

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014년 5월 1일 (01.05.2014)



(10) 국제공개번호
WO 2014/065498 A1

- (51) 국제특허분류:
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2013/007669
- (22) 국제출원일: 2013년 8월 27일 (27.08.2013)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2012-0118500 2012년 10월 24일 (24.10.2012) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 을지로 6가 18-12 번지,
Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김태형 (KIM, Tae Hyung); 448-130 경기도 용
인시 수지구 상현동 만현마을 현대아이파크 501 동
703 호, Gyeonggi-do (KR). 엄민식 (EUM, Min Sik);
448-140 경기도 용인시 수지구 성북동 LG 빌리지 2 차
202 동 1801 호, Gyeonggi-do (KR). 김희문 (KIM, Hoe
Moon); 442-150 경기도 수원시 팔달구 화서동 블루밍
푸른숲 119 동 1402 호, Gyeonggi-do (KR). 백영미
(BEAK, Young Mi); 448-140 경기도 용인시 수지구 성
북동 대우푸르지오 105 동 1104 호, Gyeonggi-do (KR).
박호철 (PARK, Ho Cheol); 442-150 경기도 수원시 팔
달구 화서동 블루밍푸른숲아파트 108 동 1104 호,
Gyeonggi-do (KR). 이창준 (LEE, Chang Jun); 425-022
경기도 안산시 단원구 고잔 2 동 주공아파트 5 단지
535 동 404 호, Gyeonggi-do (KR). 신진용 (SHIN, Jin
Yong); 448-130 경기도 용인시 수지구 상현동 서원마
을 현대홈타운 206 동 503 호, Gyeonggi-do (KR).

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

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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE

(54) 발명의 명칭 : 유기 전계 발광 소자

(57) Abstract: The present invention relates to an organic electroluminescent device, in which a light-emitting layer using an indole-based compound and an iridium compound as a host material and dopant material, respectively, is introduced into the organic electroluminescent device so that the organic electroluminescent device can be provided with improved luminous efficiency, driving voltage, life characteristics, and the like.

(57) 요약서: 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 인돌계 화합물과 이리듐 화합물을 각각 호스트/도펀트 물질로 사용한 발광층을 유기 전계 발광 소자에 도입함으로써 발광효율, 구동 전압 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.



WO 2014/065498 A1

명세서

발명의 명칭: 유기 전계 발광 소자

기술분야

- [1] 본 발명은 구동전압, 발광효율 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서 정공이 음극에서 전자가 각각 유기물층으로 주입되고, 정공과 전자가 만나 엑시톤(exciton)이 형성되며, 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [3] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색 및 적색의 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색의 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한 색순도의 증가와 에너지 전이를 통해 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [4] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 인광 도판트의 개발은 이론적으로 형광 도판트에 비해 4배까지 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트에 대해서도 연구되고 있다.
- [5] 현재까지 정공 수송 물질, 정공 주입 물질, 전자 수송 물질로는 NPB, BCP, Alq₃ 등이 알려져 있으며, 발광 물질로는 안트라센 유도체가 알려져 있다. 또한 발광 물질 중 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물은 청색(blue), 녹색(green), 적색(red)의 인광 도판트 물질로 사용되고 있으며, CBP는 인광 호스트 물질로 사용되고 있다.
- [6] 그러나 종래의 발광 물질은 발광 특성이 양호하나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 좋지 않기 때문에 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하는 실정이다. 따라서 우수한 성능을 가지는 발광 물질을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [7] 본 발명은 상기한 문제점을 해결하기 위해 구동전압, 발광효율 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

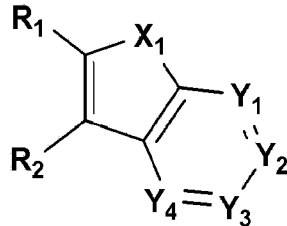
과제 해결 수단

- [8] 상기한 목적을 달성하기 위해 본 발명은 양극; 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의

유기물층 중 적어도 하나는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물과 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[9] [화학식 1]

[10]

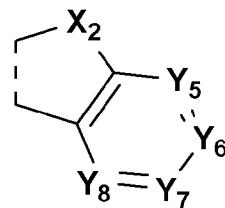


[11] 상기 화학식 1에서,

[12] Y₁ 내지 Y₄는 각각 독립적으로, N 또는 CR₃이고, Y₁과 Y₂, Y₂와 Y₃, 또는 Y₃와 Y₄ 중 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 축합 고리를 형성하며,

[13] [화학식 2]

[14]



[15] 상기 화학식 2에서,

[16] 점선은 화학식 1의 화합물과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며, Y₅ 내지 Y₈은 각각 독립적으로, N 또는 CR₄이고,

[17] 상기 X₁ 및 X₂는 각각 독립적으로, O, S, Se, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃) 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 이루어진 군에서 선택되고, 이때, X₁ 및 X₂ 중에서 적어도 하나는 N(Ar₁)이며,

[18] 상기 R₁ 내지 R₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

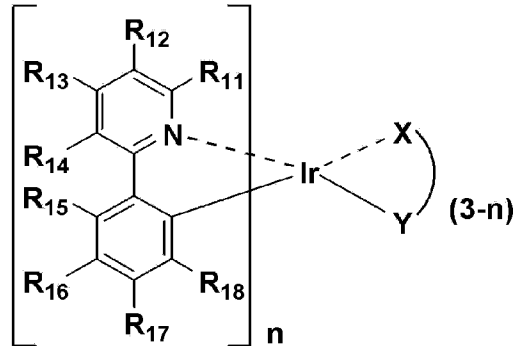
[19] 상기 R₁ 내지 R₄는 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

[20] 상기 R₁ 내지 R₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀

의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있고,

[21] [화학식 3]

[22]



[23] 상기 화학식 3에서,

[24] X-Y는 유기 리간드로서, X는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기이고, Y는 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기 또는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기이며, R_{11} 내지 R_{18} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, n은 1 내지 3의 정수이다.

[25] 본 발명에서 사용되는 알킬은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미하며, 이의 비제한적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있다.

[26] 본 발명에서 사용되는 알케닐(alkenyl)은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있다.

[27] 본 발명에서 사용되는 알키닐(alkynyl)은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 에타인일(ethynyl), 2-프로파인일(2-propynyl) 등이 있다.

[28] 본 발명에서 사용되는 시클로알킬은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는

폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있다.

- [29] 본 발명에서 사용되는 헤테로시클로알킬은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이의 비제한적인 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있다.
- [30] 본 발명에서 사용되는 아릴은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이때, 2 이상의 고리는 서로 단순 부착되거나 축합된 형태로 부착될 수 있다. 이의 비제한적인 예로는 페닐, 비페닐, 트리페닐, 터페닐(terphenyl), 나프틸, 플루오레닐, 페난트릴, 안트라세닐, 인데닐 등이 있다.
- [31] 본 발명에서 사용되는 헤테로아릴은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기로서, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 질소(N), 산소(O), 황(S) 또는 셀레늄(Se)과 같은 헤테로원자로 치환된다. 이때, 헤테로아릴은 2 이상의 고리가 서로 단순 부착되거나 축합된 형태로 부착될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함할 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 비제한적인 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 및 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있다.
- [32] 본 발명에서 사용되는 알킬옥시는 RO-로 표시되는 1가의 작용기를 의미하며, 상기 R은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로서, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 이러한 알킬옥시의 비제한적인 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다.
- [33] 본 발명에서 사용되는 아릴옥시는 R'O-로 표시되는 1가의 작용기를 의미하며, 상기 R'는 탄소수 6 내지 60의 아릴이다. 이러한 아릴옥시의 비제한적인 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있다.
- [34] 본 발명에서 사용되는 알킬실릴은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴을 의미하며, 아릴실릴은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미하고, 아릴아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [35] 본 발명에서 사용되는 축합 고리는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합

헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

발명의 실시를 위한 형태

[36] 이하, 본 발명을 설명한다.

[37]

[38] 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[39] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 인돌계 기본 골격에 축합 탄소고리 또는 축합 헤테로환 모이어티, 바람직하게는 축합 헤테로환 모이어티가 연결되고, 여러 치환체에 의해 에너지 레벨이 조절됨으로써 넓은 밴드갭 (sky blue ~ red)을 갖는다. 따라서 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 사용할 경우 인광특성이 개선됨과 동시에 전자 및/또는 정공 수송 능력, 발광 능력을 높일 수 있다.

[40] 여기서 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층 중 정공 수송층, 전자 수송층 및 발광층에 사용되는 것이 바람직하며, 인돌계 기본 골격으로 인해 종래의 CBP에 비해 발광 호스트 물질로써 우수한 특성을 나타내기 때문에 발광층의 호스트 물질로 사용되는 것이 더욱 바람직하다.

[41] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 인돌계 기본 골격에 다양한 방향족 환(aromatic ring)이 치환체로 결합되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도가 향상되어 종래 CBP보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한 다양한 방향족 환 치환체로 인해 분자 전체가 바이폴라(bipolar)한 성격을 가지면서 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있기 때문에 종래 CBP에 비해 발광층의 호스트 재료로서의 우수한 특성을 나타낼 수 있다.

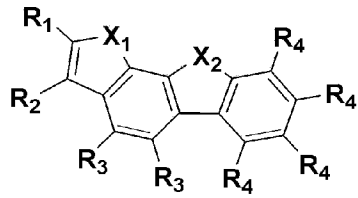
[42] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물의 Y_1 내지 Y_4 에서 축합 고리를 형성하지 않는 것은 모두 CR_3 인 것이 바람직하고, 이때, 복수개의 R_3 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, 화학식 1로 표시되는 화합물의 Y_5 내지 Y_8 은 모두 CR_4 인 것이 바람직하며, 이때, 복수개의 R_4 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[43] 한편 화합물의 넓은 밴드갭(band-gap)과 열안정성을 고려할 때, 상기 화학식 1의 R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 수소, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기(예: 페닐, 나프틸, 비스페닐) 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기(예: 피리딘)인 것이 바람직하다.

[44] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1a 내지 1f로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[45] [화학식 1a]

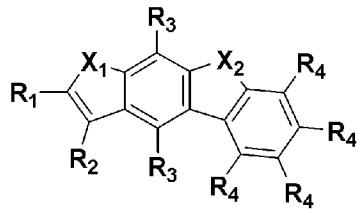
[46]



[47]

[화학식 1b]

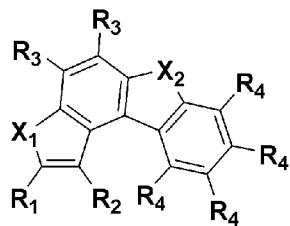
[48]



[49]

[화학식 1c]

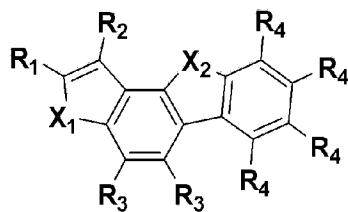
[50]



[51]

[화학식 1d]

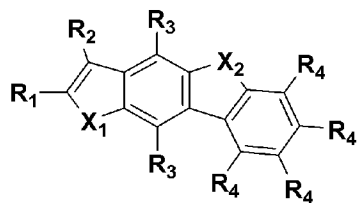
[52]



[53]

[화학식 1e]

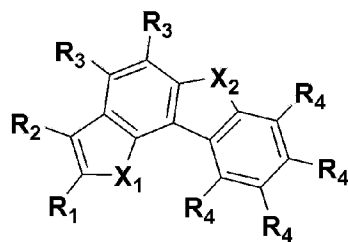
[54]



[55]

[화학식 1f]

[56]



[57]

상기 화학식 1a 내지 1f에서, X_1 , X_2 및 R_1 내지 R_4 는 상기에서 정의한 바와 같다.

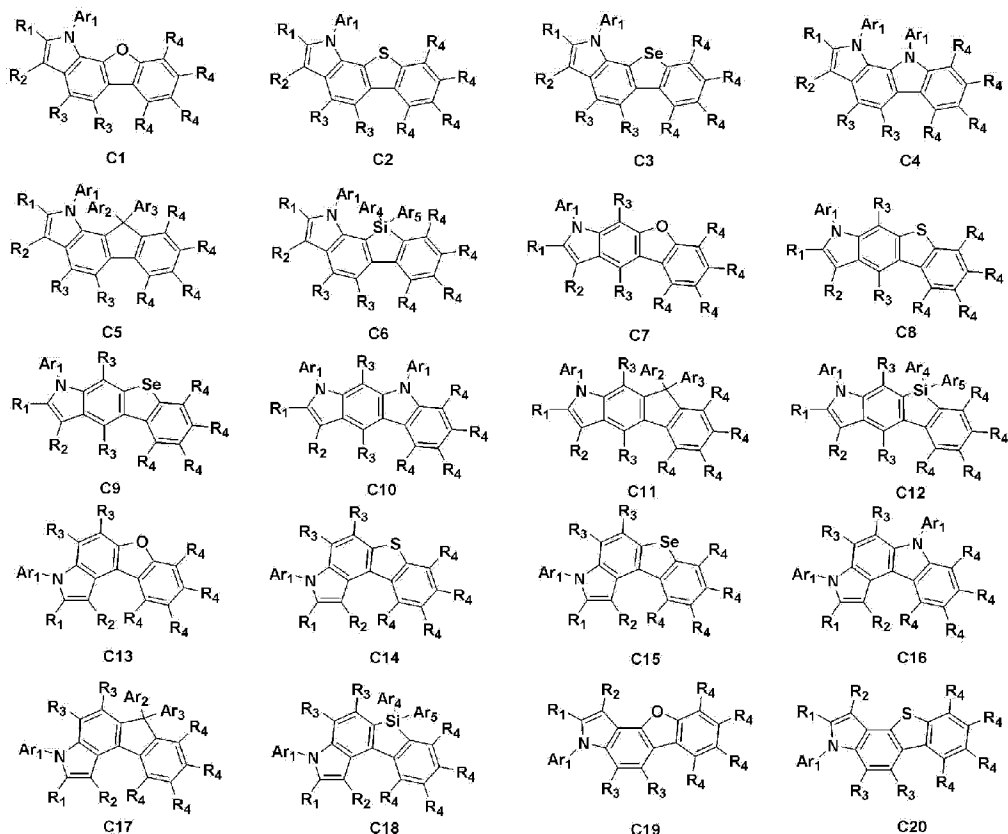
[58]

한편 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 구동 전압 및 수명 등의 특성을 고려할 때, 상기 화학식 1의 X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로, N(Ar_1) 또는 S인 것이 바람직하다. 즉, X_1 이 N(Ar_1)이고 X_2 가 S이거나, X_1 이 S이고 X_2 가 N(Ar_1)이거나,

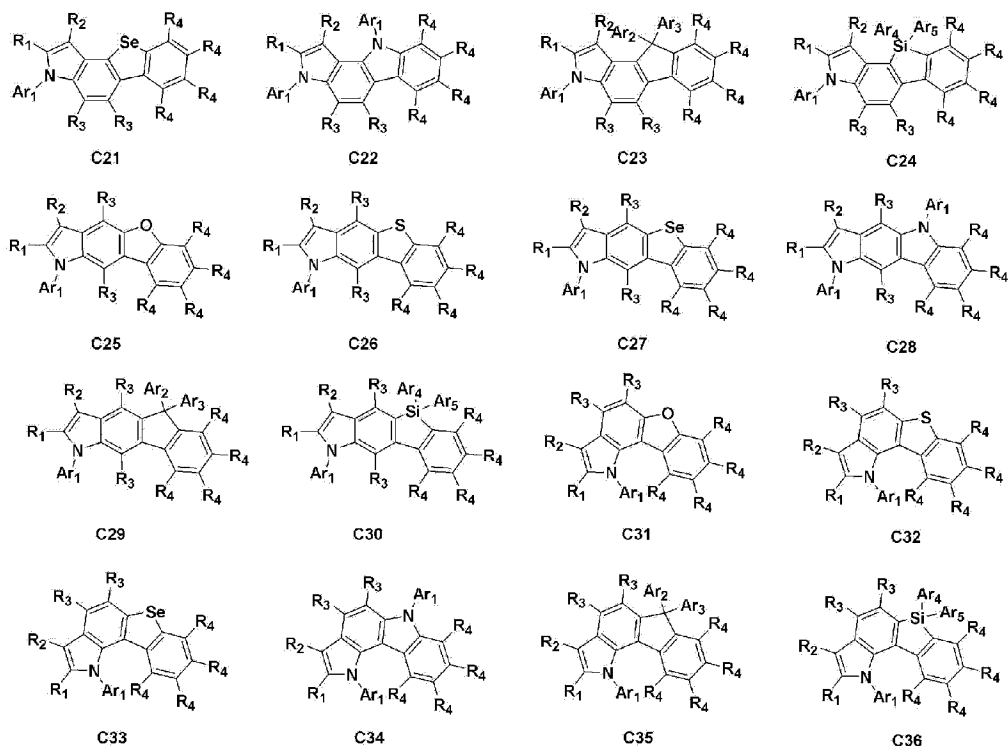
X_1 및 X_2 가 모두 $N(Ar_1)$ 인 것이 바람직하다.

[59] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로, 하기 화학식 C1 내지 C66으로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

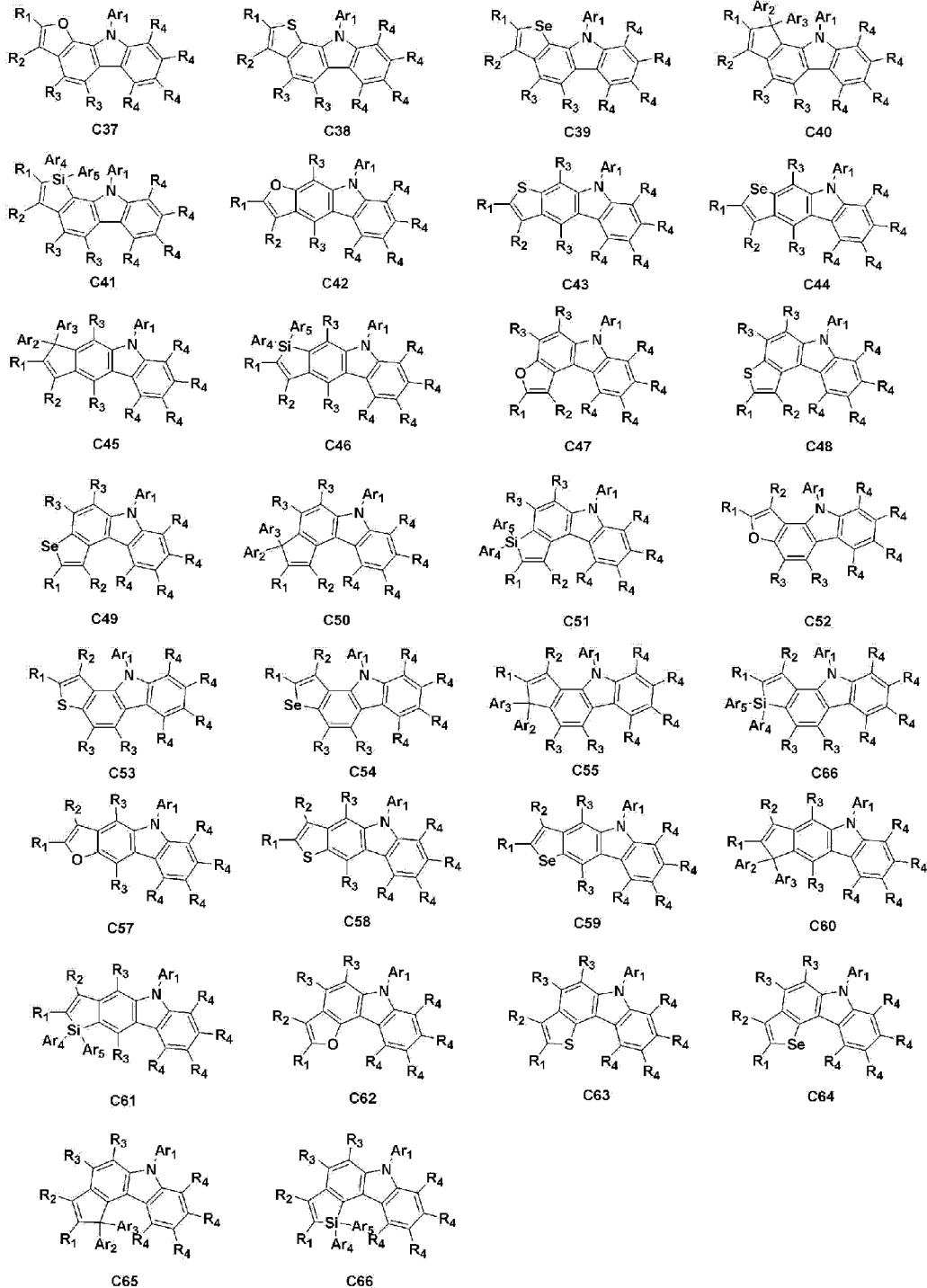
[60]



[61]



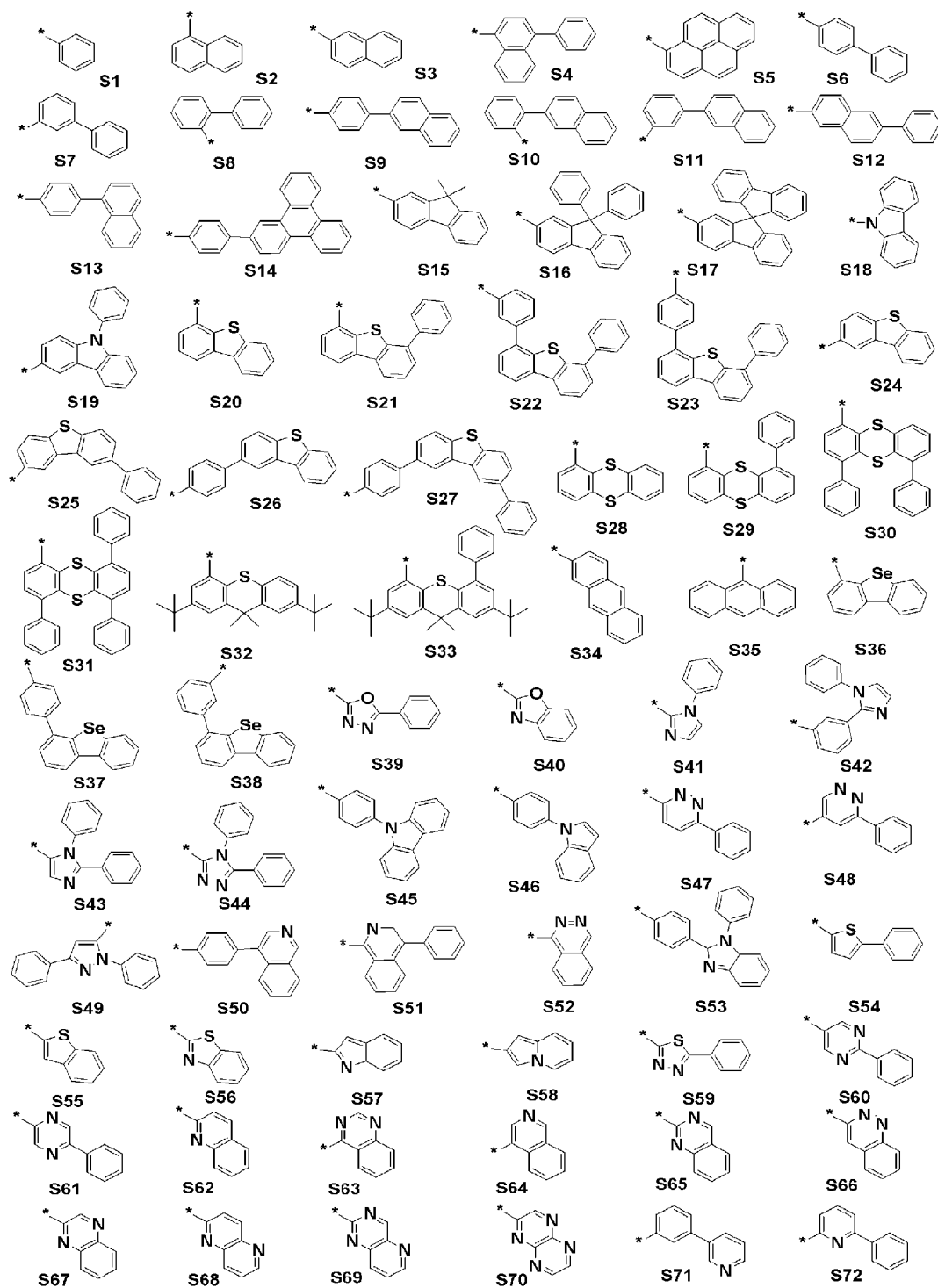
[62]

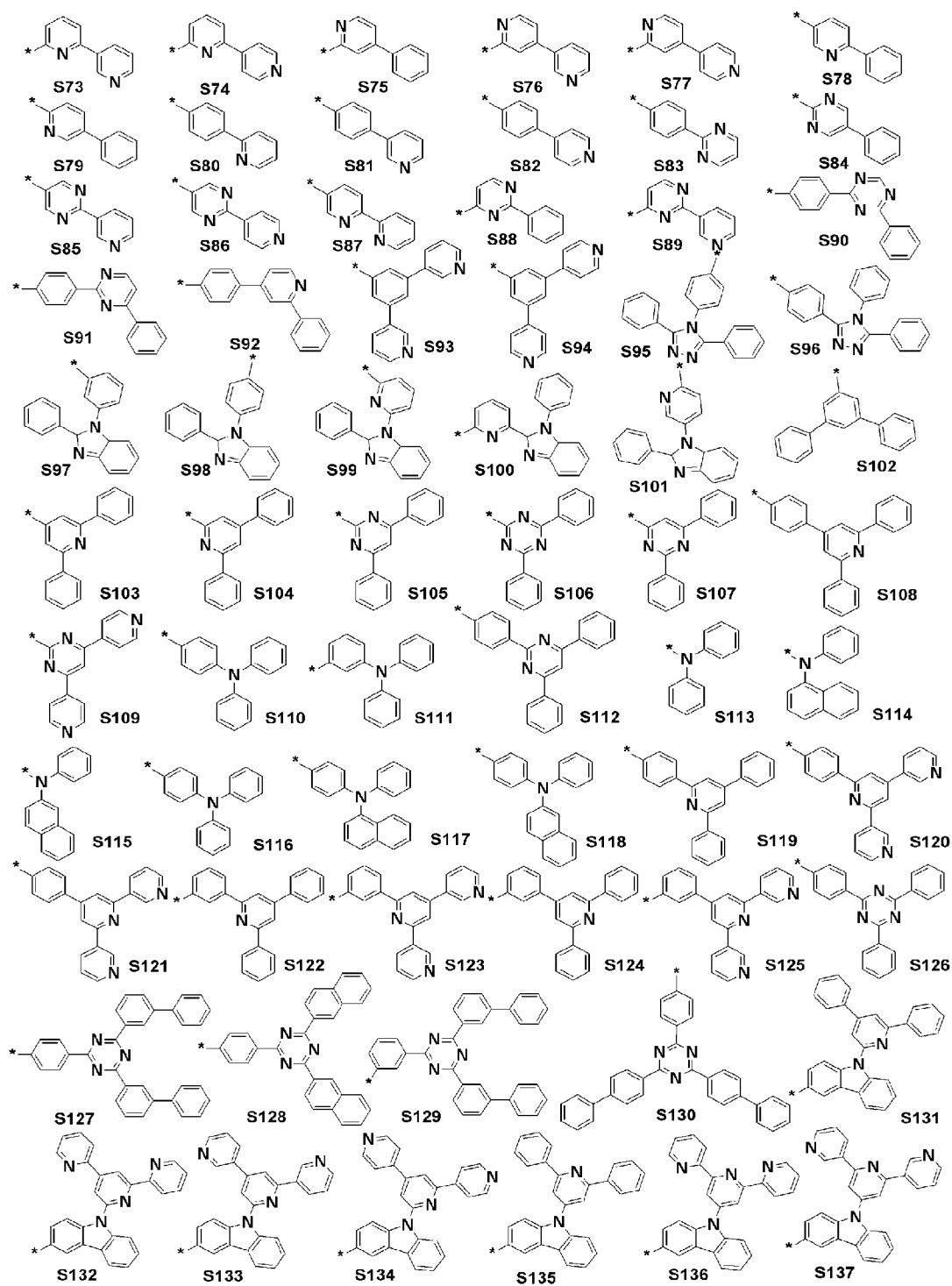


[63]

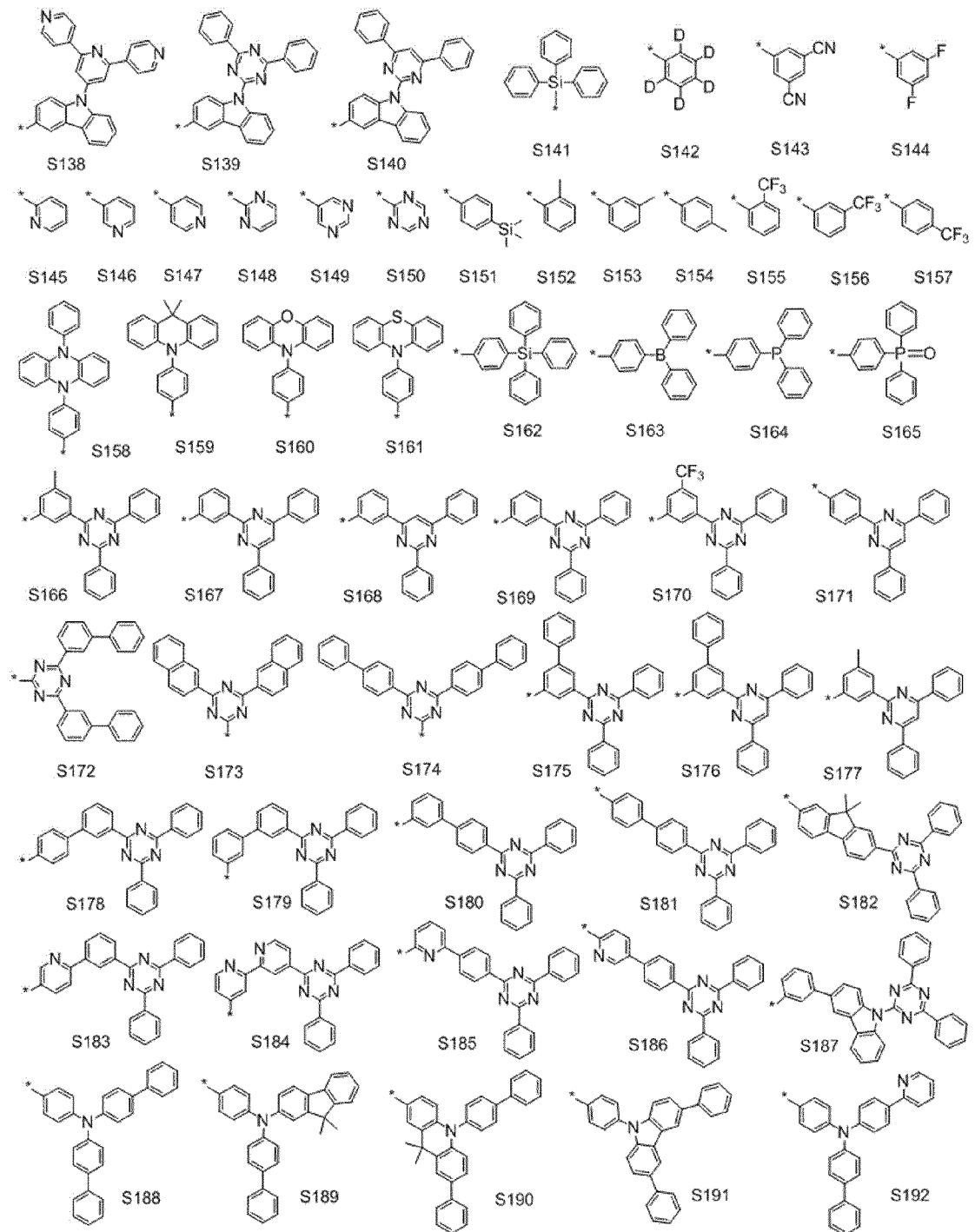
[64] 상기 화학식 C1 내지 C66에서, R₁ 내지 R₄는 상기에서 정의한 바와 같으며, 이때, 복수개의 R₃ 및 R₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, Ar₁ 내지 Ar₅는 상기에서 정의한 바와 같은데, 그 중에서도 C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다. 구체적으로, Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로, 하기 치환체(작용기) 그룹(S1-S192)으로부터 선택되는 것이 더욱 바람직하다.

