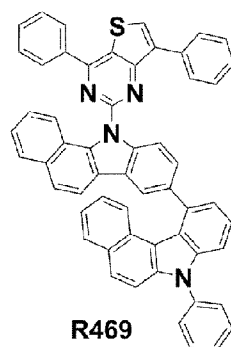
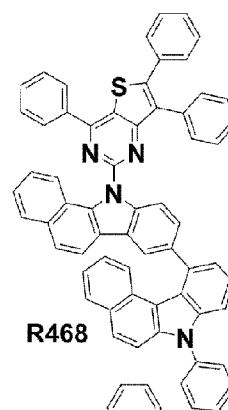
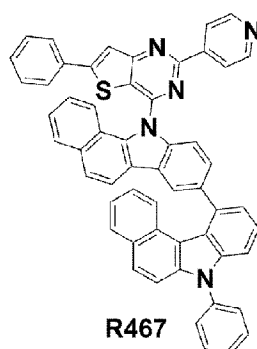
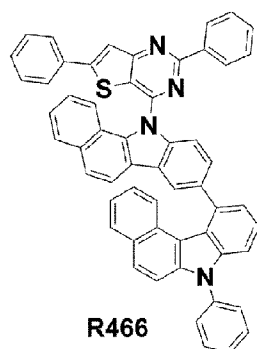
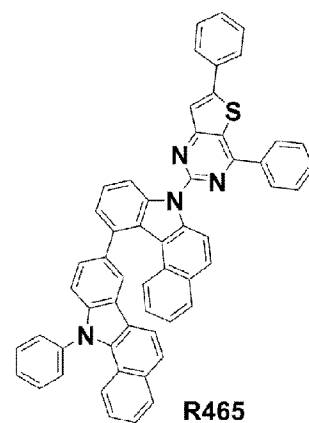
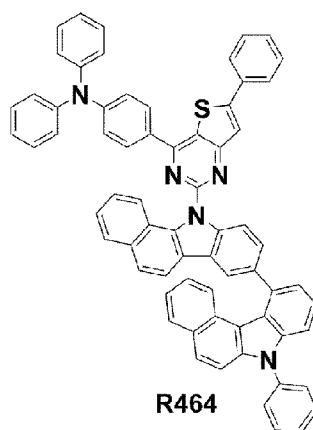
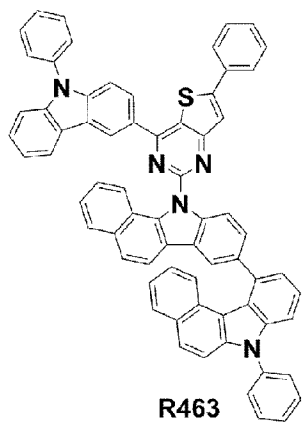


R450

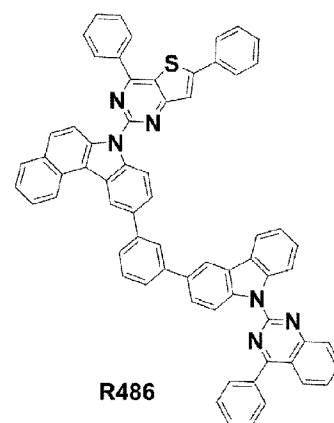
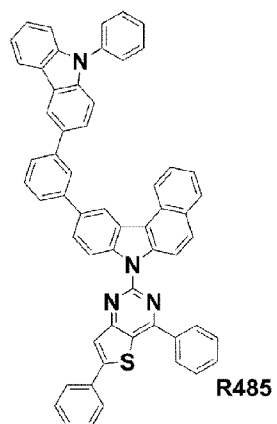
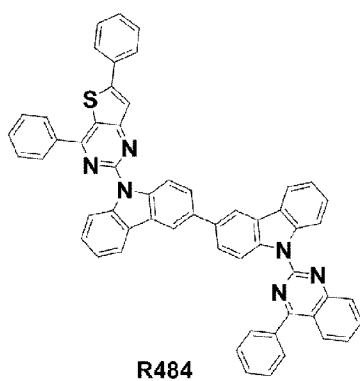
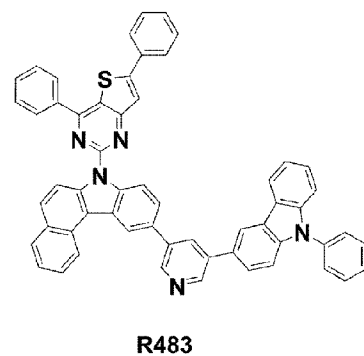
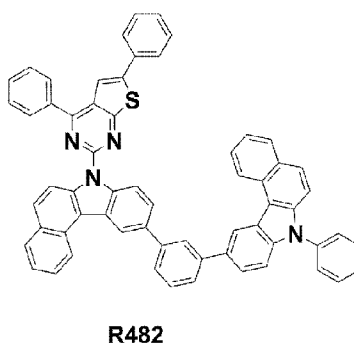
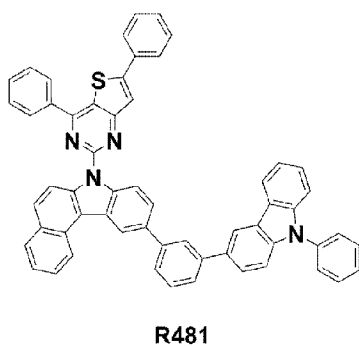
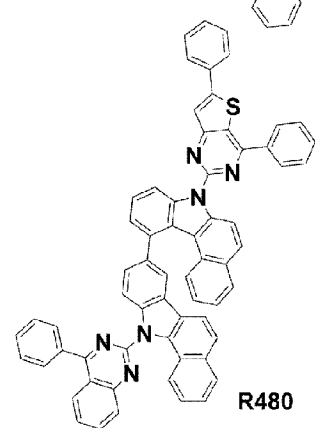
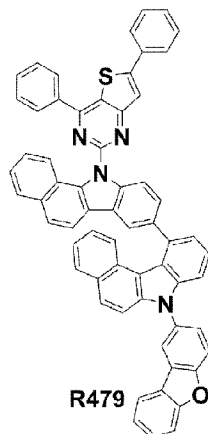
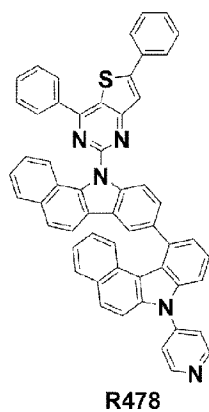
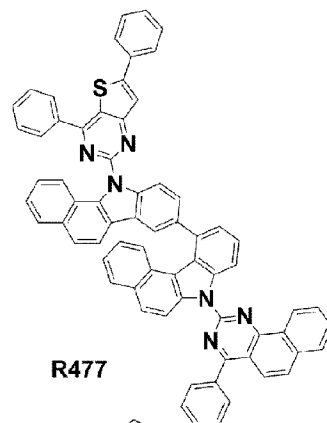
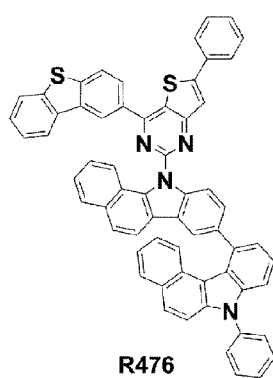
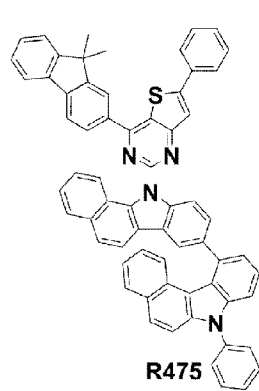
[102]



[103]



[104]



c1ccc(cc1)c2c(c3cc4ccccc4cc3s2)c5cc6ccccc6cc5n5c4ccccc4n5

The chemical structure of compound 6 is shown. It consists of two benzimidazole moieties connected by a long linker chain. The linker chain includes a thiophene ring substituted with a phenyl group at the 2-position. The entire molecule forms a large macrocycle.

R492

Chemical structure of compound 10, a macrocyclic molecule. It features two indazole units linked by a long chain containing a benzofuran moiety. The structure is symmetrical, with the indazole units at the ends and the benzofuran unit in the middle of the chain.

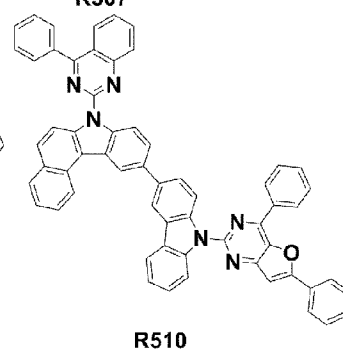
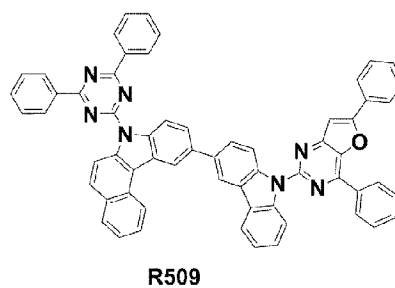
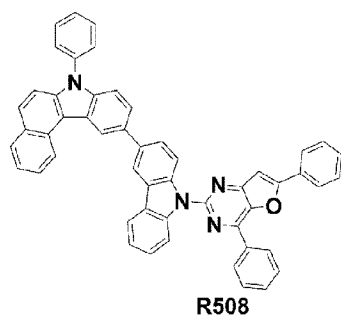
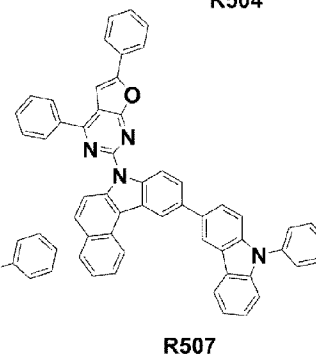
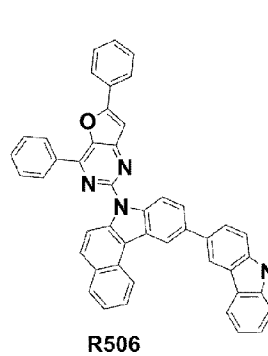
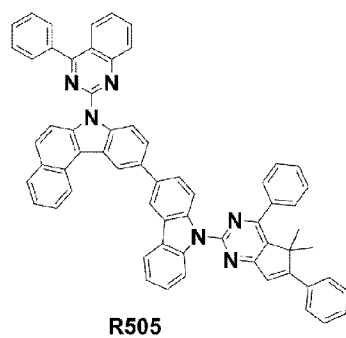
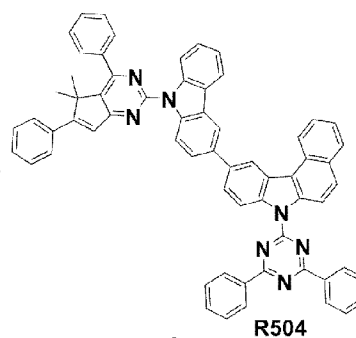
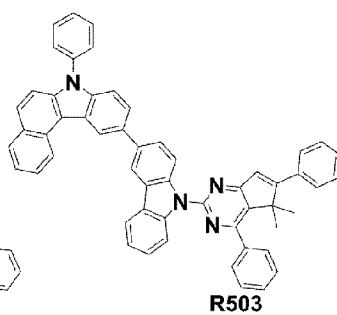
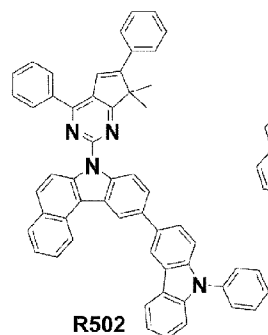
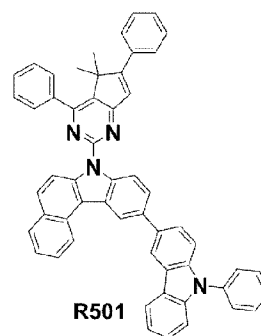
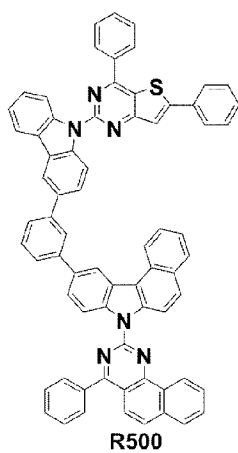
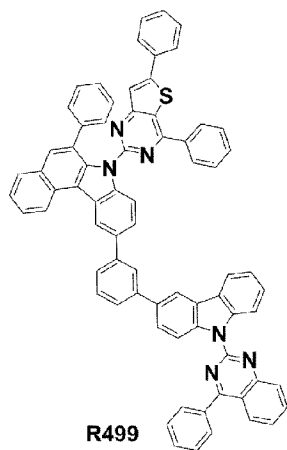
The chemical structure shows a macrocyclic molecule. It consists of two benzothiazole units and two fluorene units. The benzothiazole units are connected to the fluorene units via their 2-positions. The fluorene units are connected to each other via their 9-positions, forming a macrocyclic ring. The structure is symmetrical and features several aromatic rings and heteroatoms (sulfur and nitrogen).

The chemical structure of compound 6 consists of a central benzimidazole moiety. The nitrogen atom at position 1 of the imidazole ring is substituted with a phenyl group. The carbon atom at position 2 of the imidazole ring is substituted with another phenyl group. The benzene ring fused to the imidazole is substituted at its 5-position with a thiophene-2-ylmethyl group.

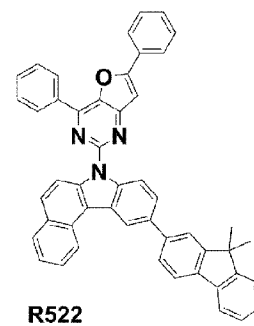
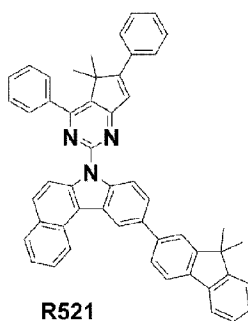
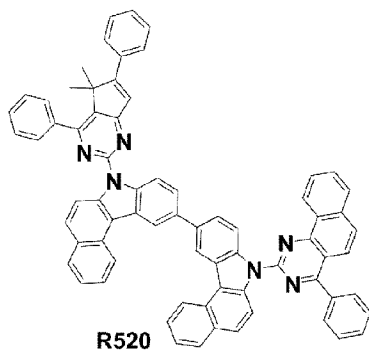
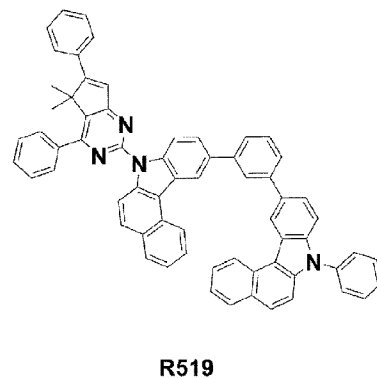
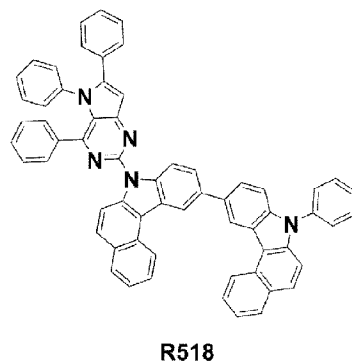
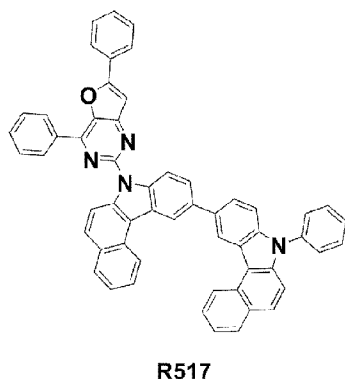
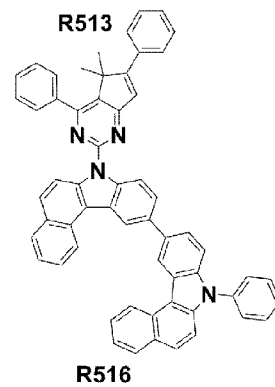
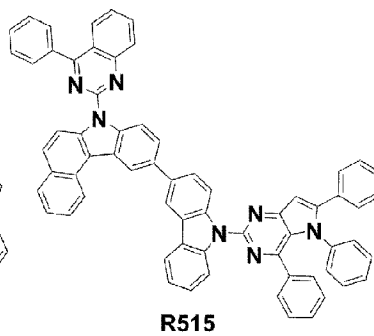
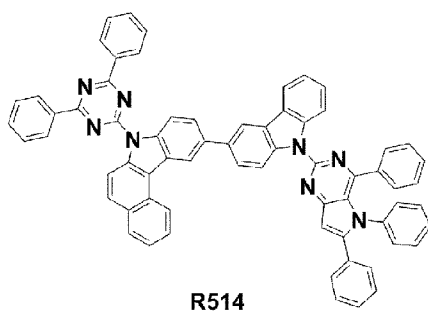
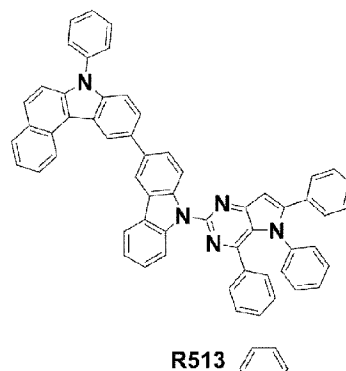
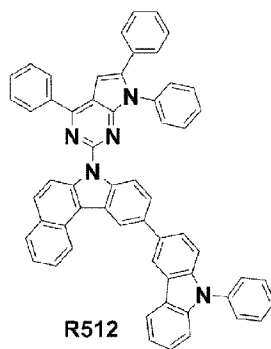
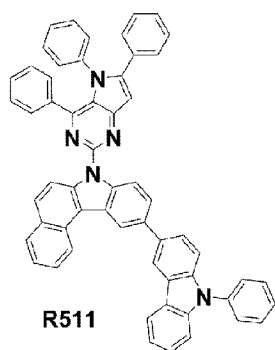
P408

R498

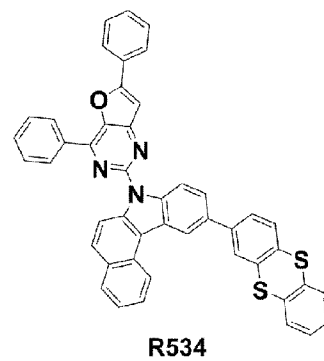
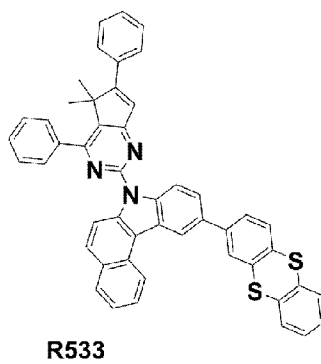
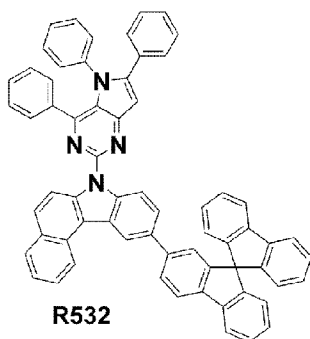
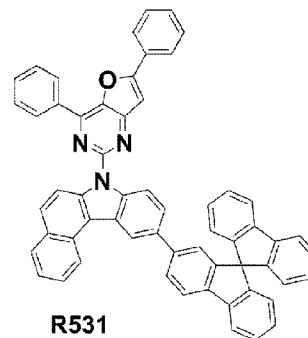
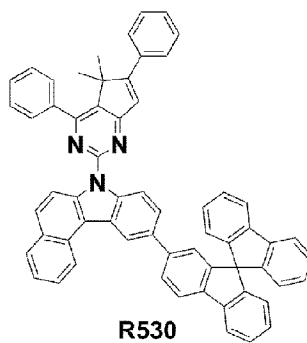
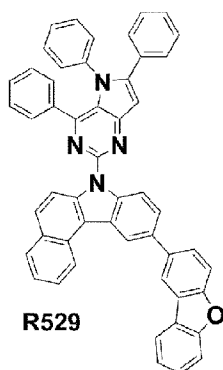
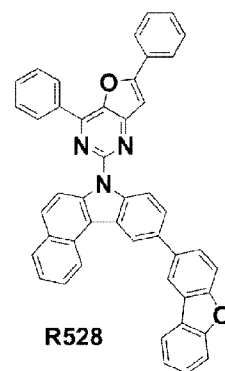
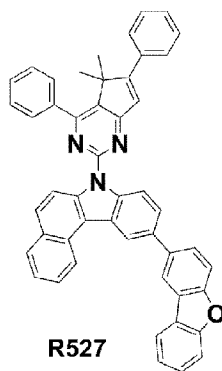
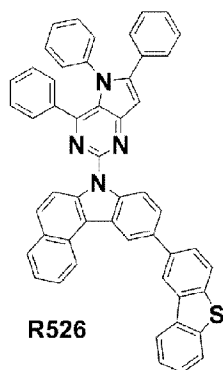
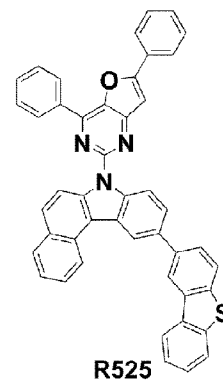
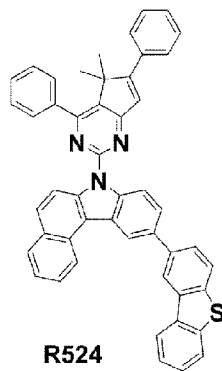
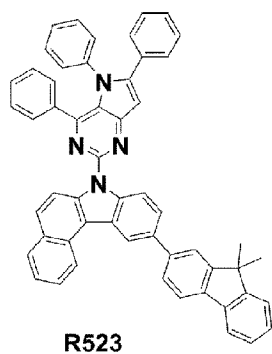
[106]



