

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020년 4월 2일 (02.04.2020)



(10) 국제공개번호
WO 2020/067594 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 471/04 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07F 9/53 (2006.01) *H01L 51/52* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2018/011606

(22) 국제출원일: 2018년 9월 28일 (28.09.2018)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(71) 출원인: 희성소재(주) (**HEESUNG MATERIAL LTD.**)
[KR/KR]; 17118 경기도 용인시 처인구 남사면 당하로
113-19, Gyeonggi-do (KR).

(72) 발명자: 이윤지 (**LEE, Yun-Ji**); 18138 경기도 오산시 오
산로232번길 9, 406호, Gyeonggi-do (KR). 오한국 (**OH,**
Han-Kook); 18134 경기도 오산시 경기동로8번길 24-8,
102호, Gyeonggi-do (KR). 지혜수 (**JI, Hye-Su**); 18141
경기도 오산시 월동로7번길 31-2, 803호, Gyeonggi-do
(KR). 정원장 (**JEONG, Won-Jang**); 18321 경기도 화성
시 봉담읍 와우로 15번길 10, 314동 1704호, Gyeonggi-do
(KR). 최진석 (**CHOI, Jin-Seok**); 16438 경기도 수원시 팔
달구 화양로50번길 30, 123동 1201호, Gyeonggi-do (KR).
최대혁 (**CHOI, Dae-Hyuk**); 16953 경기도 용인시 기흥
구 흥덕2로 126, 703동 1302호, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 정순성 (**CHUNG, Soon-Sung**); 06253 서울시 강
남구 강남대로 318, 타워837 빌딩, 6층, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국
내 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, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, 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,

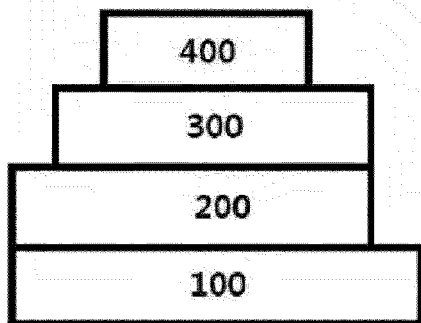
SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR,
TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역
내 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), 유
럽 (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 제21조(3))

(54) Title: HETEROCYCLIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT EMITTING DIODE COMPRISING SAME

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



(57) Abstract: The present specification relates to a heterocyclic compound repre-
sented by chemical formula 1 and an organic light emitting diode comprising same.

(57) 요약서: 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물
및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2020/067594 A1

명세서

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

- [1] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 전계 발광 소자는 자체 발광형 표시 소자의 일종으로서, 시야각이 넓고, 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다.
- [3] 유기 발광 소자는 2개의 전극 사이에 유기 박막을 배치시킨 구조를 가지고 있다. 이와 같은 구조의 유기 발광 소자에 전압이 인가되면, 2개의 전극으로부터 주입된 전자와 정공이 유기 박막에서 결합하여 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 발하게 된다. 상기 유기 박막은 필요에 따라 단층 또는 다층으로 구성될 수 있다.
- [4] 유기 박막의 재료는 필요에 따라 발광 기능을 가질 수 있다. 예컨대, 유기 박막 재료로는 그 자체가 단독으로 발광층을 구성할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있고, 또는 호스트-도펀트계 발광층의 호스트 또는 도펀트 역할을 할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다. 그 외에도, 유기 박막의 재료로서, 정공 주입, 정공 수송, 전자 차단, 정공 차단, 전자 수송, 전자 주입 등의 역할을 수행할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다.
- [5] 유기 발광 소자의 성능, 수명 또는 효율을 향상시키기 위하여, 유기 박막의 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

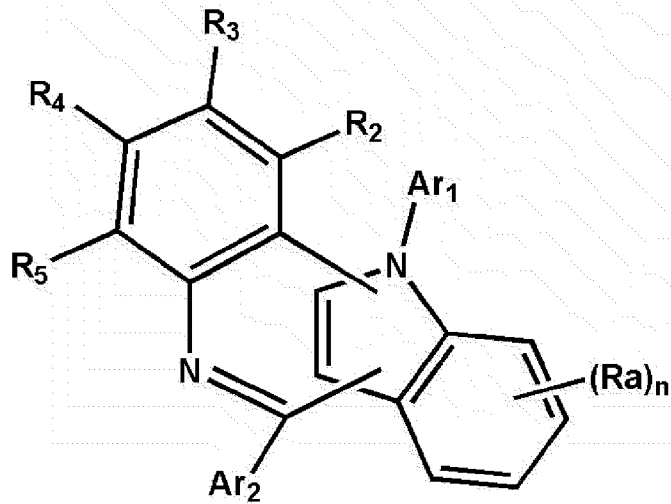
기술적 과제

- [6] 본 발명은 신규한 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공하고자 한다.

과제 해결 수단

- [7] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [8] [화학식 1]

[9]



[10] 상기 화학식 1에 있어서,

[11] R_2 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; $-CN$; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; $-SiRR'R''$; $-P(=O)RR'$; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 또는 방향족 탄화수소 고리를 형성하고,

[12] R_a 는 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

[13] Ar_1 은 $-(L1)_p-(Z1)_q$ 로 표시되고,

[14] Ar_2 는 $-(L2)_r-(Z2)_s$ 로 표시되며,

[15] 상기 $L1$ 및 $L2$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

[16] 상기 $Z1$ 및 $Z2$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; $-CN$; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; $-SiRR'R''$; $-P(=O)RR'$; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

[17] 상기 R , R' 및 R'' 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; $-CN$; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

- [18] p 및 r은 1 내지 4의 정수이며,
 [19] q 및 s는 1 내지 3의 정수이고,
 [20] n은 0 내지 4의 정수이다.
 [21] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 본 출원의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

- [22] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기발광소자의 유기물층 재료로서 사용할 수 있다. 상기 화합물은 유기발광소자에서 정공주입재료, 정공수송재료, 발광재료, 전자수송재료, 전자주입재료 등의 역할을 할 수 있다. 특히, 상기 화합물이 유기 발광 소자의 전자수송층 재료, 정공저지층 재료 또는 전하생성층 재료로서 사용될 수 있다.
- [23] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기물층에 사용하는 경우 소자의 구동전압을 낮추고, 광효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [24] 도 1 내지 도 4는 각각 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 적층구조를 개략적으로 나타낸 도이다.
- [25] <부호의 설명>
- [26] 100: 기판
- [27] 200: 양극
- [28] 300: 유기물층
- [29] 301: 정공 주입층
- [30] 302: 정공 수송층
- [31] 303: 발광층
- [32] 304: 정공 저지층
- [33] 305: 전자 수송층
- [34] 306: 전자 주입층
- [35] 400: 음극

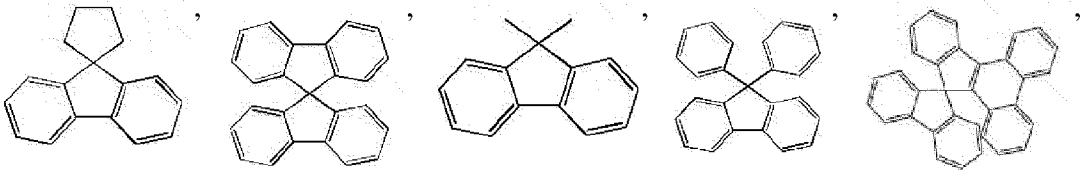
발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [36] 이하 본 출원에 대해서 자세하게 설명한다.
- [37] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

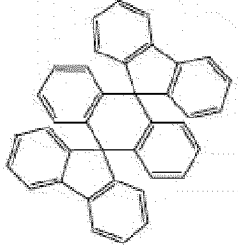
- [38] 본 명세서에 있어서, 상기 할로젠은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드일 수 있다.
- [39] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 탄소수 1 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 60, 구체적으로 1 내지 40, 더욱 구체적으로, 1 내지 20일 수 있다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로펜틸메틸기, 시클로헥실메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필펜틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [40] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 탄소수 2 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로, 2 내지 20일 수 있다. 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 상기 알키닐기는 탄소수 2 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알키닐기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로, 2 내지 20일 수 있다.
- [42] 본 명세서에 있어서, 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [43] 본 명세서에 있어서, 상기 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 시클로알킬기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 시클로알킬기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다.

상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 60, 구체적으로 3 내지 40, 더욱 구체적으로 5 내지 20일 수 있다. 구체적으로, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [44] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로시클로알킬기는 헤테로 원자로서 O, S, Se, N 또는 Si를 포함하고, 탄소수 2 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 헤테로시클로알킬기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 헤테로시클로알킬기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다. 상기 헤테로시클로알킬기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로 3 내지 20일 수 있다.
- [45] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴기는 탄소수 6 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 아릴기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 아릴기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다. 상기 아릴기는 스피로기를 포함한다. 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 60, 구체적으로 6 내지 40, 더욱 구체적으로 6 내지 25일 수 있다. 상기 아릴기의 구체적인 예로는 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 크라이세닐기, 페난트레닐기, 페릴레닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 페날레닐기, 파이레닐기, 테트라세닐기, 펜타세닐기, 플루오레닐기, 인데닐기, 아세나프틸레닐기, 벤조플루오레닐기, 스피로비플루오레닐기, 2,3-디히드로-1H-인데닐기, 이들의 축합고리기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [46] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 Si를 포함하고 상기 Si 원자가 라디칼로서 직접 연결되는 치환기이며, $-\text{SiR}_{104}\text{R}_{105}\text{R}_{106}$ 로 표시되고, R_{104} 내지 R_{106} 은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 알킬기; 알케닐기; 알콕시기; 시클로알킬기; 아릴기; 및 헤테로고리기 중 적어도 하나로 이루어진 치환기일 수 있다. 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [47] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 치환기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [48]



등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



- [49] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로아릴기는 헤테로 원자로서 S, O, Se, N 또는 Si를 포함하고, 탄소수 2 내지 60인 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 상기 다환이란 헤테로아릴기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기관 헤테로아릴기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기 동일 수도 있다. 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로 3 내지 25일 수 있다. 상기 헤테로아릴기의 구체적인 예로는 피리딜기, 피롤릴기, 피리미딜기, 피리다지닐기, 푸라닐기, 티오펜기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 옥사졸릴기, 이속사졸릴기, 티아졸릴기, 이소티아졸릴기, 트리아졸릴기, 푸라자닐기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 디티아졸릴기, 테트라졸릴기, 파이라닐기, 티오파이라닐기, 디아지닐기, 옥사지닐기, 티아지닐기, 디옥시닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 이소퀴나졸리닐기, 퀴노졸리릴기, 나프티리딜기, 아크리디닐기, 페난트리디닐기, 이미다조피리디닐기, 디아자나프탈레닐기, 트리아자인덴기, 인돌릴기, 인돌리지닐기, 벤조티아졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티오펜기, 벤조푸란기, 디벤조티오펜기, 디벤조푸란기, 카바졸릴기, 벤조카바졸릴기, 디벤조카바졸릴기, 페나지닐기, 디벤조실롤기, 스피로비(디벤조실롤), 디히드로페나지닐기, 페녹사지닐기, 페난트리딜기, 이미다조피리디닐기, 티에닐기, 인돌로[2,3-a]카바졸릴기, 인돌로[2,3-b]카바졸릴기, 인돌리닐기, 10,11-디히드로-디벤조[b,f]아제핀기, 9,10-디히드로아크리디닐기, 페난트라지닐기, 페노티아티아지닐기, 프탈라지닐기, 나프틸리디닐기, 페난트롤리닐기, 벤조[c][1,2,5]티아디아졸릴기, 5,10-디히드로디벤조[b,e][1,4]아자실리닐, 피라졸로[1,5-c]퀴나졸리닐기, 피리도[1,2-b]인다졸릴기, 피리도[1,2-a]이미다조[1,2-e]인돌리닐기, 5,11-디히드로인데노[1,2-b]카바졸릴기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

- [50] 본 명세서에 있어서, 상기 아민기는 모노알킬아민기; 모노아릴아민기; 모노헤테로아릴아민기; $-NH_2$; 디알킬아민기; 디아릴아민기; 디헤테로아릴아민기; 알킬아릴아민기; 알킬헤테로아릴아민기; 및 아릴헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 상기 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 디비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기, 비페닐나프틸아민기, 페닐비페닐아민기, 비페닐플루오레닐아민기, 페닐트리페닐레닐아민기, 비페닐트리페닐레닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [51] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 아릴기에 결합 위치가 두 개 있는 것, 즉 2가기를 의미한다. 이들은 각각 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기의 설명이 적용될 수 있다. 또한, 헤테로아릴렌기는 헤테로아릴기에 결합 위치가 두 개 있는 것, 즉 2가기를 의미한다. 이들은 각각 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기의 설명이 적용될 수 있다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 포스핀옥사이드기는 구체적으로 디페닐포스핀옥사이드기, 디나프틸포스핀옥사이드 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [53] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오쏘(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한"기로 해석될 수 있다.
- [54] 본 명세서에 있어서, 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [55] 본 명세서에 있어서, "치환 또는 비치환"이란 C1 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬; C2 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알케닐; C2 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알키닐; C3 내지 C60의 단환 또는 다환의 시클로알킬; C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로시클로알킬; C6 내지 C60의 단환 또는 다환의 아릴; C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로아릴; $-SiRR'R''$; $-P(=O)RR'$; C1 내지 C20의 알킬아민; C6 내지 C60의 단환 또는 다환의 아릴아민; 및 C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로아릴아민으로 이루어진 군으로부터 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중에서 선택된 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.

- [56] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [57] 상기 화학식 1은 인돌기에 퀴놀린기가 축합되는 구조를 갖는 것으로, 상기 화학식 1이 인돌기를 갖는 경우, 구조 내에 sp² 비공유 전자쌍을 가지지 않고 sp³ 비공유 전자쌍을 가지고 있다. 따라서 sp² 비공유 결합을 갖는 벤조티오펜 또는 벤조퓨란을 갖는 경우에 비하여 정공 수송 특성이 특히 뛰어나다. 이는 추후 유기 발광 소자의 유기물층으로 사용되는 경우 발광층에서 엑시톤(exiton)의 형성에 영향을 주어, 소자의 효율과 수명을 증가시키는 특성을 갖는다.
- [58] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -SiRR'R"; -P(=O)RR'; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 또는 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있다.
- [59] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 C1 내지 C60의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있다.
- [60] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소가거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있다.
- [61] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소가거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 C2 내지 C40의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있다.
- [62] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소가거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성할 수 있다.
- [63] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅ 중 R₂ 및 R₃는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성하고, 나머지는 수소일 수 있다.
- [64] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅ 중 R₃ 및 R₄는 서로 결합하여 벤젠고리를 형성하고, 나머지는 수소일 수 있다.
- [65] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R₂ 내지 R₅ 중 R₄ 및 R₅는

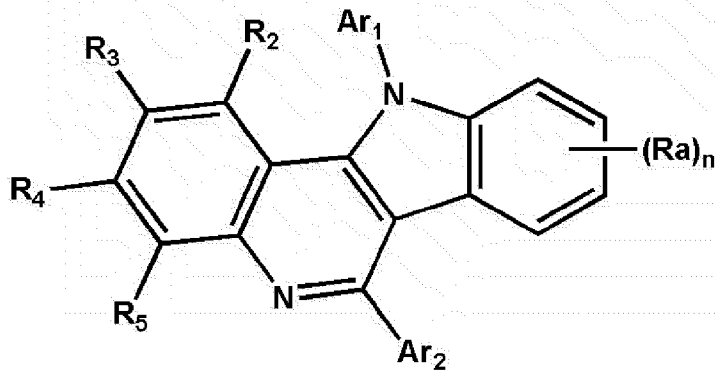
- 서로 결합하여 벤젠고리를 형성하고, 나머지는 수소일 수 있다.
- [66] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R_a 는 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기일 수 있다.
- [67] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R_a 는 수소; 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [68] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R_a 는 수소; C6 내지 C40의 아릴기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [69] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 R_a 는 수소일 수 있다.
- [70] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar_1 은 $-(L1)_p-(Z1)_q$ 로 표시되고, 상기 Ar_2 는 $-(L2)_r-(Z2)_s$ 로 표시될 수 있다.
- [71] 본원의 화학식 1의 Ar_1 및 Ar_2 가 각각의 치환기로 치환됨으로써, 열적 안정성이 단일 치환되는 경우보다 우수하며, 또한 구조적으로 인돌 구조의 정공 수송 특성을 조절하는 치환기 도입이 단일 치환된 경우보다 더 다양하게 도입이 가능하여, 구조의 특성을 조절하는 것이 뛰어날 수 있다.
- [72] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [73] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [74] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [75] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [76] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐렌기; 비페닐렌기; 나프탈렌기; 페난트레닐렌기; 트리페닐레닐렌기; 플루오란테닐렌기; 파이레닐렌기; 2가의 피리딘기; 2가의 피리미딘기; 또는 2가의 트리아진기일 수 있다.
- [77] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [78] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [79] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.

- [80] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 페닐렌기; 비페닐렌기; 나프탈렌기; 페난트레닐렌기; 2가의 피리딘기; 2가의 피리미딘기; 또는 2가의 트리아진기일 수 있다.
- [81] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [82] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [83] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [84] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 페닐렌기; 비페닐렌기; 나프탈렌기; 페난트레닐렌기; 트리페닐레닐렌기; 플루오란테닐렌기; 파이레닐렌기; 2가의 피리딘기; 2가의 피리미딘기; 또는 2가의 트리아진기일 수 있다.
- [85] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -SiRR'R"; -P(=O)RR'; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.
- [86] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 또는 P(=O)RR'일 수 있다.
- [87] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴기; 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60의 헤테로아릴기; 또는 P(=O)RR'일 수 있다.
- [88] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴기; 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40의 헤테로아릴기; 또는 P(=O)RR'일 수 있다.
- [89] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; C6 내지 C40의 아릴기, C2 내지 C40의 헤테로아릴기, C1 내지 C40의 알킬기 및 -CN으로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴기; C6 내지 C40의 아릴기로 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40의 헤테로아릴기; 또는 P(=O)RR'일 수 있으며, 상기 치환기는 다시 C1 내지 C40의 알킬기; 또는 C6 내지 C40의 아릴기로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [90] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; P(=O)RR'; 9,9'-다이메틸플루오렌기, -CN, 트리페닐렌기,

페난트렌기, 페닐기, 디벤조퓨란기 및 디벤조티오펜기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 비페닐기; 트리페닐렌기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 페난트렌기; 스피로비플루오렌기; 피리딘기; 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 페난트롤린기일 수 있다.

- [91] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z1은 수소; P(=O)RR'; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 디벤조퓨란기 및 디벤조티오펜기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 비페닐기; 스피로비플루오렌기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 피리딘기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 페난트롤린기일 수 있다.
- [92] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z2는 수소; P(=O)RR'; 페닐기, 페난트렌기, 트리페닐렌기, -CN, 9,9'-다이메틸플루오렌기, 카바졸기 및 디벤조퓨란기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 비페닐기; 트리페닐렌기; 메틸기로 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 페난트렌기; 피리딘기; 카바졸기; 또는 디벤조퓨란기일 수 있다.
- [93] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기일 수 있다.
- [94] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [95] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C60의 아릴기일 수 있다.
- [96] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴기일 수 있다.
- [97] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C6 내지 C40의 아릴기일 수 있다.
- [98] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기일 수 있다.
- [99] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [100] [화학식 2]

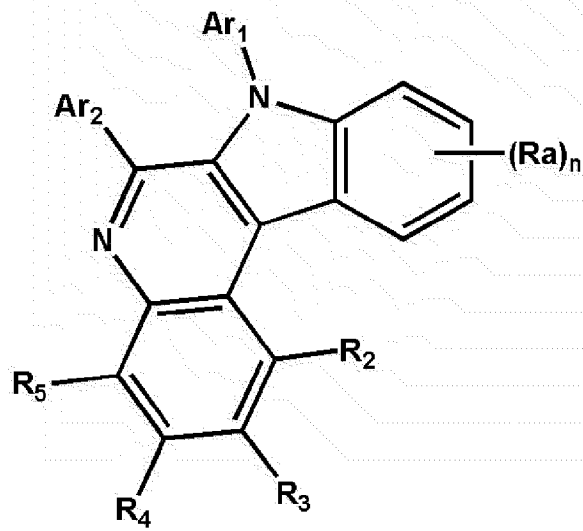
[101]



[102]

[화학식 3]

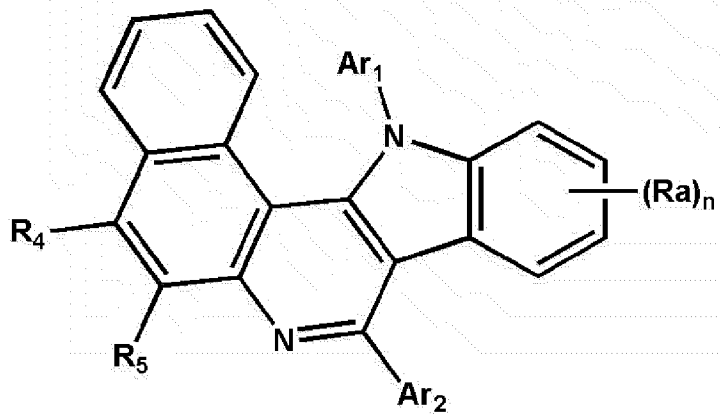
[103]



[104]

[화학식 4]

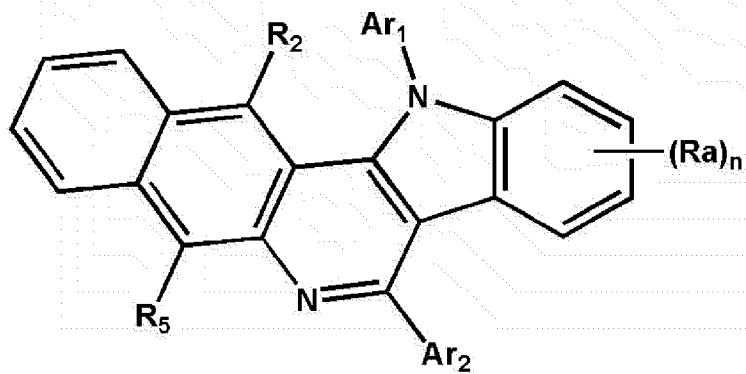
[105]



[106]

[화학식 5]

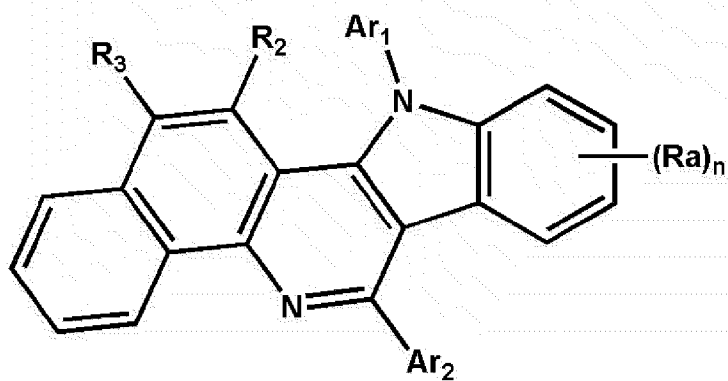
[107]



[108]

[화학식 6]

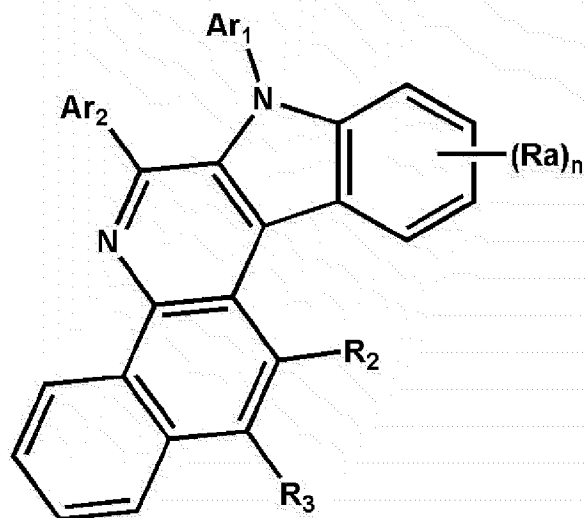
[109]



[110]

[화학식 7]

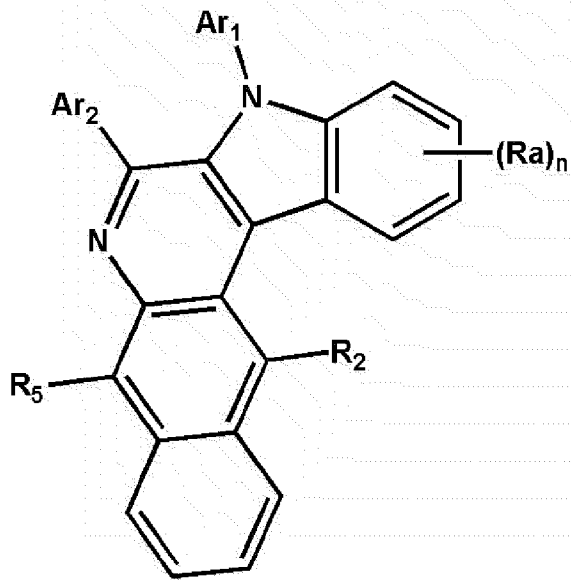
[111]



[112]

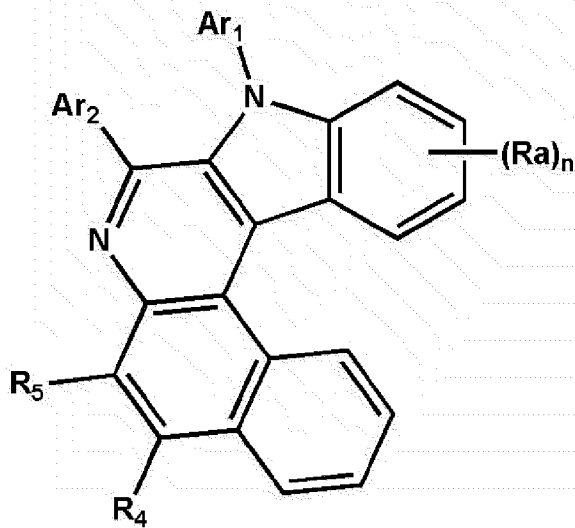
[화학식 8]

[113]



[114] [화학식 9]

[115]

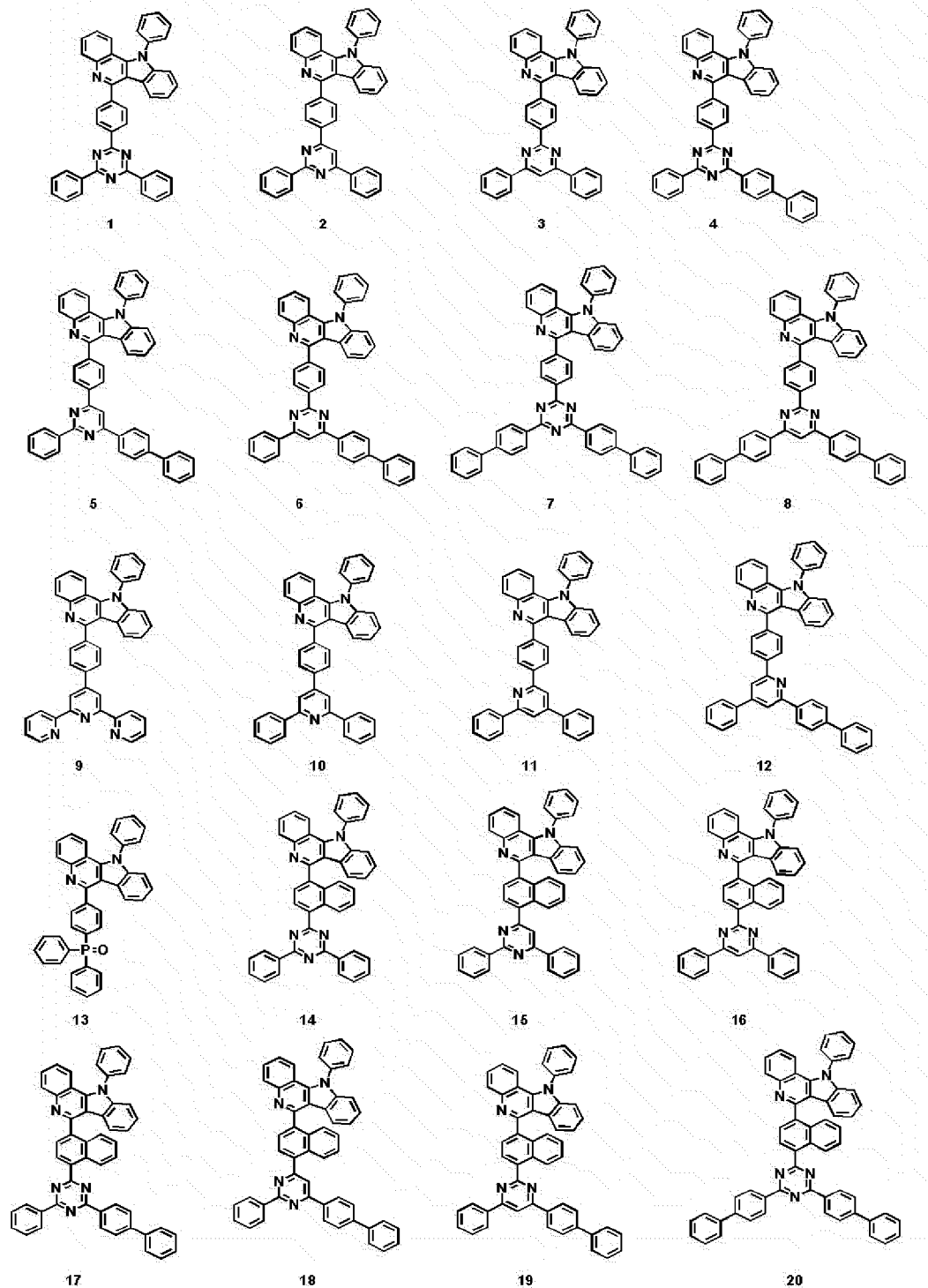


[116] 상기 화학식 2 내지 9에서,

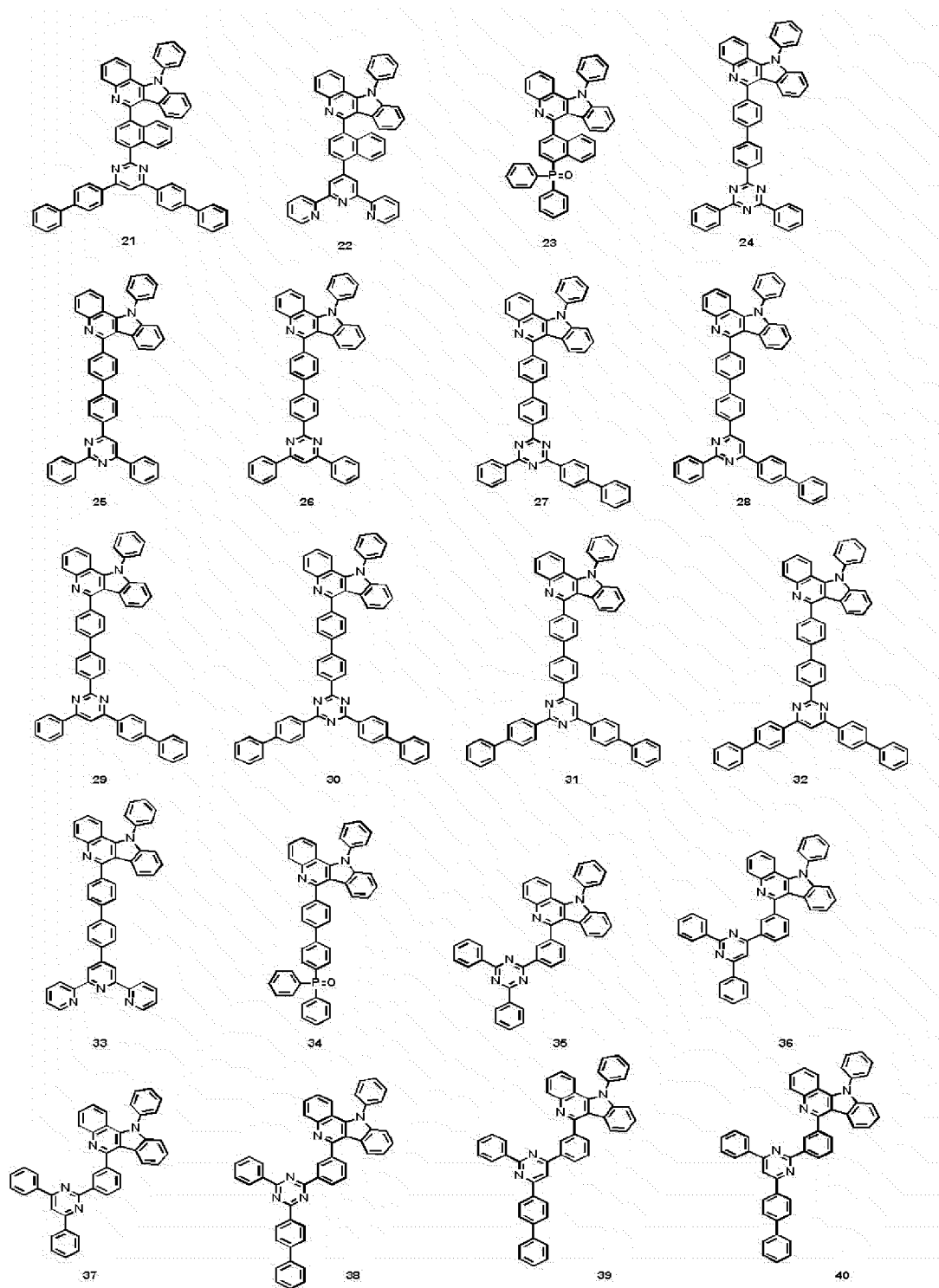
[117] R_a , Ar_1 , Ar_2 , R_2 내지 R_5 및 n 의 정의는 상기 화학식 1의 정의와 동일하다.

[118] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물을 제공한다.

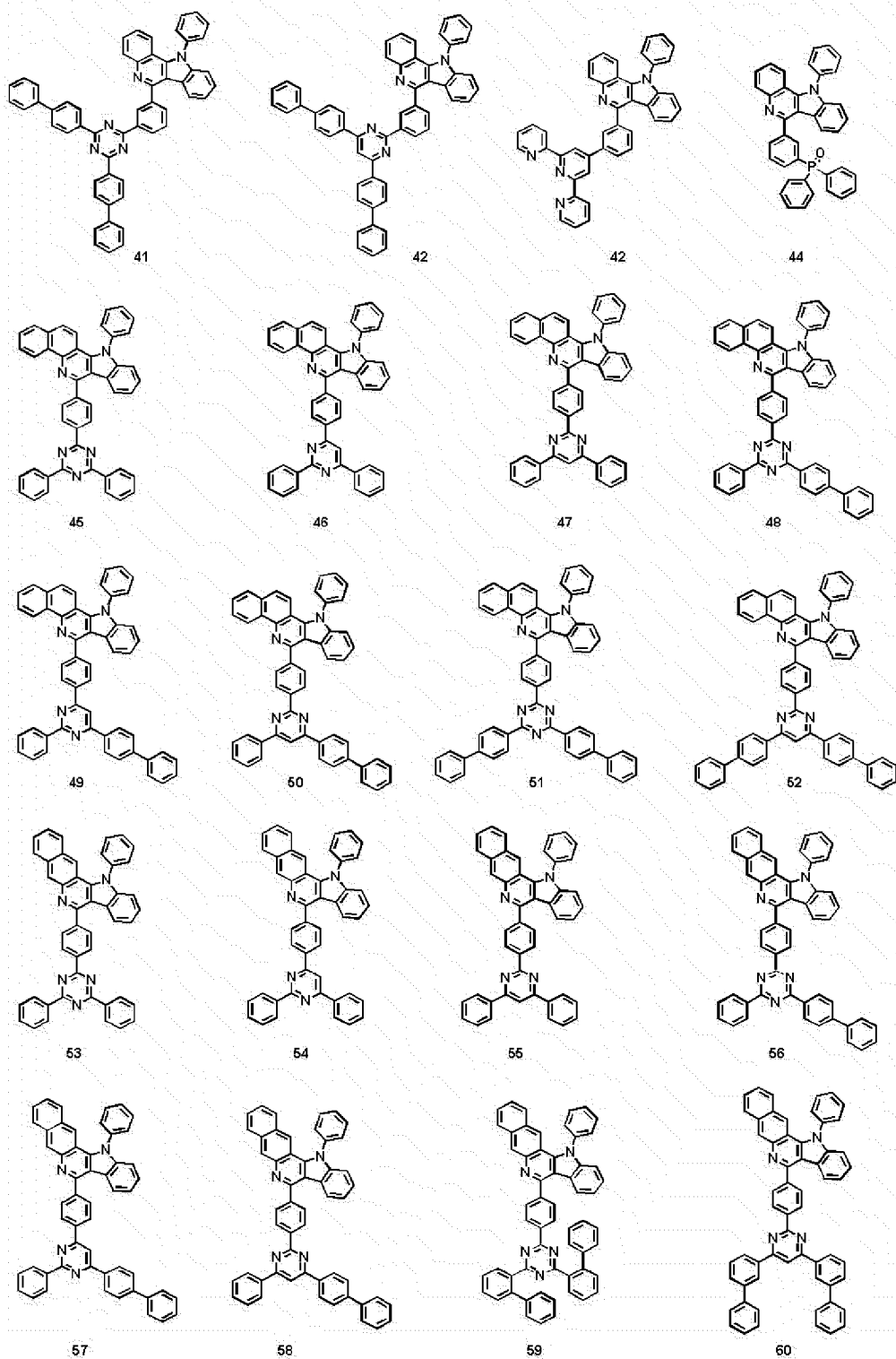
[119]



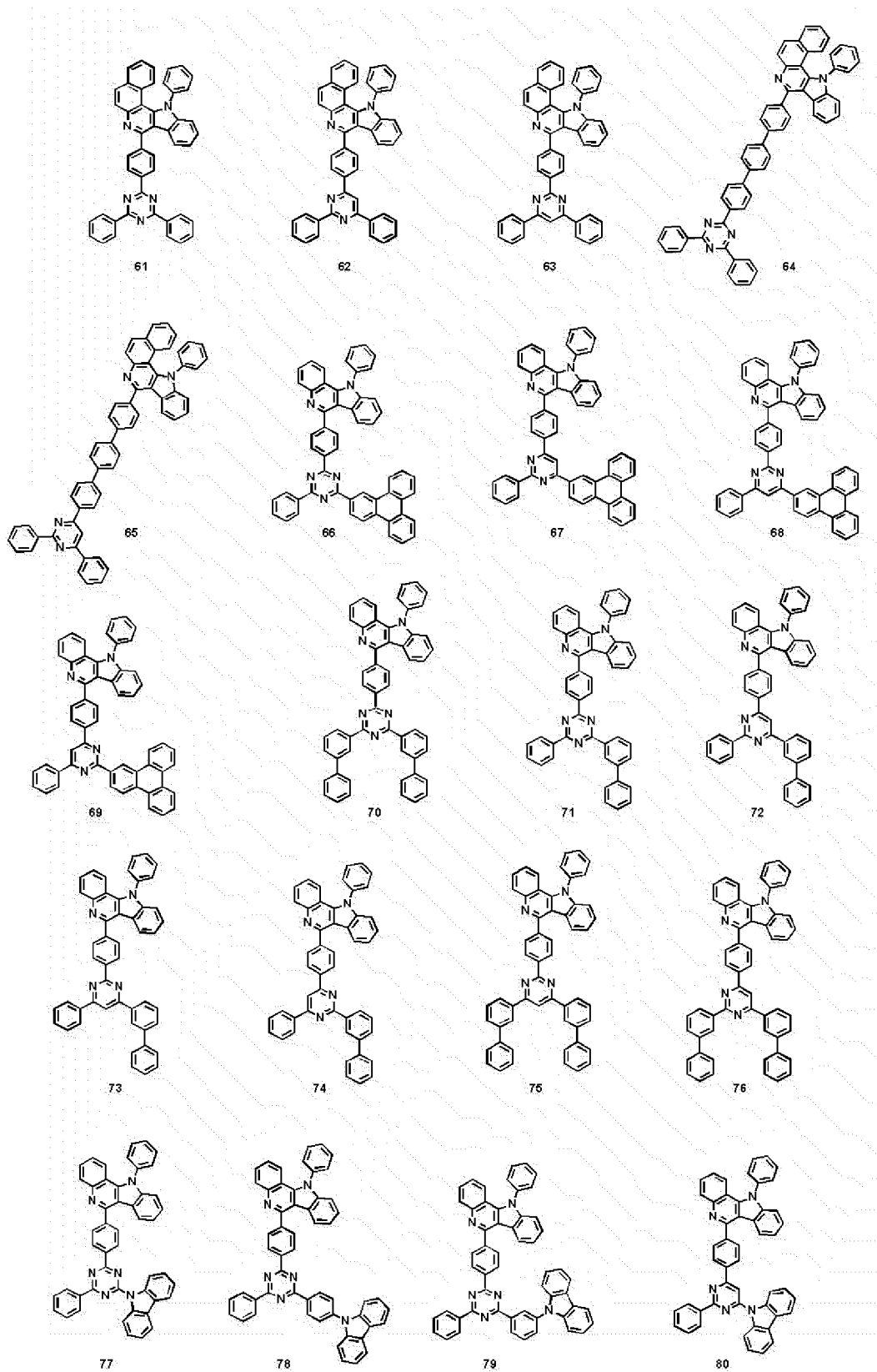
[120]



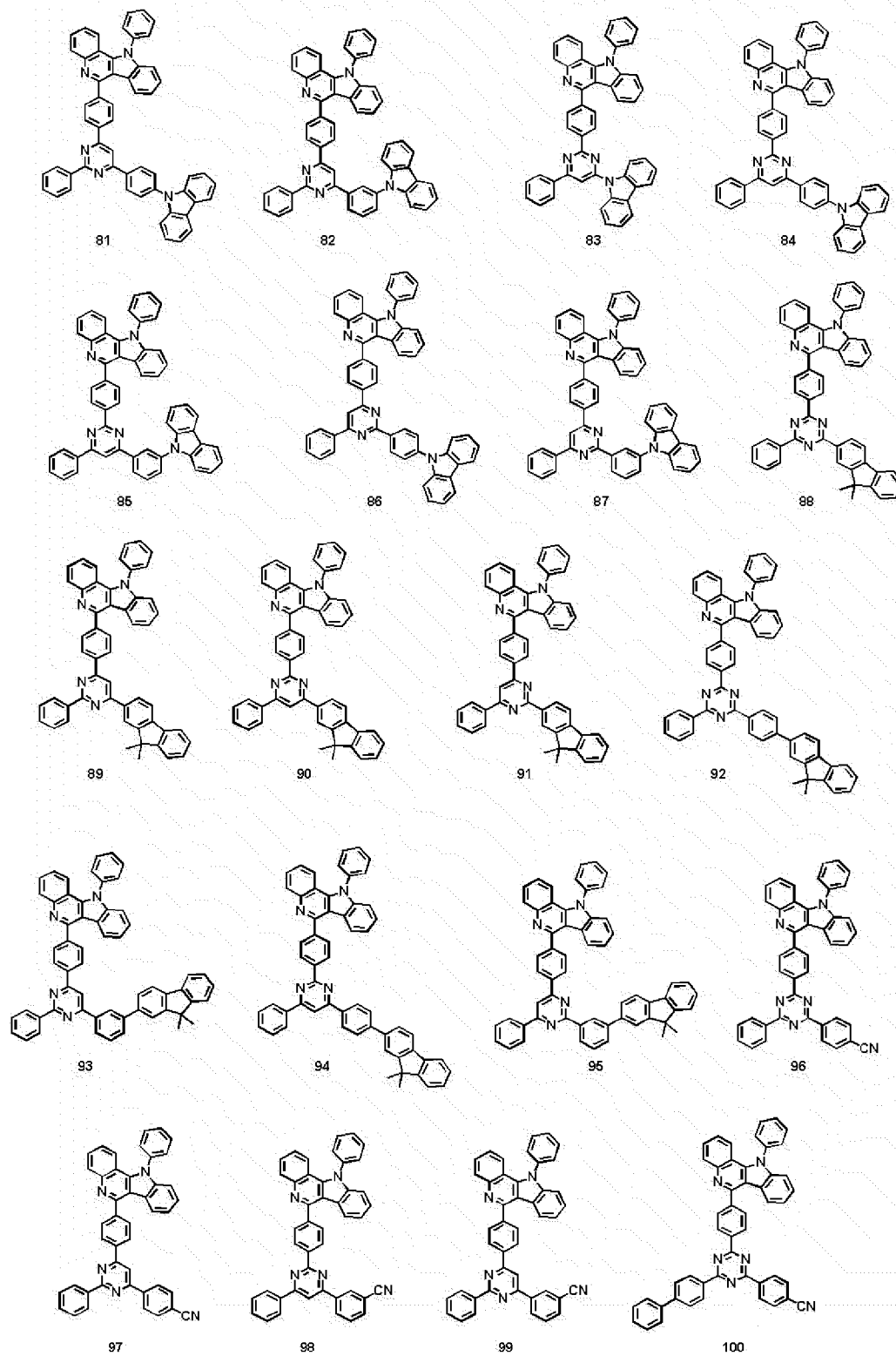
[121]



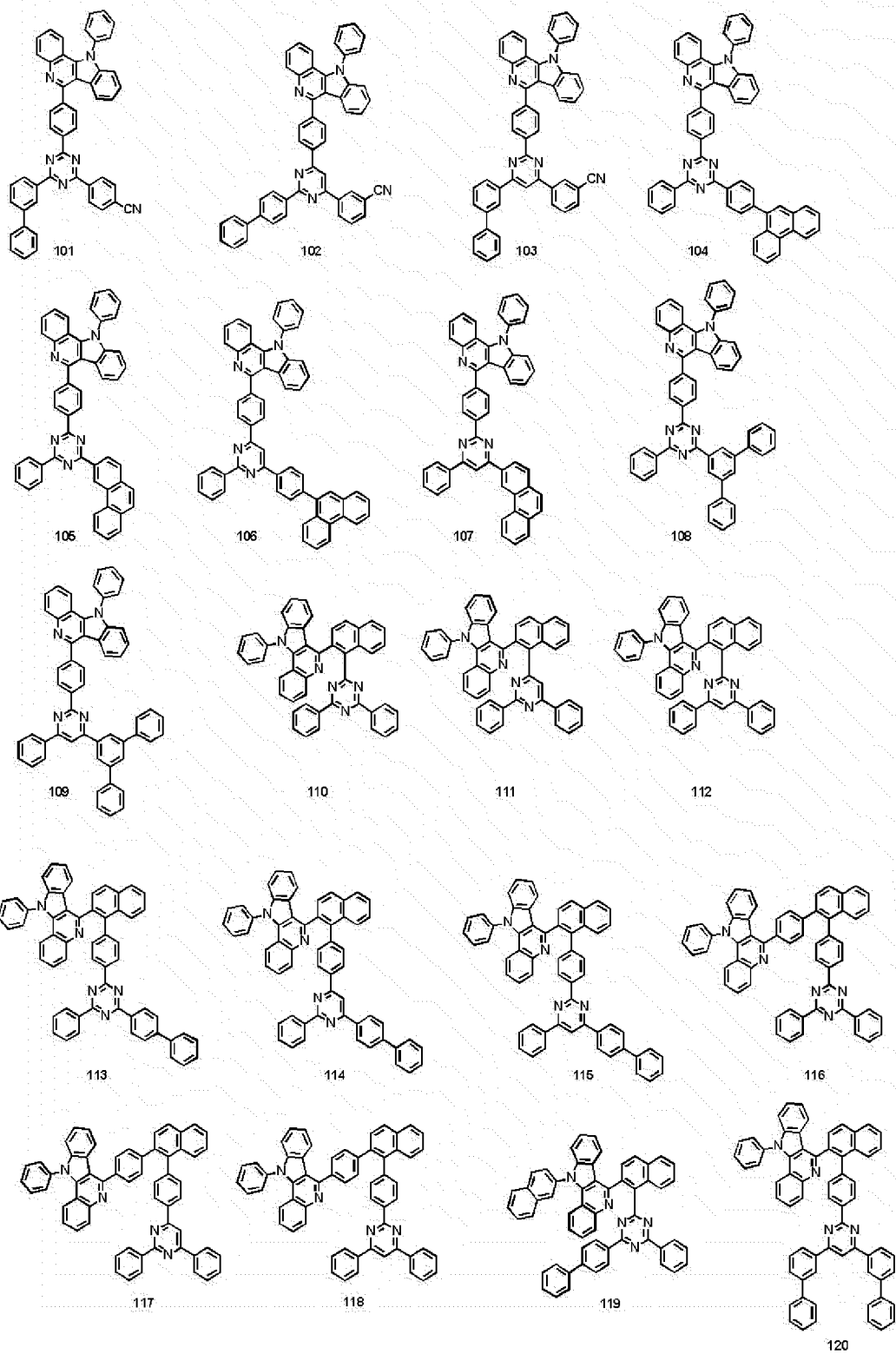
[122]