[65]





[67]

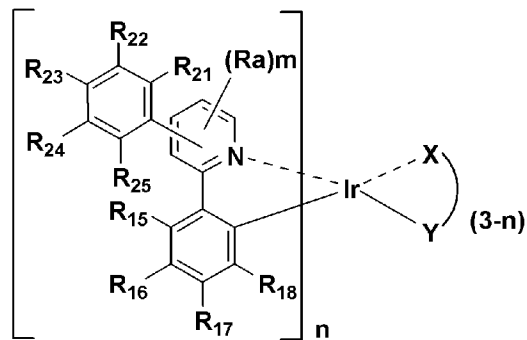


[68] 한편 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 이리듐(Ir)을 중심으로, 한쪽에는 방향족 환이 연결되고, 다른 한쪽에는 유기 리간드가 연결된다. 이러한 본 발명의 화학식 3으로 표시되는 화합물은 유기 리간드가 연결되어 있기 때문에 HOMO와 삼중항 MLCT 상태의 에너지 갭을 증가시킬 수 있다. 따라서 화학식 3으로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 구체적으로, 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층에 사용할 경우 인광특성이 개선됨과 동시에 색순도를 높일 수 있다.

- [69] 특히, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 함께 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우 그 성능을 높일 수 있다. 즉, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 중 발광층은 호스트/도펀트 물질로 이루어지는데, 본 발명은 호스트/도펀트 사이에 에너지가 효율적으로 전달될 수 있도록 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 호스트 물질로, 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용하여 구동전압, 발광 효율, 수명 특성뿐만 아니라 색순도가 우수한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있는 것이다.
- [70] 이러한 본 발명의 화학식 3으로 표시되는 화합물에서, X 및 Y는 서로 결합하여 X-Y로 표시되는 유기 리간드를 형성하는 것으로, 이때, X는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 바람직하게는 N-함유 헤테로아릴기이고, Y는 C₆~C₄₀의 아릴기 또는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기이다.
- [71] 상기 X 및 Y의 아릴기 또는 헤테로아릴기는 할로젠, 시아노기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₁~C₄₀의 알콕시기, C₆~C₄₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 또한, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리 또는 스피로 결합을 형성할 수 있다.
- [72] 본 발명의 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3a 내지 3d로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

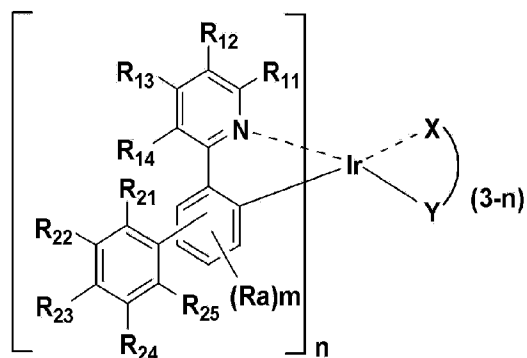
[73] [화학식 3a]

[74]



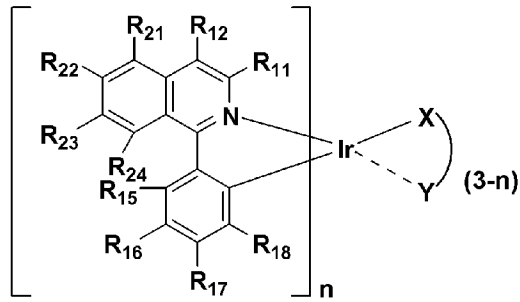
[75] [화학식 3b]

[76]



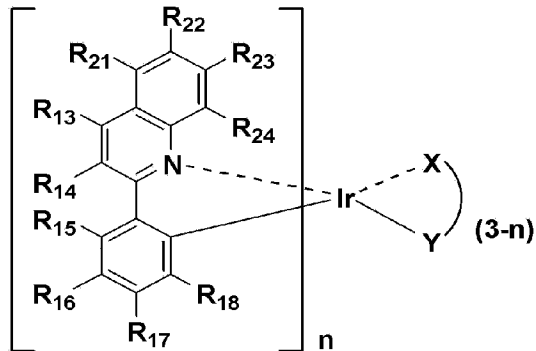
[77] [화학식 3c]

[78]



[79] [화학식 3d]

[80]

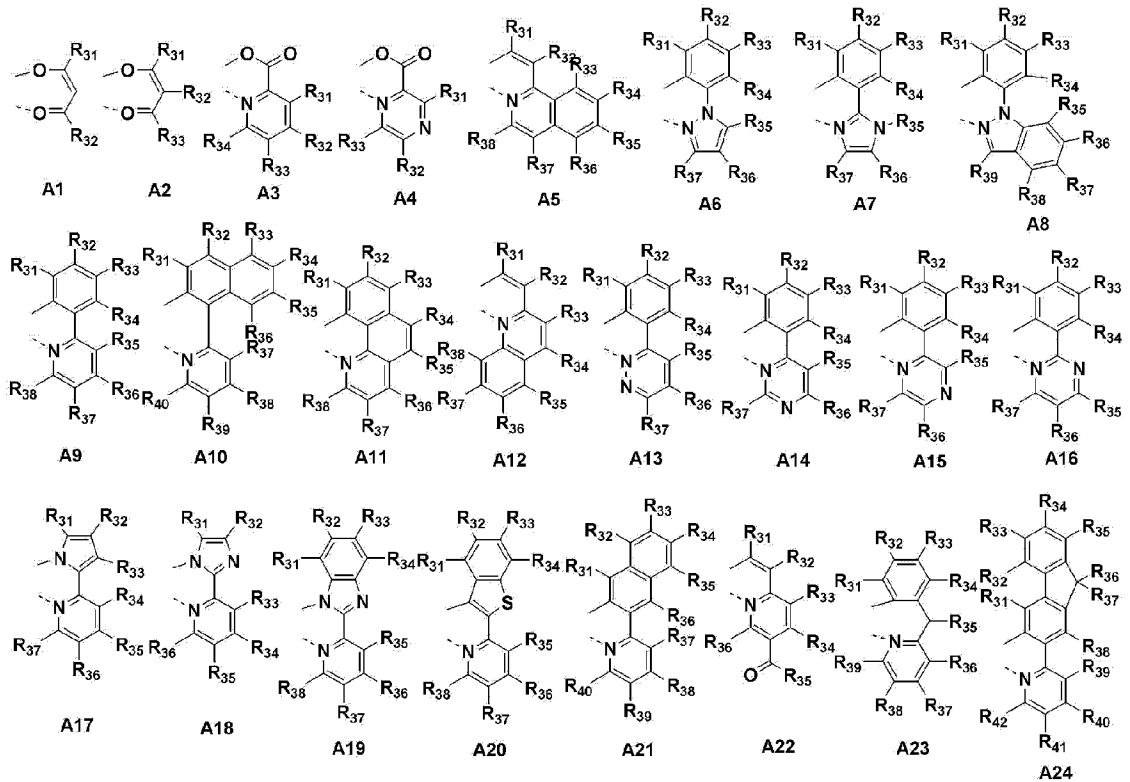


[81] 상기 화학식 3a 내지 3d에서, X, Y, n 및 R₁₁ 내지 R₁₈은 상기에서 정의한 바와 동일하다.

[82] 상기 R_a 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 m은 0 내지 3의 정수이다.

[83] 상기 화학식 3에서 유기 리간드인 X-Y는 유기 전계 발광 소자의 특성을 고려할 때, 하기 A1-A24로 표시되는 구조로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[84]

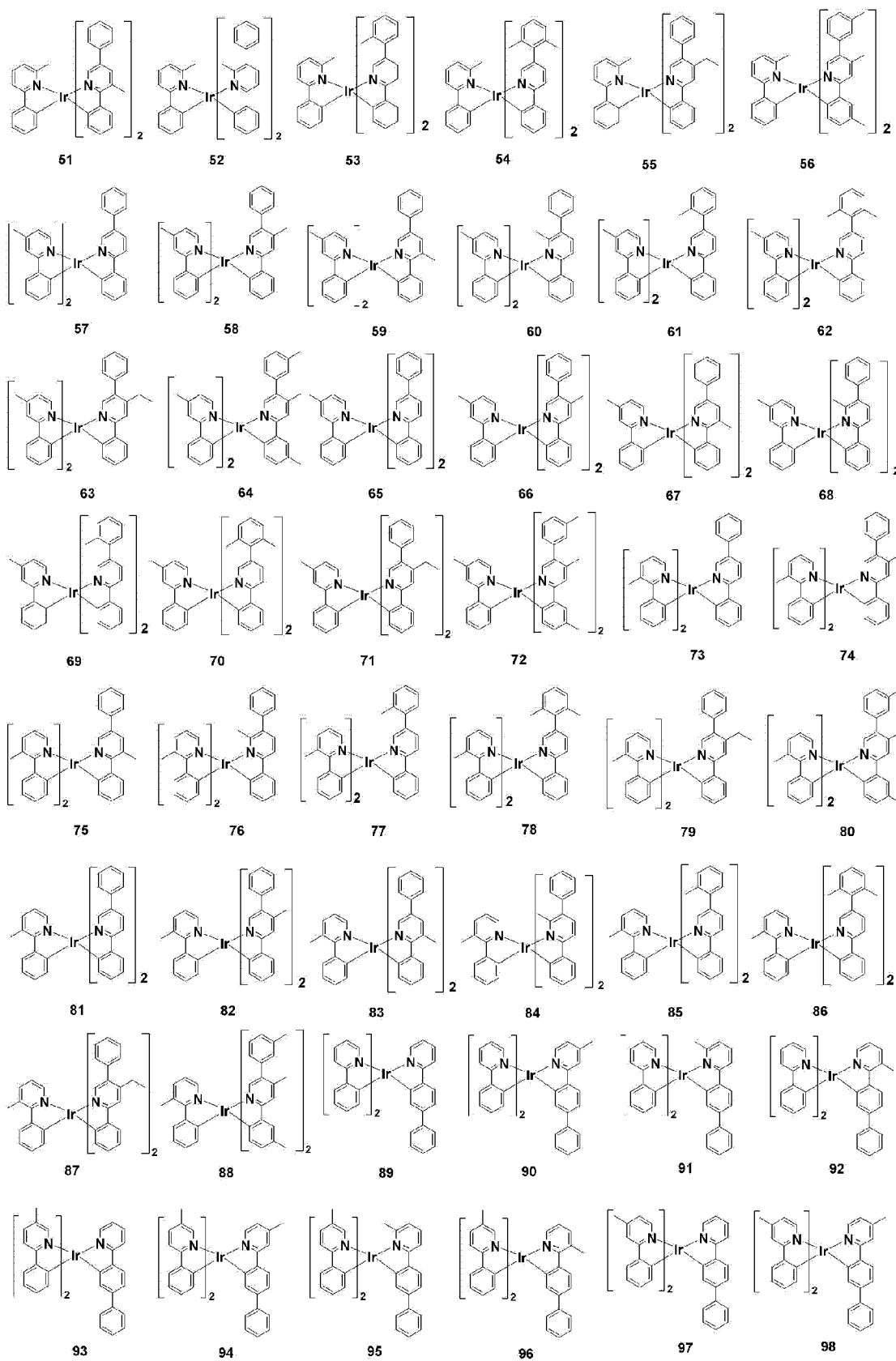


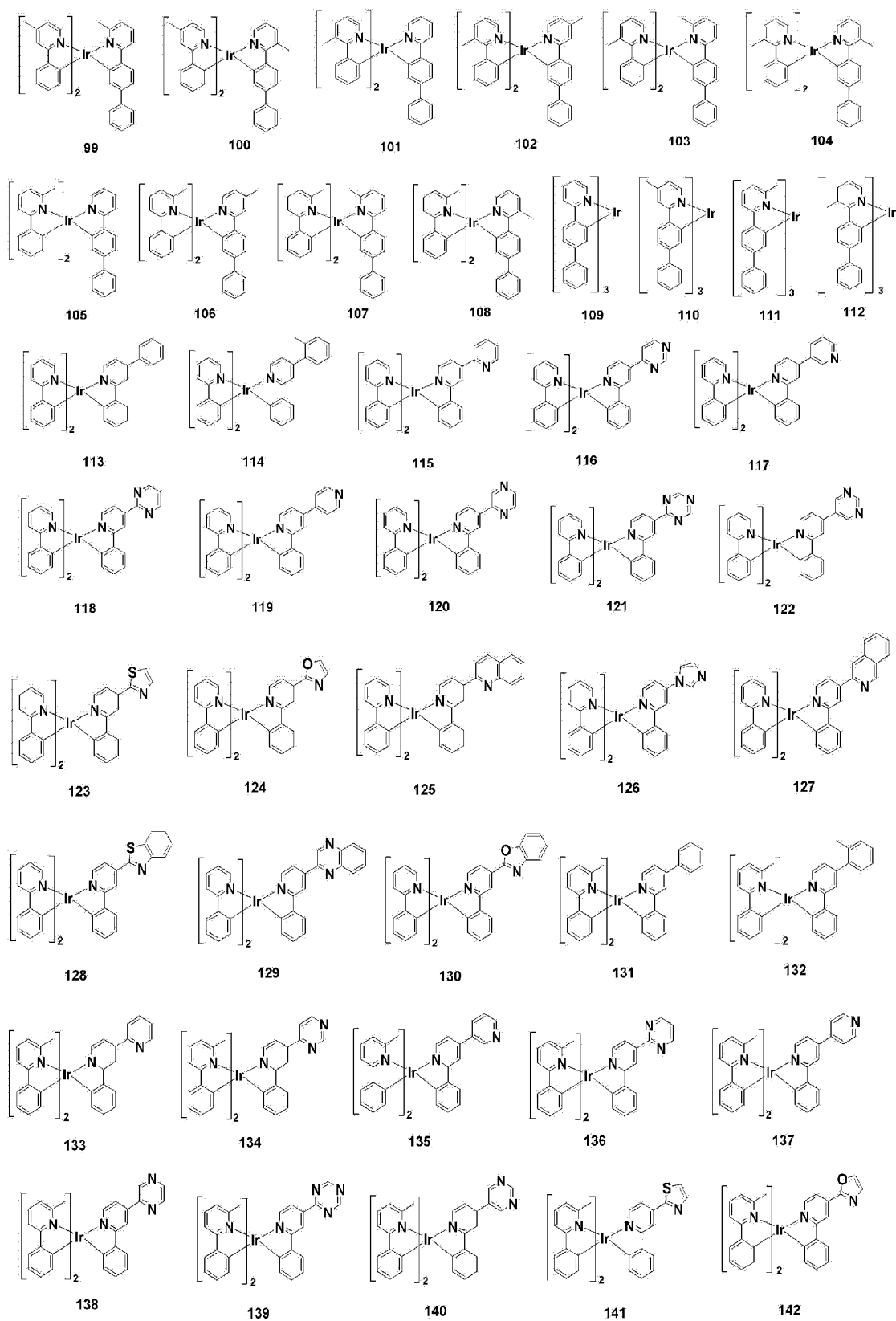
[85] 상기 A1 내지 A24로 표시되는 구조의 R₃₁ 내지 R₄₂는, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

[86] 이러한 본 발명의 화학식 3으로 표시되는 화합물의 구체적인 예로 하기 화합물들(1-170)을 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[87]

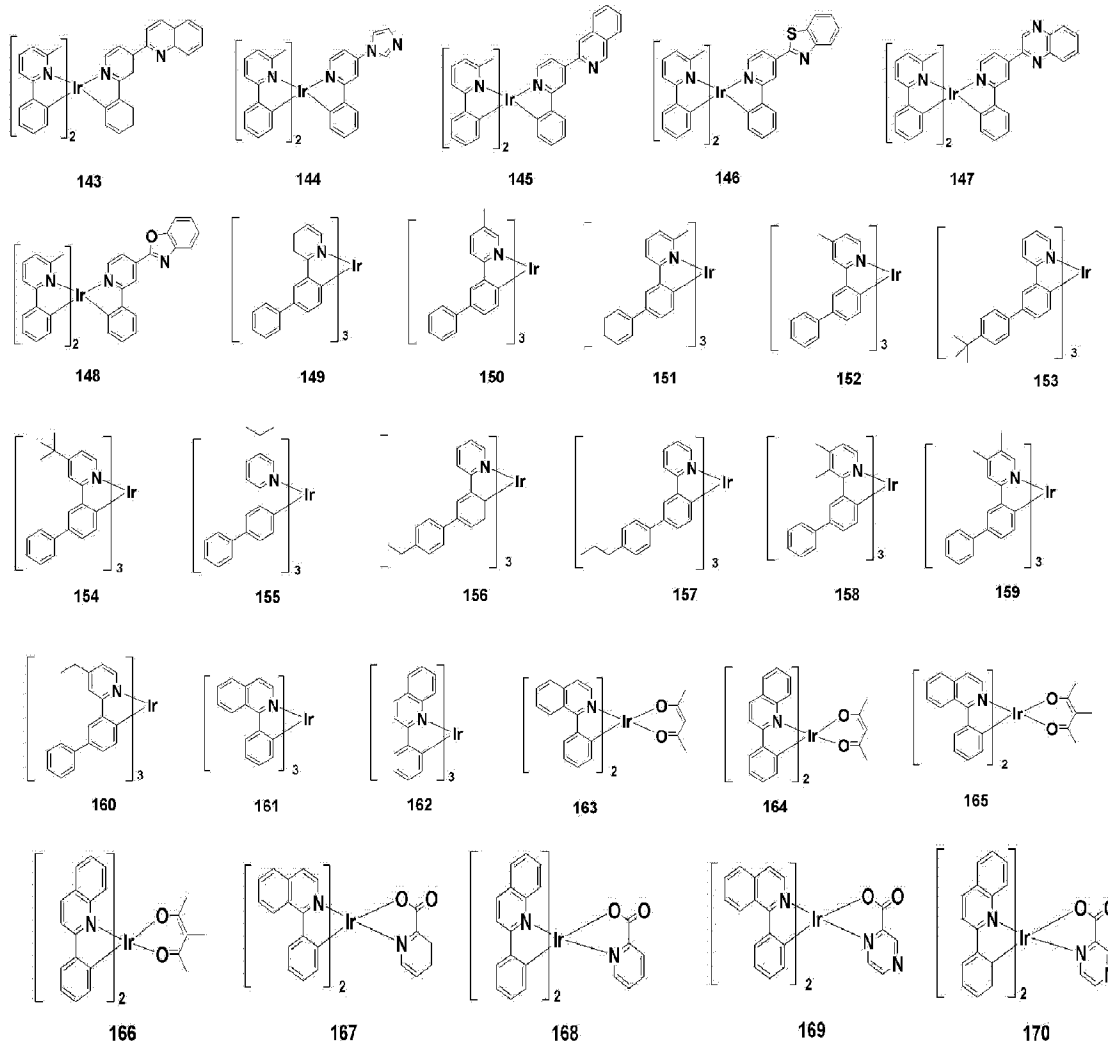






[92]

[93]



[94]

[95] 이상에서 설명한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물과 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 합성예를 바탕으로 다양하게 합성할 수 있다.

[96] 한편 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 양극(anode), 음극(cathode) 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는데, 상기 1층 이상의 유기물층 중 어느 하나 이상이 상기 화학식 1 및 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당업계에 공지된 물질 및 구조로 이루어질 수 있다.

[97] 구체적으로 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 또한 전극(양극 또는 음극)과 유기물층의 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수도 있다.

[98] 상기 유기물층에 해당되는 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 하나 이상은 상기 화학식 1 및 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 바람직하다. 보다 바람직하게는 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로, 화학식 3으로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 도펀트로 사용될 수 있다.

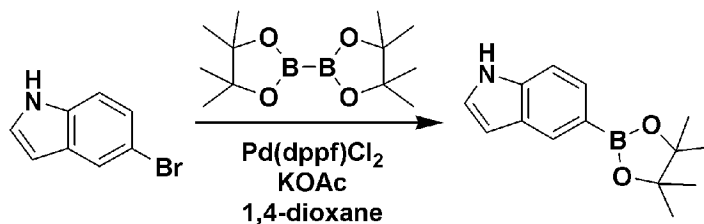
- [99] 상기 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [100] 상기 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금 등의 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO) 등의 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb 등의 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린 등의 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 사용될 수 있다.
- [101] 상기 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납 등의 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al 등의 다층 구조 물질 등이 사용될 수 있다.
- [102] 이외에 전자 주입층 및 전자 수송층은 당업계에 공지된 물질이라면 특별히 한정하지 않고 사용할 수 있다.
- [103] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 제조방법은 당업계에 공지된 방법이라면 특별히 한정되지 않으나, 상기 유기물층은 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 여기서, 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등을 들 수 있다.
- [104]
- [105] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[106]

[107] [준비예 1] IC-1의 합성

[108] <단계 1> 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole의 합성

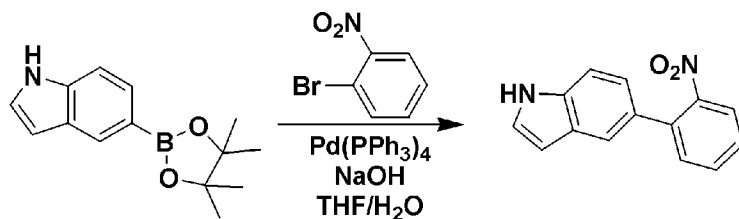
[109]



- [110] 질소 기류 하에서 5-bromo-1H-indole (25 g, 0.128 mol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (48.58 g, 0.191 mol), Pd(dppf)Cl₂ (5.2 g, 5 mol), KOAc (37.55 g, 0.383 mol) 및 1,4-dioxane (500 ml)를 혼합하고 130°C에서 12시간 동안 교반하였다.
- [111] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole (22.32 g, 수율 72%)을 얻었다.
- [112] ¹H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 6.45 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.42 (d, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.21 (s, 1H)

[113] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[114]



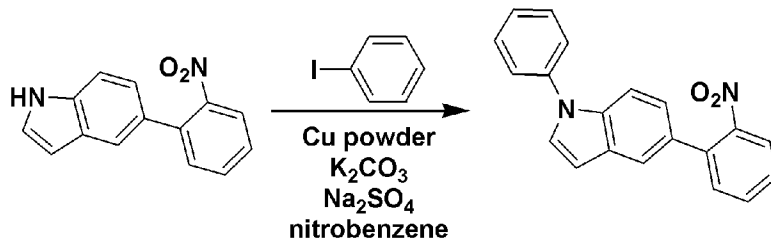
[115] 질소 기류 하에서 1-bromo-2-nitrobenzene (15.23 g, 75.41 mmol)과 상기 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole (22 g, 90.49 mmol), NaOH (9.05 g, 226.24 mmol) 및 THF/H₂O(400 ml/200 ml)를 혼합한 다음, 40°C에서 Pd(PPh₃)₄(4.36 g, 5 mol%)를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[116] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole (11.32 g, 수율 63%)을 얻었다.

[117] ¹H-NMR: δ 6.47 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.44 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.65 (t, 1H), 7.86 (t, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.09 (t, 1H), 8.20 (s, 1H)

[118] <단계 3> 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[119]



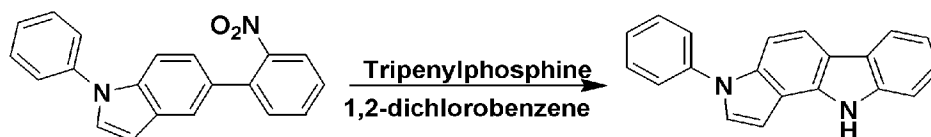
[120] 질소 기류 하에서 상기 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole (11 g, 46.17 mmol), iodobenzene (14.13 g, 69.26 mmol), Cu powder (0.29 g, 4.62 mmol), K₂CO₃ (6.38 g, 46.17 mmol), Na₂SO₄ (6.56 g, 46.17 mmol), nitrobenzene (200 ml)를 혼합하고 190°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[121] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (10.30 g, 수율 71%)을 얻었다.

[122] ¹H-NMR: δ 6.48 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.45 (m, 3H), 7.55 (m, 4H), 7.63 (t, 1H), 7.84 (t, 1H), 7.93 (s, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.11 (t, 1H)

[123] <단계 4> IC-1의 합성

[124]



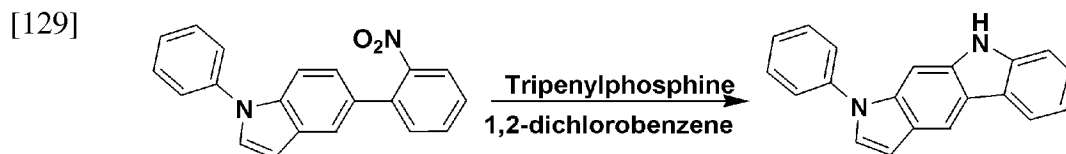
[125] 질소 기류 하에서 상기 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (5 g, 15.91 mmol), triphenylphosphine (10.43 g, 39.77 mmol) 및 1,2-dichlorobenzene (50 ml)를

혼합하고 12시간 동안 교반하였다.

- [126] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 얻어진 유기층에 대해 MgSO_4 로 물을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC=3:1 (v/v))로 정제하여 IC-1 (2.38 g, 수율 53%)을 얻었다.

- [127] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.99 (d, 1H), 7.12 (t, 1H), 7.27 (t, 1H), 7.32 (d, 1H), 7.41 (t, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.60 (m, 5H), 7.85 (d, 1H), 8.02 (d, 1H), 10.59 (s, 1H)

- [128] [준비예 2] IC-2의 합성

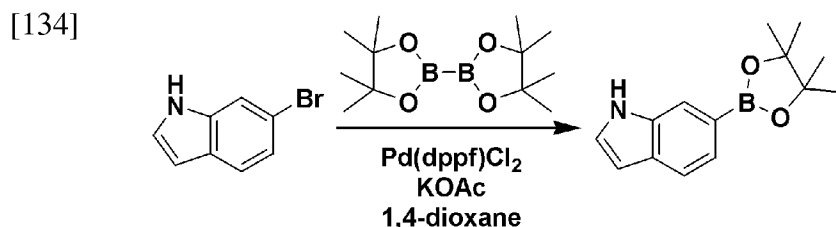


- [130] 상기 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole, triphenylphosphine 및 1,2-dichlorobenzene을 사용하여 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-1과 구조 이성질체인 IC-2을 얻었다.

- [131] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.98 (d, 1H), 7.13 (t, 1H), 7.26 (t, 1H), 7.33 (d, 1H), 7.42 (t, 1H), 7.51 (s, 1H), 7.61 (m, 5H), 7.84 (d, 1H), 8.03 (s, 1H), 10.58 (s, 1H)

- [132] [준비예 3] IC-3의 합성

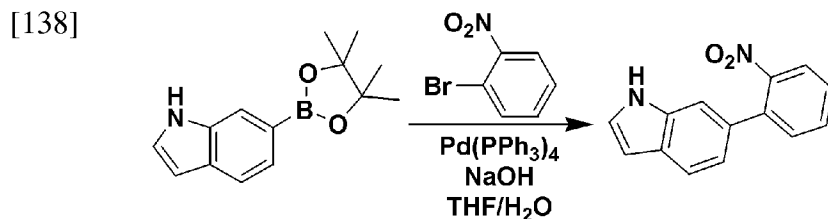
- [133] <단계 1> 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole의 합성



- [135] 5-bromo-1H-indole 대신 6-bromo-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 얻었다.

- [136] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.25 (s, 12H), 6.52 (d, 1H), 7.16 (d, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.49 (d, 1H), 7.53 (s, 1H), 8.15 (s, 1H)

- [137] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

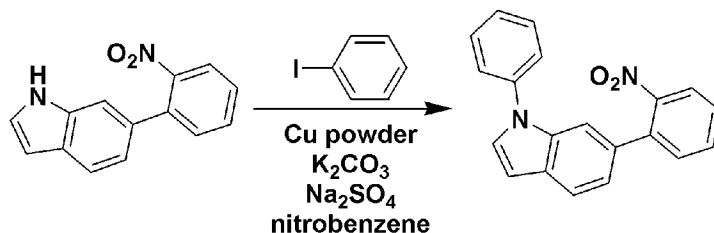


- [139] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 상기 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 2>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[140] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.57 (d, 1H), 7.07 (d, 1H), 7.24 (d, 1H), 7.35 (s, 1H), 7.43 (t, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.58 (t, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 8.19 (s, 1H)

[141] <단계 3> 6-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[142]

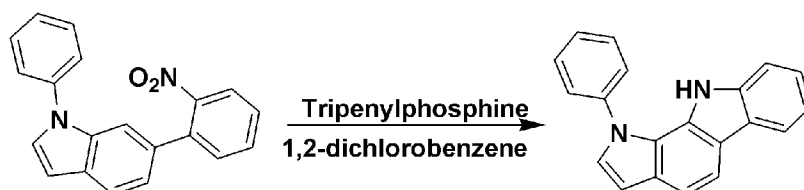


[143] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[144] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.81 (d, 1H), 7.12 (t, 1H), 7.22 (t, 1H), 7.35 (s, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.51 (m, 3H), 7.56 (m, 2H), 7.62 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 8.02 (d, 1H)

[145] <단계 4> IC-3의 합성

[146]

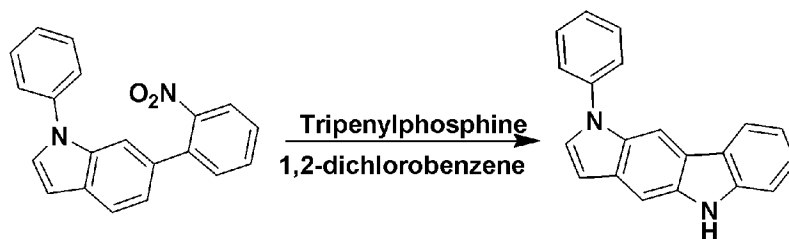


[147] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-3을 얻었다.

[148] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.80 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.23 (t, 1H), 7.42 (d, 1H), 7.50 (m, 3H), 7.57 (m, 2H), 7.63 (m, 2H), 7.86 (d, 1H), 8.03 (d, 1H), 9.81 (s, 1H)

[149] [준비예 4] IC-4의 합성

[150]



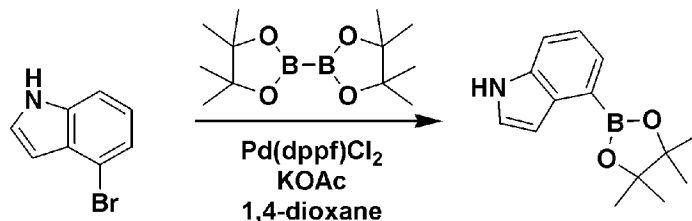
[151] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-3과 구조 이성질체인 IC-4를 얻었다.