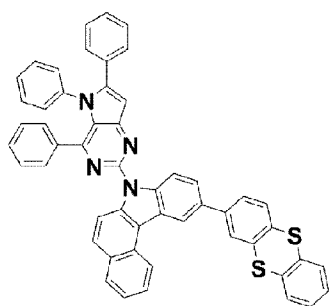
[107]



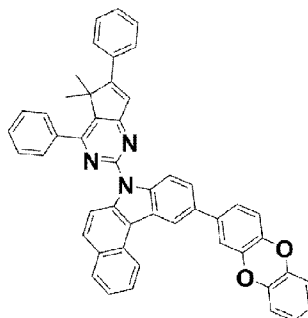
[108]



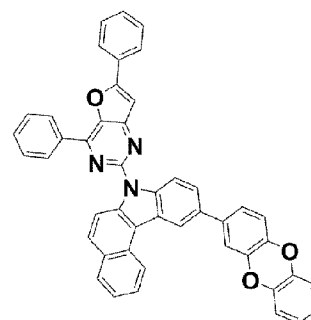
[109]



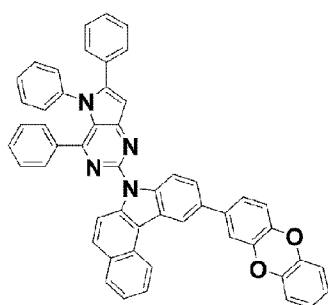
R535



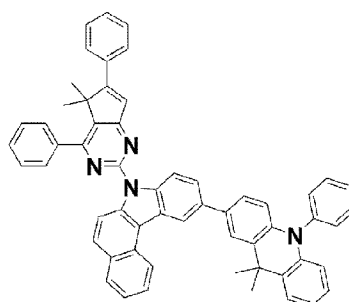
R536



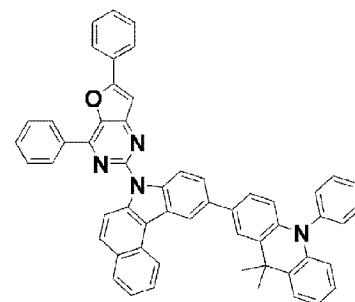
R537



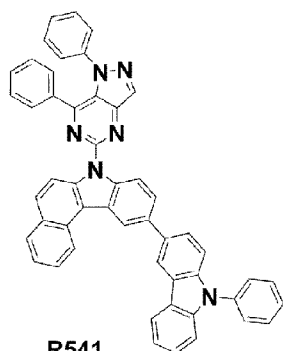
R538



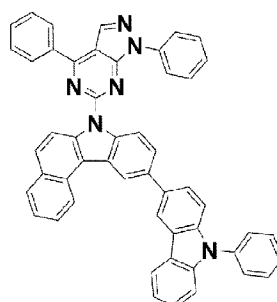
R539



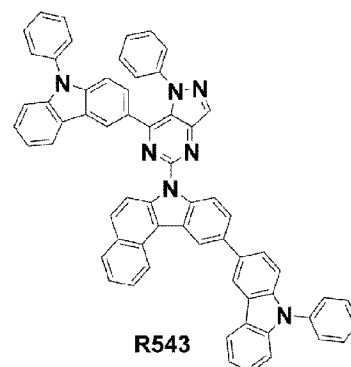
R540



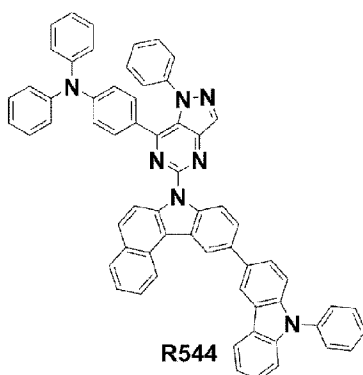
R541



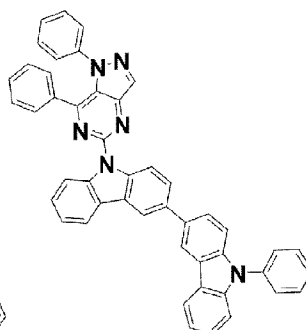
R542



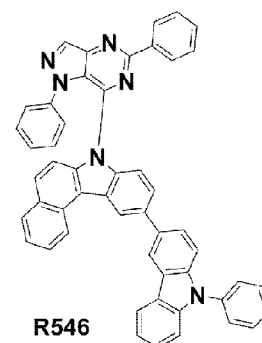
R543



R544

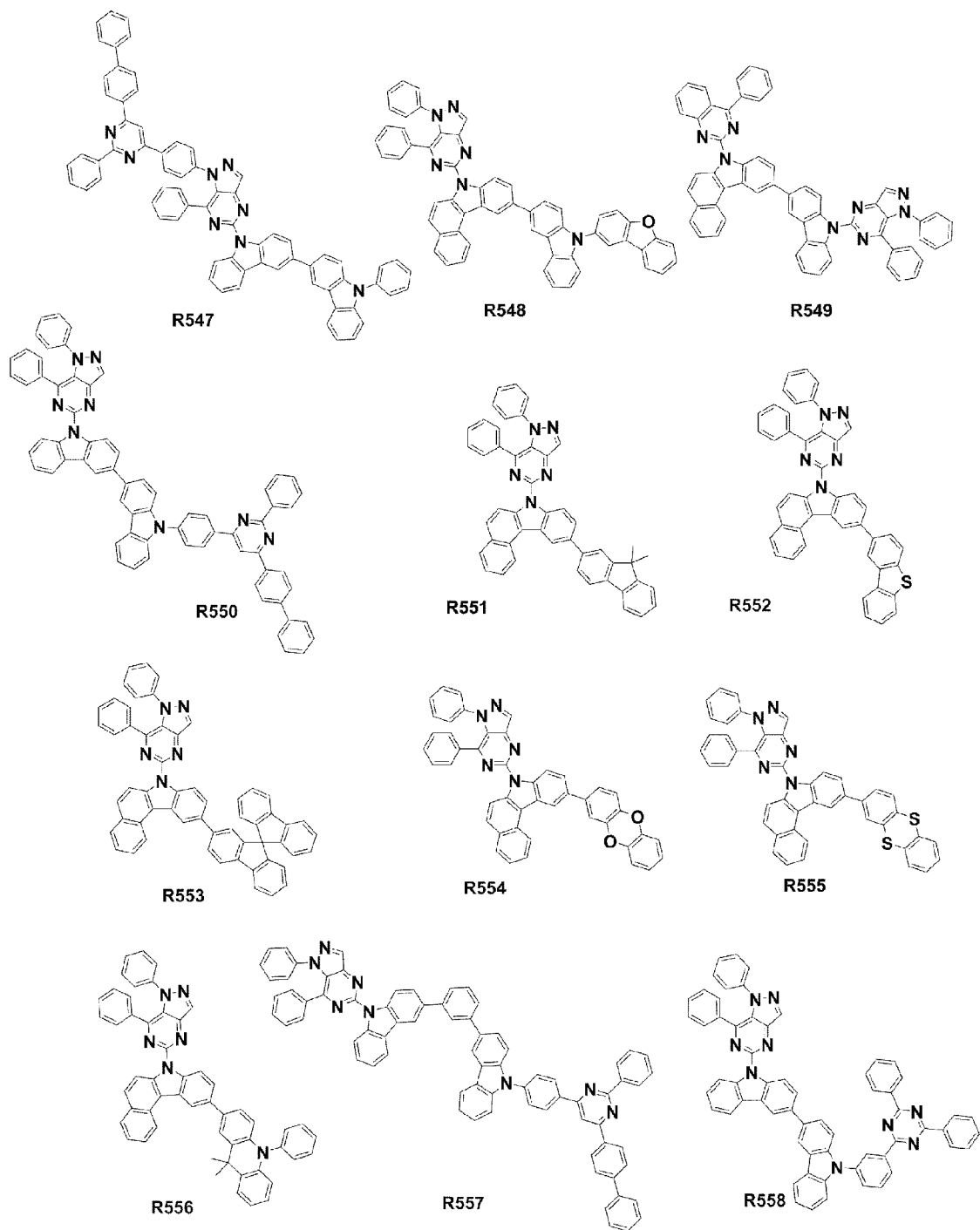


R545

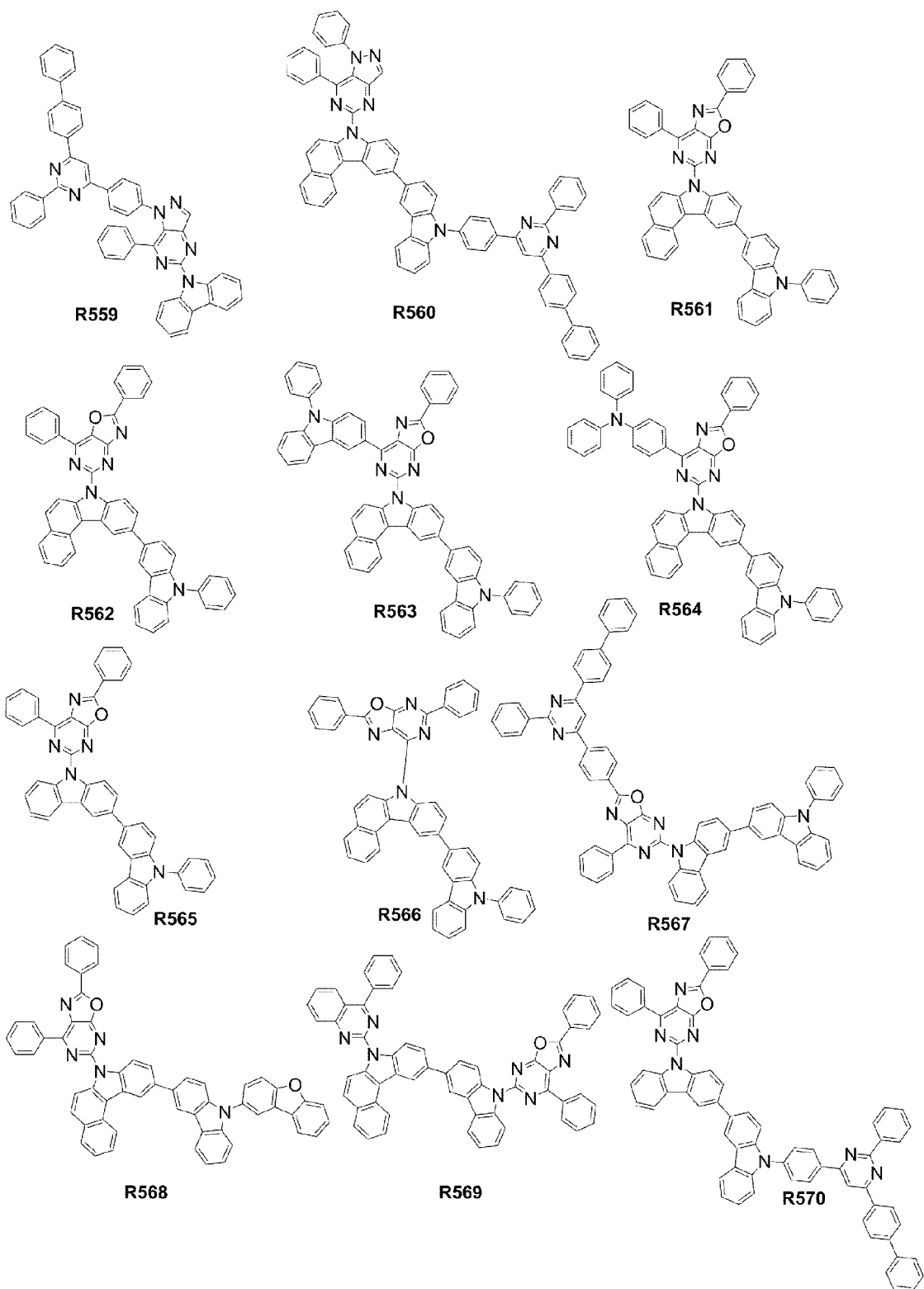


R546

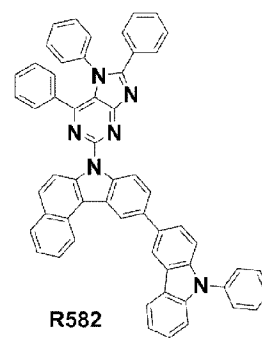
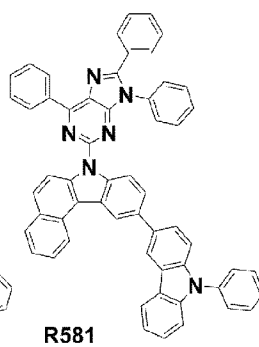
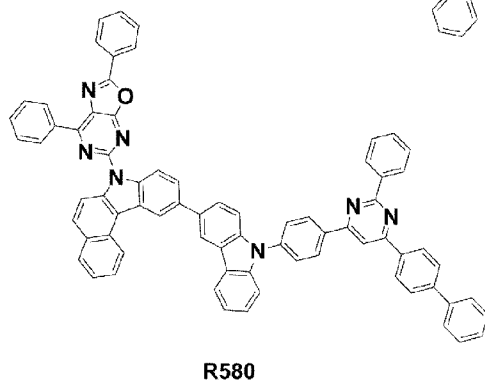
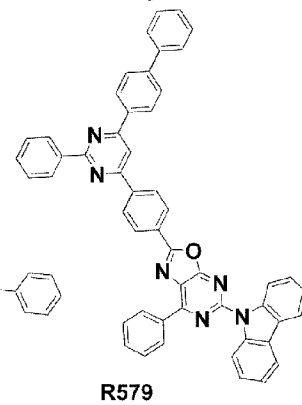
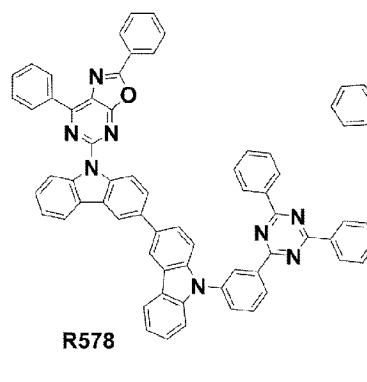
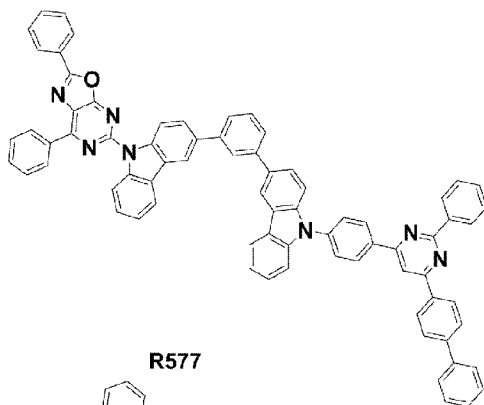
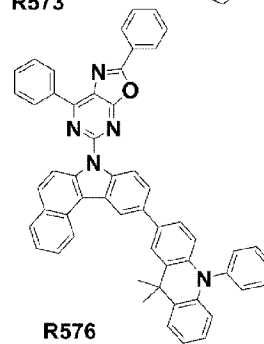
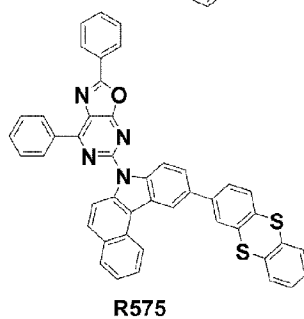
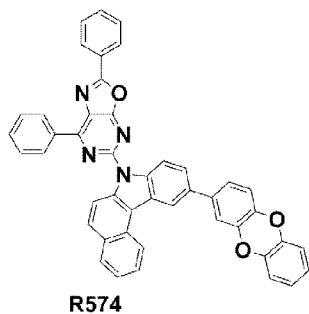
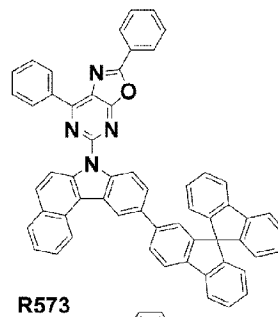
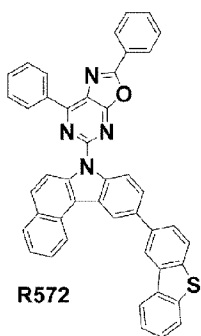
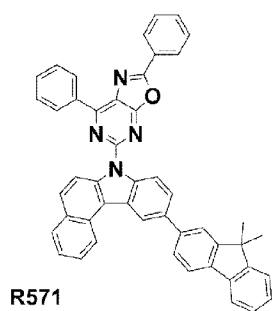
[110]



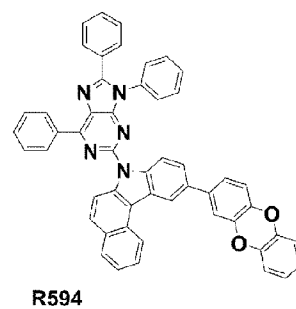
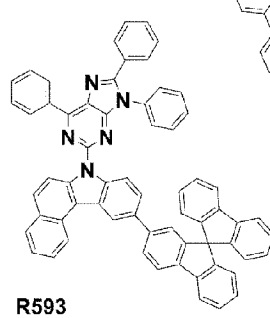
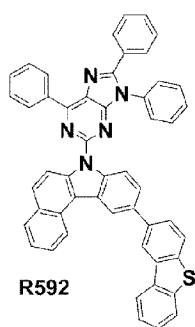
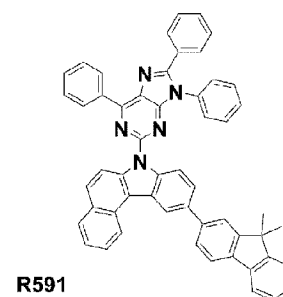
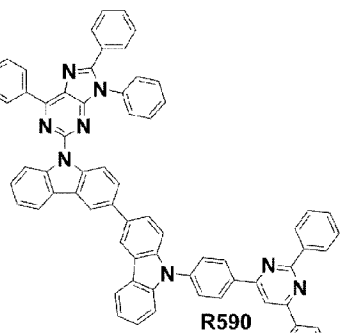
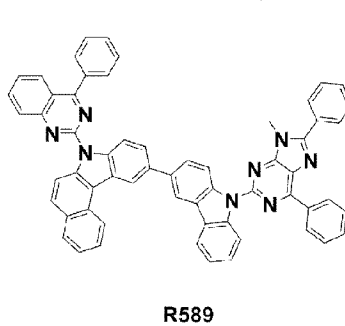
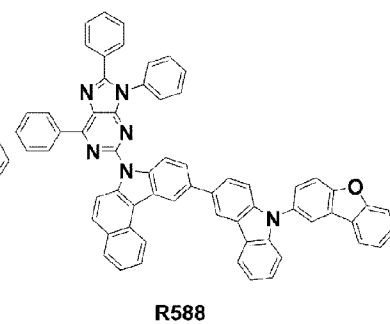
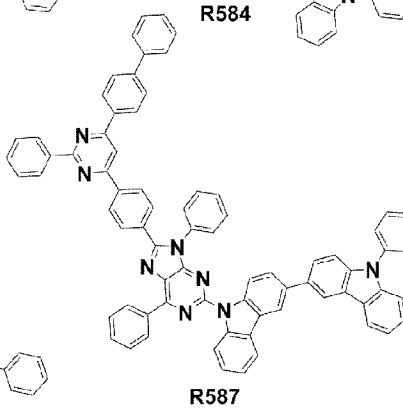
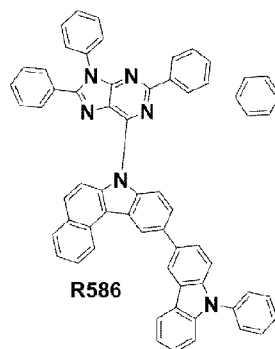
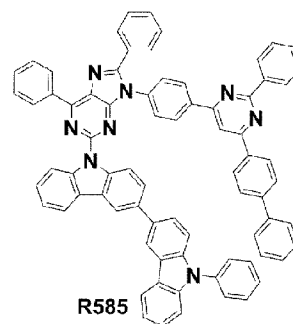
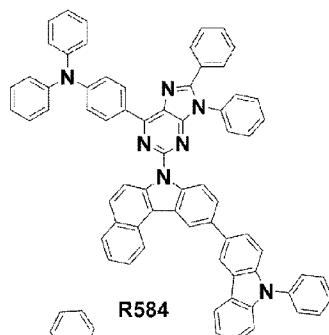
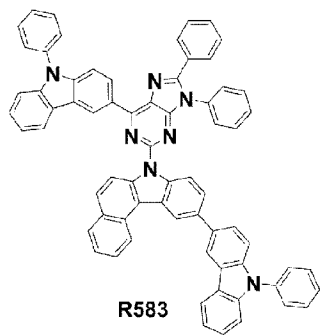
[111]