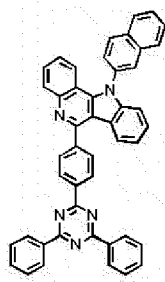
[123]



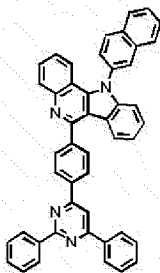
[124]



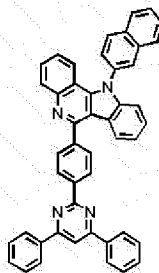
[125]



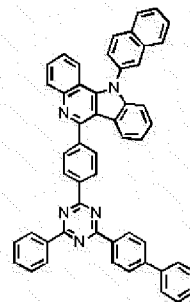
121



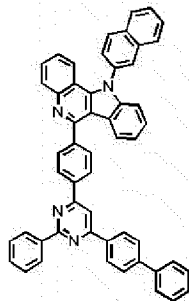
122



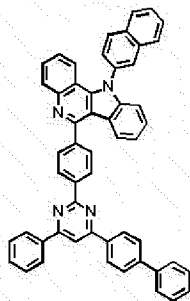
123



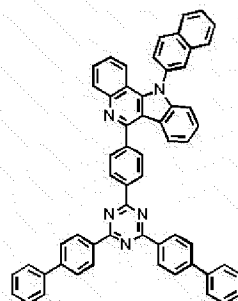
124



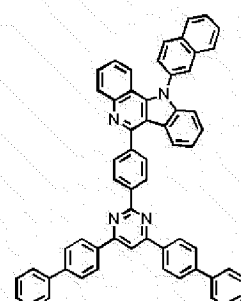
125



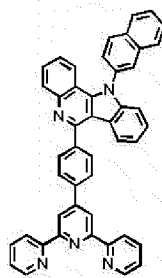
126



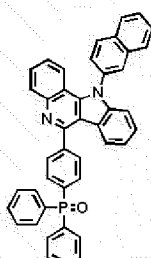
127



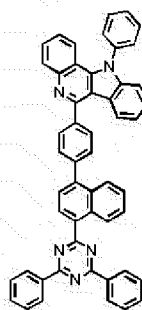
128



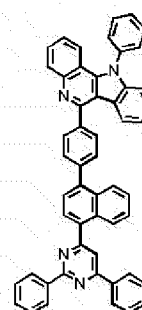
129



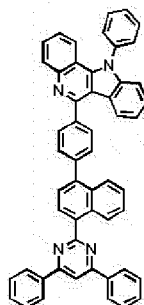
130



131

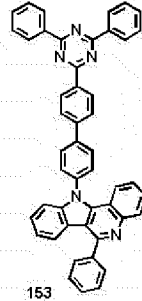
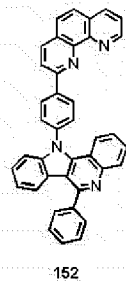
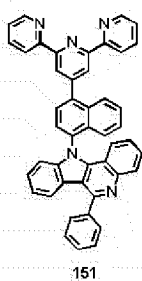
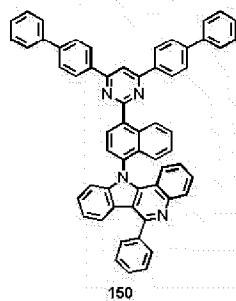
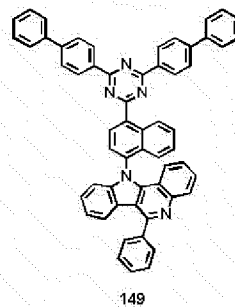
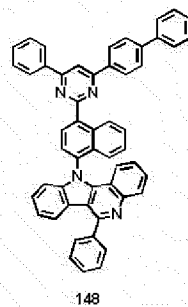
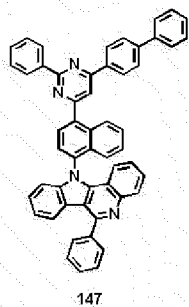
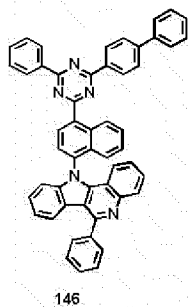
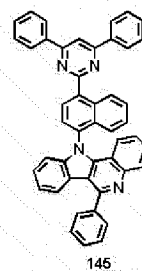
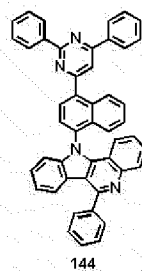
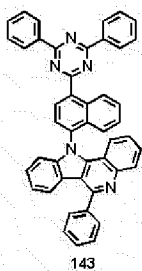
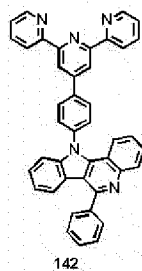
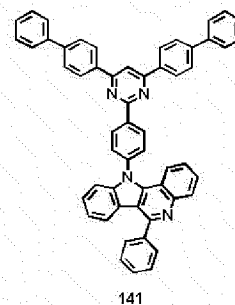
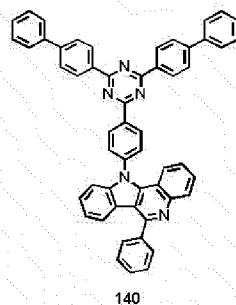
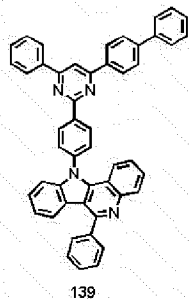
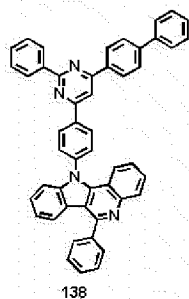
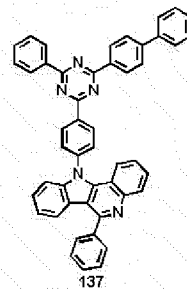
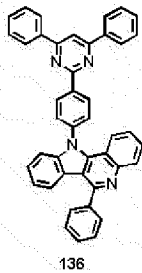
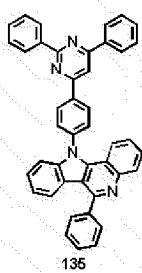
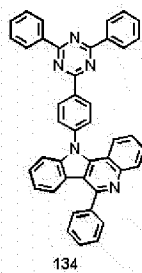


132

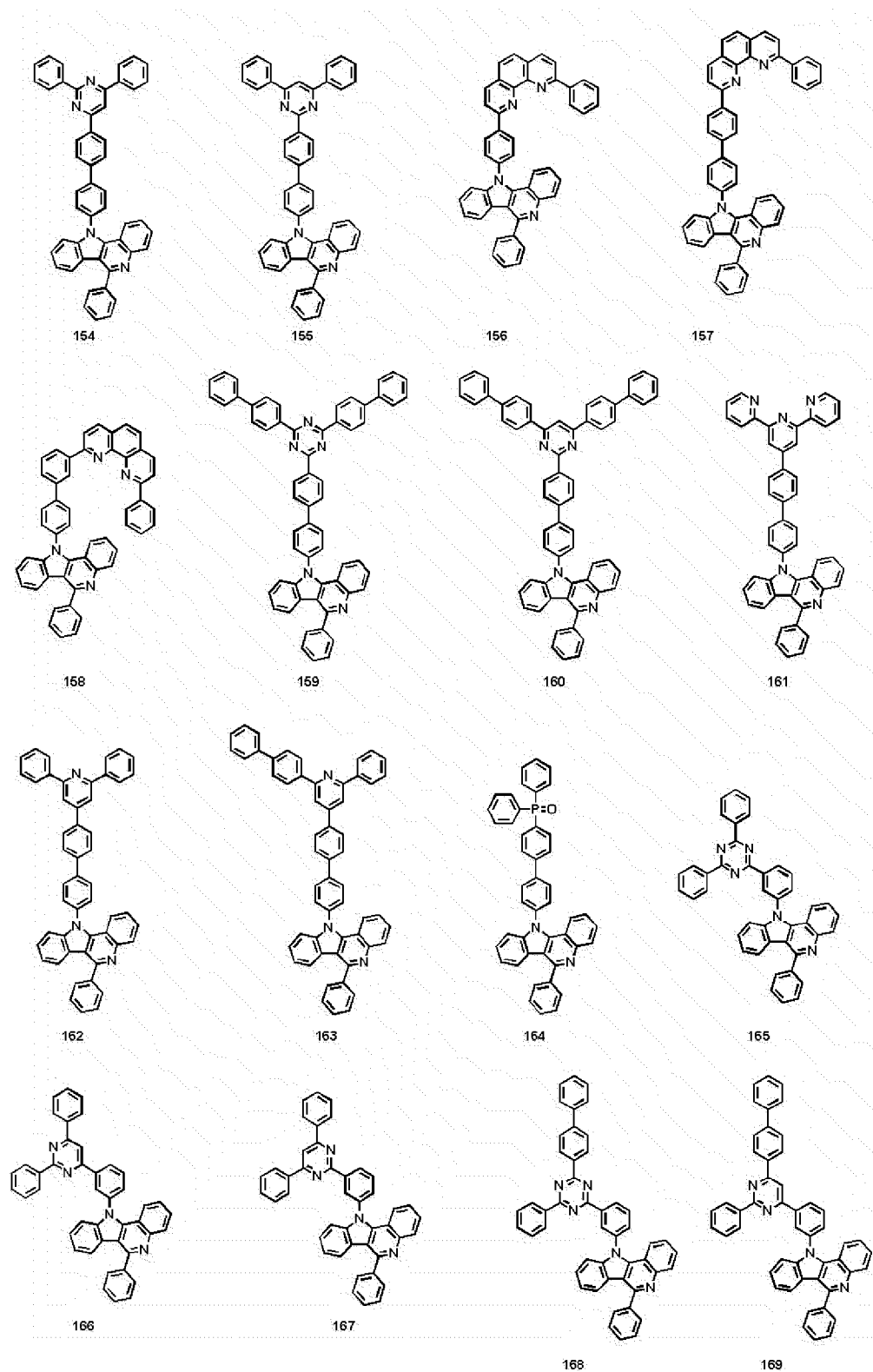


133

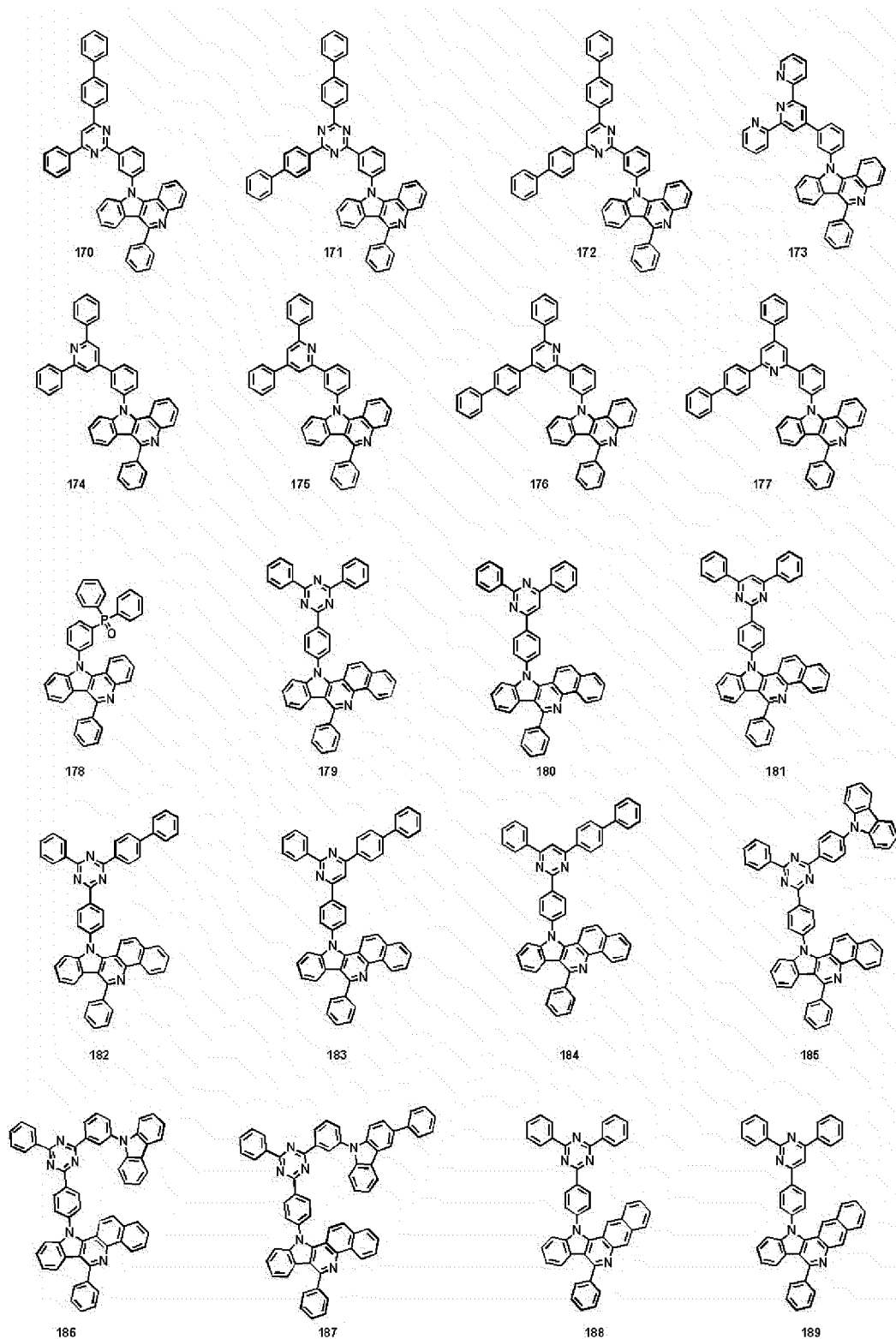
[126]



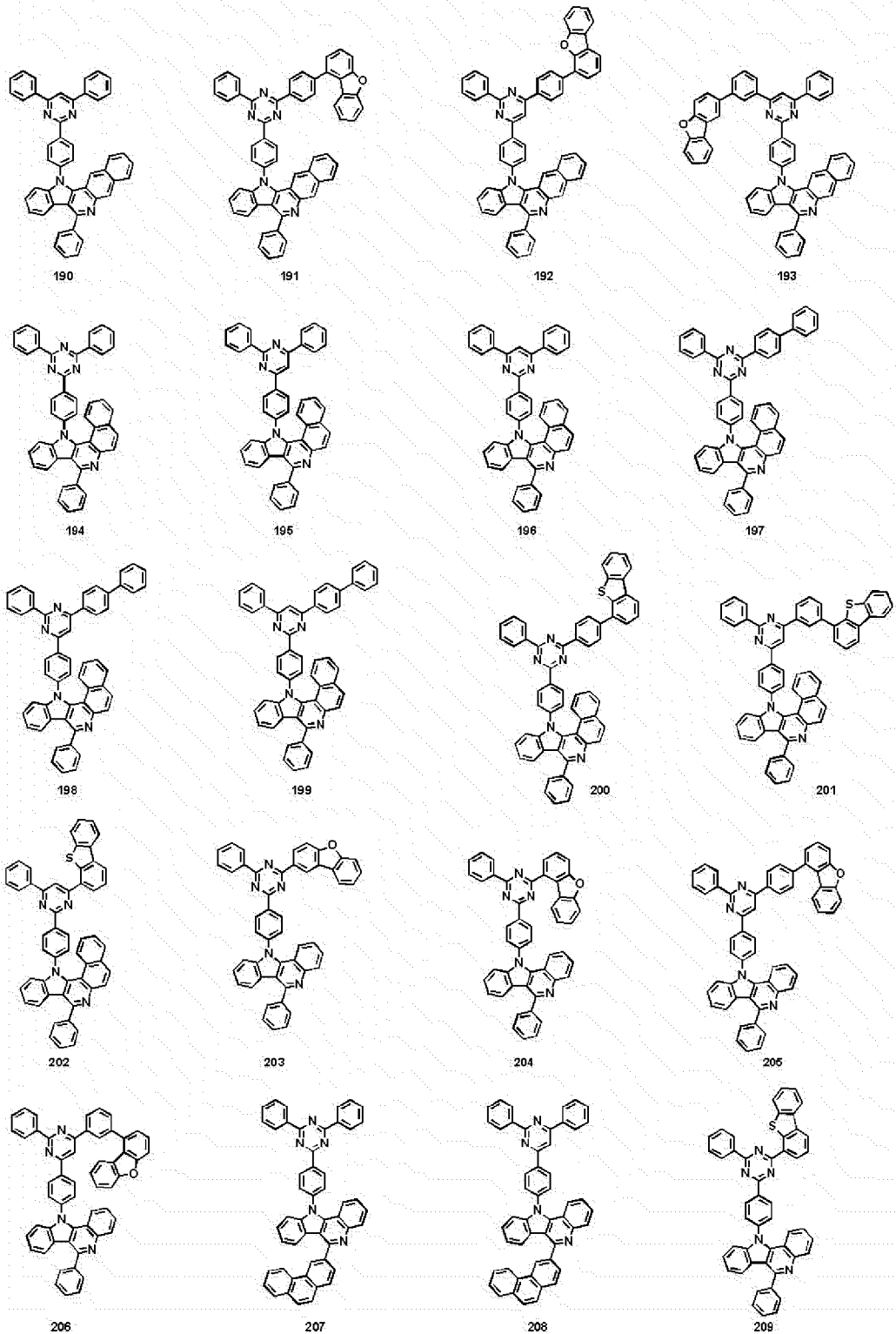
[127]



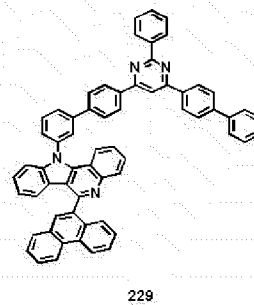
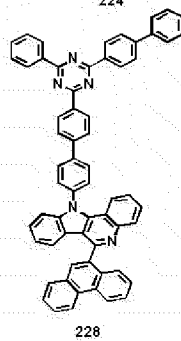
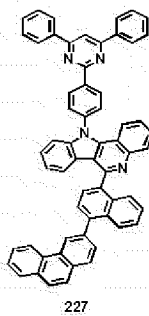
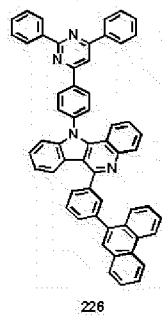
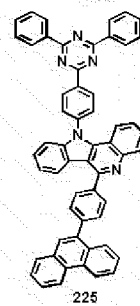
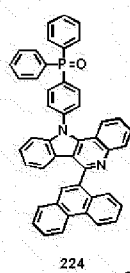
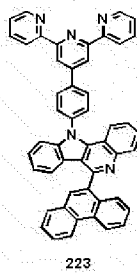
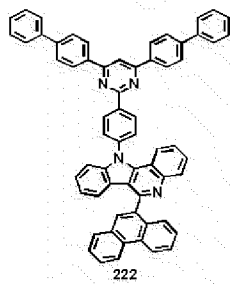
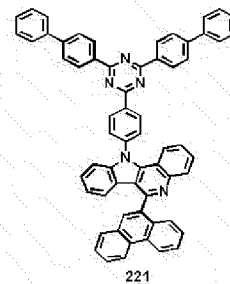
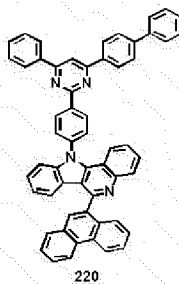
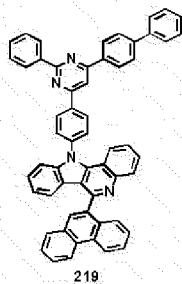
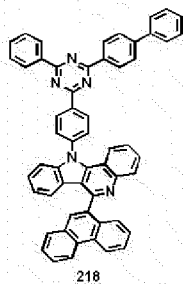
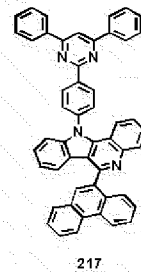
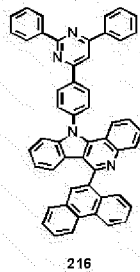
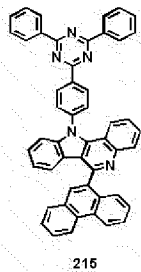
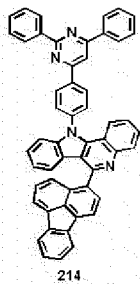
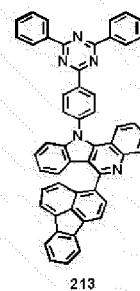
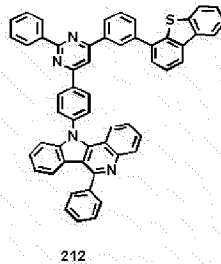
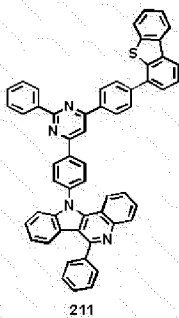
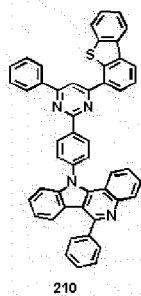
[128]



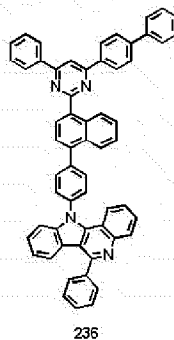
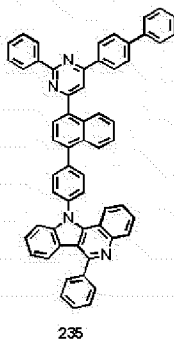
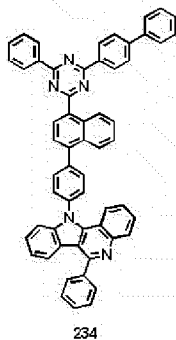
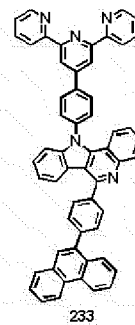
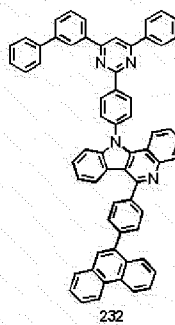
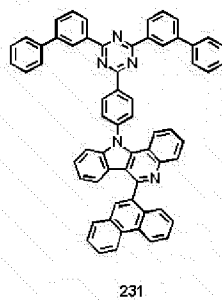
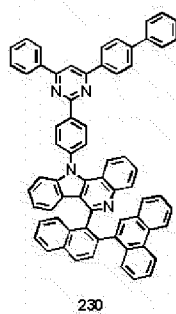
[129]



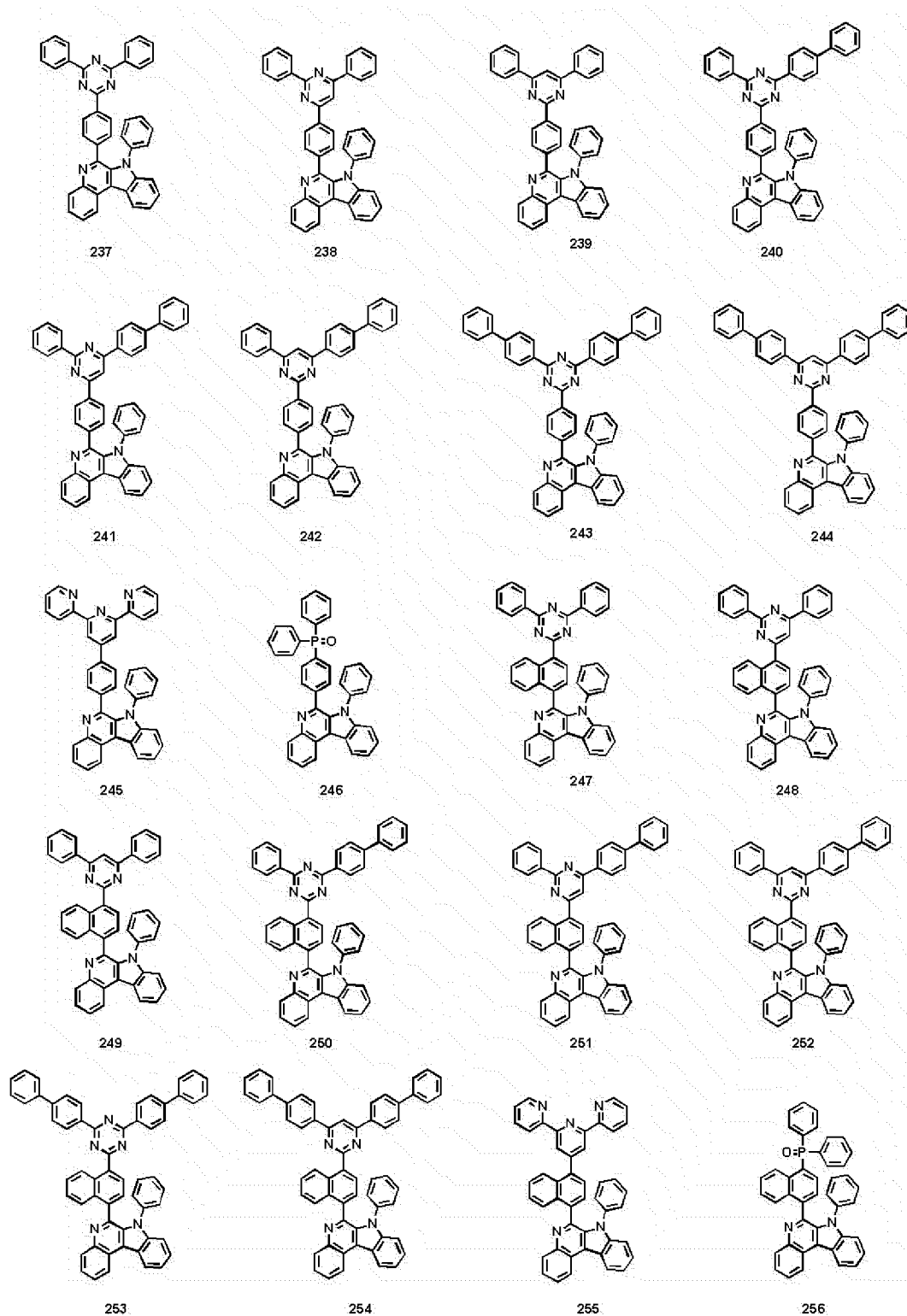
[130]



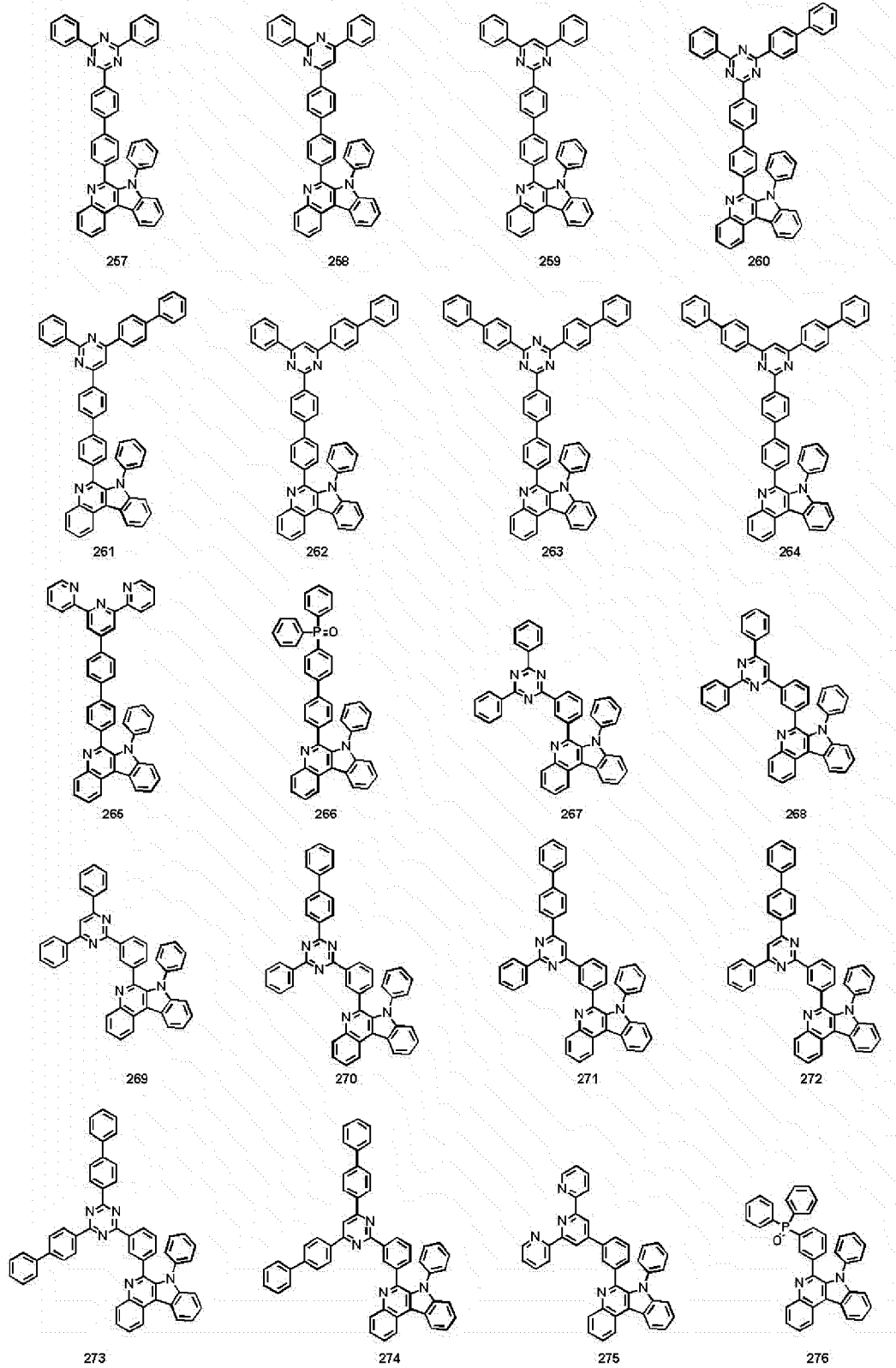
[131]



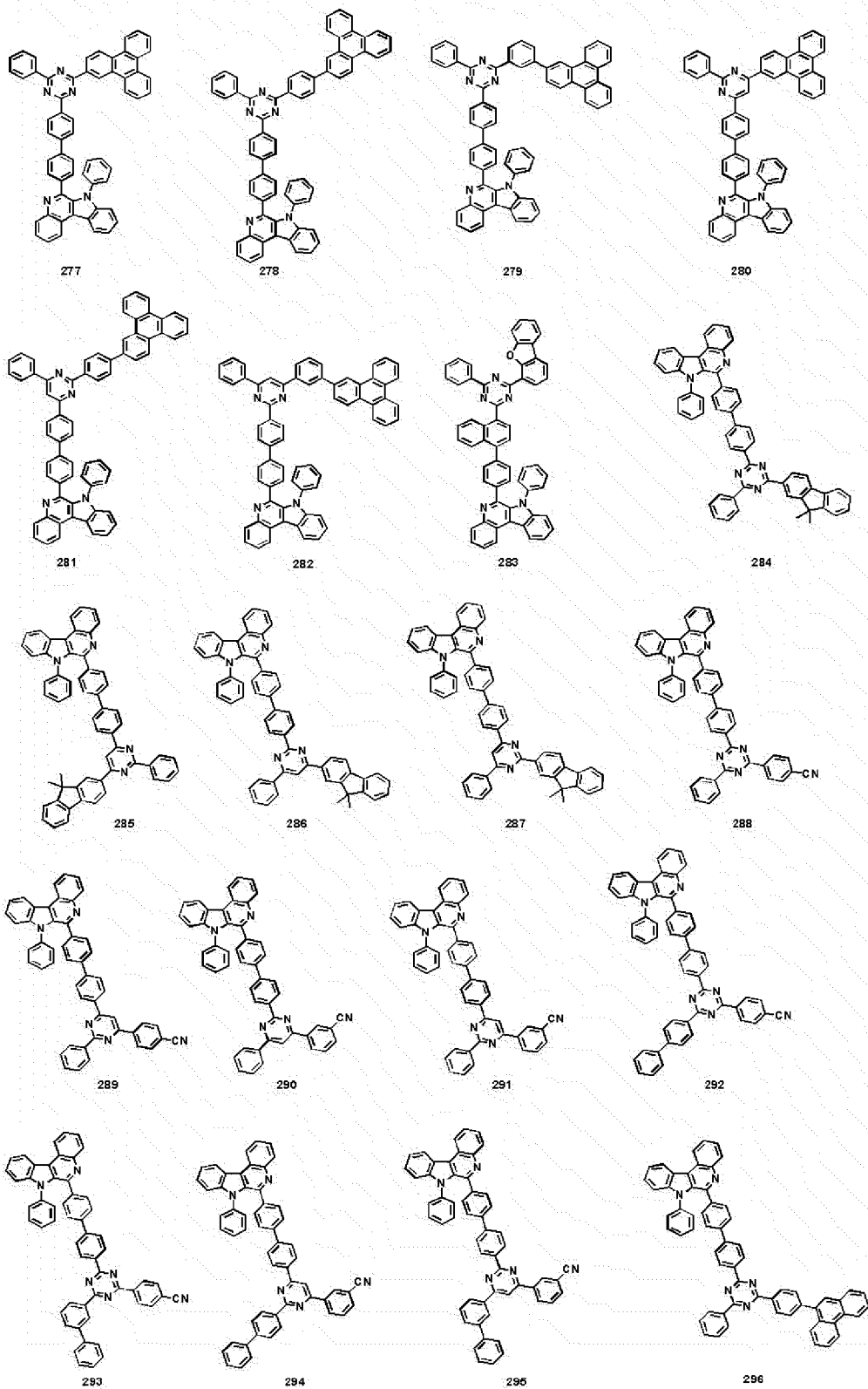
[132]



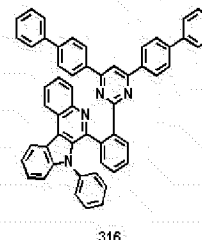
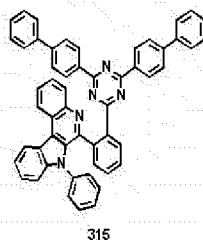
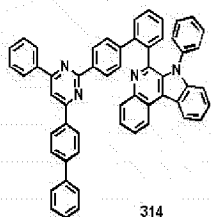
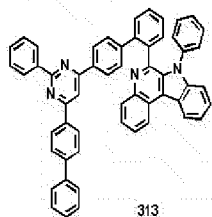
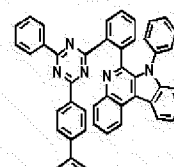
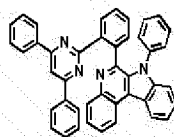
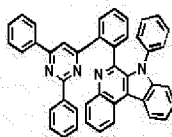
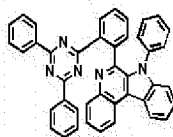
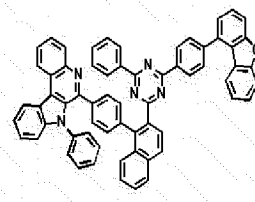
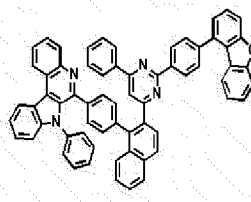
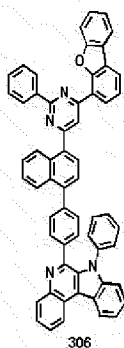
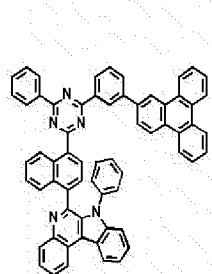
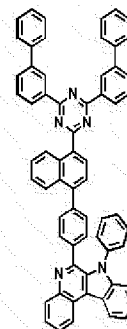
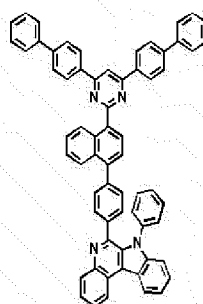
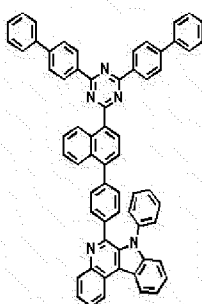
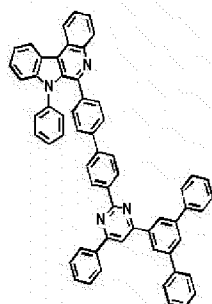
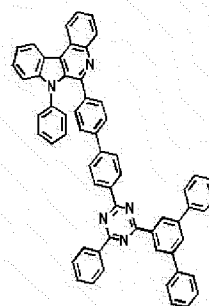
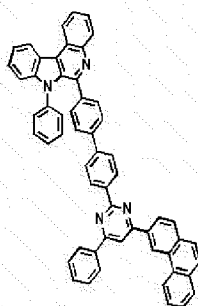
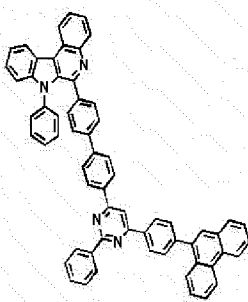
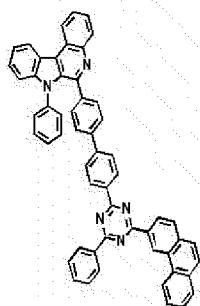
[133]



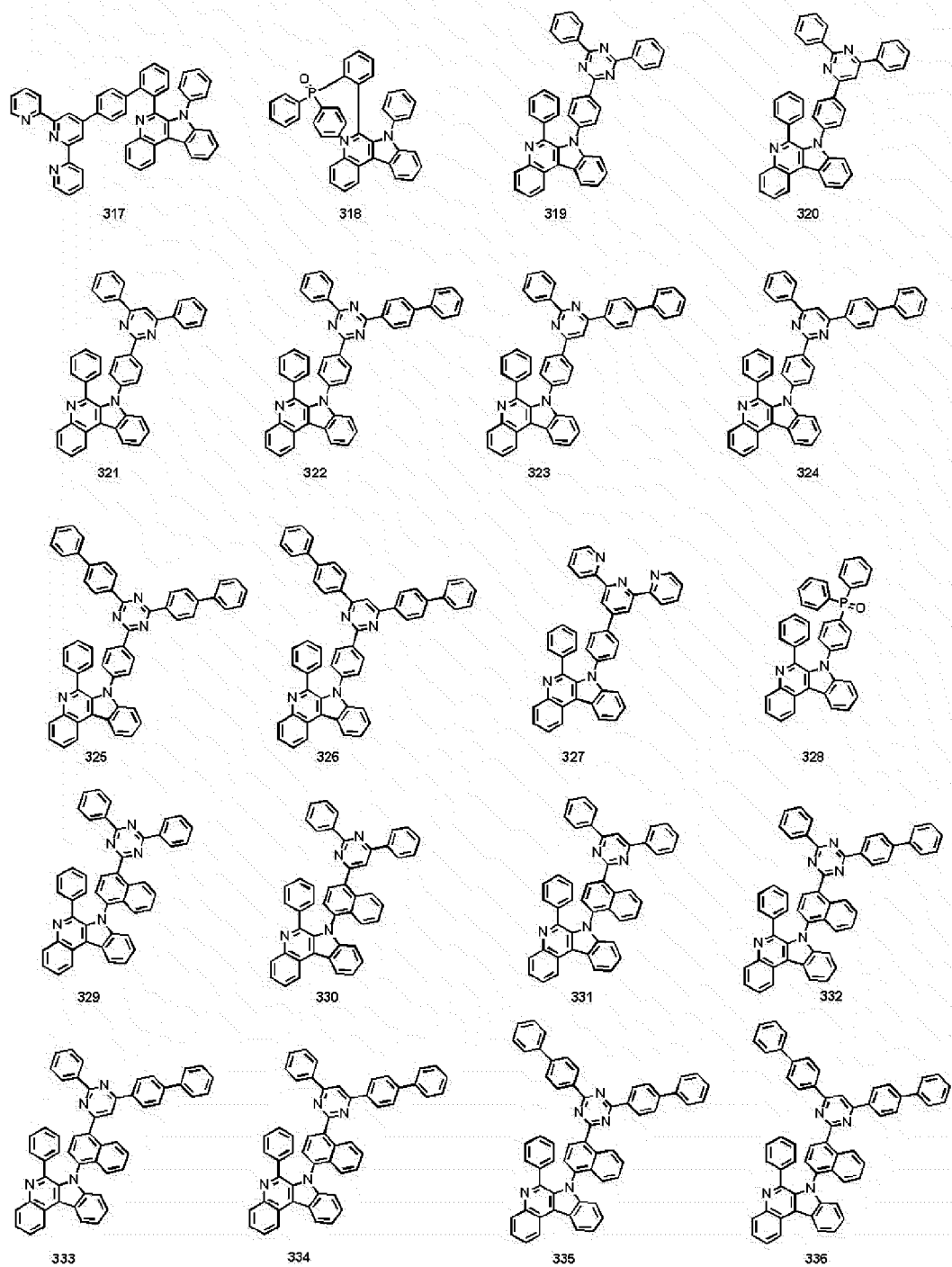
[134]



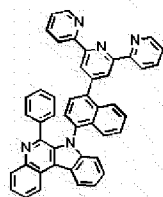
[135]



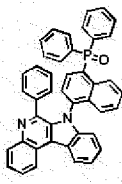
[136]



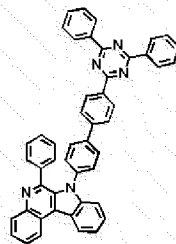
[137]