[152] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.81 (d, 1H), 7.12 (t, 1H), 7.22 (t, 1H), 7.43 (s, 1H), 7.51 (m, 3H), 7.58 (m, 2H), 7.64 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 8.02 (s, 1H), 9.82 (s, 1H)

[153] [준비예 5] IC-5의 합성

[154] <단계 1> 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole의 합성

[155]



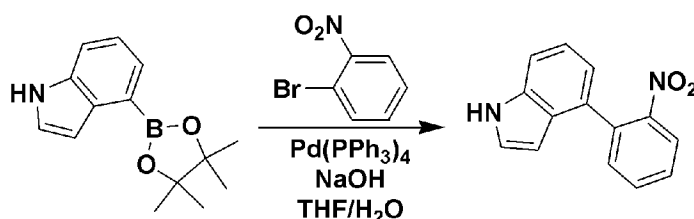
[156] 5-bromo-1H-indole 대신 4-bromo-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비에 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 얻었다.

[157] $^1\text{H NMR}$: δ 1.26 (s, 12H), 6.43 (d, 1H), 7.26 (t, 1H), 7.48 (d, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 8.23 (s, 1H)

[158] <단계 2> 4-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[159]

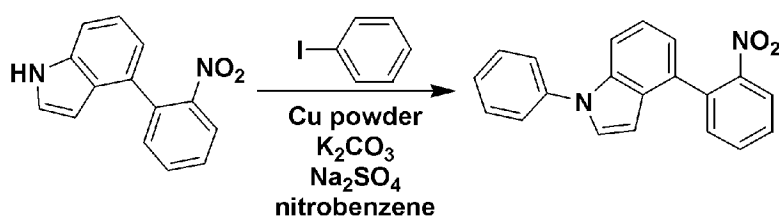


[160] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 상기 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비에 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 4-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[161] $^1\text{H NMR}$: δ 6.45 (d, 1H), 7.27 (t, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.66 (t, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.89 (m, 2H), 7.99 (d, 1H), 8.04 (d, 1H), 8.24 (s, 1H)

[162] <단계 3> 4-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[163]

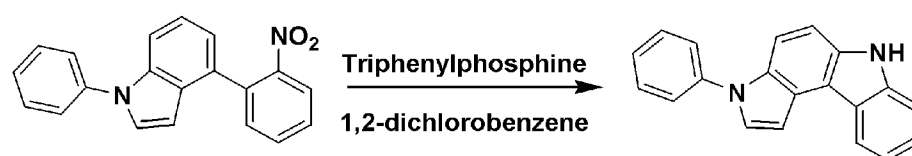


[164] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 4-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 4-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[165] $^1\text{H NMR}$: δ 6.47 (d, 1H), 7.28 (t, 1H), 7.47 (m, 2H), 7.52 (m, 2H), 7.60 (m, 2H), 7.67 (t, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.89 (m, 2H), 8.00 (d, 1H), 8.06 (d, 1H)

[166] <단계 4> IC-5의 합성

[167]



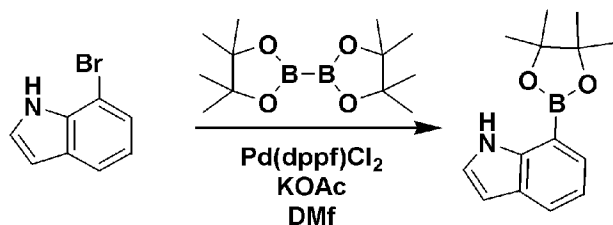
[168] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 4-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-5을 얻었다.

[169] ^1H NMR: δ 6.49 (d, 1H), 7.29 (t, 1H), 7.46 (m, 2H), 7.54 (m, 2H), 7.61 (d, 1H), 7.69 (t, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.88 (m, 2H), 8.01 (d, 1H), 8.04 (d, 1H), 8.23 (s, 1H)

[170] [준비예 6] IC-6의 합성

[171] <단계 1> 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole의 합성

[172]



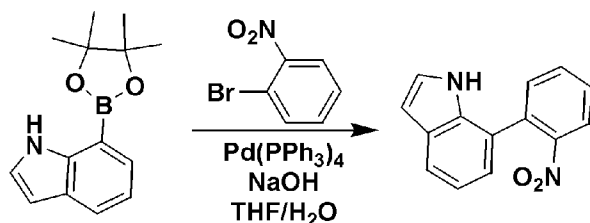
[173] 5-bromo-1H-indole 대신 7-bromo-1H-indole를 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 얻었다.

[174] ^1H NMR: δ 1.25 (s, 12H), 6.43 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.45 (t, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.71 (d, 1H), 8.22 (s, 1H)

[175] <단계 2> 7-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[176]

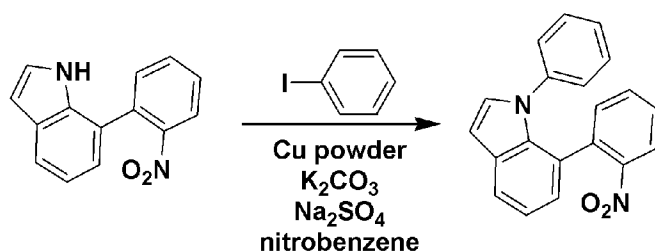


[177] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 상기 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 7-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[178] ^1H NMR: δ 6.42 (d, 1H), 7.24 (d, 1H), 7.43 (t, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.70 (m, 2H), 7.88 (t, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.11 (d, 1H), 8.23 (s, 1H)

[179] <단계 3> 7-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[180]



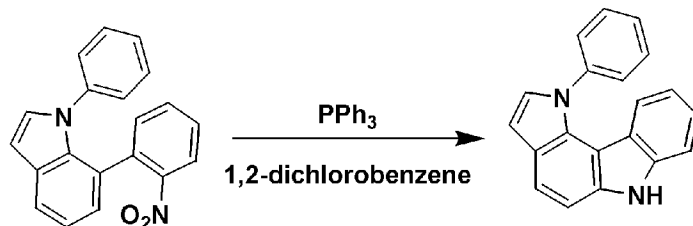
[181] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 7-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여

7-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[182] ^1H NMR: δ 6.43 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.44 (m, 3H), 7.56 (m, 4H), 7.71 (m, 2H), 7.89 (t, 1H), 8.02 (d, 1H), 8.10 (d, 1H)

[183] <단계 4> IC-6의 합성

[184]



[185] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

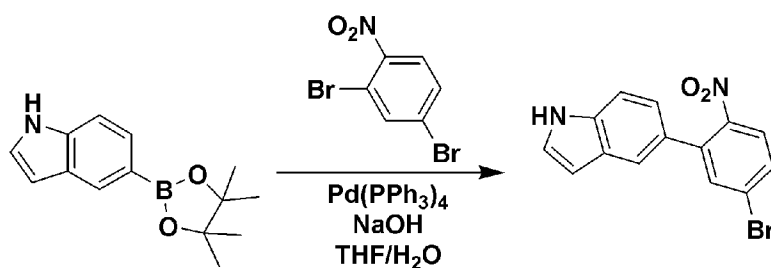
7-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-6을 얻었다.

[186] ^1H NMR: δ 6.45 (d, 1H), 7.24 (d, 1H), 7.45 (m, 3H), 7.57 (m, 3H), 7.63 (d, 1H), 7.70 (d, 1H), 7.88 (t, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.22 (s, 1H)

[187] [준비예 7] IC-7의 합성

[188] <단계 1> 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[189]

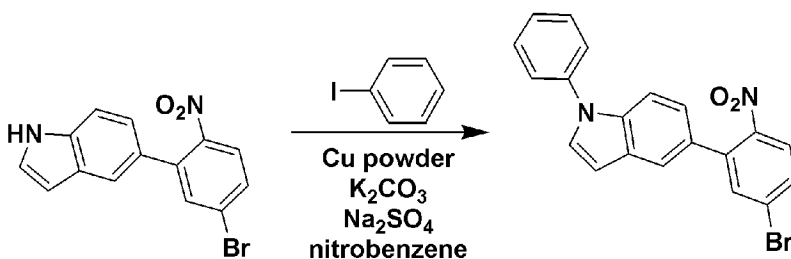


[190] 1-bromo-2-nitrobenzene 대신 2,4-dibromo-1-nitrobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[191] ^1H NMR: δ 6.45 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.45 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.64 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 7.96 (s, 1H), 8.13 (s, 1H), 8.21 (s, 1H)

[192] <단계 2> 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[193]



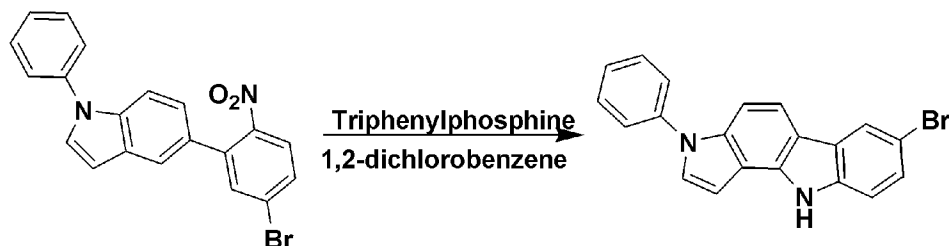
[194] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[195] ^1H NMR: δ 6.44 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.46 (m, 3H), 7.56 (m, 4H), 7.65 (d, 1H), 7.86

(d, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.11 (s, 1H)

[196] <단계 3> IC-7의 합성

[197]



[198] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

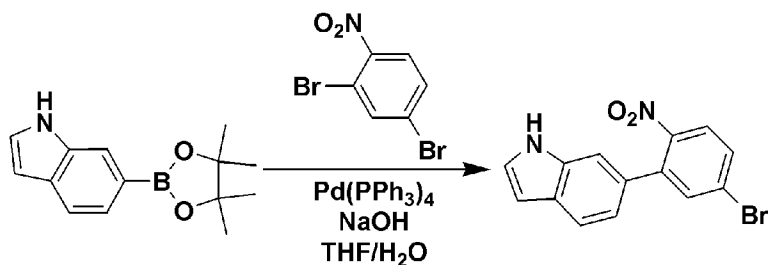
5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-7을 얻었다.

[199] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.45 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.45 (d, 1H), 7.51 (d, 1H), 7.57 (m, 3H), 7.64 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 8.10 (s, 1H), 8.23 (s, 1H)

[200] [준비예 8] IC-8의 합성

[201] <단계 1> 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[202]



[203] 1-bromo-2-nitrobenzene과

5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신

2,4-dibromo-1-nitrobenzene과

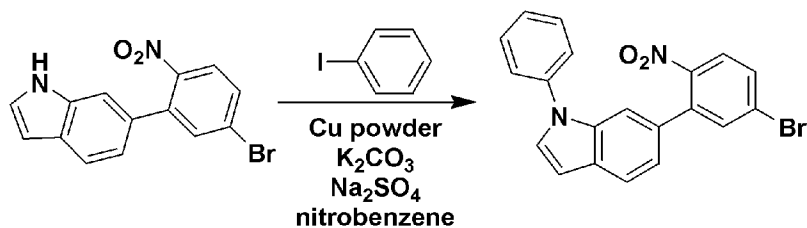
6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여

6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[204] $^1\text{H NMR}$: δ 6.51 (d, 1H), 7.31 (d, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.60 (d, 1H), 7.69 (d, 1H), 7.90 (d, 1H), 8.01 (s, 1H), 8.14 (s, 1H), 8.25 (s, 1H)

[205] <단계 2> 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[206]

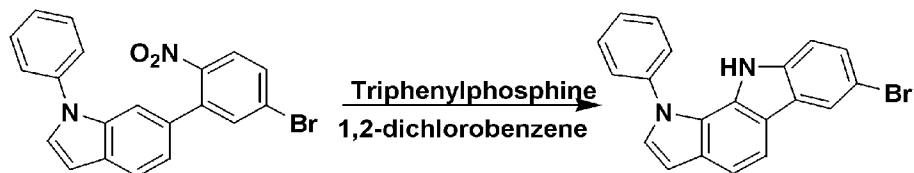


[207] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[208] ^1H NMR: δ 6.49 (d, 1H), 7.30 (d, 1H), 7.51 (m, 3H), 7.61 (m, 4H), 7.70 (d, 1H), 7.91 (d, 1H), 8.00 (s, 1H), 8.16 (s, 1H)

[209] <단계 3> IC-8의 합성

[210]



[211] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

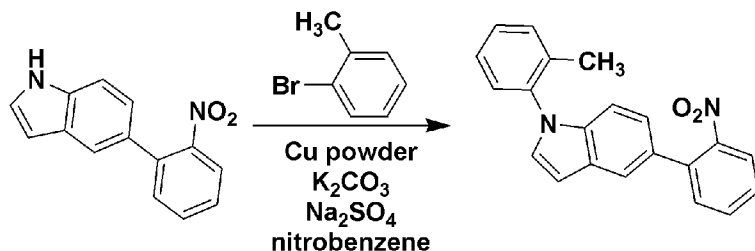
6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-8을 얻었다.

[212] ^1H -NMR: δ 6.47 (d, 1H), 7.28 (d, 1H), 7.40 (m, 2H), 7.47 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.59 (m, 3H), 7.66 (d, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.25 (s, 1H)

[213] [준비예 9] IC-9의 합성

[214] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1-o-tolyl-1H-indole의 합성

[215]

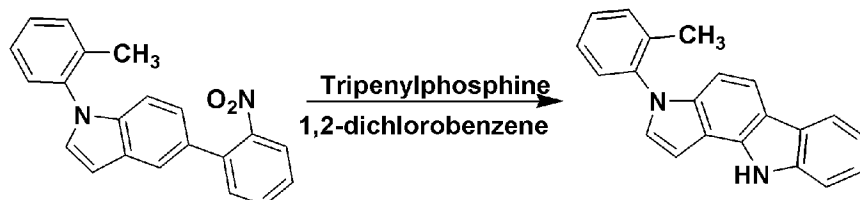


[216] Iodobenzene 대신 1-bromo-2-methylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1-o-tolyl-1H-indole을 얻었다.

[217] ^1H -NMR: δ 1.92 (s, 3H), 6.47 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.46 (m, 3H), 7.56 (m, 3H), 7.64 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.94 (s, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.12 (t, 1H)

[218] <단계 2> IC-9의 합성

[219]



[220] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

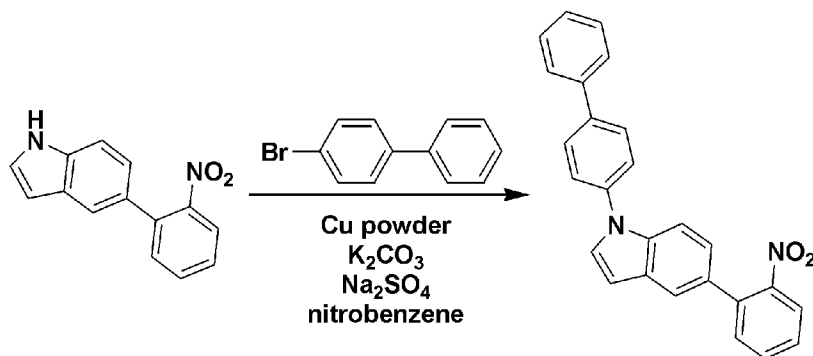
5-(2-nitrophenyl)-1-o-tolyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-9를 얻었다.

[221] ^1H -NMR: δ 1.93 (s, 3H), 6.98 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.28 (t, 1H), 7.31 (d, 1H), 7.42 (t, 1H), 7.51 (d, 1H), 7.61 (m, 4H), 7.86 (d, 1H), 8.01 (d, 1H), 10.58 (s, 1H)

[222] [준비예 10] IC-10의 합성

[223] <단계 1> 1-(biphenyl-4-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[224]

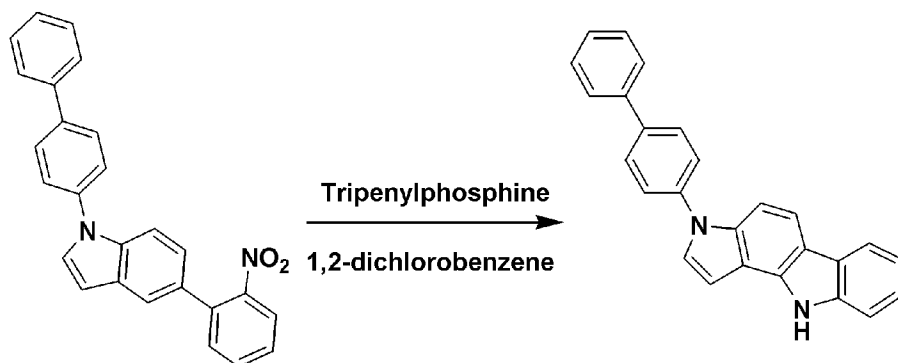


[225] Iodobenzene 대신 4-bromobiphenyl을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 1-(biphenyl-4-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[226] ¹H-NMR: δ 6.73 (d, 1H), 7.18 (d, 1H), 7.39 (m, 2H), 7.47 (m, 3H), 7.54 (d, 1H), 7.59 (m, 3H), 7.64 (m, 4H), 7.75 (d, 2H), 7.82 (d, 1H)

[227] <단계 2> IC-10의 합성

[228]



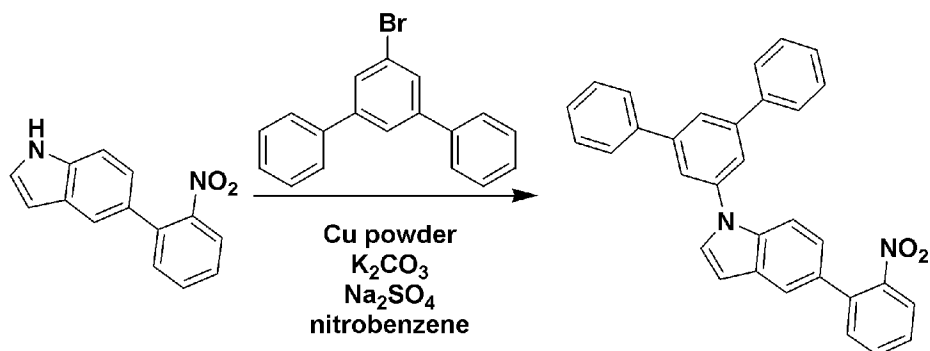
[229] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 1-(biphenyl-4-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-10를 얻었다.

[230] ¹H-NMR: δ 6.75 (d, 1H), 7.20 (d, 1H), 7.42 (m, 2H), 7.51 (m, 3H), 7.56 (d, 1H), 7.62 (m, 3H), 7.68 (m, 3H), 7.76 (d, 2H), 7.85 (d, 1H), 10.45 (s, 1H)

[231] [준비예 11] IC-11의 합성

[232] <단계 1> IC-11-1의 합성

[233]



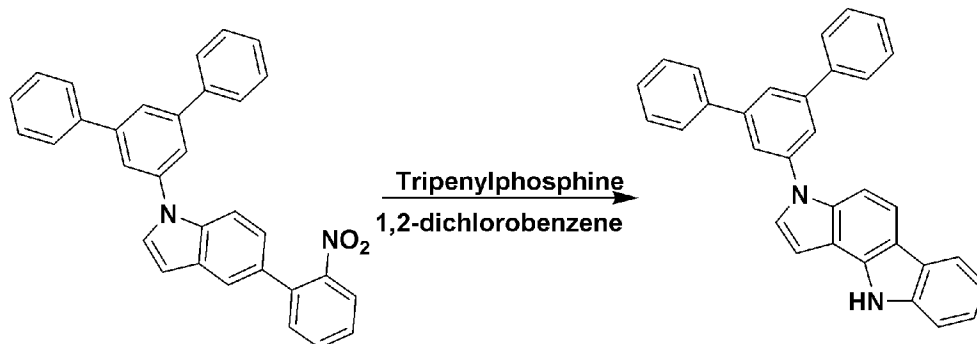
[234] Iodobenzene 대신 1-bromo-3,5-diphenyl benzene을 사용하는 것을 제외하고는

준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 IC-11-1을 얻었다.

[235] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.98 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.24 (t, 1H), 7.38 (t, 2H), 7.46 (m, 6H), 7.58 (d, 1H), 7.81 (d, 4H), 7.87 (m, 4H), 7.93 (d, 1H), 7.99 (d, 1H)

[236] <단계 2> IC-11의 합성

[237]



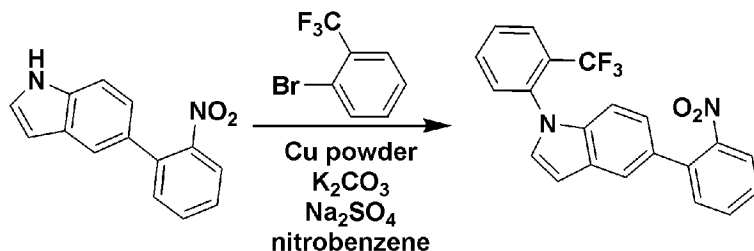
[238] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 IC-11-1을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-11를 얻었다.

[239] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.97 (d, 1H), 7.10 (t, 1H), 7.23 (t, 1H), 7.37 (t, 2H), 7.45 (m, 6H), 7.58 (d, 1H), 7.80 (d, 4H), 7.86 (m, 3H), 7.92 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 10.60 (s, 1H)

[240] [준비에 12] IC-12의 합성

[241] <단계 1> 5-(2-nitrophenyl)-1-(2-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole의 합성

[242]

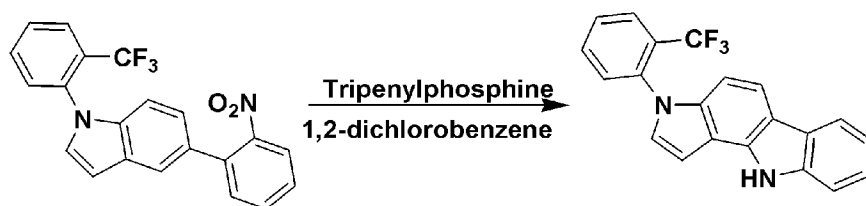


[243] Iodobenzene 대신 1-bromo-2-(trifluoromethyl)benzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1-(2-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole을 얻었다.

[244] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.48 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.47 (m, 3H), 7.57 (m, 3H), 7.63 (t, 1H), 7.84 (t, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.13 (t, 1H)

[245] <단계 2> IC-12의 합성

[246]



[247] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

5-(2-nitrophenyl)-1-(2-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-12를 얻었다.

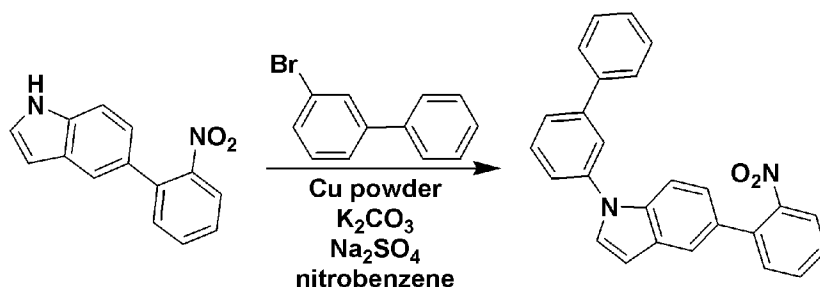
[248] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.97 (d, 1H), 7.12 (t, 1H), 7.29 (t, 1H), 7.32 (d, 1H), 7.41 (t, 1H), 7.52

(d, 1H), 7.60 (m, 4H), 7.85 (d, 1H), 8.01 (d, 1H), 10.57 (s, 1H)

[249] [준비예 13] IC-13의 합성

[250] <단계 1> 1-(biphenyl-3-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[251]



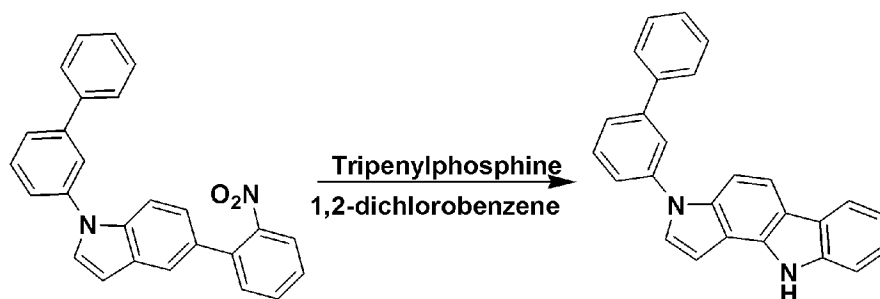
[252] Iodobenzene 대신 3-bromobiphenyl을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여

1-(biphenyl-3-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[253] ¹H-NMR: δ 6.75 (d, 1H), 7.19 (d, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.48 (m, 3H), 7.52 (d, 1H), 7.58 (m, 3H), 7.65 (m, 4H), 7.76 (m, 2H), 7.85 (d, 1H)

[254] <단계 2> IC-13의 합성

[255]



[256] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

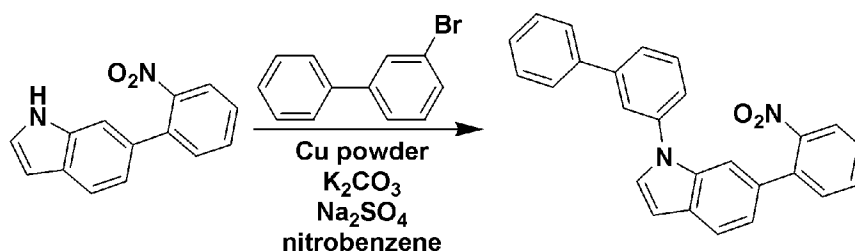
1-(biphenyl-3-yl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-13를 얻었다.

[257] ¹H-NMR: δ 6.74 (d, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.41 (m, 2H), 7.52 (m, 3H), 7.56 (d, 1H), 7.61 (m, 3H), 7.69 (m, 3H), 7.77 (m, 2H), 7.86 (d, 1H), 10.44 (s, 1H)

[258] [준비예 14] IC-14의 합성

[259] <단계 1> 1-(biphenyl-3-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[260]

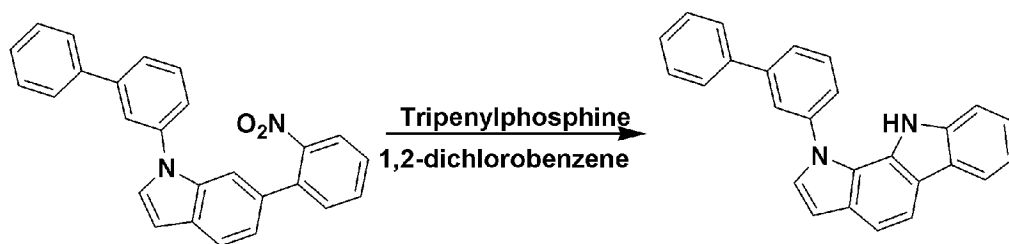


[261] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 3-bromobiphenyl을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 1-(biphenyl-3-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[262] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.76 (d, 1H), 7.18 (d, 1H), 7.37 (m, 2H), 7.47 (m, 3H), 7.51 (d, 1H), 7.57 (m, 3H), 7.64 (m, 4H), 7.75 (m, 2H), 7.86 (d, 1H)

[263] <단계 2> IC-14의 합성

[264]



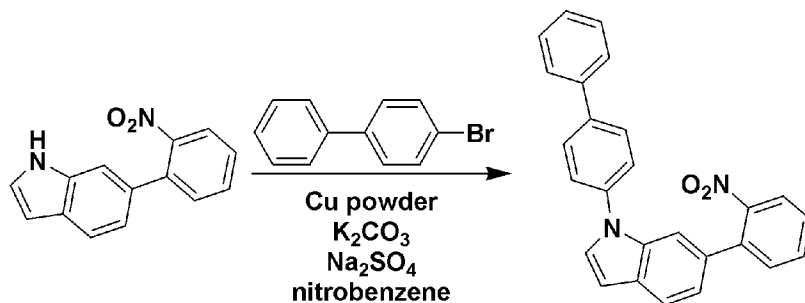
[265] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 1-(biphenyl-3-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-14을 얻었다.

[266] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.75 (d, 1H), 7.20 (d, 1H), 7.40 (m, 2H), 7.51 (m, 3H), 7.57 (d, 1H), 7.62 (m, 3H), 7.70 (m, 3H), 7.76 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 10.43 (s, 1H)

[267] [준비예 15] IC-15의 합성

[268] <단계 1> 1-(biphenyl-4-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[269]

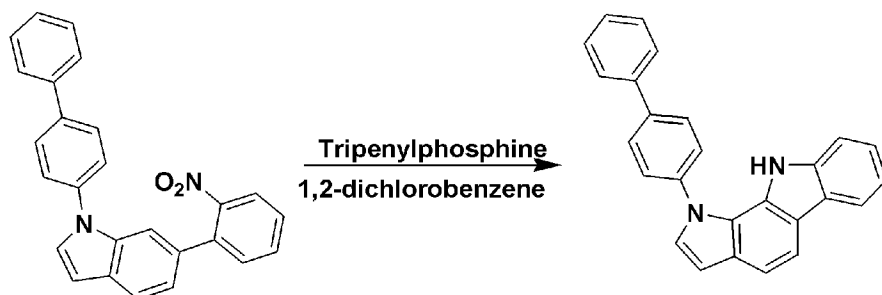


[270] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 4-bromobiphenyl을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 1-(biphenyl-4-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[271] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.74 (d, 1H), 7.19 (d, 1H), 7.40 (m, 2H), 7.46 (m, 3H), 7.55 (d, 1H), 7.58 (m, 3H), 7.63 (m, 4H), 7.75 (d, 2H), 7.83 (d, 1H)

[272] <단계 2> IC-15의 합성

[273]



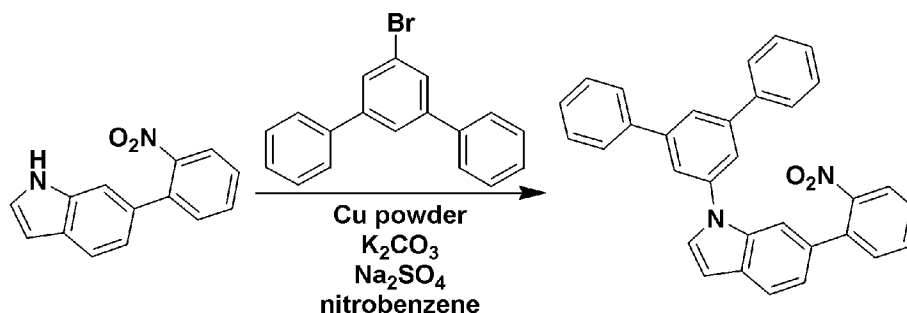
[274] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 1-(biphenyl-4-yl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-15을 얻었다.