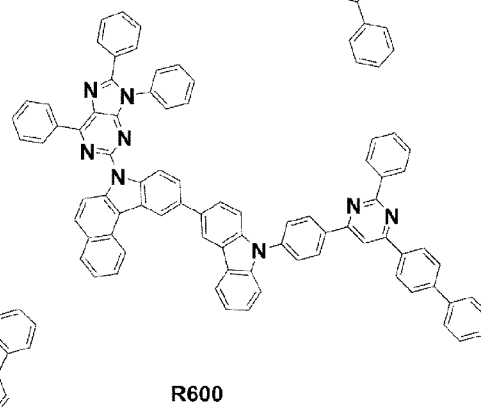
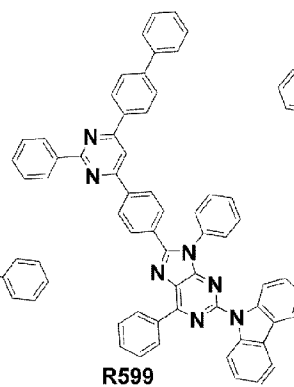
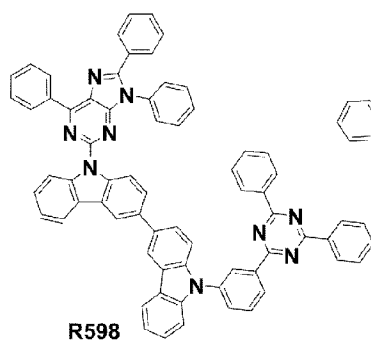
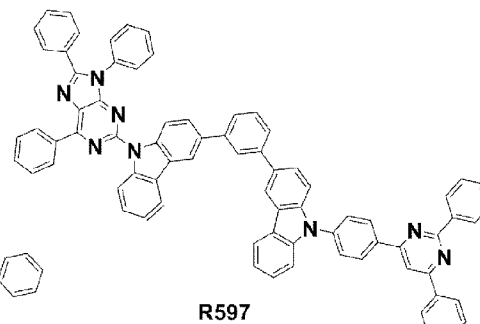
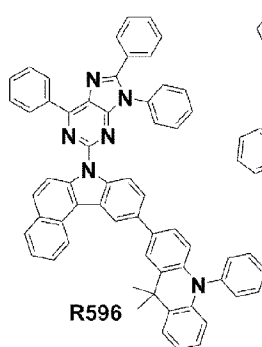
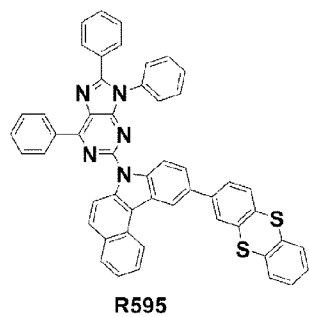
[112]



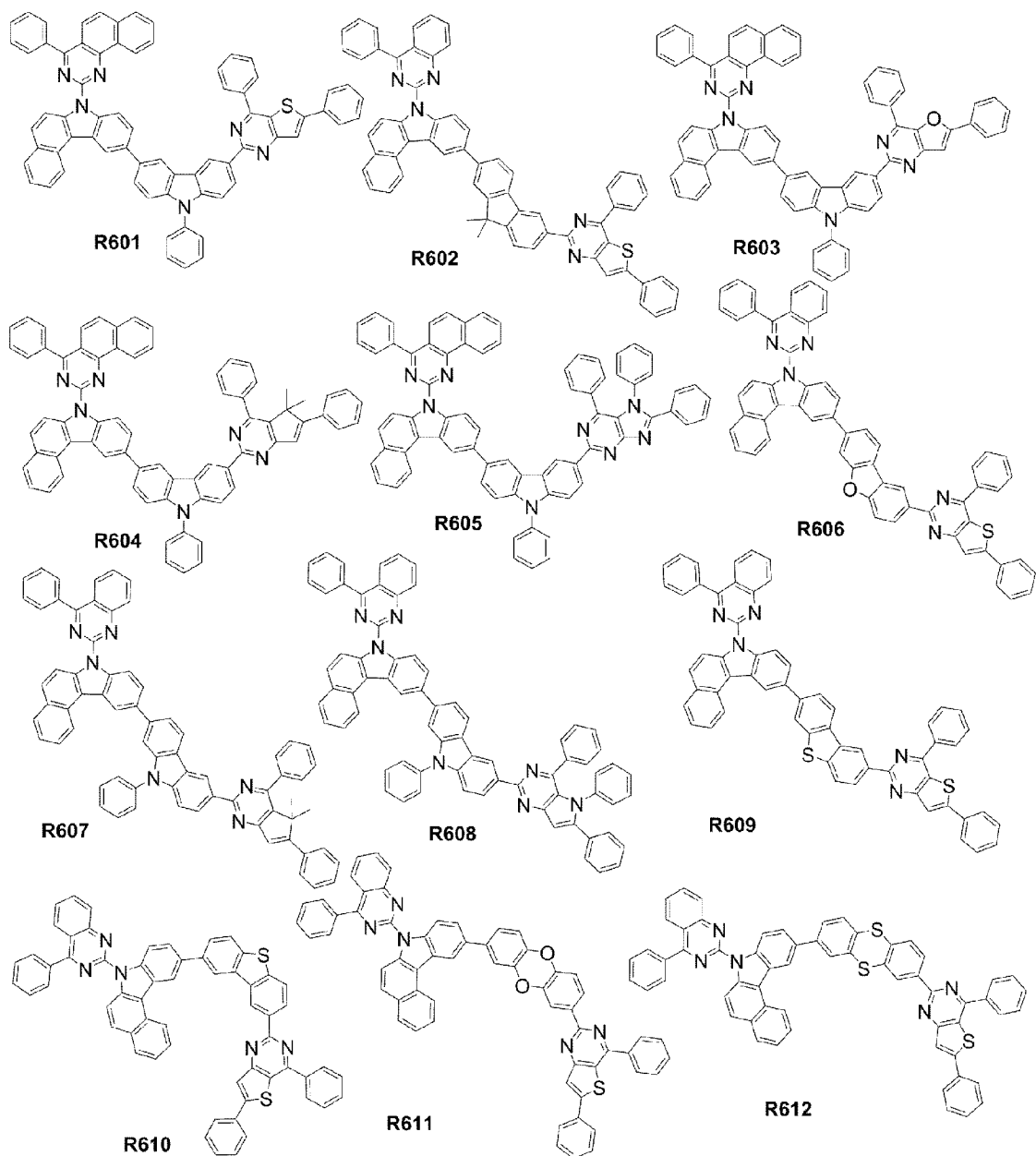
[113]



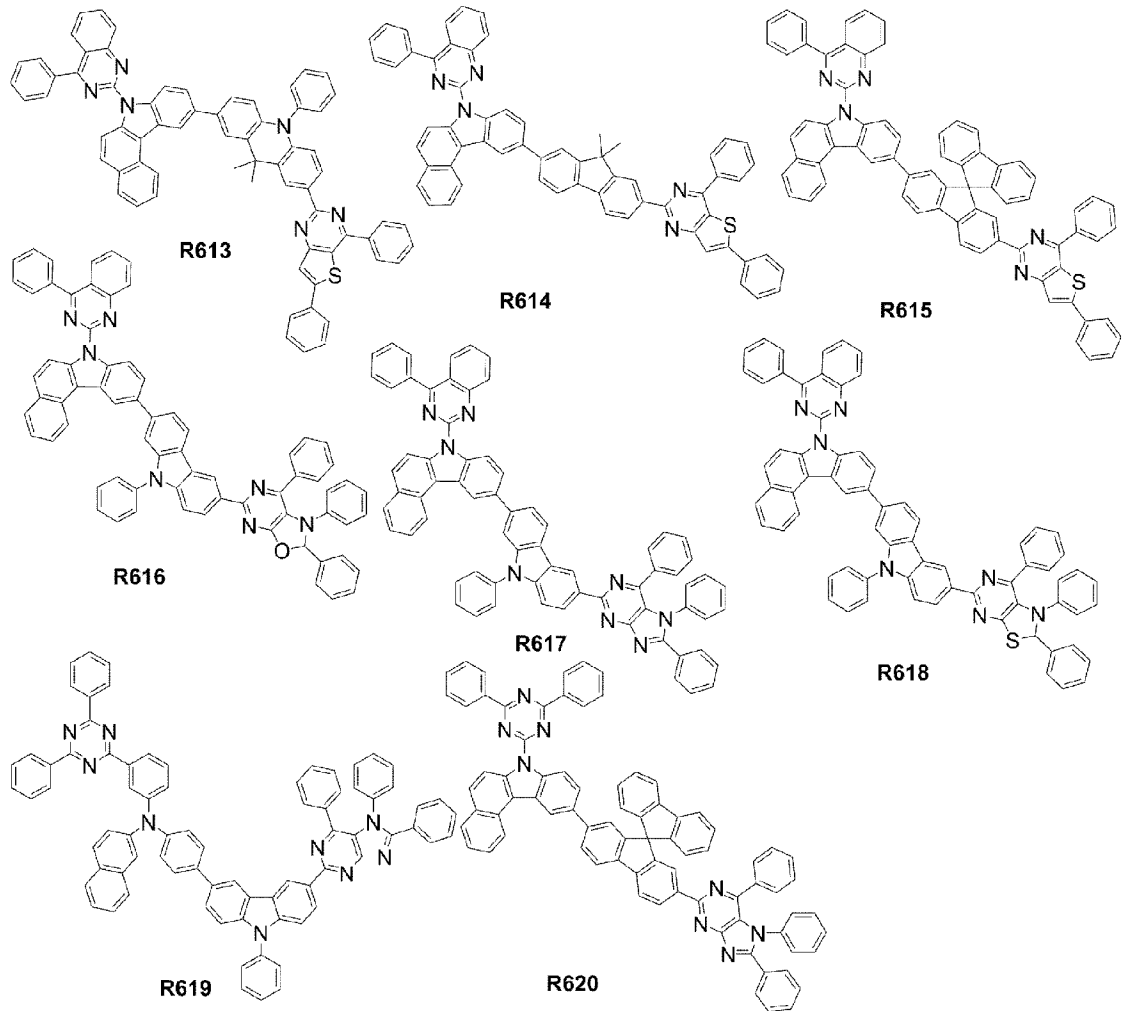
[114]



[115]



[116]



[117]

[118] **2. 유기 전계 발광 소자**

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

[120] 구체적으로, 본 발명의 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 포함되거나, 또는 2 이상이 혼합된 상태로 포함될 수 있다.

[121] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 수명 개선층, 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 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 바람직하다.

[122] 구체적으로, 상기 발광층은 호스트를 포함할 수 있는데, 이때 호스트로서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 단독으로 포함하거나 상기 화학식 1로 표시되는

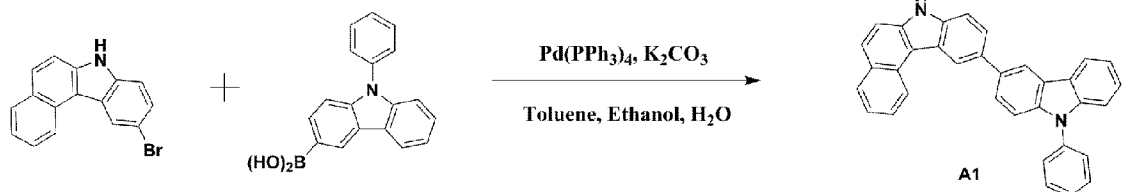
화합물과 함께 다른 화합물을 호스트로 포함하는 것이다.

- [123] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 수명 개선층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있다. 또한 상기 전극(음극, 또는 양극)과 유기물층의 계면에 절연층 또는 접착층이 더 적층될 수 있다.
- [124] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 제조할 수 있다.
- [125] 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.
- [126] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.
- [127] 또한, 양극 물질은 특별히 한정되지 않으나, 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 사용할 수 있다.
- [128] 또, 음극 물질은 특별히 한정되지 않으나, 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 사용할 수 있다.
- [129] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.
- [130]
- [131] 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.

[132]

[133] [준비에 1] A1의 합성

[134]



[135] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid 5.8g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%), 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A1 (5.6g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

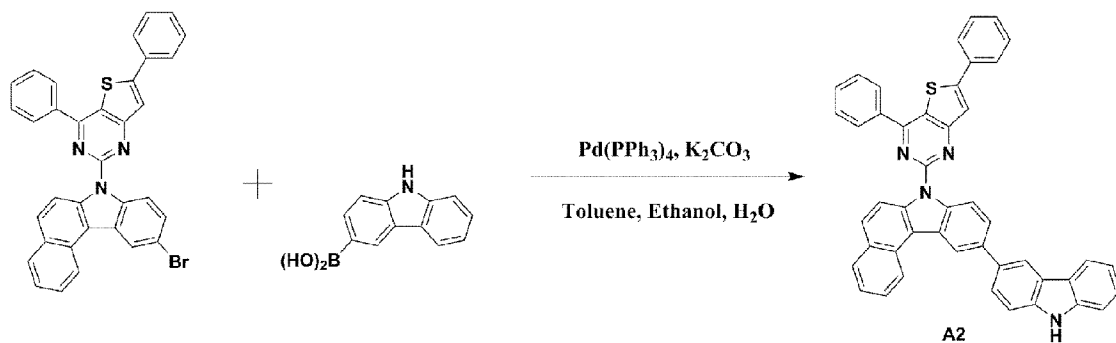
[136] GC-Mass (이론치: 458.55 g/mol, 측정치: 458 g/mol)

[137] ¹H-NMR: δ 7.25~7.28(m, 2H), 7.50~7.67(m, 13H), 7.85~7.91(m, 3H), 8.15(d, 1H), 8.48(t, 2H), 10.01(s, 1H)

[138]

[139] [준비에 2] A2의 합성

[140]



[141] 질소 기류 하에서

2-(10-bromo-7H-benzo[c]carbazol-7-yl)-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 9.8g (16.9 mmol), 9H-carbazol-3-ylboronic acid 4.3g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A2 (7.9g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

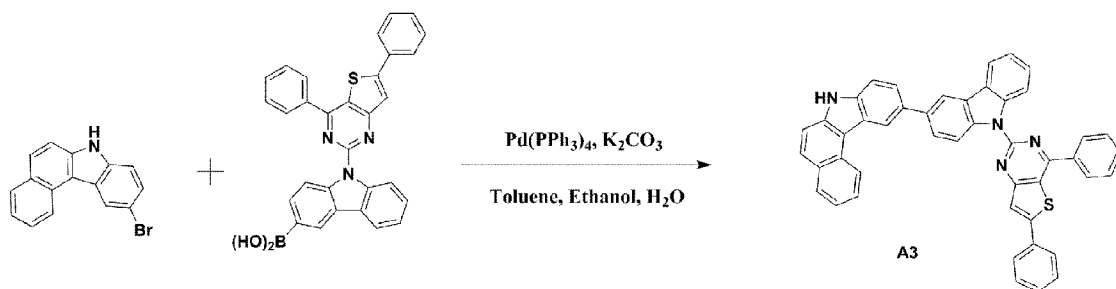
[142] GC-Mass (이론치: 668.81g/mol, 측정치: 668g/mol)

[143] ¹H-NMR: δ 7.25~7.28(m, 2H), 7.41~7.48(m, 7H), 7.58~7.75(m, 13H), 8.05(d, 1H), 8.13~8.14(m, 3H), 8.48(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[144]

[145] [준비에 3] A3의 합성

[146]



[147] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0 (16.8 mmol), 9-(4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidin-2-yl)-9H-carbazol-3-ylboronic acid 10.2g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.6g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A3 (7.9g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

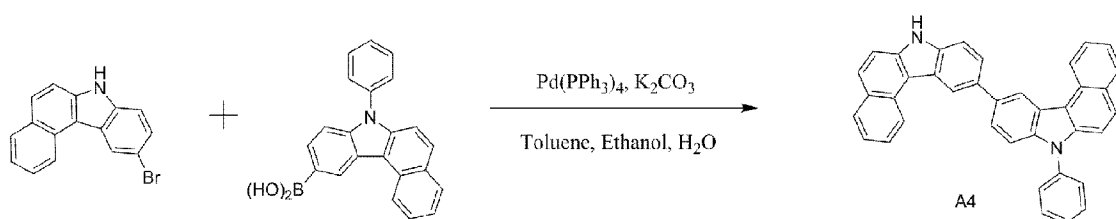
[148] GC-Mass (이론치: 668.81g/mol, 측정치: 668g/mol)

[149] ¹H-NMR: δ 7.25~7.49(m, 9H), 7.63~7.78(m, 15H), 8.15(d, 1H), 8.54~8.55(t, 2H), 10.01(s, 1H)

[150]

[151] [준비에 4] A4의 합성

[152]



[153] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 7-phenyl-7H-benzo[c]carbazol-10-ylboronic acid 6.8g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A4 (6.4g, 12.7mmol, 수율 75%)을 얻었다.

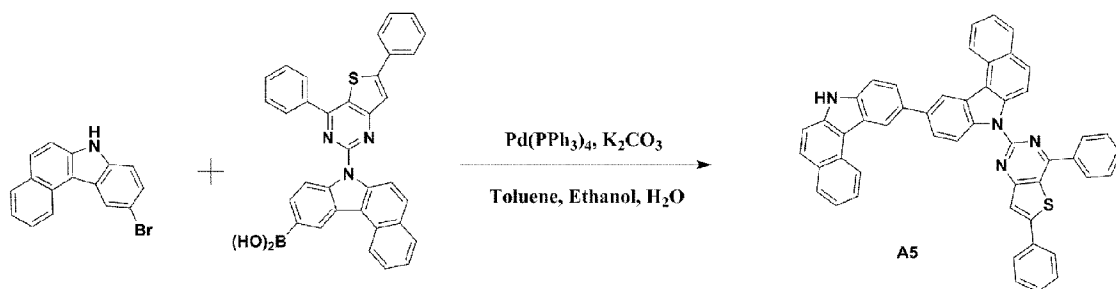
[154] GC-Mass (이론치: 508.61g/mol, 측정치: 508g/mol)

[155] ¹H-NMR: δ 7.45~7.63(m, 15H), 7.88~7.93(m, 4H), 8.15(d, 2H), 8.50(d, 2H), 10.01(s, 1H)

[156]

[157] [준비에 5] A5의 합성

[158]



[159] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 7-(4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidin-2-yl)-7H-benzo[c]carbazol-10-ylboronic acid 11.1g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol을 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A5 (9.1g, 12.7mmol, 수율 75%)을 얻었다.

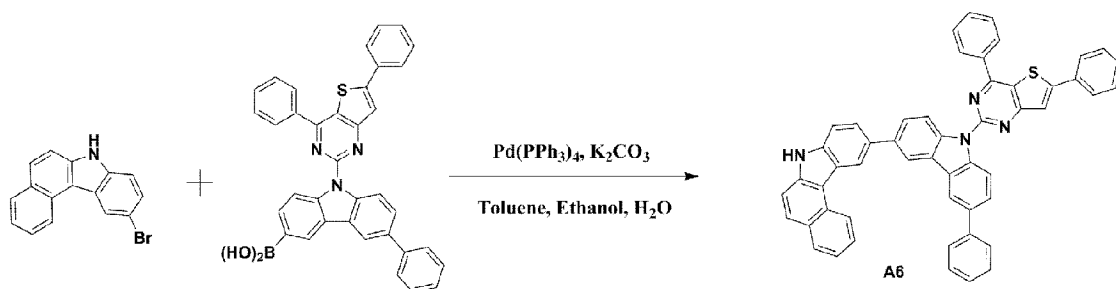
[160] GC-Mass (이론치: 718.87g/mol, 측정치: 718g/mol)

[161] ¹H-NMR: δ 7.23(s, 1H), 7.41~7.48(m, 6H), 7.62~7.88(m, 18H), 8.15(d, 2H), 8.53(d, 2H), 10.01(s, 1H)

[162]

[163] [준비에 6] A6의 합성

[164]



[165] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9-(4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidin-2-yl)-6-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid 11.1g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A6 (9.0g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

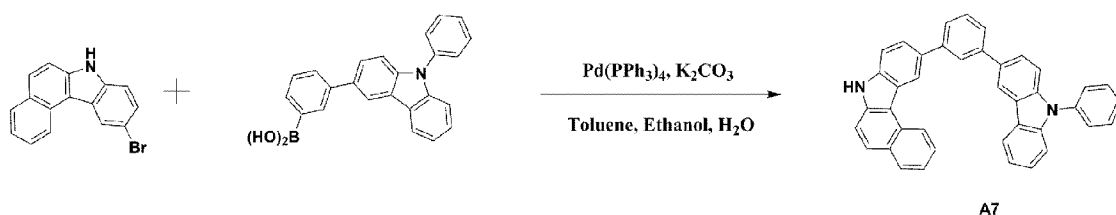
[166] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[167] ¹H-NMR: δ 7.23(s, 1H), 7.41~7.53(m, 11H), 7.62~7.79(m, 15H), 8.01(d, 1H), 8.16~8.17(m, 2H), 8.53(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[168]

[169] [준비에 7] A7의 합성

[170]



[171] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 3-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenylboronic acid 7.4g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A7 (6.5g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

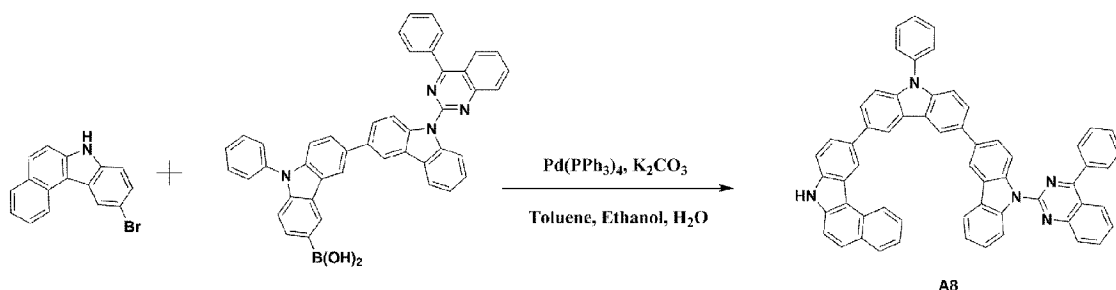
[172] GC-Mass (이론치: 534.65g/mol, 측정치: 534g/mol)

[173] ¹H-NMR: δ 7.25(m, 1H), 7.51~7.69(m, 18H), 7.82(d, 1H), 8.01(d, 1H), 8.14~8.17(m, 3H), 8.53(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[174]