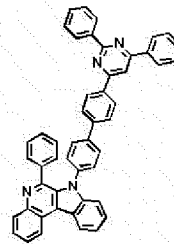
337



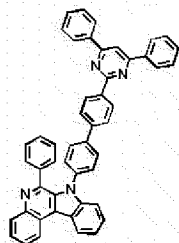
338



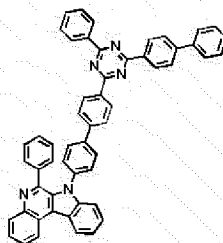
339



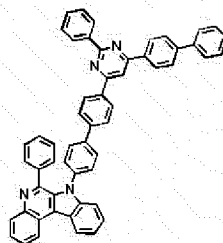
340



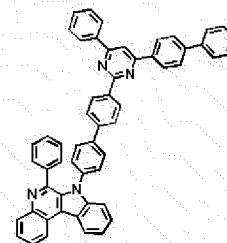
341



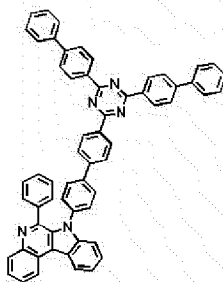
342



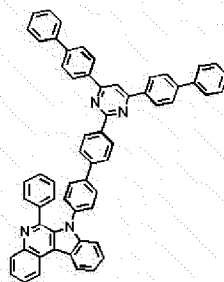
343



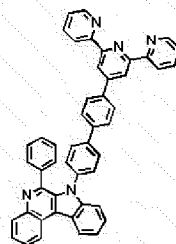
344



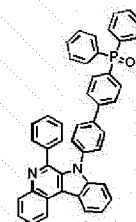
345



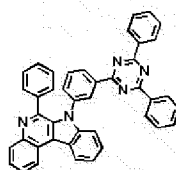
346



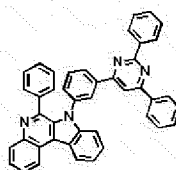
347



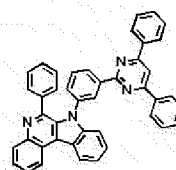
348



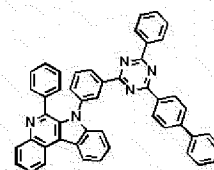
349



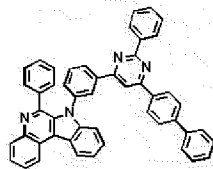
350



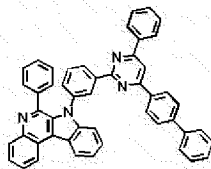
351



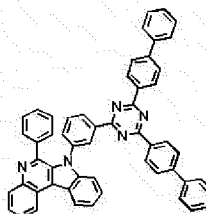
352



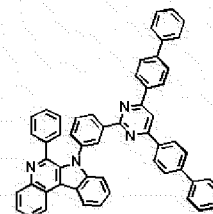
353



354

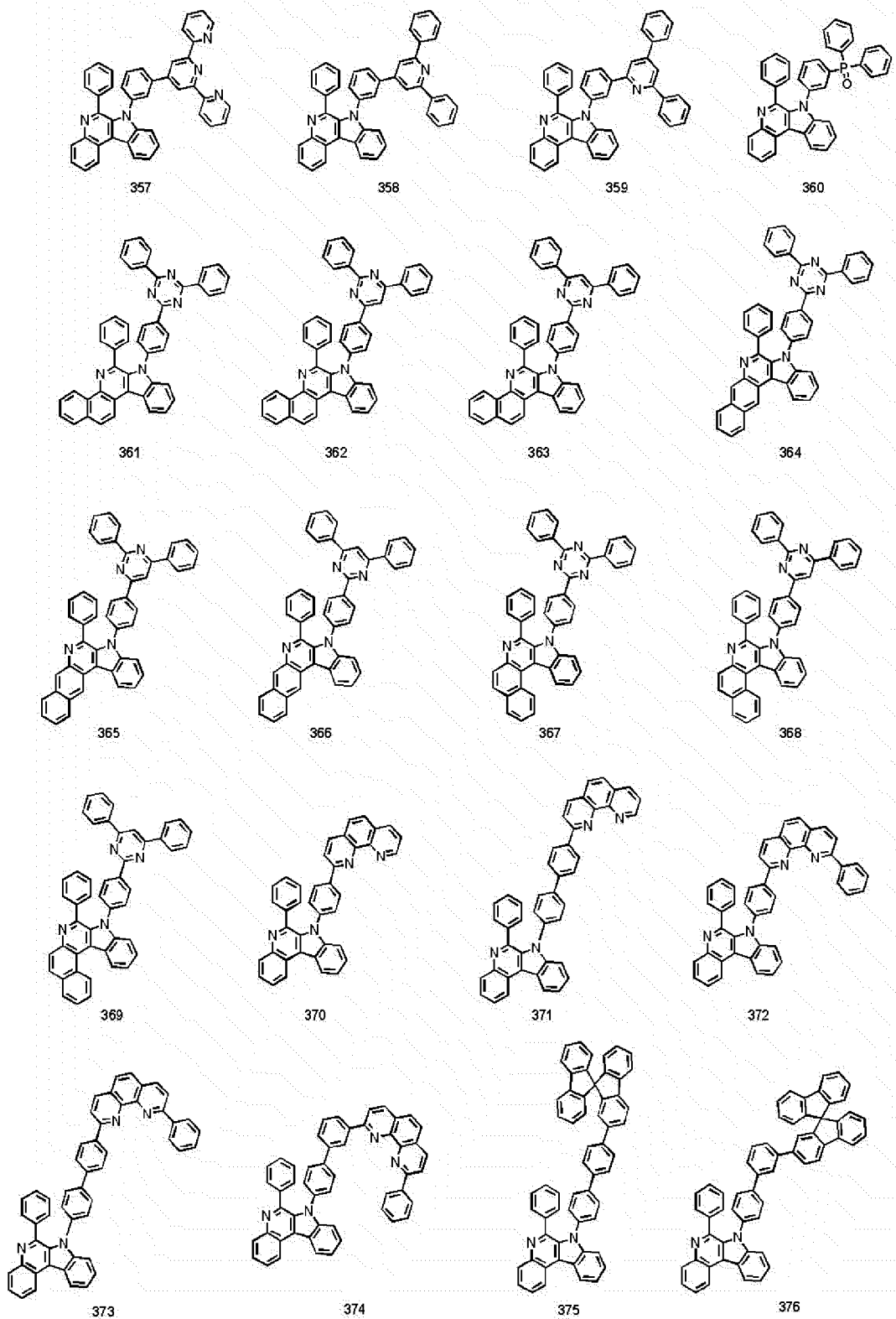


355

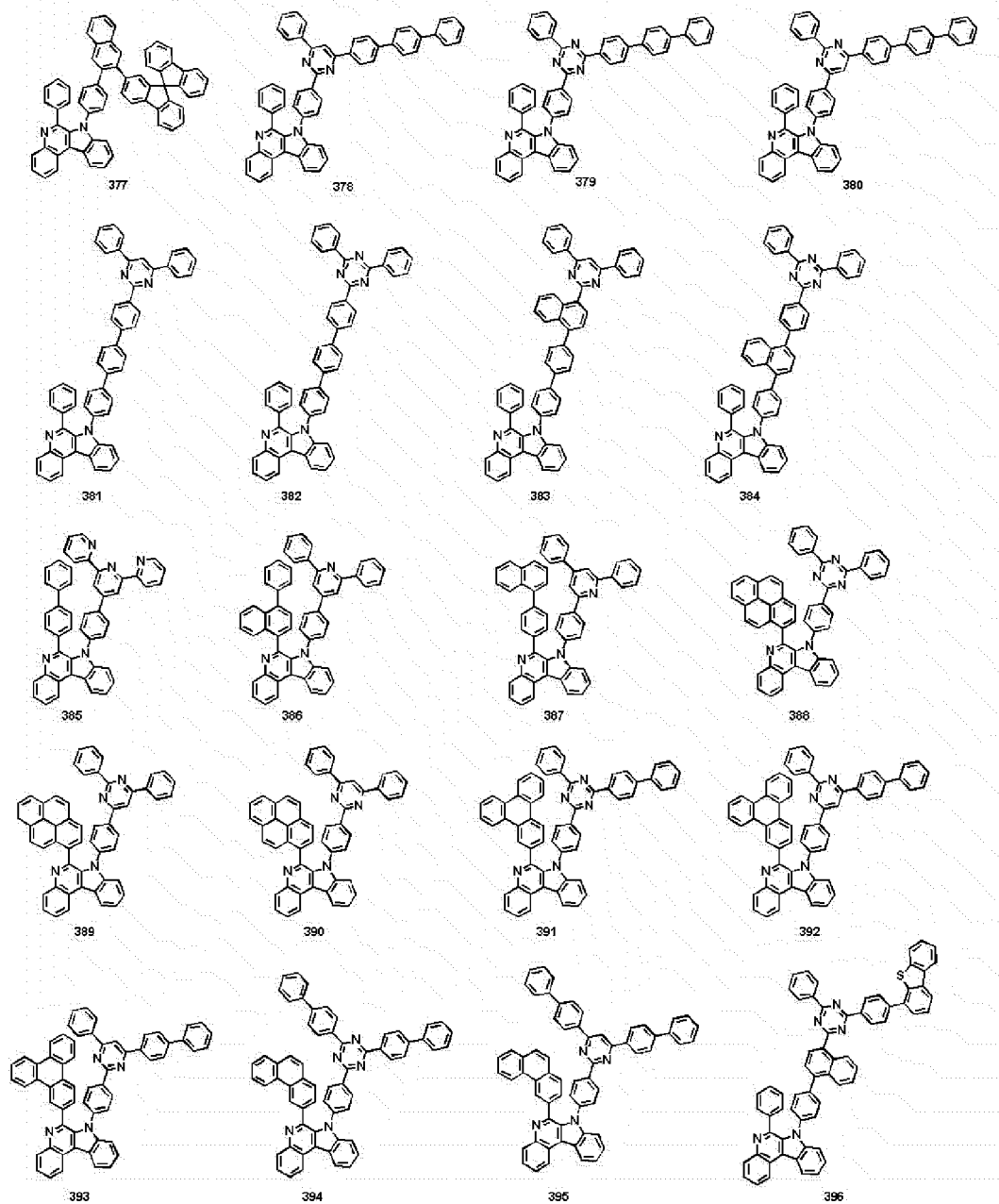


356

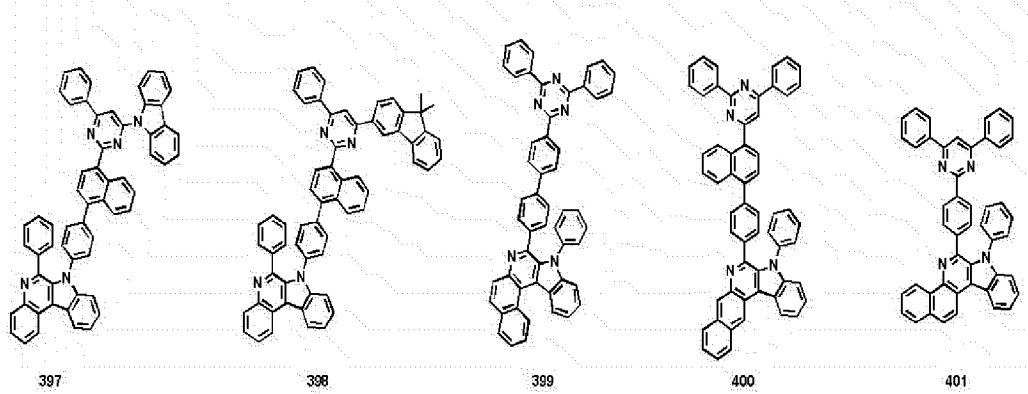
[138]



[139]

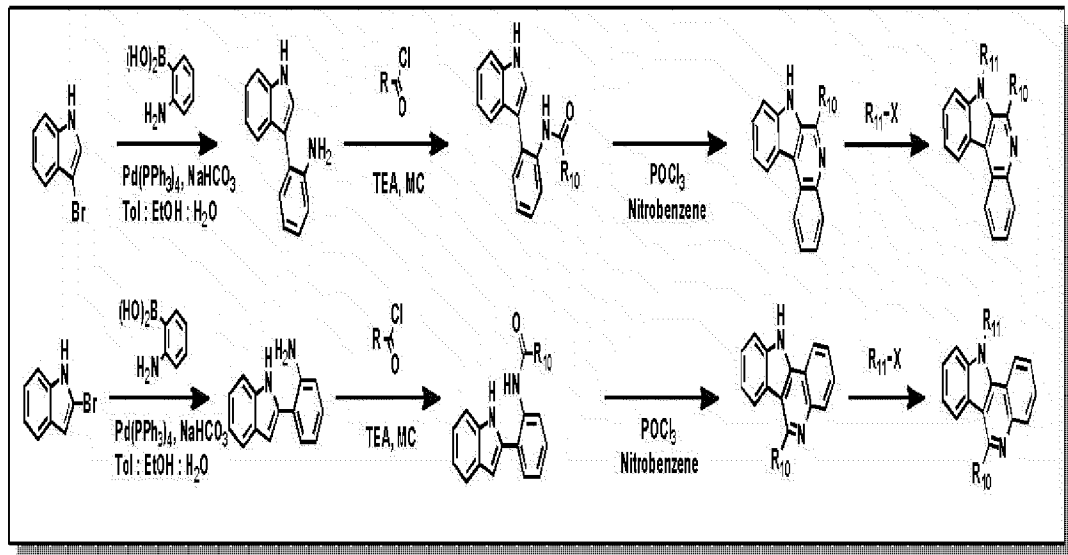


[140]



[141] 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 하기 일반식 1에 따라 제조될 수 있다.

[142]

[143] 상기 일반식 1에서, R_{10} 또는 R_{11} 은 상기 화학식 1의 Ar_1 또는 Ar_2 의 정의와 동일하다.

[144] 또한, 상기 화학식 1 내지 9의 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송용 물질, 발광층 물질, 전자 수송층 물질 및 전하 생성층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.

[145] 또한, 상기 화학식 1 내지 9의 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 에너지 밴드갭을 미세하게 조절이 가능하게 하며, 한편으로 유기물 사이에서의 계면에서의 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.

[146] 한편, 상기 화합물은 유리 전이 온도(T_g)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.

- [147] 본 출원의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물은 다단계 화학반응으로 제조할 수 있다. 일부 중간체 화합물이 먼저 제조되고, 그 중간체 화합물들로부터 화학식 1의 화합물이 제조될 수 있다. 보다 구체적으로, 본 출원의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물은 후술하는 제조예를 기초로 제조될 수 있다.
- [148] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1에 따른 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.
- [149] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극일 수 있고, 상기 제2 전극은 음극일 수 있다.
- [150] 또 다른 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 음극일 수 있고, 상기 제2 전극은 양극일 수 있다.
- [151] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 청색 유기 발광 소자일 수 있으며, 상기 화학식 1에 따른 헤테로고리 화합물은 상기 청색 유기 발광 소자의 재료로 사용될 수 있다.
- [152] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 녹색 유기 발광 소자일 수 있으며, 상기 화학식 1에 따른 헤테로고리 화합물은 상기 녹색 유기 발광 소자의 재료로 사용될 수 있다.
- [153] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 적색 유기 발광 소자일 수 있으며, 상기 화학식 1에 따른 헤테로고리 화합물은 상기 적색 유기 발광 소자의 재료로 사용될 수 있다.
- [154] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물에 대한 구체적인 내용은 전술한 바와 동일하다.
- [155] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 헤테로고리 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [156] 상기 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [157] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [158] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자주입층 또는

- 전자수송층을 포함하고, 상기 전자주입층 또는 전자수송층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [159] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [160] 또 다른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자저지층 또는 정공저지층을 포함하고, 상기 전자저지층 또는 정공저지층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [161] 또 다른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공저지층을 포함하고, 상기 정공저지층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [162] 또 다른 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층, 발광층 또는 정공저지층을 포함하고, 상기 전자수송층, 발광층 또는 정공저지층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [163] 본 발명의 유기 발광 소자는 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자주입층, 전자수송층, 전자차단층 및 정공차단층으로 이루어진 균에서 선택되는 1층 또는 2층 이상을 더 포함할 수 있다.
- [164] 도 1 내지 3에 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 전극과 유기물층의 적층 순서를 예시하였다. 그러나, 이들 도면에 의하여 본 출원의 범위가 한정될 것을 의도한 것은 아니며, 당 기술분야에 알려져 있는 유기 발광 소자의 구조가 본 출원에도 적용될 수 있다.
- [165] 도 1에 따르면, 기판(100) 상에 양극(200), 유기물층(300) 및 음극(400)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자가 도시된다. 그러나, 이와 같은 구조에만 한정되는 것은 아니고, 도 2와 같이, 기판 상에 음극, 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자가 구현될 수도 있다.
- [166] 도 3은 유기물층이 다층인 경우를 예시한 것이다. 도 3에 따른 유기 발광 소자는 정공 주입층(301), 정공 수송층(302), 발광층(303), 정공 저지층(304), 전자 수송층(305) 및 전자 주입층(306)을 포함한다. 그러나, 이와 같은 적층 구조에 의하여 본 출원의 범위가 한정되는 것은 아니며, 필요에 따라 발광층을 제외하거나 층은 생략될 수도 있고, 필요한 다른 기능층이 더 추가될 수 있다.
- [167] 상기 화학식 1 내지 9을 포함하는 유기물층은, 필요에 따라 다른 물질을 추가로 포함할 수 있다.
- [168] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는, 양극, 음극 및 양극과 음극 사이에 구비된 2 이상의 스택을 포함하고, 상기 2 이상의 스택은 각각 독립적으로 발광층을 포함하며, 상기 2 이상의 스택 간의 사이에는 전하 생성층을 포함하고, 상기 전하 생성층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한다.
- [169] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는, 양극, 상기 양극 상에 구비되고 제1 발광층을 포함하는 제1 스택, 상기 제1 스택 상에 구비되는 전하 생성층, 상기 전하 생성층 상에 구비되고 제2 발광층을 포함하는 제2 스택, 및

상기 제2 스택 상에 구비되는 음극을 포함한다. 이 때, 상기 전하 생성층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 제1 스택 및 제2 스택은 각각 독립적으로 전술한 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 1종 이상 추가로 포함할 수 있다.

- [170] 상기 전하 생성층은 N-타입 전하 생성층일 수 있고, 상기 전하 생성층은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 이외에 당 기술분야에 알려진 도펀트를 추가로 포함할 수 있다.
- [171] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자로서, 2-스택 텐덤 구조의 유기 발광 소자를 하기 도 4에 개략적으로 나타내었다.
- [172] 이 때, 상기 도 4에 기재된 제 1 전자저지층, 제 1 정공저지층 및 제 2 정공저지층 등은 경우에 따라 생략될 수 있다.
- [173] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 상기 화학식 1 내지 9의 화합물 이외의 재료를 하기에 예시하지만, 이들은 예시를 위한 것일 뿐 본 출원의 범위를 한정하기 위한 것은 아니며, 당 기술분야에 공지된 재료들로 대체될 수 있다.
- [174] 양극 재료로는 비교적 일함수가 큰 재료들을 이용할 수 있으며, 투명 전도성 산화물, 금속 또는 전도성 고분자 등을 사용할 수 있다. 상기 양극 재료의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO : Al 또는 SnO₂ : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [175] 음극 재료로는 비교적 일함수가 낮은 재료들을 이용할 수 있으며, 금속, 금속 산화물 또는 전도성 고분자 등을 사용할 수 있다. 상기 음극 재료의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [176] 정공 주입 재료로는 공지된 정공 주입 재료를 이용할 수도 있는데, 예를 들면, 미국 특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 문헌 [Advanced Material, 6, p.677 (1994)]에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류, 예컨대 트리스(4-카바조일-9-일페닐)아민(TCTA), 4,4',4"-트리[페닐(m-톨릴)아미노]트리페닐아민(m-MTDATA), 1,3,5-트리스[4-(3-메틸페닐페닐아미노)페닐]벤젠(m-MTDAPB), 용해성이 있는 전도성 고분자인 폴리아닐린/도데실벤젠술포산(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid) 또는 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)(Poly(3,4-ethylenedioxy thiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), 폴리아닐린/캄퍼술포산(Polyaniline/Camphor sulfonic acid) 또는

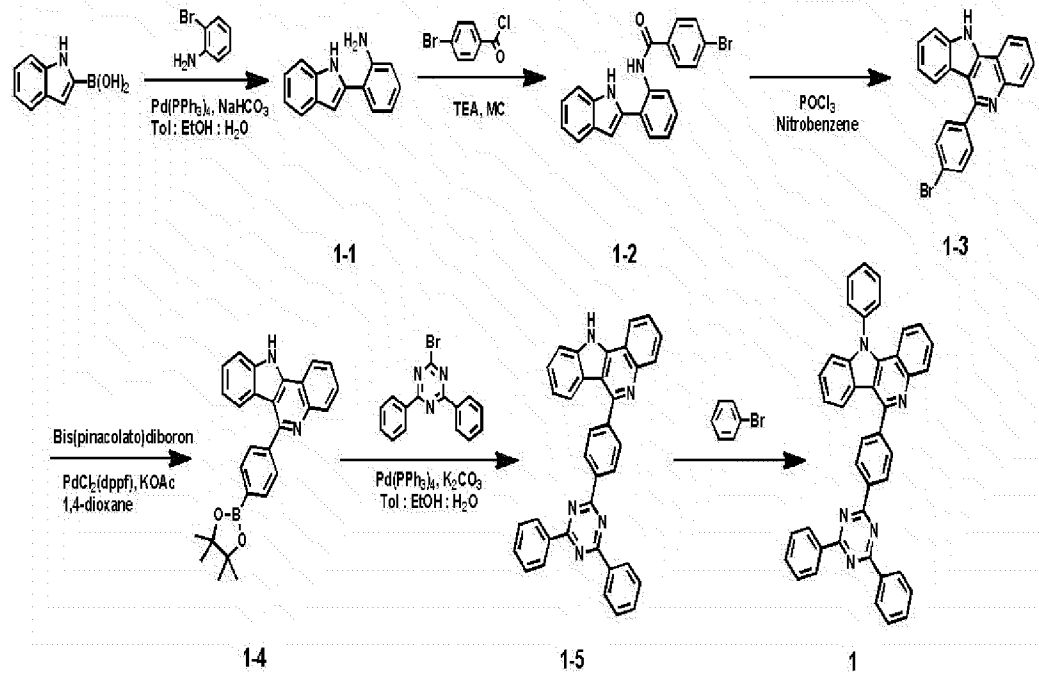
폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)(Polyaniline/Poly(4-styrene-sulfonate))등을 사용할 수 있다.

- [177] 정공 수송 재료로는 피라졸린 유도체, 아릴아민계 유도체, 스틸벤 유도체, 트리페닐디아민 유도체 등이 사용될 수 있으며, 저분자 또는 고분자 재료가 사용될 수도 있다.
- [178] 전자 수송 재료로는 옥사디아졸 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 이의 유도체, 벤조퀴논 및 이의 유도체, 나프토퀴논 및 이의 유도체, 안트라퀴논 및 이의 유도체, 테트라시아노안트라퀴노디메탄 및 이의 유도체, 플루오레논 유도체, 디페닐디시아노에틸렌 및 이의 유도체, 디페노퀴논 유도체, 8-히드록시퀴놀린 및 이의 유도체의 금속 착체 등이 사용될 수 있으며, 저분자 물질 뿐만 아니라 고분자 물질이 사용될 수도 있다.
- [179] 전자 주입 재료로는 예를 들어, LiF가 당업계 대표적으로 사용되나, 본 출원이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [180] 발광 재료로는 적색, 녹색 또는 청색 발광재료가 사용될 수 있으며, 필요한 경우, 2 이상의 발광 재료를 혼합하여 사용할 수 있다. 이 때, 2 이상의 발광 재료를 개별적인 공급원으로 증착하여 사용하거나, 예비혼합하여 하나의 공급원으로 증착하여 사용할 수 있다. 또한, 발광 재료로서 형광 재료를 사용할 수도 있으나, 인광 재료로서 사용할 수도 있다. 발광 재료로는 단독으로서 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자를 결합하여 발광시키는 재료가 사용될 수도 있으나, 호스트 재료와 도펀트 재료가 함께 발광에 관여하는 재료들이 사용될 수도 있다.
- [181] 발광 재료의 호스트를 혼합하여 사용하는 경우에는, 동일 계열의 호스트를 혼합하여 사용할 수도 있고, 다른 계열의 호스트를 혼합하여 사용할 수도 있다. 예를 들어, n 타입 호스트 재료 또는 p 타입 호스트 재료 중 어느 두 종류 이상의 재료를 선택하여 발광층의 호스트 재료로 사용할 수 있다.
- [182] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [183] 본 출원의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기 발광 소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [184] 이하에서, 실시예를 통하여 본 명세서를 더욱 상세하게 설명하지만, 이들은 본 출원을 예시하기 위한 것일 뿐, 본 출원 범위를 한정하기 위한 것은 아니다.
- [185] <제조예>
- [186] <제조예 1> 화합물 1의 제조

[187]



[188] 1) 화합물 1-1의 제조

[189] (1H-인돌-2-일)보론산((1H-indol-2-yl)boronic acid) (100 g, 0.621 mol), 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) (96 g, 0.558 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 1000 mL : 200 mL : 200 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (35.8 g, 0.031 mol) 와 NaHCO₃ (156.5 g, 1.863 mol)를 넣고 3 시간 동안 100°C 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 1-1 (94 g, 72%) 을 얻었다.

[190] 2) 화합물 1-2의 제조

[191] 화합물 1-1 (94 g, 0.451 mol), 트리에틸 아민(Triethyl amine) (42 mL, 0.451 mol)을 MC 1200 mL에 넣고 녹인다. 4-브로모벤조일 클로라이드(4-bromobenzoyl chloride) (108.9 g, 0.496 mol) 을 MC 300 mL에 녹인 후, 0°C 에서 천천히 혼합물에 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 1-2 (150 g, 85%)를 얻었다.

[192] 3) 화합물 1-3의 제조

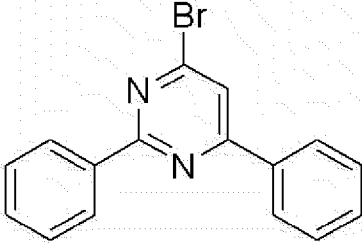
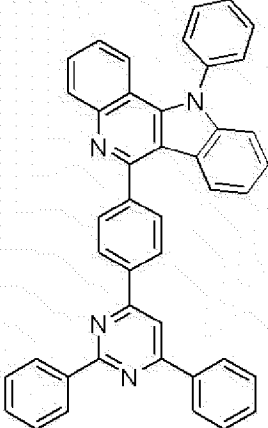
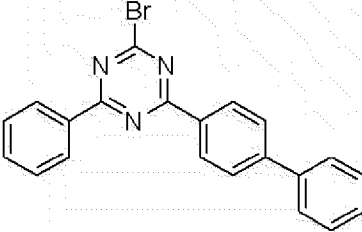
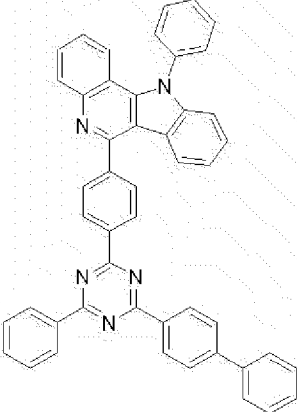
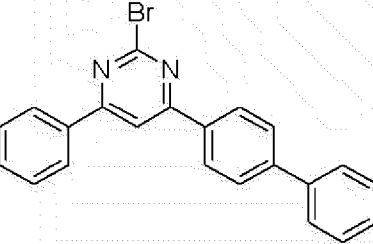
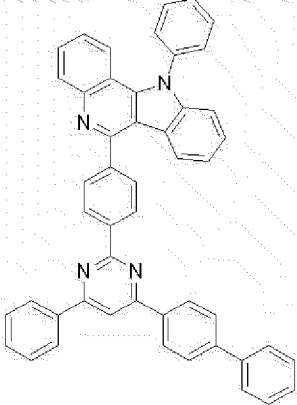
[193] 화합물 1-2 (150 g, 0.383 mol)을 니트로벤젠(Nitrobenzene 1500) mL에 녹인 후, POCl₃ (35 mL, 0.383 mol)을 천천히 적가한다. 15 시간 동안 140°C 에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 NaHCO₃를 증류수에 넣어 녹인 용액을 천천히 넣고 교반한다. 이후에 생기는 고체를 필터하여 수집한다. 수집한 고체를 MC와 MeOH에 재결정하여 고체 형태의 화합물 1-3 (68 g, 48%)를 얻었다.

[194] 4) 화합물 1-4의 제조

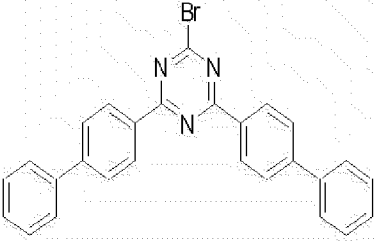
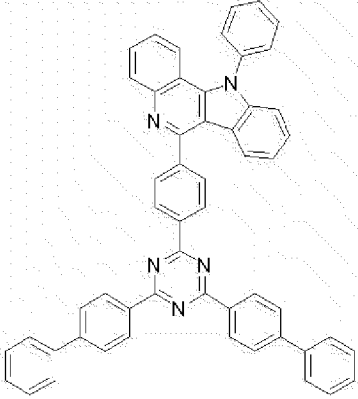
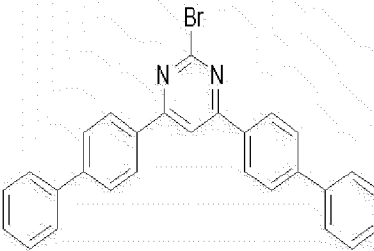
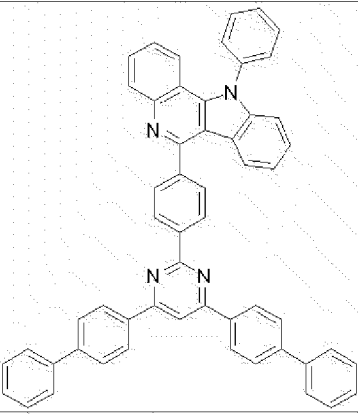
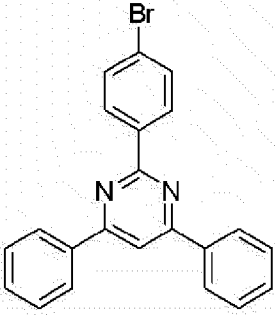
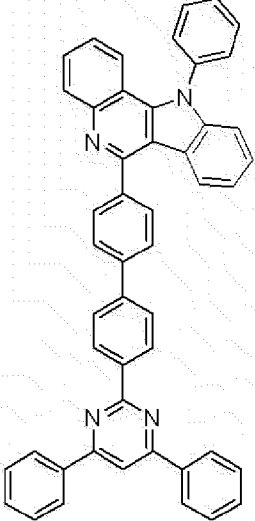
- [195] 화합물 1-3 (10 g, 0.026 mol), 비스(피나콜라토)다이보론(Bis(pinacolato)diboron) (9.9 g, 0.039 mol), KOAc (7.6 g, 0.078 mol), PdCl₂(dppf) (0.9 g, 0.0013 mol)을 1,4-다이옥세인(1,4-dioxane) 200 mL에 녹인 후 5 시간 동안 90°C 에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하여 화합물 1-4 (10 g, 91%)를 얻었다.
- [196] **5) 화합물 1-5의 제조**
- [197] 화합물 1-4 (10 g, 0.023 mol), 2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (7 g, 0.023 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 100 mL : 20 mL : 20 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (1.3 g, 0.0011 mol) 와 K₂CO₃(9.5 g, 0.069 mol)를 넣고 5 시간 동안 100°C 에서 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 화합물 1-5 (9 g, 74%)을 얻었다.
- [198] **6) 화합물 1의 제조**
- [199] 화합물 1-5 (9 g, 0.017 mol), 브로모벤젠(bromobenzene) (3.2 g, 0.021 mol)을 톨루엔(Toluene) 100 mL 에 녹인 후 Pd₂(dba)₃ (1.5 g, 0.0017 mol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine) (0.6 g, 0.034 mol), 소듐 tert-부톡사이드(Sodium tert-butoxide) (4.9 g, 0.051 mol) 을 넣고 15 시간 동안 100°C 에서 교반한다. 반응 완료 후, 상온으로 식힌 뒤에 생긴 고체를 필터하여 건조 후에 화합물 1 (7.5 g, 73%)을 얻었다.
- [200] 상기 제조예 1에서 2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 하기 표 1의 중간체 A를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 1과 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.
- [201]

[202]

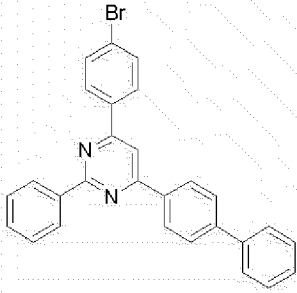
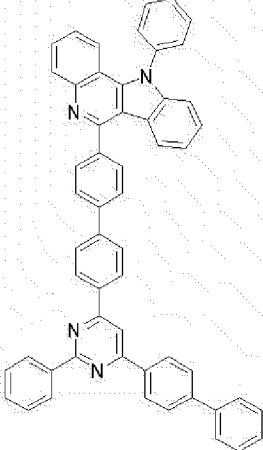
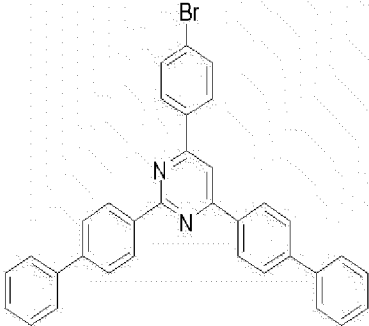
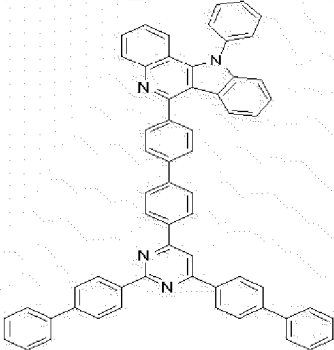
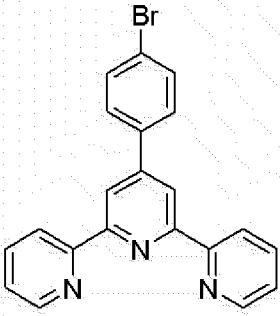
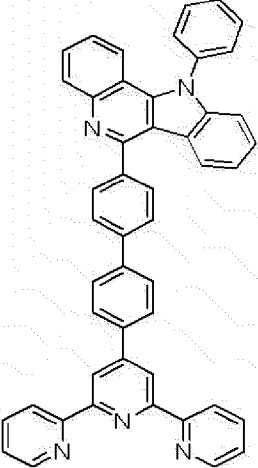
[표 1]

화합물 번호	중간체 A	목적화합물	수율
2			61%
4			65%
6			66%

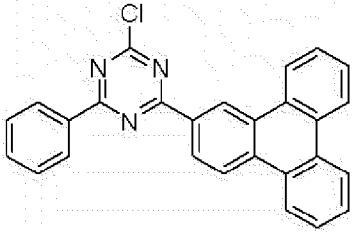
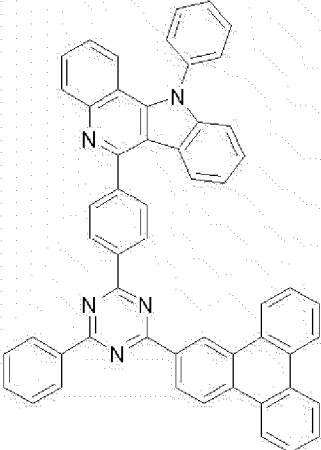
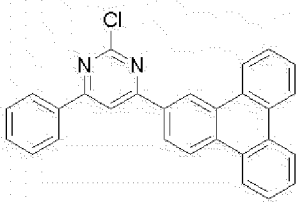
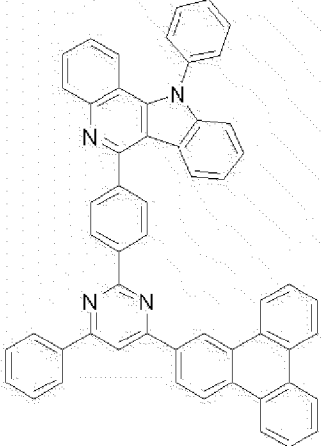
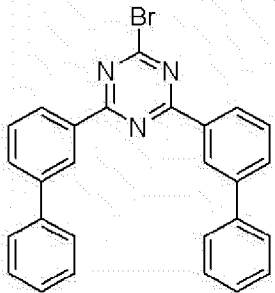
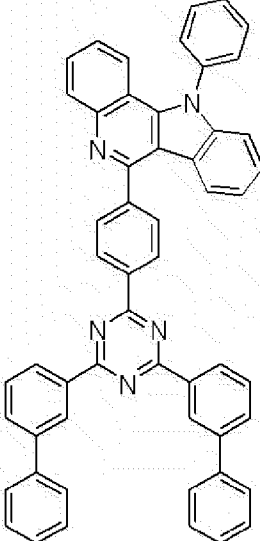
[203]

7	 <p>Chemical structure of 4,4'-diphenyl-2-bromopyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It consists of a central pyrimidine ring with a bromine atom at the 2-position and cyano groups at the 5 and 6 positions. The 4 and 4' positions are substituted with phenyl rings.</p>	 <p>Chemical structure of 4,4'-diphenyl-2-(1-phenyl-1H-indolizin-5-yl)pyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It features a central pyrimidine ring with cyano groups at the 5 and 6 positions and a 1-phenyl-1H-indolizin-5-yl group at the 2-position. The 4 and 4' positions are substituted with phenyl rings.</p>	64%
8	 <p>Chemical structure of 4,4'-diphenyl-2-bromopyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It consists of a central pyrimidine ring with a bromine atom at the 2-position and cyano groups at the 5 and 6 positions. The 4 and 4' positions are substituted with phenyl rings.</p>	 <p>Chemical structure of 4,4'-diphenyl-2-(1-phenyl-1H-indolizin-5-yl)pyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It features a central pyrimidine ring with cyano groups at the 5 and 6 positions and a 1-phenyl-1H-indolizin-5-yl group at the 2-position. The 4 and 4' positions are substituted with phenyl rings.</p>	69%
26	 <p>Chemical structure of 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It consists of a central pyrimidine ring with cyano groups at the 5 and 6 positions and phenyl rings at the 2 and 6 positions. A bromine atom is attached to the 4-position of the pyrimidine ring.</p>	 <p>Chemical structure of 4-bromo-2,6-diphenyl-2-(1-phenyl-1H-indolizin-5-yl)pyrimidin-5,6-dicarbonitrile. It features a central pyrimidine ring with cyano groups at the 5 and 6 positions, phenyl rings at the 2 and 6 positions, and a 1-phenyl-1H-indolizin-5-yl group at the 2-position. A bromine atom is attached to the 4-position of the pyrimidine ring.</p>	71%

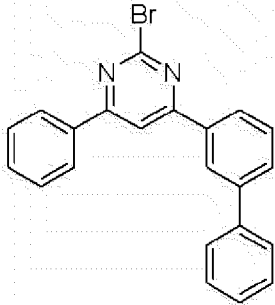
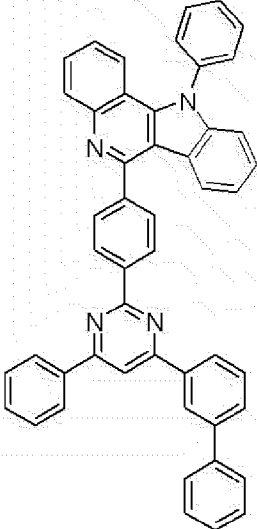
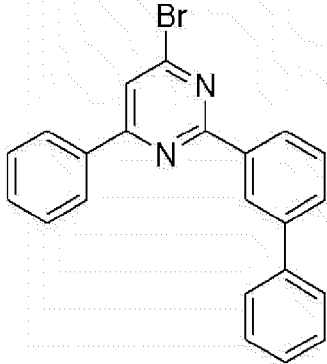
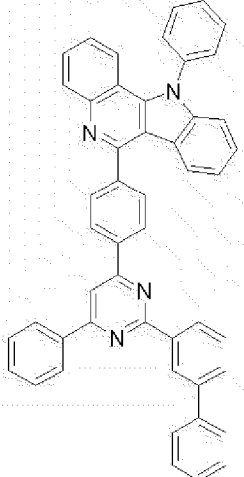
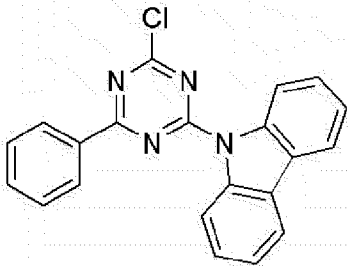
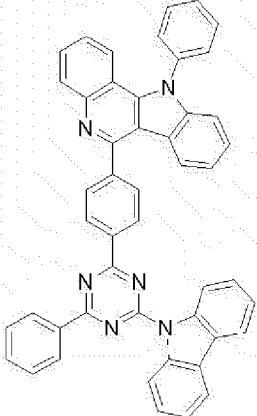
[204]

28			77%
31			70%
33			54%

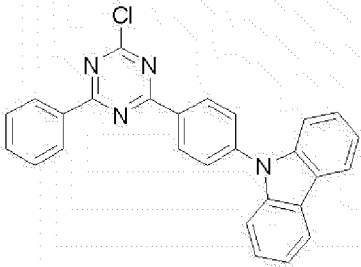
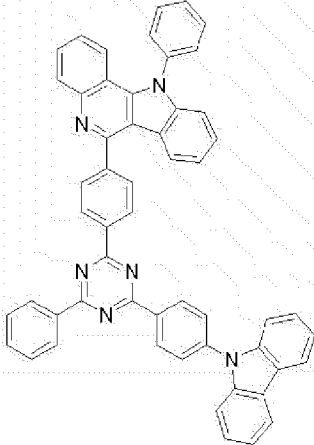
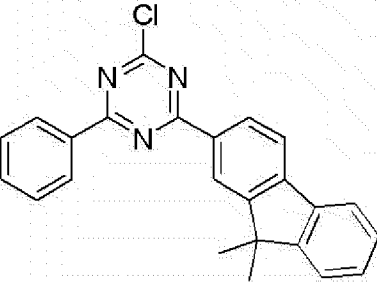
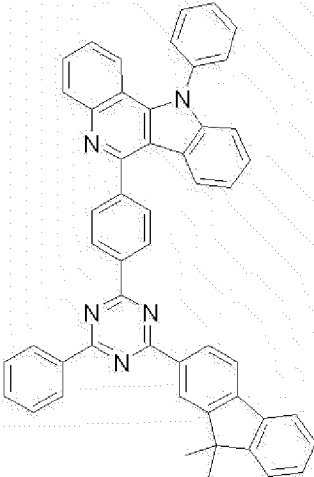
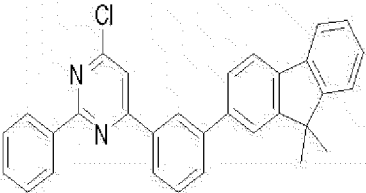
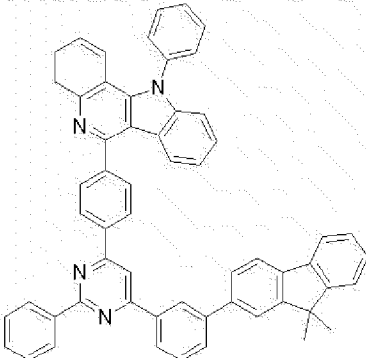
[205]

66			61%
68			66%
70			64%

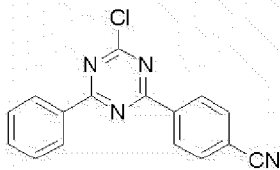
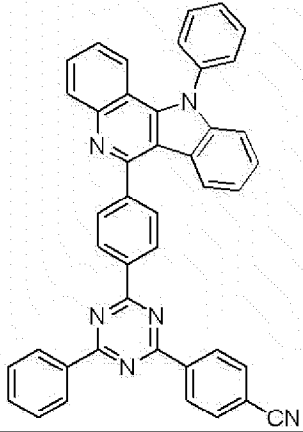
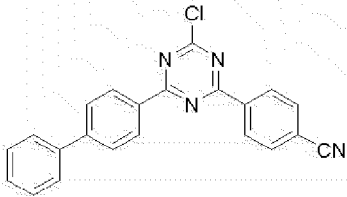
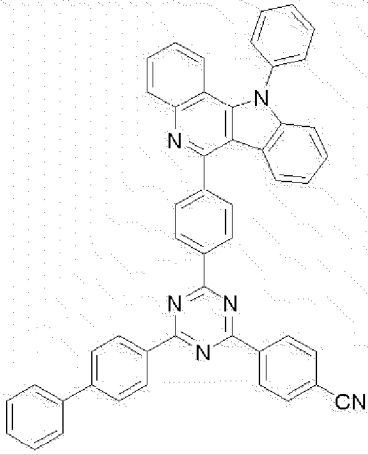
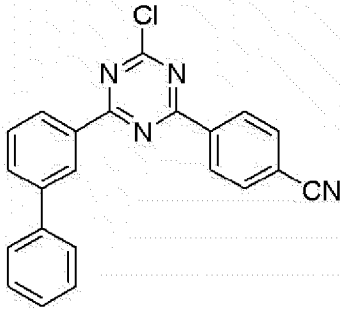
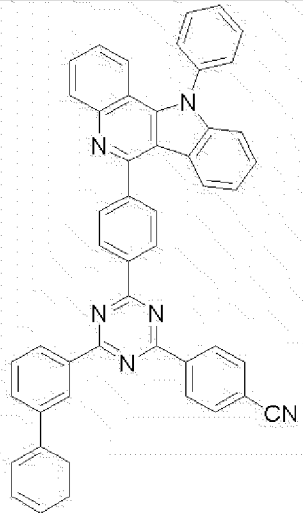
[206]

73	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1Br</chem>	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1C4=CC=C(C5=CC=CC=C5)C4c6c7c(c8c6c9c(c8)ccccc9N10C=CC=CC=C10)ccccc7</chem>	65%
74	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1Br</chem>	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1C4=CC=C(C5=CC=CC=C5)C4c6c7c(c8c6c9c(c8)ccccc9N10C=CC=CC=C10)ccccc7</chem>	66%
77	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1Cl</chem>	 <chem>O=C1C=C(C2=CC=CC=C2)N(C3=CC=CC=C3)N1C4=CC=C(C5=CC=CC=C5)C4c6c7c(c8c6c9c(c8)ccccc9N10C=CC=CC=C10)ccccc7</chem>	68%

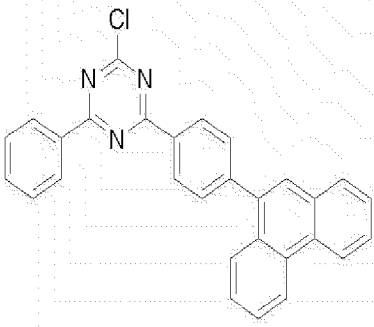
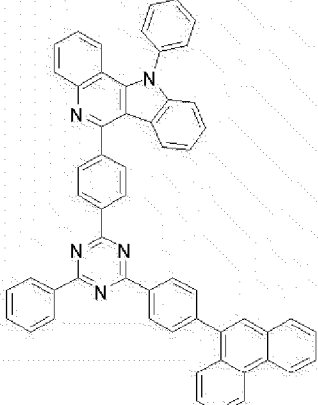
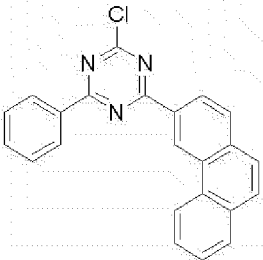
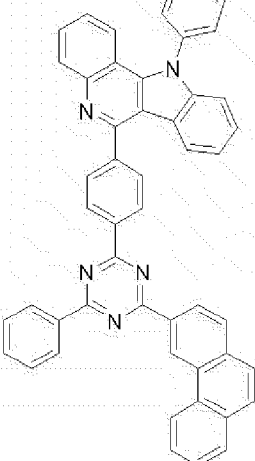
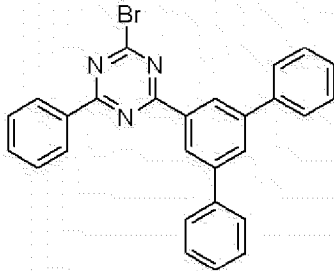
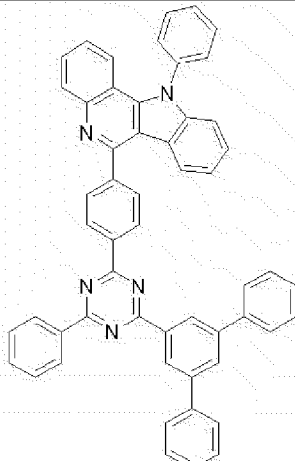
[207]

78			66%
88			66%
93			64%

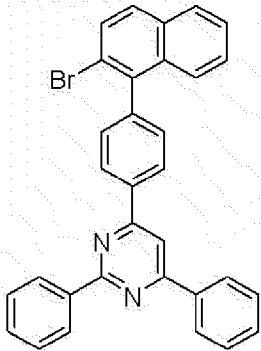
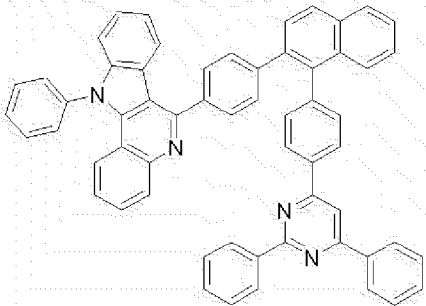
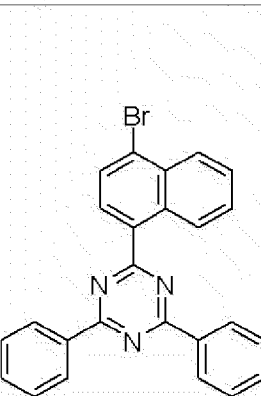
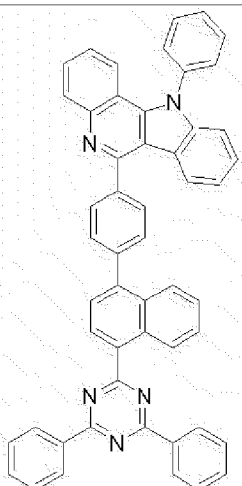
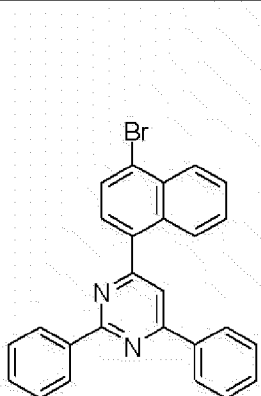
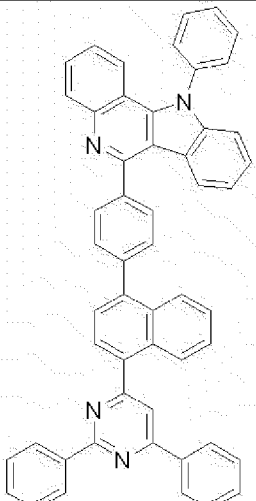
[208]

96			60%
100			61%
101			60%

[209]

104			64%
105			61%
108			59%

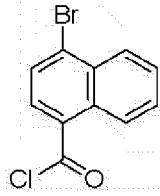
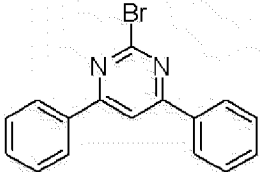
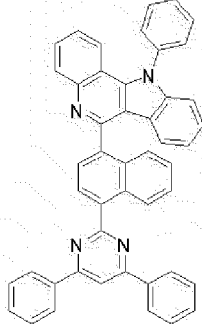
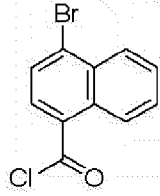
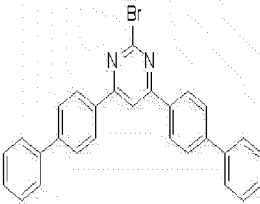
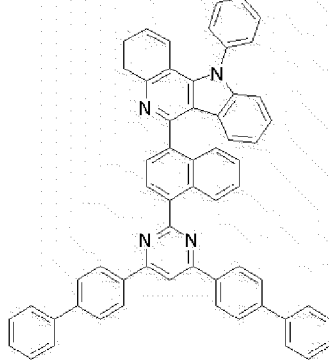
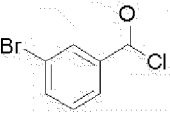
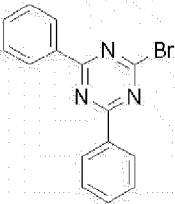
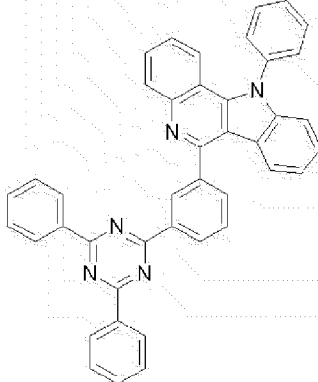
[210]