[275] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.74 (d, 1H), 7.19 (d, 1H), 7.43 (m, 2H), 7.52 (m, 3H), 7.57 (d, 1H), 7.63 (m, 3H), 7.69 (m, 3H), 7.75 (d, 2H), 7.86 (d, 1H), 10.46 (s, 1H)

[276] [준비예 16] IC-16의 합성

[277] <단계 1> IC-16-1의 합성

[278]

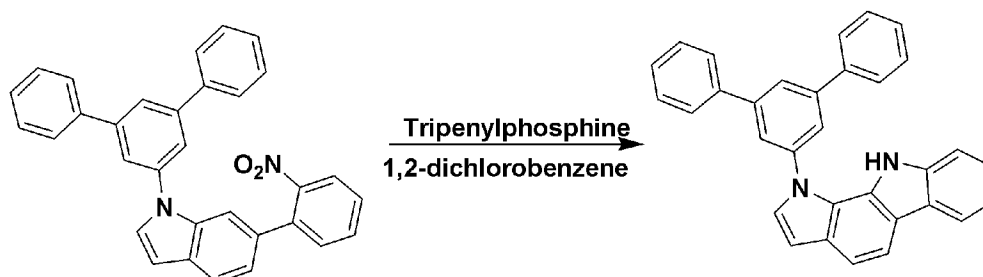


[279] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 1-bromo-3,5-diphenylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 IC-16-1을 얻었다.

[280] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.98 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.24 (t, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.45 (m, 6H), 7.57 (d, 1H), 7.80 (d, 4H), 7.86 (m, 4H), 7.92 (d, 1H), 7.98 (d, 1H)

[281] <단계 2> IC-16의 합성

[282]



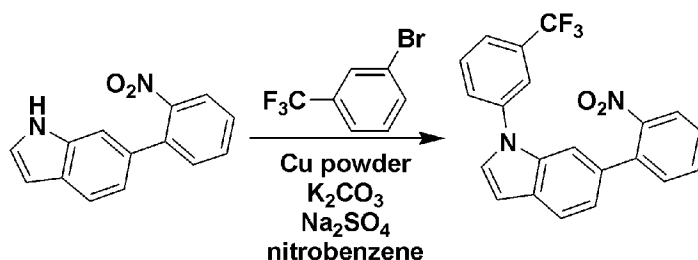
[283] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 IC-16-1을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-16을 얻었다.

[284] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.97 (d, 1H), 7.10 (t, 1H), 7.23 (t, 1H), 7.37 (t, 2H), 7.45 (m, 6H), 7.58 (d, 1H), 7.80 (d, 4H), 7.86 (m, 3H), 7.92 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 10.59 (s, 1H)

[285] [준비예 17] IC-17의 합성

[286] <단계 1> 6-(2-nitrophenyl)-1-(3-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole의 합성

[287]



[288] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 1-bromo-3-(trifluoromethyl)benzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의

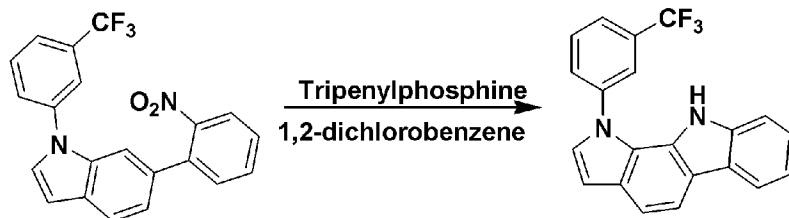
<단계 3>과 동일한 과정을 수행하여

6-(2-nitrophenyl)-1-(3-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole을 얻었다.

[289] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.80 (d, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.21 (t, 1H), 7.36 (s, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.50 (m, 2H), 7.55 (m, 2H), 7.63 (m, 2H), 7.86 (d, 1H), 8.01 (d, 1H)

[290] <단계 2> IC-17의 합성

[291]



[292] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

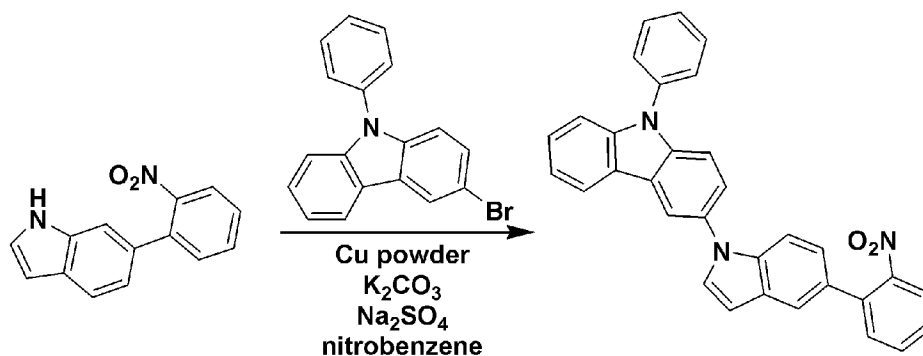
6-(2-nitrophenyl)-1-(3-(trifluoromethyl)phenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비에 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-17을 얻었다.

[293] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.81 (d, 1H), 7.12 (t, 1H), 7.24 (t, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.51 (m, 2H), 7.58 (m, 2H), 7.64 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 8.02 (d, 1H), 9.82 (s, 1H)

[294] [준비에 18] IC-18의 합성

[295] <단계 1> 3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9-phenyl-9H-carbazole의 합성

[296]



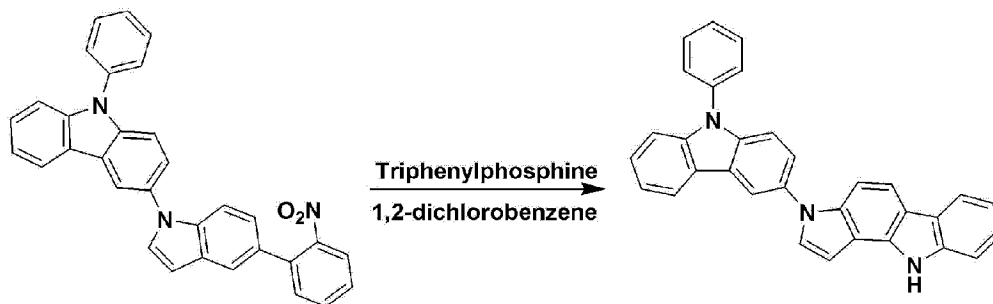
[297] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여

3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9-phenyl-9H-carbazole을 얻었다.

[298] GC-Mass (이론치: 479.16 g/mol, 측정치: 479 g/mol)

[299] <단계 2> IC-18의 합성

[300]



[301] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기
3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9-phenyl-9H-carbazole을 사용하는 것을
제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-18을
얻었다.

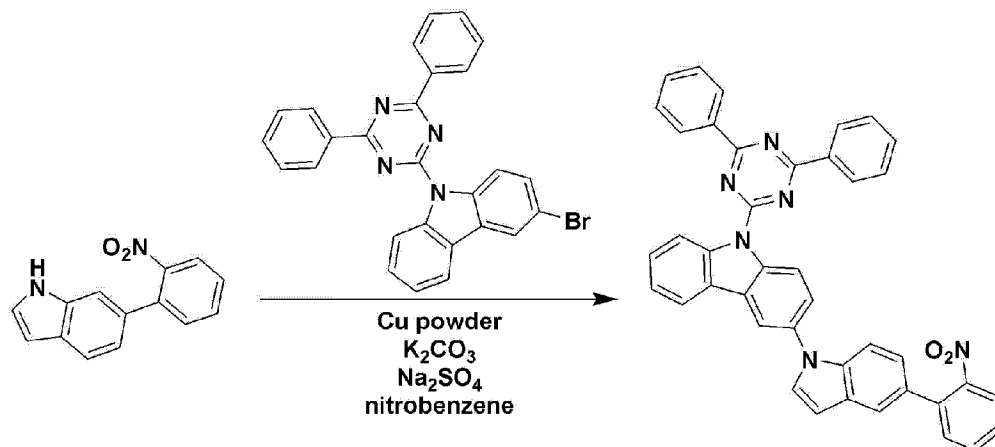
[302] GC-Mass (이론치: 447.17 g/mol, 측정치: 447 g/mol)

[303] [준비예 19] IC-19의 합성

[304] <단계 1>

9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9H-carbazole
의 합성

[305]



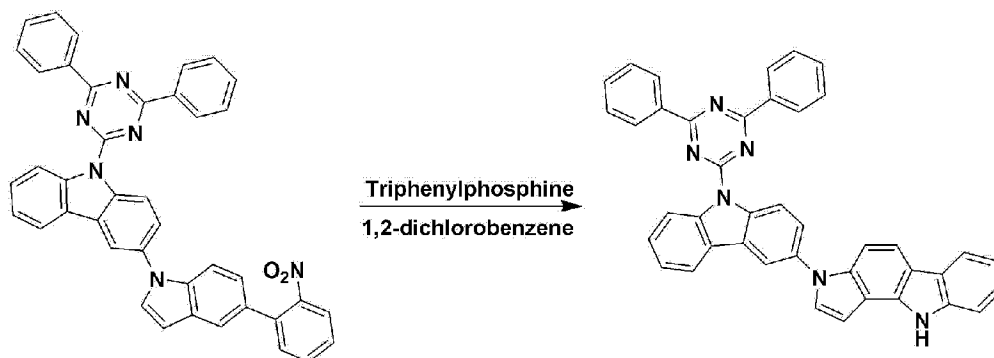
[306] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과
3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을
제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여
9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9H-carbazole
을 얻었다.

[307] GC-Mass (이론치: 634.21 g/mol, 측정치: 634 g/mol)

[308] <단계 2>

3-(9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-3,10-dihydropyrrolo[3,2-a]car
bazole의 합성

[309]

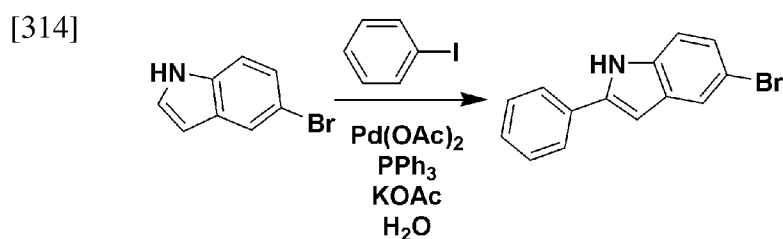


- [310] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-3-(5-(2-nitrophenyl)-1H-indol-1-yl)-9H-carbazole 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-19을 얻었다.

[311] GC-Mass (이론치: 602.22 g/mol, 측정치: 602 g/mol)

[312] [준비예 20] IC-20의 합성

[313] <단계 1> 5-bromo-2-phenyl-1H-indole의 합성

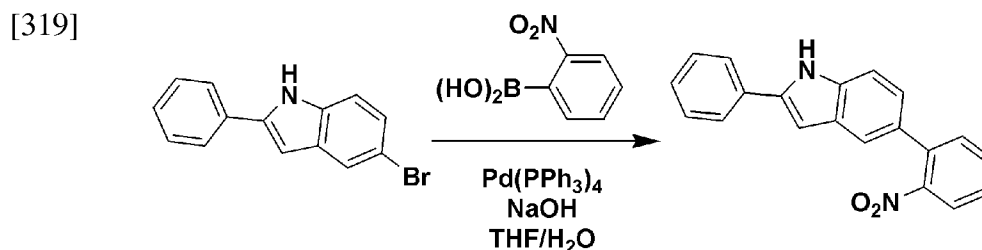


[315] 질소 기류 하에서 5-bromo-1H-indole (25 g, 0.13 mol), iodobenzene (31.22 g, 0.15 mol), Pd(OAc)₂ (1.43 g, 5 mol%), Triphenylphosphine (1.67 g, 5 mol%), KOAc (37.55 g, 0.38 mol) 및 H₂O (300 ml)를 혼합하고 110°C에서 24시간 동안 교반하였다.

[316] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 5-bromo-2-phenyl-1H-indole (16.66 g, 수율 48%)을 얻었다.

[317] ¹H-NMR: δ 6.89 (dd, 1H), 7.20 (dd, 1H), 7.34 (m, 1H), 7.36 (d, 1H), 7.47 (t, 2H), 7.71 (d, 1H), 7.86 (dd, 2H), 11.74 (s, 1H)

[318] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole의 합성



[320] 질소 기류 하에서 2-nitrophenylboronic acid (11.04 g, 66.14 mmol)과 상기 5-bromo-2-phenyl-1H-indole (15 g, 55.12 mmol), NaOH (6.61 g, 165.36 mmol) 및 THF/H₂O(200 ml/100 ml)를 혼합한 다음, 40°C에서 Pd(PPh₃)₄(3.18 g, 5 mol)를 넣고

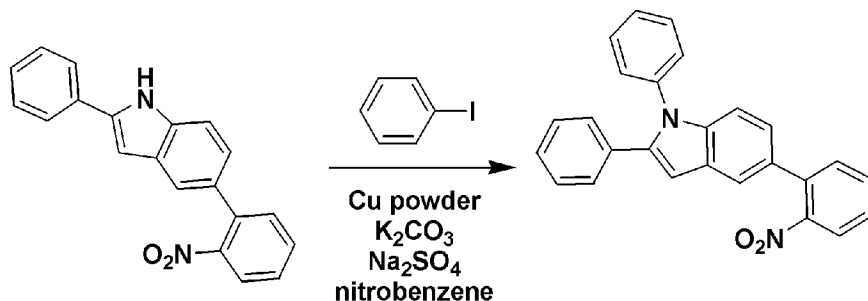
80°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[321] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 5:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole (10.74 g, 수율 62%)을 얻었다.

[322] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.88 (dd, 1H), 7.21 (d, 1H), 7.32 (m, 1H), 7.34 (d, 1H), 7.46 (m, 3H), 7.64 (m, 2H), 7.77 (d, 2H), 8.02 (d, 2H), 11.73 (s, 1H)

[323] <단계 3> 5-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole의 합성

[324]

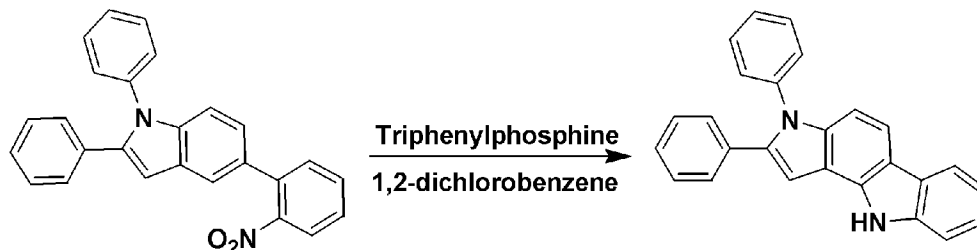


[325] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[326] GC-Mass (이론치: 390.14 g/mol, 측정치: 390 g/mol)

[327] <단계 4> IC-20의 합성

[328]



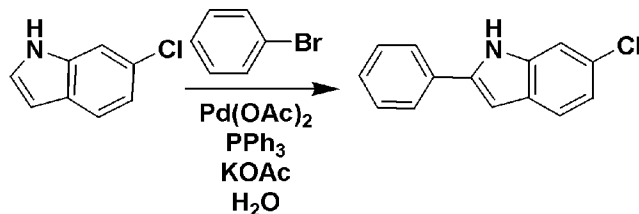
[329] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 5-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-20을 얻었다.

[330] GC-Mass (이론치: 358.15 g/mol, 측정치: 358 g/mol)

[331] [준비예 21] IC-21의 합성

[332] <단계 1> 6-chloro-2-phenyl-1H-indole의 합성

[333]



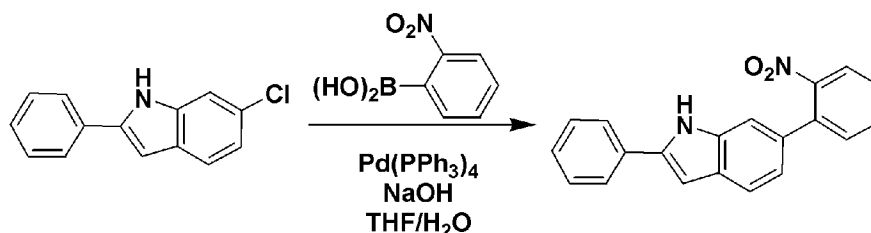
[334] 5-bromo-1H-indole과 iodobenzene 대신 6-chloro-1H-indole과 bromobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 20의 <단계 1>과 동일한 과정을

수행하여 6-chloro-2-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[335] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.92 (d, 1H), 7.02 (dd, 1H), 7.33 (t, 1H), 7.41 (s, 1H), 7.47 (t, 2H), 7.54 (d, 1H), 7.85 (d, 2H), 11.68 (s, 1H)

[336] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole의 합성

[337]

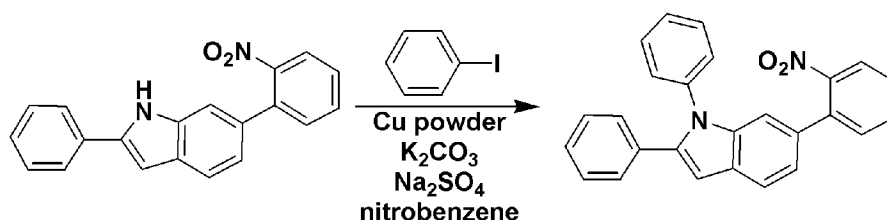


[338] 5-bromo-2-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-chloro-2-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 20의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[339] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.91 (d, 1H), 7.03 (d, 1H), 7.31 (t, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.48 (m, 3H), 7.53 (d, 1H), 7.76 (m, 3H), 8.01 (d, 2H), 11.66 (s, 1H)

[340] <단계 3> 6-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole의 합성

[341]

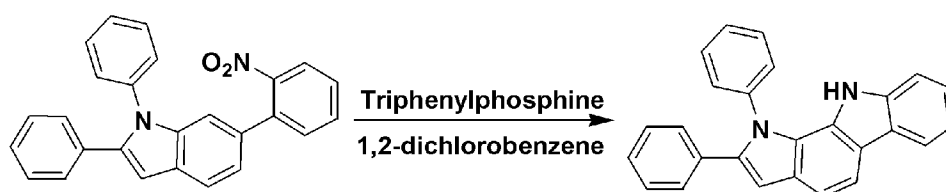


[342] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[343] GC-Mass (이론치: 390.14 g/mol, 측정치: 390 g/mol)

[344] <단계 4> IC-21의 합성

[345]



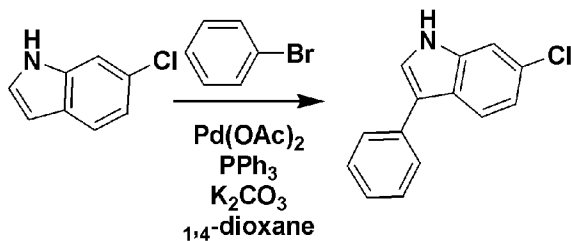
[346] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1,2-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-21을 얻었다.

[347] GC-Mass (이론치: 358.15 g/mol, 측정치: 358 g/mol)

[348] [준비예 22] IC-22의 합성

[349] <단계 1> 6-chloro-3-phenyl-1H-indole의 합성

[350]



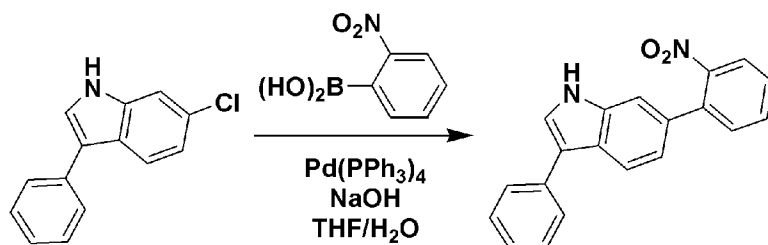
[351] 질소 기류 하에서 6-chloro-1H-indole (25 g, 0.17 mol), bromobenzene (31.19 g, 0.20 mol), Pd(OAc)₂ (1.86 g, 5 mol), Triphenylphosphine (2.17 g, 5 mol%), K₂CO₃ (68.64 g, 0.50 mol) 및 1,4-dioxane (300 ml)를 혼합하고 130°C에서 18시간 동안 교반하였다.

[352] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 6-chloro-3-phenyl-1H-indole (24.5 g, 수율 65%)을 얻었다.

[353] ¹H-NMR: δ 7.10 (dd, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.43 (t, 2H), 7.49 (d, 1H), 7.67 (dd, 2H), 7.73 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 11.49 (s, 1H)

[354] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)-3-phenyl-1H-indole의 합성

[355]

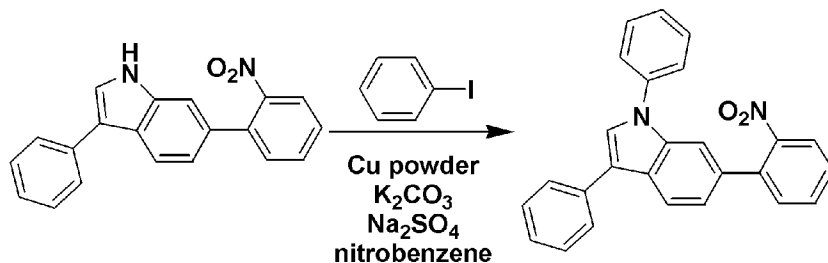


[356] 5-bromo-2-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-chloro-3-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비에 20의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-3-phenyl-1H-indole을 얻었다.

[357] ¹H-NMR: δ 7.11 (d, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.44 (t, 2H), 7.48 (m, 2H), 7.55 (m, 3H), 7.61 (d, 1H), 7.73 (d, 1H), 8.00 (d, 2H), 11.48 (s, 1H)

[358] <단계 3> 6-(2-nitrophenyl)-1,3-diphenyl-1H-indole의 합성

[359]

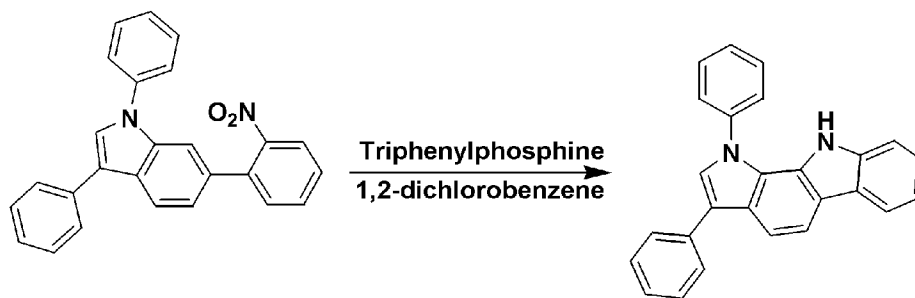


[360] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-3-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-1,3-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[361] GC-Mass (이론치: 390.14 g/mol, 측정치: 390 g/mol)

[362] <단계 4> IC-22의 합성

[363]



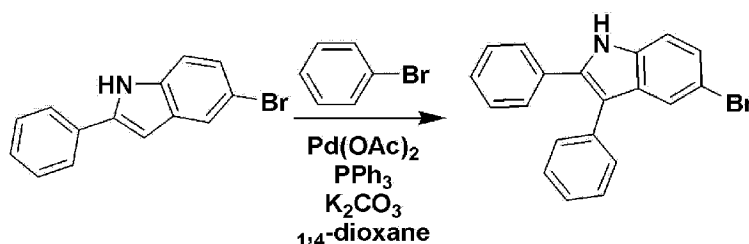
[364] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1,3-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-22를 얻었다.

[365] GC-Mass (이론치: 358.15 g/mol, 측정치: 358 g/mol)

[366] [준비예 23] IC-23의 합성

[367] <단계 1> 5-bromo-2,3-diphenyl-1H-indole의 합성

[368]

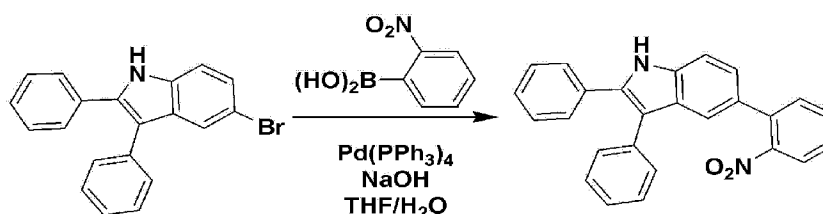


[369] 6-chloro-1H-indole 대신 5-bromo-2-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 22의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5-bromo-2,3-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[370] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.23 (d, 1H), 7.31 (t, 2H), 7.43 (m, 6H), 7.67 (d, 1H), 7.71 (d, 1H), 7.84 (d, 2H), 11.34 (s, 1H)

[371] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole의 합성

[372]

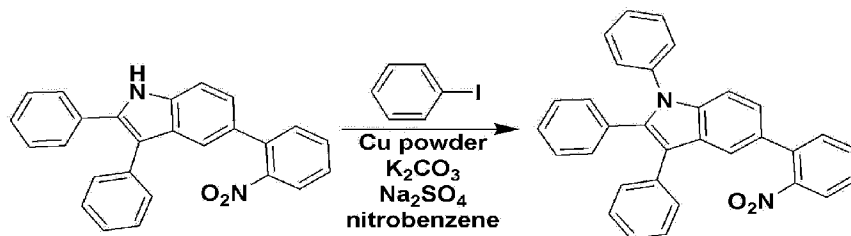


[373] 5-bromo-2-phenyl-1H-indole 대신 상기 5-bromo-2,3-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 20의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[374] GC-Mass (이론치: 390.14 g/mol, 측정치: 390 g/mol)

[375] <단계 3> 5-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole의 합성

[376]

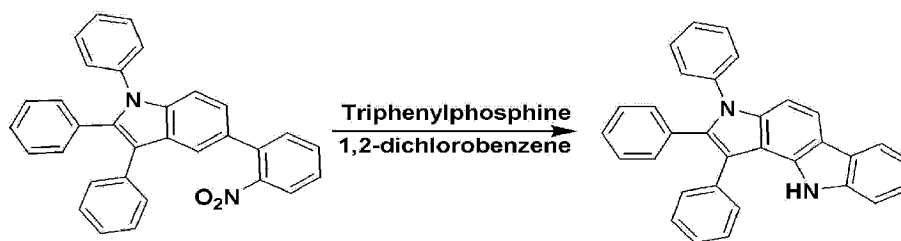


[377] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 5-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole을 얻었다.

[378] GC-Mass (이론치: 466.17 g/mol, 측정치: 466 g/mol)

[379] <단계 4> IC-23의 합성

[380]



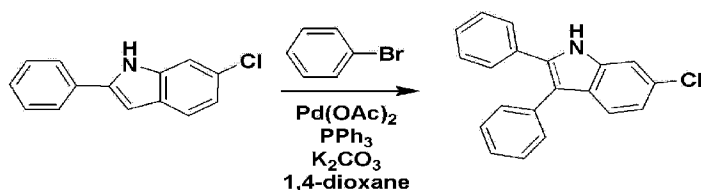
[381] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 5-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-23을 얻었다.

[382] GC-Mass (이론치: 434.18 g/mol, 측정치: 434 g/mol)

[383] [준비예 24] IC-24의 합성

[384] <단계 1> 6-chloro-2,3-diphenyl-1H-indole의 합성

[385]

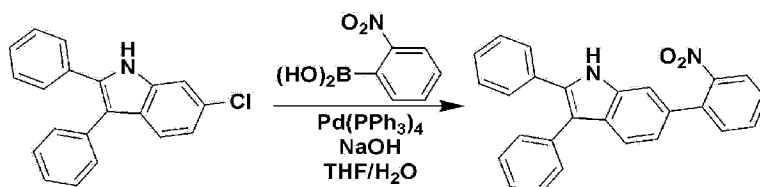


[386] 6-chloro-1H-indole 대신 6-chloro-2-phenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 22의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-chloro-2,3-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[387] ¹H-NMR: δ 7.18 (d, 1H), 7.29 (t, 2H), 7.50 (m, 6H), 7.62 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.89 (d, 2H), 11.35 (s, 1H)

[388] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole의 합성

[389]



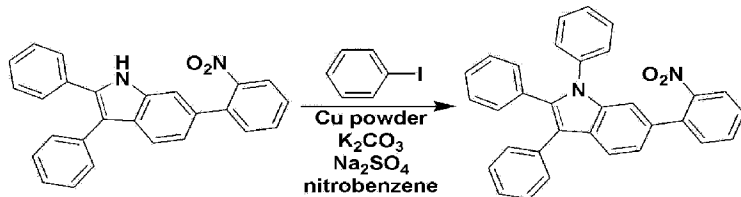
[390] 5-bromo-2-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-chloro-2,3-diphenyl-1H-indole을

사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 20의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole을 얻었다.

[391] GC-Mass (이론치: 390.14 g/mol, 측정치: 390 g/mol)

[392] <단계 3> 6-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole의 합성

[393]

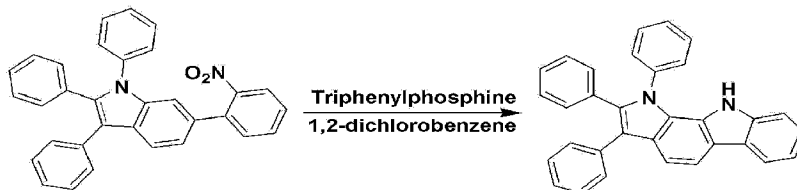


[394] 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-2,3-diphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole을 얻었다.

[395] GC-Mass (이론치: 466.17 g/mol, 측정치: 466 g/mol)

[396] <단계 4> IC-24의 합성

[397]



[398] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)-1,2,3-triphenyl-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-24을 얻었다.

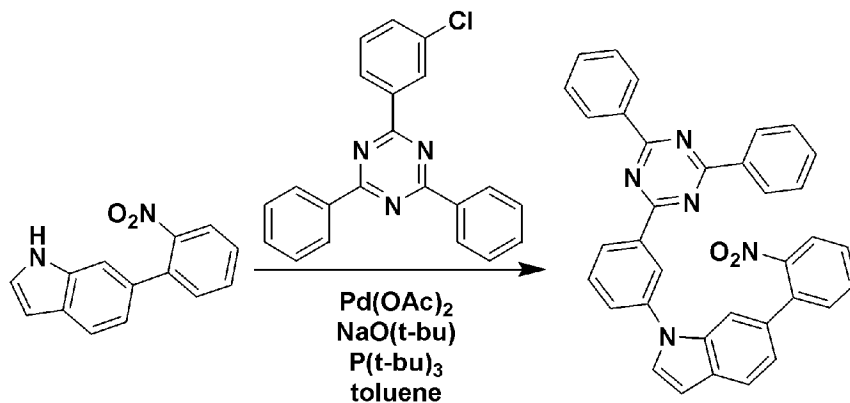
[399] GC-Mass (이론치: 434.18 g/mol, 측정치: 434 g/mol)

[400] [준비예 25] IC-25의 합성

[401] <단계 1>

1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[402]



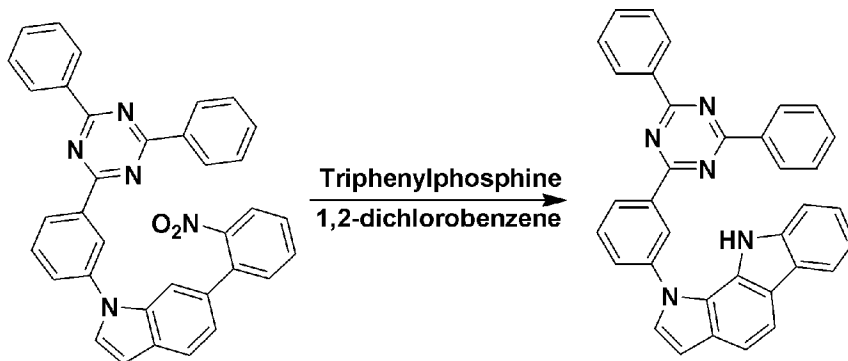
[403] 질소 기류 하에서 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole (10 g, 41.97 mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (17.32 g, 50.37 mmol), Pd(OAc)₂ (0.47 g, 5 mol%), NaO(t-bu) (8.07 g, 83.95 mmol), P(t-bu)₃ (0.85 g, 4.19 mmol) 및 Toluene (100 ml)을 혼합하고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[404] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO_4 로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole (15.8 g, 수율 69%)을 얻었다.