[175] [준비에 8] A8의 합성

[176]



[177] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 9.8g (16.9 mmol), 9-phenyl-9'-(4-phenylquinazolin-2-yl)-9H,9'H-3,3'-bicarbazol-6-ylboronic acid 13.3g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A8 (9.8g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

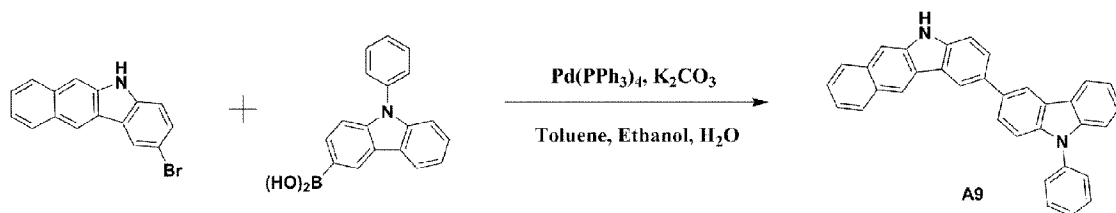
[178] GC-Mass (이론치: 827.97g/mol, 측정치: 827g/mol)

[179] ¹H-NMR: δ 7.25(m, 1H), 7.43~7.78(m, 25H), 8.02~8.17(m, 9H), 8.53(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[180]

[181] [준비에 9] A9의 합성

[182]



[183] 질소 기류 하에서 2-bromo-5H-benzo[b]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid 5.8g (20.2 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A9 (5.4g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

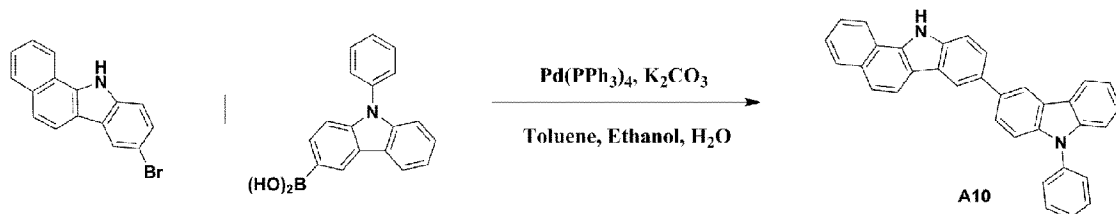
[184] GC-Mass (이론치: 458.55g/mol, 측정치: 458g/mol)

[185] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.28~7.59(m, 16H), 7.88~7.93(m, 3H), 8.15(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[186]

[187] [준비에 10] A10의 합성

[188]



[189] 질소 기류 하에서 8-bromo-11H-benzo[a]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid 5.8g (20.2 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A10 (5.4g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

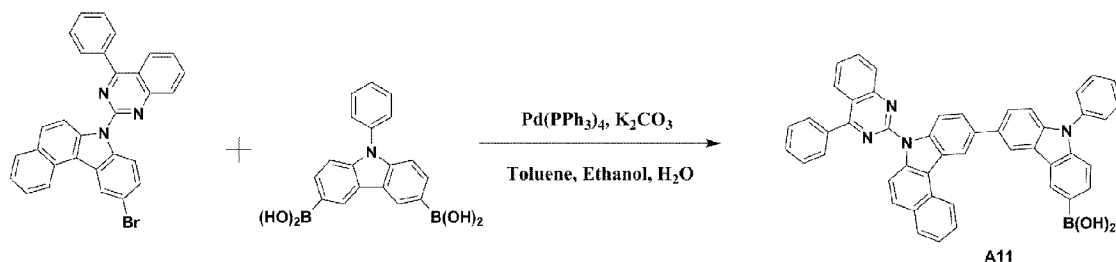
[190] GC-Mass (이론치: 458.55g/mol, 측정치: 458g/mol)

[191] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.27~7.33(m, 2H), 7.42~7.65(m, 12H), 7.77~7.84(m, 3H), 8.12~8.14(m, 2H), 8.52~8.54(m, 2H), 10.01(s, 1H)

[192]

[193] [준비에 11] A11의 합성

[194]



[195] 질소 기류 하에서 10-bromo-7-(4-phenylquinazolin-2-yl)-7H-benzo[c]carbazole 8.4g (16.9 mmol), 9-phenyl-9H-carbazole-3,6-diylboronic acid 6.7g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A11 (8.9g, 12.7mmol, 수율 75%)을 얻었다.

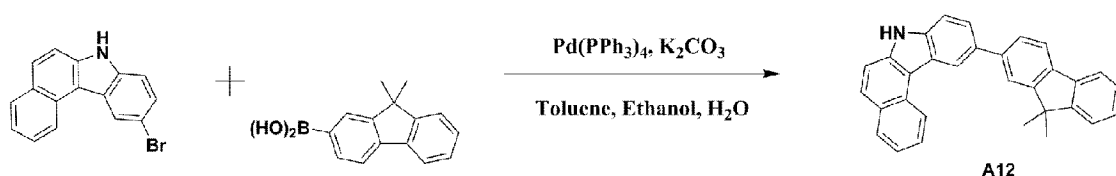
[196] GC-Mass (이론치: 706.60g/mol, 측정치: 706g/mol)

[197] ¹H-NMR: δ 2.0(s, 2H), 7.45~7.58(m, 15H), 7.72~7.78(m, 5H), 8.02~8.06(m, 4H), 8.16~8.18(m, 4H), 8.54(d, 1H)

[198]

[199] [준비에 12] A12의 합성

[200]



[201] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-ylboronic acid 4.8 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A12 (5.0g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

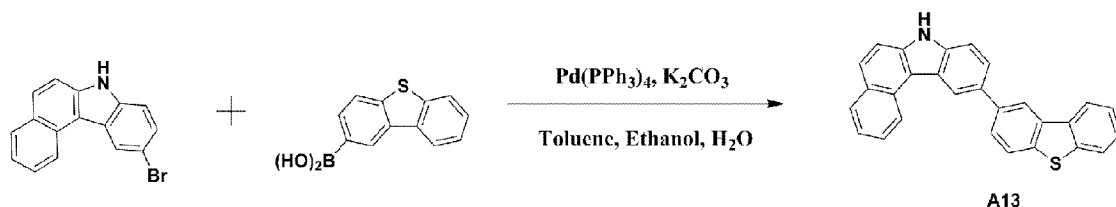
[202] GC-Mass (이론치: 409.52g/mol, 측정치: 409g/mol)

[203] ¹H-NMR: δ 1.73(m, 6H), 7.25(m, 1H), 7.34(m, 1H), 7.55~7.62(m, 7H), 7.76(s, 2H), 7.76~7.79(m, 3H), 8.16(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[204]

[205] [준비에 13] A13의 합성

[206]



[207] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), dibenzo[b,d]thiophen-2-ylboronic acid 4.6 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A13 (4.7g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

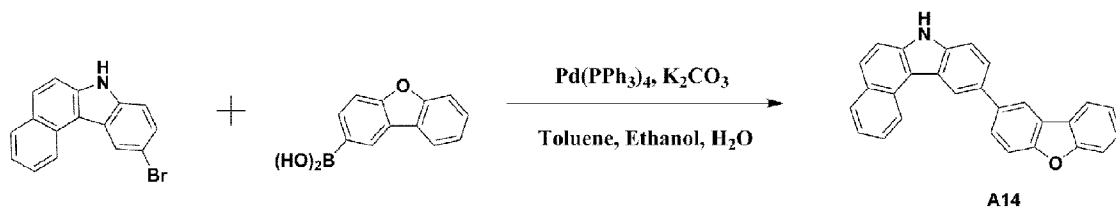
[208] GC-Mass (이론치: 399.51g/mol, 측정치: 399g/mol)

[209] ¹H-NMR: δ 7.50~7.51(m, 2H), 7.65~7.76(m, 6H), 7.88~7.89(m, 2H), 7.98~8.00(m, 3H), 8.15(d, 1H), 8.45~8.49(d, 2H), 10.01(s, 1H)

[210]

[211] [준비예 14] A14의 합성

[212]



[213] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), dibenzo[b,d]furan-2-ylboronic acid 4.3 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A14 (4.5g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

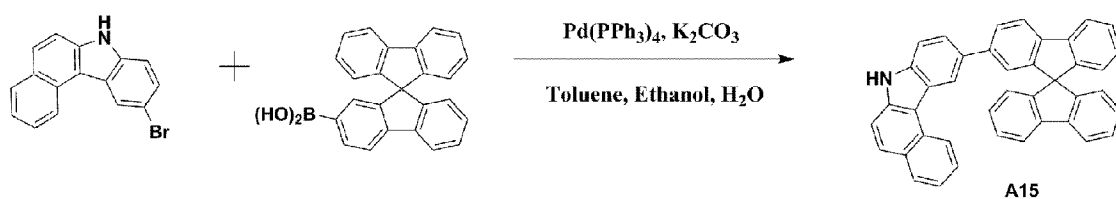
[214] GC-Mass (이론치: 383.44g/mol, 측정치: 383g/mol)

[215] ¹H-NMR: δ 7.35~7.38(m, 2H), 7.65~7.85 (m, 12H), 8.15(d, 1H), 8.53(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[216]

[217] [준비예 15] A15의 합성

[218]



[219] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9,9'-spirobi[fluorene]-2-ylboronic acid 7.3 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A15 (9.0g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

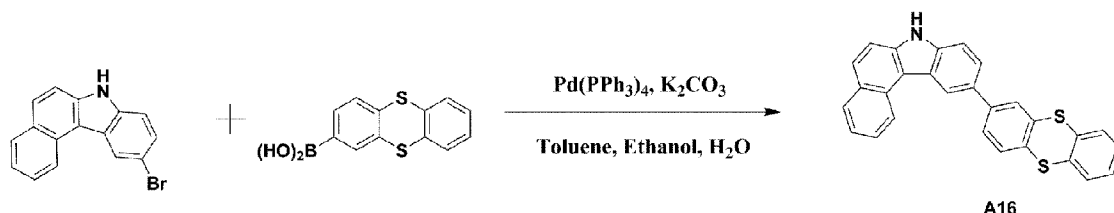
[220] GC-Mass (이론치: 531.64g/mol, 측정치: 531g/mol)

[221] ¹H-NMR: δ 7.16~7.35(m, 8H), 7.65~7.75(m, 11H), 7.86~7.89(m, 3H), 8.16(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[222]

[223] [준비에 16] A16의 합성

[224]



[225] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), thianthren-2-ylboronic acid 5.3 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A16 (5.2g, 12.0mmol, 수율 71%)을 얻었다.

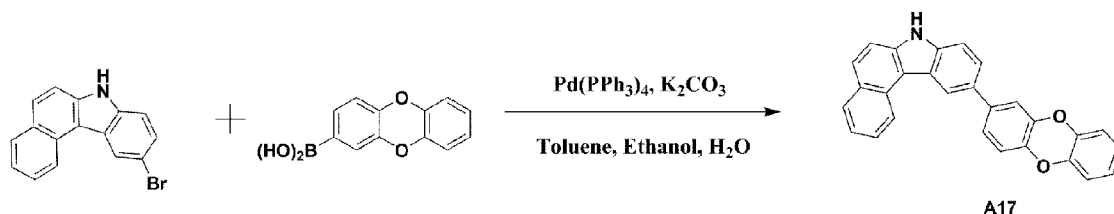
[226] GC-Mass (이론치: 431.57g/mol, 측정치: 431g/mol)

[227] ¹H-NMR: δ 6.99(m, 2H), 7.21~7.24(m, 5H), 7.63~7.67(m, 5H), 7.76(s, 1H), 7.87(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[228]

[229] [준비에 17] A17의 합성

[230]



[231] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), dibenzo[b,e][1,4]dioxin-2-ylboronic acid 4.6 g (20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후,

메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A17 (4.9g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

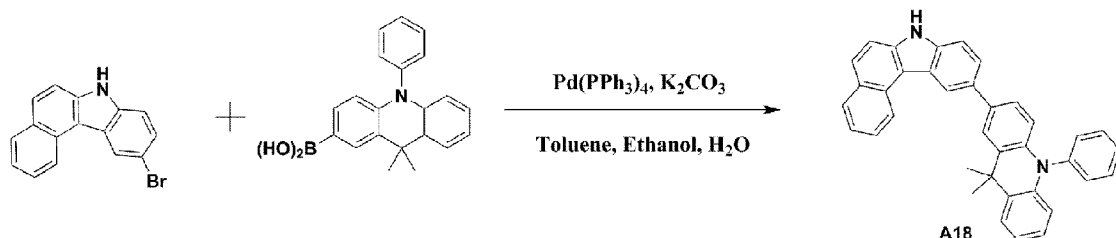
[232] GC-Mass (이론치: 399.44g/mol, 측정치: 399g/mol)

[233] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.83(m, 2H), 7.13~7.16(m, 3H), 7.41~7.43(m, 2H), 7.63~7.67(m, 5H), 7.76(s, 1H), 7.87(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[234]

[235] [준비에 18] A18의 합성

[236]



[237] 질소 기류 하에서 10-bromo-7H-benzo[c]carbazole 5.0g (16.9 mmol), 9,9-dimethyl-10-phenyl-9,10-dihydroacridin-2-ylboronic acid 6.7 g (20.2 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.0g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol에 넣고 110°C 에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A18 (6.1g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

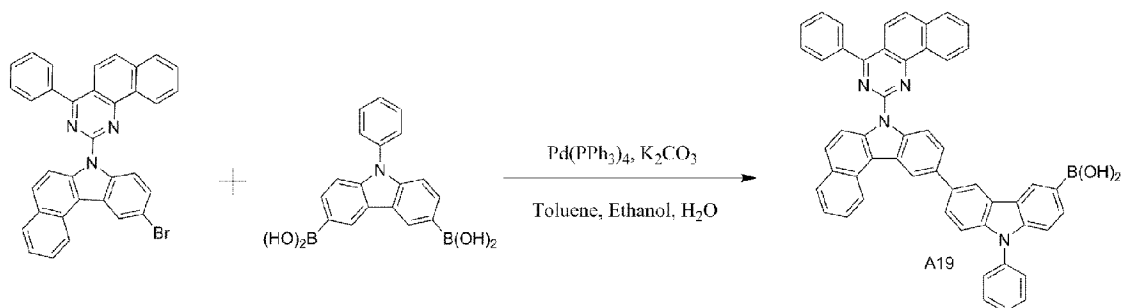
[238] GC-Mass (이론치: 500.63g/mol, 측정치: 500g/mol)

[239] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.72(m, 6H), 6.35~6.54(m, 3H), 6.73~6.79(m, 4H), 7.11~7.20(m, 5H), 7.63~7.68(m, 5H), 7.76(s, 1H), 7.87(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.54(d, 1H), 10.01(s, 1H)

[240]

[241] [준비에 19] A19의 합성

[242]



[243] 질소 기류 하에서

10-bromo-7-(4-phenylbenzo[h]quinazoline-2-yl)-7H-benzo[c]carbazole 9.3g (16.9 mmol), 9-phenyl-9H-carbazole-3,6-diylboronic acid 6.7g (20.2 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.0g (5 mol%), 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)와 Toluene/ H_2O /Ethanol

80ml/40ml/40ml를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

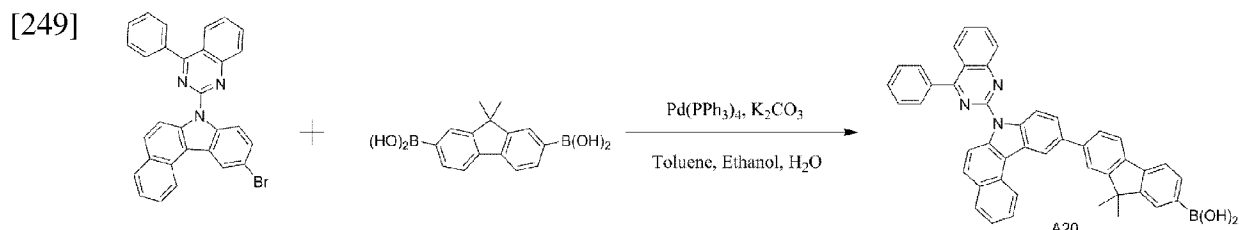
[244] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A19 (9.2g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[245] GC-Mass (이론치: 756.66g/mol, 측정치: 756g/mol)

[246] $^1\text{H-NMR}$: δ 2.0(s, 2H), 7.45~8.12(m, 27H), 8.16~8.81(m, 3H), 8.54(d, 1H)

[247]

[248] [준비에 20] A20의 합성



[250] 질소 기류 하에서 10-bromo-7-(4-phenylquinazoline-2-yl)-7H-benzo[c]carbazole 8.4g (16.9 mmol), 9,9-dimethyl-9H-fluorene-2,7-diyl diboronic acid 5.7g (20.2 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 1.0g (5 mol%), 및 potassium carbonate 7.0g (50.6 mmol)와 Toluene/ H_2O /Ethanol 80ml/40ml/40ml를 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

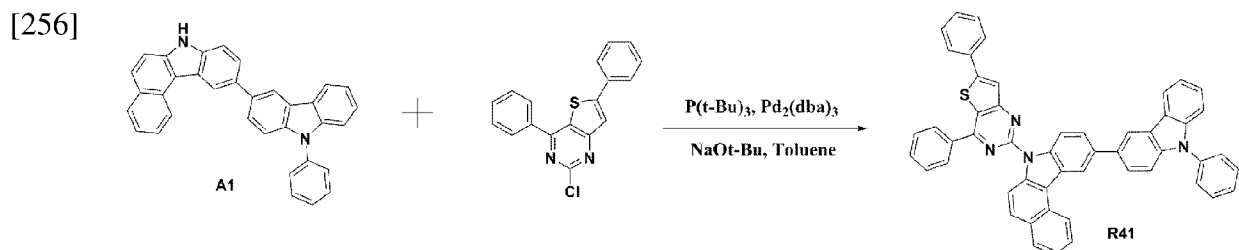
[251] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A20 (7.8g, 11.8mmol, 수율 70%)을 얻었다.

[252] GC-Mass (이론치: 657.57g/mol, 측정치: 657g/mol)

[253] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.72(s, 6H), 2.0(s, 2H), 7.17(d, 1H), 7.34(s, 1H), 7.41(m, 1H), 7.51(m, 2H), 7.56(s, 1H), 7.64~7.67(m, 5H), 7.78~8.03(m, 9H), 8.16~8.81(m, 3H), 8.54(d, 1H)

[254]

[255] [합성에 1] R41의 합성



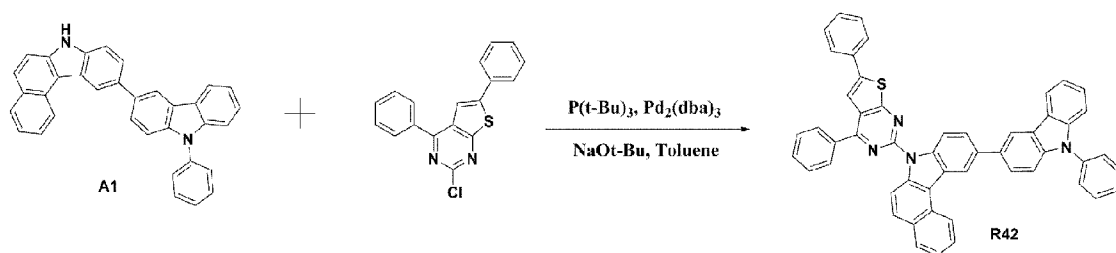
[257] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol), 2-chloro-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 4.3g(13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R41 5.9g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[258] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[259]

[260] [합성예 2] R42의 합성

[261]



[262] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol),

2-chloro-4,6-diphenylthieno[2,3-d]pyrimidine 4.3g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다.

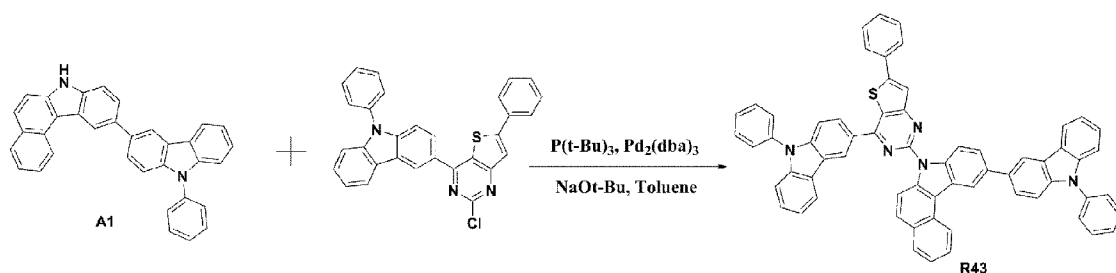
반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R42 5.9g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[263] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[264]

[265] [합성예 3] R43의 합성

[266]



[267] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol),

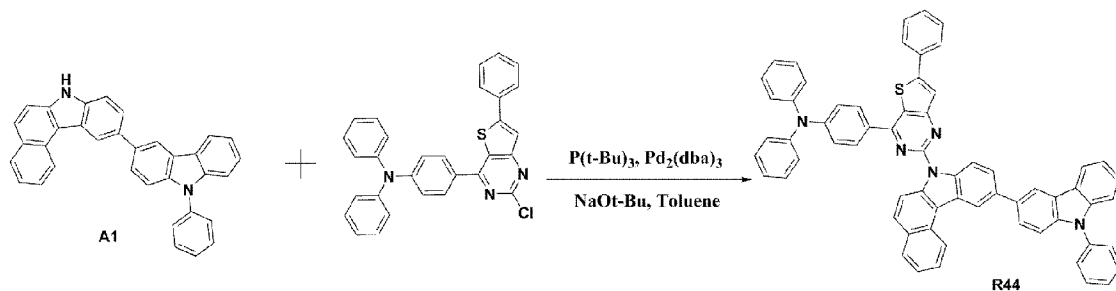
2-chloro-6-phenyl-4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)thieno[3,2-d]pyrimidine 6.5g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R43 7.0g (7.7mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[268] GC-Mass (이론치: 910.09g/mol, 측정치: 910g/mol)

[269]

[270] [합성예 4] R44의 합성

[271]



[272] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol),

4-(2-chloro-6-phenylthieno[3,2-d]pyrimidin-4-yl)-N,N-diphenylaniline 6.5g

(13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및

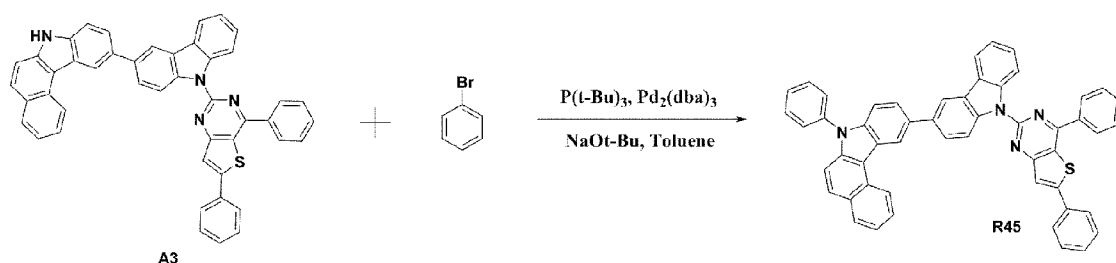
Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R44 6.8g (7.4mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[273] GC-Mass (이론치: 912.11g/mol, 측정치: 912g/mol)

[274]

[275] [합성에 5] R45의 합성

[276]



[277] 질소 기류 하에서 A3 7.9g (11.8mmol), bromobenzene 2.0g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.7g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 4.1g (35.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다.