117			58%
131			65%
132			61%

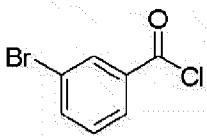
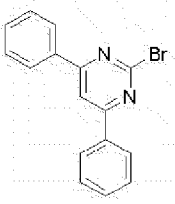
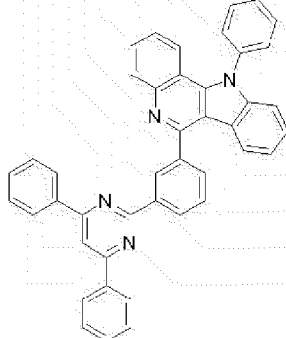
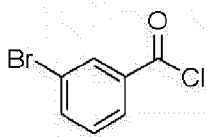
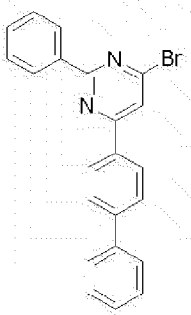
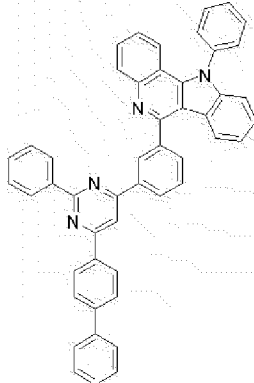
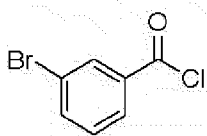
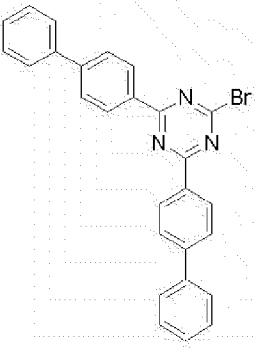
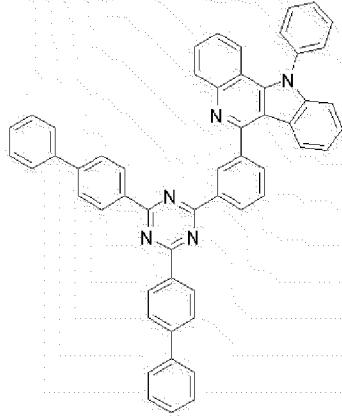
[211] 상기 제조예 1에서 4-브로모벤조일 클로라이드(4-bromobenzoyl chloride) 대신 하기 표 2의 중간체 B를 사용하고, 2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 하기 표 2의 중간체 C를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 1과 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[212]

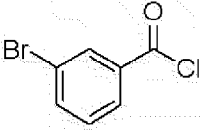
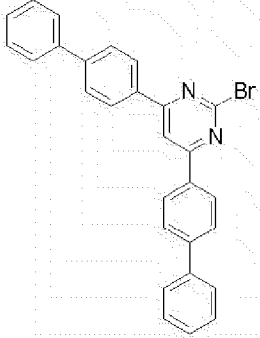
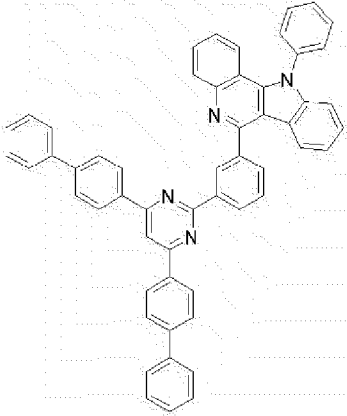
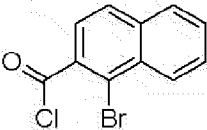
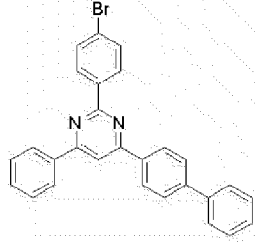
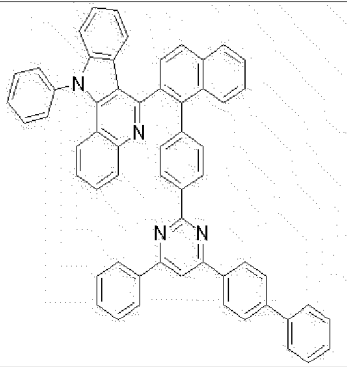
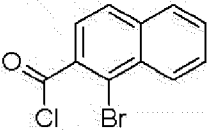
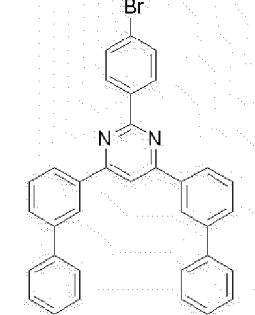
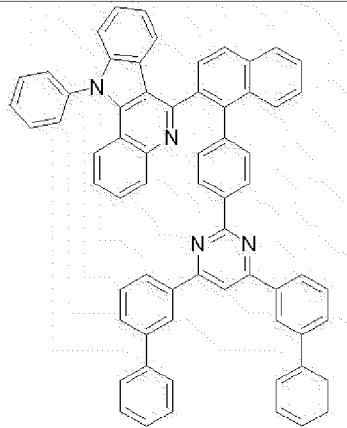
[표 2]

화합물 번호	중간체 B	중간체 C	화합물	수율
16				60%
21				64%
35				66%

[213]

37				61%
39				63%
41				63%

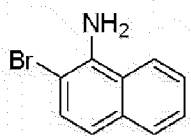
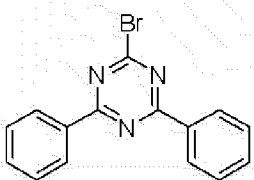
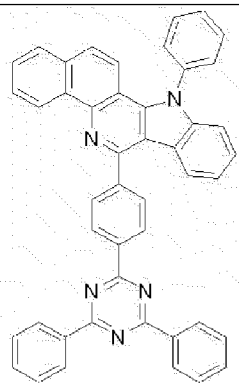
[214]

42				64%
115				66%
120				62%

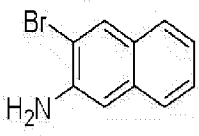
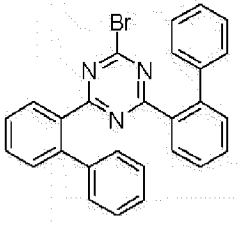
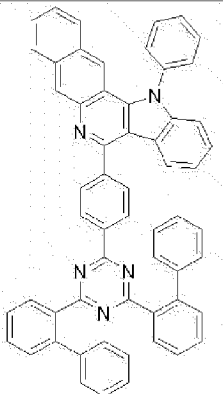
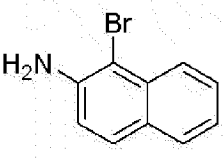
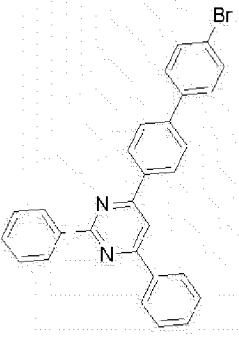
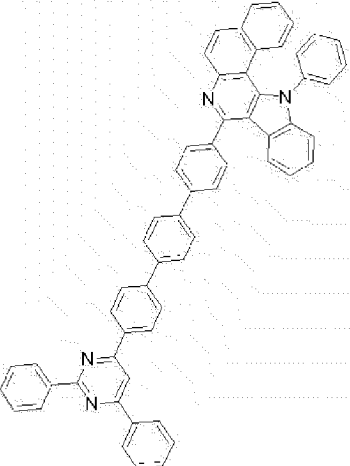
[215] 상기 제조예 1에서 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) 대신 하기 표 3의 중간체 D를 사용하고,
 2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신
 하기 표 3의 중간체 E를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 1과 동일한 방법으로
 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[216]

[표 3]

화합물 번호	중간체 D	중간체 E	화합물	수율
45				51%

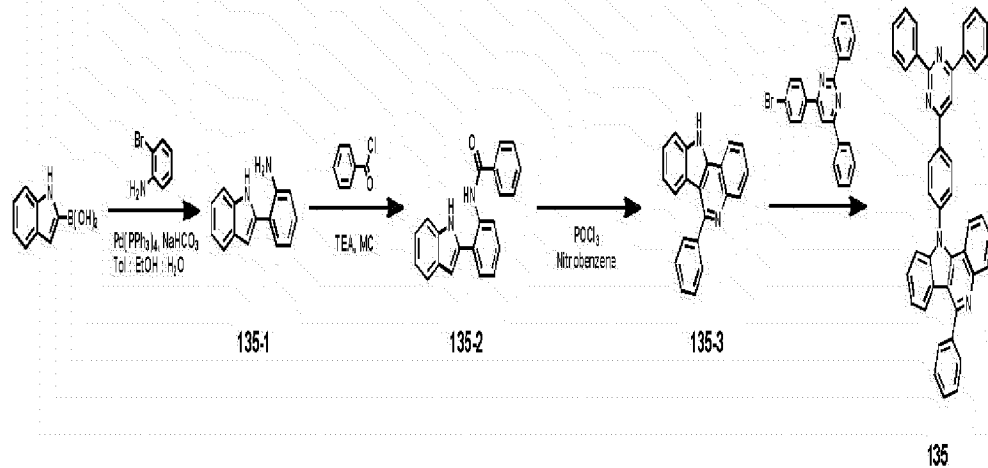
[217]

59				52%
65				49%

[218]

<제조예 2> 화합물 135의 제조

[219]

[220] **1) 화합물 135-1의 제조**

[221] (1H-인돌-2-일)보론산((1H-indol-2-yl)boronic acid) (100 g, 0.621 mol), 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) (96 g, 0.558 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 1000 mL : 200 mL : 200 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (35.8 g, 0.031 mol) 와 NaHCO₃ (156.5 g, 1.863 mol)를 넣고 3 시간 동안 100°C 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물135-1 (94 g, 72%) 을 얻었다.

[222] **2) 화합물 135-2의 제조**

[223] 화합물 135-1 (94 g, 0.451 mol), 트리에틸 아민(Triethyl amine) (42 mL, 0.451 mol)을 MC 1200 mL에 넣고 녹인다. 벤조일 클로라이드(benzoyl chloride) (69.7 g, 0.496 mol) 을 MC 300 mL에 녹인 후, 0°C 에서 천천히 혼합물에 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 135-2 (112 g, 80%)를 얻었다.

[224] **3) 화합물 135-3의 제조**

[225] 화합물 135-2 (112 g, 0.358 mol)을 니트로벤젠(Nitrobenzene) 1000 mL에 녹인 후, POCl₃ (33 mL, 0.358 mol)을 천천히 적가한다. 15 시간 동안 140°C 에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 NaHCO₃를 증류수에 넣어 녹인 용액을 천천히 넣고 교반한다. 이후에 생기는 고체를 필터하여 수집한다. 수집한 고체를 MC와 MeOH에 재결정하여 고체 형태의 화합물 135-3 (54 g, 51%)를 얻었다.

[226] **4) 화합물 135의 제조**

[227] 화합물 135-3 (9 g, 0.030 mol), 4-(4-브로모페닐)-2,6-다이페닐피리미딘(4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine) (11.8 g, 0.030 mol)을 톨루엔(Toluene) 100 mL 에 녹인 후 Pd₂(dba)₃ (2.8 g, 0.003 mol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine) (1.2 g, 0.006 mol), 소듐 tert-부톡사이드(Sodium tert-butoxide) (5.7 g, 0.062 mol) 을 넣고 15 시간 동안

100°C 에서 교반한다. 반응 완료 후, 상온으로 식힌 뒤에 생긴 고체를 필터하여 건조 후에 화합물 135 (9.4 g, 52%)을 얻었다.

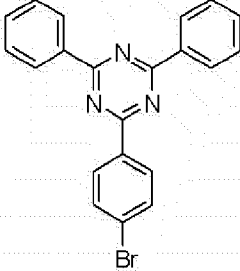
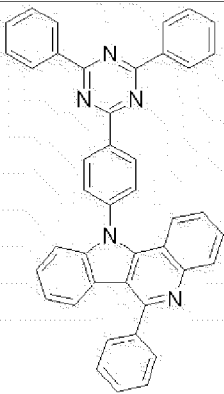
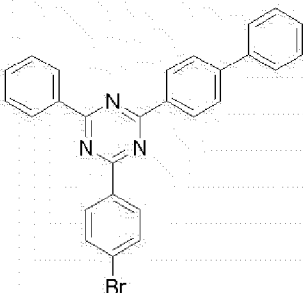
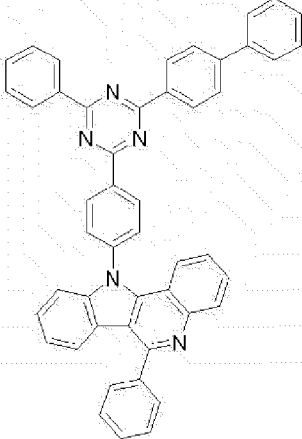
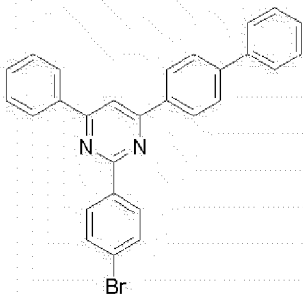
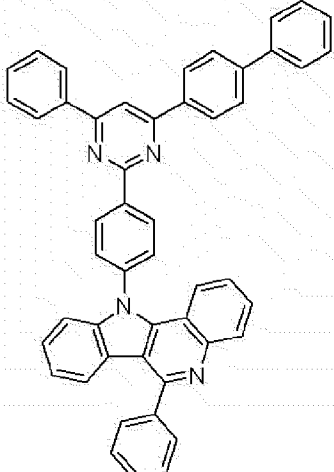
[228] 상기 제조예 2 에서

4-(4-브로모페닐)-2,6-다이페닐피리미딘(4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine) 대신 하기 표 4의 중간체 F를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

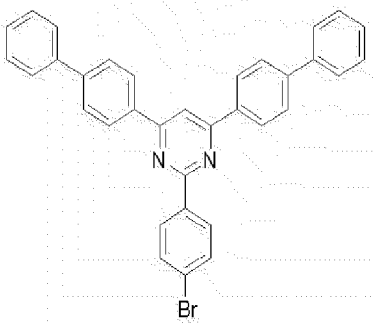
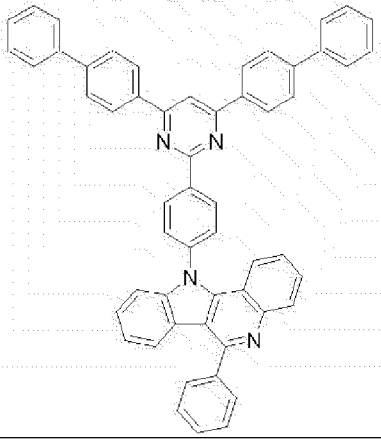
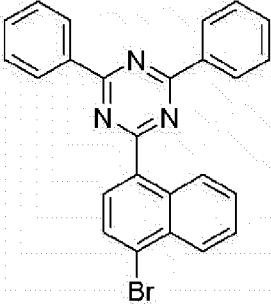
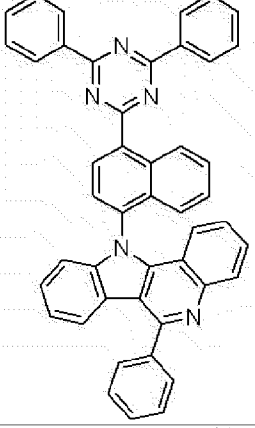
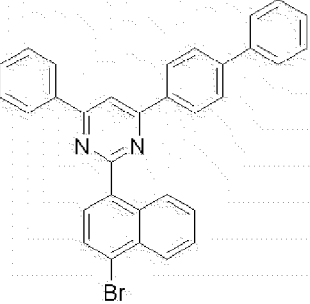
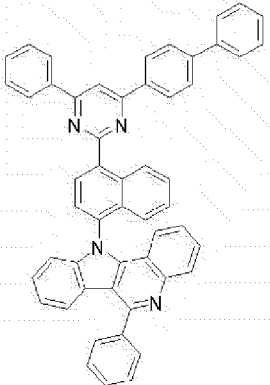
[229]

[230]

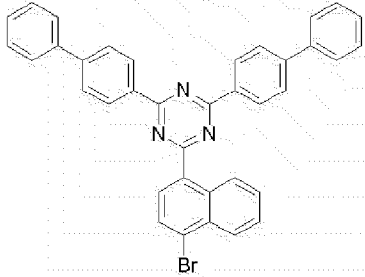
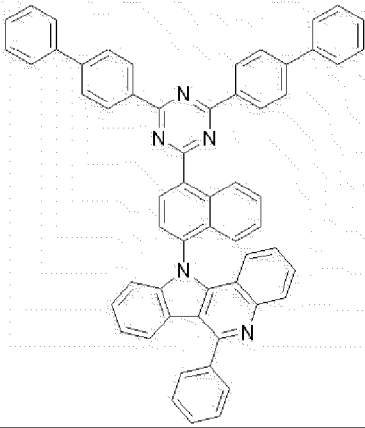
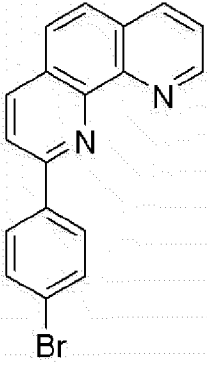
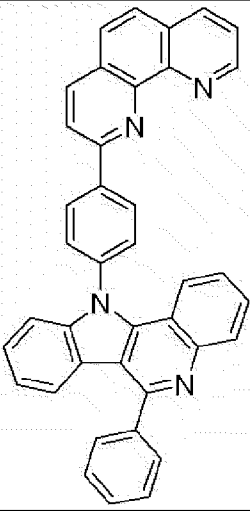
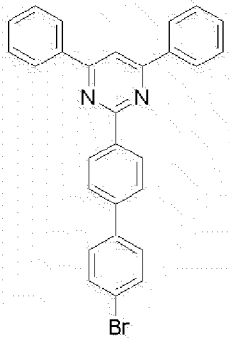
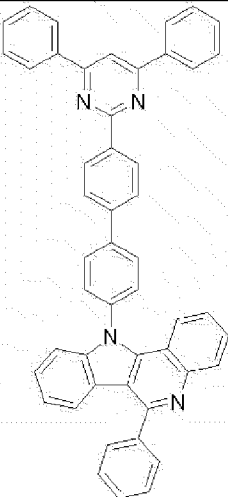
[표 4]

화합물 번호	중간체 F	화합물	수율
134			56%
137			55%
139			59%

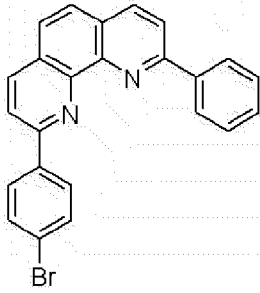
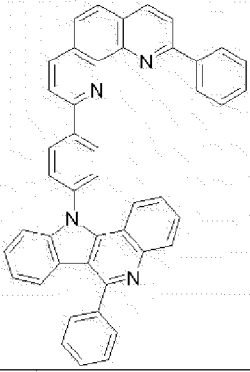
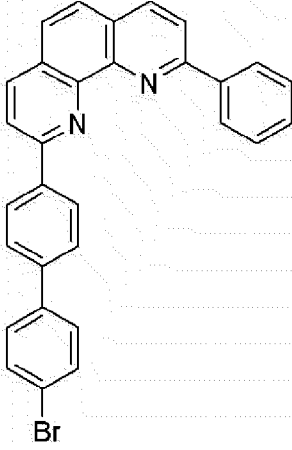
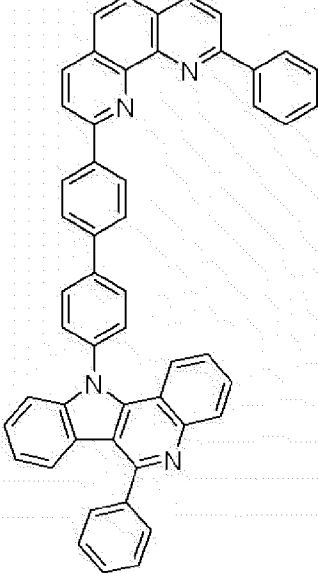
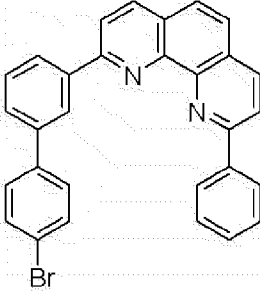
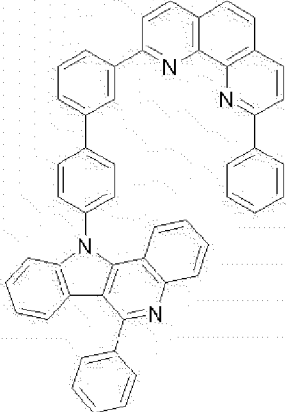
[231]

141			61%
143			66%
148			63%

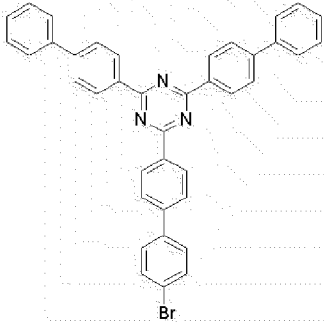
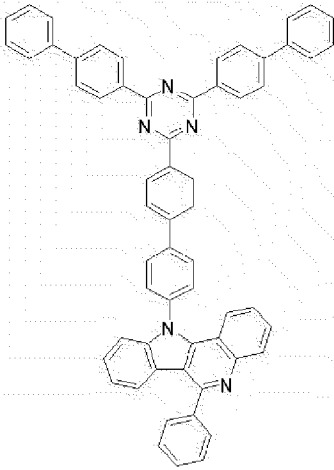
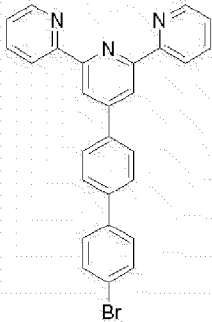
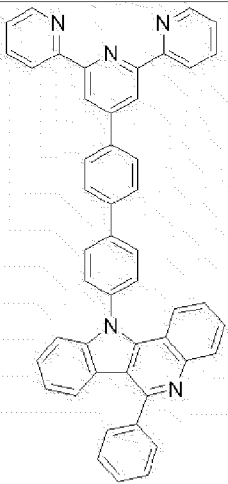
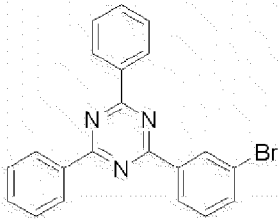
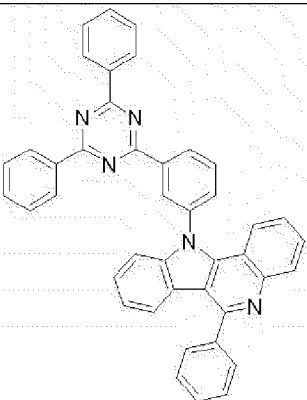
[232]

149	 <chem>Brc1ccc2c(c1)c3ccccc3n2C4=CC=C(C=C4)C5=CC=C(C=C5)C6=CC=C(C=C6)</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3c4c5ccccc5n4c3cc2C6=CC=C(C=C6)C7=CC=C(C=C7)C8=CC=C(C=C8)</chem>	58%
152	 <chem>Brc1ccc(cc1)-c2cc3c4c5ccccc5n4c3cc2C6=CC=C(C=C6)C7=CC=C(C=C7)C8=CC=C(C=C8)</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3c4c5ccccc5n4c3cc2C6=CC=C(C=C6)C7=CC=C(C=C7)C8=CC=C(C=C8)</chem>	59%
155	 <chem>Brc1ccc(cc1)-c2cc3c4c5ccccc5n4c3cc2C6=CC=C(C=C6)C7=CC=C(C=C7)C8=CC=C(C=C8)</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3c4c5ccccc5n4c3cc2C6=CC=C(C=C6)C7=CC=C(C=C7)C8=CC=C(C=C8)</chem>	65%

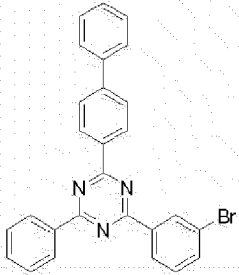
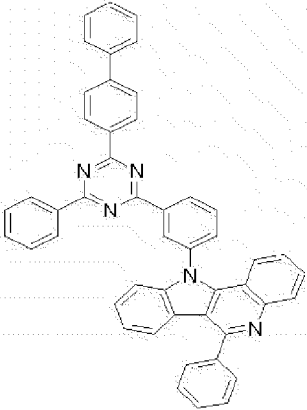
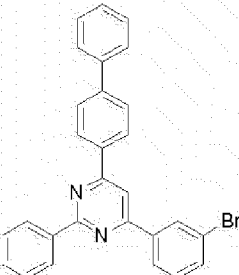
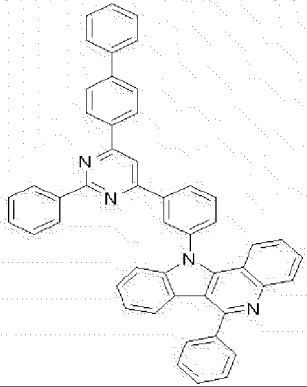
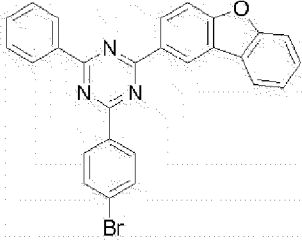
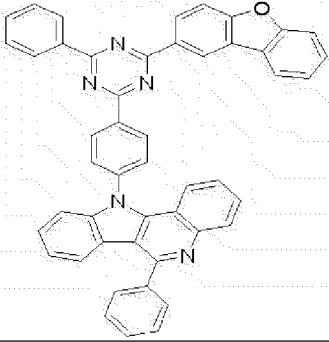
[233]

156	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)C5=CC=CC=C5</chem>	63%
157	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)C5=CC=C(C=C5)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)C5=CC=CC=C5C6=CC=CC=C6</chem>	66%
158	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=CC3=C(C=C2)C=CC=C3C4=CC=C(C=C4)C5=CC=C(C=C5)C6=CC=CC=C6</chem>	63%

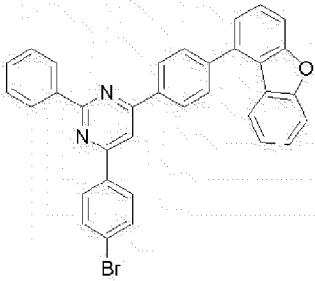
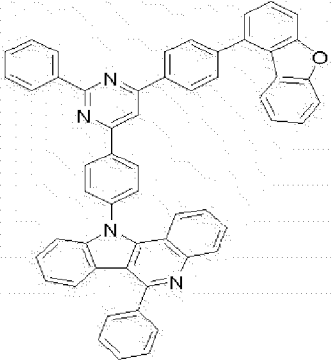
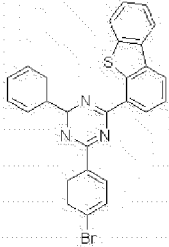
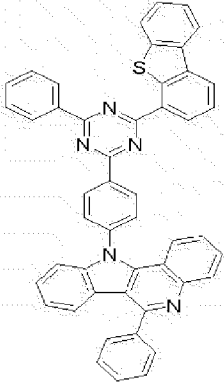
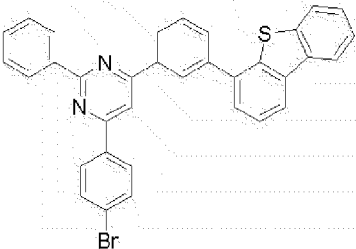
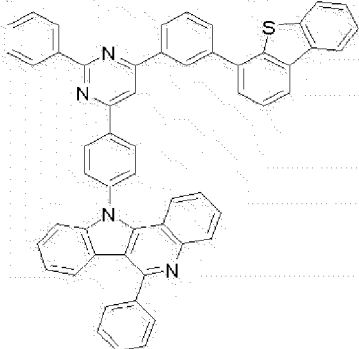
[234]

159			63%
161			66%
165			66%

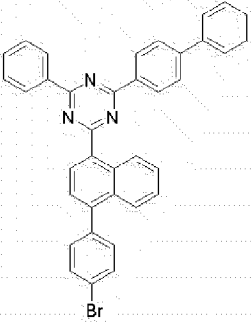
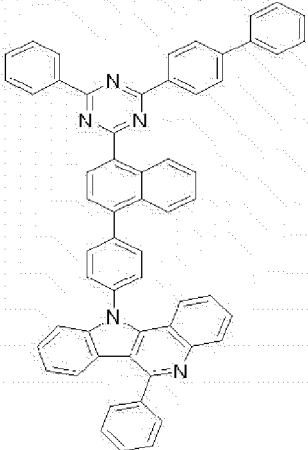
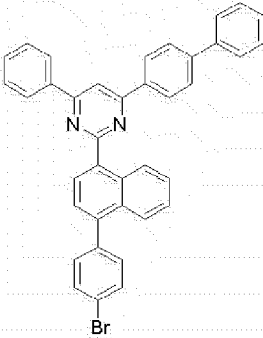
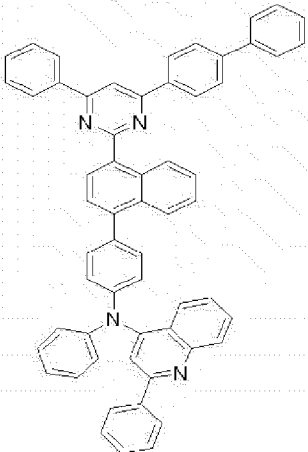
[235]

168			60%
169			61%
203			65%

[236]

205	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)O4=CC=CC=C4O3)C=C2C5=CC=C(C=C5)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)O4=CC=CC=C4O3)C=C2C5=CC=C(C=C5)N6C7=CC=CC=C7C(=N6)C8=CC=CC=C8</chem>	61%
209	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)S4=CC=CC=C4S3)C=C2C5=CC=C(C=C5)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)S4=CC=CC=C4S3)C=C2C5=CC=C(C=C5)N6C7=CC=CC=C7C(=N6)C8=CC=CC=C8</chem>	60%
212	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)S4=CC=CC=C4S3)C=C2C5=CC=C(C=C5)Br</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)N2C=NC(C3=CC=C(C=C3)S4=CC=CC=C4S3)C=C2C5=CC=C(C=C5)N6C7=CC=CC=C7C(=N6)C8=CC=CC=C8</chem>	61%

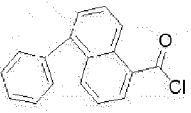
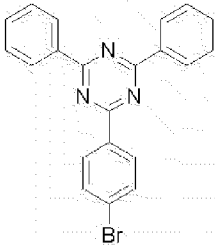
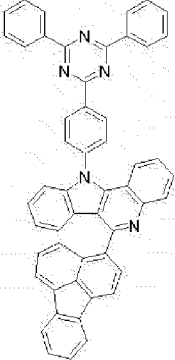
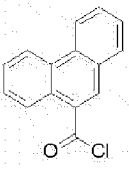
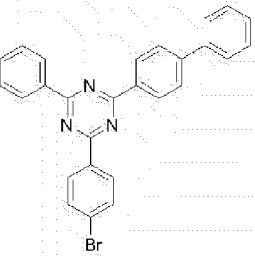
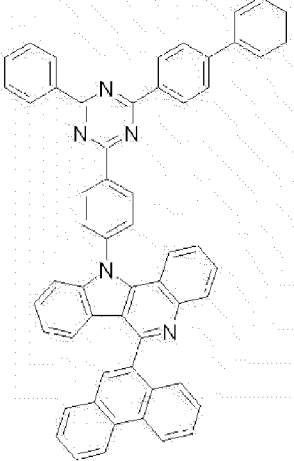
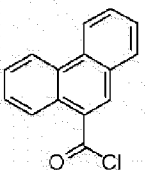
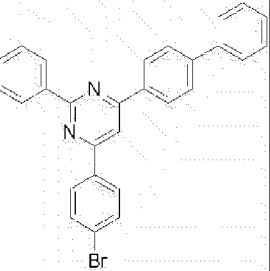
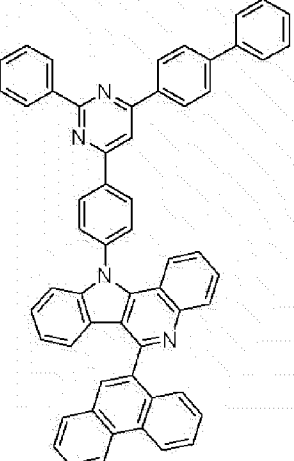
[237]

234			61%
236			58%

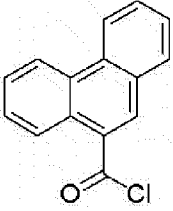
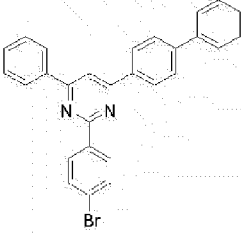
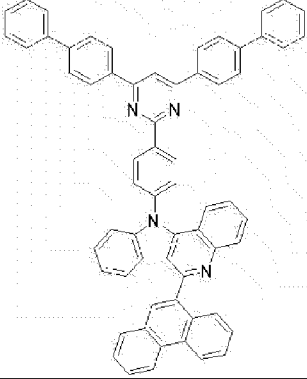
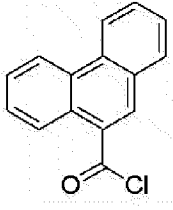
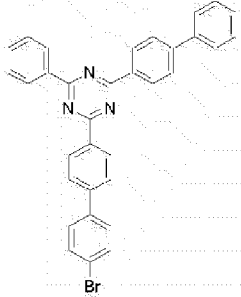
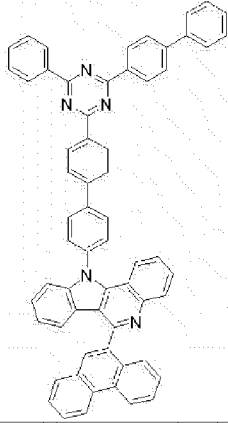
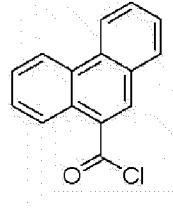
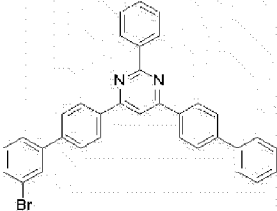
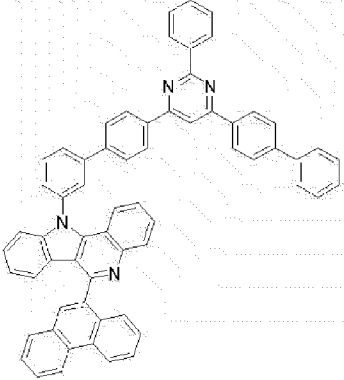
[238] 상기 제조예 2에서 벤조일 클로라이드(benzoyl chloride) 대신 하기 표 5의 중간체 G를 사용하고,
 4-(4-브로모페닐)-2,6-다이페닐피리미딘(4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidin e) 대신 하기 표 5의 중간체 H를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[239]

[표 5]

화합물 번호	중간체 G	중간체 H	화합물	수율
213				45%
218				51%
219				54%

[240]

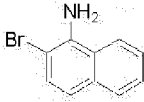
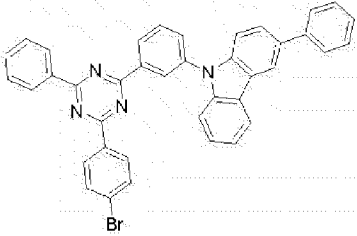
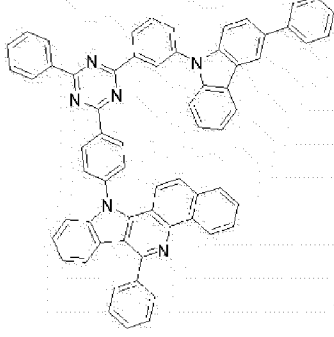
222				51%
228				53%
229				53%

[241] 상기 제조예 2 에서 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) 대신 하기 표 6의 중간체 I를 사용하고,

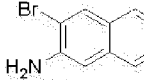
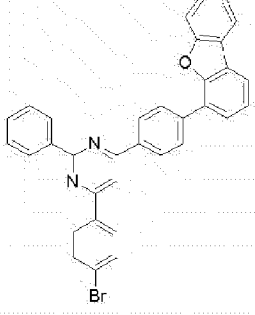
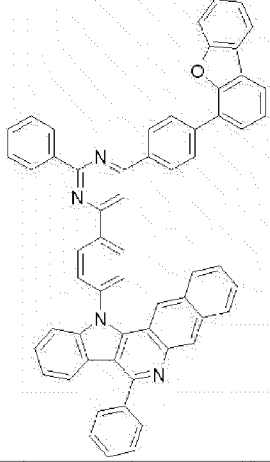
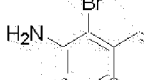
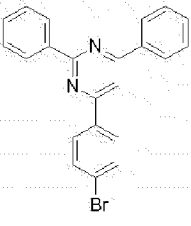
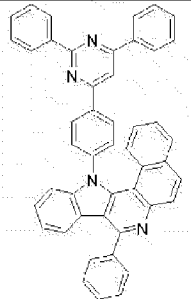
4-(4-브로모페닐)-2,6-다이페닐피리미딘(4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine) 대신 하기 표 6의 중간체 J를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[242]

[표 6]

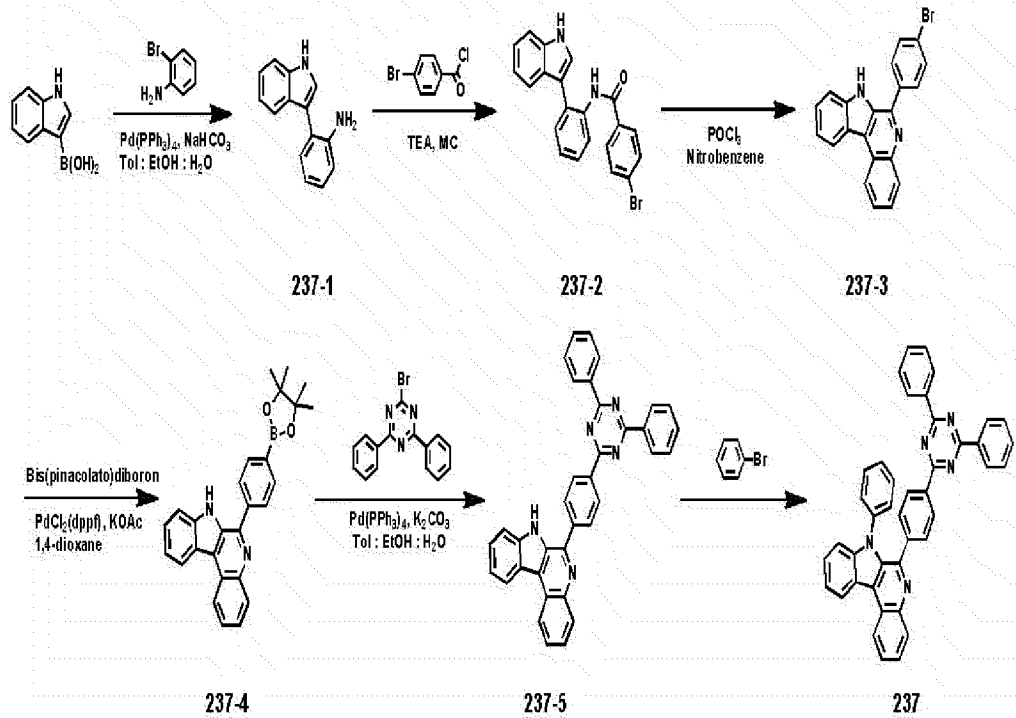
화합물 번호	중간체 I	중간체 J	화합물	수율
187				49%

[243]

192				50%
195				51%

[244] <제조예 3> 화합물 237의 제조

[245]



[246] 1) 화합물 237-1의 제조

[247] (1H-인돌-3-일)보론산((1H-indol-3-yl)boronic acid) (100 g, 0.621 mol), 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) (96 g, 0.558 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 1000 mL : 200 mL : 200 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (35.8 g, 0.031 mol) 와 NaHCO₃ (156.5 g, 1.863 mol)를 넣고 3 시간 동안 100°C 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 237-1 (94 g, 72%) 을 얻었다.

[248] 2) 화합물 237-2의 제조

[249] 화합물 237-1 (94 g, 0.451 mol), 트리에틸 아민(Triethyl amine) (42 mL, 0.451 mol)을 MC 1200 mL에 넣고 녹인다. 4-브로모벤조일 클로라이드(4-bromobenzoyl chloride) (108.9 g, 0.496 mol) 을 MC 300 mL에 녹인 후, 0°C 에서 천천히 혼합물에 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 237-2 (150 g, 85%)를 얻었다.

[250] 3) 화합물 237-3의 제조

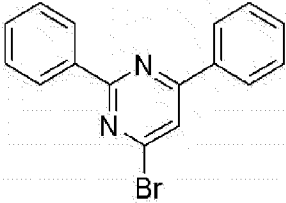
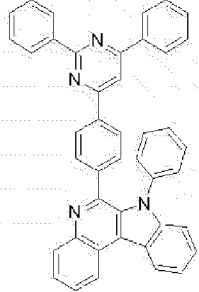
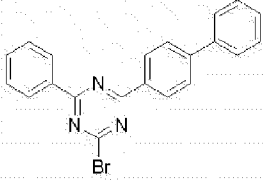
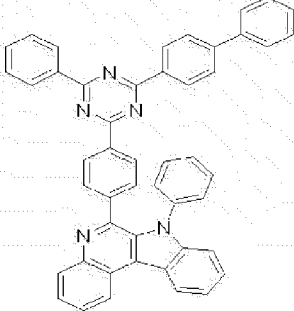
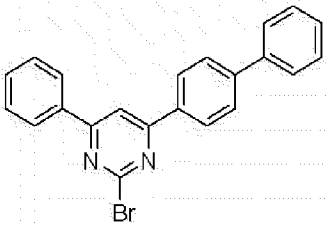
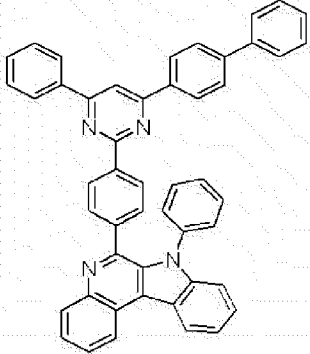
[251] 화합물 237-2 (150 g, 0.383 mol)을 니트로벤젠(Nitrobenzene) 1500 mL에 녹인 후, POCl₃ (35 mL, 0.383 mol)을 천천히 적가한다. 15 시간 동안 140°C에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 NaHCO₃를 증류수에 넣어 녹인 용액을 천천히 넣고 교반한다. 이후에 생기는 고체를 필터하여 수집한다. 수집한 고체를 MC와 MeOH에 재결정하여 고체 형태의 화합물 237-3 (68 g, 48%)를 얻었다.