[405] GC-Mass (이론치: 545.19 g/mol, 측정치: 545 g/mol)

[406] <단계 2> IC-25의 합성

[407]



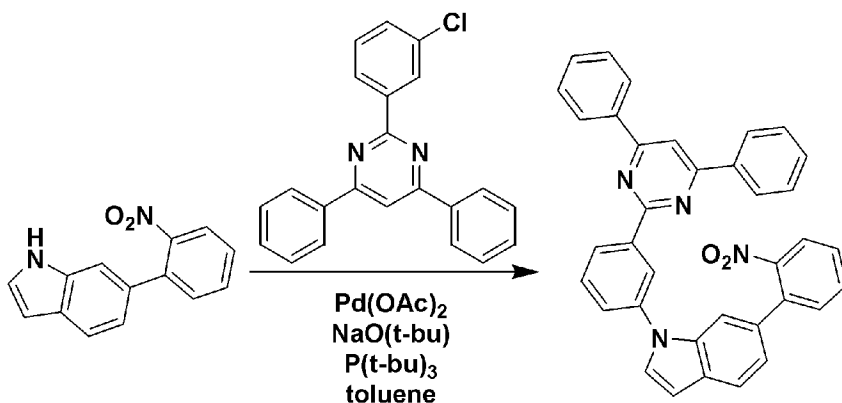
[408] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기 1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-25을 얻었다.

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

[410] [준비예 26] IC-26의 합성

[411] <단계 1> 1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[412]

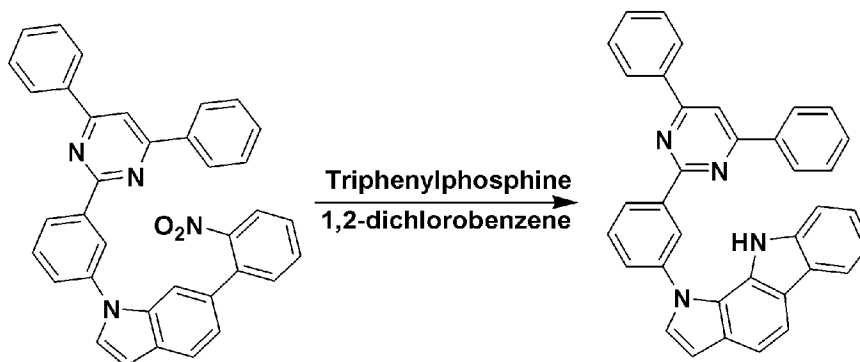


[413] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 25의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

[414] GC-Mass (이론치: 544.19 g/mol, 측정치: 544 g/mol)

[415] <단계 2> IC-26의 합성

[416]



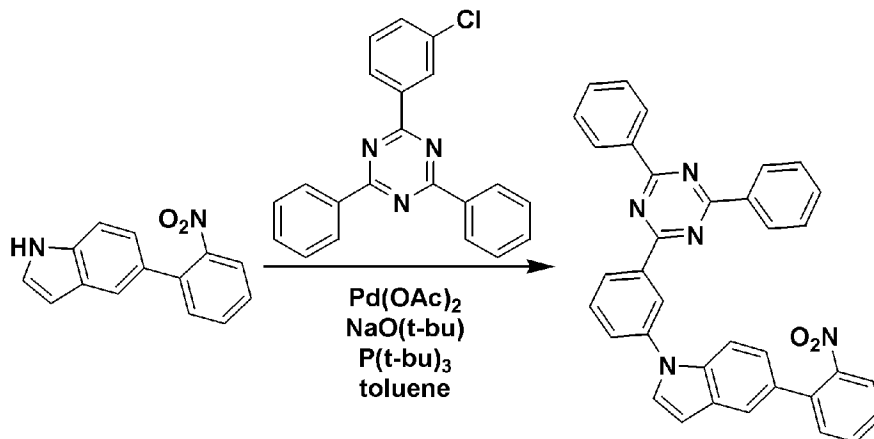
[417] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기
1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-6-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는
것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-26을
얻었다.

[418] GC-Mass (이론치: 512.20 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[419] [준비예 27] IC-27의 합성

[420] <단계 1> 1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-5-(2-
nitrophenyl)-1H-indole의 합성

[421]

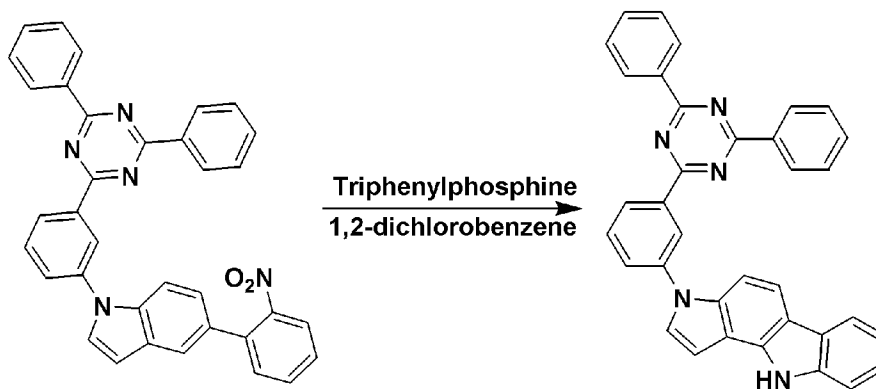


[422] 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole 대신 5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을
제외하고는 상기 준비예 25의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여
1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 얻었다.

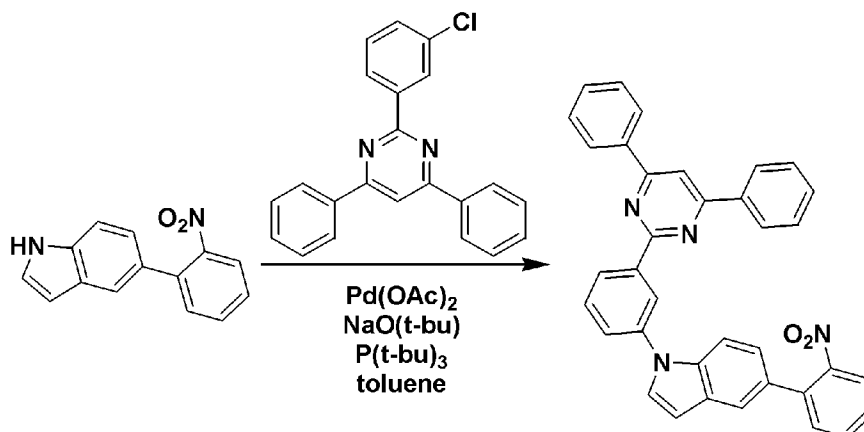
[423] GC-Mass (이론치: 545.19 g/mol, 측정치: 545 g/mol)

[424] <단계 2> IC-27의 합성

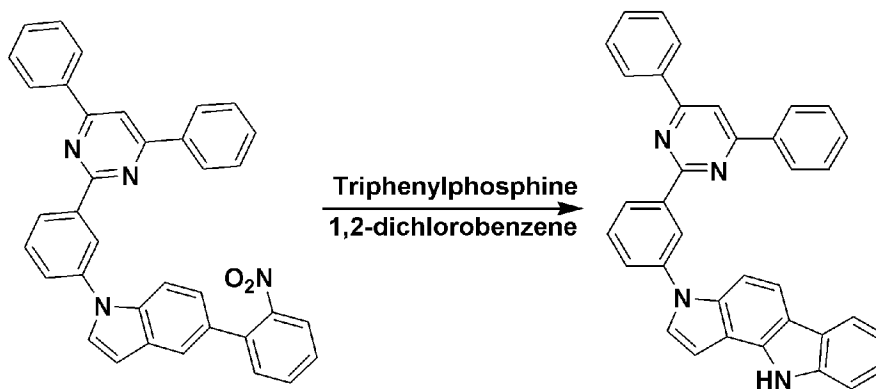
[425]



- [426] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기
1-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는
것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-27을
얻었다.
- [427] GC-Mass (이론치: 513.20 g/mol, 측정치: 513 g/mol)
- [428] [준비예 28] IC-28의 합성
- [429] <단계 1> 1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole의
합성
- [430]



- [431] 6-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신
5-(2-nitrophenyl)-1H-indole과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을
사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 25의 <단계 1>과 동일한 과정을
수행하여 1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을
얻었다.
- [432] GC-Mass (이론치: 544.19 g/mol, 측정치: 544 g/mol)
- [433] <단계 2> IC-28의 합성
- [434]



[435] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

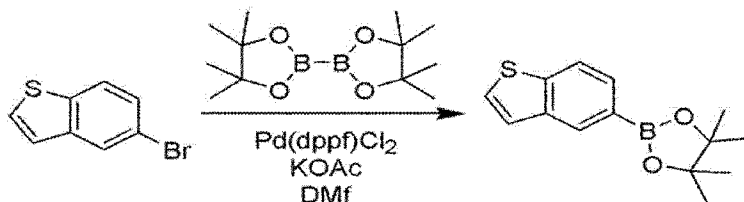
1-(3-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-5-(2-nitrophenyl)-1H-indole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 IC-28을 얻었다.

[436] GC-Mass (이론치: 512.20 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[437] [준비예 29] IC-29a 및 IC-29b의 합성

[438] <단계 1> 2-(benzo[b]thiophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane의 합성

[439]



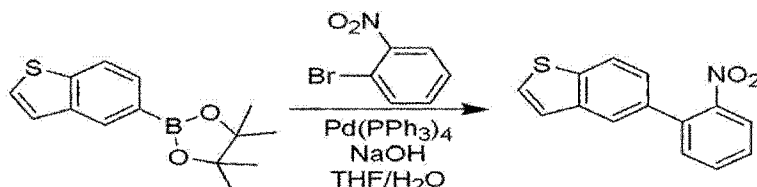
[440] 5-bromo-1H-indole 대신 5-bromobenzo[b]thiophene를 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

2-(benzo[b]thiophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 얻었다.

[441] ^1H NMR: δ 1.24 (s, 12H), 7.65 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.07 (d, 1H), 8.12 (s, 1H)

[442] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene의 합성

[443]



[444] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 상기

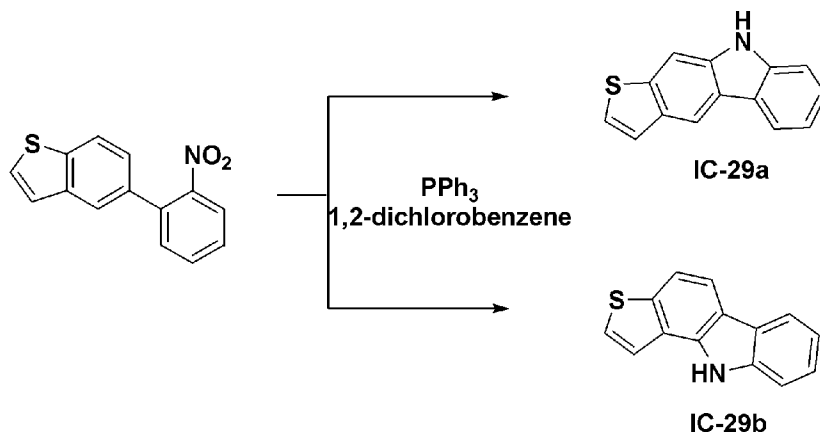
2-(benzo[b]thiophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여

5-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene을 얻었다.

[445] ^1H NMR: δ 7.67 (m, 2H), 7.88 (m, 2H), 7.98 (d, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.07 (m, 2H), 8.13 (s, 1H)

[446] <단계 3> IC-29a 및 IC-29b의 합성

[447]



[448] 5-(2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 대신 상기

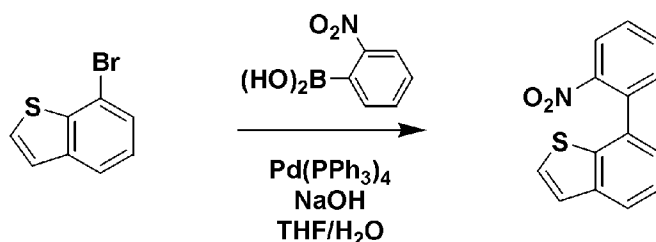
5-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 IC-29a 1.70 g (7.60 mmol, yield : 35 %)과 IC-29b 1.89 g (8.46 mmol, yield : 39%)을 얻었다.

[449] IC-29a의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.59 (m, 3H), 7.79 (m, 3H), 8.11 (d, 1H), 8.26 (s, 1H)[450] IC-29b의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.53 (m, 2H), 7.81 (m, 3H), 8.12 (m, 2H), 8.25 (s, 1H)

[451] [준비예 30] IC-30 의 합성

[452] <단계 1> 7-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene의 합성

[453]

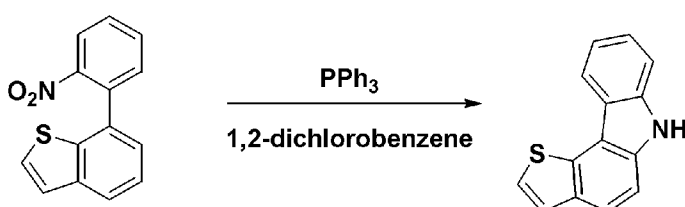


[454] 질소 기류 하에서 12.2 g (35.2 mmol)의 7-bromobenzo[b]thiophene, 6.44 g (38.7 mmol)의 2-nitrophenylboronic acid, 4.22 g (105.6 mmol)의 NaOH과 300 ml/150 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 교반하였다. 40°C에서 2.03 g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 7-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 7.38 g (28.9 mmol, yield 82 %)을 얻었다.

[455] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.63 (m, 5H), 7.96 (m, 3H), 8.21 (d, 1H)

[456] <단계 2> IC-30 의 합성

[457]



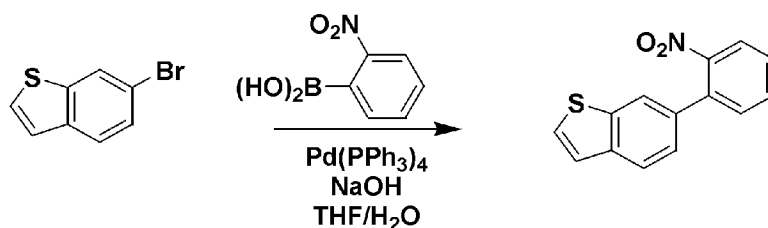
[458] 질소 기류 하에서 상기 7-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 5.53 g (21.7 mmol)과 triphenylphosphine 14.2 g (54.2 mmol), 1,2-dichlorobenzene 100 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출된 유기층은 MgSO_4 로 물을 제거하고, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 IC-30 3.29 g, (14.8 mmol, yield : 68 %)을 얻었다.

[459] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.37 (t, 1H), 7.46 (m, 5H), 7.87 (d, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.24 (s, 1H)

[460] [준비예 31] IC-31a 및 IC-31b의 합성

[461] <단계 1> 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene의 합성

[462]

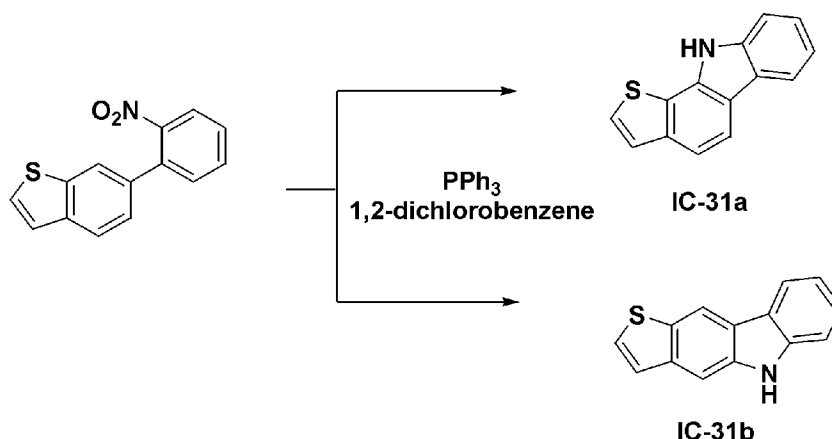


[463] 7-bromobenzo[b]thiophene 대신 6-bromobenzo[b]thiophene 12.2 g (35.2 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 30의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 7.01 g (27.5 mmol, yield : 78%)을 얻었다.

[464] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.68 (m, 3H), 7.98 (m, 6H)

[465] <단계 2> IC-31a과 IC-31b의 합성

[466]



[467] 7-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 대신 상기 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 5.53 g (21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 30의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 IC-31a 1.60 g (7.16 mmol, yield : 33 %) 과 IC-31b 1.79 g (8.03 mmol, yield : 37%)을 얻었다.

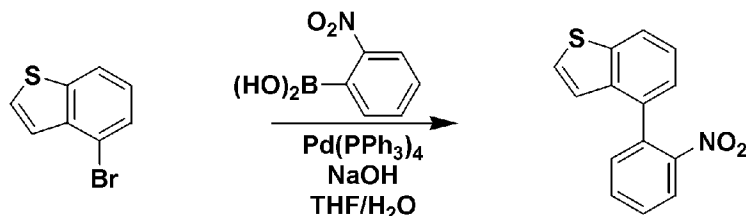
[468] IC-31a 의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.27 (t, 1H), 7.53 (m, 4H), 7.78 (d, 1H), 7.92 (d, 1H), 8.10 (d, 1H), 8.25 (s, 1H)

[469] IC-31b 의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.63 (m, 3H), 7.79 (m, 3H), 8.11 (d, 1H), 8.25 (s, 1H)

[470] [준비예 32] IC-32의 합성

[471] <단계 1> 4-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene의 합성

[472]

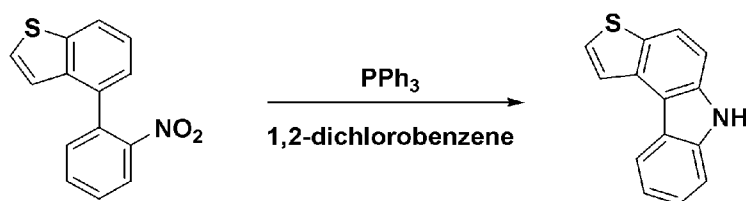


[473] 7-bromobenzo[b]thiophene 대신 4-bromobenzo[b]thiophene 12.2 g (35.2 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 30의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 4-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 7.28 g (28.5 mmol, yield : 81%)을 얻었다.

[474] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.68 (m, 4H), 7.89 (m, 3H), 8.01 (m, 2H)

[475] <단계 2> IC-32 의 합성

[476]



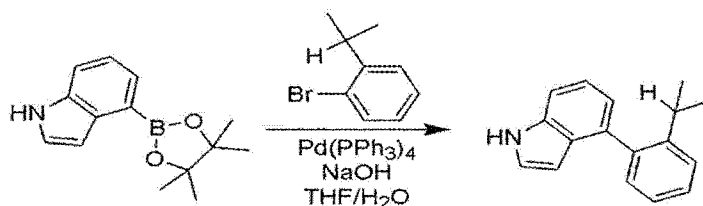
[477] 7-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 대신 상기 4-(2-nitrophenyl)benzo[b]thiophene 5.53 g (21.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 30의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 IC-32 3.05 g (13.7 mmol, yield : 63 %)을 얻었다.

[478] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.31 (m, 2H), 7.73 (m, 4H), 7.96 (d, 1H), 8.10 (d, 1H), 8.26 (s, 1H)

[479] [준비예 33] IC-33의 합성

[480] <단계 1> 4-(2-isopropylphenyl)-1H-indole의 합성

[481]

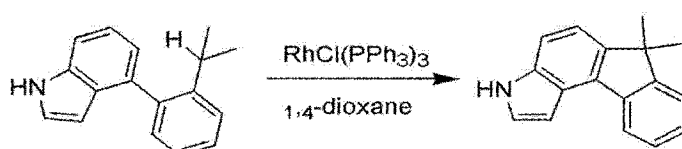


[482] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 사용하고 1-bromo-2-nitrobenzene 대신 1-bromo-2-isopropylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 4-(2-isopropylphenyl)-1H-indole을 얻었다.

[483] $^1\text{H NMR}$: δ 1.21 (s, 6H), 2.87 (m, 1H), 6.43 (d, 1H), 7.26 (t, 1H), 7.35 (m, 3H), 7.48 (d, 1H), 7.74 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 8.23 (s, 1H)

[484] <단계 2> IC-33의 합성

[485]



[486] 질소 기류 하에서 상기 4-(2-isopropylphenyl)-1H-indole(5 g, 21.25 mmol)과

RhCl(PPh₃)₃(98.3 mg, 0.5 mol%)를 1,4-dioxane 50 ml에 녹인 다음 135°C에서 1시간 동안 교반하였다.

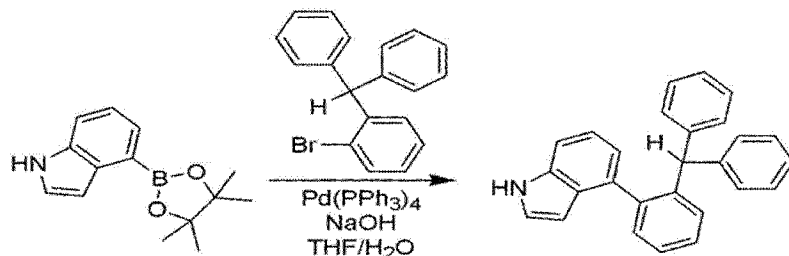
[487] 반응 종결 후 용매를 제거하고 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v:v))로 정제하여 IC-33 (4 g, 수율 81%)을 얻었다.

[488] ¹H NMR: δ 1.20 (s, 6H), 6.45 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.37 (m, 3H), 7.49 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.86 (d, 1H), 8.22 (s, 1H)

[489] [준비예 34] IC-34의 합성

[490] <단계 1> 4-(2-benzhydrylphenyl)-1H-indole의 합성

[491]

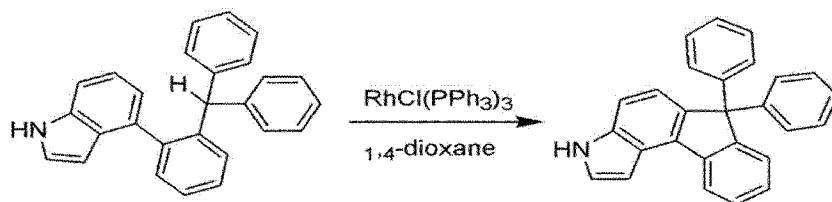


[492] 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole 대신 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole을 사용하고 1-bromo-2-nitrobenzene 대신 (2-bromophenyl)methylene)dibenzene을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 4-(2-benzhydrylphenyl)-1H-indole을 얻었다.

[493] ¹H NMR: δ 2.88 (m, 1H), 6.44 (d, 1H), 7.27 (m, 6H), 7.34 (m, 8H), 7.47 (d, 1H), 7.75 (m, 2H), 7.86 (d, 1H), 8.21 (s, 1H)

[494] <단계 2> IC-34의 합성

[495]



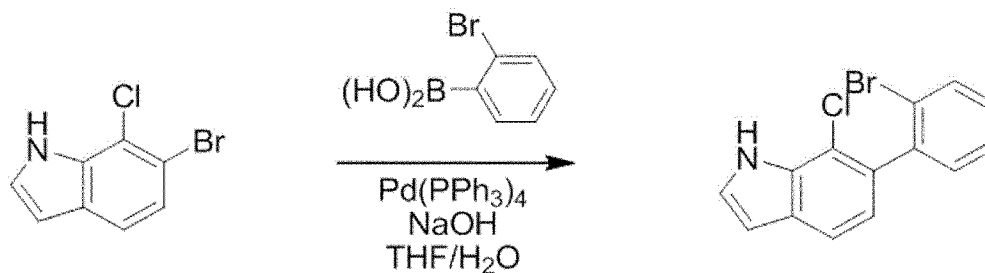
[496] 4-(2-isopropylphenyl)-1H-indole 대신 상기 4-(2-benzhydrylphenyl)-1H-indole을 사용하여 준비예 33의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 IC-34을 얻었다.

[497] ¹H NMR: δ 6.43 (d, 1H), 7.26 (m, 5H), 7.34 (m, 8H), 7.46 (d, 1H), 7.76 (m, 2H), 7.85 (d, 1H), 8.20 (s, 1H)

[498] [준비예 35] IC-35의 합성

[499] <단계 1> 6-(2-bromophenyl)-7-chloro-1H-indole의 합성

[500]

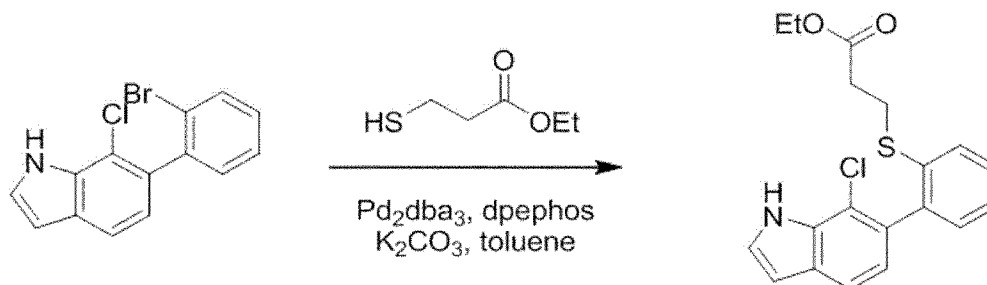


- [501] 질소 기류 하에서 9.13 g (39.6 mmol)의 6-bromo-7-chloro-1H-indole, 9.54 g (47.5 mmol)의 2-bromophenylboronic acid, 4.75 g (118.8 mmol)의 NaOH과 200 ml/100 ml의 THF/H₂O를 넣고 교반하였다. 40°C에서 2.29 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 6-(2-bromophenyl)-7-chloro-1H-indole 8.86 g (28.9 mmol, yield: 73 %)을 얻었다.

[502] ¹H-NMR : δ 6.45 (d, 1H), 7.35 (m, 3H), 7.74 (m, 3H), 8.06 (d, 1H), 8.64 (s, 1H)

[503] <단계 2> ethyl 3-(2-(7-chloro-1H-indol-6-yl)phenylthio)propanoate의 합성

[504]



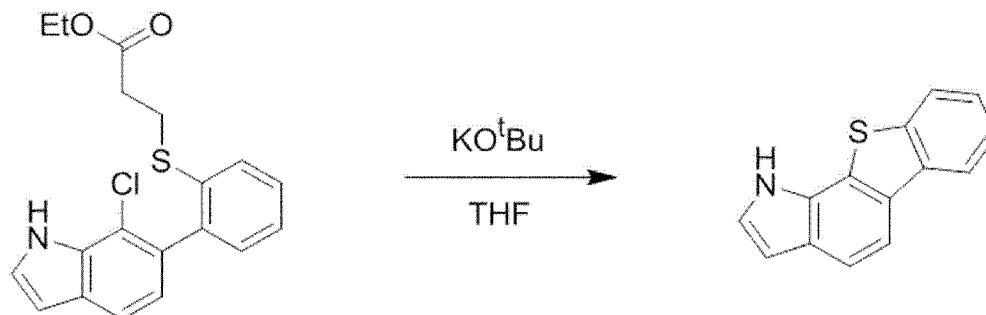
- [505] 질소 기류 하에서 7.45 g (24.3 mmol)의 6-(2-bromophenyl)-7-chloro-1H-indole, 3.59 g (26.77 mmol)의 ethyl 3-mercaptopropanoate, 167 mg (0.18 mmol)의 Pd₂dba₃, 197 mg (0.37 mmol)의 dpephos, 8.4 g (61 mmol)의 K₂CO₃를 100 ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 15시간 교반하였다.

- [506] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 ethyl 3-(2-(7-chloro-1H-indol-6-yl)phenylthio)propanoate 6.38 g (17.7 mmol, yield: 72 %)을 얻었다.

[507] ¹H-NMR : δ 1.29 (t, 3H), 2.58 (t, 2H), 3.12 (t, 2H), 4.12 (q, 2H), 6.25 (d, 1H), 7.37 (m, 4H), 7.70 (m, 2H), 8.06 (d, 1H), 8.60 (s, 1H)

[508] <단계 3> IC-35의 합성

[509]



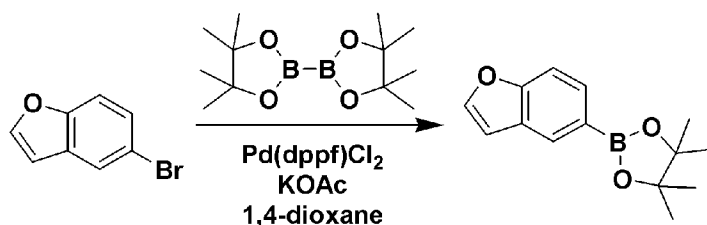
[510] 질소 기류 하에서 6.34 g (15.4 mmol)의 ethyl 3-(2-(7-chloro-1H-indol-6-yl)phenylthio)propanoate, 2.60 g (23.2 mmol)의 potassium tert-butoxide를 100 ml의 THF에 넣고 50°C에서 8시간 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 IC-35 2.30 g (10.3 mmol, yield: 67 %)을 얻었다.

[511] ¹H-NMR : δ 6.44 (d, 1H), 7.25 (d, 1H), 7.51 (m, 3H), 8.00 (m, 2H), 8.40 (d, 1H), 8.63 (s, 1H)

[512] [준비예 36] IC-36의 합성

[513] <단계 1> 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane의 합성

[514]



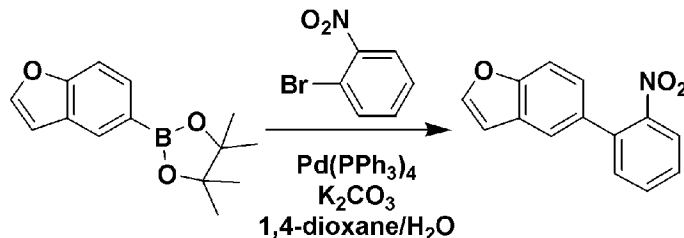
[515] 질소 기류 하에서 5-bromobenzofuran (25 g, 0.126 mol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (38.67 g, 0.152 mol), Pd(dppf)Cl₂ (3.11 g, 3 mol%), KOAc (37.36 g, 0.381 mol) 및 1,4-dioxane (500 ml)를 혼합하고 130°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[516] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane (23.23 g, 수율 75%)을 얻었다.

[517] ¹H-NMR: δ 1.25 (s, 12H), 6.46 (d, 1H), 7.28 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.98 (s, 1H)

[518] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)benzofuran의 합성

[519]

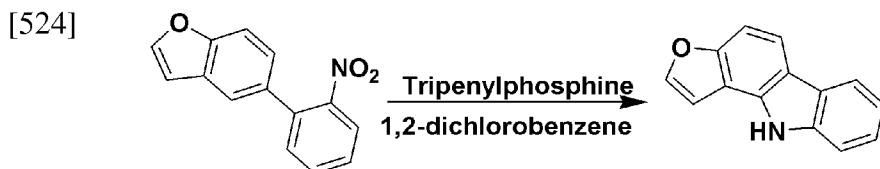


[520] 질소 기류 하에서 1-bromo-2-nitrobenzene (15.86 g, 78.52 mmol)과 상기 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane (23 g, 94.23 mmol), K_2CO_3 (32.56 g, 235.57 mmol) 및 1,4-dioxane/ H_2O (400 ml/200 ml)를 혼합한 다음, $40^\circ C$ 에서 $Pd(PPh_3)_4$ (4.54 g, 5 mol%)를 넣고 $110^\circ C$ 에서 12시간 동안 교반하였다.