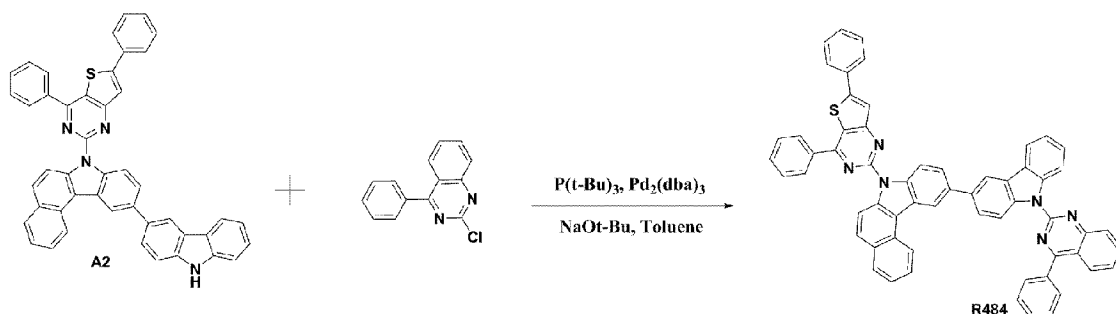
반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R45 5.7g (7.7mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[278] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[279]

[280] [합성에 6] R484의 합성

[281]



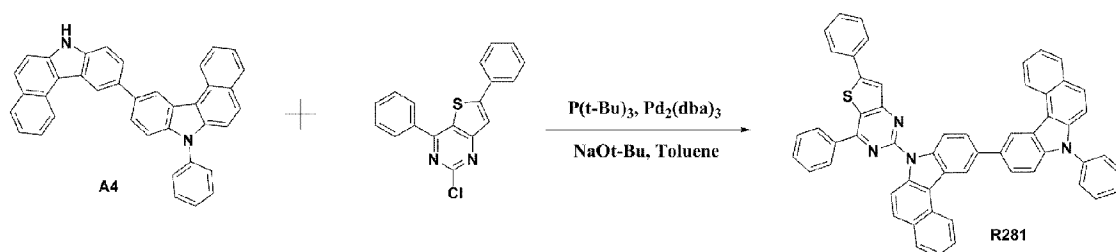
[282] 질소 기류 하에서 A2 7.9g (11.8mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 6.6g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.7g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 4.1g (35.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R484 6.7g(7.7mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[283] GC-Mass (이론치: 873.03g/mol, 측정치: 873g/mol)

[284]

[285] [합성예 7] R281의 합성

[286]



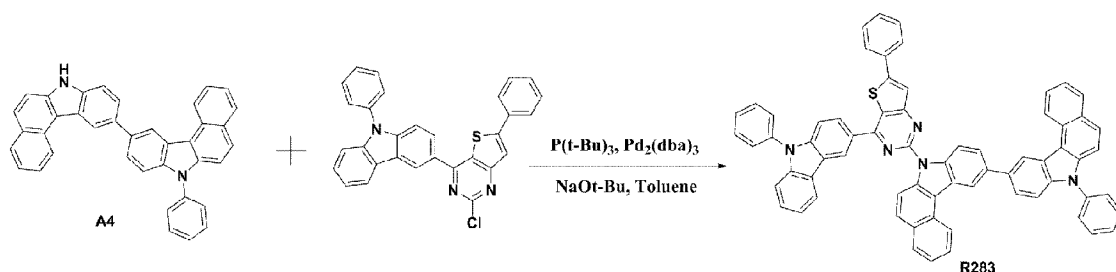
[287] 질소 기류 하에서 A4 6.4g (12.7mmol), 2-chloro-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 4.5g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g (38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R281 6.6g (8.4mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[288] GC-Mass (이론치: 794.96g/mol, 측정치: 794g/mol)

[289]

[290] [합성예 8] R283의 합성

[291]



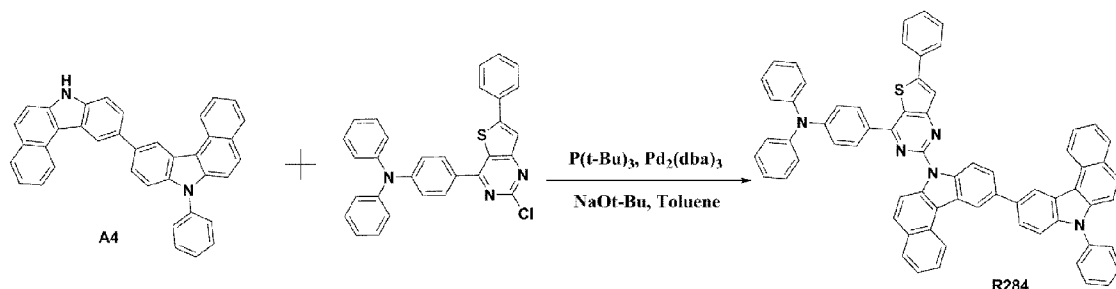
[292] 질소 기류 하에서 A4 6.4g (12.7mmol), 2-chloro-6-phenyl-4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)thieno[3,2-d]pyrimidine 6.8g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g(38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R283 8.0g (8.4mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[293] GC-Mass (이론치: 960.15g/mol, 측정치: 960g/mol)

[294]

[295] [합성예 9] R284의 합성

[296]



[297] 질소 기류 하에서 A4 6.4g (12.7mmol),

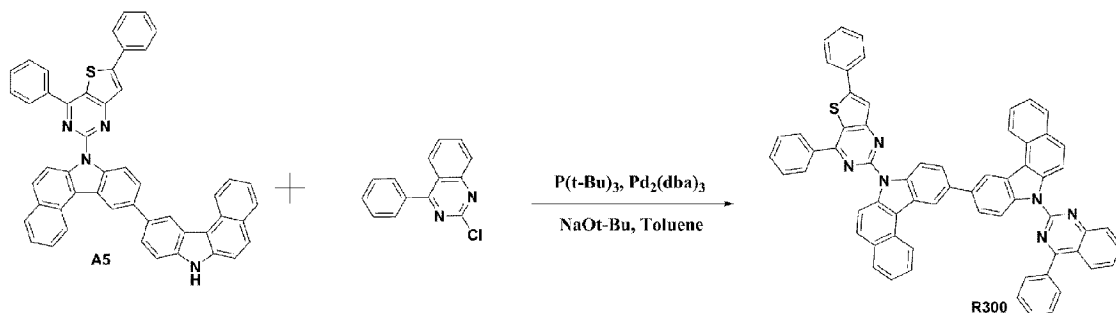
4-(2-chloro-6-phenylthieno[3,2-d]pyrimidin-4-yl)-N,N-diphenylaniline 6.8g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g (38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R284 8.0g (8.4mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[298] GC-Mass (이론치: 962.17g/mol, 측정치: 962g/mol)

[299]

[300] [합성예 10] R300의 합성

[301]



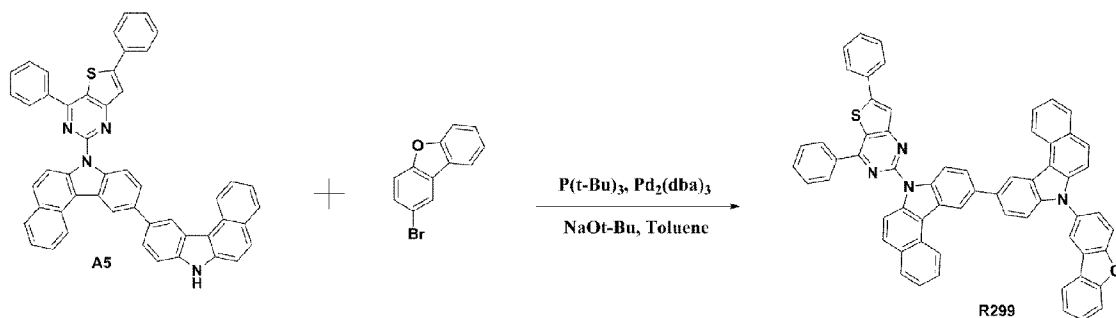
[302] 질소 기류 하에서 A5 9.1g (12.7mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline 3.3g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g (38.0mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R300 7.6g (8.2mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[303] GC-Mass (이론치: 923.09g/mol, 측정치: 923g/mol)

[304]

[305] [합성예 11] R299의 합성

[306]



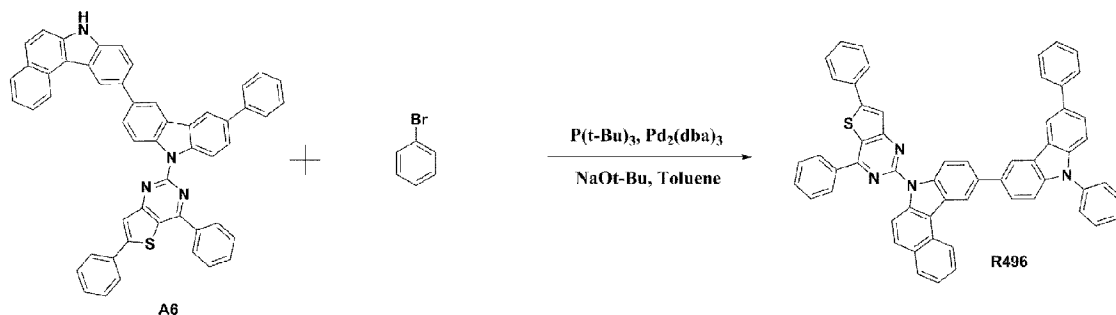
[307] 질소 기류 하에서 A5 9.1g (12.7mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan 3.4g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g(38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R299 6.9g (7.8mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[308] GC-Mass (이론치: 885.04g/mol, 측정치: 885g/mol)

[309]

[310] [합성예 12] R496의 합성

[311]



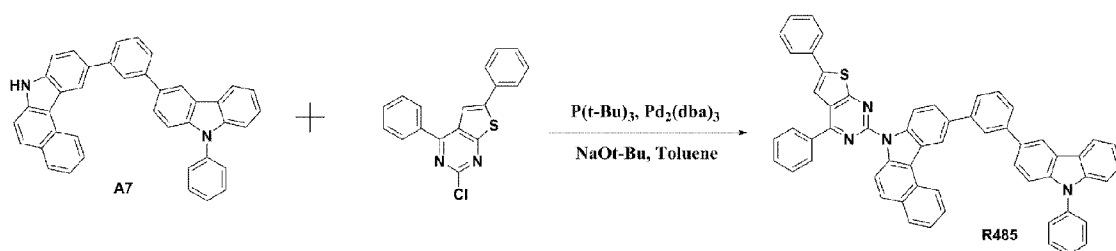
[312] 질소 기류 하에서 A6 9.1g (12.1mmol), bromobenzene 3.4g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g (38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R496 6.9g (7.8mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[313] GC-Mass (이론치: 821.00g/mol, 측정치: 821g/mol)

[314]

[315] [합성예 13] R485의 합성

[316]



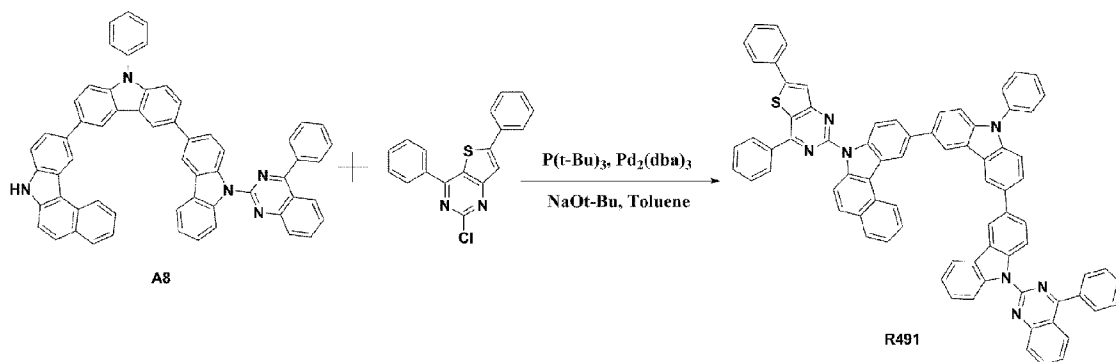
[317] 질소 기류 하에서 A7 6.5g (12.1mmol), 2-chloro-4,6-diphenylthieno[2,3-d]pyrimidine 4.3g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R485 6.4g (7.8mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[318] GC-Mass (이론치: 821.00g/mol, 측정치: 821g/mol)

[319]

[320] [합성예 14] R491의 합성

[321]



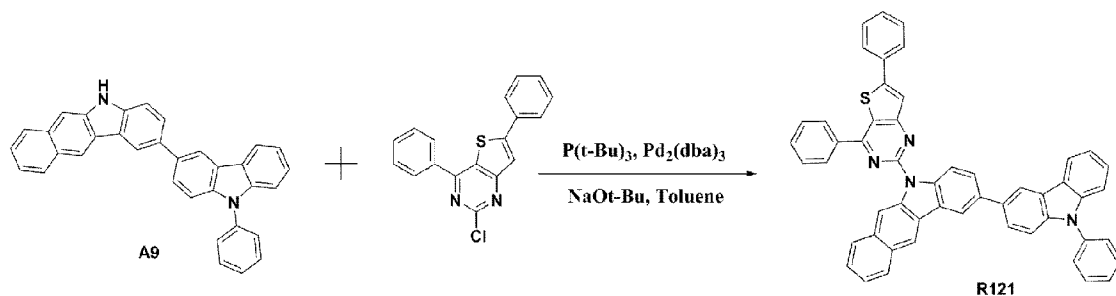
[322] 질소 기류 하에서 A8 9.8g (11.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 4.2g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.4g (35.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R491 8.0g (7.2mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[323] GC-Mass (이론치: 1114.32g/mol, 측정치: 1114g/mol)

[324]

[325] [합성예 15] R121의 합성

[326]



[327] 질소 기류 하에서 A9 5.4g (11.8mmol), 2-chloro-4,6-diphenylthieno[2,3-d]pyrimidine 4.2g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.4g

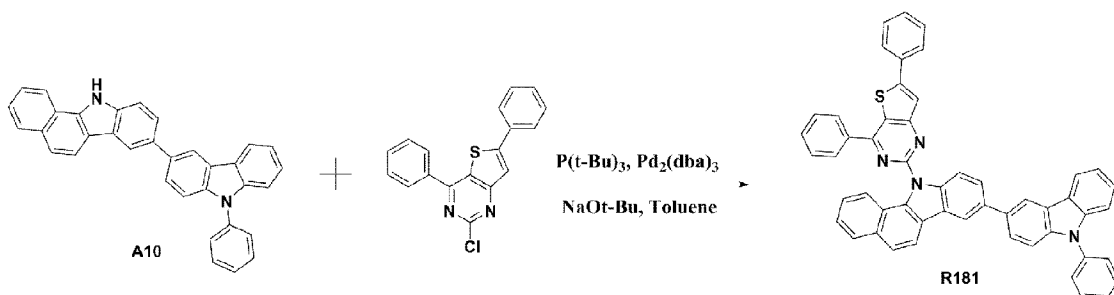
(35.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R121 5.4g (7.2mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[328] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[329]

[330] [합성예 16] R181의 합성

[331]



[332] 질소 기류 하에서 A10 5.4g (11.8mmol),

2-chloro-4,6-diphenylthieno[2,3-d]pyrimidine 4.2g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.4g (35.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다.

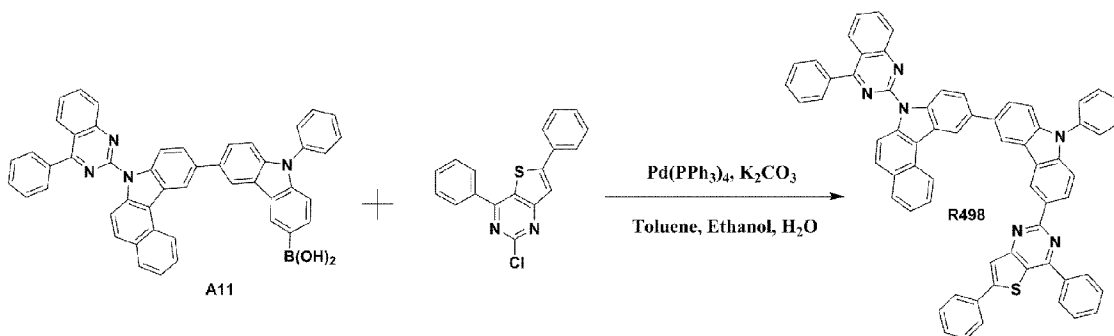
반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R181 5.4g (7.2mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[333] GC-Mass (이론치: 744.90g/mol, 측정치: 744g/mol)

[334]

[335] [합성예 17] R498의 합성

[336]



[337] 질소 기류 하에서 A11 8.9g (12.7mmol),

2-chloro-4,6-diphenylthieno[2,3-d]pyrimidine 4.5g (13.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.6g (38.0mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다.

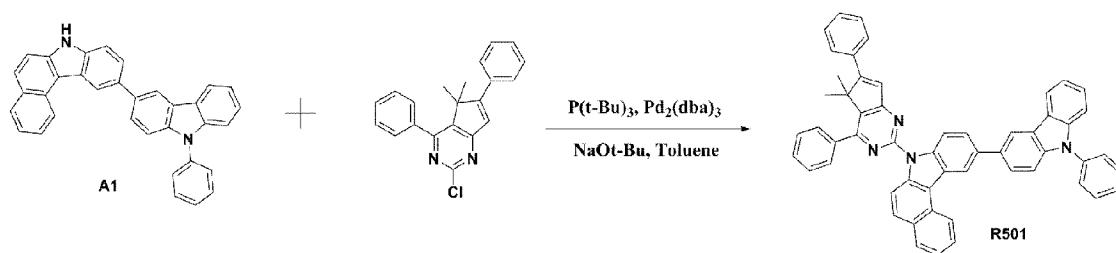
반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R498 7.3g(7.7mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[338] GC-Mass (이론치: 949.13g/mol, 측정치: 949g/mol)

[339]

[340] [합성예 18] R501의 합성

[341]



[342] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol),

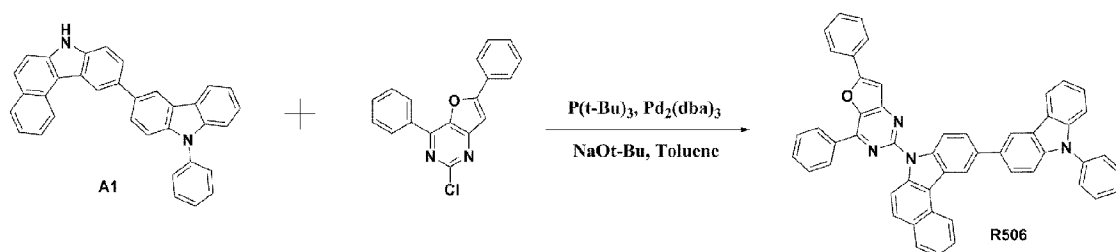
2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.4g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R501 6.0g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[343] GC-Mass (이론치: 754.92g/mol, 측정치: 754g/mol)

[344]

[345] [합성예 19] R506의 합성

[346]



[347] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol),

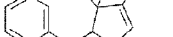
2-chloro-4,5,6-triphenyl-5H-pyrrolo[3,2-d]pyrimidine 4.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R506 5.6g(7.7mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[348] GC-Mass (이론치: 728.84g/mol, 측정치: 728g/mol)

[349]

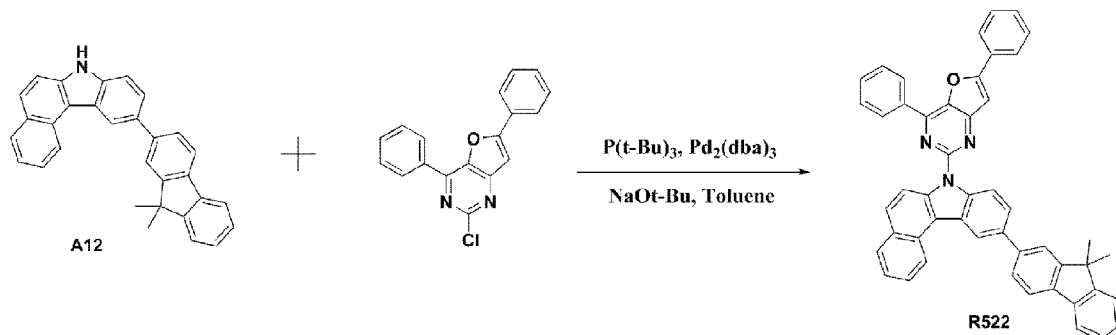
[350] [합성예 20] R511의 합성

Chemical reaction scheme showing the synthesis of P511. Reactant A1 (a fluorene derivative with a phenyl group) reacts with a benzimidazole derivative (2-chloro-1,2-diphenyl-1H-benzimidazole) in the presence of $P(t-Bu)_3$, $Pd_2(dba)_3$, $NaOt-Bu$, and Toluene to form product P511 (a complex molecule with two fluorene units linked by a benzimidazole core).