[252] 4) 화합물 237-4의 제조

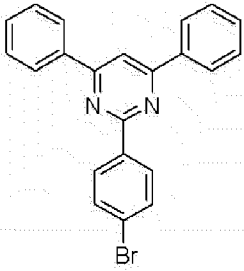
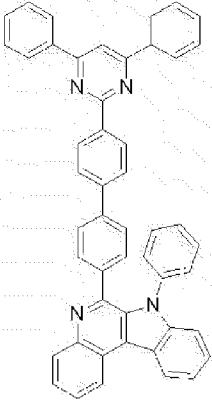
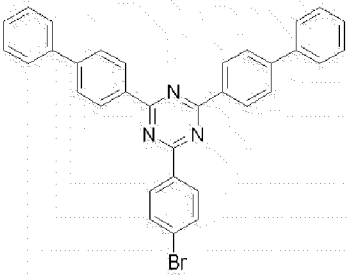
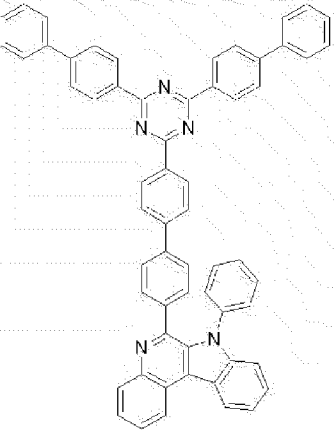
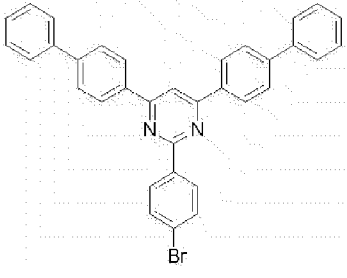
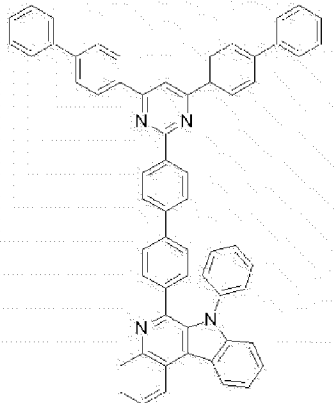
- [253] 화합물 237-3 (10 g, 0.026 mol),
비스(피나콜라토)다이보론(Bis(pinacolato)diboron) (9.9 g, 0.039 mol), KOAc (7.6 g, 0.078 mol), PdCl₂(dppf) (0.9 g, 0.0013 mol)을 1,4-다이옥세인(1,4-dioxane) 200 mL에 녹인 후 5 시간 동안 90°C 에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하여 화합물 237-4 (10 g, 91%)를 얻었다.
- [254] **5) 화합물 237-5의 제조**
- [255] 화합물 237-4 (8 g, 0.019 mol),
2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (5.9 g, 0.019 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 80 mL : 10 mL : 10 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (1.1 g, 0.0009 mol) 와 K₂CO₃(7.8 g, 0.057 mol)를 넣고 5 시간 동안 100°C 에서 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 화합물 237-5 (7.4 g, 75%) 을 얻었다.
- [256] **6) 화합물 237의 제조**
- [257] 화합물 237-5 (7.4 g, 0.014 mol), 브로모벤젠(bromobenzene) (3.2 g, 0.021 mol)을 톨루엔(Toluene) 100 mL 에 녹인 후 Pd₂(dba)₃ (1.2 g, 0.0014 mol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine) (0.5 g, 0.0028 mol), 소듐 tert-부톡사이드(Sodium tert-butoxide) (2.7 g, 0.028 mol) 을 넣고 15 시간 동안 100°C 에서 교반한다. 반응 완료 후, 상온으로 식힌 뒤에 생긴 고체를 필터하여 건조 후에 화합물 237 (6.5 g, 77%)을 얻었다.
- [258] 상기 제조예 3에서
2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 하기 표 7의 중간체 K를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 3과 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.
- [259]

[260]

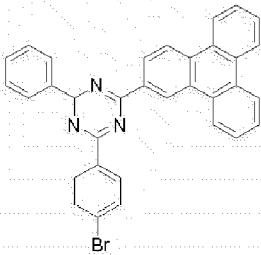
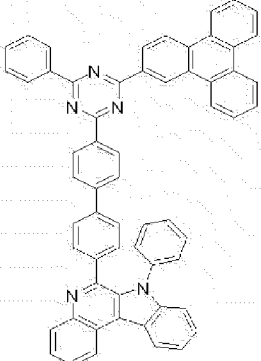
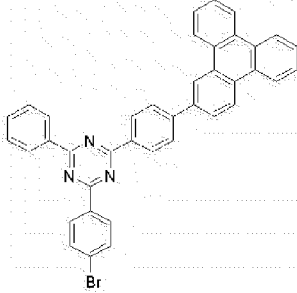
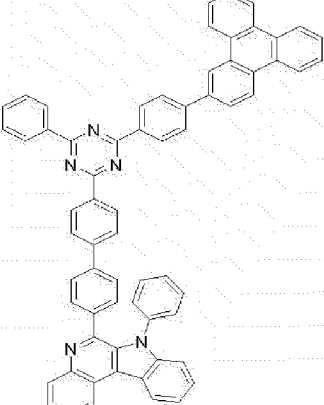
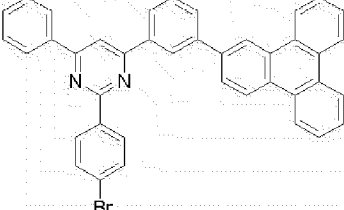
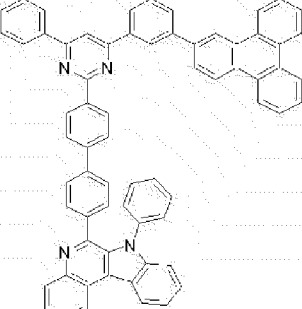
[표 7]

화합물 번호	중간체 K	화합물	수율
238			70%
240			58%
242			72%

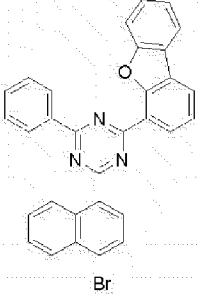
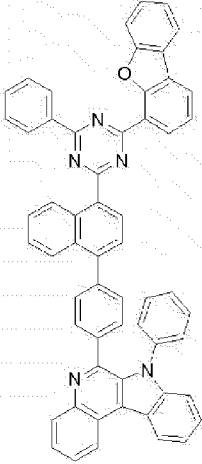
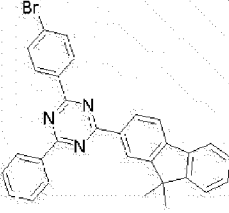
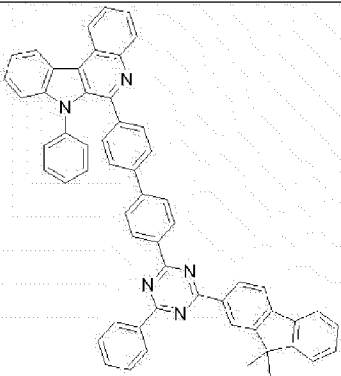
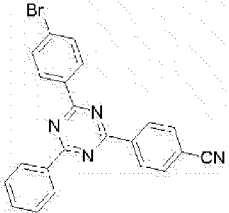
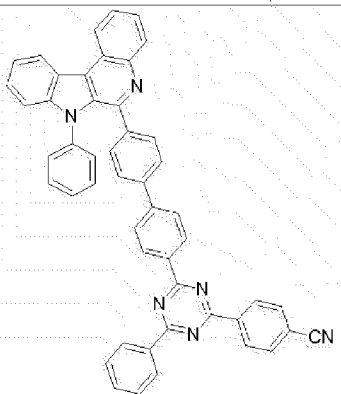
[261]

259			73%
263			75%
264			69%

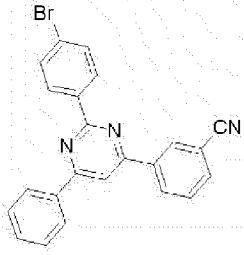
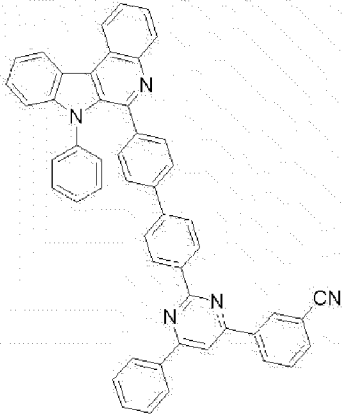
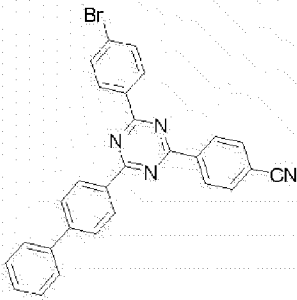
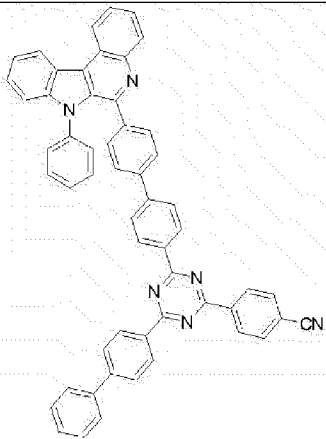
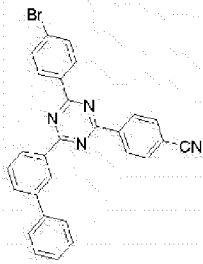
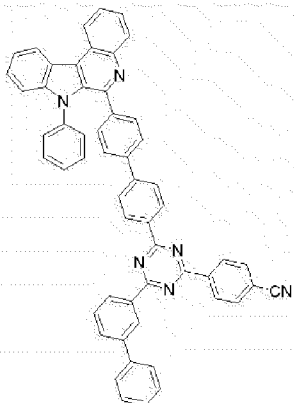
[262]

277			58%
278			55%
282			59%

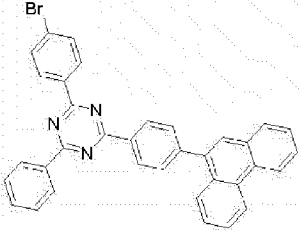
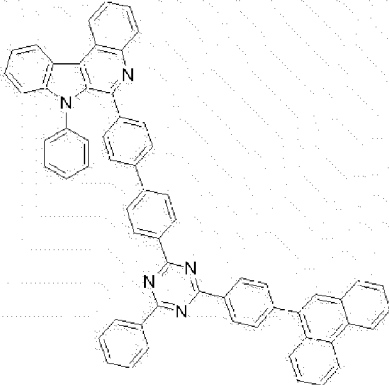
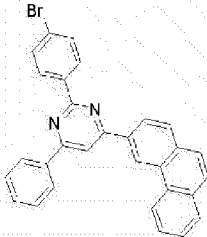
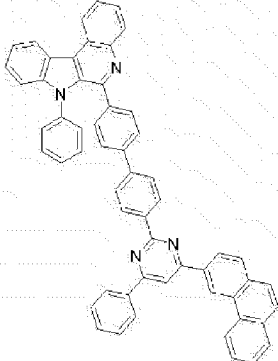
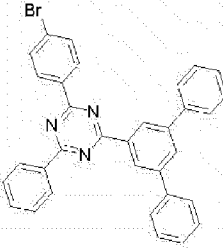
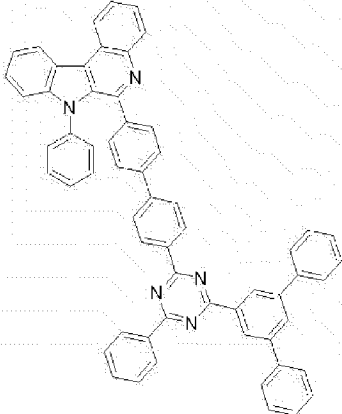
[263]

283			64%
284			66%
288			68%

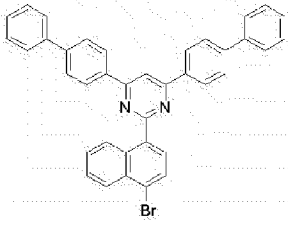
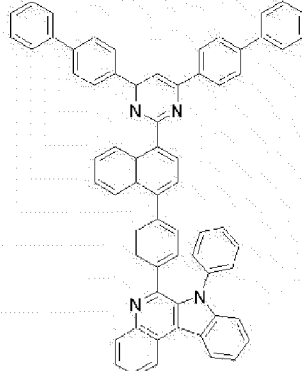
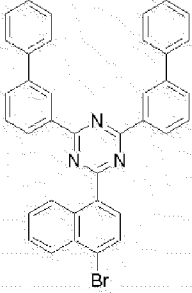
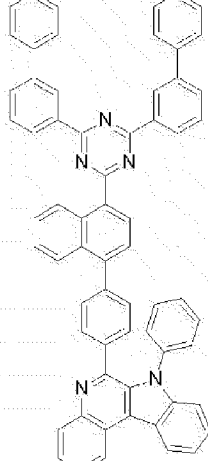
[264]

290	 <p>Chemical structure of 2-bromo-4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole. It features a 1,2,4-triazole ring substituted with a bromine atom at position 2, a cyano group at position 4, and a phenyl group at position 5.</p>	 <p>Chemical structure of 2-(4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazol-2-yl)benzimidazole. It consists of a benzimidazole ring system connected at its 2-position to the 2-position of a 4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole ring.</p>	65%
292	 <p>Chemical structure of 2-(4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazol-2-yl)pyridine. It features a pyridine ring substituted at its 2-position with a 4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole group.</p>	 <p>Chemical structure of 2-(4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazol-2-yl)quinoline. It consists of a quinoline ring system connected at its 2-position to the 2-position of a 4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole ring.</p>	67%
293	 <p>Chemical structure of 2-(4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazol-2-yl)indole. It features an indole ring system substituted at its 2-position with a 4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole group.</p>	 <p>Chemical structure of 2-(4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazol-2-yl)isoindole. It consists of an isoindole ring system connected at its 2-position to the 2-position of a 4-cyano-5-phenyl-1,2,4-triazole ring.</p>	69%

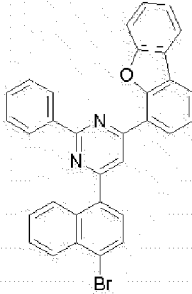
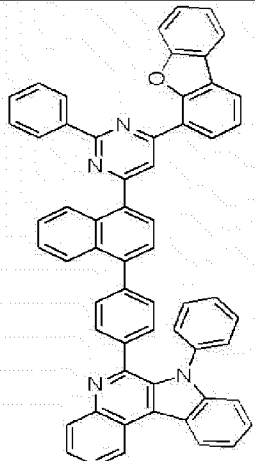
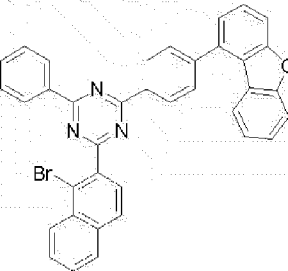
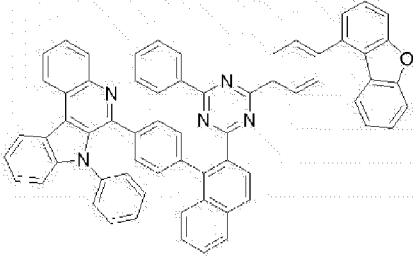
[265]

296			67%
299			64%
300			61%

[266]

303			66%
304			64%

[267]

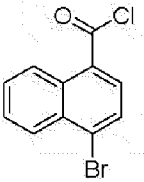
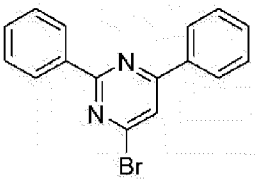
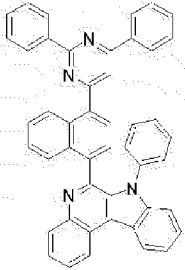
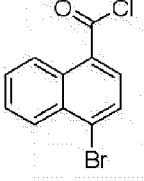
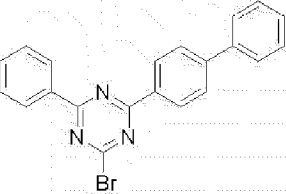
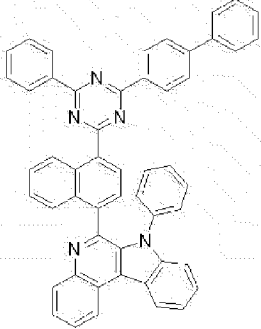
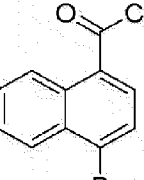
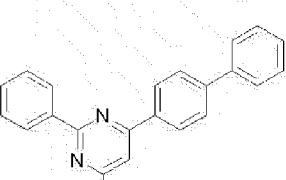
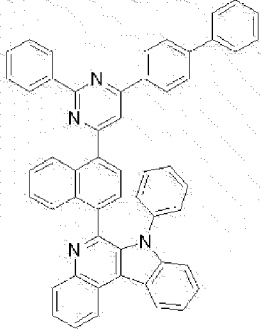
306			62%
308			61%

[268] 상기 제조예 3 에서 4-브로모벤조일 클로라이드(4-bromobenzoyl chloride) 대신 하기 표 8의 중간체 L를 사용하고,

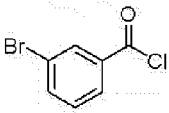
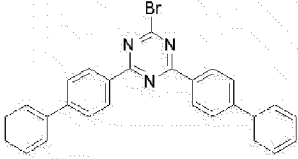
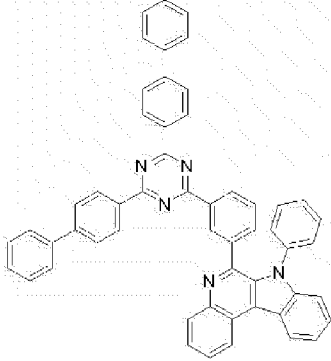
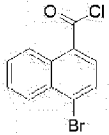
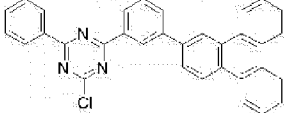
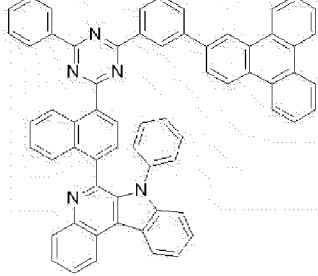
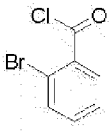
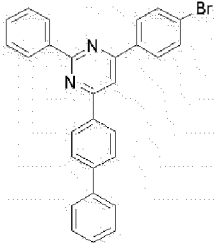
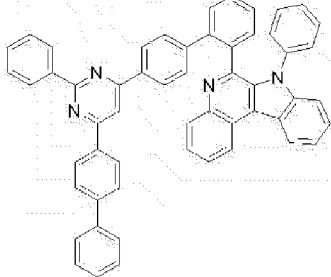
2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 하기 표 8의 중간체 M를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 3과 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[269]

[표 8]

합성물 번호	중간체 L	중간체 M	화합물	수율
248				70%
250				74%
251				73%

[271]

273				72%
305				71%
313				72%

[272] 상기 제조예 3 에서 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) 대신 하기 표 9의 중간체 N를 사용하고,
 2-브로모-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 하기 표 9의 중간체 O를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 3과 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

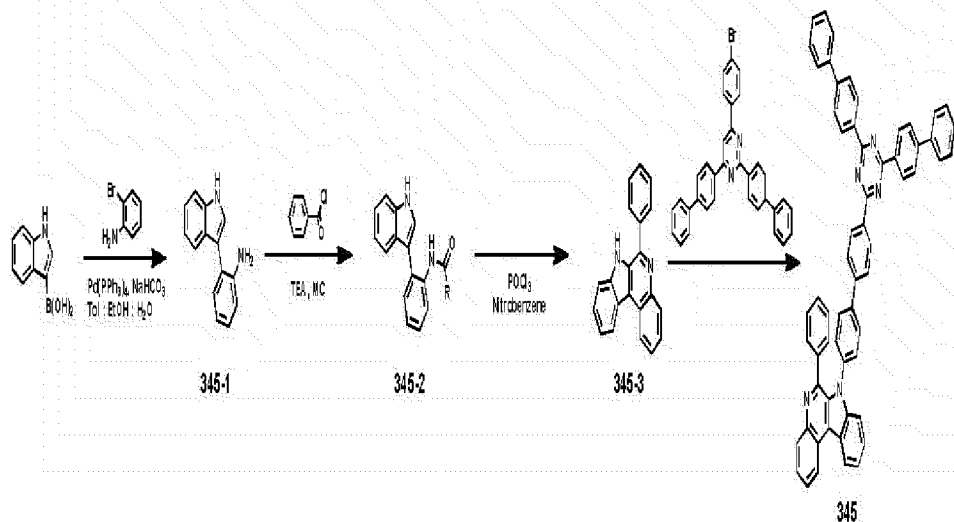
[273]

[표 9]

화합물 번호	중간체 N	중간체 O	화합물	수율
399				50%
400				51%
401				59%

[274] <제조예 4> 화합물 345의 제조

[275]

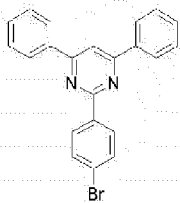
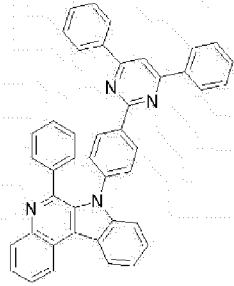
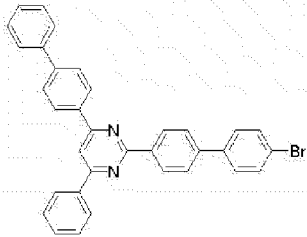
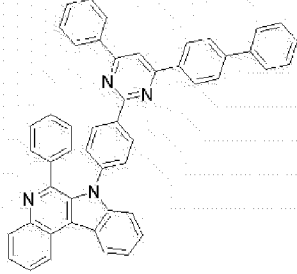
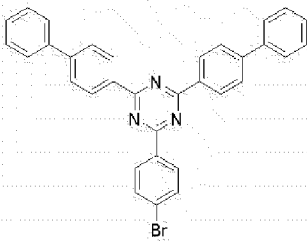
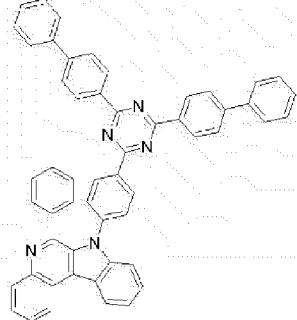


[276] 1) 화합물 345-1의 제조

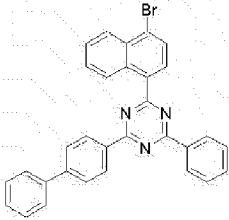
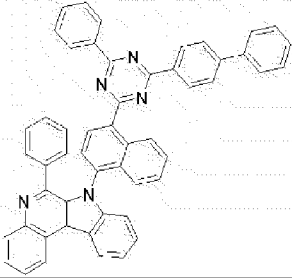
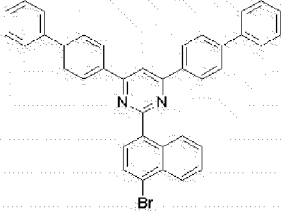
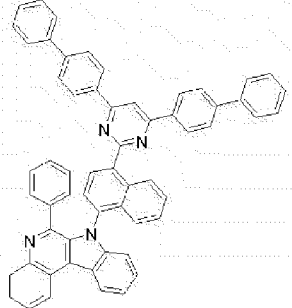
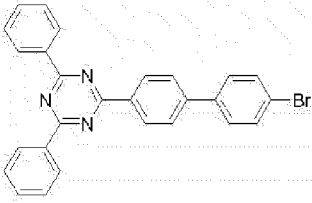
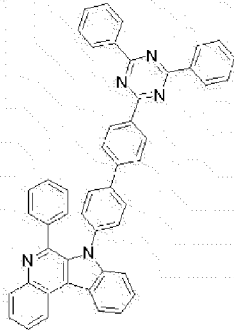
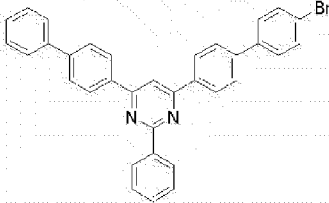
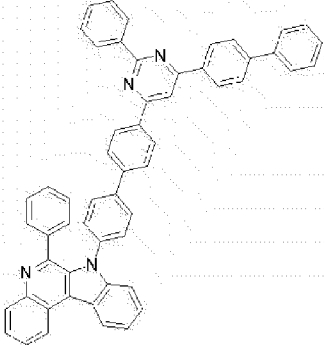
- [277] (1H-인돌-3-일)보론산((1H-indol-3-yl)boronic acid) (100 g, 0.621 mol), 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) (96 g, 0.558 mol)을 톨루엔(Toluene), EtOH, H₂O 1000 mL : 200 mL : 200 mL 에 녹인 후 Pd(PPh₃)₄ (35.8 g, 0.031 mol) 와 NaHCO₃ (156.5 g, 1.863 mol)를 넣고 3 시간 동안 100°C 교반한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 345-1 (94 g, 72%) 을 얻었다.
- [278] **2) 화합물 345-2의 제조**
- [279] 화합물 345-1 (94 g, 0.451 mol), 트리에틸 아민(Triethyl amine) (42 mL, 0.451 mol)을 MC 1200 mL에 넣고 녹인다. 벤조일 클로라이드(benzoyl chloride) (69.7 g, 0.496 mol) 을 MC 300 mL에 녹인 후, 0°C 에서 천천히 혼합물에 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 MC와 증류수를 넣어서 추출한다. 이후 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 액체 형태의 화합물 345-2 (112 g, 80%)를 얻었다.
- [280] **3) 화합물 345-3의 제조**
- [281] 화합물 345-2 (112 g, 0.358 mol)을 니트로벤젠(Nitrobenzene) 1000 mL에 녹인 후, POCl₃ (33 mL, 0.358 mol)을 천천히 적가한다. 15 시간 동안 140°C 에서 반응한다. 반응 완료 후 반응액에 NaHCO₃를 증류수에 넣어 녹인 용액을 천천히 넣고 교반한다. 이후에 생기는 고체를 필터하여 수집한다. 수집한 고체를 MC와 MeOH에 재결정하여 고체 형태의 화합물 345-3 (54 g, 51%)를 얻었다.
- [282] **4) 화합물 345의 제조**
- [283] 화합물 345-3 (9 g, 0.030 mol), 2,4-다이([1,1']-바이페닐)-4-일)-6-(4-브로모페닐)피리미딘(2,4-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(4-bromophenyl)pyrimidine) (4.7 g, 0.030 mol)을 톨루엔(Toluene) 100 mL 에 녹인 후 Pd₂(dba)₃ (2.8 g, 0.003 mol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine) (1.2 g, 0.006 mol), 소듐 tert-부톡사이드(Sodium tert-butoxide) (5.7 g, 0.062 mol) 을 넣고 15 시간 동안 100°C에서 교반한다. 반응 완료 후, 상온으로 식힌 뒤에 생긴 고체를 필터하여 건조 후에 화합물 345 (15 g, 60%)을 얻었다.
- [284] 상기 제조예 4에서 2,4-다이([1,1']-바이페닐)-4-일)-6-(4-브로모페닐)피리미딘(2,4-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(4-bromophenyl)pyrimidine)대신 하기 표 10의 중간체 P를 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.
- [285]

[286]

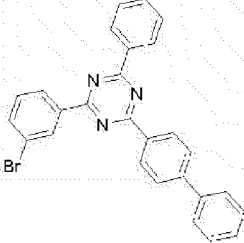
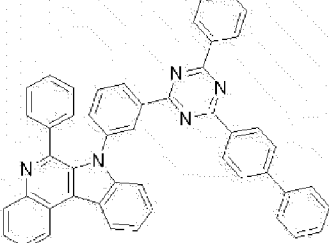
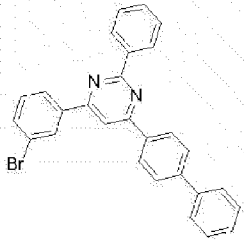
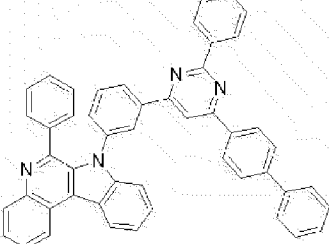
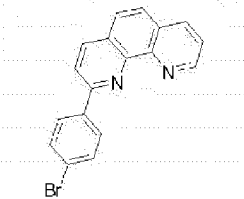
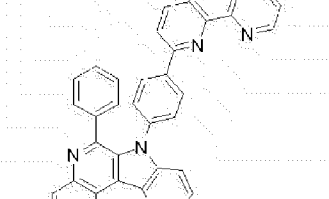
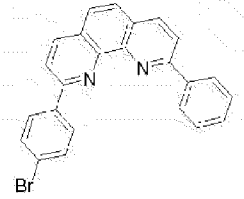
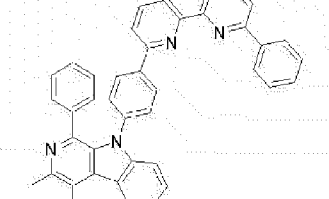
[표 10]

화합물 번호	중간체 P	화합물	수율
321			69%
324			68%
325			66%

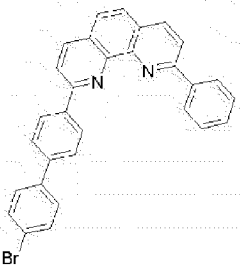
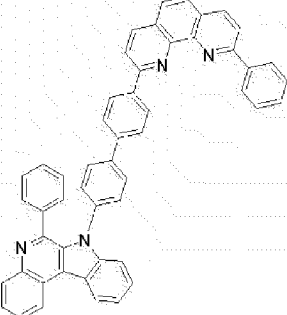
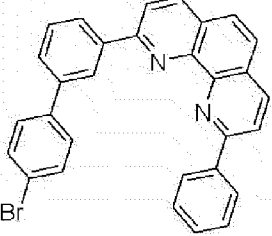
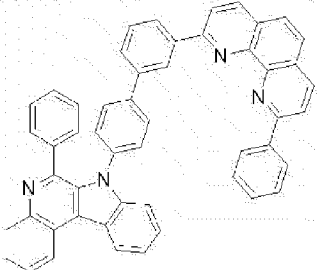
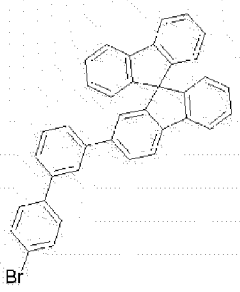
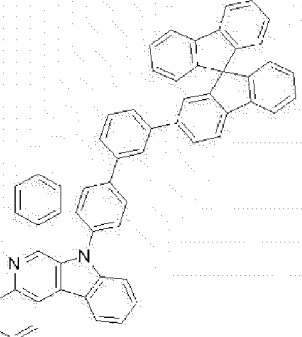
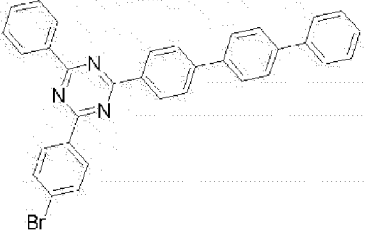
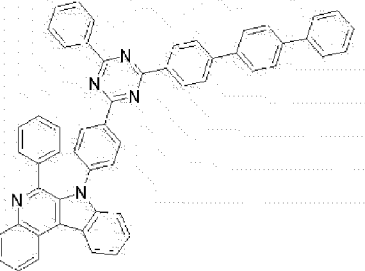
[287]

332			66%
336			66%
339			68%
343			67%

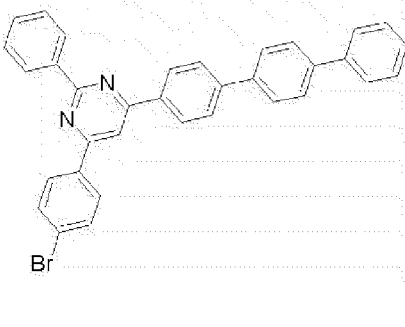
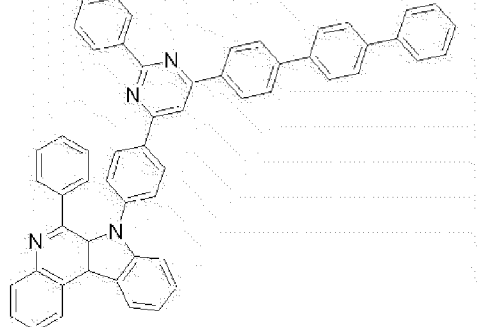
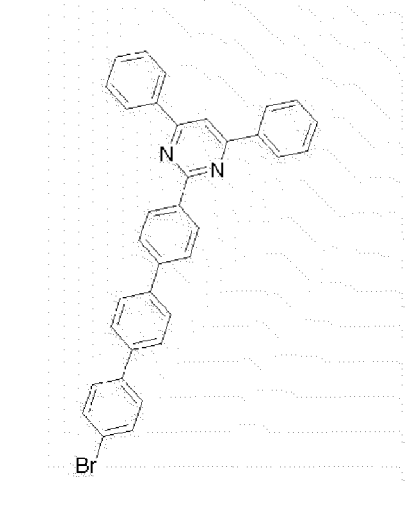
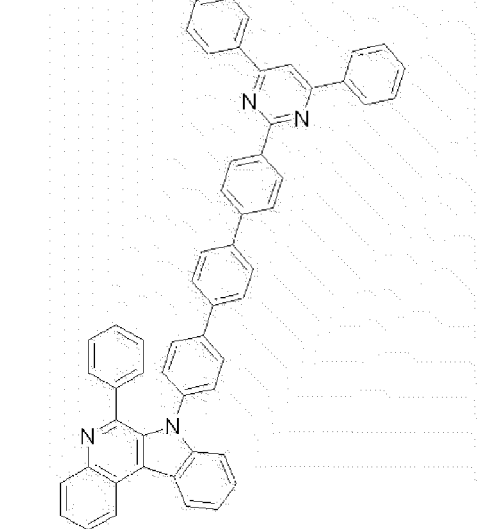
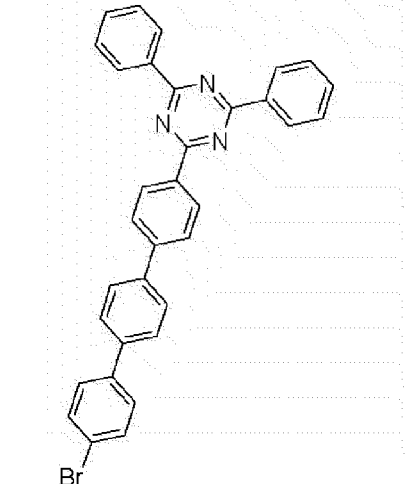
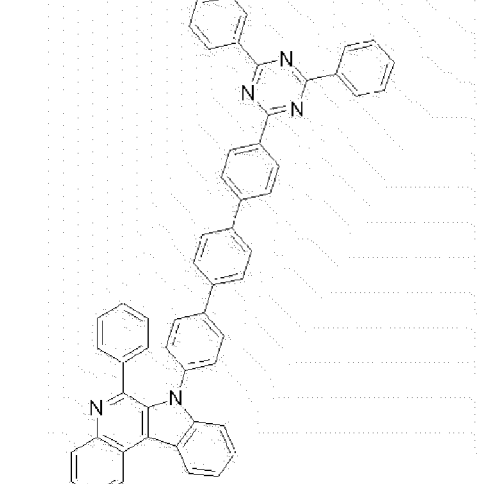
[288]

352			68%
353			67%
370			61%
372			60%

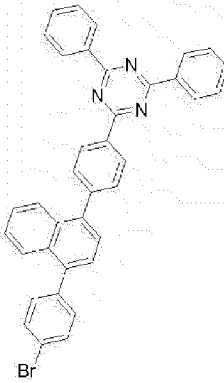
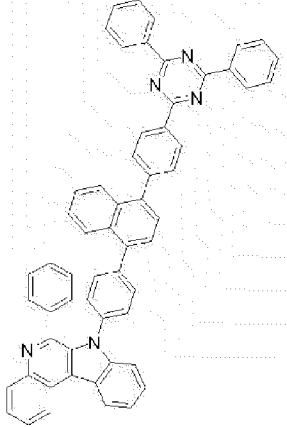
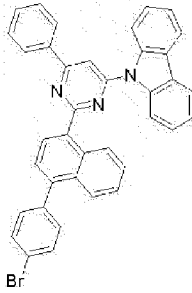
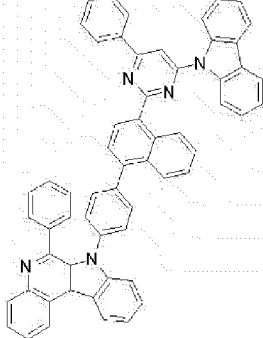
[289]

373	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. It features a benzimidazole core with a bromine atom on the benzene ring and a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative with a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	64%
374	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. It features a benzimidazole core with a bromine atom on the benzene ring and a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative with a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	63%
376	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. It features a benzimidazole core with a bromine atom on the benzene ring and a fluorenyl group attached to the imidazole ring.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative with a fluorenyl group attached to the imidazole ring.</p>	61%
379	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. It features a benzimidazole core with a bromine atom on the benzene ring and a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative with a biphenyl group attached to the imidazole ring.</p>	66%

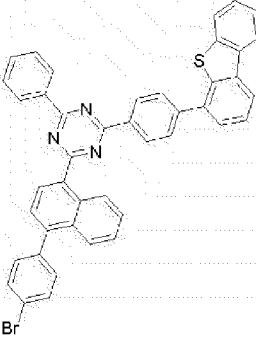
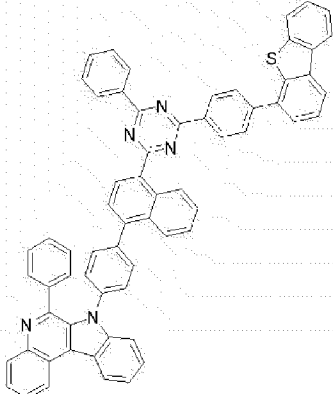
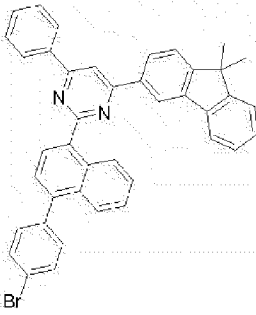
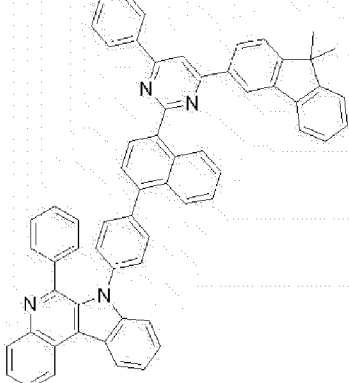
[290]

380	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position. A bromine atom is attached to the para position of the phenyl ring at the 4-position.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position.</p>	61%
381	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position. A bromine atom is attached to the para position of the phenyl ring at the 4-position.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position.</p>	64%
382	 <p>Chemical structure of a brominated benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position. A bromine atom is attached to the para position of the phenyl ring at the 4-position.</p>	 <p>Chemical structure of a benzimidazole derivative. The benzimidazole ring is substituted with a phenyl group at the 2-position and a 4-phenylphenyl group at the 5-position.</p>	61%

[291]

384			59%
397			59%

[292]

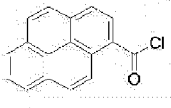
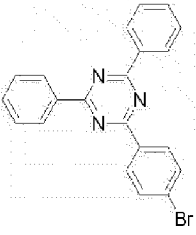
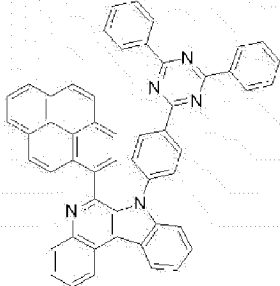
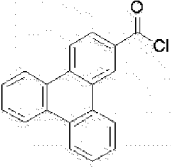
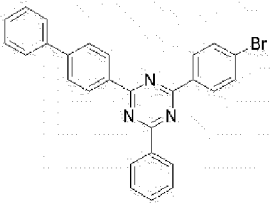
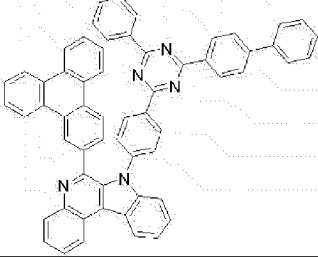
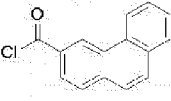
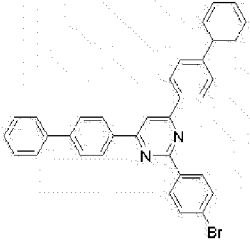
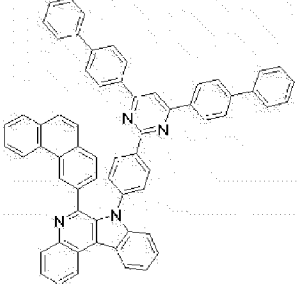
396			60%
398			61%

[293] 상기 제조예 4 에서 벤조일 클로라이드(benzoyl chloride) 대신 하기 표 11의 중간체 Q를 사용하고

2,4-다이([1,1']-바이페닐)-4-일)-6-(4-브로모페닐)피리미딘(2,4-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(4-bromophenyl)pyrimidine) 대신 하기 표 11의 중간체 R을 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[294]

[표 11]

화합물 번호	중간체 Q	중간체 R	화합물	수율
388				60%
391				55%
395				51%

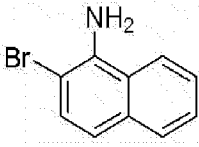
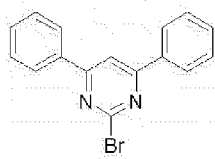
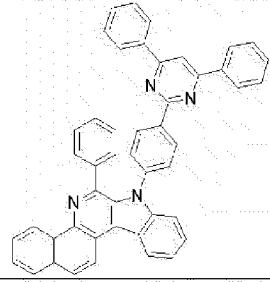
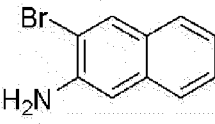
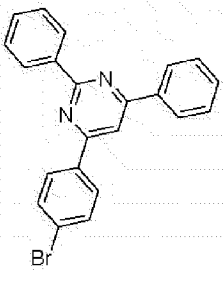
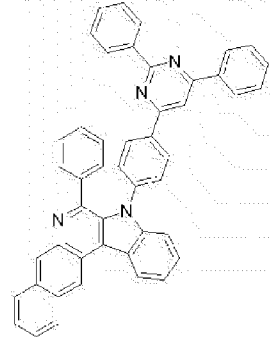
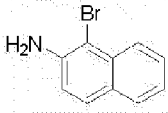
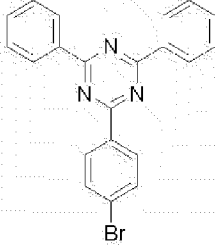
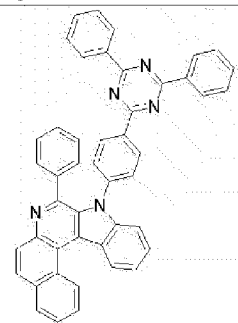
[295]

상기 제조예 4에서 2-브로모아닐린(2-bromoaniline) 대신 하기 표 12의 중간체 S를 사용하고

2,4-다이([1,1']-바이페닐)-4-일)-6-(4-브로모페닐)피리미딘(2,4-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(4-bromophenyl)pyrimidine) 대신 하기 표 12의 중간체 T을 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 목적화합물을 합성하였다.

[296]

[표 12]

화합물 번호	중간체 S	중간체 T	화합물	수율
363				50%
365				51%
367				52%

[297] 상기 표 1 내지 표 12에 기재된 화합물 이외의 나머지 화합물도 전술한 제조예에 기재된 방법과 마찬가지로 제조하였다.

[298] 하기 표 13 및 표 14는 합성된 화합물의 $^1\text{H NMR}$ 자료 및 FD-MS 자료이며, 하기 자료를 통하여, 목적하는 화합물이 합성되었음을 확인할 수 있다.

[299] [丑13]

NO	¹ H NMR(CDCl ₃ , 300Mz)
1	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(4H, d), 7.96~7.85(6H, m), 7.62~7.50(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
2	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42~8.30(5H, m), 7.94~7.87(6H, m), 7.62~7.50(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
4	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42~8.36(3H, m), 7.96~7.85(8H, m), 7.75(2H, d), 7.62~7.35(12H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
6	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 7.94~7.85(10H, m), 7.75(1H, d), 7.62~7.49(12H, m), 7.16(1H, t)
7	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 7.96(10H, m), 7.75(4H, d), 7.62~7.41(12H, m), 7.25(4H, m), 7.16(1H, t)
8	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(d, 1H), 8.30(4H, d), 8.23(1H, s), 7.94~7.75(14H, m), 7.62~7.41(12H, m), 7.16(1H, t)
16	δ= 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.29(1H, d), 8.23(1H, s), 7.94~7.85(7H, m), 7.62~7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
21	δ= 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(4H, d), 8.29(1H, d), 8.23(1H, s), 7.94~7.75(12H, m), 7.62~7.41(14H, m), 7.16(1H, t)
26	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.23(1H, s), 7.94~7.85(12H, m), 7.62~7.49(11H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
28	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.35~8.30(6H, m), 7.94~7.85(10H, m), 7.75(2H, d), 7.62~7.35(12H, m), 7.16(1H, t)
31	δ= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(4H, d), 8.23(1H, s), 7.96~7.85(12H, m), 7.75(4H, d), 7.62~7.41(12H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
33	δ= 9.18(2H, d), 8.14(2H, d), 8.69(2H, d), 8.55(2H, d), 8.42(1H, d), 7.94(2H, d), 7.85(4H, d), 7.74(2H, t), 7.62~7.50(5H, m), 7.35(1H, t), 7.25~7.16(7H, m)
35	δ= 8.55(1H, d), 8.42~8.33(8H, m), 7.94~7.85(4H, m), 7.73(1H, t), 7.62~7.50(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
37	δ= 8.55(1H, d), 8.42~8.33(4H, m), 8.23(1H, s), 7.94~7.85(8H, m), 7.73(1H, t), 7.62~7.49(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
39	δ= 8.55(1H, d), 8.42~8.30(7H, m), 8.23(1H, s), 7.94~7.85(7H, m), 7.75(2H, d), 7.73(1H, t), 7.62~7.35(12H, m), 7.16(1H, t)
41	δ= 8.55(1H, d), 8.42~8.33(4H, m), 7.96~7.85(8H, m), 7.75~7.73(5H, m), 7.62~7.35(12H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)

42	$\delta=8.55(1H, d), 8.42\sim 8.30(8H, m), 8.23(1H, s), 7.94\sim 7.75(13H, m), 7.62\sim 7.35(12H, m), 7.16(1H, t)$
45	$\delta= 8.69(2H, d), 8.51(2H, d), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 8.11(1H, d), 7.96(2H, d), 7.94(1H, d), 7.90(1H, d), 7.72\sim 7.50(13H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
59	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.28(1H, d), 8.11(1H, d), 8.03(1H, s), 7.96\sim 7.94(7H, m), 7.79\sim 7.41(23H, m), 7.16(1H, t)$
65	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(2H, d), 8.35(2H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.09\sim 7.85(10H, m), 7.62\sim 7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
66	$\delta= 8.79(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42\sim 8.30(6H, m), 8.15(1H, d), 7.96\sim 7.85(6H, m), 7.70\sim 7.50(13H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
68	$\delta= 8.79 (1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.33(2H, d), 8.30(1H, d), 8.23(1H, s), 8.15(1H, d), 7.96\sim 7.85(8H, m), 7.70\sim 7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
70	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.38(2H, d), 7.94\sim 7.85(8H, m), 7.75\sim 7.73(4H, m), 7.61\sim 7.35(14H, m), 7.16(1H, t)$
73	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.23(1H, s), 7.96\sim 7.85(10H, m), 7.75(2H, d), 7.73(1H, t), 7.62\sim 7.35(13H, m), 7.16(1H, t)$
74	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.38(1H, t), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 7.94\sim 7.87(7H, m), 7.75(2H, d), 7.73(1H, t), 7.62\sim 7.41(13H, m), 7.16(1H, t)$
77	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(2H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.19(1H, d), 7.96\sim 7.85(7H, m), 7.62\sim 7.50(10H, m), 7.35(2H, t), 7.20(1H, t), 7.16(2H, t)$
78	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.19(1H, d), 7.94\sim 7.85(11H, m), 7.62\sim 7.50(10H, m), 7.35(1H, t), 7.20\sim 7.16(3H, t)$
88	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.09(1H, d), 7.94\sim 7.78(9H, m), 7.62\sim 7.50(9H, m), 7.38(1H, t), 7.35(1H, t), 7.28(1H, t), 1.69(6H, s)$
93	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.35(2H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.09(1H, d), 7.94\sim 7.73(10H, m), 7.62\sim 7.50(10H, m), 7.38\sim 7.28(3H, m), 7.16(1H, t), 1.69(6H, s)$
96	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 7.96\sim 7.82(10H, m), 7.62\sim 7.50(8H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
100	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 7.96\sim 7.75(14H, m), 7.62\sim 7.35(9H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
101	$\delta= 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 7.94\sim 7.75(14H, m), 7.62\sim 7.35(10H,$

	m), 7.16(1H, t)
104	δ = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.27(1H, d), 8.05(1H, s), 7.96~7.85(9H, m), 7.70~7.50(12H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
105	δ = 9.27(1H, d), 8.85(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.15(1H, d), 7.96~7.85(7H, m), 7.75~7.50(12H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
108	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.04(3H, s), 7.96~7.85(6H, m), 7.75(4H, d), 7.62~7.35(15H, m), 7.16(1H, t)
115	δ = 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.45~8.42(2H, d), 8.30~8.20(5H, m), 7.94~7.85(10H, m), 7.62~7.35(14H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
117	δ = 8.93(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42~8.23(8H, m), 7.94~7.85(6H, m), 7.72(1H, d), 7.62~7.35(14H, m), 7.25(4H, m), 7.16(1H, t)
120	δ =8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.42(1H, d), 8.25(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94~7.85(10H, m), 7.75(4H, d), 7.73(2H, d), 7.62~7.35(16H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
131	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(4H, d), 8.06(1H, d), 7.94~7.84(5H, m), 7.62~7.46(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
132	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.35(2H, d), 8.23(1H, s), 8.06(1H, d), 7.94~7.84(7H, m), 7.62~7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
134	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.36(5H, m), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(8H, m), 7.65(2H, d), 7.50~7.49(7H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
135	δ = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.35(2H, d), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 7.94~7.87(10H, m), 7.65(2H, t), 7.55~7.49(7H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
137	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.36(3H, d), 8.19(2H, d), 7.96~7.85(10H, m), 7.75(2H, d), 7.65(2H, t), 7.50~7.35(8H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
139	δ = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(12H, m), 7.75(2H, d), 7.65(2H, t), 7.55~7.35(8H, m), 7.16(1H, t)
141	δ = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30~8.19(7H, m), 7.94~7.75(16H, m), 7.65(2H, t), 7.49~7.35(8H, m), 7.16(1H, t)
143	δ = 8.97(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42~8.36(5H, m), 8.24~8.12(4H, m), 7.94~7.79(5H, m), 7.65~7.49(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
148	δ = 8.97(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30~8.12(7H, m), 7.94~7.35(23H,

	m), 7.16(1H, t)
149	δ = 8.97(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.24~8.19(3H, d), 7.94~7.35(25H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)
152	δ = 8.80(1H, d), 8.71(1H, d), 8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(2H, d), 8.20(1H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(7H, m), 7.65~7.49(4H, m), 7.35(1H, t), 7.29(1H, d), 7.16(1H, t)
155	δ = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(14H, m), 7.65(2H, t), 7.55~7.49(7H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
156	δ = 8.71(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.33(2H, d), 8.30(2H, d), 8.20(1H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(7H, m), 7.65~7.49(6H, m), 7.35(1H, t), 7.29(2H, d), 7.16(1H, t)
157	δ = 8.71(2H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.33(2H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(11H, m), 7.65~7.49(6H, m), 7.35(1H, t), 7.29(2H, d), 7.16(1H, t)
158	δ = 8.71(2H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.33(4H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(9H, m), 7.73~7.49(8H, m), 7.35~7.29(3H, m), 7.16(1H, t)
159	δ = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.19(2H, d), 7.96~7.85(14H, m), 7.75(4H, d), 7.65(2H, t), 7.49~7.35(8H, m), 7.25~7.16(7H, m),
161	δ = 9.18(2H, d), 9.14(2H, s), 8.55(3H, d), 8.42(1H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(8H, m), 7.74~7.65(4H, d), 7.49(1H, t), 7.35(1H, t), 7.25~7.16(7H, m)
165	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.36(5H, m), 8.24(2H, d), 8.19(2H, d), 7.94~7.85(4H, m), 7.68~7.60(4H, m), 7.50(7H, t), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
168	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.36(3H, d), 8.24~8.19(4H, d), 7.96~7.85(6H, m), 7.75~7.60(6H, m), 7.50~7.35(8H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
169	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.30(5H, m), 8.23~8.19(4H, m), 7.94~7.65(13H, m), 7.50~7.35(8H, m), 7.16(1H, t)
187	δ = 8.55(2H, d), 8.51(1H, d), 8.36(2H, d), 8.24~8.11(6H, m), 7.99~7.90(9H, m), 7.77~7.60(9H, m), 7.50~7.35(9H, m), 7.16(1H, t)
192	δ = 8.55(1H, d), 8.35~7.91(18H, m), 7.75~7.65(5H, m), 7.50~7.25(11H, m), 7.16(1H, t)
195	δ = 8.55(2H, d), 8.35(2H, d), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 8.06~7.91(10H, m), 7.65~7.49(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
203	δ = 8.55(1H, d), 8.42~8.36(3H, d), 8.19(2H, d), 7.98~7.79(12H, m), 7.65(2H, t), 7.54~7.49(5H, m), 7.39(1H, t), 7.35(1H, t), 7.31(1H, t), 7.16(1H, t)