[521] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$ 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)benzofuran (12.40 g, 수율 66%)을 얻었다.

[522] 1H -NMR: δ 6.45 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.42 (d, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.66 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.96 (s, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.06 (t, 1H)

[523] <단계 3> IC-36의 합성



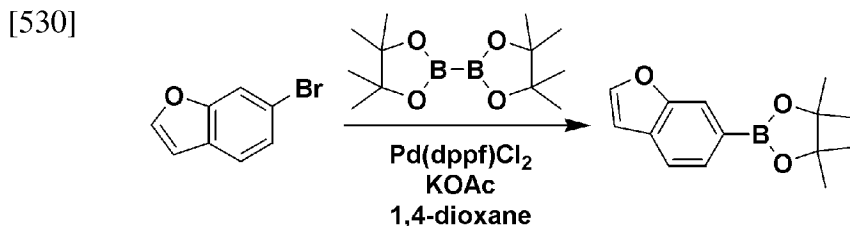
[525] 질소 기류 하에서 상기 5-(2-nitrophenyl)benzofuran (10 g, 41.80 mmol), triphenylphosphine (27.41 g, 104.50 mmol) 및 1,2-dichlorobenzene (150 ml)를 혼합하고 12시간 동안 교반하였다.

[526] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 얻어진 유기층에 대해 $MgSO_4$ 로 물을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC=3:1 (v/v))로 정제하여 IC-36 (4.76 g, 수율 55%)을 얻었다.

[527] 1H -NMR: δ 6.51 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.54 (d, 1H), 7.68 (t, 1H), 7.86 (t, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.05 (t, 1H), 10.58 (s, 1H)

[528] [준비예 37] IC-37의 합성

[529] <단계 1> 2-(benzofuran-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane의 합성

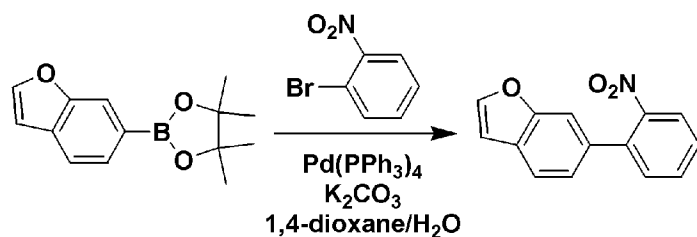


[531] 5-bromobenzofuran 대신 6-bromobenzofuran을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 2-(benzofuran-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 얻었다.

[532] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.25 (s, 12H), 6.46 (d, 1H), 7.28 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 7.98 (s, 1H)

[533] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)benzofuran의 합성

[534]

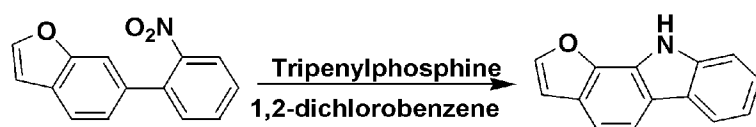


[535] 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 대신 상기 2-(benzofuran-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)benzofuran을 얻었다.

[536] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.45 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.42 (d, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.66 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.96 (s, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.06 (t, 1H)

[537] <단계 3> IC-37의 합성

[538]



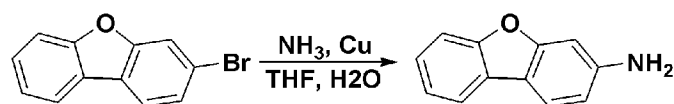
[539] 5-(2-nitrophenyl)benzofuran 대신 6-(2-nitrophenyl)benzofuran을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 IC-37를 얻었다.

[540] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.51 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.54 (d, 1H), 7.68 (t, 1H), 7.86 (t, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.05 (t, 1H), 10.58 (s, 1H)

[541] [준비예 38] IC-38의 합성

[542] <단계 1> dibenzo[b,d]furan-3-amine의 합성

[543]

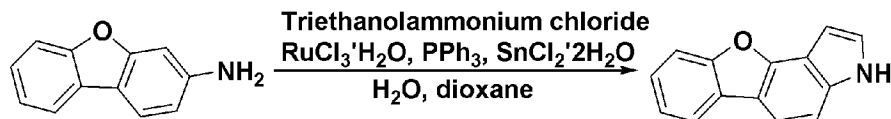


[544] 질소 기류 하에서 3-bromodibenzo[b,d]furan (7.41 g, 30.0 mmol)을 THF 100 ml 에 녹인 후, 28 % aqueous ammonia (10.2 ml, 150 mmol) 과 Cu (0.10 g, 5 mol%)를 넣고, 110°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA=10:1 (v/v))로 정제하여 dibenzo[b,d]furan-3-amine 4.45 g (yield : 81%)을 얻었다.

[545] $^1\text{H-NMR}$: δ 5.32 (s, 2H), 6.33 (d, 1H), 7.34 (m, 2H), 7.43 (s, 1H), 7.65 (d, 2H), 7.89 (d, 1H)

[546] <단계 2> IC-38의 합성

[547]

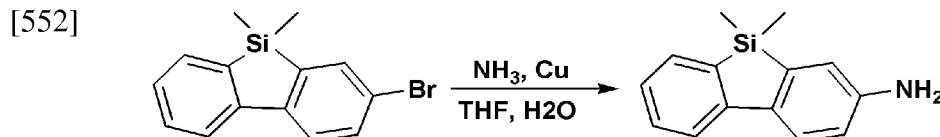


[548] 질소 기류 하에서 dibenzo[b,d]furan-3-amine (4.45 g, 24.29 mmol)을 H_2O /dioxane (10 ml / 90 ml) 에 녹인 후, triethanolammonium chloride (0.45 g, 2.43 mmol) 과 $\text{RuCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (0.055 g, 0.2 mmol)과 PPh_3 (0.191 g, 0.7 mmol), $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (0.548 g, 2.43 mmol)을 넣고, 180°C 에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 aqueous 5% HCl 에 반응물을 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피(Hexane:MC=1:1 (v/v))로 정제하여 IC-38 2.7 g (yield : 53%)을 얻었다.

[549] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.45 (d, 1H), 7.13 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.35 (m, 2H), 7.66 (d, 1H), 7.88 (d, 2H), 10.46 (s, 1H)

[550] [준비예 39] IC-39의 합성

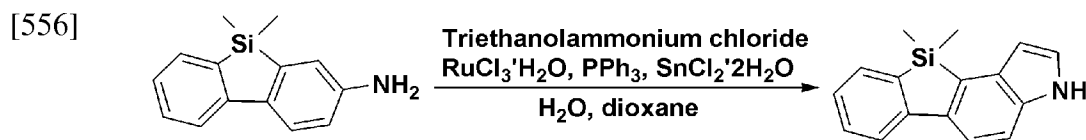
[551] <단계 1> 5,5-dimethyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine의 합성



[553] 3-bromodibenzo[b,d]furan 대신 3-bromo-5,5-dimethyl-5H-dibenzo[b,d] silole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 38의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5,5-dimethyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine을 얻었다.

[554] $^1\text{H-NMR}$: δ 0.68 (s, 6H), 5.31 (s, 2H), 6.68 (d, 1H), 6.80 (s, 1H), 7.33 (t, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.61 (t, 1H), 7.64 (d, 1H), 7.91 (d, 1H)

[555] <단계 2> IC-39의 합성



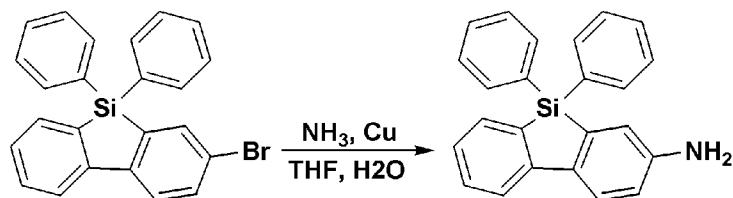
[557] dibenzo[b,d]furan-3-amine 대신 상기 5,5-dimethyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 38의 <단계 2>과 동일한 과정을 수행하여 IC-39를 얻었다.

[558] $^1\text{H-NMR}$: δ 0.66 (s, 6H), 6.45 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.33 (t, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.61 (t, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.97 (d, 1H), 10.42 (s, 1H)

[559] [준비예 40] IC-40의 합성

[560] <단계 1> 5,5-diphenyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine의 합성

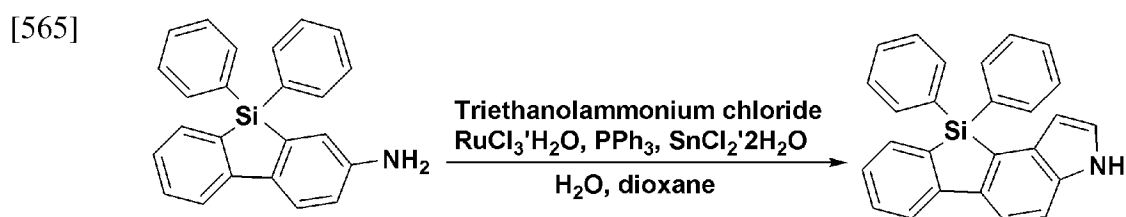
[561]



[562] 3-bromodibenzo[b,d]furan 대신 3-bromo-5,5-diphenyl-5H-dibenzo[b,d] silole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 38의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 5,5-diphenyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine을 얻었다.

[563] $^1\text{H-NMR}$: δ 5.33 (s, 2H), 6.67 (d, 1H), 6.81 (s, 1H), 7.31 (t, 1H), 7.37 (m, 4H), 7.46 (m, 4H), 7.54 (m, 3H), 7.62 (t, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.92 (d, 1H)

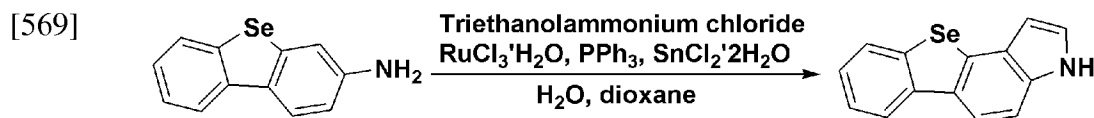
[564] <단계 2> IC-40의 합성



[566] dibenzo[b,d]furan-3-amine 대신 상기 5,5-diphenyl-5H-dibenzo[b,d]silol-3-amine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 38의 <단계 2>과 동일한 과정을 수행하여 IC-40을 얻었다.

[567] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.44 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.35 (m, 5H), 7.47 (m, 4H), 7.53 (m, 3H), 7.62 (t, 1H), 7.78 (d, 1H), 7.90 (d, 1H), 7.96 (d, 1H), 10.41 (s, 1H)

[568] [준비예 41] IC-41의 합성

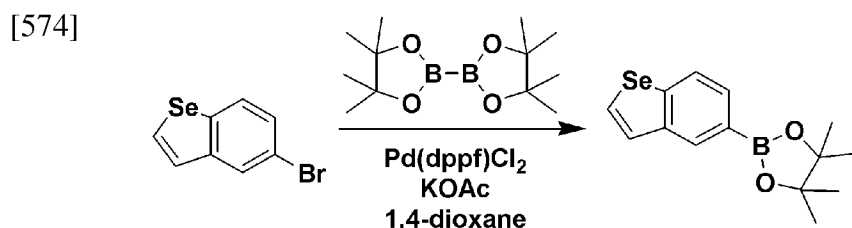


[570] dibenzo[b,d]furan-3-amine 대신 dibenzo[b,d]selenophen-3-amine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 38의 <단계 2>과 동일한 과정을 수행하여 IC-41을 얻었다.

[571] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.47 (d, 1H), 7.15 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.36 (m, 2H), 7.67 (d, 1H), 7.89 (d, 2H), 10.45 (s, 1H)

[572] [준비예 42] IC-42의 합성

[573] <단계 1> 2-(benzo[b]selenophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane의 합성

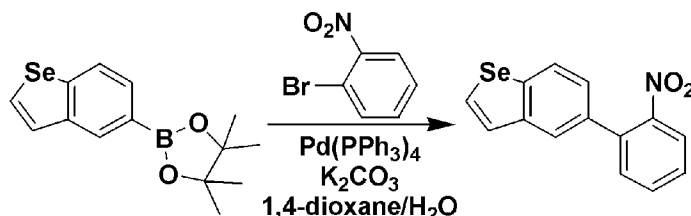


[575] 5-bromobenzofuran 대신 5-bromobenzo[b]selenophene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 2-(benzo[b]selenophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 얻었다.

[576] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.26 (s, 12H), 6.45 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.54 (d, 1H), 8.00 (s, 1H)

[577] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene의 합성

[578]

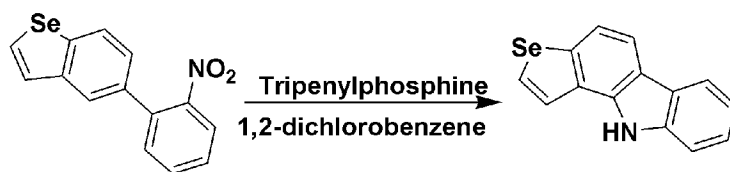


[579] 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 대신 상기 2-(benzo[b]selenophen-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 5-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene을 얻었다.

[580] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.44 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.51 (d, 1H), 7.65 (t, 1H), 7.84 (t, 1H), 7.94 (s, 1H), 8.00 (d, 1H), 8.05 (t, 1H)

[581] <단계 3> IC-42의 합성

[582]



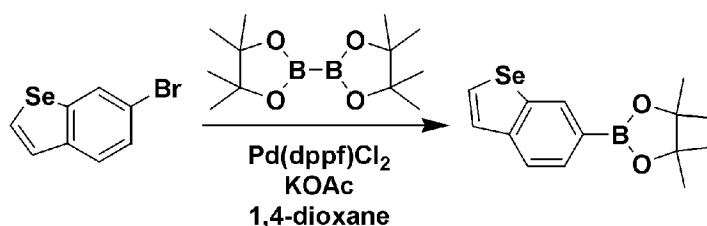
[583] 5-(2-nitrophenyl)benzofuran 대신 5-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 IC-42를 얻었다.

[584] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.52 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.44 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.69 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.96 (d, 1H), 8.03 (t, 1H), 10.56 (s, 1H)

[585] [준비예 43] IC-43의 합성

[586] <단계 1> 2-(benzo[b]selenophen-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane의 합성

[587]

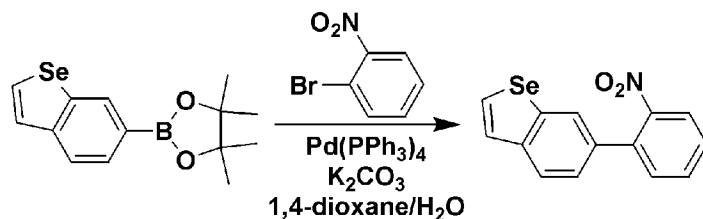


[588] 5-bromobenzofuran 대신 6-bromobenzo[b]selenophene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 2-(benzo[b]selenophen-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 얻었다.

[589] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.24 (s, 12H), 6.45 (d, 1H), 7.28 (d, 1H), 7.44 (d, 1H), 7.57 (d, 1H), 7.96 (s, 1H)

[590] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene의 합성

[591]

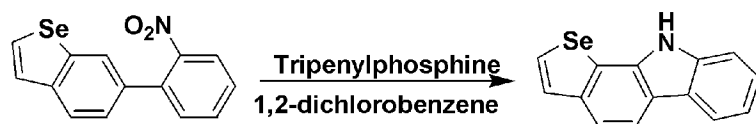


[592] 2-(benzofuran-5-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(benzo[b]selenophen-6-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene을 얻었다.

[593] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.46 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.54 (d, 1H), 7.67 (t, 1H), 7.86 (t, 1H), 7.93 (s, 1H), 8.02 (d, 1H), 8.08 (t, 1H)

[594] <단계 3> IC-43의 합성

[595]



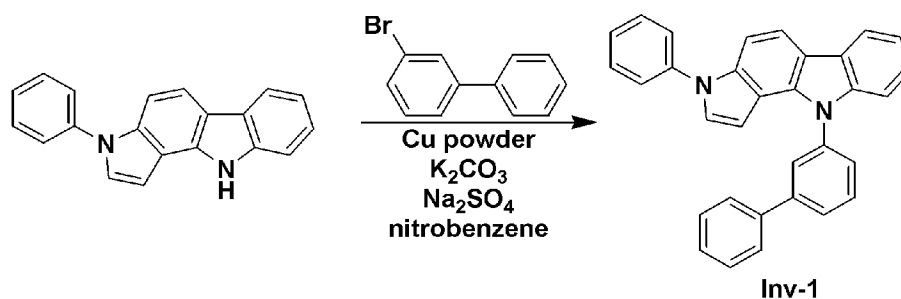
[596] 5-(2-nitrophenyl)benzofuran 대신 6-(2-nitrophenyl)benzo[b]selenophene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 36의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 IC-43를 얻었다.

[597] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.52 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.43 (d, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.67 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.09 (t, 1H), 10.55 (s, 1H)

[598]

[599] [합성예 1] Inv-1의 합성

[600]



[601] 질소 기류 하에서 IC-1 (3 g, 10.63 mmol), 3-bromobiphenyl (3.72 g, 15.94 mmol), Cu powder (0.07 g, 1.06 mmol), K_2CO_3 (1.47 g, 10.63 mmol), Na_2SO_4 (1.51 g, 10.63 mmol), nitrobenzene (100 ml)를 혼합하고 200°C 에서 24시간 동안 교반하였다.

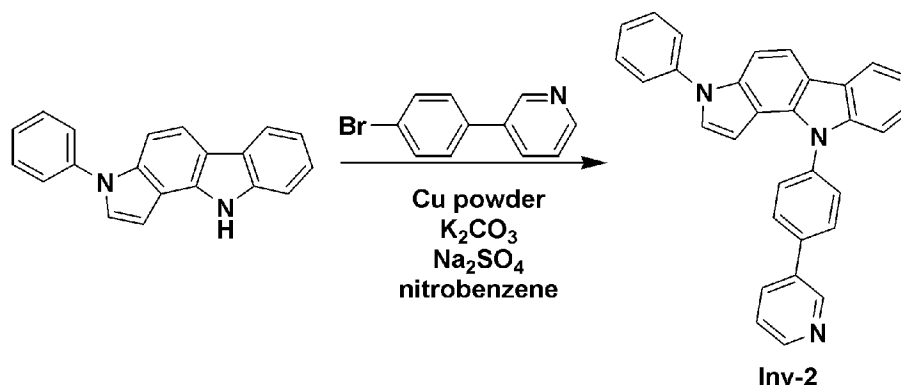
[602] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 1:1 (v/v))로 정제하여 목적 화합물인 Inv-1

(2.26 g, 수율 49 %)을 얻었다.

[603] GC-Mass (이론치: 434.18 g/mol, 측정치: 434 g/mol)

[604] [합성 예 2] Inv-2의 합성

[605]

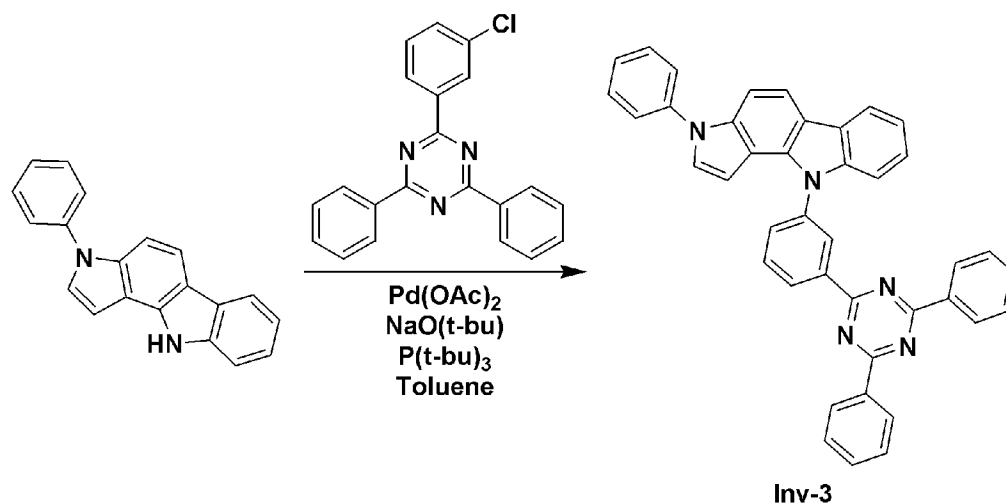


[606] 3-bromobiphenyl 대신 3-(4-bromophenyl)pyridine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-2 (2.13 g, 46 %)를 얻었다.

[607] GC-Mass (이론치: 435.17 g/mol, 측정치: 435.17 g/mol)

[608] [합성 예 3] Inv-3의 합성

[609]



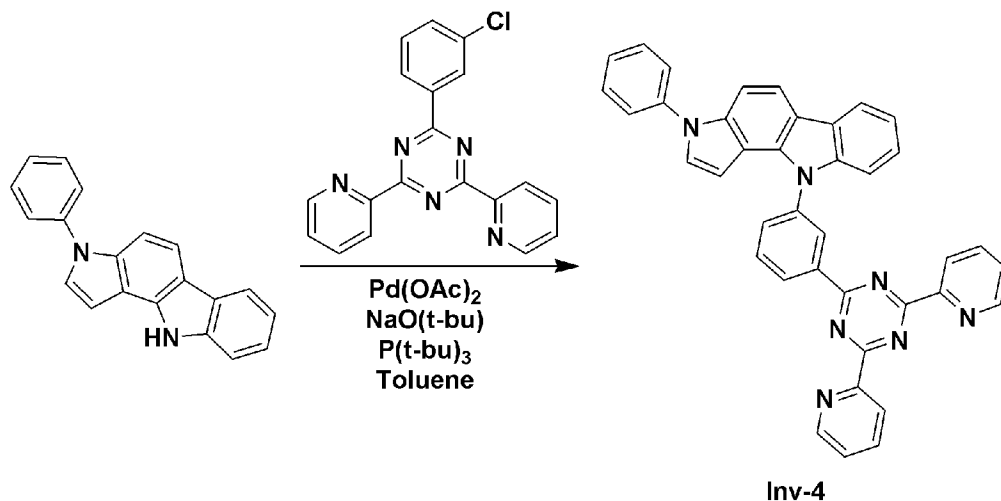
[610] 질소 기류 하에서 IC-1 (3 g, 10.63 mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.38 g, 12.75 mmol), Pd(OAc)₂ (0.12 g, 5 mol%), NaO(t-bu) (2.04 g, 21.25 mmol), P(t-bu)₃ (0.21 g, 1.06 mmol) 및 Toluene (100 ml)을 혼합하고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[611] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 2:1 (v/v))로 정제하여 목적 화합물인 Inv-3 (4.89 g, 수율 78 %)을 얻었다.

[612] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[613] [합성 예 4] Inv-4의 합성

[614]

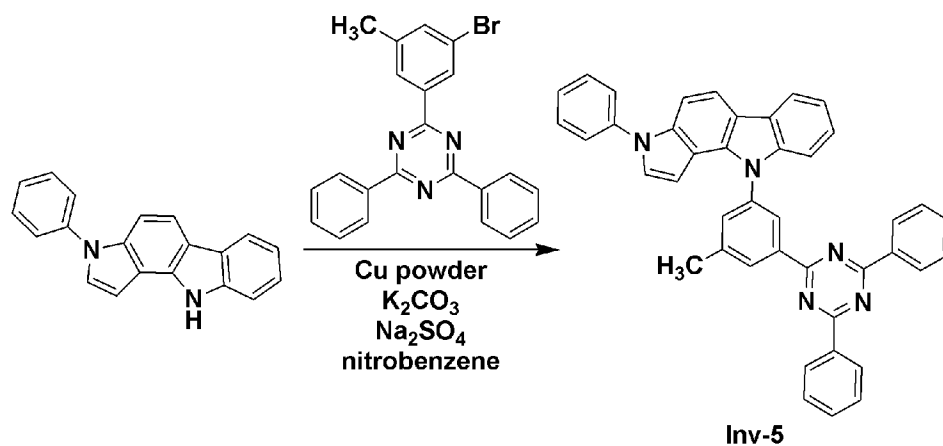


[615] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-di(pyridin-2-yl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-4 (4.97 g, 79 %)를 얻었다.

[616] GC-Mass (이론치: 591.22 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[617] [합성예 5] Inv-5의 합성

[618]

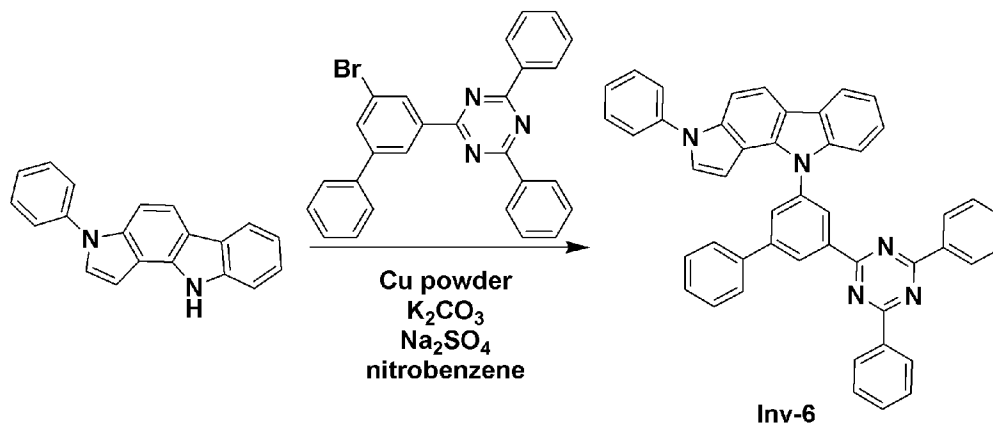


[619] 3-bromobiphenyl 대신 2-(3-bromo-5-methylphenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-5 (3.21 g, 50 %)를 얻었다.

[620] GC-Mass (이론치: 603.24 g/mol, 측정치: 603 g/mol)

[621] [합성예 6] Inv-6의 합성

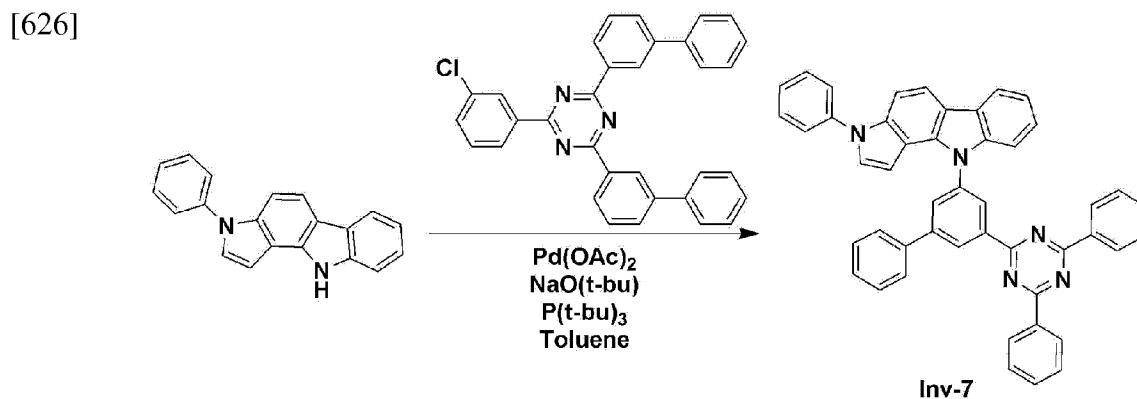
[622]



[623] 3-bromobiphenyl 대신 2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-6 (3.47 g, 49 %)를 얻었다.

[624] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

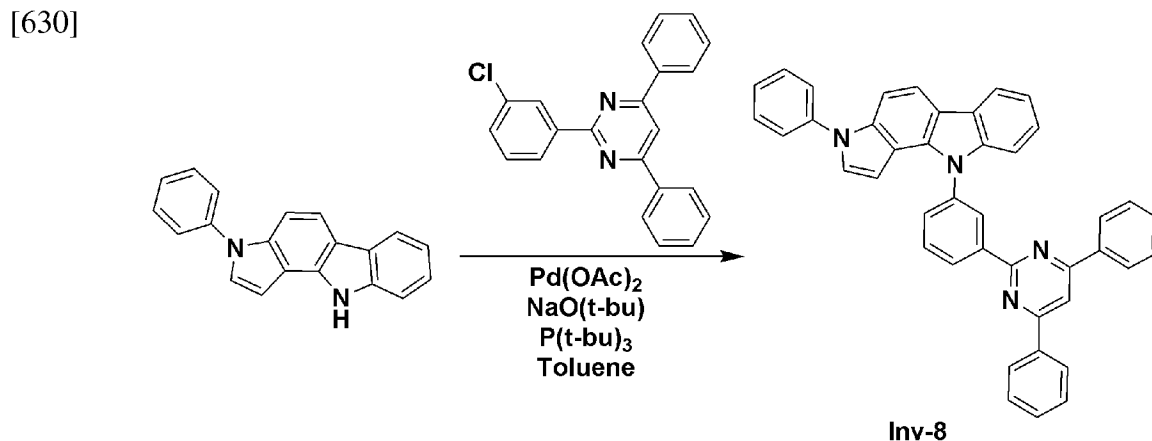
[625] [합성 예 7] Inv-7의 합성



[627] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-(3-chlorophenyl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-7 (5.38 g, 76 %)를 얻었다.

[628] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[629] [합성 예 8] Inv-8의 합성

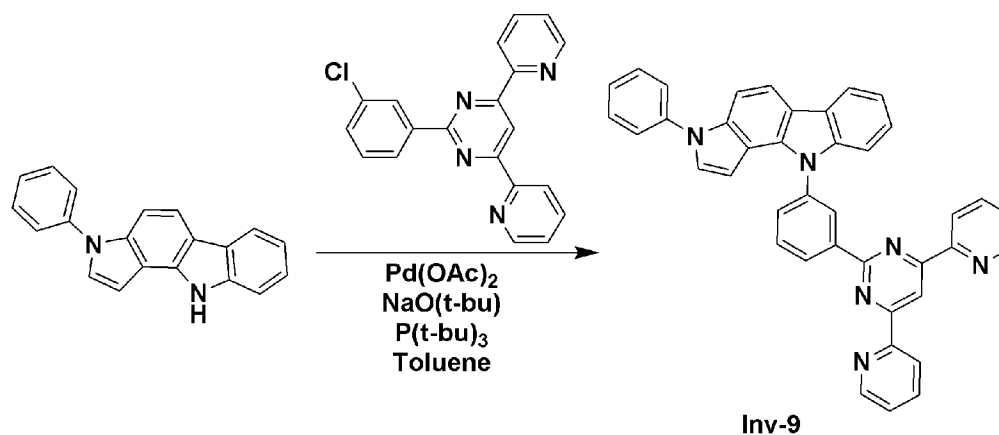


- [631] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신
2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기
합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-8 (4.63 g, 74 %)를 얻었다.