A12 +  $\xrightarrow[\text{NaOt-Bu, Toluene}]{\text{P(t-Bu)}_3, \text{Pd}_2(\text{dba})_3}$ **R521**

[360] [합성예 22] R522의 합성

[361]



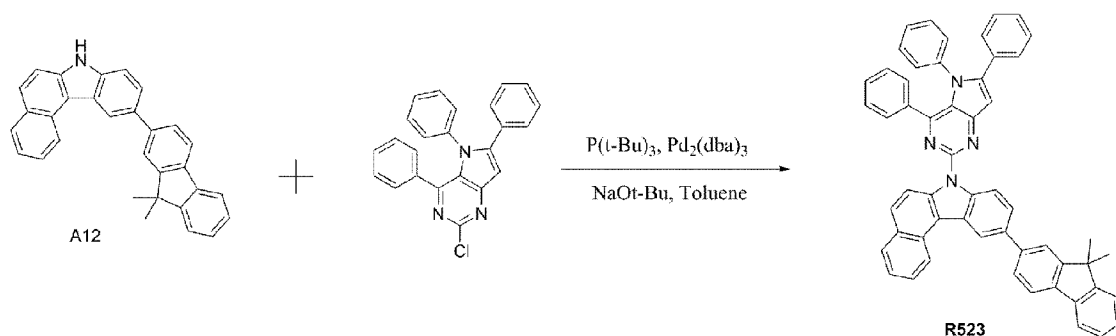
[362] 질소 기류 하에서 A12 5.0g (12.1mmol), 2-chloro-4,5,6-triphenyl-5H-pyrrolo[3,2-d]pyrimidine 4.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R522 5.2g (7.7mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[363] GC-Mass (이론치: 679.81g/mol, 측정치: 679g/mol)

[364]

[365] [합성예 23] R523의 합성

[366]



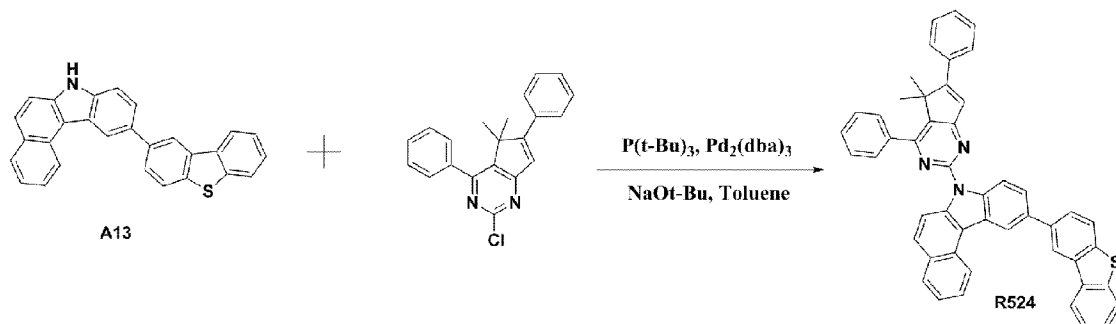
[367] 질소 기류 하에서 A12 5.0g (12.1mmol), 2-chloro-4,6-diphenylfuro[3,2-d]pyrimidine 4.3g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R523 5.7g (7.5mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[368] GC-Mass (이론치: 754.92g/mol, 측정치: 754g/mol)

[369]

[370] [합성예 24] R524의 합성

[371]



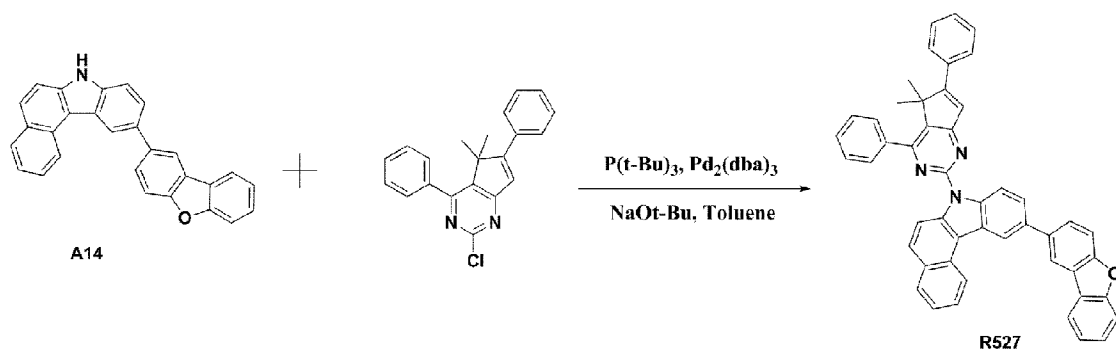
[372] 질소 기류 하에서 A13 4.7g (11.8mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.3g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.4g (35.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R524 5.3g (7.7mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[373] GC-Mass (이론치: 695.87g/mol, 측정치: 695g/mol)

[374]

[375] [합성예 25] R527의 합성

[376]



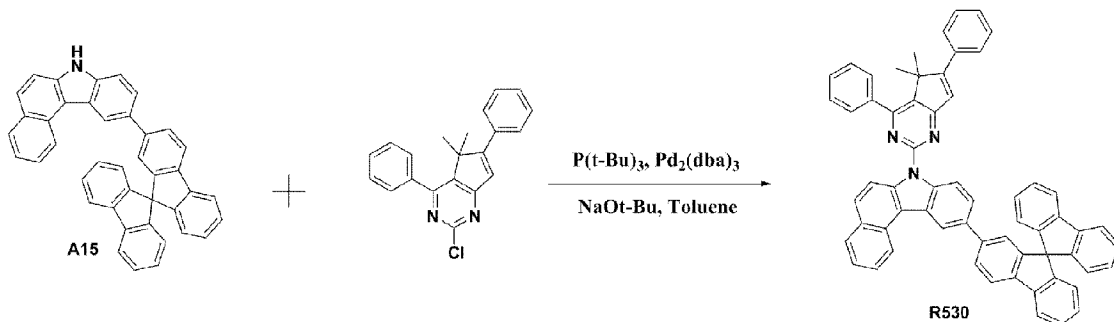
[377] 질소 기류 하에서 A14 4.5g (11.8mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.3g (13.0mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.4g (35.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R527 5.2g (7.7mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[378] GC-Mass (이론치: 679.81g/mol, 측정치: 679g/mol)

[379]

[380] [합성예 26] R530의 합성

[381]



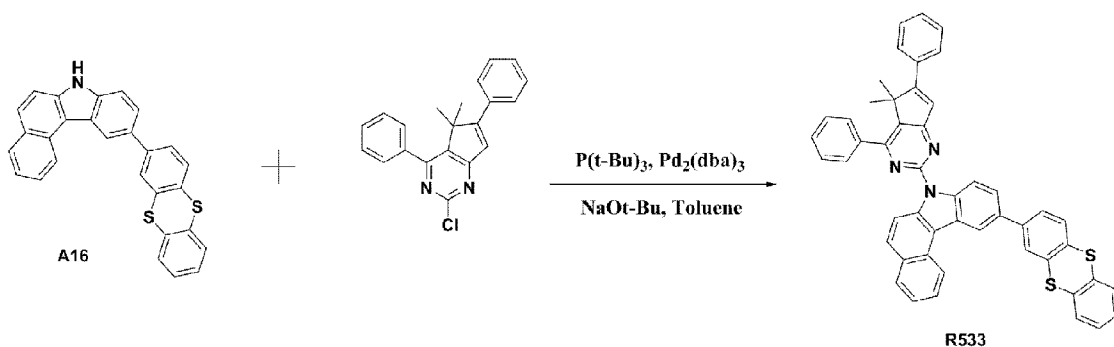
[382] 질소 기류 하에서 A15 6.5g (12.1mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.4g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R530 6.5g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[383] GC-Mass (이론치: 828.01g/mol, 측정치: 828g/mol)

[384]

[385] [합성예 27] R533의 합성

[386]



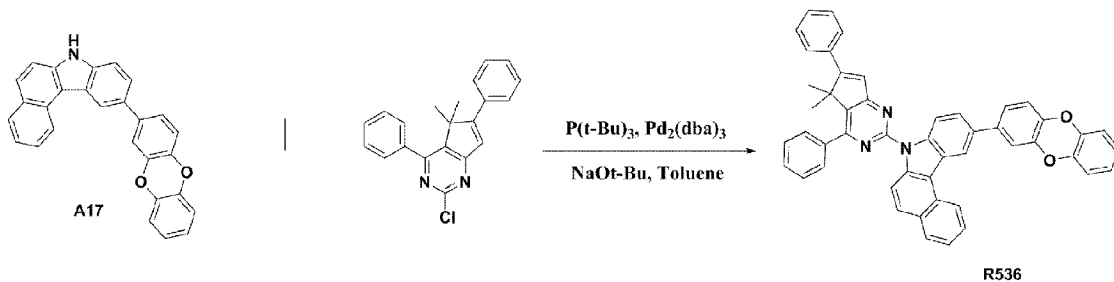
[387] 질소 기류 하에서 A16 5.2g (12.0mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.4g (13.2mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (35.9mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R533 5.7g (7.8mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[388] GC-Mass (이론치: 727.94g/mol, 측정치: 727g/mol)

[389]

[390] [합성예 28] R536의 합성

[391]



[392]

질소 기류 하에서 A17 4.9g (12.1mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.4g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R536 5.5g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[393]

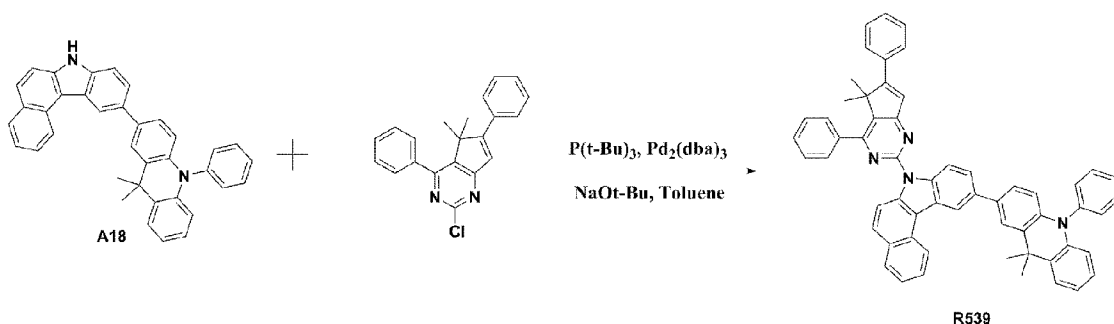
GC-Mass (이론치: 695.81g/mol, 측정치: 695g/mol)

[394]

[395]

[합성예 29] R539의 합성

[396]



[397]

질소 기류 하에서 A18 6.1g (12.1mmol), 2-chloro-5,5-dimethyl-4,6-diphenyl-5H-cyclopenta[d]pyrimidine 4.4g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R539 6.3g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[398]

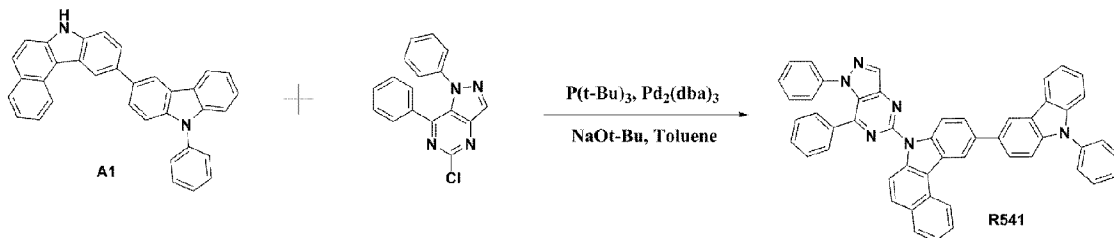
GC-Mass (이론치: 797.00g/mol, 측정치: 797g/mol)

[399]

[400]

[합성예 30] R541의 합성

[401]



[402]

질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol), 5-chloro-1,7-diphenyl-1H-pyrazolo[4,3-d]pyrimidine 4.1g(13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R541 5.8g(7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[403]

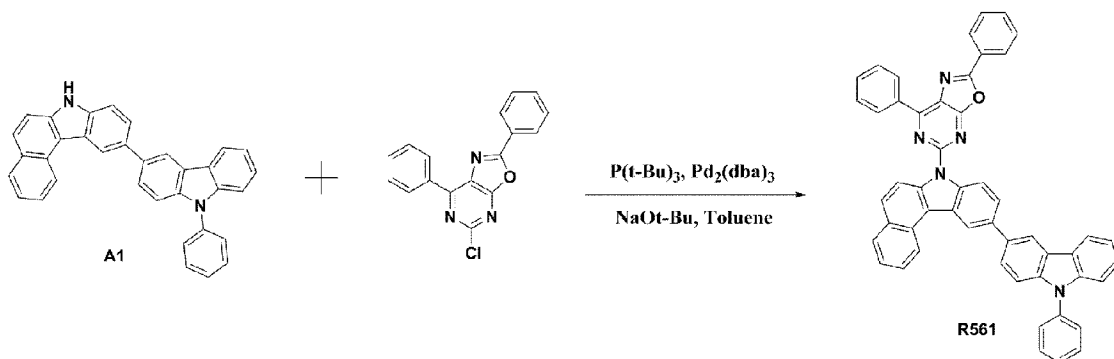
GC-Mass (이론치: 728.84g/mol, 측정치: 728g/mol)

[404]

[405]

[합성예 31] R561의 합성

[406]



[407]

질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol), 5-chloro-2,7-diphenyloxazolo[5,4-d]pyrimidine 4.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R561 5.8g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[408]

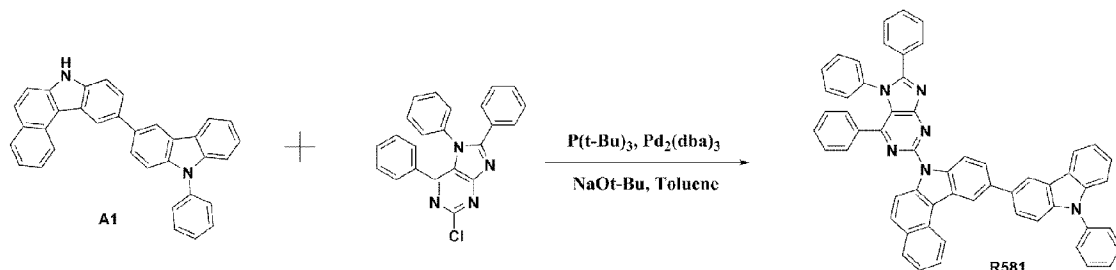
GC-Mass (이론치: 729.82g/mol, 측정치: 729g/mol)

[409]

[410]

[합성예 32] R581의 합성

[411]



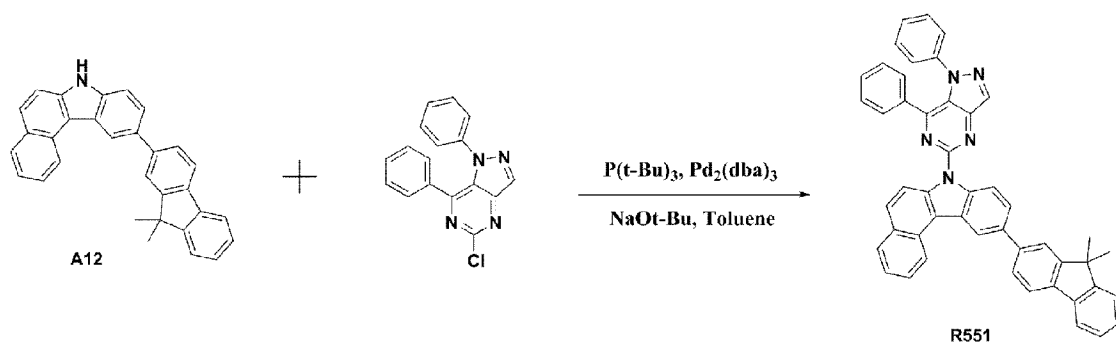
[412] 질소 기류 하에서 A1 5.6g (12.1mmol), 2-chloro-6,7,8-triphenyl-7H-purine 5.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R581 6.4g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[413] GC-Mass (이론치: 804.94g/mol, 측정치: 804g/mol)

[414]

[415] [합성예 33] R551의 합성

[416]



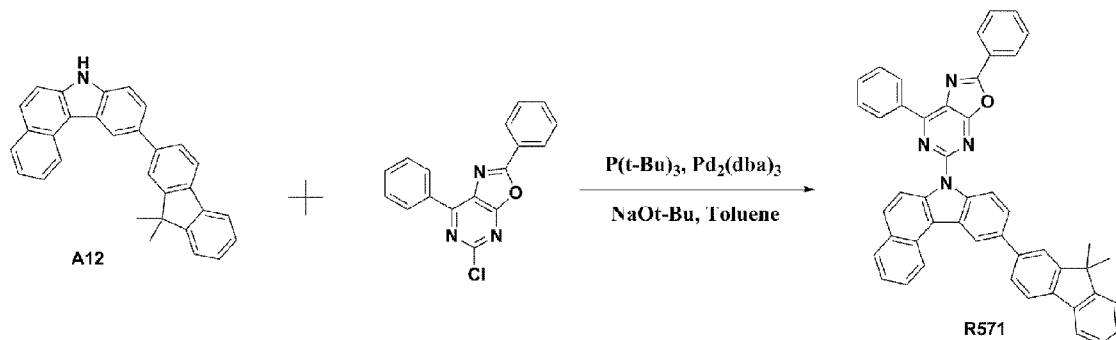
[417] 질소 기류 하에서 A12 5.0g (12.1mmol), 5-chloro-1,7-diphenyl-1H-pyrazolo[4,3-d]pyrimidine 4.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R551 5.4g (7.9mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[418] GC-Mass (이론치: 679.81g/mol, 측정치: 679g/mol)

[419]

[420] [합성예 34] R571의 합성

[421]



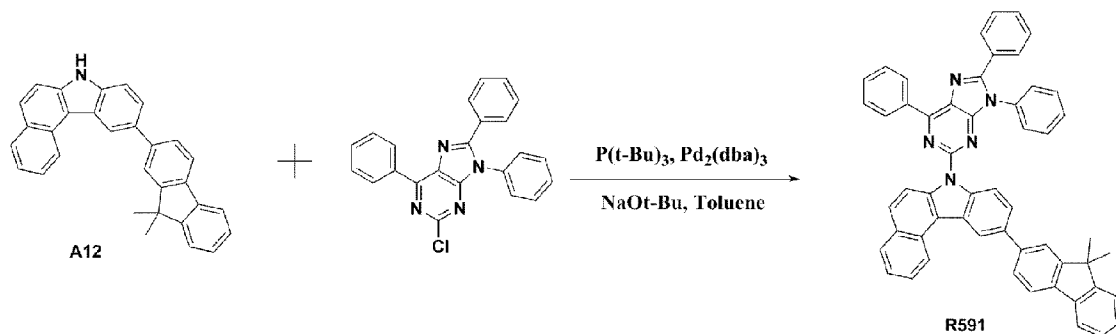
[422] 질소 기류 하에서 A12 5.0g (12.1mmol), 5-chloro-2,7-diphenyloxazo[5,4-d]pyrimidine 4.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R571 5.2g (7.7mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[423] GC-Mass (이론치: 680.79g/mol, 측정치: 680g/mol)

[424]

[425] [합성예 35] R591의 합성

[426]



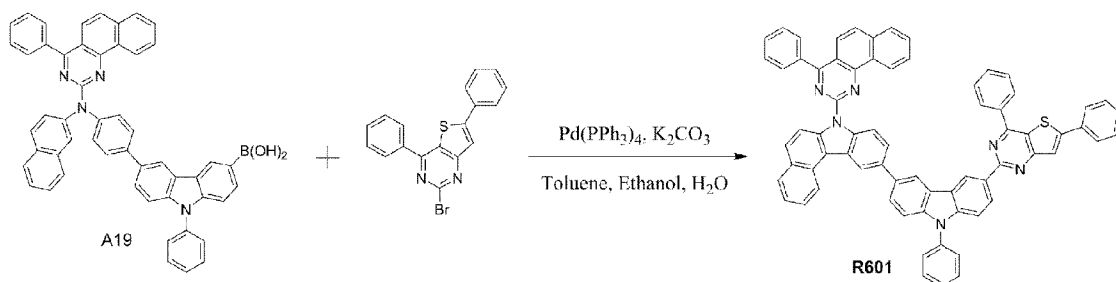
[427] 질소 기류 하에서 A12 5.0g (12.1mmol), 2-chloro-6,8,9-triphenyl-9H-purine 5.1g (13.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.6g (5 mol%), tri-*tert*-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide 3.5g (36.4mmol)을 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R591 5.7g (7.5mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[428] GC-Mass (이론치: 755.91g/mol, 측정치: 755g/mol)

[429]

[430] [합성예 36] R601의 합성

[431]



[432]

질소 기류 하에서 A19 9.2g (12.1 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 5.3g (14.5 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.7g (5 mol%) 및 potassium carbonate 7.0g (36.3 mmol)를 Toluene/H₂O/Ethanol 80ml/40ml/40ml에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R601 (8.7g, 12.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[433]

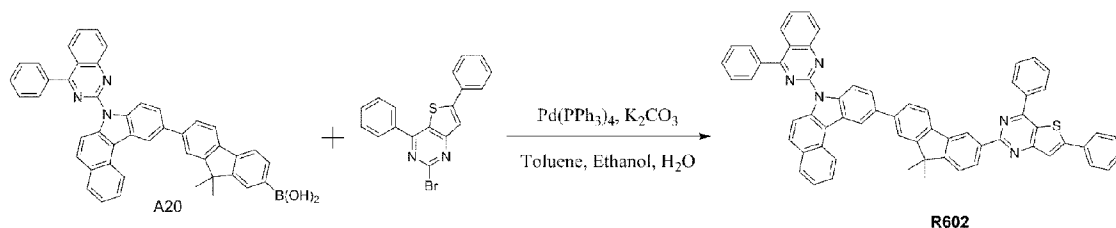
GC-Mass (이론치: 999.19g/mol, 측정치: 999g/mol)

[434]

[435]

[합성예 37] R602의 합성

[436]



[437]

질소 기류 하에서 A20 7.8g (11.8 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylthieno[3,2-d]pyrimidine 5.2g (14.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.7g (5 mol%) 및 potassium carbonate 4.9g (35.4 mmol)를 Toluene/H₂O/Ethanol 80ml/40ml/40ml에 넣고 110°C에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R602 (7.6g, 8.5mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[438]

GC-Mass (이론치: 900.10g/mol, 측정치: 900g/mol)

[439]

[440]

[실시예 1 내지 31] 적색 유기 전계 발광 소자의 제작

[441]

상기 합성예에서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[442]

먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 세척하였다. 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 유리 기판을 5분간

세정하고 진공 증착기로 유리 기판을 이송하였다.