205	$\delta = 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.35(2H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 7.98\sim 7.82(10H, m), 7.69\sim 7.49(9H, m), 7.39\sim 7.25(5H, m), 7.16(1H, t)$
209	$\delta = 8.55(2H, d), 8.45\sim 8.36(4H, d), 8.19(2H, d), 7.94\sim 7.85(10H, m), 7.70\sim 7.49(9H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
212	$\delta = 8.55(2H, d), 8.45\sim 8.32(5H, m), 8.23(1H, s), 8.19(2H, d), 7.94\sim 7.85(11H, m), 7.73\sim 7.49(11H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
213	$\delta = 8.55(1H, d), 8.42(2H, d), 8.36(4H, d), 8.21(1H, d), 8.10(2H, t), 7.94\sim 7.80(10H, m), 7.69(1H, d), 7.55\sim 7.50(7H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
218	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.55(1H, d), 8.44(1H, s), 8.42\sim 8.36(3H, d), 8.17(1H, d), 7.96\sim 7.85(11H, m), 7.75\sim 7.62(6H, m), 7.50\sim 7.35(7H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, s)$
219	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.55(1H, d), 8.44\sim 8.30(6H, m), 8.23(1H, s), 8.17(1H, d), 7.94\sim 7.85(11H, m), 7.75\sim 7.62(6H, m), 7.50\sim 7.35(7H, m), 7.16(1H, d)$
222	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.55(1H, d), 8.44\sim 8.42(2H, d), 8.30(4H, d), 8.23(1H, s), 8.17(1H, d), 7.94\sim 7.63(21H, m), 7.49\sim 7.35(7H, m), 7.16(1H, t)$
228	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.55(1H, d), 8.44(1H, s), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.17(1H, d), 7.96\sim 7.85(14H, m), 7.75\sim 7.62(6H, m), 7.50\sim 7.35(7H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)$
229	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.55(1H, d), 8.44(1H, s), 8.42\sim 8.17(10H, m), 7.94\sim 7.85(9H, m), 7.75\sim 7.60(8H, m), 7.50\sim 7.35(8H, m), 7.16(1H, t)$
234	$\delta = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.36(2H, d), 8.19(2H, d), 8.06(1H, d), 7.96\sim 7.84(11H, m), 7.75(2H, d), 7.65(2H, t), 7.50\sim 7.35(10H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
236	$\delta = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.42(1H, d), 8.30(2H, d), 8.19(2H, d), 8.06(1H, d), 7.94\sim 7.85(13H, m), 7.75(2H, d), 7.65\sim 7.35(12H, m), 7.16(1H, t)$
237	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96\sim 7.94(4H, d), 7.85(1H, t), 7.70\sim 7.50(12H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
238	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.35(2H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94(4H, d), 7.70\sim 7.49(12H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
240	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 7.96\sim 7.94(6H, m), 7.85(1H, t), 7.70\sim 7.35(15H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
242	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.96\sim 7.85(9H, m), 7.70\sim 7.35(15H, m), 7.16(1H, t)$
248	$\delta = 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.35\sim 8.20(5H, m), 7.94\sim 7.85(5H, m),$

	7.62~7.50(14H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
250	δ = 8.97(2H, d), 8.89(1H, d), 8.55(1H, d), 8.36~8.29(3H, d), 8.20(1H, d), 7.94(4H, d), 7.85(1H, t), 7.70~7.35(17H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
251	δ = 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.35~8.20(7H, m), 7.94(2H, d), 7.85(2H, d), 7.75~7.35(17H, m), 7.16(1H, t)
253	δ = 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.29(1H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.94(7H, m), 7.70~7.35(19H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)
259	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94~7.85(11H, m), 7.70~7.49(12H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
263	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(11H, m), 7.70~7.41(17H, m), 7.25(6H, d), 7.16(1H, t)
264	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.30(4H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.96~7.41(28H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
267	δ = 8.55(1H, d), 8.38(1H, s), 8.36(4H, d), 8.33(2H, s), 8.20(1H, d), 7.94(2H, d), 7.85(1H, t), 7.70~7.50(13H, m), 7.35(1H, d), 7.16(1H, t)
270	δ = 8.55(1H, d), 8.38(1H, s), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96(4H, d), 7.70~7.35(16H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
273	δ = 8.55(1H, d), 8.38(1H, s), 8.33(3H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.94(7H, m), 7.70~7.35(18H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)
277	δ = 9.60(1H, d), 9.27(1H, s), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.30(3H, d), 8.20~8.15(2H, d), 7.96~7.85(7H, m), 7.70~7.50(15H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
278	δ = 9.60(1H, d), 9.27(1H, s), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.37~8.30(5H, m), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(9H, m), 7.70~7.50(15H, m), 7.35(1H, t), 7.25~7.16(5H, m)
282	δ = 9.60(1H, d), 9.27(1H, s), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.37~8.30(3H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(11H, m), 7.70~7.49(16H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
283	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 8.08(1H, d), 8.06(1H, d), 7.98~7.84(6H, m), 7.70~7.35(18H, m), 7.16(1H, t)
284	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 8.09(1H, d), 7.94~7.50(20H, m), 7.38~7.25(5H, m), 7.16(1H, t), 1.69(6H, s)
288	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.82(11H, m), 7.70~7.50(9H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)

290	$\delta = 8.69(1H, d), 8.55(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 8.12(1H, d), 8.02\sim 7.85(11H, m), 7.70\sim 7.49(10H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
292	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 7.96\sim 7.35(25H, m), 7.25(4H, d), 7.16(1H, t)$
293	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.38(1H, d), 8.20(1H, d), 7.95\sim 7.35(26H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
296	$\delta = 9.08(1H, d), 8.84(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.27\sim 8.20(2H, dd), 8.05(1H, s), 7.96\sim 7.85(10H, m), 7.70\sim 7.50(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
299	$\delta = 9.27(1H, s), 8.85(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55\sim 8.52(2H, d), 8.23\sim 8.15(3H, m), 7.96\sim 7.85(10H, m), 7.75\sim 7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
300	$\delta = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 8.04(3H, s), 7.96\sim 7.94(4H, d), 7.85(3H, t), 7.70\sim 7.35(20H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
303	$\delta = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.30\sim 8.20(6H, m), 8.06(1H, d), 7.95\sim 7.35(27H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
304	$\delta = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.38(2H, d), 8.20(1H, d), 8.06(1H, d), 7.94\sim 7.41(29H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
305	$\delta = 9.60(1H, d), 9.27(1H, s), 8.97(2H, d), 8.68(1H, d), 8.55(1H, d), 8.38\sim 8.30(7H, m), 8.20(1H, d), 7.94(3H, d), 7.85(1H, t), 7.73\sim 7.50(19H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)$
306	$\delta = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.35(2H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 8.08(1H, d), 8.06(1H, d), 7.98\sim 7.94(3H, d), 8.85\sim 8.84(2H, t), 7.74\sim 7.39(19H, m), 7.16(1H, t)$
308	$\delta = 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(3H, d), 8.06(1H, d), 7.96\sim 7.94(4H, m), 7.85(1H, d), 7.70\sim 7.50(13H, m), 7.39\sim 7.16(9H, m)$
313	$\delta = 8.55(1H, d), 8.35\sim 8.30(7H, m), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94(3H, d), 7.85(3H, d), 7.60\sim 7.35(17H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)$
321	$\delta = 8.55(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94\sim 7.85(12H, m), 7.70(1H, t), 7.55\sim 7.49(7H, m), 7.35(1H, t), 7.28(2H, t), 7.16(1H, t)$
324	$\delta = 8.55(1H, d), 8.30(2H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94\sim 7.85(13H, m), 7.75(2H, d), 7.70(1H, t), 7.55\sim 7.28(10H, m), 7.16(1H, t)$
325	$\delta = 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 7.96\sim 7.85(13H, m), 7.75(4H, d), 7.70(1H, t), 7.49\sim 7.28(14H, m), 7.16(1H, t)$
332	$\delta = 8.97(1H, d), 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.28\sim 8.20(2H, d), 8.12(1H, d),$

	7.96~7.70(11H, m), 7.50~7.16(15H, m)
336	δ = 8.97(1H, d), 8.55(1H, d), 8.30~8.20(7H, m), 8.12(1H, d), 7.94~7.70(15H, m), 7.59~7.28(12H, m), 7.16(1H, t)
339	δ = 8.55(1H, d), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(11H, m), 7.70(1H, t), 7.50(7H, m), 7.35~7.28(5H, m), 7.16(1H, t)
343	δ = 8.55(1H, d), 8.35~8.30(6H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94~7.86(13H, m), 7.75(3H, t), 7.50~7.28(10H, m), 7.16(1H, t)
345	δ = 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(15H, m), 7.75(4H, d), 7.70(1H, t), 7.49~7.16(17H, m)
352	δ = 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.24~8.20(3H, m), 7.96~7.85(7H, m), 7.75(5H, d), 7.50~7.28(12H, m), 7.16(1H, t)
353	δ = 8.55(1H, d), 8.35~8.30(4H, d), 8.23~8.20(3H, m), 7.94~7.75(13H, m), 7.50~7.28(10H, m), 7.16(1H, t)
363	δ = 8.55(1H, d), 8.51(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 8.11(1H, d), 7.94~7.86(12H, m), 7.72~7.67(2H, t), 7.55~7.49(7H, m), 7.35~7.28(3H, t), 7.16(1H, t)
365	δ = 8.55(1H, d), 8.35~8.23(4H, m), 8.11(1H, d), 8.03(1H, s), 7.94~7.86(9H, m), 7.75~7.69(3H, m), 7.55~7.49(7H, m), 7.35~7.28(3H, m), 7.16(1H, t)
367	δ = 8.55(1H, d), 8.44(1H, d), 8.36(4H, d), 8.06~7.86(10H, m), 7.61~7.50(9H, m), 7.35~7.28(3H, m), 7.16(1H, t)
370	δ = 8.80(1H, d), 8.71(1H, d), 8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.30(2H, d), 8.20(2H, d), 7.94~7.85(8H, m), 7.70(1, t), 7.56~7.49(2H, t), 7.35~7.28(4H, d), 7.16(1H, t)
372	δ = 8.71(2H, d), 8.55(1H, d), 8.33~8.30(4H, d), 8.20(2H, d), 7.94~7.85(8H, m), 7.70(1H, t), 7.55~7.49(4H, m), 7.35~7.29(5H, m), 7.16(1H, t)
373	δ = 8.71~8.69(4H, d), 8.55(1H, d), 8.33(2H, d), 8.20(2H, d), 7.94~7.86(12H, m), 7.70(1H, t), 7.55~7.49(4H, m), 7.35~7.28(5H, m), 7.16(1H, t)
374	δ = 8.71(2H, d), 8.55(1H, d), 8.33(4H, d), 8.20(2H, d), 7.94~7.85(10H, m), 7.73~7.70(2H, t), 7.61~7.49(5H, m), 7.35~7.28(5H, m), 7.16(1H, t)
376	δ = 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 8.09(1H, d), 7.94~7.70(17H, m), 7.61~7.28(15H, m), 7.16(1H, t)
379	δ = 8.55(1H, d), 8.36(2H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.86(11H, m), 7.75~7.70(3H, t), 7.50~7.16(17H, m)
380	δ = 8.55(1H, d), 8.35~8.30(4H, d), 8.23~8.20(3H, d), 7.94~7.85(11H, m), 7.75~7.70(3H, t), 7.50~7.28(14H, m), 7.16(1H, t)

381	δ = 8.55(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 7.94~7.85(15H, m), 7.70(1H, t), 7.55~7.49(7H, m), 7.49~7.25(9H, m), 7.16(1H, t)
382	δ = 8.55(1H, d), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(11H, m), 7.70(1H, t), 7.50(7H, m), 7.25~7.16(10H, m)
384	δ = 9.00(2H, d), 8.55(1H, d), 8.36(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(11H, m), 7.70(1H, t), 7.61(2H, d), 7.50~7.49(7H, m), 7.39~7.28(7H, m), 7.16(1H, t)
388	δ = 8.55~8.52(3H, d), 8.36~8.31(5H, d), 8.20(1H, d), 8.08~8.04(4H, m), 7.94~7.85(8H, m), 7.70(2H, d), 7.50(6H, s), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)
391	δ = 9.66(1H, s), 8.79(1H, d), 8.54(2H, d), 8.36~8.33(4H, d), 8.20(1H, d), 7.96~7.85(9H, m), 7.75~7.64(7H, m), 7.50~7.35(8H, m), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
395	δ = 9.66(1H, s), 8.85(1H, d), 8.55(3H, d), 8.30~8.20(6H, m), 7.94~7.63(21H, m), 7.49~7.35(7H, m), 7.16(1H, t)
396	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.45(1H, d), 8.36~8.32(3H, d), 8.20(1H, d), 8.06(1H, d), 7.96~7.85(13H, m), 7.70(2H, t), 7.52~7.46(8H, m), 7.35~7.25(5H, m), 7.16(1H, t)
397	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.20(1H, d), 8.06(1H, d), 7.94~7.84(13H, m), 7.70(1H, t), 7.55~7.49(8H, m), 7.35~7.16(8H, m)
398	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.55(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 8.18(1H, s), 8.06(1H, d), 7.94~7.86(13H, m), 7.74~7.64(3H, d), 7.55~7.28(12H, m), 7.16(1H, t)
399	δ = 8.69(2H, d), 8.55(2H, d), 8.36(4H, d), 8.06~7.94(6H, m), 7.85(2H, d), 7.63~7.50(13H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
400	δ = 9.02(1H, d), 8.95(1H, d), 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.35(2H, d), 8.23(1H, s), 8.28(1H, d), 8.11(1H, d), 8.03(1H, s), 8.06(1H, d), 7.94(1H, d), 7.84(1H, d), 7.75~7.46(16H, m), 7.35(1H, t), 7.25(2H, d), 7.16(1H, t)
401	δ = 8.69(2H, d), 8.55(1H, d), 8.51(1H, d), 8.23(1H, s), 8.20(1H, d), 8.11(1H, d), 7.96~7.90(8H, m), 7.72~7.49(13H, m), 7.35(1H, t), 7.16(1H, t)

[300] [표14]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	2	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
3	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	4	m/z= 677.81(C48H31N5=677.23)
5	m/z= 676.81 (C49H32N4=676.26)	6	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
7	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	8	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
9	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	10	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)
11	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)	12	m/z= 675.83 (C50H33N3=675.26)
13	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)	14	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)
15	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	16	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
17	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)	18	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
19	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	20	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)
21	m/z = 802.98 (C59H38N4=802.31)	22	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)
23	m/z= 620.69 (C43H29N2OP=620.20)	24	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
25	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	26	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
27	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	28	m/z= 752.91 (C55H36N4=752.29)
29	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	30	m/z= 830.00 (C60H39N5=829.31)
31	m/z= 829.01	32	m/z= 829.01

	(C61H40N4=828.32)		(C61H40N4=828.32)
33	m/z= 677/81 (C48H31N5=677.25)	34	m/z= 646.73 (C45H31N2OP=646.21)
35	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	36	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
37	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	38	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
39	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	40	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
41	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	42	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
43	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	44	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
45	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	46	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
47	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	48	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
49	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	50	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
51	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	52	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.30)
53	m/z= 651.77 (c46H29N5= 651.24)	54	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
55	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	56	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
57	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	58	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
59	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	60	m/z= 802.91 (C59H38N4=802.31)
61	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	62	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
63	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	64	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)
65	m/z= 802.98	66	m/z=751.89

	(C59H38N4=802.31)		(C54H33N5=751.27)
67	m/z= 750.90 (C55H34N4=750.27)	68	m/z= 750.90 (C55H34N4=750.27)
69	m/z= 750.90 (C55H34N4=750.27)	70	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
71	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	72	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
73	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	74	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
75	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	76	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
77	m/z= 690.81 (C48H30N6=690.25)	78	m/z= 766.90 (C54H34N6=766.28)
79	m/z= 766.90 (C54H32N6=766.28)	80	m/z= 689.82 (C49H31N5=689.25)
81	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)	82	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)
83	m/z= 689.82 (C49H31N5=689.25)	84	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)
85	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)	86	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)
87	m/z= 765.92 (C55H35N5=765.28)	88	m/z= 717.87 (C51H35N5=717.28)
89	m/z= 716.88 (C52H36N4=716.29)	90	m/z= 716.88 (C52H36N4=716.29)
91	m/z= 716.88 (C52H36N4=716.29)	92	m/z= 793.97 (C57H39N5=793.32)
93	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)	94	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)
95	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)	96	m/z= 626.72 (C43H26N6=626.22)
97	m/z= 625.73 (C44H27N5=625.22)	98	m/z= 625.73 (C44H27N5=625.22)
99	m/z= 625.73	100	m/z= 702.82

	(C44H27N5=625.22)		(C49H30N6=702.25)
101	m/z= 702.82 (C49H30N6=702.25)	102	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)
103	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	104	m/z= 777.93 (C56.35N5=777.28)
105	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	106	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)
107	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)	108	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
109	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	110	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)
111	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	112	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
113	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	114	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
115	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)	116	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)
117	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)	118	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
119	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)	120	m/z= 879.07 (C65H42N4=878.34)
121	m/z= 651.77 (C46H29H5=651.24)	122	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
123	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	124	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
125	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	126	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
127	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	128	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
129	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	130	m/z= 620.69 (C43H29N2OP=620.20)
131	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)	132	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
133	m/z= 726.88	134	m/z= 601.71

	(C53H34N4=726.27)		(C42H27N5=601.22)
135	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	136	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
137	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	138	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
139	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	140	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
141	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	142	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)
143	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	144	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
145	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	146	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
147	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	148	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
149	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	150	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
151	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	152	m/z=548.69 (C39H24N4=548.20)
153	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	154	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
155	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	156	m/z= 624.74(C45H28N4=624.23)
157	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)	158	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)
159	m/z= 830.00 (C60H39N5=829.32)	160	m/z= 829.01 (C61H40N4=828.32)
161	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	162	m/z= 675.83 (C50H33N3=675.26)
163	m/z= 751.93 (C56H37N3=751.29)	164	m/z= 646.73 (C45H31N2OP=646.21)
165	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	166	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
167	m/z= 600.72	168	m/z= 677.81

	(C43H28N4=600.23)		(C48H31N5=677.25)
169	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	170	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
171	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	172	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
173	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	174	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)
175	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)	176	m/z= 675.83 (C50H33N3=675.26)
177	m/z= 675.83 (C50H33N3=675.26)	178	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
179	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	180	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
181	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	182	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
183	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	184	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
185	m/z= 816.96 (C58H36N6=816.30)	186	m/z= 816.96 (C58H36N6=816.30)
187	m/z= 893.06 (C64H40N6=892.33)	188	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)
189	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	190	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
191	m/z= 817.95 (C58H35N5O=817.28)	192	m/z= 816.96 (C59H36N4O=816.28)
193	m/z= 816.96 (C59H36N4O=816.28)	194	m/a= 651.77 (C46H29N5=651.24)
195	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	196	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
197	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)	198	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
199	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	200	m/z= 834.01 (C58H35N5S=833.26)
201	m/z= 833.02	202	m/a= 756.92

	(C59H36N4S=832.26)		(C53H32N4S=756.23)
203	m/z= 691.79 (C48H29N5O=691.23)	204	m/z= 691.79 (C48H29N4O=691.23)
205	m/z= 766.90 (C55H34N4O=766.27)	206	m/z= 766.90 (C55H34N4O=766.27)
207	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	208	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)
209	m/z= 707.85 (C48H29N5S=707.21)	210	m/z= 706.86 (C49H30N4S=706.21)
211	m/z= 782.96 (C55H34N4S=782.25)	212	m/z= 782.96 (C55H34N4S=782.25)
213	m/z= 725.85 (C52H31N5=725.25)	214	m/z= 724.86 (C53H32N4=724.26)
215	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	216	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)
217	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)	218	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)
219	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)	220	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)
221	m/z= 854.02 (C62H39N5=853.32)	222	m/z= 853.04 (C63H40N4=852.32)
223	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	224	m/z= 670.75 (C47H31N2OP=670.21)
225	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)	226	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)
227	m/z= 827.00 (C61H38N4=826.31)	228	m/z= 854.02 (C62H39N5=853.32)
229	m/z= 853.04 (C63H40N4=852.32)	230	m/z= 903.10 (C67H42N4=902.34)
231	m/z= 854.02 (C62H39N5=853.32)	232	m/z= 853.04 (C63H40N4=852.32)
233	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)	234	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)
235	m/z= 802.98	236	m/z= 802.98

	(C59H38N4=802.31)		(C59H38N4=802.31)
237	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	238	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
239	m/z= (600.72 (C43H28N4=600.23)	240	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
241	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	242	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
243	m/z= 753.90 (C54H35N4=753.28)	244	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
245	m/z= 601.71 (C42H27N4=601.22)	246	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
247	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	248	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
249	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	250	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
251	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	252	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
253	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	254	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
255	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	256	m/z= 620.69 (C43H29N2OP=620.20)
257	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	258	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
259	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	260	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
261	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	262	m/z= 752.29 (C55H36N4=752.29)
263	m/z= 830.00 (C60H39N5=829.32)	264	m/z= 829.01 (C61H40N4=828.32)
265	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	266	m/z= 646.73 (C45H31N2OP=646.21)
267	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	268	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
269	m/z= 600.72	270	m/z= 677.81

	(C43H28N4=600.23)		(C48H31N5=677.25)
271	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	272	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
273	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	274	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
275	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	276	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
277	m/z= 827.99 (C60H37N5=827.30)	278	m/z= 904.08 (C66H41N5=903.33)
279	m/z= 904.08 (C66H41N5=903.33)	280	m/z= 827.00 (C61H38N4=826.31)
281	m/z= 903.10 (C67H42N4=902.32)	282	m/z= 903.10 (C67H42N4=902.23)
283	m/z= 817.95 (C58H35N5O=817.28)	284	m/z= 793.97 (C57H39N5=793.32)
285	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)	286	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)
287	m/z= 792.98 (C58H40N4=792.32)	288	m/z= 702.82 (C49H30N6=702.25)
289	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	290	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)
291	m/z= 701.83 (C50H31N5=701.25)	292	m/z= 778.91 (C55H34N6=778.28)
293	m/z= 778.91 (C55H34N6=778.28)	294	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)
295	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)	296	m/z= 854.02 (C62H39N5=853.32)
297	m/z= 777.93 (C56H35N5=777.28)	298	m/z= 853.04 (C63H40N4=852.32)
299	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)	300	m/z= 830.00 (C60H39N5=829.32)
301	m/z= 829.01 (C61H40N4=828.32)	302	m/z= 880.06 (C64H41N5=879.33)
303	m/z= 879.07	304	m/z= 880.06

	(C65H42N4=878.34)		(C64H41N5=879.33)
305	m/z= 878.05 (C64H39N5=877.32)	306	m/z= 816.96 (C59H36N4O=816.28)
307	m/z= 893.06 (C65H40N4O=829.32)	308	m/z= 894.05 (C64H39N5O=893.31)
309	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	310	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
311	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	312	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
313	m/z= 752.92 (Cm55H36N4=752.29)	314	m/z= 752.92 (c55H36N4=752.29)
315	m/z= 753.90 C(54H35N5=753.28)	316	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
317	m/z= 677.82 (C48H31N5=677.25)	318	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
319	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	320	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
321	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	322	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
323	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	324	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
325	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	326	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
327	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	328	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
329	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	330	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
331	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24).	332	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)
333	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	334	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)
335	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)	336	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)
337	m/z= 651.77	338	m/z= 620.69

	(C46H29N5=651.24)		(C43H29N2OP=620.20)
339	m/z= 677.81 (C548H31N5=677.25)	340	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
341	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	342	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
343	m/z= 752.92 (C55H36NN4=752.29)	344	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
345	m/z= 830.00 (C60H39N5=829.32)	346	m/z= 829.01 (C61H40N4=828.32)
347	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	348	m/z= 646.73 (C45H31N2OP=646.21)
349	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	350	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)
351	m/z= 600.72 (C43H28N4=600.23)	352	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)
353	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)	354	m/z= 676.82 (C49H32N4=676.26)
355	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)	356	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
357	m/z= 601.71 (C42H27N5=601.22)	358	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)
359	m/z= 599.73 (C44H29N3=599.23)	360	m/z= 570.63 (C39H27N2OP=570.18)
361	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	362	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
363	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	364	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)
365	m/z= 650.78 (C47H30N4=6050.24)	366	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
367	m/z= 651.77 (C46H29N5=651.24)	368	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)
369	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)	370	m/z= 548.64 (C39H24N4=548.20)
371	m/z= 624.74	372	m/z= 624.74

	(C45H28N4=624.23)		(C45H28N4=624.23)
373	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)	374	m/z= 700.84 (C51H32N4=700.26)
375	m/z= 760.94 (C58H36N2=760.28)	376	m/z= 760.94 (C58H36N2=760.28)
377	m/z= 811.00 (C62H38N2=810.30)	378	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
379	m/z= 853.90 (C54H35N5=753.28)	380	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)
381	m/z= 752.92 (C55H36N4=752.29)	382	m/z= 753.90 (C54H35N5=753.28)
383	m/z= 802.98 (C59H38N4=802.31)	384	m/z= 803.96 (C58H37N5=803.30)
385	m/z= 677.81 (C48H31N5=677.25)	386	m/z= 725.89 (C54H35N3=725.28)
387	m/z= 725.89 (C54H35N3=725.28)	388	m/z= 725.85 (C52H31N5=725.25)
389	m/z= 726.88 (C53H34N4=726.27)	390	m/z= 724.86 (C53H32N4=724.26)
391	m/z= 827.99 (C60H37N5=827.30)	392	m/z= 827.00 (C61H38N4=826.31)
393	m/z= 827.00 (C61H38N4=826.31)	394	m/z= 854.02 (C62H39N5=853.32)
395	m/z= 853.04 (C63H40N4=852.32)	396	m/z= 910.11 (C64H39N5S=909.29)
397	m/z= 815.98 (C59H37N5=815.30)	398	m/z= 843.04 (C62H42N4=842.34)
399	m/z= 727.87 (C52H33N5=727.27)	400	m/z= 776.94 (C57H36N4=776.29)
401	m/z= 650.78 (C47H30N4=650.24)		

[301] <실험예 1> 유기 발광 소자의 제작

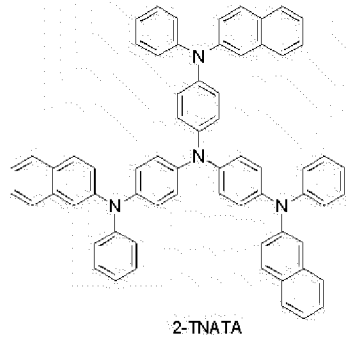
[302] 1) 유기 발광 소자의 제작

[303] OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막을

트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 각 5분간 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

- [304] 다음으로 진공 증착 장비의 기판 폴더에 ITO 기판을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 하기 4,4',4"-트리스(N,N-(2-나프틸)-페닐아미노)트리페닐 아민 (4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenyl amine: 2-TNATA)을 넣었다.

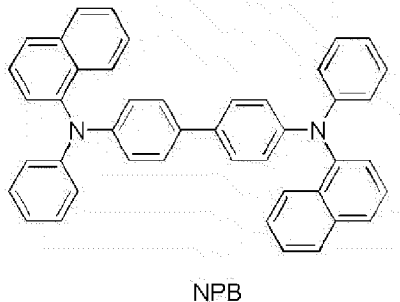
[305]



- [306] 이어서 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 600Å 두께의 정공 주입층을 증착하였다.

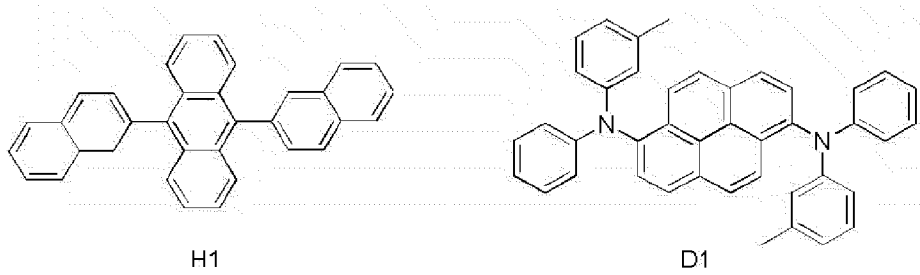
- [307] 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 하기 N,N'-비스(α-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(N,N'-bis(α-naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine: NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공 주입층 위에 300Å 두께의 정공 수송층을 증착하였다.

[308]



- [309] 이와 같이 정공 주입층 및 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층으로서 다음과 같은 구조의 청색 발광 재료를 증착시켰다. 구체적으로, 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 청색 발광 호스트 재료인 H1을 200Å 두께로 진공 증착시키고 그 위에 청색 발광 도판트 재료인 D1을 호스트 재료 대비 5% 진공 증착시켰다.

[310]



[311] 이어서 전자 수송층으로서 하기 표 15에 기재된 화합물 중 하나를 300Å 두께로 증착하였다.

[312] 전자 주입층으로 리튬 플루오라이드(lithium fluoride: LiF)를 10Å 두께로 증착하였고 Al 음극을 1,000Å의 두께로 하여 OLED 소자를 제작하였다.

[313] 한편, OLED 소자 제작에 필요한 모든 유기 화합물은 재료 별로 각각 10^{-6} ~ 10^{-8} torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 제작에 사용하였다

[314] 본 발명에 따라 제조된 청색 유기 발광 소자의 구동전압, 발광효율, 색좌표(CIE), 수명을 측정한 결과는 표 15와 같았다.

[315] [표15]

	화합물	구동전압(V)	발광효율(cd/A)	CIE(x, y)	수명(T95)
비교예 1	E1	5.70	6.00	(0.134, 0.102)	20
비교예 2	A	5.33	4.21	(0.134, 0.100)	12
비교예 3	B	5.31	4.10	(0.134, 0.100)	8
비교예 4	C	5.26	4.98	(0.134, 0.100)	9
실시예 1	1	5.45	6.21	(0.134, 0.101)	37
실시예 2	2	5.44	6.22	(0.134, 0.102)	34
실시예 3	4	5.62	5.95	(0.134, 0.103)	42
실시예 4	6	4.98	6.44	(0.134, 0.100)	40
실시예 5	7	5.62	6.38	(0.134, 0.100)	35
실시예 6	8	4.72	6.20	(0.134, 0.102)	48
실시예 7	16	5.45	6.44	(0.134, 0.103)	33
실시예 8	21	5.44	6.34	(0.134, 0.102)	36
실시예 9	26	5.62	6.20	(0.134, 0.101)	39
실시예 10	28	5.40	6.12	(0.134, 0.103)	44
실시예 11	31	5.60	6.21	(0.134, 0.102)	43
실시예 12	33	5.45	6.22	(0.134, 0.101)	37
실시예 13	35	4.98	6.38	(0.134, 0.101)	42
실시예 14	37	5.62	6.20	(0.134, 0.100)	45
실시예 15	39	4.72	6.12	(0.134, 0.100)	43
실시예 16	41	4.91	6.21	(0.134, 0.101)	41
실시예 17	42	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 18	45	5.62	5.95	(0.134, 0.100)	33
실시예 19	59	5.44	6.13	(0.134, 0.102)	25
실시예 20	65	5.38	6.38	(0.134, 0.101)	39
실시예 21	66	5.38	6.20	(0.134, 0.103)	40
실시예 22	68	5.39	6.25	(0.134, 0.102)	41
실시예 23	70	4.96	6.21	(0.134, 0.101)	37
실시예 24	73	4.91	6.22	(0.134, 0.102)	33

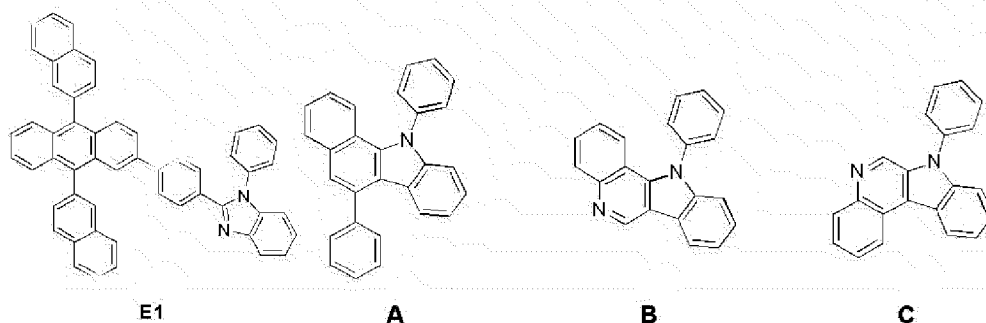
실시예 25	74	4.91	6.12	(0.134, 0.101)	42
실시예 26	77	4.98	6.51	(0.134, 0.101)	39
실시예 27	78	5.62	6.21	(0.134, 0.100)	41
실시예 28	88	5.39	5.95	(0.134, 0.101)	34
실시예 29	93	5.38	5.85	(0.134, 0.101)	35
실시예 30	96	5.38	6.38	(0.134, 0.101)	39
실시예 31	100	5.38	6.20	(0.134, 0.103)	40
실시예 32	101	5.39	6.42	(0.134, 0.102)	43
실시예 33	104	4.96	6.21	(0.134, 0.101)	37
실시예 34	105	4.91	6.22	(0.134, 0.102)	33
실시예 35	108	4.91	6.12	(0.134, 0.101)	37
실시예 36	115	5.38	6.38	(0.134, 0.101)	39
실시예 37	117	5.38	6.20	(0.134, 0.103)	40
실시예 38	120	5.39	6.62	(0.134, 0.102)	43
실시예 39	131	4.96	6.21	(0.134, 0.101)	37
실시예 40	132	4.91	6.22	(0.134, 0.102)	33
실시예 41	134	4.91	6.12	(0.134, 0.101)	42
실시예 42	135	4.98	6.51	(0.134, 0.101)	39
실시예 43	137	5.62	6.21	(0.134, 0.100)	41
실시예 44	139	5.39	5.95	(0.134, 0.101)	34
실시예 45	141	5.10	6.88	(0.134, 0.100)	41
실시예 46	143	5.38	6.38	(0.134, 0.101)	39
실시예 47	148	5.38	6.20	(0.134, 0.103)	40
실시예 48	149	5.11	6.62	(0.134, 0.102)	43
실시예 49	155	4.95	6.22	(0.134, 0.100)	41
실시예 50	157	4.98	6.92	(0.134, 0.100)	40
실시예 51	159	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	39
실시예 52	161	4.75	6.53	(0.134, 0.102)	40
실시예 53	165	4.72	6.35	(0.134, 0.102)	42
실시예 54	168	4.91	6.93	(0.134, 0.100)	45
실시예 55	169	4.93	6.95	(0.134, 0.100)	40

실시예 56	187	4.98	6.21	(0.134, 0.100)	40
실시예 57	192	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	34
실시예 58	195	5.31	6.53	(0.134, 0.102)	35
실시예 59	203	4.79	6.55	(0.134, 0.102)	48
실시예 60	205	5.40	6.13	(0.134, 0.101)	39
실시예 61	209	5.44	6.04	(0.134, 0.100)	41
실시예 62	212	5.39	6.01	(0.134, 0.101)	34
실시예 63	213	4.96	6.88	(0.134, 0.100)	45
실시예 64	218	4.95	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 65	219	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 66	222	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	33
실시예 67	228	4.75	6.53	(0.134, 0.102)	40
실시예 68	229	5.40	6.12	(0.134, 0.101)	39
실시예 69	234	5.44	6.21	(0.134, 0.100)	41
실시예 70	236	5.39	6.20	(0.134, 0.101)	36
실시예 71	237	5.39	6.88	(0.134, 0.100)	45
실시예 72	238	5.21	6.93	(0.134, 0.100)	43
실시예 73	240	5.13	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 74	242	5.05	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 75	248	4.91	5.98	(0.134, 0.100)	33
실시예 76	250	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 77	251	5.40	6.12	(0.134, 0.101)	39
실시예 78	253	5.43	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 79	259	5.33	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 80	263	4.91	6.98	(0.134, 0.100)	43
실시예 81	264	4.91	6.12	(0.134, 0.100)	35
실시예 82	267	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 83	270	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	38
실시예 84	273	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 85	277	4.72	6.33	(0.134, 0.102)	41
실시예 86	278	4.63	6.53	(0.134, 0.102)	48

실시예 87	282	4.91	6.82	(0.134, 0.100)	43
실시예 88	283	4.99	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 89	284	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 90	288	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	33
실시예 91	290	5.43	6.53	(0.134, 0.102)	41
실시예 92	292	4.88	6.89	(0.134, 0.102)	42
실시예 93	293	5.40	6.12	(0.134, 0.101)	39
실시예 94	296	5.41	5.89	(0.134, 0.100)	41
실시예 95	299	5.39	6.01	(0.134, 0.101)	32
실시예 96	300	4.63	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 97	303	4.91	6.82	(0.134, 0.100)	43
실시예 98	304	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	38
실시예 99	305	4.91	6.78	(0.134, 0.100)	43
실시예 100	306	4.90	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 101	308	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 102	313	5.62	5.98	(0.134, 0.100)	33
실시예 103	321	5.21	6.03	(0.134, 0.101)	33
실시예 104	324	5.39	6.01	(0.134, 0.101)	32
실시예 105	325	5.33	6.04	(0.134, 0.101)	33
실시예 106	332	4.91	6.93	(0.134, 0.100)	43
실시예 107	336	4.77	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 108	339	4.98	6.22	(0.134, 0.100)	40
실시예 109	343	5.03	5.98	(0.134, 0.100)	39
실시예 110	345	4.71	6.51	(0.134, 0.102)	41
실시예 111	352	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	48
실시예 112	353	4.74	6.59	(0.134, 0.102)	45
실시예 113	363	5.42	6.13	(0.134, 0.101)	39
실시예 114	365	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	38
실시예 115	367	4.91	6.78	(0.134, 0.100)	43
실시예 116	370	5.44	5.89	(0.134, 0.100)	41
실시예 117	372	5.36	6.01	(0.134, 0.101)	32

실시예 118	373	4.96	6.82	(0.134, 0.100)	45
실시예 119	374	4.91	6.93	(0.134, 0.100)	43
실시예 120	376	4.95	6.95	(0.134, 0.100)	41
실시예 121	379	5.34	6.11	(0.134, 0.101)	38
실시예 122	380	4.86	6.76	(0.134, 0.100)	45
실시예 123	381	4.94	6.73	(0.134, 0.102)	42
실시예 124	382	4.91	6.55	(0.134, 0.100)	46
실시예 125	384	5.31	6.29	(0.134, 0.100)	42
실시예 126	388	5.22	6.11	(0.134, 0.100)	35
실시예 127	391	5.33	6.24	(0.134, 0.102)	41
실시예 128	395	5.31	6.57	(0.134, 0.102)	46
실시예 129	396	4.72	6.53	(0.134, 0.102)	35
실시예 130	397	4.79	6.55	(0.134, 0.102)	48
실시예 131	398	5.40	6.13	(0.134, 0.101)	39
실시예 132	399	5.12	5.89	(0.134, 0.100)	41
실시예 133	400	5.31	6.01	(0.134, 0.101)	34
실시예 134	401	5.11	6.88	(0.134, 0.100)	45

[316]



[317] 상기 표 15의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 청색 유기 발광 소자의 전자 수송층 재료를 이용한 유기 발광 소자는 비교예 1에 비해 구동 전압이 낮고, 발광효율 및 수명이 현저히 개선되었다.

[318] 또한 비교예 2 내지 비교예 4에 비하여 발광 효율과 수명이 더 뛰어난 것을 확인할 수 있다. 특히, 상기 비교예 3 및 4의 화합물 B 및 C는 본원의 코어구조에 치환기가 하나 치환된 것을 알 수 있다. 치환기가 하나 치환되는 경우 본원 화학식 1의 헤테로고리 화합물과 같이 2 치환된 화합물 보다 열적 안정성이 떨어져 수명이 특히 저하됨을 확인할 수 있었다.

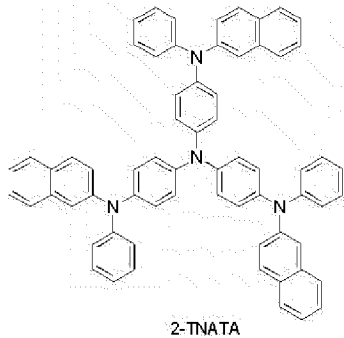
[319] <실험예 2> 유기 발광 소자의 제작

[320] 1) 유기 발광 소자의 제작

[321] OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막을 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 각 5분간 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

[322] 다음으로 진공 증착 장비의 기판 폴더에 ITO 기판을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 하기 4,4',4''-트리스(N,N-(2-나프틸)-페닐아미노)트리페닐 아민 (4,4',4''-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenyl amine: 2-TNATA)을 넣었다.

[323]

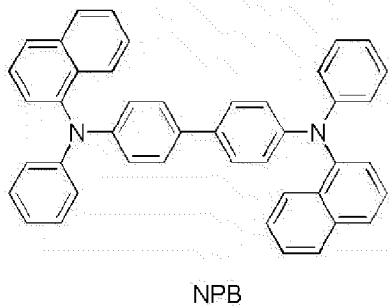


[324] 이어서 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 600Å 두께의 정공 주입층을 증착하였다.

[325] 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 하기

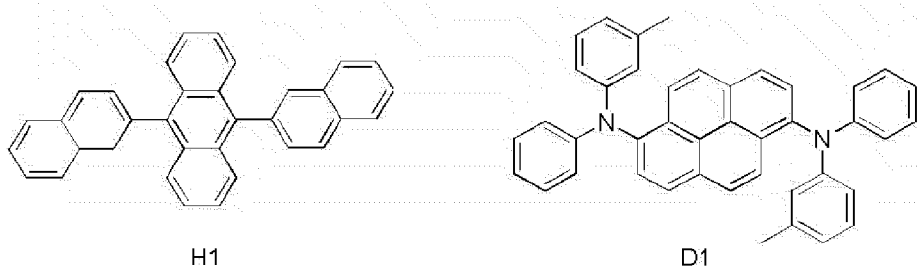
N,N'-비스(α-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(N,N'-bis(α-naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine: NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공 주입층 위에 300Å 두께의 정공 수송층을 증착하였다.

[326]



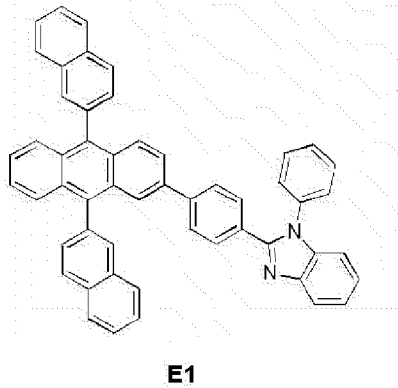
[327] 이와 같이 정공 주입층 및 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층으로서 다음과 같은 구조의 청색 발광 재료를 증착시켰다. 구체적으로, 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 청색 발광 호스트 재료인 H1을 200Å 두께로 진공 증착시키고 그 위에 청색 발광 도판트 재료인 D1을 호스트 재료 대비 5% 진공 증착시켰다.

[328]



[329] 이어서 전자 수송층으로서 하기 구조식 E1의 화합물을 300Å 두께로 증착하였다.

[330]



[331] 전자 주입층으로 리튬 플루오라이드(lithium fluoride: LiF)를 10Å 두께로 증착하였고 Al 음극을 1,000Å의 두께로 하여 OLED 소자를 제작하였다.

[332] 한편, OLED 소자 제작에 필요한 모든 유기 화합물은 재료 별로 각각 10^{-6} ~ 10^{-8} torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 제작에 사용하였다

[333] 실험에 2에서 전자수송층 E1의 두께를 250 Å 형성한 다음 상기 전자수송층 상부에 하기 표 16에 표시되어있는 화합물의 두께를 50Å 으로 정공저지층을 형성한것을 제외하고는, 실험에 2와 동일하게 수행하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[334] 본 발명에 따라 제조된 청색 유기 발광 소자의 구동전압, 발광효율, 색좌표(CIE), 수명을 측정한 결과는 표 16와 같았다.

[335] [표16]

	화합물	구동전압(V)	발광효율(cd/A)	CIE(x, y)	수명(T95)
비교예 5	-	5.51	5.94	(0.134, 0.100)	31
비교예 6	A	5.21	4.12	(0.134, 0.101)	12
비교예 7	B	5.33	4.01	(0.134, 0.100)	11
비교예 8	C	5.31	4.01	(0.134, 0.100)	11
실시예 135	2	5.14	6.89	(0.134, 0.102)	54
실시예 136	8	5.34	6.58	(0.134, 0.101)	44
실시예 137	68	5.38	6.51	(0.134, 0.103)	47
실시예 138	77	5.11	6.75	(0.134, 0.102)	46
실시예 139	104	5.42	6.21	(0.134, 0.101)	54
실시예 140	108	5.13	6.63	(0.134, 0.102)	52
실시예 141	120	5.05	6.66	(0.134, 0.101)	49
실시예 142	205	5.42	6.13	(0.134, 0.101)	41
실시예 143	212	5.14	6.89	(0.134, 0.102)	54
실시예 144	213	5.34	6.58	(0.134, 0.101)	44
실시예 145	273	5.38	6.51	(0.134, 0.103)	47
실시예 146	277	5.11	6.75	(0.134, 0.102)	46
실시예 147	288	5.32	6.25	(0.134, 0.101)	55
실시예 148	388	5.14	6.46	(0.134, 0.102)	51
실시예 149	391	5.04	6.62	(0.134, 0.101)	55
실시예 150	395	5.32	6.25	(0.134, 0.101)	55

[336] 상기 표 16의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 청색 유기 발광 소자의 정공 저지층 재료를 이용한 유기 발광 소자는 비교예 5에 비해 구동 전압이 낮고, 발광효율 및 수명이 현저히 개선되었다. 또한 비교예 6 내지 비교예 8에 비하여 발광효율과 수명이 현저히 개선되었다. 특히, 상기 비교예 7 및 8의 화합물 B 및 C는 본원의 코어구조에 치환기가 하나 치환된 것을 알 수 있다. 치환기가 하나 치환되는 경우 본원 화학식 1의 헥테로고리 화합물과 같이 2 치환된 화합물 보다 열적 안정성이 떨어져 수명이 특히 저하됨을 확인할 수 있었다.

[337] 이러한 결과의 원인은 본원 화학식 1의 화합물은 p-타입과 n-타입을 모두 갖는 바이폴라 타입이므로, 정공 누수를 막고 발광층 내에서 엑시톤을 효과적으로

가될 수 있기 때문이다.