[632] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[633] [합성 예 9] Inv-9의 합성

[634]

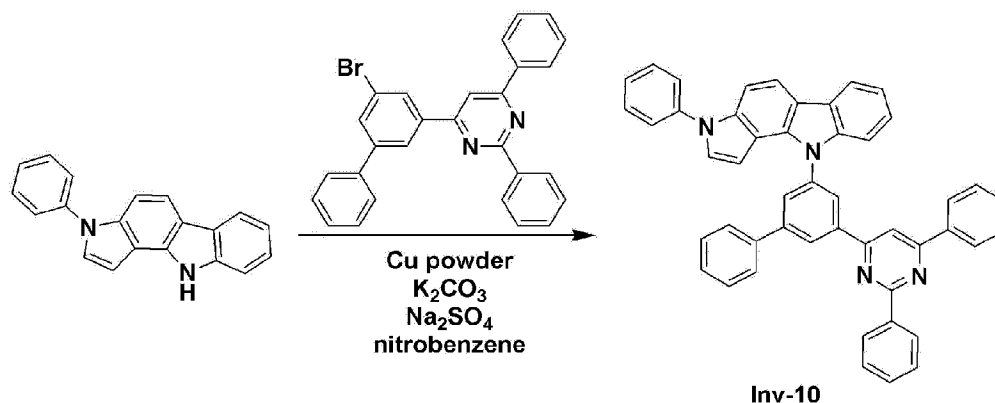


- [635] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신
2-(3-chlorophenyl)-4,6-di(pyridin-2-yl)pyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는
상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-9 (4.83 g, 77 %)를
얻었다.

[636] GC-Mass (이론치: 590.22 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[637] [합성 예 10] Inv-10의 합성

[638]

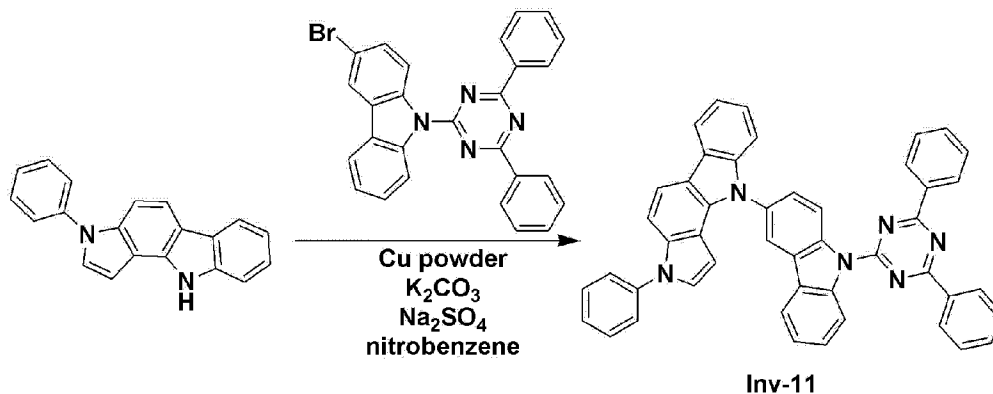


- [639] 3-bromobiphenyl 대신 4-(5-bromobiphenyl-3-yl)-2,6-diphenylpyrimidine을
사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적
화합물인 Inv-10 (3.53 g, 50 %)를 얻었다.

[640] GC-Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[641] [합성 예 11] Inv-11의 합성

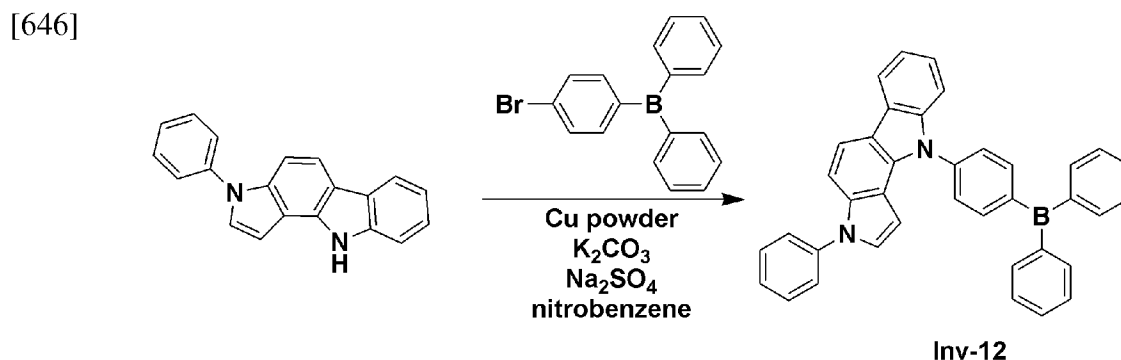
[642]



[643] 3-bromobiphenyl 대신 3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-11 (3.39 g, 47 %)를 얻었다.

[644] GC-Mass (이론치: 678.25 g/mol, 측정치: 678 g/mol)

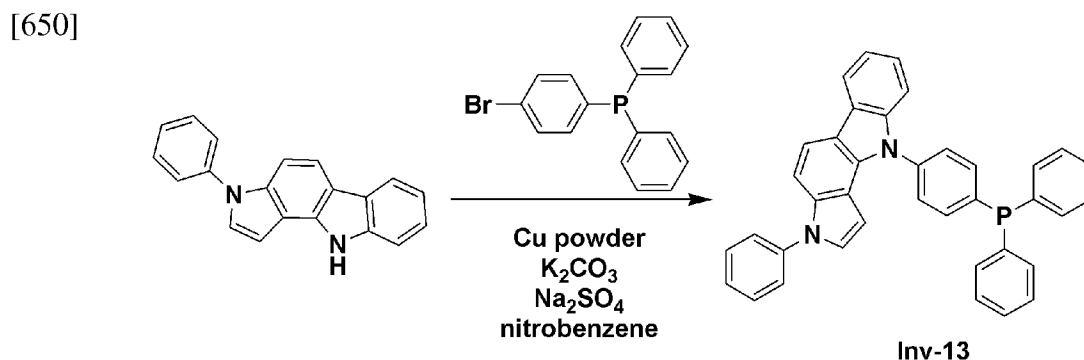
[645] [합성 예 12] Inv-12의 합성



[647] 3-bromobiphenyl 대신 (4-bromophenyl)diphenylborane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-12 (2.44 g, 44 %)를 얻었다.

[648] GC-Mass (이론치: 522.23 g/mol, 측정치: 522 g/mol)

[649] [합성 예 13] Inv-13의 합성

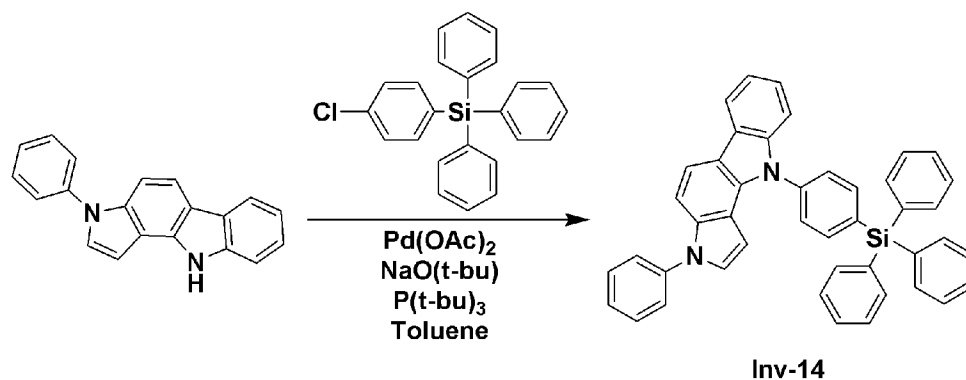


[651] 3-bromobiphenyl 대신 (4-bromophenyl)diphenylphosphine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-13 (2.59 g, 45 %)를 얻었다.

[652] GC-Mass (이론치: 542.19 g/mol, 측정치: 542 g/mol)

[653] [합성 예 14] Inv-14의 합성

[654]

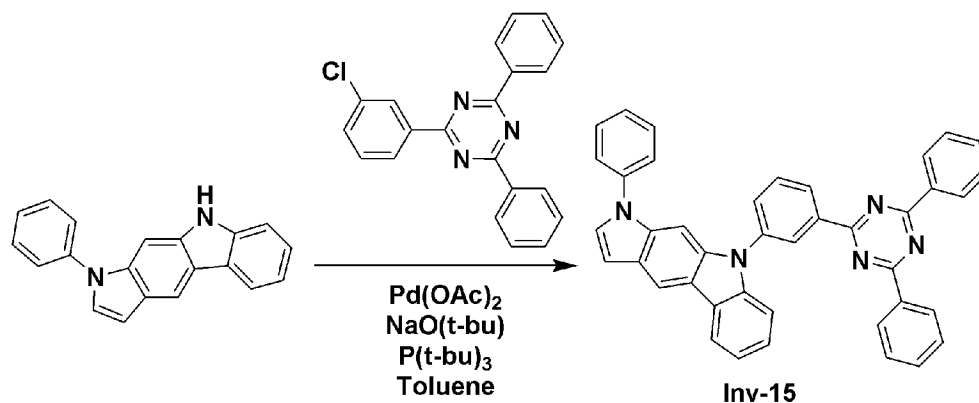


[655] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 (4-chlorophenyl)triphenylsilane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-14 (4.92 g, 75 %)를 얻었다.

[656] GC-Mass (이론치: 616.23 g/mol, 측정치: 616 g/mol)

[657] [합성 예 15] Inv-15의 합성

[658]

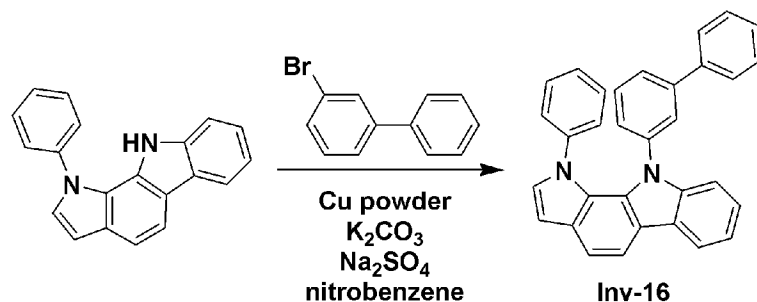


[659] IC-1 대신 IC-2를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-15 (4.51 g, 72 %)를 얻었다.

[660] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[661] [합성 예 16] Inv-16의 합성

[662]

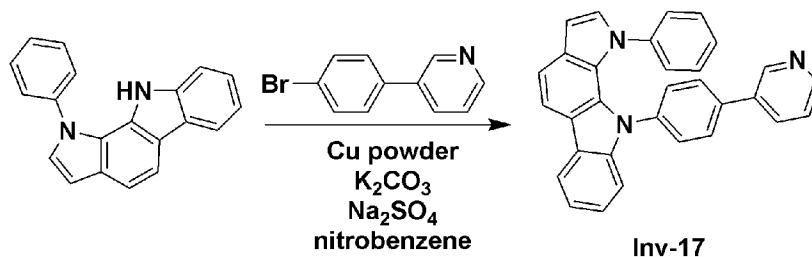


[663] IC-1 대신 IC-3을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-16 (2.35 g, 51 %)를 얻었다.

[664] GC-Mass (이론치: 434.18 g/mol, 측정치: 434 g/mol)

[665] [합성 예 17] Inv-17의 합성

[666]

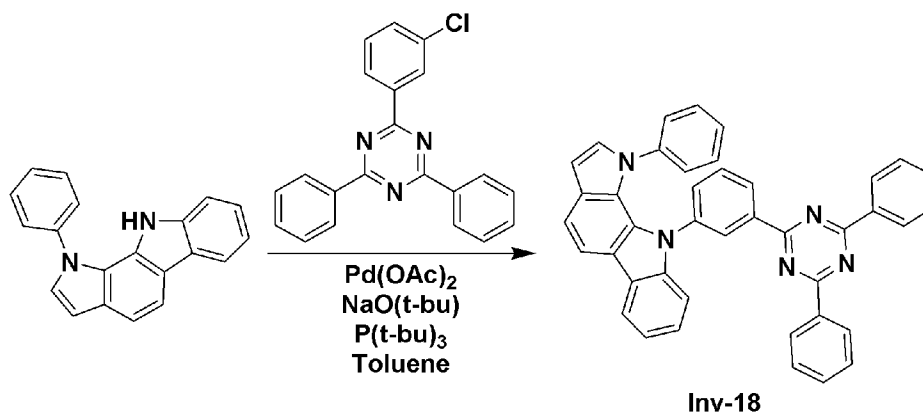


[667] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과 3-(4-bromophenyl)pyridine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-17 (2.45 g, 53 %)를 얻었다.

[668] GC-Mass (이론치: 435.17 g/mol, 측정치: 435 g/mol)

[669] [합성 예 18] Inv-18의 합성

[670]

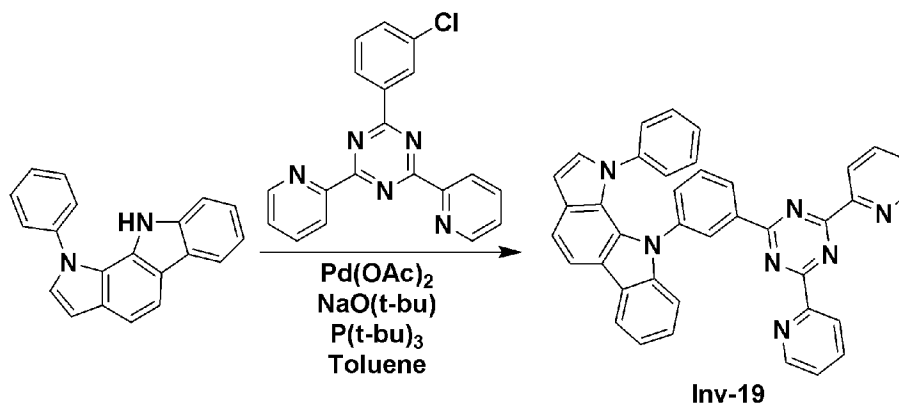


[671] IC-1 대신 IC-3을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-18 (4.32 g, 69 %)를 얻었다.

[672] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[673] [합성 예 19] Inv-19의 합성

[674]

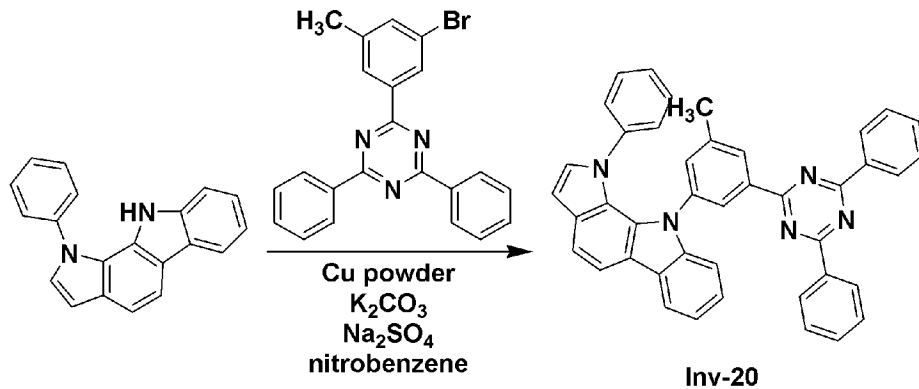


[675] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-3과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-di(pyridin-2-yl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-19 (4.53 g, 72 %)를 얻었다.

[676] GC-Mass (이론치: 591.22 g/mol, 측정치: 591 g/mol)

[677] [합성 예 20] Inv-20의 합성

[678]



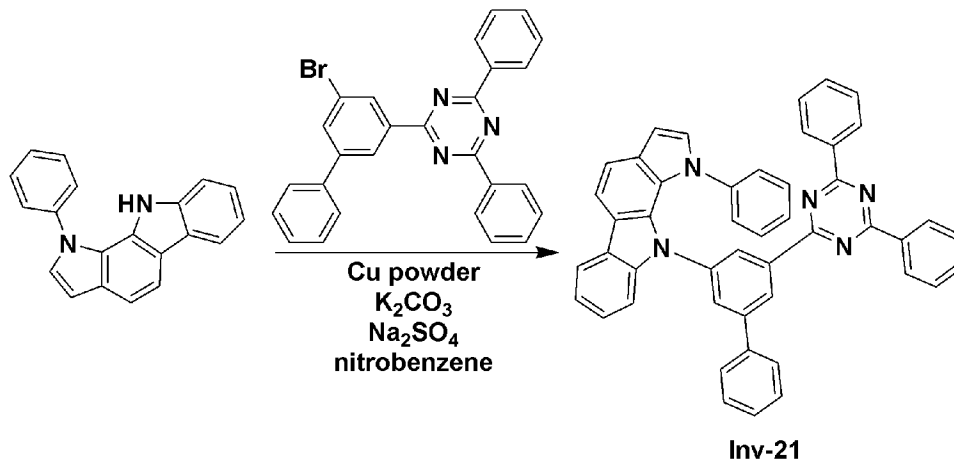
[679] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과

2-(3-bromo-5-methylphenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-20 (2.95 g, 46 %)를 얻었다.

[680] GC-Mass (이론치: 603.24 g/mol, 측정치: 603 g/mol)

[681] [합성 예 21] Inv-21의 합성

[682]



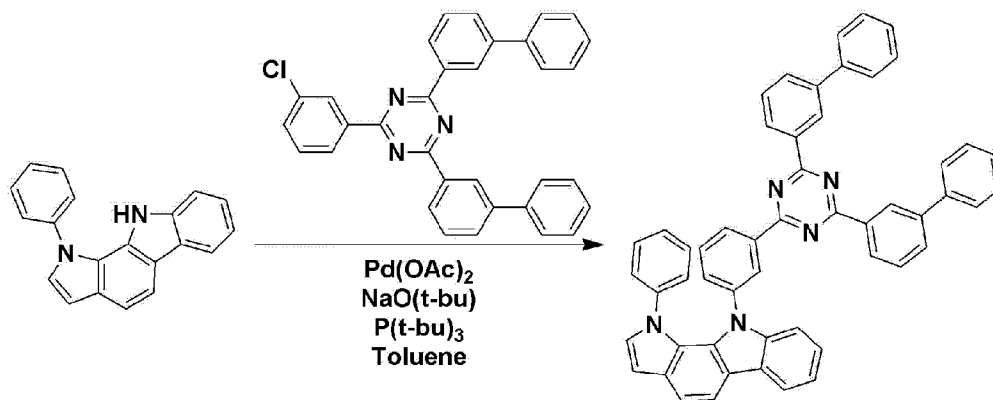
[683] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과

2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-21 (3.18 g, 45 %)를 얻었다.

[684] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[685] [합성 예 22] Inv-22의 합성

[686]

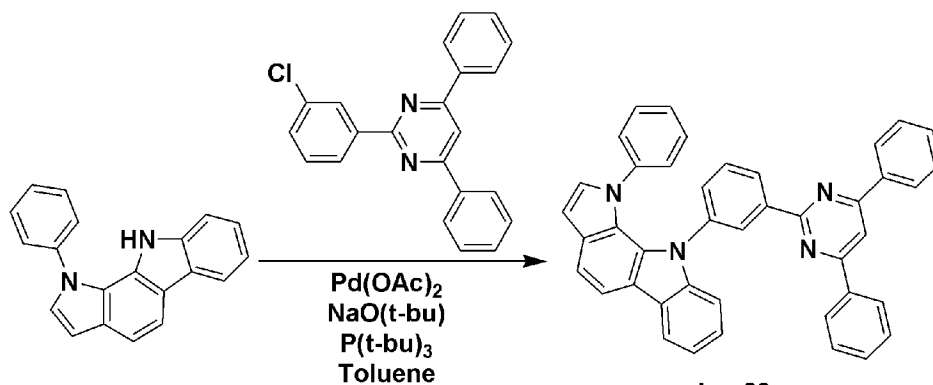
**Inv-22**

[687] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-3과 2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-(3-chlorophenyl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-22 (6.07 g, 77 %)를 얻었다.

[688] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[689] [합성 예 23] Inv-23의 합성

[690]

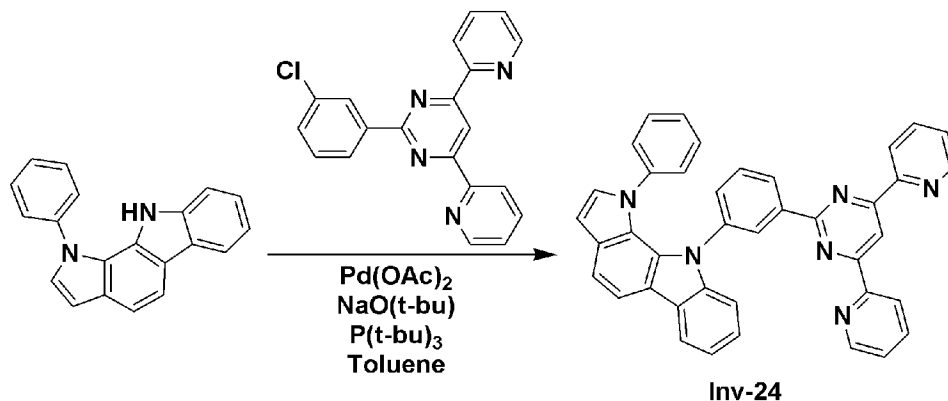
**Inv-23**

[691] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-3과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-23 (4.69 g, 75 %)를 얻었다.

[692] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[693] [합성 예 24] Inv-24의 합성

[694]

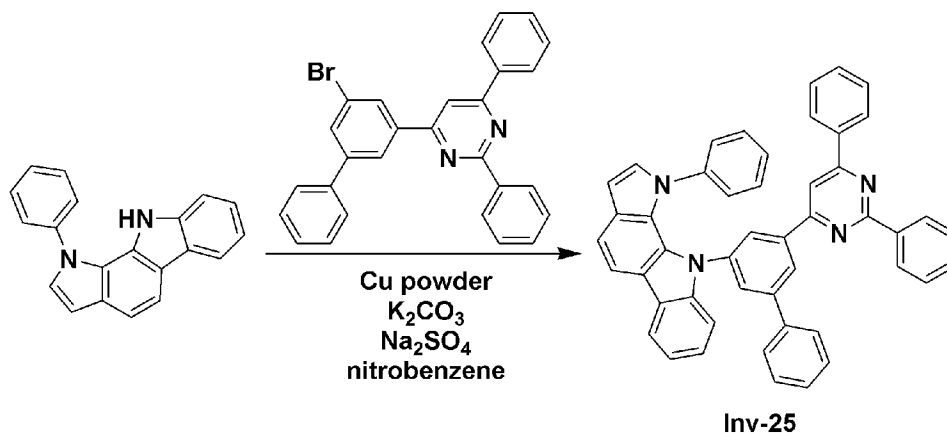


[695] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-3과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-di(pyridin-2-yl)pyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-24 (4.46 g, 71 %)를 얻었다.

[696] GC-Mass (이론치: 590.22 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[697] [합성 예 25] Inv-25의 합성

[698]

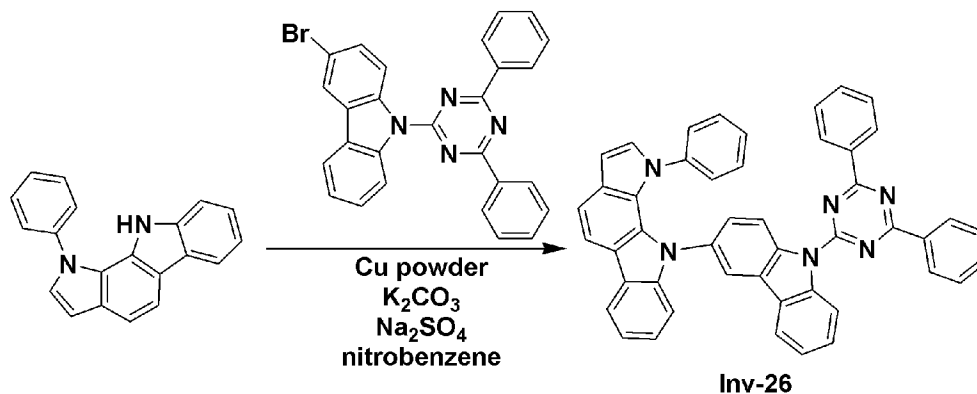


[699] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과 4-(5-bromobiphenyl-3-yl)-2,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-25 (3.04 g, 43 %)를 얻었다.

[700] GC-Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[701] [합성 예 26] Inv-26의 합성

[702]

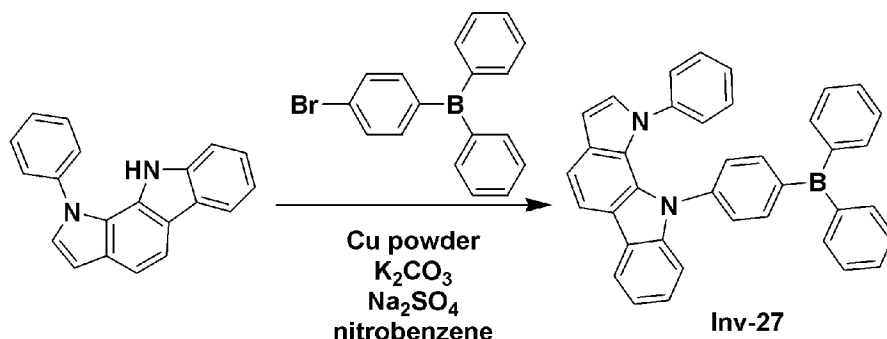


[703] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과 3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-26 (2.96 g, 41 %)를 얻었다.

[704] GC-Mass (이론치: 678.25 g/mol, 측정치: 678 g/mol)

[705] [합성 예 27] Inv-27의 합성

[706]

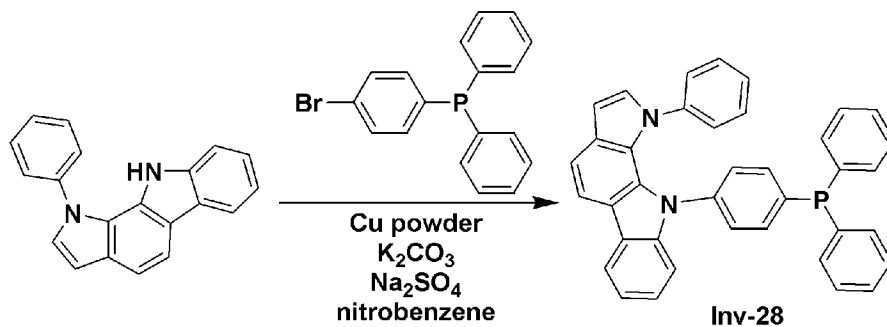


[707] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과 (4-bromophenyl)diphenylborane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-27 (2.66 g, 48 %)를 얻었다.

[708] GC-Mass (이론치: 522.23 g/mol, 측정치: 522 g/mol)

[709] [합성 예 28] Inv-28의 합성

[710]

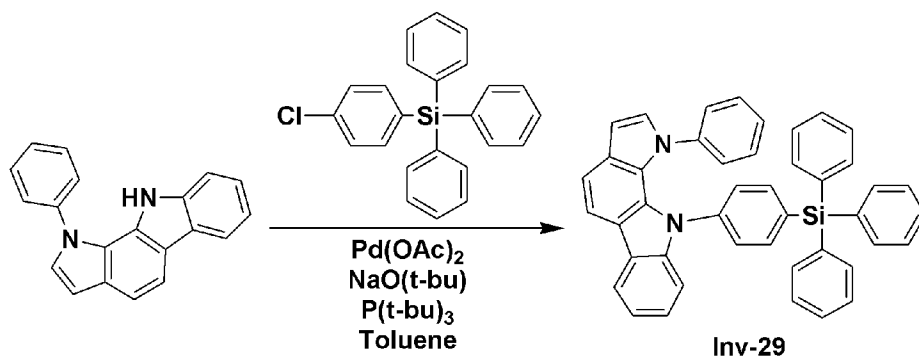


[711] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-3과 (4-bromophenyl) diphenylphosphine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-28 (2.54 g, 44 %)를 얻었다.

[712] GC-Mass (이론치: 542.19 g/mol, 측정치: 542 g/mol)

[713] [합성 예 29] Inv-29의 합성

[714]

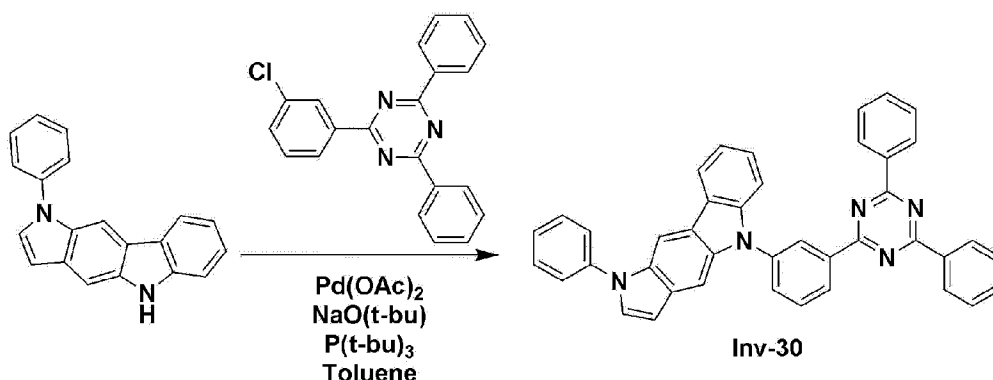


[715] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-3과 (4-chlorophenyl)triphenylsilane을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-29 (4.65 g, 71 %)를 얻었다.

[716] GC-Mass (이론치: 616.23 g/mol, 측정치: 616 g/mol)

[717] [합성 예 30] Inv-30의 합성

[718]

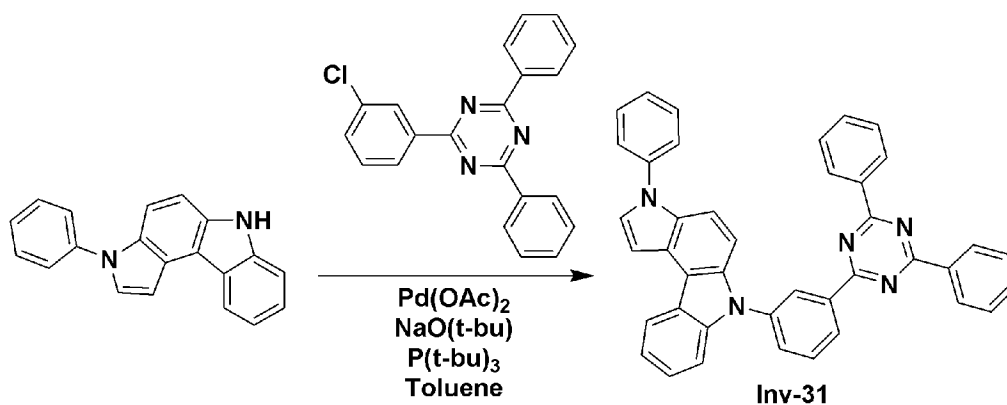


[719] IC-1 대신 IC-4를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-30 (4.70 g, 75 %)를 얻었다.

[720] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[721] [합성 예 31] Inv-31의 합성

[722]

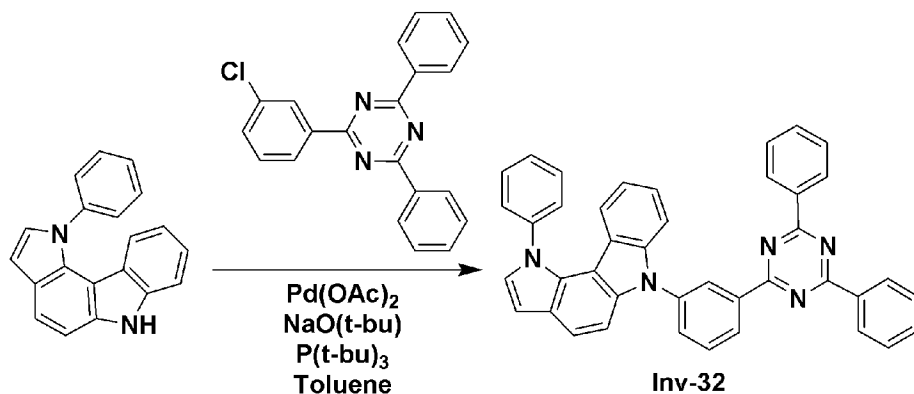


[723] IC-1 대신 IC-5를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-31 (4.57 g, 73 %)를 얻었다.