- [443] 이렇게 준비된 ITO 유리 기판(전극) 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/90% 합성에 1 내지 29, 36, 37에서 합성한 각각의 화합물 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[444]

[445] [비교예 1]

- [446] 발광 호스트 물질로서 화합물 R41 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[447]

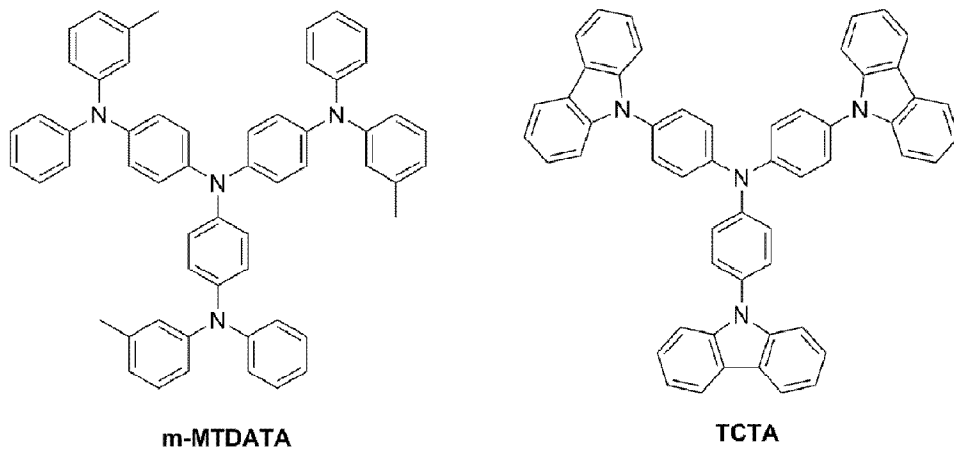
[448] [비교예 2]

- [449] 발광 호스트 물질로서 화합물 R41 대신 D1을 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

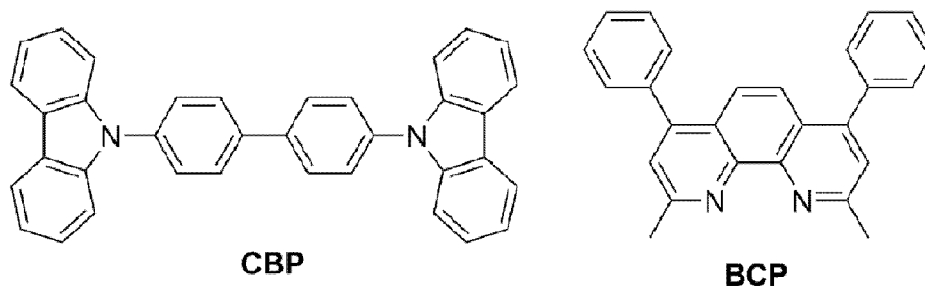
[450]

- [451] 사용된 m-MTDATA, TCTA, (piq)₂Ir(acac), BCP, Alq₃, CBP 및 D1의 구조는 하기와 같다.

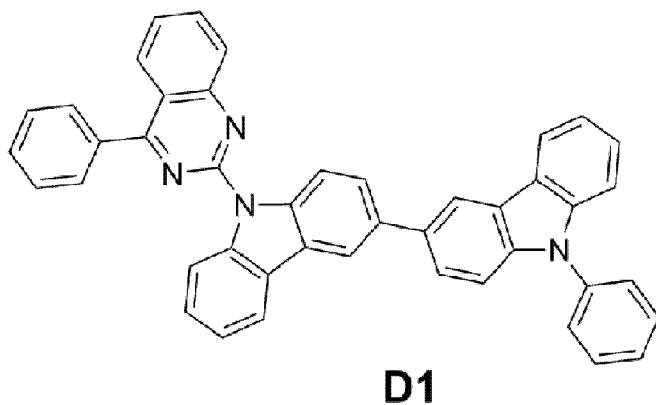
[452]



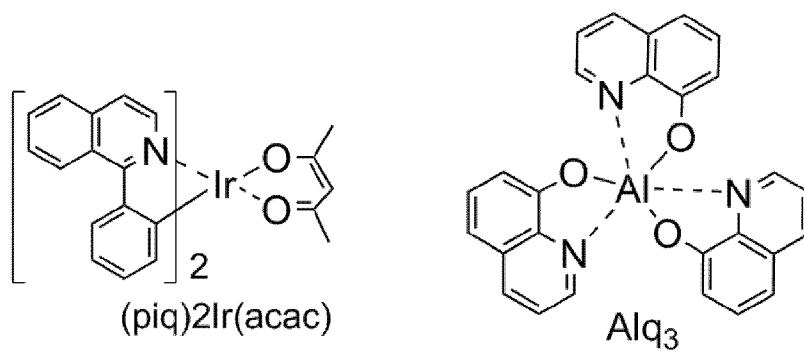
[453]



[454]



[455]



[456]

[457] [평가예 1]

[458] 실시예 1 내지 31, 비교예 1 및 2에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 발광피크 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[459] [표1]

샘플	발광층 호스트	구동전압 (V)	발광피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	R41	4.0	621	17.5
실시예 2	R42	4.3	621	17.4
실시예 3	R43	4.1	621	16.8
실시예 4	R44	4.5	621	17.2
실시예 5	R45	4.5	621	16.5
실시예 6	R484	4.3	621	17.2
실시예 7	R281	4.2	621	16.8
실시예 8	R283	4.3	621	17.2
실시예 9	R284	4.4	621	17.4
실시예 10	R300	4.3	621	16.8
실시예 11	R299	4.2	621	17.2
실시예 12	R496	4.5	621	16.1
실시예 13	R485	4.2	621	15.8
실시예 14	R491	4.2	621	15.9
실시예 15	R121	4.1	621	16.3
실시예 16	R181	4.4	621	18.7
실시예 17	R498	4.3	621	17.2
실시예 18	R501	4.4	621	16.1
실시예 19	R506	4.1	621	16.7
실시예 20	R511	4.2	621	18.3
실시예 21	R521	3.3	621	15.9
실시예 22	R522	3.5	621	14.8
실시예 23	R523	3.3	621	15.7
실시예 24	R524	3.5	621	15.2
실시예 25	R527	3.3	621	14.8
실시예 26	R530	3.5	623	15.0
실시예 27	R533	3.0	621	14.5
실시예 28	R536	3.6	621	14.5

실시예 29	R539	3.3	621	15.1
실시예 30	R601	3.5	621	14.2
실시예 31	R602	3.5	621	14.5
비교예 1	CBP	5.7	622	9.2
비교예 2	D1	4.2	622	13.1

[460] 상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료로 사용한 경우(실시예 1 내지 31)가 종래 CBP를 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층의 재료로 사용한 경우(비교예 1)에 비해 효율 및 구동전압이 우수한 것을 알 수 있었고, D1을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료로 사용한 경우(비교예 2)에 비해 효율이 우수한 것을 알 수 있었다.

[461]

[462] [실시예 32 내지 35] 유기 전계 발광 소자의 제작

[463] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 세척하였다. 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 유리 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 유리 기판을 이송하였다.

[464] 상기와 같이 준비된 ITO 유리 기판(전극) 위에 m-MTDATA (60nm)/합성예 4, 9, 26, 28에서 합성한 각각의 화합물 (80nm)/DS-H522 + 5% DS-501 (300nm)/BCP (10nm)/Alq3 (30 nm)/LiF (1nm)/Al (200nm) 순서로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[465]

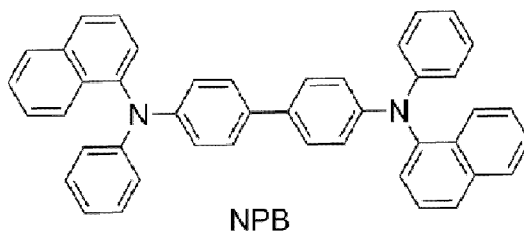
[466] [비교예 3]

[467] 정공 수송층의 물질로 사용된 합성예 4의 화합물 대신 NPB를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 32와 동일한 과정으로 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[468]

[469] 사용된 DS-H522 및 DS-501는 (주)두산전자 BG의 제품이며, NPB의 구조는 하기와 같다.

[470]



[471]

[472] [평가예 2]

[473] 실시예 32 내지 35 및 비교예 3에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에

대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[474] [표2]

샘플	정공 수송층	구동전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 32	R44	3.0	21.9
실시예 33	R284	2.8	22.5
실시예 34	R530	3.6	35.7
실시예 35	R536	3.7	33.9
비교예 3	NPB	5.3	18.1

[475] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 유기 전계 발광 소자의 정공 수송층 재료로 사용한 경우(실시예 32 내지 35)가 종래 NPB를 유기 전계 발광 소자의 정공 수송층 재료로 사용한 경우(비교예 3)보다 효율 및 구동전압이 우수한 것을 알 수 있었다.

[476]

[477] [실시예 36 내지 42] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[478] 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 유리 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[479] 상기와 같이 준비된 ITO 유리 기판(전극) 위에 DS-205 (80 nm)/NPB (15 nm)/ADN + 5 % DS-405 (30nm)/ 합성예 20, 30 내지 35에서 합성한 각각의 화합물 /LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[480]

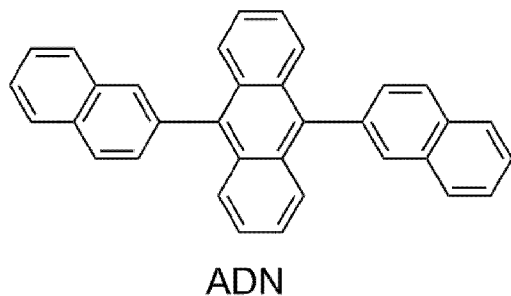
[481] [비교예 4] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[482] 전자 수송층의 물질로 사용된 합성예 20의 화합물 대신 Alq₃을 사용하여 30 nm로 증착하는 것을 제외하고는 실시예 36과 동일한 과정으로 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[483]

[484] 사용된 DS-205 및 DS-405는 (주)두산전자 BG의 제품이며, ADN의 구조는 하기와 같다.

[485]



[486]

[487] [평가예 3]

[488] 실시예 36 내지 42 및 비교예 4에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm^2 에서의 구동전압, 전류효율, 발광피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[489] [표3]

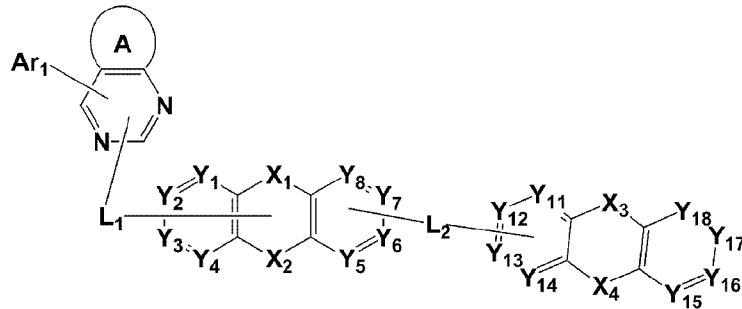
샘플	전자 수송층	구동전압 (V)	전류효율 (cd/A)	발광피크(nm)
실시예 36	R511	3.5	10.8	458
실시예 37	R541	3.2	8.8	458
실시예 38	R561	3.2	9.4	458
실시예 39	R581	3.8	9.9	458
실시예 40	R551	3.1	8.5	458
실시예 41	R571	3.3	8.8	458
실시예 42	R591	3.6	9.1	459
비교예 4	Alq ₃	5.2	5.4	458

[490] 상기 표 3에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 유기 전계 발광 소자의 전자 수송층 재료로 사용한 경우(실시예 36 내지 42)가 종래 Alq₃를 사용한 유기 전계 발광 소자의 정공 수송층 재료로 사용한 경우(비교예 4)에 비해 효율 및 구동전압이 우수한 것을 알 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

A는 S, O 및 N 중 하나의 원자를 함유 또는 비함유하는 5원 고리이고, Ar₁은 수소, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

L₁ 및 L₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며, 이때 L₁은 X₁, X₂, Y₁ 내지 Y₄ 중 어느 하나의 탄소 또는 질소와 연결되고,

X₁은 NR₁ 또는 CR₂R₃이고,

X₂ 내지 X₄는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 단일결합, S, O, NR₄ 및 CR₅R₆로 이루어진 군에서 선택되고, 이때, X₂ 및 X₄ 중 하나 이상은 단일결합이며, X₃ 및 X₄가 모두 단일결합인 경우는 제외되고, Y₁ 내지 Y₈ 및 Y₁₁ 내지 Y₁₈은 각각 독립적으로 CR₇이고, 이때, 복수의 R₇는 서로 동일하거나 상이하며,

R₁ 내지 R₇는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 방향족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하며,

상기 A의 5원 고리와, 상기 Ar₁의 아릴기 및 헤테로아릴기와, 상기 L₁ 및 L₂의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, 상기 R₁ 내지 R₇의 아릴기 및 헤테로아릴기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₂~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로

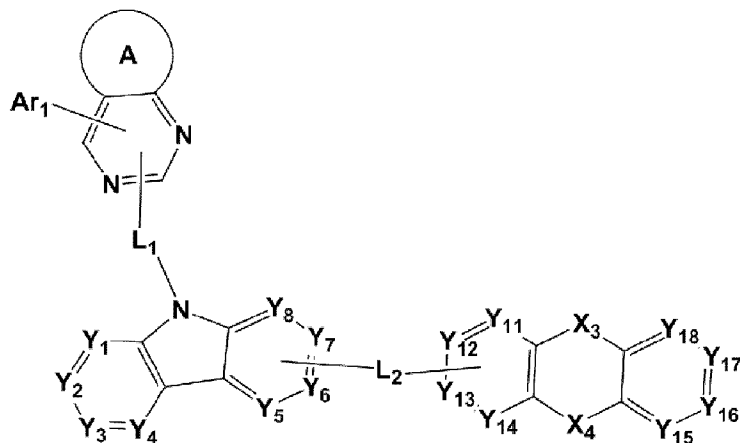
치환 또는 비치환되며, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 2]

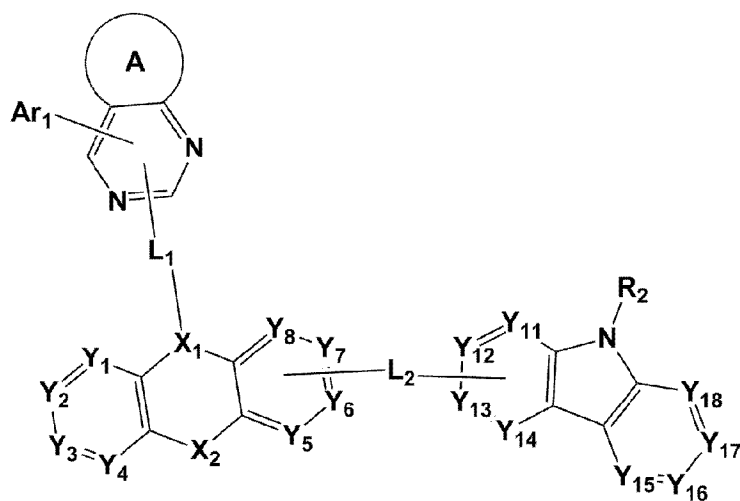
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 2 내지 5로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:

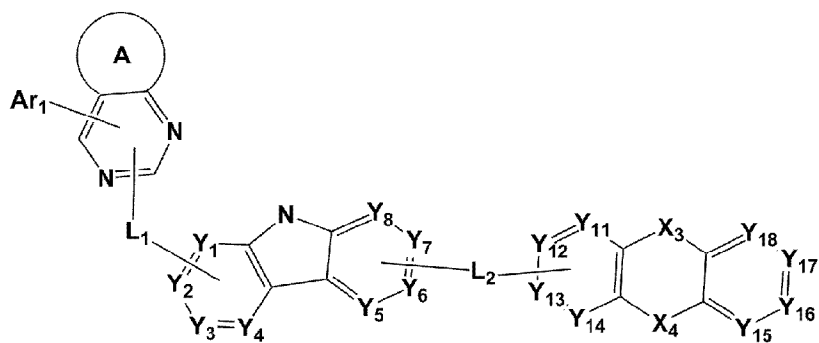
[화학식 2]



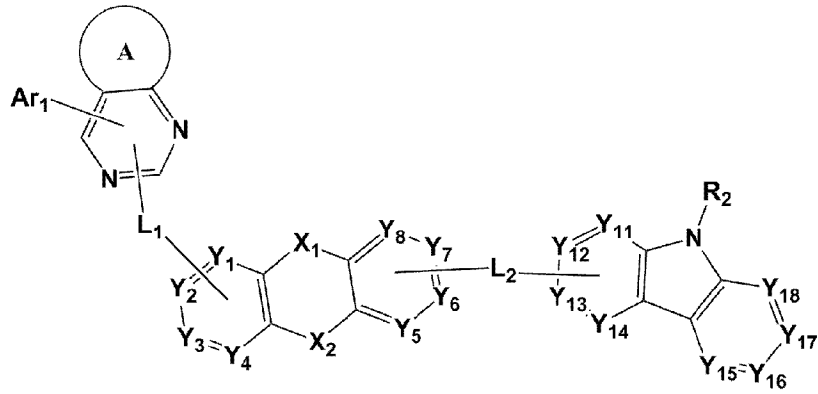
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 2 내지 5에서,

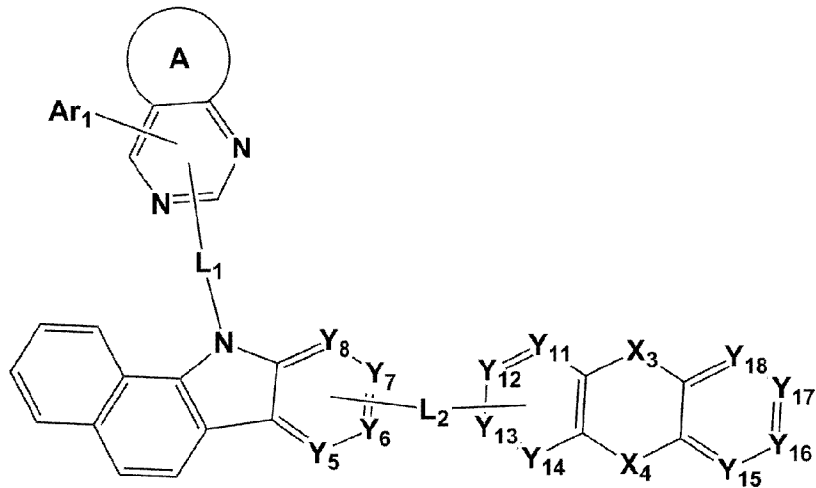
A, Ar₁, X₁ 내지 X₄, Y₁ 내지 Y₈, Y₁₁ 내지 Y₁₈, L₁, L₂ 및 R₂에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 3]