[338] <실험예 3> 유기 발광 소자의 제작

[339] 1) 유기 발광 소자의 제작

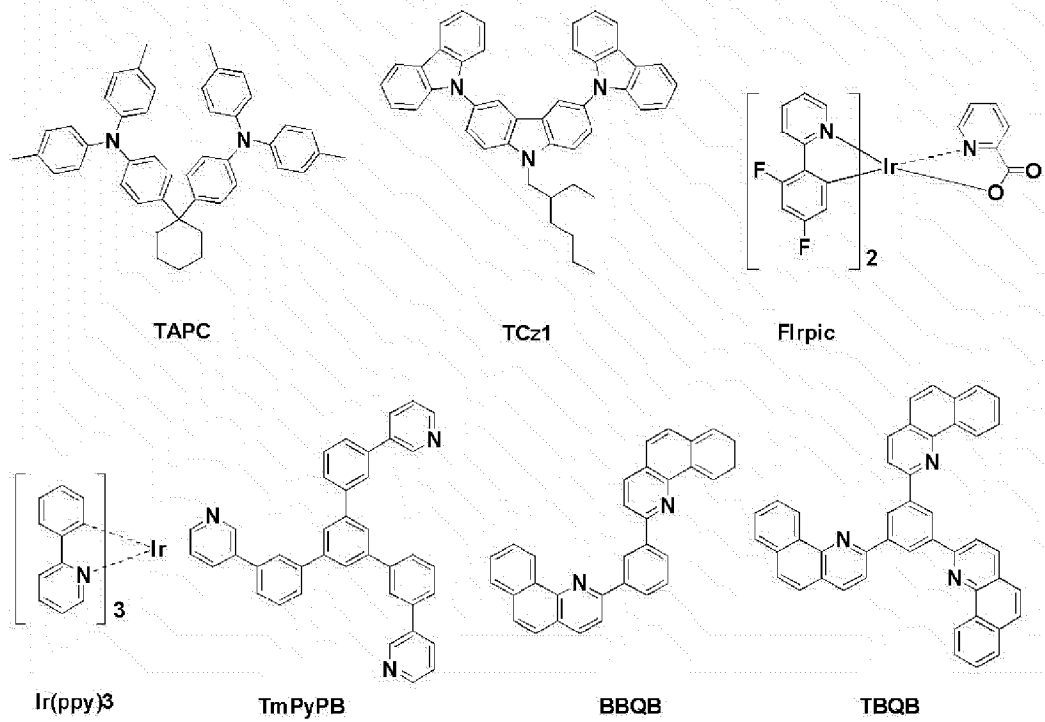
[340] 1500Å의 두께로 ITO가 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 아세톤, 메탄올, 이소프로필 알코올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV 세정기에서 UV를 이용하여 5분간 UVO 처리하였다. 이후 기판을 플라즈마 세정기(PT)로 이송시킨 후, 진공상태에서 ITO 일함수 및 잔막 제거를 위해 플라즈마 처리를 하여, 유기 증착용 열증착 장비로 이송하였다.

[341] 상기 ITO 투명 전극(양극)위에 2 스택 WOLED(White Organic Light Device) 구조로 유기물을 형성하였다. 제1 스택은 우선 TAPC를 300Å의 두께로 열진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 열 진공 증착시켰다. 발광층은 호스트인 TCz1에 청색 인광도펀트로 FIrpic를 8% 도핑하여 300Å 증착하였다. 전자 수송층은 TmPyPB를 사용하여 400Å을 형성한 후, 전하 생성층으로 하기 표 17에 표기된 화합물에 Cs₂CO₃를 20% 도핑하여 100Å 형성하였다.

[342] 제2 스택은 우선 MoO₃을 50Å의 두께로 열진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 공통층인 정공 수송층을 TAPC에 MoO₃를 20% 도핑하여 100Å 형성한 후, TAPC를 300Å 증착하여 형성하였다, 그 위에 발광층은 호스트인 TCz1에 녹색 인광 도펀트인 Ir(ppy)₃를 8% 도핑하여 300Å 증착한 후, 전자 수송층으로 TmPyPB를 사용하여 600Å을 형성하였다. 마지막으로 전자 수송층 위에 리튬 플루오라이드(lithium fluoride: LiF)를 10Å 두께로 증착하여 전자 주입층을 형성한 후, 전자 주입층 위에 알루미늄(Al) 음극을 1,200Å의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

[343] 한편, OLED 소자 제작에 필요한 모든 유기 화합물은 재료 별로 각각 10⁻⁶ ~ 10⁻⁸ torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 제작에 사용하였다.

[344]



[345] 본 발명에 따라 제조된 백색 유기 발광 소자의 구동전압, 발광효율, 색좌표(CIE), 수명(T95)를 측정한 결과는 하기 표 17과 같았다.

[346] [표17]

	화합물	구동전압(V)	발광효율(cd/A)	CIE(x, y)	수명(T95)
비교예 9	TmPyPB	8.57	57.61	(0.212, 0.433)	22
비교예 10	BBQB	8.43	58.11	(0.220, 0.429)	22
비교예 11	TBQB	8.47	58.90	(0.222, 0.430)	26
비교예 12	A	7.21	41.11	(0.201, 0.398)	9
비교예 13	B	7.28	41.12	(0.189, 0.388)	6
비교예 14	C	7.22	41.01	(0.188, 0.388)	6
실시예 1	1	7.24	61.88	(0.209, 0.415)	23
실시예 2	33	6.98	60.58	(0.224, 0.429)	30
실시예 3	66	6.89	72.10	(0.243, 0.442)	38
실시예 4	78	6.71	69.65	(0.205, 0.411)	41
실시예 5	101	6.49	71.44	(0.243, 0.442)	39
실시예 6	152	7.34	58.29	(0.209, 0.419)	30
실시예 7	156	7.21	59.33	(0.210, 0.420)	29
실시예 8	157	7.44	69.65	(0.205, 0.411)	33
실시예 9	158	7.41	71.44	(0.243, 0.442)	35
실시예 10	296	6.95	58.29	(0.209, 0.419)	34
실시예 11	299	7.21	59.33	(0.210, 0.420)	29
실시예 12	370	6.71	69.65	(0.205, 0.411)	41
실시예 13	372	6.49	71.44	(0.243, 0.442)	39
실시예 14	373	6.95	58.29	(0.209, 0.419)	34

[347] 상기 표 17의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 2-스택 백색 유기 발광 소자의 전하 생성층 재료를 이용한 유기 발광 소자는 비교예 9 내지 비교예 11에 비해 구동 전압이 낮고, 발광효율이 개선되었다. 또한 비교예 12 내지 14에 비하여 구동 전압은 유사하지만, 발광효율과 수명이 현저하게 개선되었다.

[348] 특히, 상기 비교예 13 및 14의 화합물 B 및 C는 본원의 코어구조에 치환기가 하나 치환된 것을 알 수 있다. 치환기가 하나 치환되는 경우, 본원 화학식 1의 헥테로고리 화합물과 같이 2 치환된 화합물 보다 열적 안정성이 떨어져 수명이 특히 저하됨을 확인할 수 있었다.

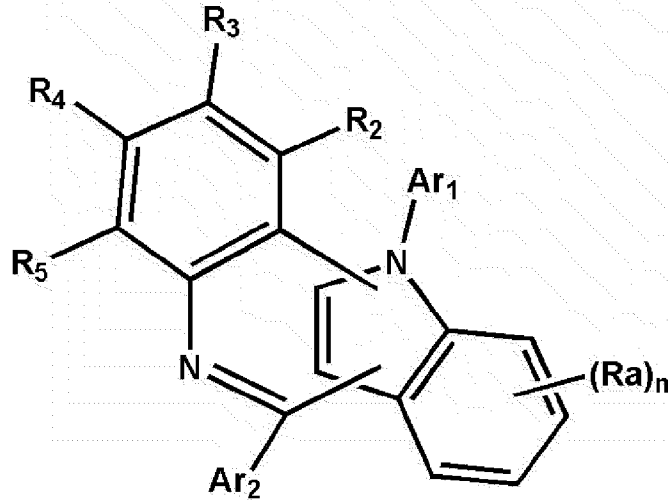
[349]

[350]

PAGE INTENTIONALLY LEFT BLANK AT THE TME OF FILING

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물:
[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

R_2 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -SiRR'R''; -P(=O)RR'; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 또는 방향족 탄화수소 고리를 형성하고,

R_6 는 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

Ar_1 은 -(L1)p-(Z1)q로 표시되고,

Ar_2 는 -(L2)r-(Z2)s로 표시되며,

상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 알키닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된

헤테로아릴기; $-SiRR'R''$; $-P(=O)RR'$; 및 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군으로부터 선택되며,
 상기 R, R' 및 R''는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; $-CN$; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 p 및 r은 1 내지 4의 정수이며,
 q 및 s는 1 내지 3의 정수이고,
 n은 0 내지 4의 정수이다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, "치환 또는 비치환"이란 C1 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬; C2 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알케닐; C2 내지 C60의 직쇄 또는 분지쇄의 알키닐; C3 내지 C60의 단환 또는 다환의 시클로알킬; C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로시클로알킬; C6 내지 C60의 단환 또는 다환의 아릴; C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로아릴; $-SiRR'R''$; $-P(=O)RR'$; C1 내지 C20의 알킬아민; C6 내지 C60의 단환 또는 다환의 아릴아민; 및 C2 내지 C60의 단환 또는 다환의 헤테로아릴아민으로 이루어진 군으로부터 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중에서 선택된 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미하고, 상기 R, R' 및 R''의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일한 것인 헤테로고리 화합물.

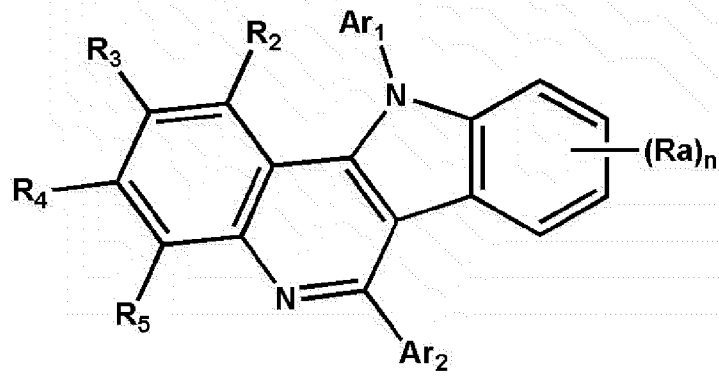
[청구항 3] 청구항 1에 있어서,
 상기 R₂ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소가거나, 서로 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 C2 내지 C40의 방향족 탄화수소 고리를 형성하는 것인 헤테로고리 화합물.

[청구항 4] 청구항 1에 있어서,
 상기 L1 및 L2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C6 내지 C40의 아릴렌기; 또는 C2 내지 C40의 헤테로아릴렌기이고,
 상기 Z1 및 Z2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40의 아릴기; 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40의 헤테로아릴기; 또는 $P(=O)RR'$ 이며,
 상기 R 및 R'의 정의는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일한 것인 헤테로고리 화합물.

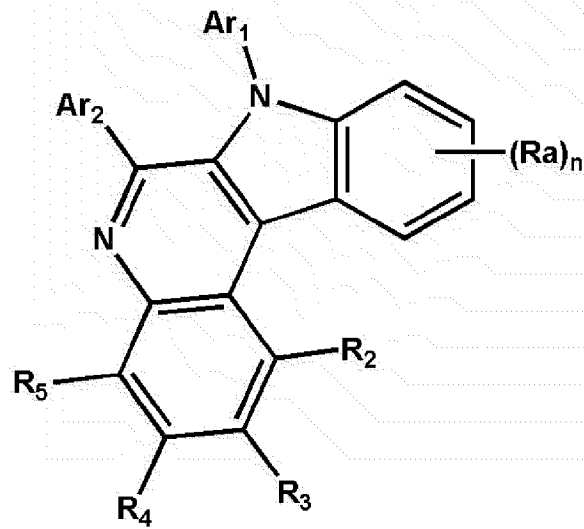
[청구항 5] 청구항 1에 있어서,
 상기 R_a는 수소인 것인 헤테로고리 화합물.

[청구항 6] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

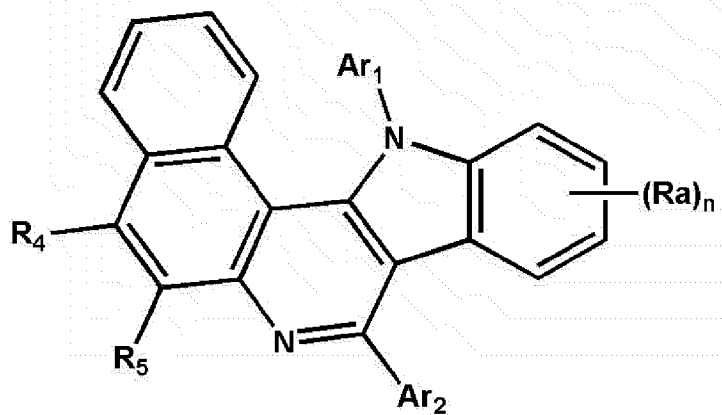
[화학식 2]



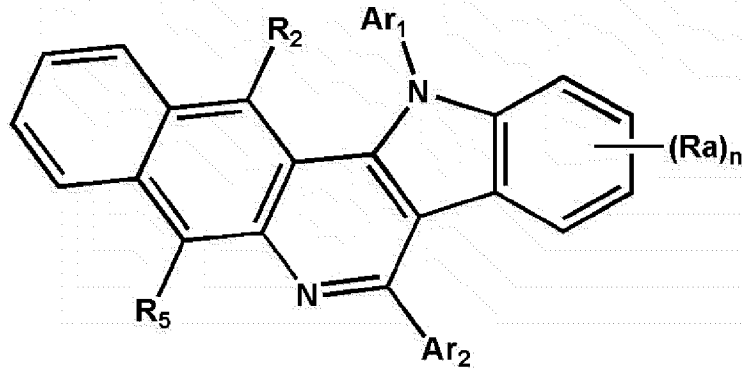
[화학식 3]



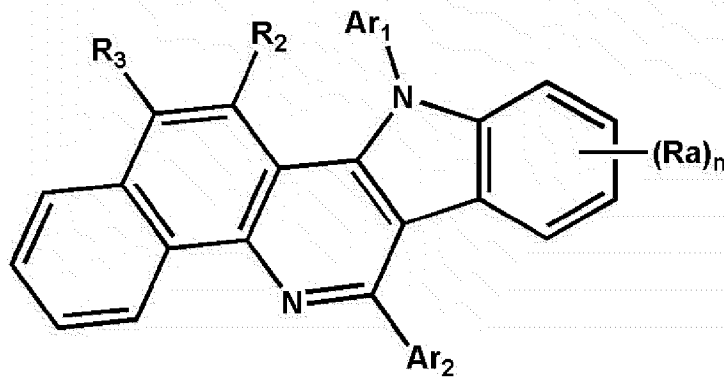
[화학식 4]



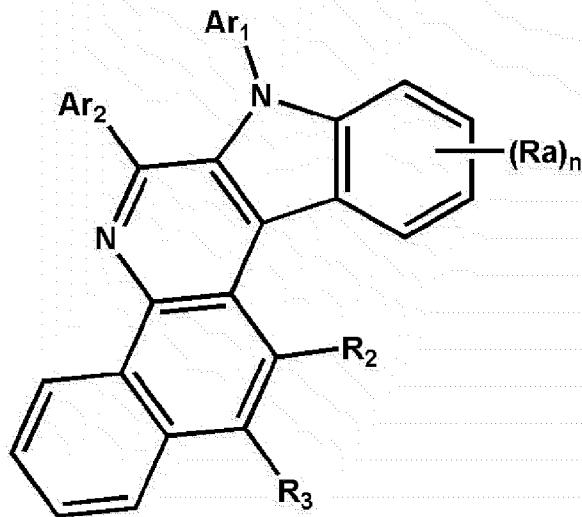
[화학식 5]



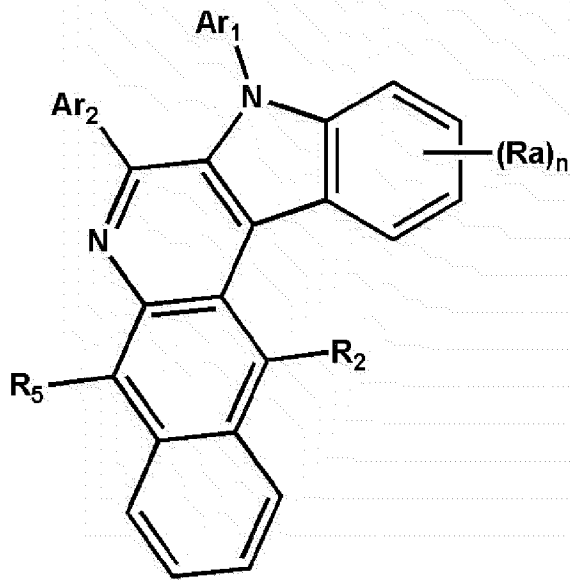
[화학식 6]



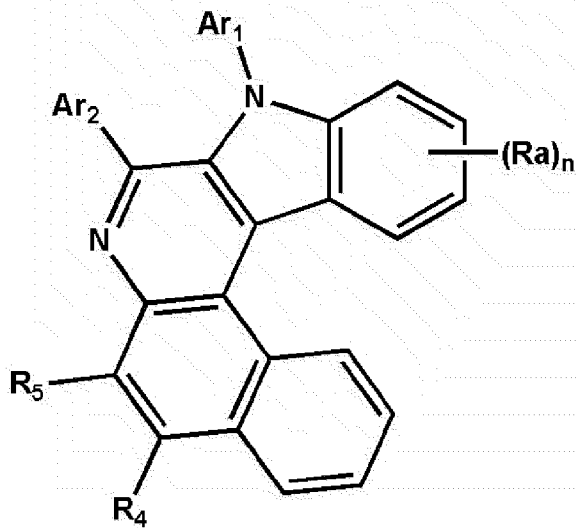
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]

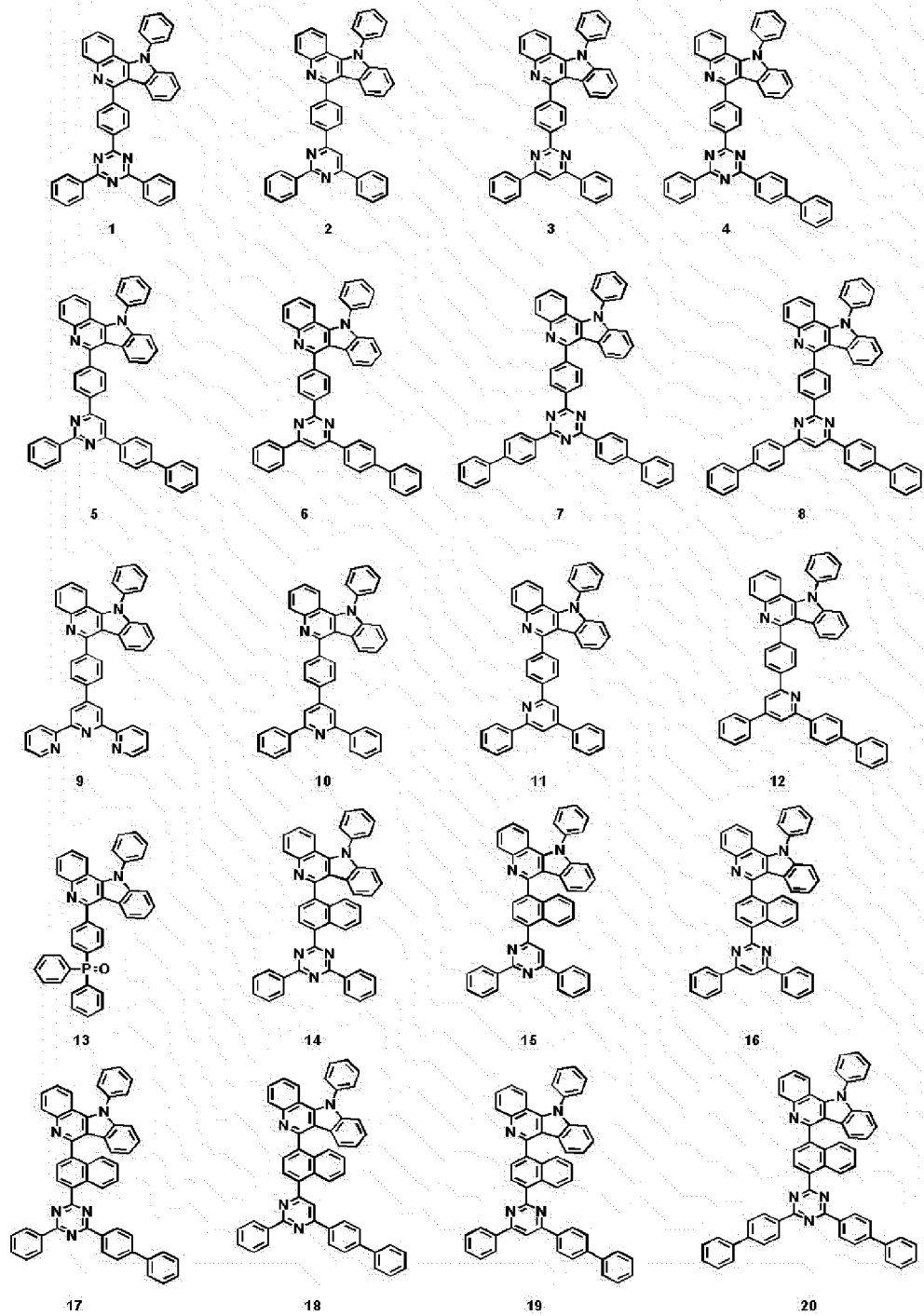


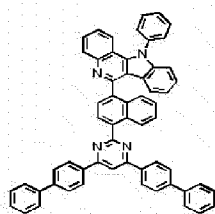
상기 화학식 2 내지 9에서,

R_a , Ar_1 , Ar_2 , R_2 내지 R_5 및 n 의 정의는 상기 화학식 1의 정의와 동일하다.

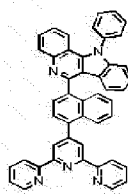
[청구항 7]

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

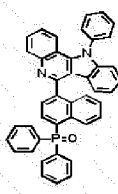




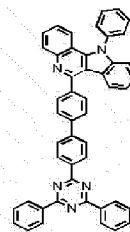
21



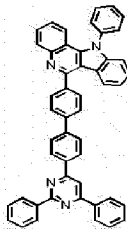
22



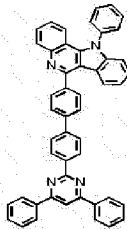
23



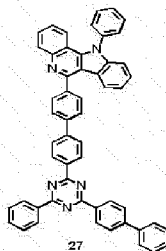
24



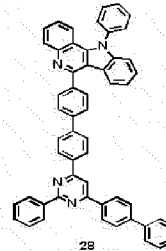
25



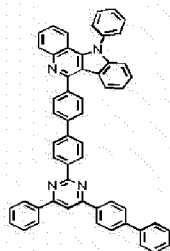
26



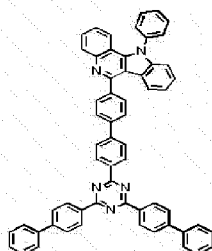
27



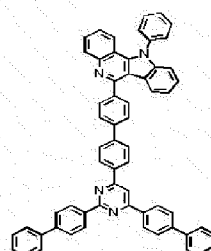
28



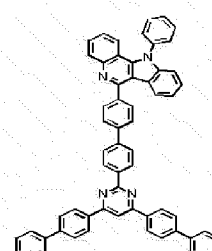
29



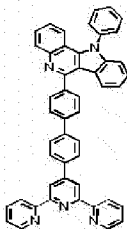
30



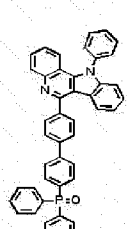
31



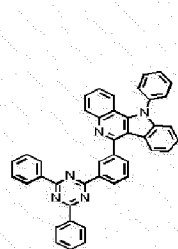
32



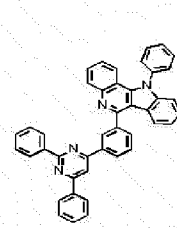
33



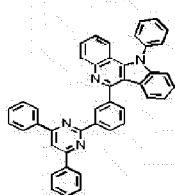
34



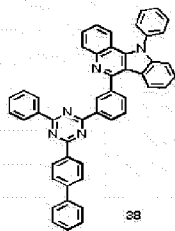
35



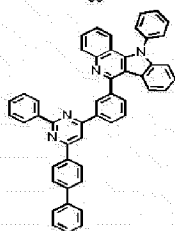
36



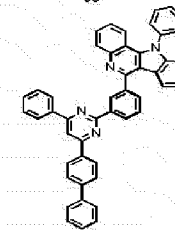
37



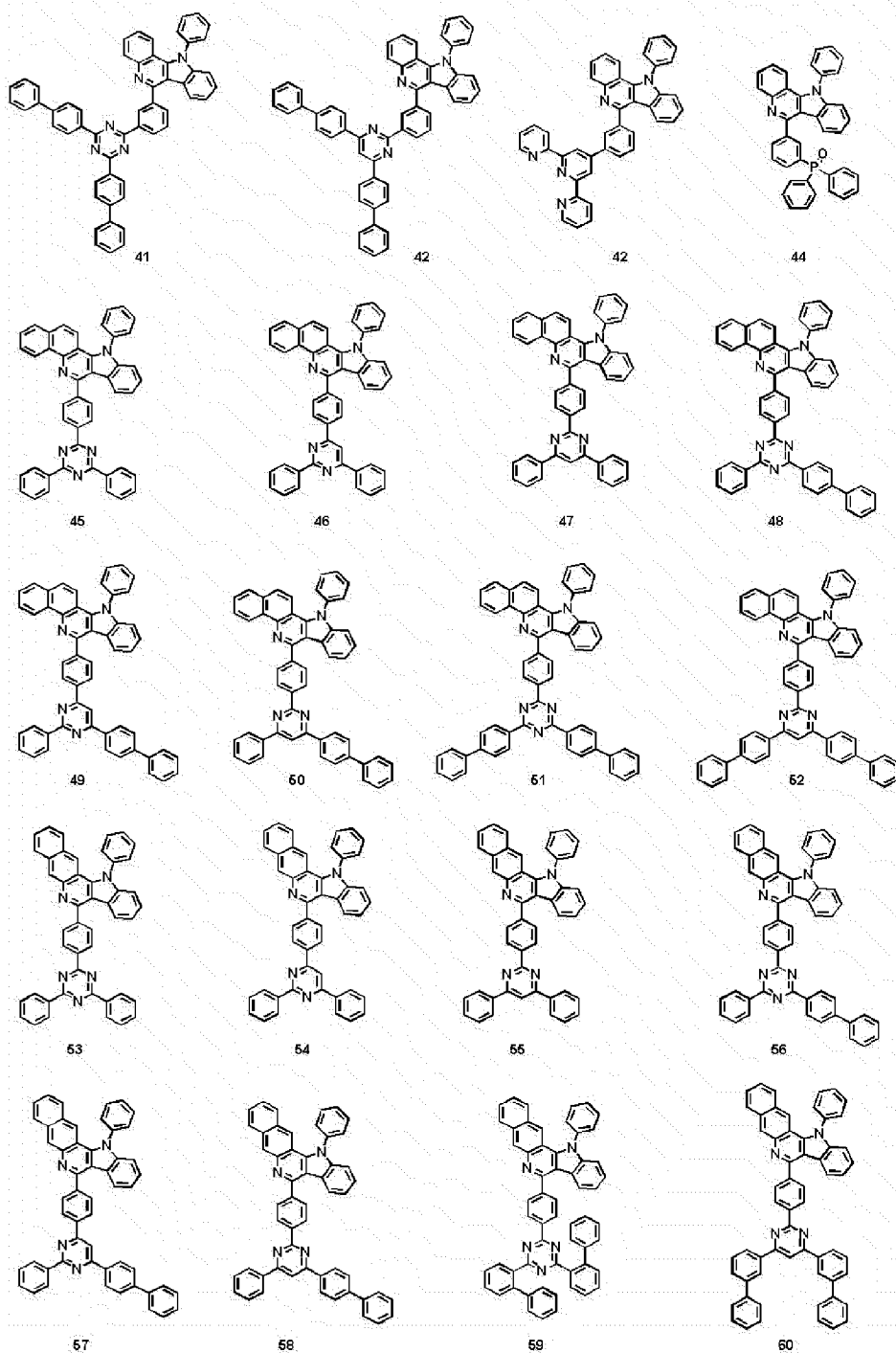
38

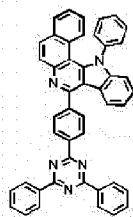


39

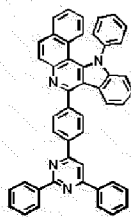


40

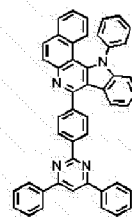




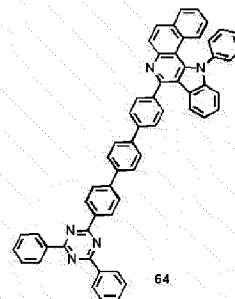
61



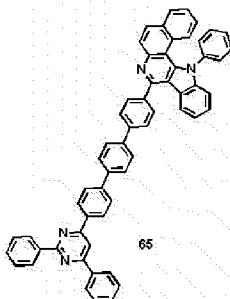
62



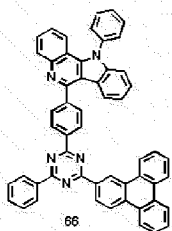
63



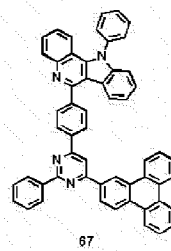
64



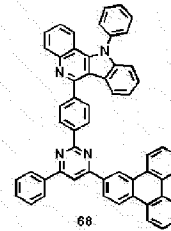
65



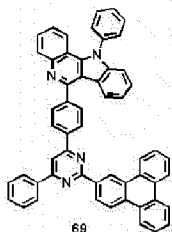
66



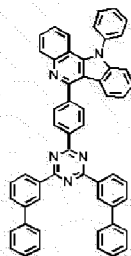
67



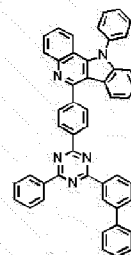
68



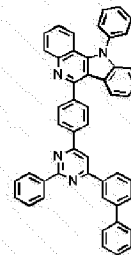
69



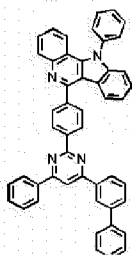
70



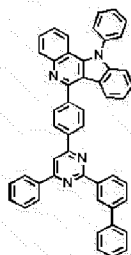
71



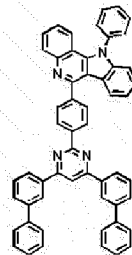
72



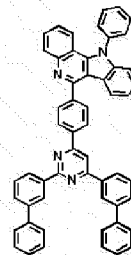
73



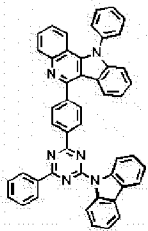
74



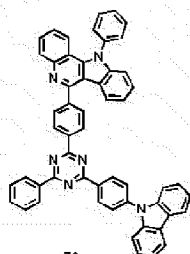
75



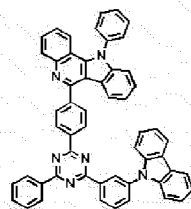
76



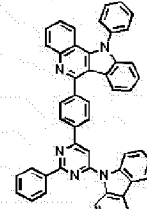
77



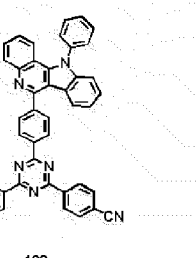
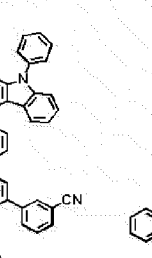
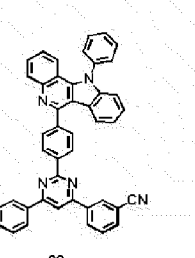
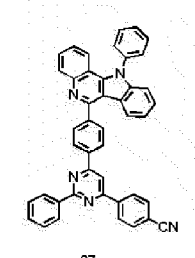
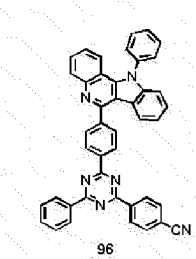
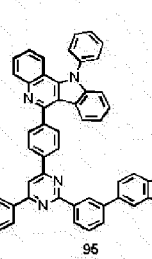
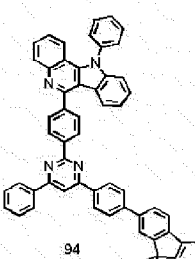
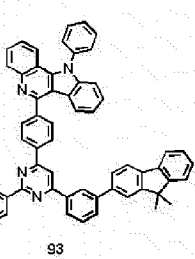
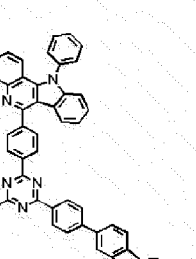
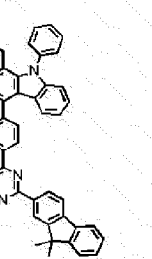
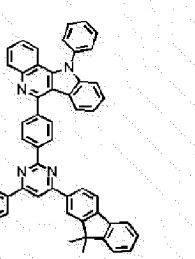
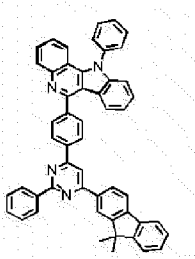
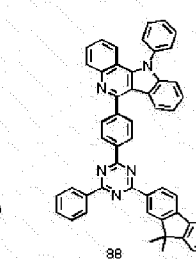
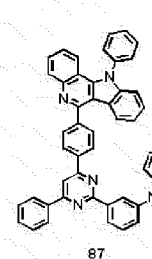
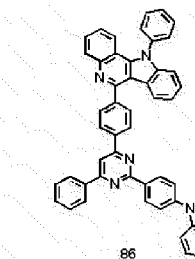
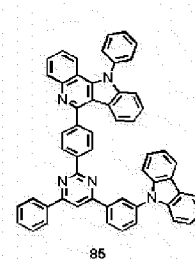
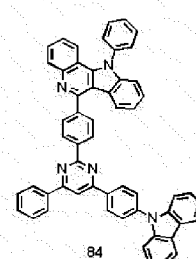
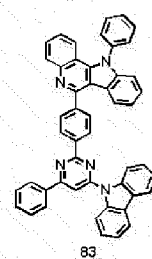
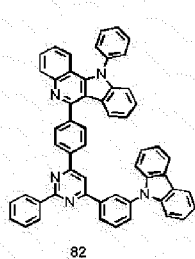
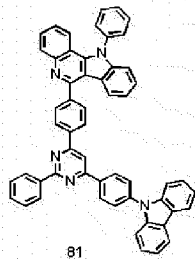
78

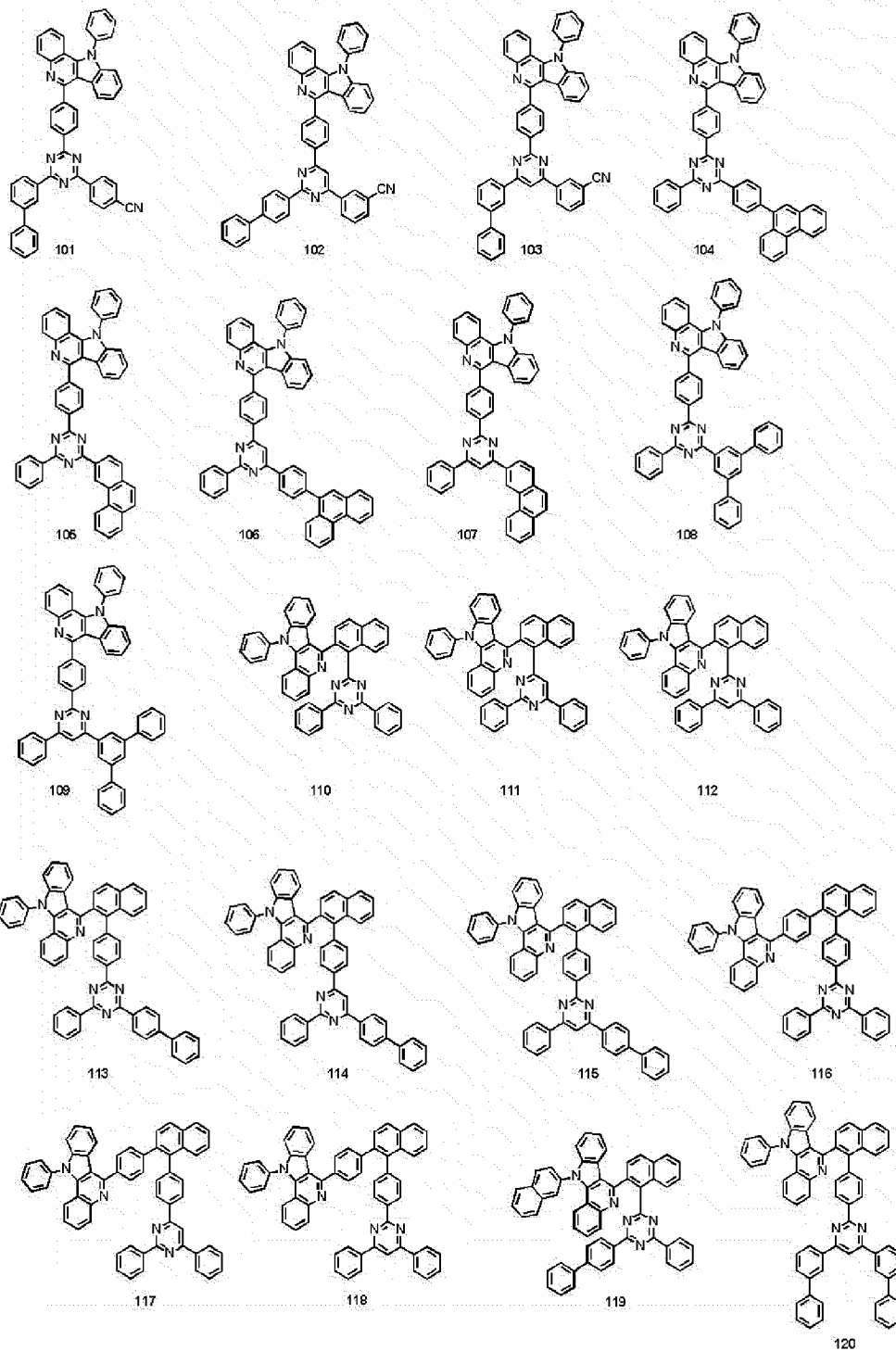


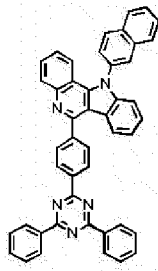
79



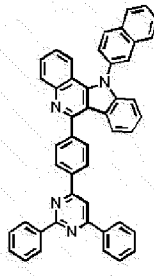
80



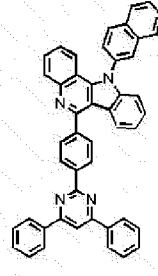




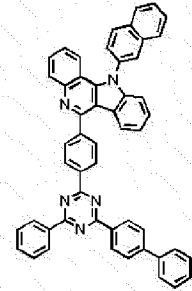
121



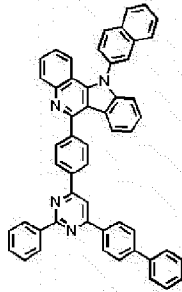
122



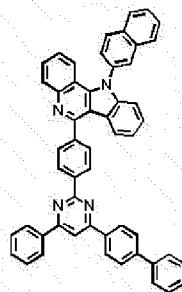
123



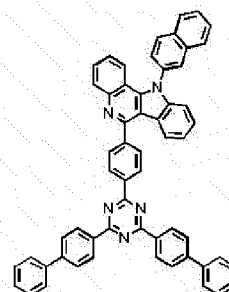
124



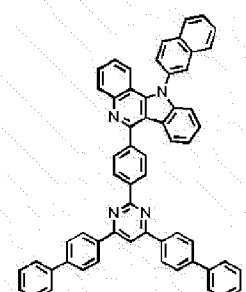
125



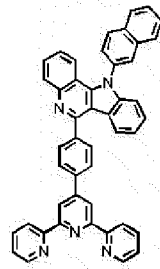
126



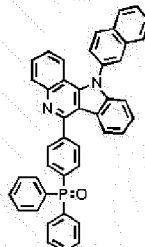
127



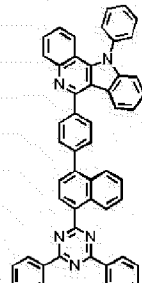
128



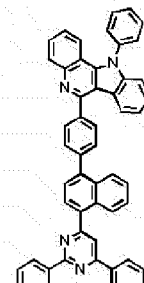
129



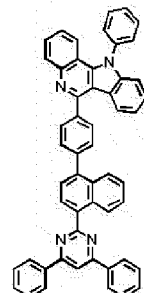
130



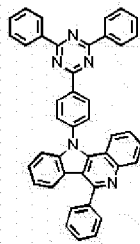
131



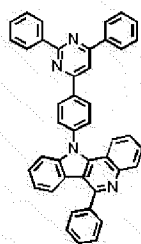
132



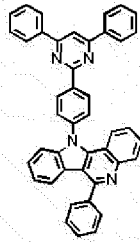
133



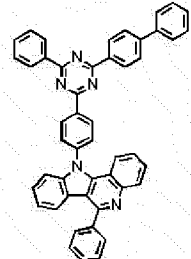
134



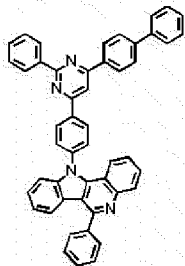
135



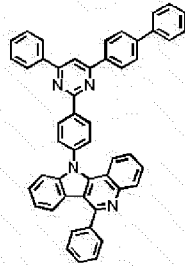
136



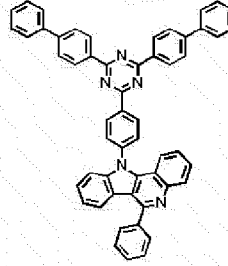
137



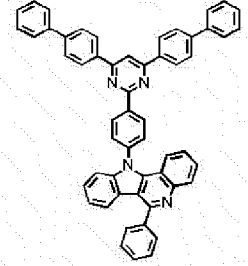
138



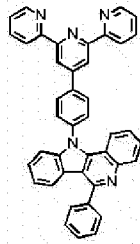
139



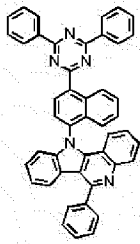
140



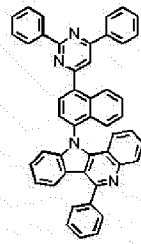
141



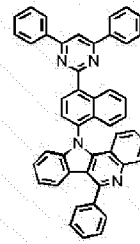
142



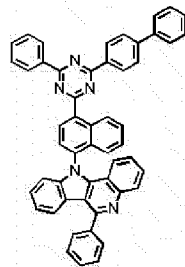
143



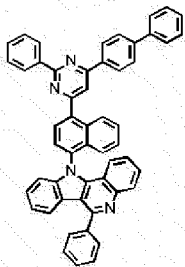
144



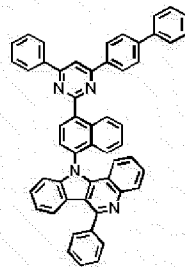
145



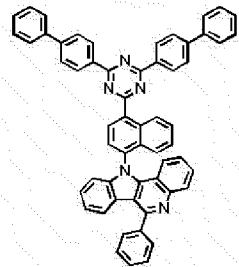
146



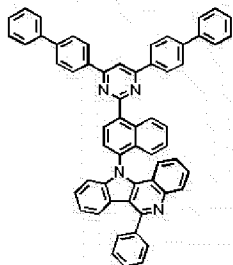
147



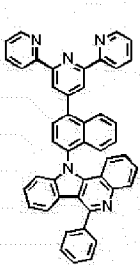
148



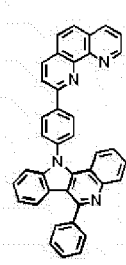
149



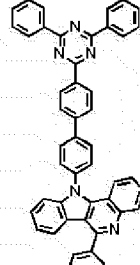
150



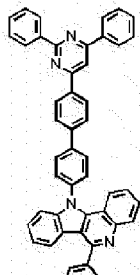
151



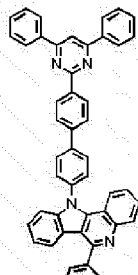
152



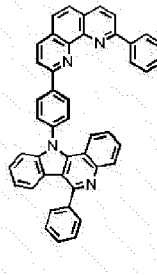
153



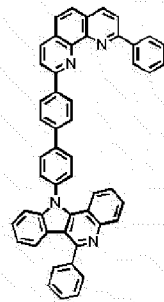
154



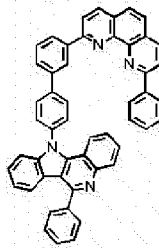
155



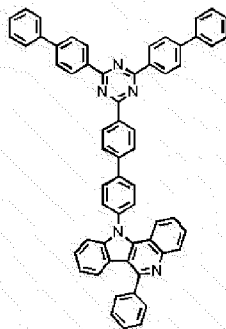
156



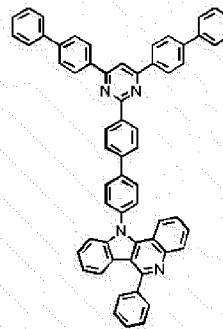
157



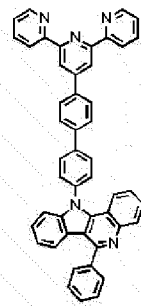
158



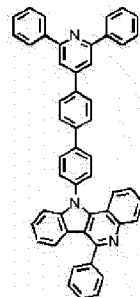
159



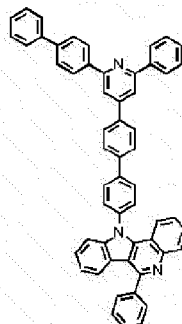
160



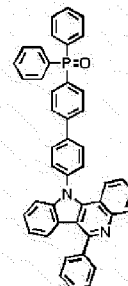
161



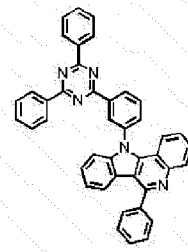
162



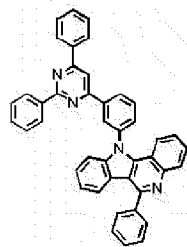
163



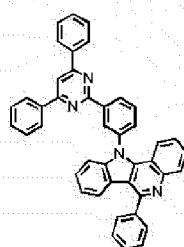
164



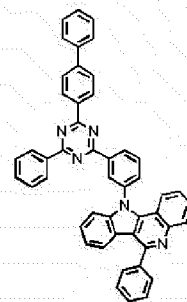
165



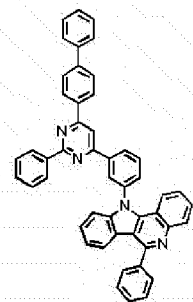
166



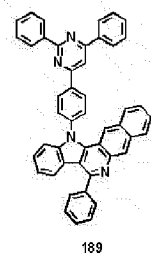
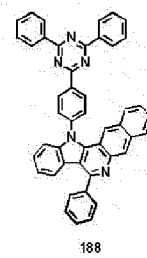
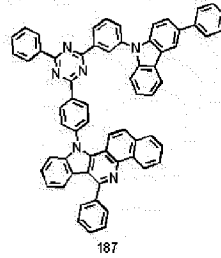
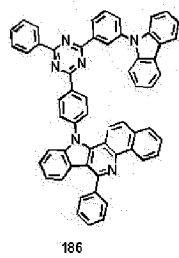
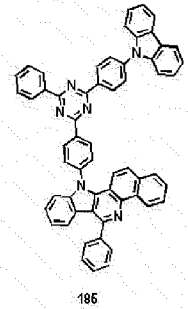
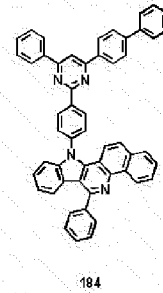
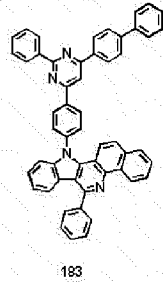
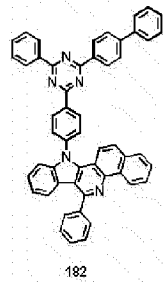
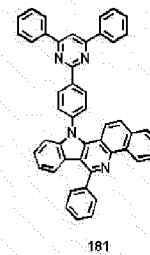
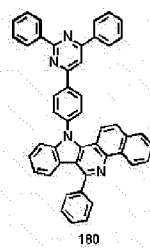
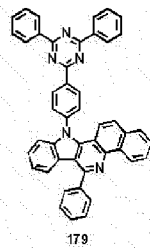
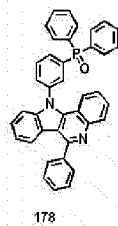
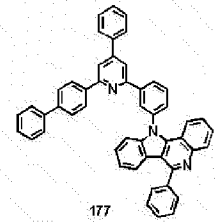
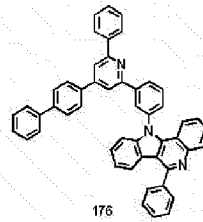
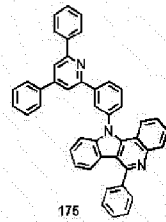
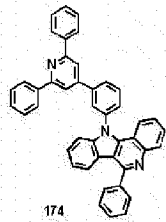
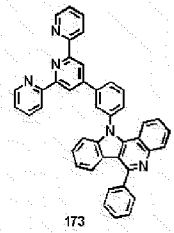
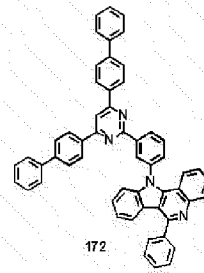
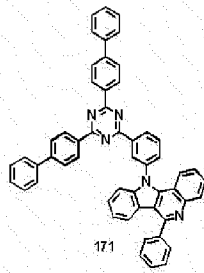
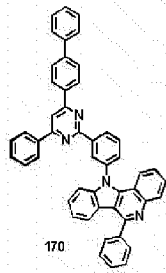
167