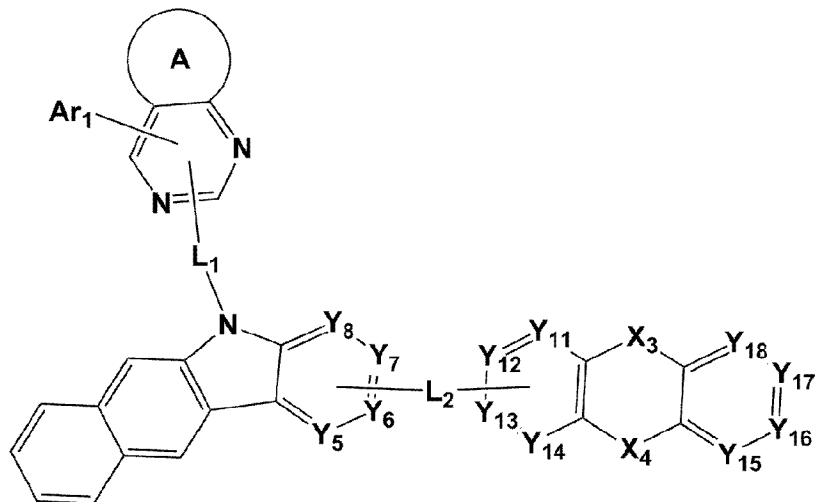
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 6 내지 8로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:

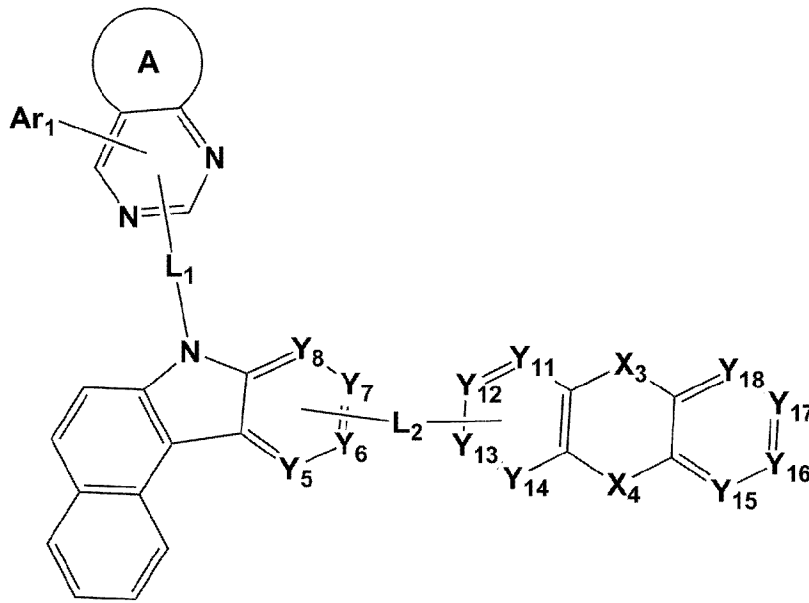
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 6 내지 8에서,

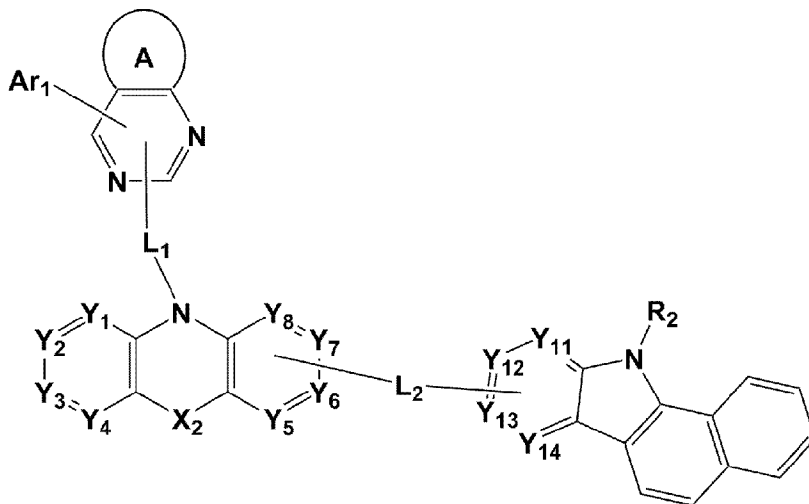
A, Ar₁, X₃, X₄, Y₅ 내지 Y₈, L₁, L₂ 및 Y₁₁ 내지 Y₁₈에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 4]

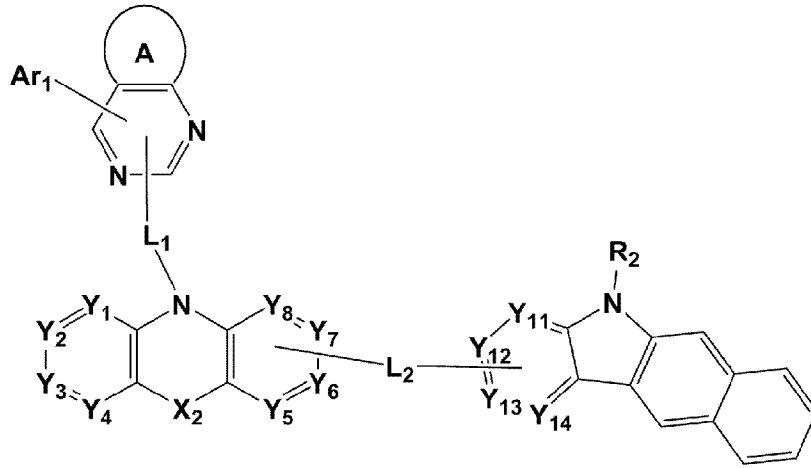
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 9 내지 11로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:

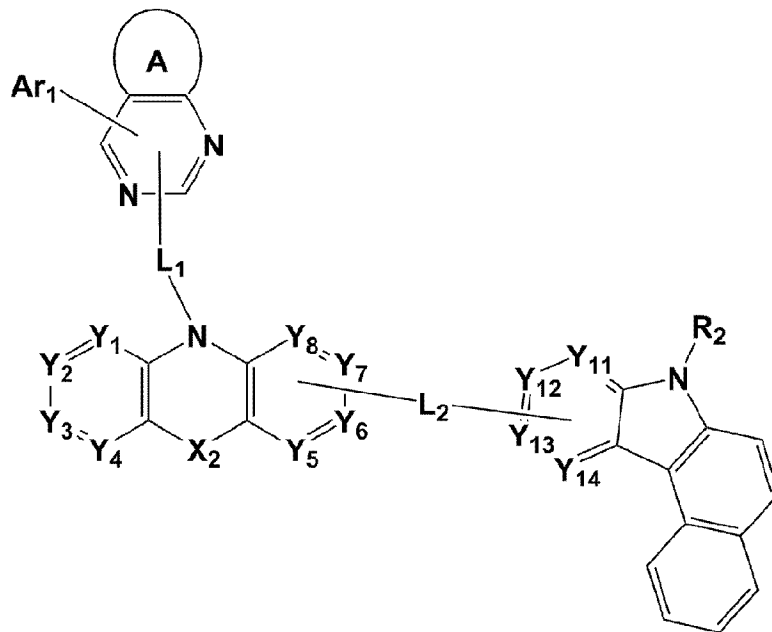
[화학식 9]



[화학식 10]



[화학식 11]



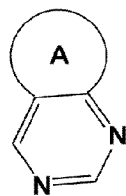
상기 화학식 9 내지 11에서,

A, Ar₁, X₁, X₂, Y₅ 내지 Y₈, Y₁₁ 내지 Y₁₈, L₁, L₂ 및 R₂에 대한 설명은 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 5]

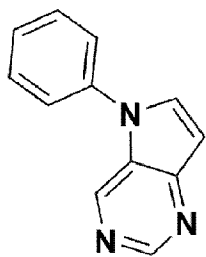
제1항에 있어서,

상기 화학식 1에서

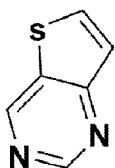


로 표시되는 모이어티가 하기 S-1 내지 S-8로

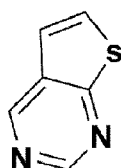
표시되는 모이어티로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.



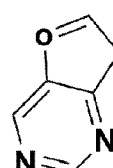
S-1



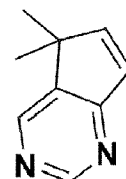
S-2



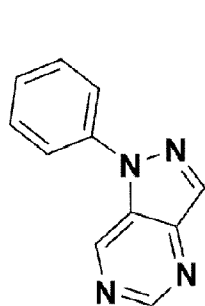
S-3



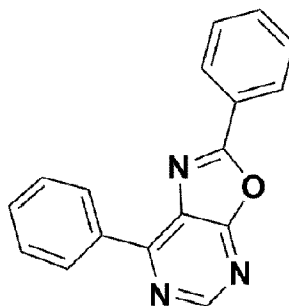
S-4



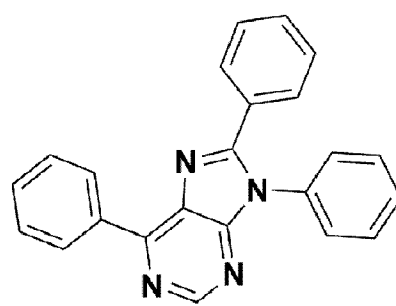
S-5



S-6



S-7



S-8

- [청구항 6] 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,
상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 7] 제6항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 8] 제6항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 인광 발광층인 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2017/002821

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 495/04(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 491/048(2006.01)i, C07D 209/56(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(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 495/04; C07D 403/14; C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 473/00; C07D 401/14; H05B 33/18; C07D 487/04; C07D 491/048; C07D 209/56; H01L 51/00

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), Google & Keywords: pyrimidine, 5-membered ring, carbazole, fluorene, dibenzothiophene, dibenzofuran, acridine, thianthrene, dibenzodioxin, organic electroluminescence diode, organic layer

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2014-0012440 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 03 February 2014 See claims 1, 9-10; paragraphs [0001], [0029], [0086].	1-2,6-8
A		3-5
A	KR 10-2012-0080508 A (CS ELSOLAR CO., LTD.) 17 July 2012 See the entire document.	1-8
A	WO 2012-023947 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 23 February 2012 See the entire document.	1-8
A	WO 2009-030981 A2 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 12 March 2009 See the entire document.	1-8
A	KR 10-2005-0050489 A (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 31 May 2005 See the entire document.	1-8



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

05 JULY 2017 (05.07.2017)

Date of mailing of the international search report

05 JULY 2017 (05.07.2017)

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. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/002821

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2014-0012440 A	03/02/2014	CN 104471026 A	25/03/2015
		EP 2875094 A1	27/05/2015
		JP 2015-530732 A	15/10/2015
		US 2015-0159084 A1	11/06/2015
		WO 2014-014310 A1	23/01/2014
KR 10-2012-0080508 A	17/07/2012	KR 10-1375357 B1	26/03/2014
		KR 10-2013-0007511 A	18/01/2013
WO 2012-023947 A1	23/02/2012	JP 2013-536196 A	19/09/2013
		JP 5770289 B2	26/08/2015
		KR 10-2013-0108265 A	02/10/2013
		TW 201226407 A	01/07/2012
		TW I530496 B	21/04/2016
		US 2013-0140549 A1	06/06/2013
WO 2009-030981 A2	12/03/2009	CN 101669226 A	10/03/2010
		CN 101808964 A	18/08/2010
		CN 101808964 B	01/01/2014
		CN 101827834 A	08/09/2010
		CN 101827834 B	25/11/2015
		CN 101939296 A	05/01/2011
		CN 101939296 B	13/08/2014
		CN 103601609 A	26/02/2014
		CN 104311533 A	28/01/2015
		CN 104835914 A	12/08/2015
		CN 105367544 A	02/03/2016
		EP 2097938 A2	09/09/2009
		EP 2185532 A2	19/05/2010
		EP 2185532 B1	09/11/2016
		EP 2200956 A1	30/06/2010
		EP 2200956 B1	03/07/2013
		EP 2240446 A2	20/10/2010
		EP 2240446 B1	11/11/2015
		EP 2511254 A2	17/10/2012
		EP 2511254 A3	02/01/2013
		EP 2511254 B1	11/05/2016
		EP 3112336 A1	04/01/2017
		JP 2010-515255 A	06/05/2010
		JP 2010-535806 A	25/11/2010
		JP 2010-535809 A	25/11/2010
		JP 2011-509247 A	24/03/2011
		JP 2014-041846 A	06/03/2014
		JP 2014-080430 A	08/05/2014
		JP 2014-196342 A	16/10/2014
		JP 2015-003916 A	08/01/2015
		JP 2015-164919 A	17/09/2015
		JP 2016-121181 A	07/07/2016
		JP 2016-181725 A	13/10/2016

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/002821

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
		JP 5575661 B2	20/08/2014
		JP 5722036 B2	20/05/2015
		JP 5944440 B2	05/07/2016
		JP 5968862 B2	10/08/2016
		JP 6009144 B2	19/10/2016
		JP 6062903 B2	18/01/2017
		KR 10-1118808 B1	22/03/2012
		KR 10-1565724 B1	03/11/2015
		KR 10-1630883 B1	15/06/2016
		KR 10-1645737 B1	04/08/2016
		KR 10-1665726 B1	12/10/2016
		KR 10-1684205 B1	07/12/2016
		KR 10-2009-0106566 A	09/10/2009
		KR 10-2015-0041182 A	15/04/2015
		KR 10-2015-0041196 A	15/04/2015
		KR 10-2016-0086983 A	20/07/2016
		KR 10-2016-0104752 A	05/09/2016
		TW 200901530 A	01/01/2009
		TW 200914435 A	01/04/2009
		TW 200920717 A	16/05/2009
		TW 200927742 A	01/07/2009
		TW 201438315 A	01/10/2014
		TW 201546056 A	16/12/2015
		TW 1443094 B	01/07/2014
		TW 1481089 B	11/04/2015
		TW 1501943 B	01/10/2015
		TW 1511964 B	11/12/2015
		TW 1531567 B	01/05/2016
		TW 1551594 B	01/10/2016
		TW 1554506 B	21/10/2016
		TW 1561513 B	11/12/2016
		TW 1562975 B	21/12/2016
		US 2006-0087817 A1	27/04/2006
		US 2009-0134784 A1	28/05/2009
		US 2009-0153034 A1	18/06/2009
		US 2009-0167162 A1	02/07/2009
		US 2010-0237334 A1	23/09/2010
		US 2011-0057171 A1	10/03/2011
		US 2011-0057559 A1	10/03/2011
		US 2011-0084599 A1	14/04/2011
		US 2012-0012829 A1	19/01/2012
		US 2014-0008643 A1	09/01/2014
		US 2016-0372685 A1	22/12/2016
		US 7190591 B2	13/03/2007
		US 8007927 B2	30/08/2011
		US 8221905 B2	17/07/2012
		US 8367850 B2	05/02/2013
		US 8580402 B2	12/11/2013
		US 8586204 B2	19/11/2013
		US 8652652 B2	18/02/2014

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/002821

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
		US 8866377 B2	21/10/2014
		US 9123903 B2	01/09/2015
		WO 2009-021107 A1	12/02/2009
		WO 2009-021126 A2	12/02/2009
		WO 2009-021126 A3	18/06/2009
		WO 2009-021126 A8	30/07/2009
		WO 2009-030981 A3	18/06/2009
		WO 2009-085344 A2	09/07/2009
		WO 2009-085344 A3	15/10/2009
		WO 2009-086028 A2	09/07/2009
		WO 2009-086028 A3	27/08/2009
KR 10-2005-0050489 A	31/05/2005	CN 1622720 A	01/06/2005
		EP 1535981 A2	01/06/2005
		EP 1535981 A3	07/12/2005
		JP 2005-158668 A	16/06/2005
		KR 10-0560790 B1	13/03/2006
		US 2005-0112401 A1	26/05/2005
		US 2009-0195153 A1	06/08/2009
		US 7521130 B2	21/04/2009

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 495/04(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 491/048(2006.01)i, C07D 209/56(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 495/04; C07D 403/14; C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 473/00; C07D 401/14; H05B 33/18; C07D 487/04; C07D 491/048; C07D 209/56; H01L 51/00

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus), Google & 키워드: 피리미딘, 5원고리, 카바졸, 플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란, 아크리딘, 티안트렌, 디벤조디옥사인, 유기 전계 발광 소자, 유기물층

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2014-0012440 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2014.02.03 청구항 1, 9-10; 단락 [0001], [0029], [0086] 참조.	1-2, 6-8
A		3-5
A	KR 10-2012-0080508 A ((주)씨에스엘솔라) 2012.07.17 전체 문헌 참조.	1-8
A	WO 2012-023947 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2012.02.23 전체 문헌 참조.	1-8
A	WO 2009-030981 A2 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2009.03.12 전체 문헌 참조.	1-8
A	KR 10-2005-0050489 A (삼성에스디아이 주식회사) 2005.05.31 전체 문헌 참조.	1-8

☐ 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 07월 05일 (05.07.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 07월 05일 (05.07.2017)

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 10-2014-0012440 A	2014/02/03	CN 104471026 A EP 2875094 A1 JP 2015-530732 A US 2015-0159084 A1 WO 2014-014310 A1	2015/03/25 2015/05/27 2015/10/15 2015/06/11 2014/01/23
KR 10-2012-0080508 A	2012/07/17	KR 10-1375357 B1 KR 10-2013-0007511 A	2014/03/26 2013/01/18
WO 2012-023947 A1	2012/02/23	JP 2013-536196 A JP 5770289 B2 KR 10-2013-0108265 A TW 201226407 A TW I530496 B US 2013-0140549 A1	2013/09/19 2015/08/26 2013/10/02 2012/07/01 2016/04/21 2013/06/06
WO 2009-030981 A2	2009/03/12	CN 101669226 A CN 101808964 A CN 101808964 B CN 101827834 A CN 101827834 B CN 101939296 A CN 101939296 B CN 103601609 A CN 104311533 A CN 104835914 A CN 105367544 A EP 2097938 A2 EP 2185532 A2 EP 2185532 B1 EP 2200956 A1 EP 2200956 B1 EP 2240446 A2 EP 2240446 B1 EP 2511254 A2 EP 2511254 A3 EP 2511254 B1 EP 3112336 A1 JP 2010-515255 A JP 2010-535806 A JP 2010-535809 A JP 2011-509247 A JP 2014-041846 A JP 2014-080430 A JP 2014-196342 A JP 2015-003916 A JP 2015-164919 A JP 2016-121181 A JP 2016-181725 A	2010/03/10 2010/08/18 2014/01/01 2010/09/08 2015/11/25 2011/01/05 2014/08/13 2014/02/26 2015/01/28 2015/08/12 2016/03/02 2009/09/09 2010/05/19 2016/11/09 2010/06/30 2013/07/03 2010/10/20 2015/11/11 2012/10/17 2013/01/02 2016/05/11 2017/01/04 2010/05/06 2010/11/25 2010/11/25 2011/03/24 2014/03/06 2014/05/08 2014/10/16 2015/01/08 2015/09/17 2016/07/07 2016/10/13

국제조사보고서에서
인용된 특허문헌

공개일

대응특허문헌

공개일

JP 5575661 B2	2014/08/20
JP 5722036 B2	2015/05/20
JP 5944440 B2	2016/07/05
JP 5968862 B2	2016/08/10
JP 6009144 B2	2016/10/19
JP 6062903 B2	2017/01/18
KR 10-1118808 B1	2012/03/22
KR 10-1565724 B1	2015/11/03
KR 10-1630883 B1	2016/06/15
KR 10-1645737 B1	2016/08/04
KR 10-1665726 B1	2016/10/12
KR 10-1684205 B1	2016/12/07
KR 10-2009-0106566 A	2009/10/09
KR 10-2015-0041182 A	2015/04/15
KR 10-2015-0041196 A	2015/04/15
KR 10-2016-0086983 A	2016/07/20
KR 10-2016-0104752 A	2016/09/05
TW 200901530 A	2009/01/01
TW 200914435 A	2009/04/01
TW 200920717 A	2009/05/16
TW 200927742 A	2009/07/01
TW 201438315 A	2014/10/01
TW 201546056 A	2015/12/16
TW I443094 B	2014/07/01
TW I481089 B	2015/04/11
TW I501943 B	2015/10/01
TW I511964 B	2015/12/11
TW I531567 B	2016/05/01
TW I551594 B	2016/10/01
TW I554506 B	2016/10/21
TW I561513 B	2016/12/11
TW I562975 B	2016/12/21
US 2006-0087817 A1	2006/04/27
US 2009-0134784 A1	2009/05/28
US 2009-0153034 A1	2009/06/18
US 2009-0167162 A1	2009/07/02
US 2010-0237334 A1	2010/09/23
US 2011-0057171 A1	2011/03/10
US 2011-0057559 A1	2011/03/10
US 2011-0084599 A1	2011/04/14
US 2012-0012829 A1	2012/01/19
US 2014-0008643 A1	2014/01/09
US 2016-0372685 A1	2016/12/22
US 7190591 B2	2007/03/13
US 8007927 B2	2011/08/30
US 8221905 B2	2012/07/17
US 8367850 B2	2013/02/05
US 8580402 B2	2013/11/12
US 8586204 B2	2013/11/19
US 8652652 B2	2014/02/18

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
		US 8866377 B2	2014/10/21
		US 9123903 B2	2015/09/01
		WO 2009-021107 A1	2009/02/12
		WO 2009-021126 A2	2009/02/12
		WO 2009-021126 A3	2009/06/18
		WO 2009-021126 A8	2009/07/30
		WO 2009-030981 A3	2009/06/18
		WO 2009-085344 A2	2009/07/09
		WO 2009-085344 A3	2009/10/15
		WO 2009-086028 A2	2009/07/09
		WO 2009-086028 A3	2009/08/27
KR 10-2005-0050489 A	2005/05/31	CN 1622720 A	2005/06/01
		EP 1535981 A2	2005/06/01
		EP 1535981 A3	2005/12/07
		JP 2005-158668 A	2005/06/16
		KR 10-0560790 B1	2006/03/13
		US 2005-0112401 A1	2005/05/26
		US 2009-0195153 A1	2009/08/06
		US 7521130 B2	2009/04/21