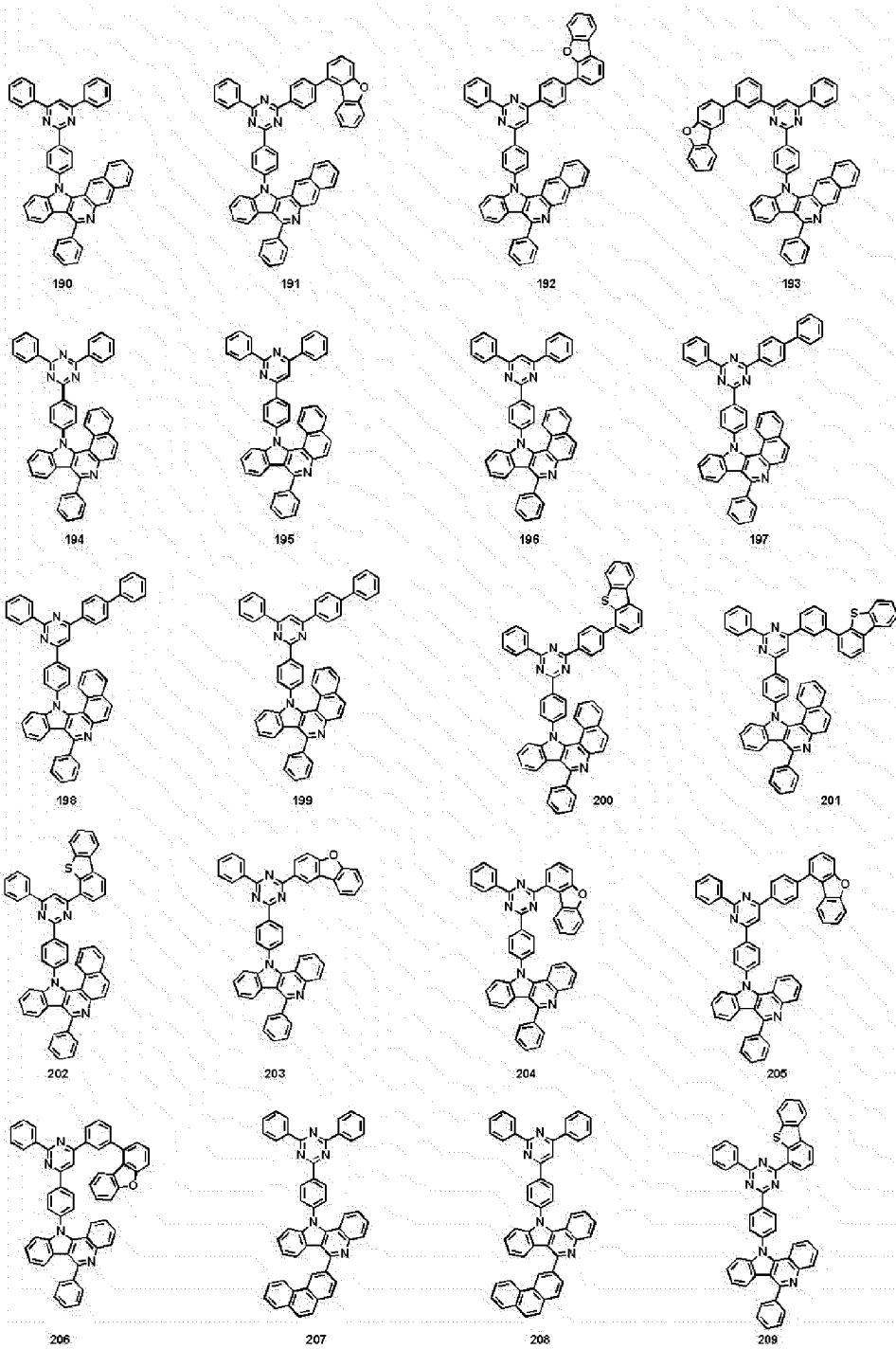


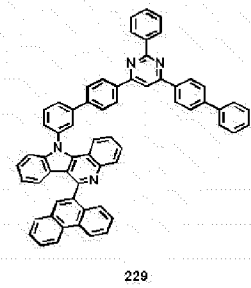
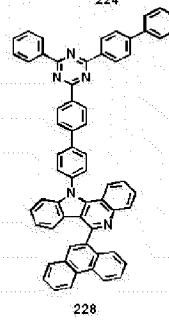
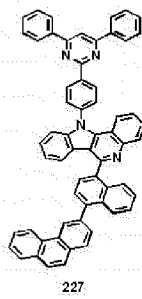
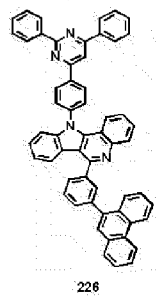
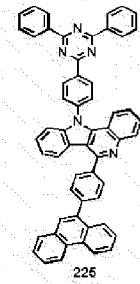
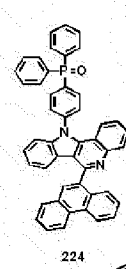
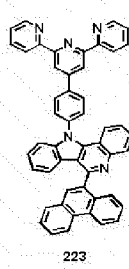
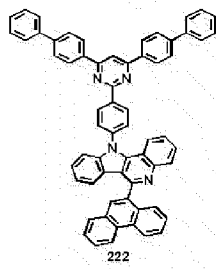
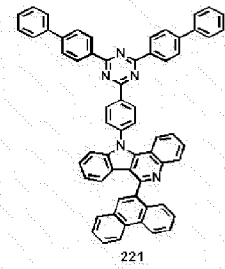
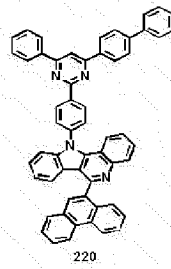
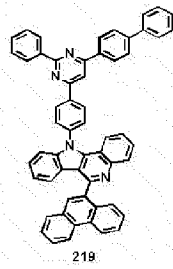
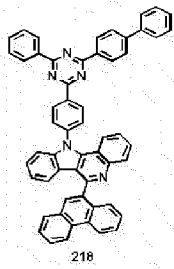
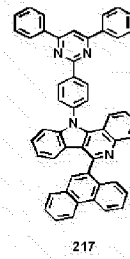
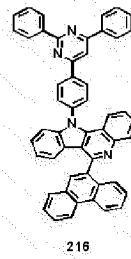
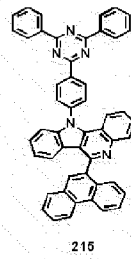
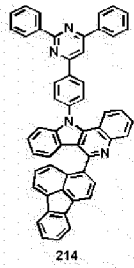
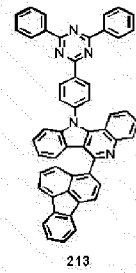
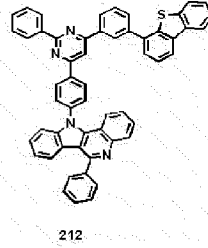
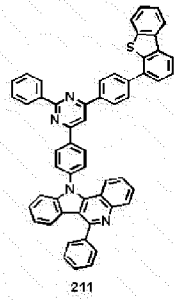
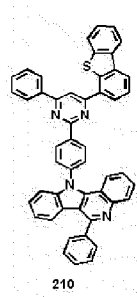
168

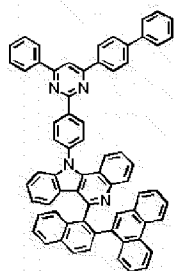


169

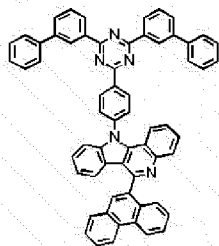




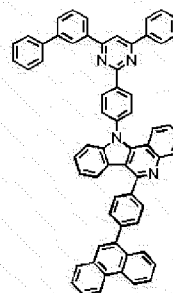




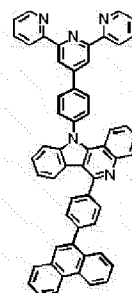
230



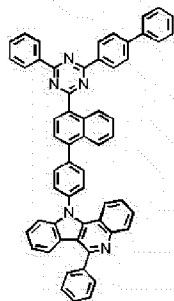
231



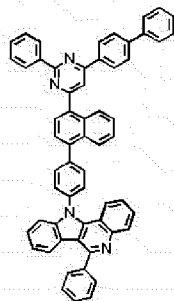
232



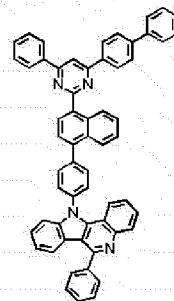
233



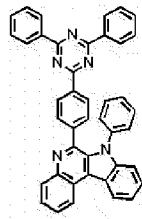
234



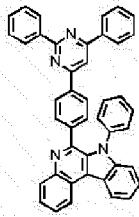
235



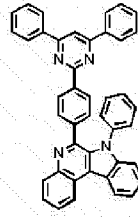
236



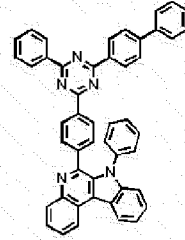
237



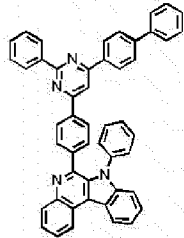
238



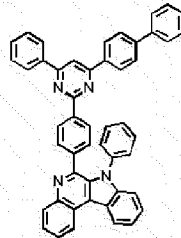
239



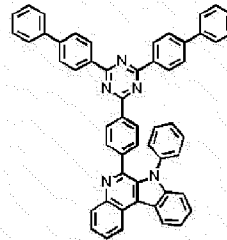
240



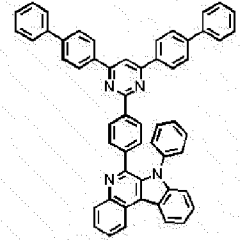
241



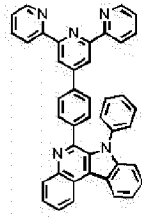
242



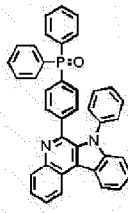
243



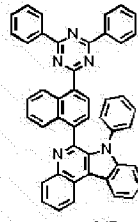
244



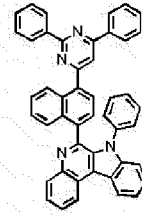
245



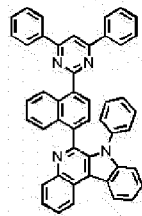
246



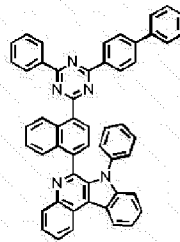
247



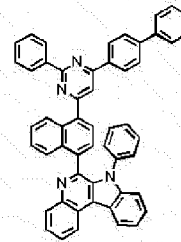
248



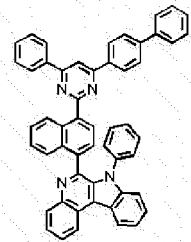
249



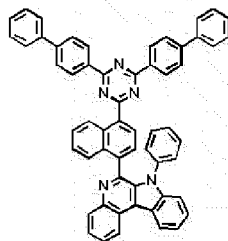
250



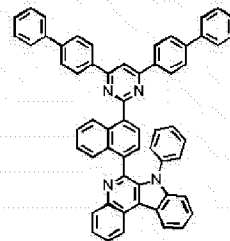
251



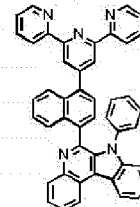
252



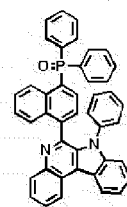
253



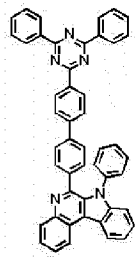
254



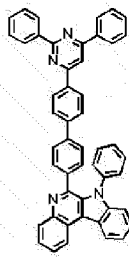
255



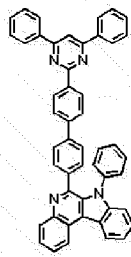
256



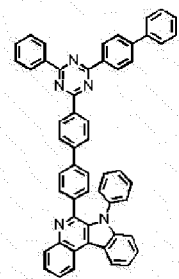
257



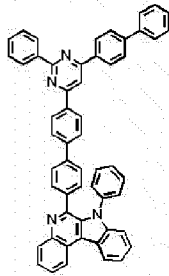
258



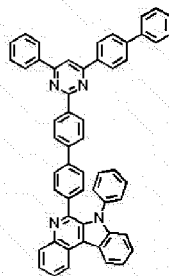
259



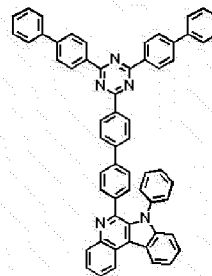
260



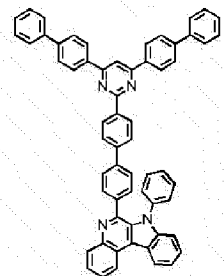
261



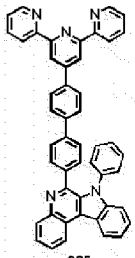
262



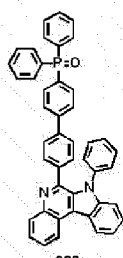
263



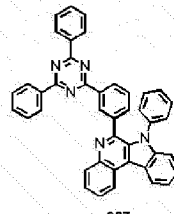
264



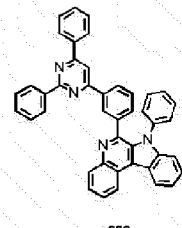
265



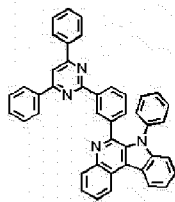
266



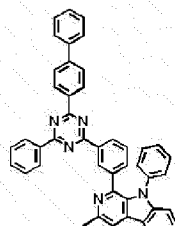
267



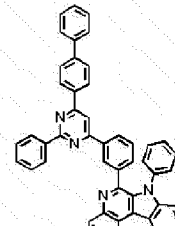
268



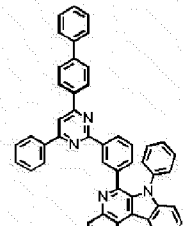
269



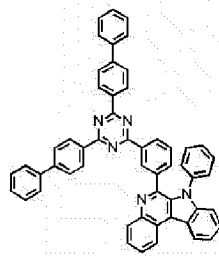
270



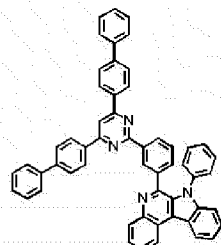
271



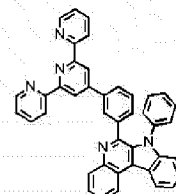
272



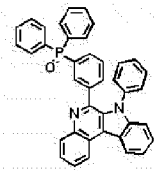
273



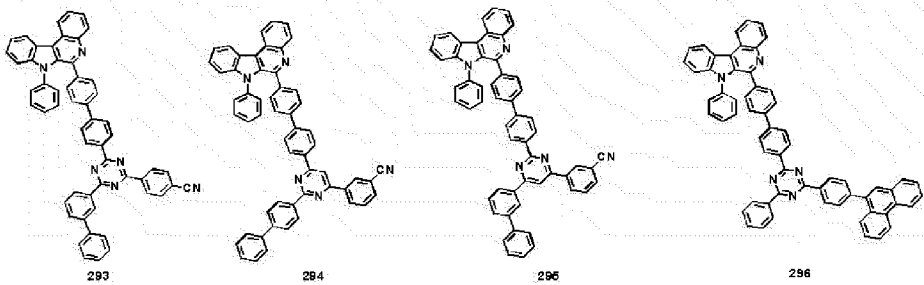
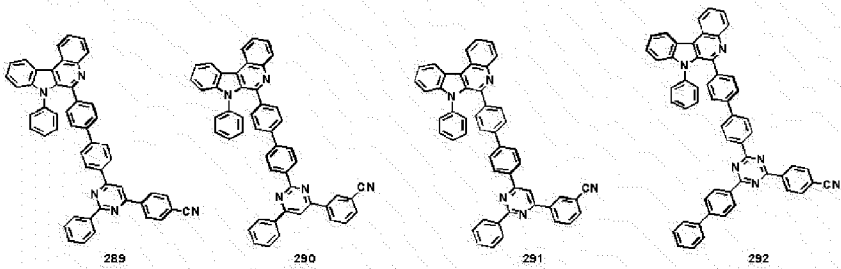
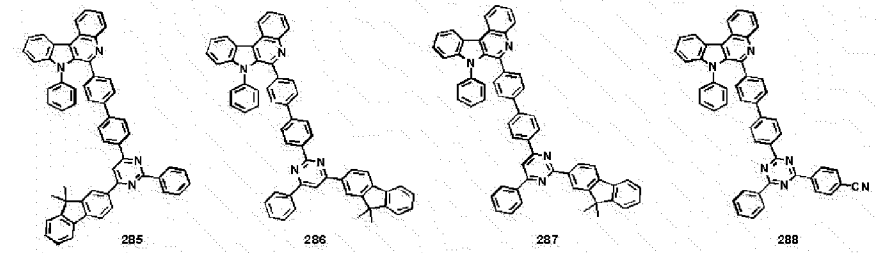
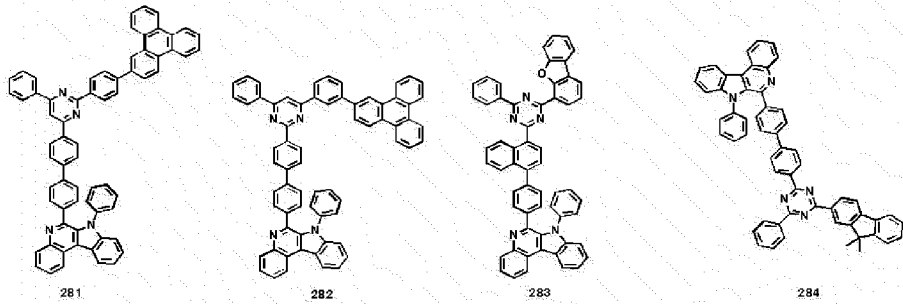
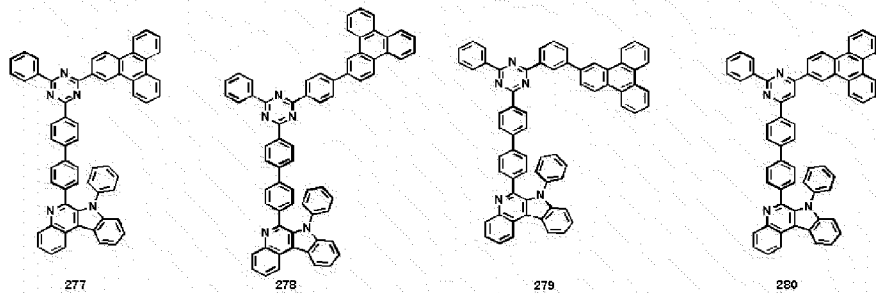
274

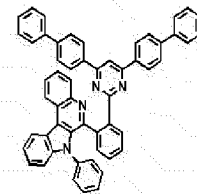
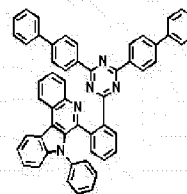
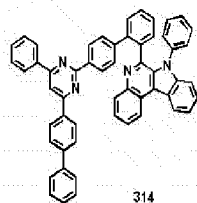
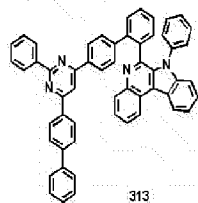
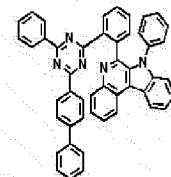
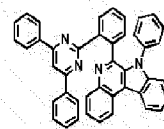
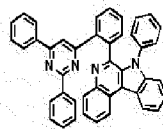
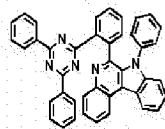
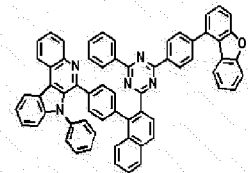
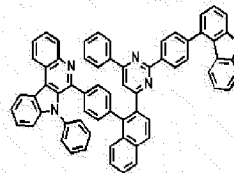
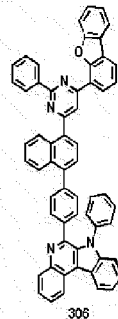
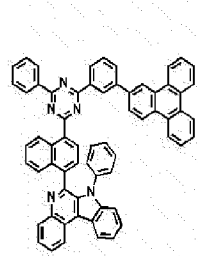
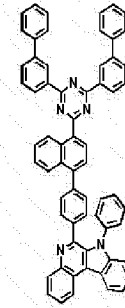
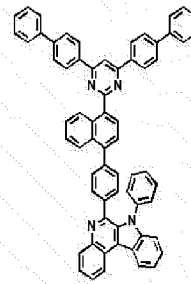
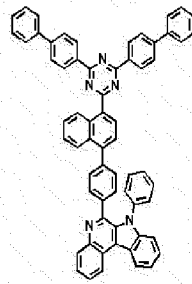
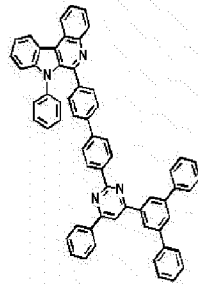
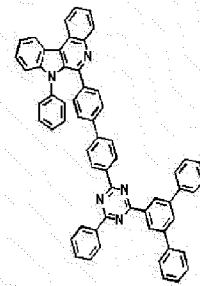
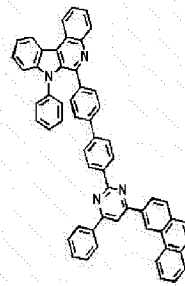
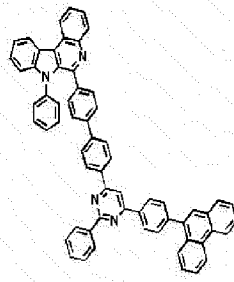
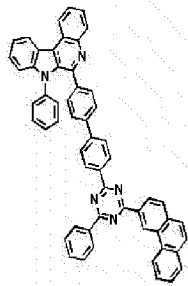


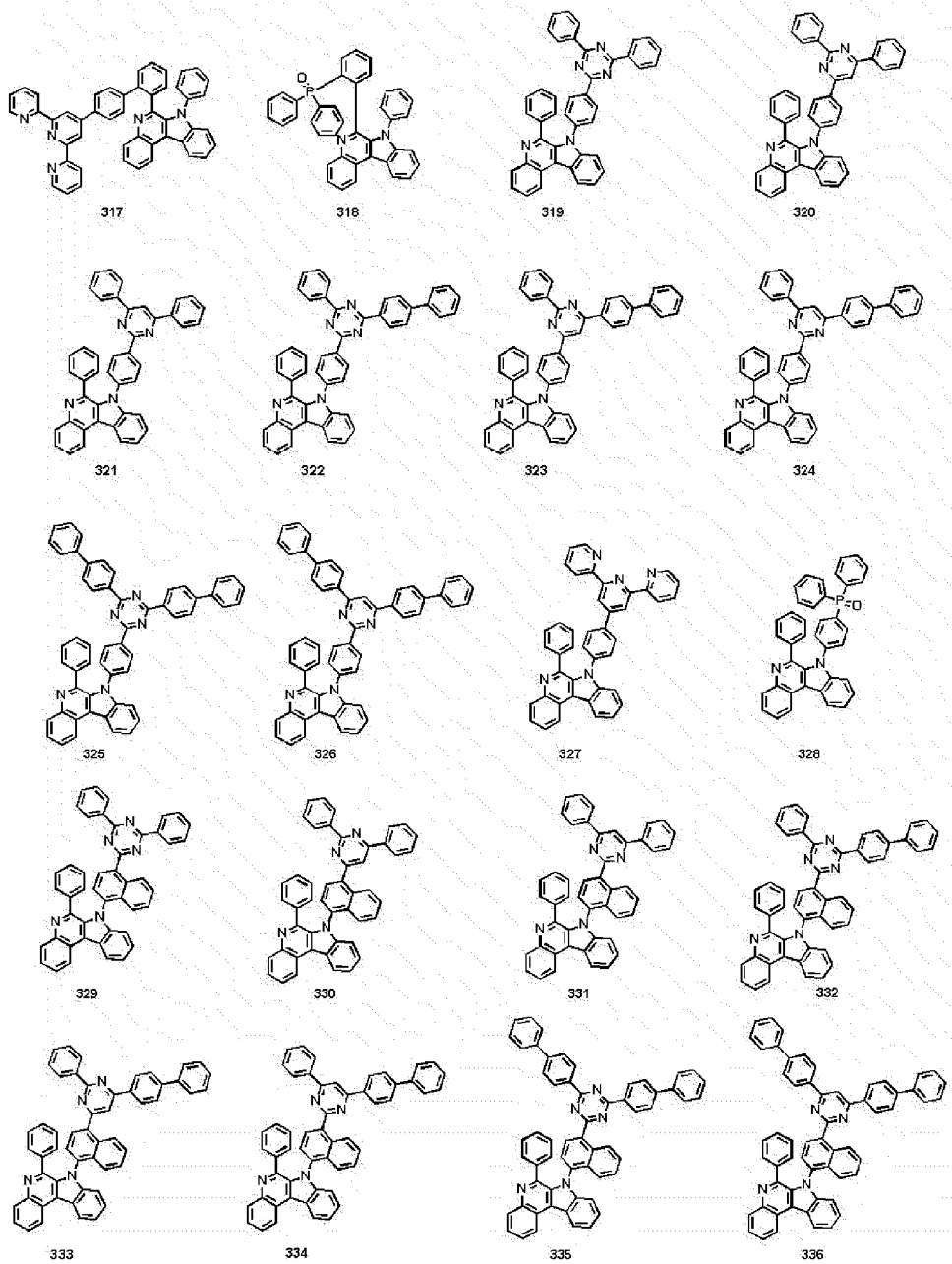
275

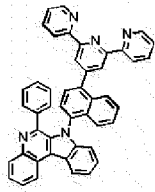


276

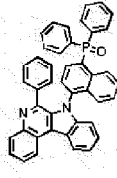




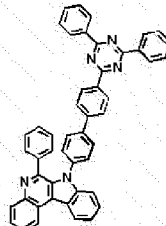




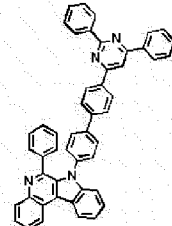
337



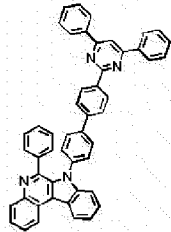
338



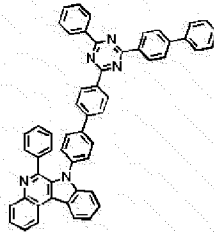
339



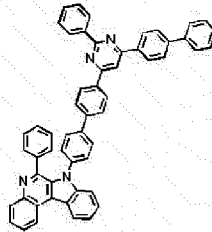
340



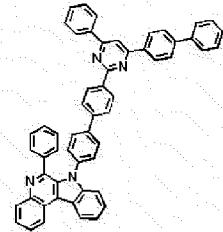
341



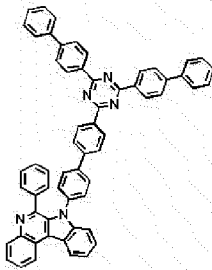
342



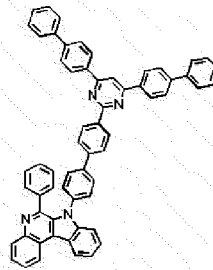
343



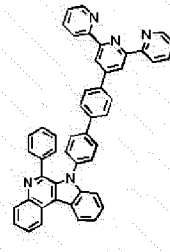
344



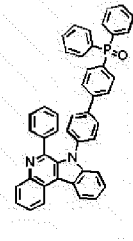
345



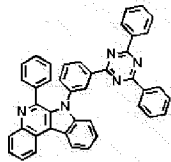
346



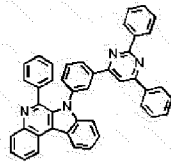
347



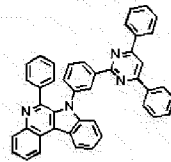
348



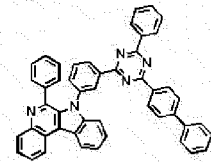
349



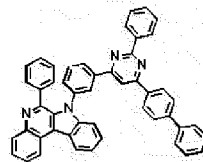
350



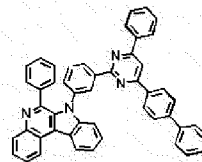
351



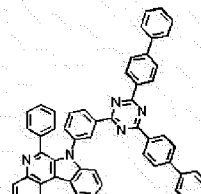
352



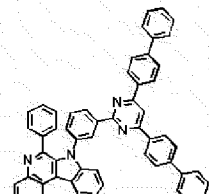
353



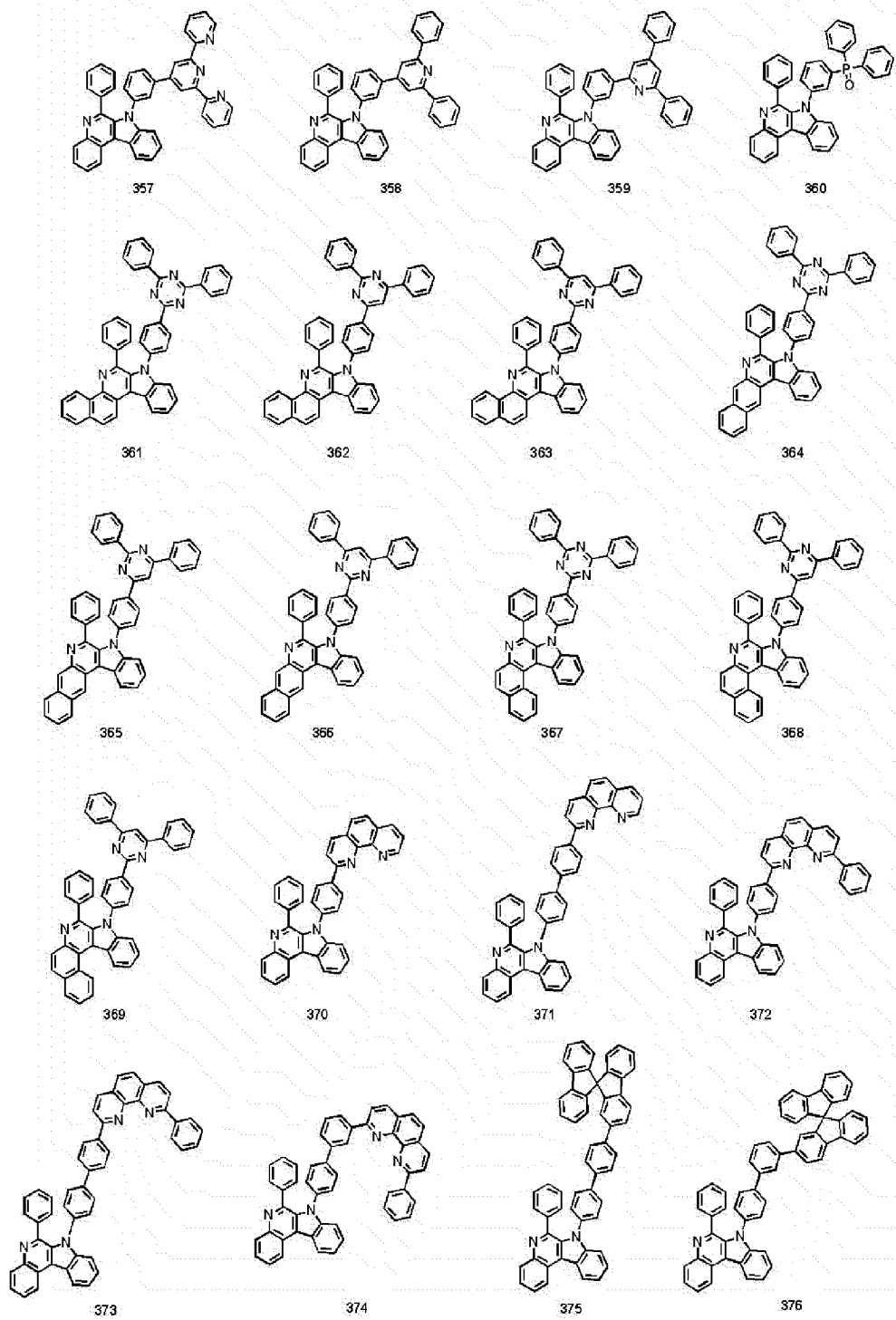
354

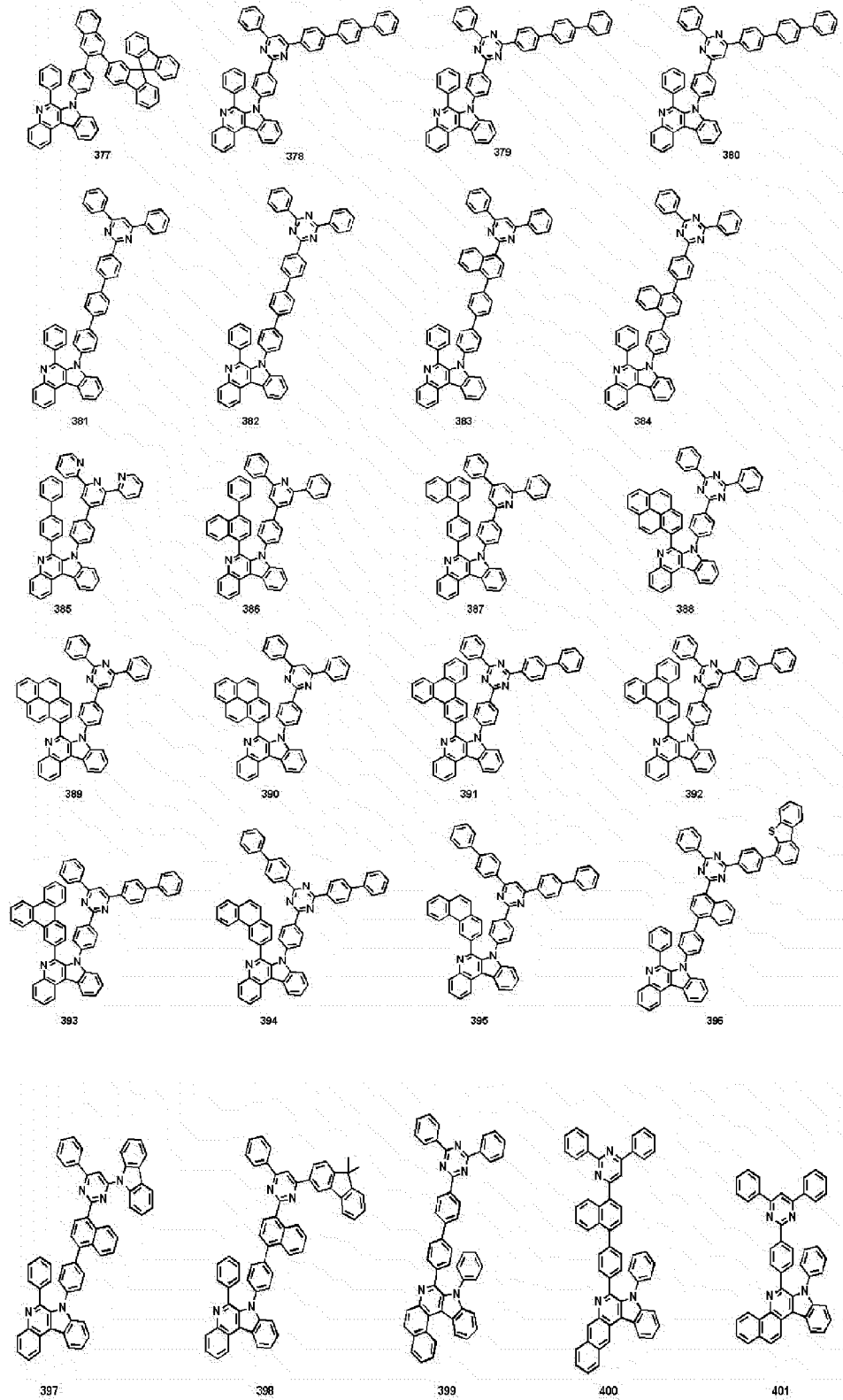


355



356



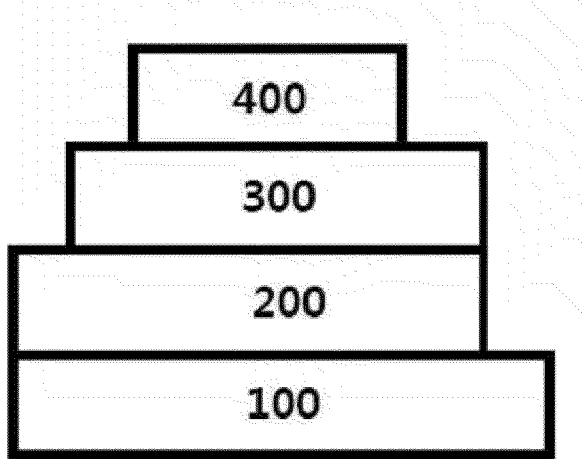


[청구항 8] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과

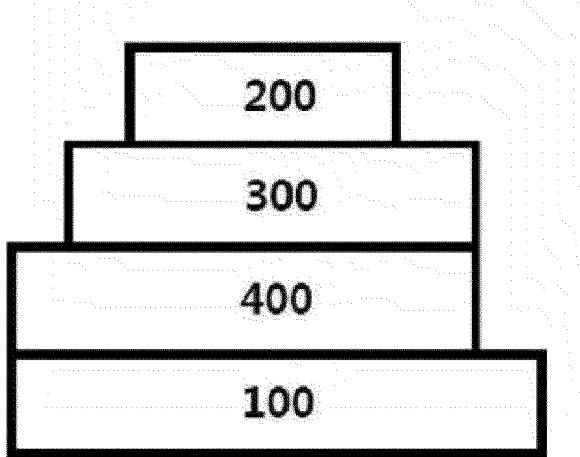
상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 7 중 어느 한 항에 따른 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

- [청구항 9] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 10] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층 또는 전자수송층을 포함하고, 상기 전자주입층 또는 전자수송층은 상기 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 11] 청구항 8에 있어서, 상기 유기물층은 전자저지층 또는 정공저지층을 포함하고, 상기 전자저지층 또는 정공저지층은 상기 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 12] 청구항 8에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자주입층, 전자수송층, 전자저지층 및 정공저지층으로 이루어진 균에서 선택되는 1층 또는 2층 이상을 더 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 13] 청구항 8에 있어서, 상기 유기 발광 소자는, 제1 전극, 상기 제1 전극 상에 구비되고 제1 발광층을 포함하는 제1 스택, 상기 제1 스택 상에 구비되는 전하 생성층, 상기 전하 생성층 상에 구비되고 제2 발광층을 포함하는 제2 스택, 및 상기 제2 스택 상에 구비되는 제2 전극을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 14] 청구항 13에 있어서, 상기 전하 생성층은 상기 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 15] 청구항 13에 있어서, 상기 전하 생성층은 N-타입 전하 생성층이고, 상기 전하 생성층은 상기 헥테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

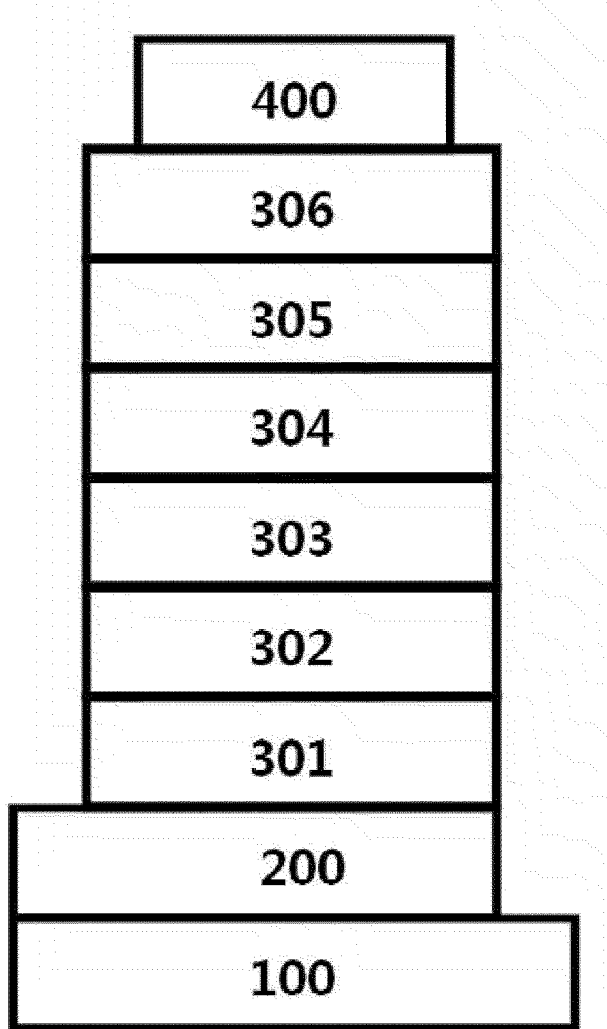
[도1]



[도2]



[도3]



[도4]

음극
전자주입층
제2 전자수송층
제2 정공저지층
제2 스택발광층
제2 전자저지층
제2 정공수송층
P형 전하생성층
N형 전하생성층
제1 전자수송층
제1 정공저지층
제1 스택발광층
제1 전자저지층
제1 정공수송층
제1 정공주입층
양극
기판

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2018/011606

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 471/04(2006.01)i, C07F 9/53(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/52(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 471/04; C07D 495/04; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; H05B 33/14; C07F 9/53; H01L 51/52

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) & Keywords: heterocyclic compound, pyrimidine, hole transport layer, electron-blocking layer, organic light emitting diode

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-1035780 B1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 20 May 2011 See claims 1, 10, 12-13; and paragraphs [0023]-[0024], [0045], [0048], [0059], [0068].	1-15
A	KR 10-2014-0079306 A (SFC CO., LTD.) 26 June 2014 See claims 1-12.	1-15
A	KR 10-2018-0072245 A (DOOSAN CORPORATION) 29 June 2018 See claims 1-14.	1-15
A	JP 2005-317314 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC.) 10 November 2005 See claims 1-12.	1-15
A	KR 10-2011-0076892 A (HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD.) 06 July 2011 See the entire document.	1-15



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

24 JUNE 2019 (24.06.2019)

Date of mailing of the international search report

24 JUNE 2019 (24.06.2019)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu,
Daejeon, 35208, 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/KR2018/011606

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-1035780 B1	20/05/2011	CN 1723258 A	18/01/2006
		EP 1571193 A1	07/09/2005
		JP 4541152 B2	08/09/2010
		TW 200414821 A	01/08/2004
		TW 1359182 B	01/03/2012
		US 2006-0251918 A1	09/11/2006
		WO 2004-053019 A1	13/04/2006
KR 10-2014-0079306 A	26/06/2014	None	
KR 10-2018-0072245 A	29/06/2018	None	
JP 2005-317314 A	10/11/2005	None	
KR 10-2011-0076892 A	06/07/2011	CN 102164923 A	24/08/2011
		CN 102164923 B	10/12/2014
		EP 2336130 A1	22/06/2011
		EP 2336130 B1	28/06/2017
		JP 5832746 B2	16/12/2015
		TW 201022261 A	16/06/2010
		US 2011-0175079 A1	21/07/2011
		US 2013-0341604 A1	26/12/2013
US 8586210 B2	19/11/2013		
WO 2010-035723 A1	01/04/2010		

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07D 471/04(2006.01)i, C07F 9/53(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/52(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 471/04; C07D 495/04; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; H05B 33/14; C07F 9/53; H01L 51/52

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) & 키워드: 헤테로 고리 화합물, 피리미딘, 정공 수송층, 정공 차단층, 유기 발광 소자

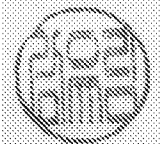
C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-1035780 B1 (이데미쓰 고산 가부시킴가이샤) 2011.05.20 청구항 1, 10, 12-13; 및 단락 [0023]-[0024], [0045], [0048], [0059], [0068] 참조.	1-15
A	KR 10-2014-0079306 A (에스에프씨 주식회사) 2014.06.26 청구항 1-12 참조.	1-15
A	KR 10-2018-0072245 A (주식회사 두산) 2018.06.29 청구항 1-14 참조.	1-15
A	JP 2005-317314 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC.) 2005.11.10 청구항 1-12 참조.	1-15
A	KR 10-2011-0076892 A (호도가야 가가쿠 고교 가부시킴가이샤) 2011.07.06 전체 문헌 참조.	1-15

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌
 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌
 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일 2019년 06월 24일 (24.06.2019)	국제조사보고서 발송일 2019년 06월 24일 (24.06.2019)
--	---

ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 감유림 전화번호 +82-42-481-3516	
---	------------------------------------	---

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-1035780 B1	2011/05/20	CN 1723258 A EP 1571193 A1 JP 4541152 B2 TW 200414821 A TW I359182 B US 2006-0251918 A1 WO 2004-053019 A1	2006/01/18 2005/09/07 2010/09/08 2004/08/01 2012/03/01 2006/11/09 2006/04/13
KR 10-2014-0079306 A	2014/06/26	없음	
KR 10-2018-0072245 A	2018/06/29	없음	
JP 2005-317314 A	2005/11/10	없음	
KR 10-2011-0076892 A	2011/07/06	CN 102164923 A CN 102164923 B EP 2336130 A1 EP 2336130 B1 JP 5832746 B2 TW 201022261 A US 2011-0175079 A1 US 2013-0341604 A1 US 8586210 B2 WO 2010-035723 A1	2011/08/24 2014/12/10 2011/06/22 2017/06/28 2015/12/16 2010/06/16 2011/07/21 2013/12/26 2013/11/19 2010/04/01