[724] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[725] [합성 예 32] Inv-32의 합성

[726]

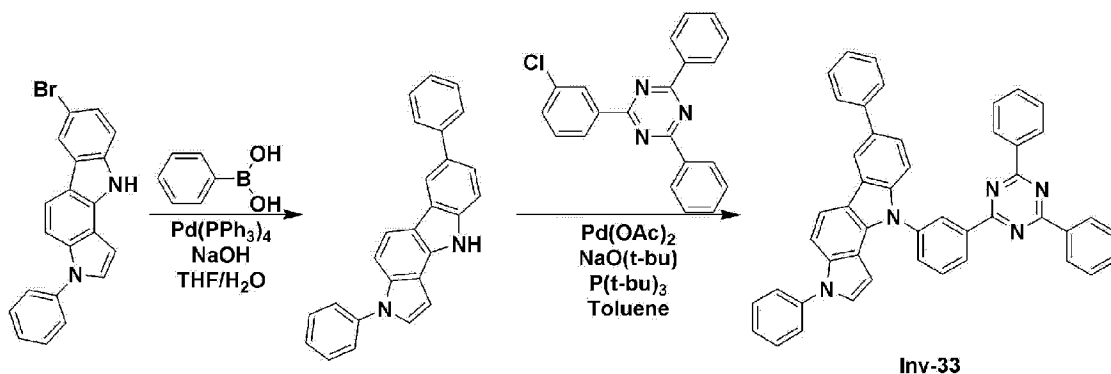


[727] IC-1 대신 IC-6을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-32 (4.82 g, 77 %)를 얻었다.

[728] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[729] [합성 예 33] Inv-33의 합성

[730]



[731] 질소 기류 하에서 IC-7 (5 g, 13.84 mmol)과 phenylboronic acid (2.03 g, 16.61 mmol), NaOH (1.66 g, 41.52 mmol) 및 THF/H₂O(100 ml/500 ml)를 혼합한 다음, 40°C에서 Pd(PPh₃)₄(0.80 g, 5 mol%)를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다.

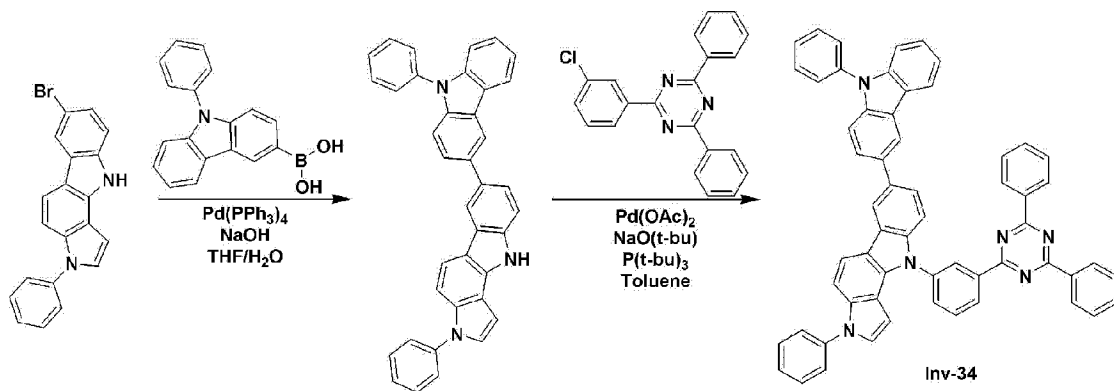
[732] 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 3,7-diphenyl-3,10-dihydropyrrolo[3,2-a]carbazole을 얻었다.

[733] 상기 3,7-diphenyl-3,10-dihydropyrrolo[3,2-a]carbazole을 IC-1 대신 사용하여 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-33 (6.27 g, 68 %)를 얻었다.

[734] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[735] [합성 예 34] Inv-34의 합성

[736]

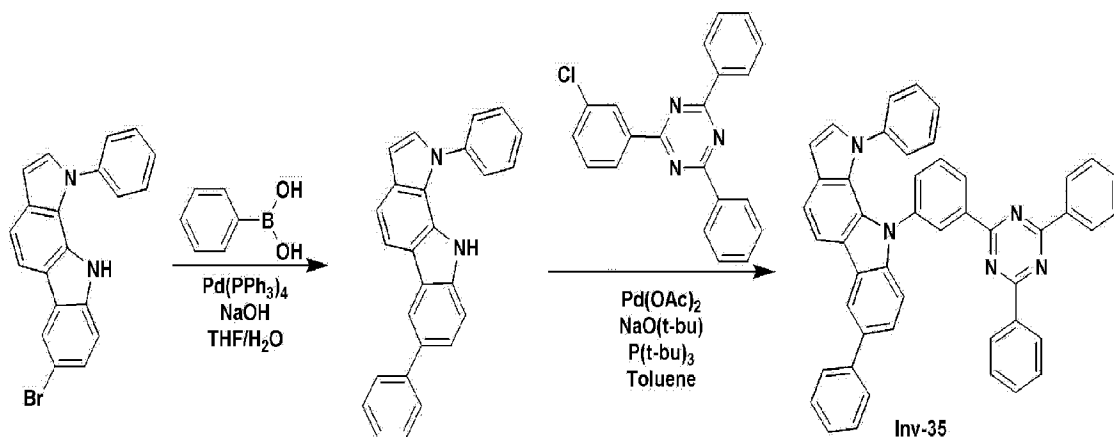


[737] phenylboronic acid 대신 9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 33과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-34 (7.94 g, 69 %)를 얻었다.

[738] GC-Mass (이론치: 830.32 g/mol, 측정치: 830 g/mol)

[739] [합성 예 35] Inv-35의 합성

[740]



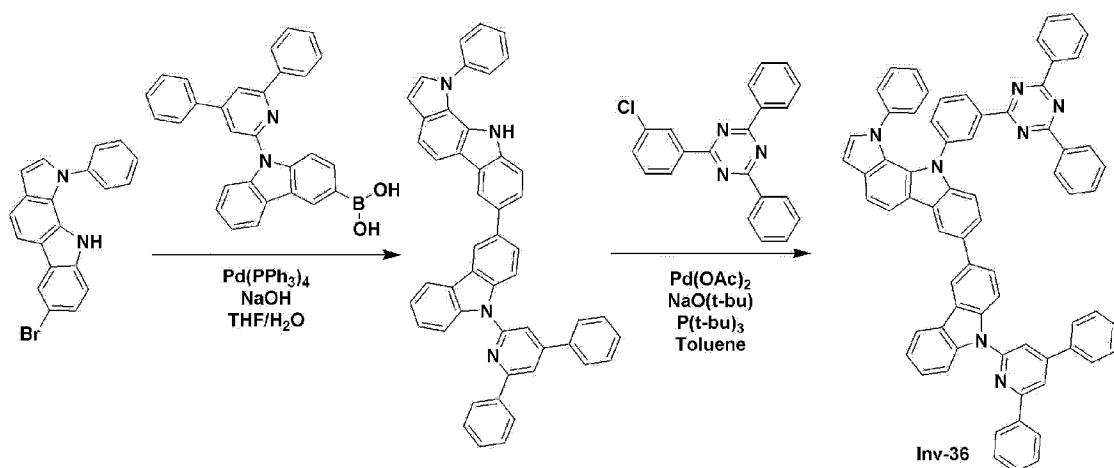
[741] IC-7 대신 IC-8을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 33과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-35 (6.64 g, 72 %)를 얻었다.

[742]

[743] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[744] [합성 예 36] Inv-36의 합성

[745]

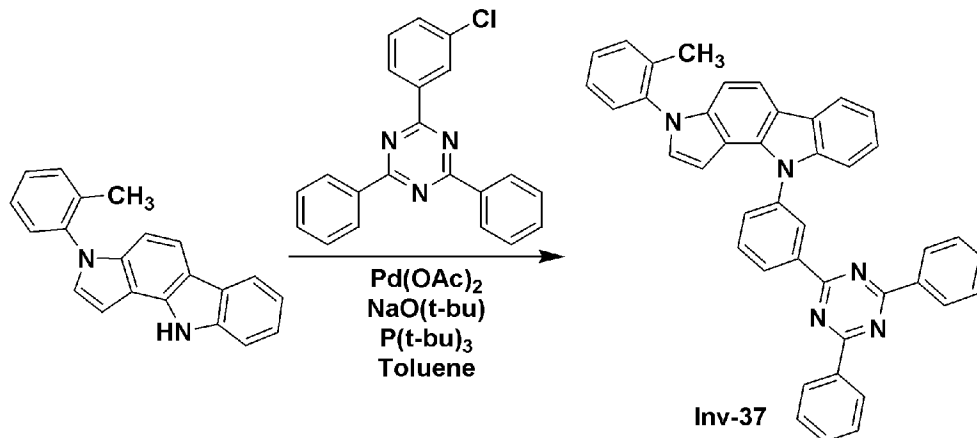


[746] IC-7과 phenylboronic acid 대신 IC-8과 9-(4,6-diphenylpyridin-2-yl)-9H-carbazol-3-ylboronic acid을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 33과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-36 (10.22 g, 75 %)를 얻었다.

[747] GC-Mass (이론치: 983.37 g/mol, 측정치: 983 g/mol)

[748] [합성 예 37] Inv-37의 합성

[749]

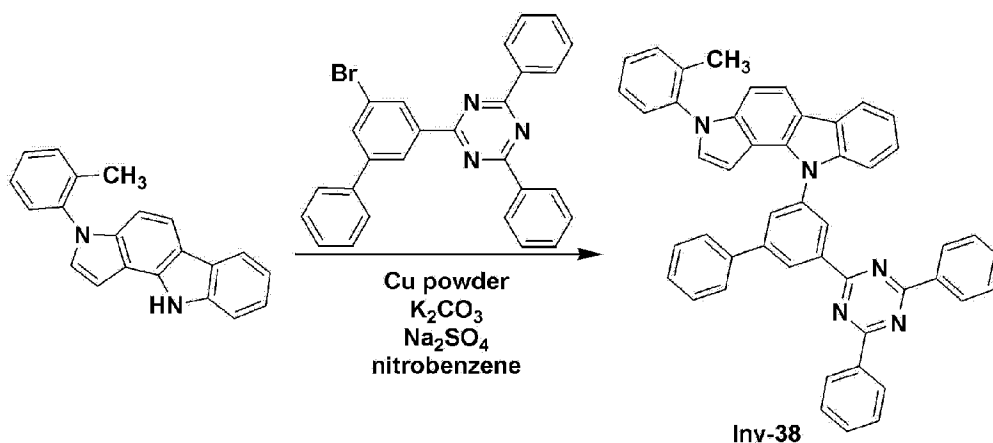


[750] IC-1 대신 IC-9를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-37 (4.34 g, 71 %)를 얻었다.

[751] GC-Mass (이론치: 603.24 g/mol, 측정치: 603 g/mol)

[752] [합성 예 38] Inv-38의 합성

[753]

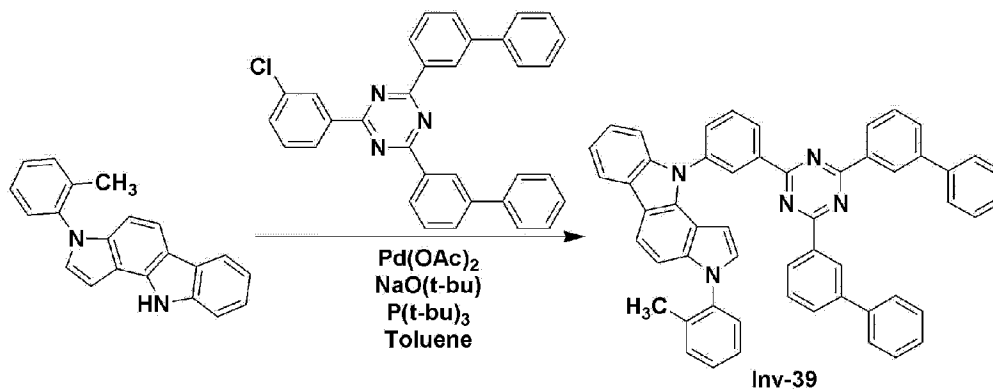


[754] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-9와 2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-38 (3.58 g, 52 %)를 얻었다.

[755] GC-Mass (이론치: 679.27 g/mol, 측정치: 679 g/mol)

[756] [합성 예 39] Inv-39의 합성

[757]

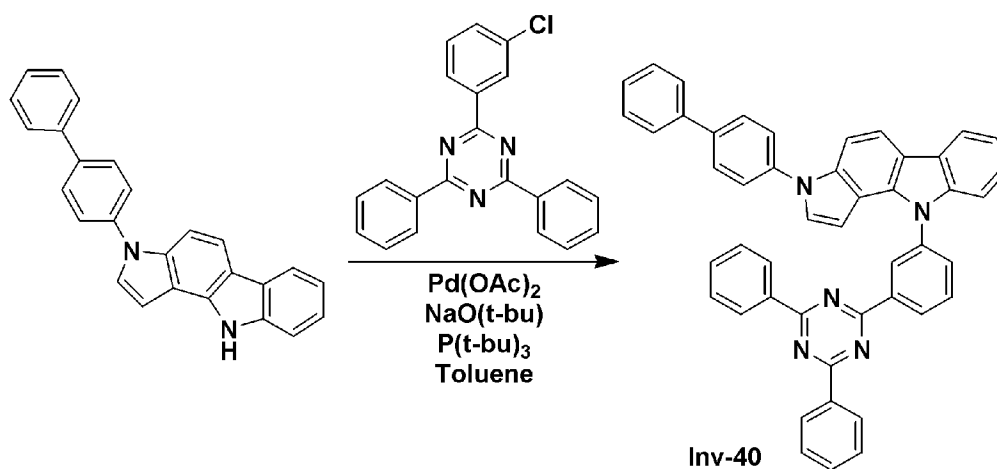


[758] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-9와 2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-(3-chlorophenyl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-39 (5.20 g, 68 %)를 얻었다.

[759] GC-Mass (이론치: 775.30 g/mol, 측정치: 775 g/mol)

[760] [합성 예 40] Inv-40의 합성

[761]

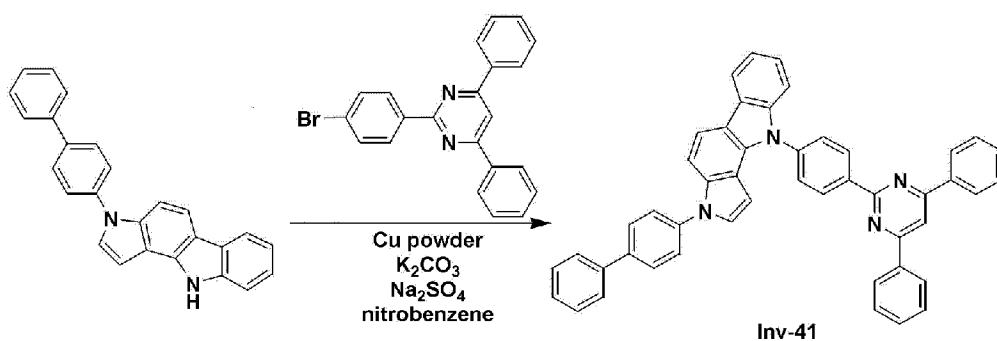


[762] IC-1 대신 IC-10을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-40 (3.90 g, 70 %)를 얻었다.

[763] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[764] [합성 예 41] Inv-41의 합성

[765]



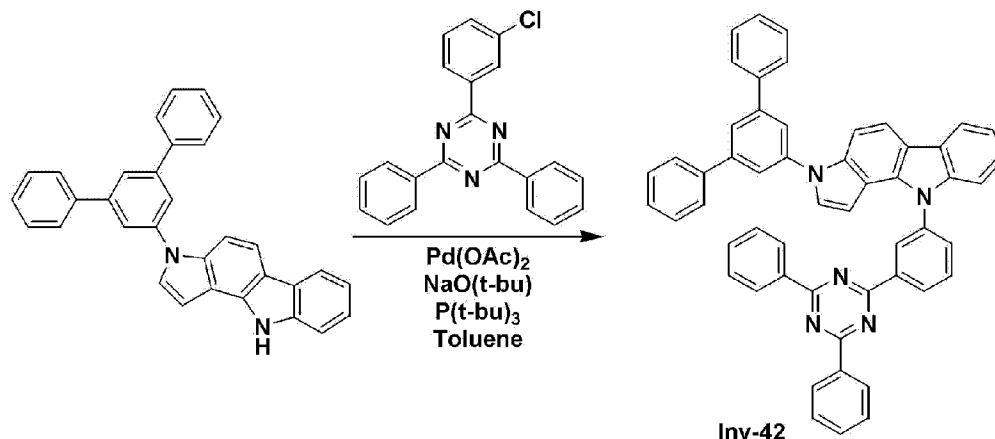
[766] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-10과 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기

합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-41 (2.67 g, 48 %)를 얻었다.

[767] GC-Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[768] [합성 예 42] Inv-42의 합성

[769]

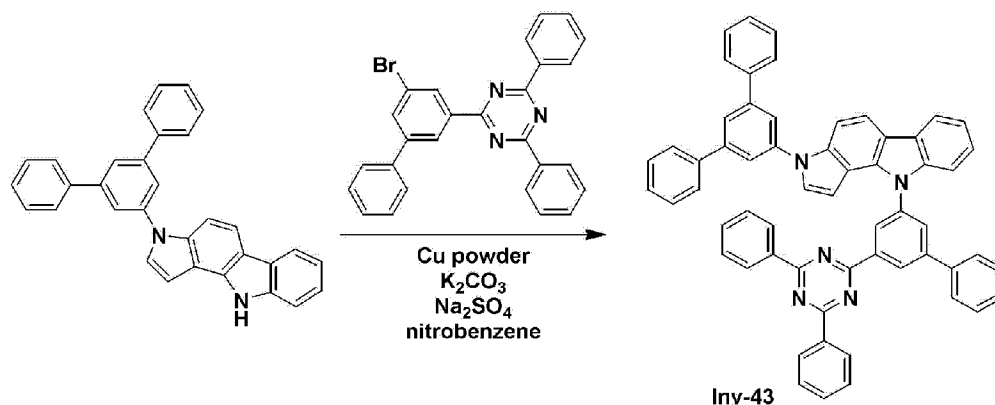


[770] IC-1 대신 IC-11을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-42 (3.74 g, 73 %)를 얻었다.

[771] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[772] [합성 예 43] Inv-43의 합성

[773]



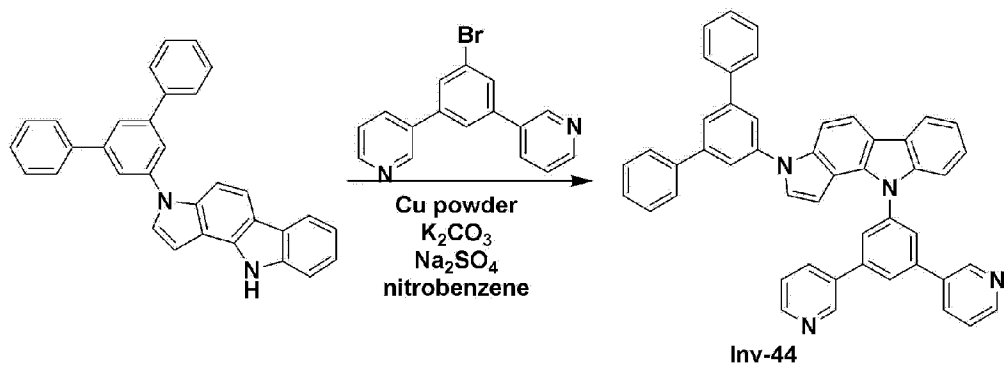
[774] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-11과

2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-43 (2.94 g, 52 %)를 얻었다.

[775] GC-Mass (이론치: 817.32 g/mol, 측정치: 817 g/mol)

[776] [합성 예 44] Inv-44의 합성

[777]

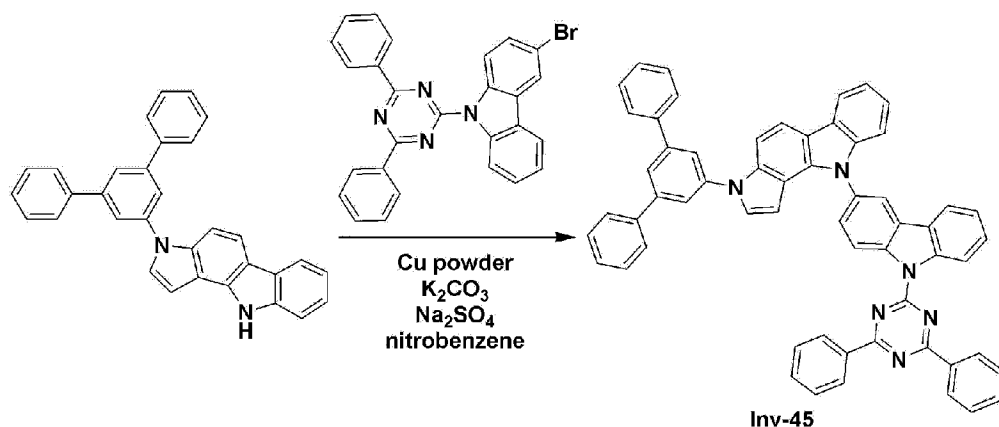


[778] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-11과 3,3'-(5-bromo-1,3-phenylene)dipyridine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-44 (2.34 g, 51 %)를 얻었다.

[779] GC-Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[780] [합성 예 45] Inv-45의 합성

[781]

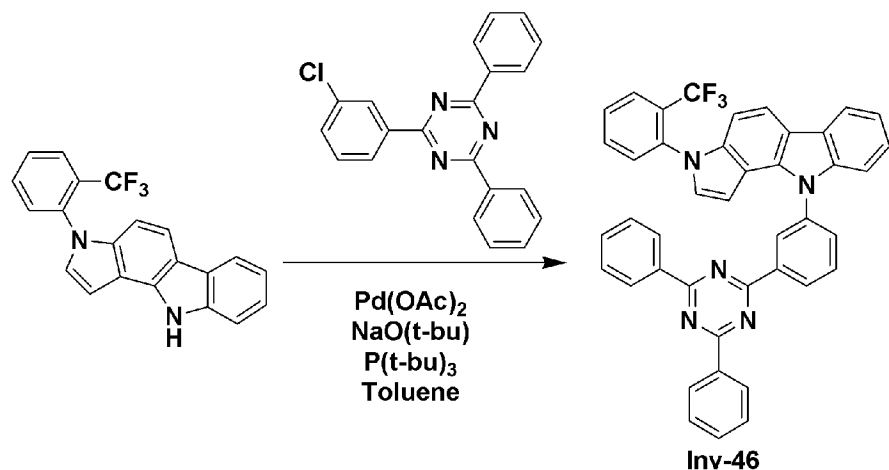


[782] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-11과 3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-45 (2.81 g, 49 %)를 얻었다.

[783] GC-Mass (이론치: 830.32 g/mol, 측정치: 830 g/mol)

[784] [합성 예 46] Inv-46의 합성

[785]

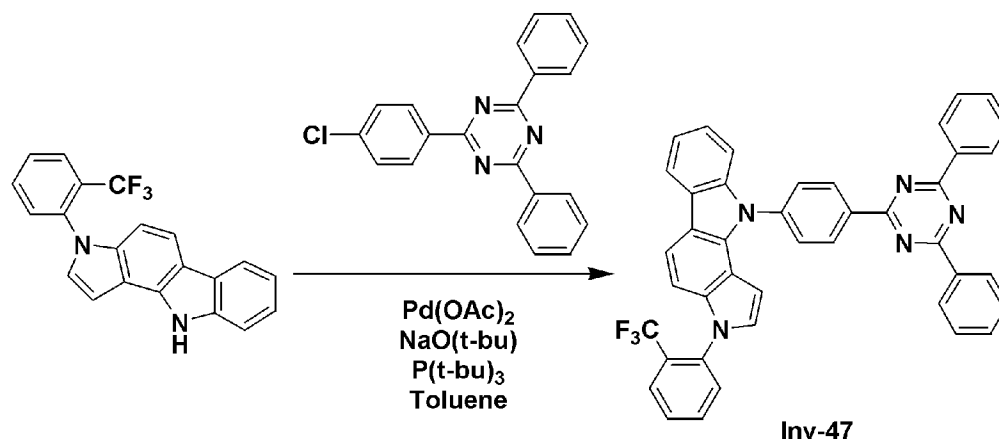


[786] IC-1 대신 IC-12를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-46 (4.05 g, 72 %)를 얻었다.

[787] GC-Mass (이론치: 657.21 g/mol, 측정치: 657 g/mol)

[788] [합성 예 47] Inv-47의 합성

[789]

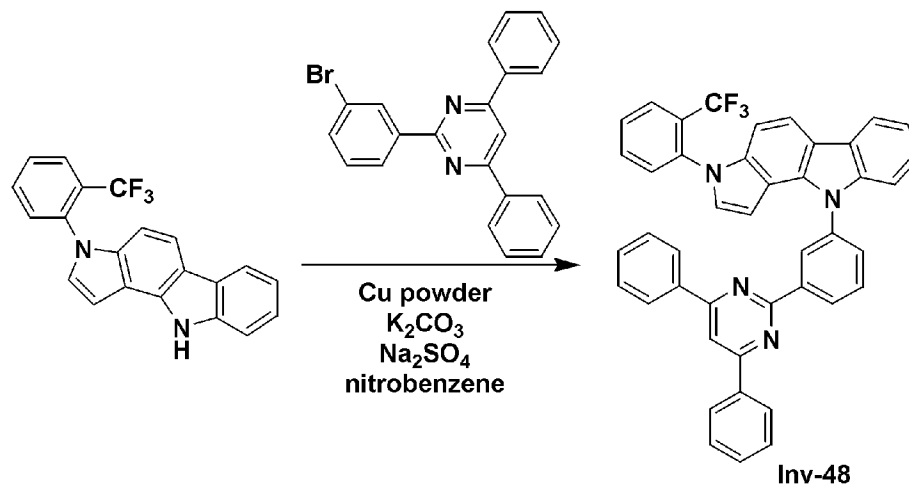


[790] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-12와 2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-47 (3.66 g, 65 %)를 얻었다.

[791] GC-Mass (이론치: 657.21 g/mol, 측정치: 657 g/mol)

[792] [합성 예 48] Inv-48의 합성

[793]

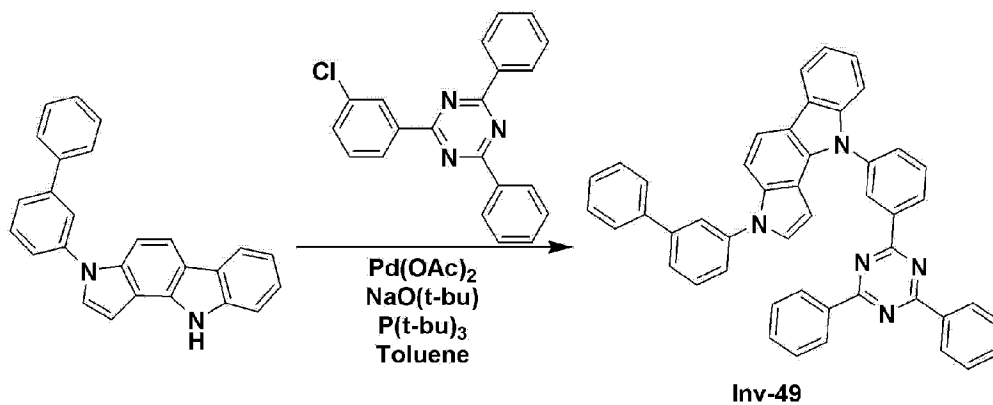


[794] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-12와 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-48 (2.64 g, 47 %)를 얻었다.

[795] GC-Mass (이론치: 656.22 g/mol, 측정치: 656 g/mol)

[796] [합성 예 49] Inv-49의 합성

[797]

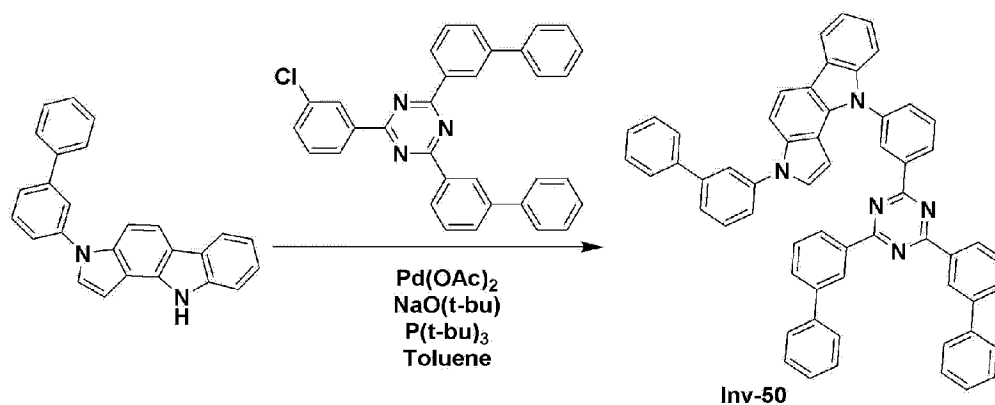


[798] IC-1 대신 IC-13을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-49 (3.90 g, 70 %)를 얻었다.

[799] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[800] [합성 예 50] Inv-50의 합성

[801]

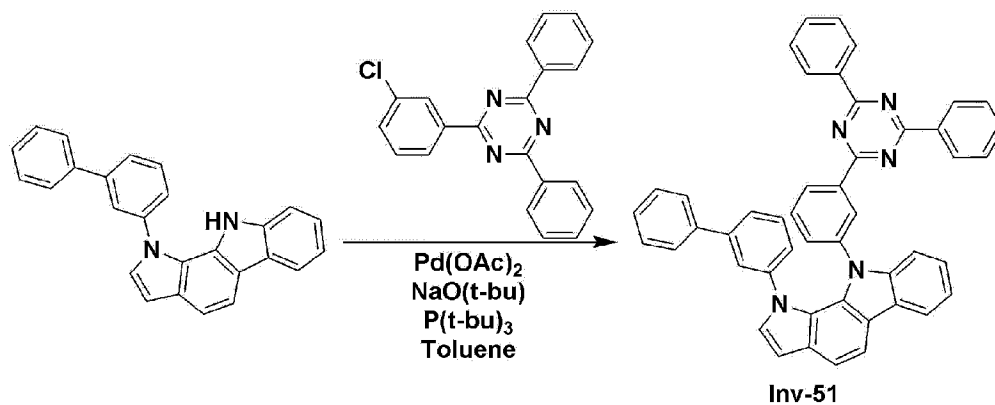


[802] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-13과 2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-(3-chlorophenyl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-50 (5.00 g, 73 %)를 얻었다.

[803] GC-Mass (이론치: 817.32 g/mol, 측정치: 817 g/mol)

[804] [합성 예 51] Inv-51의 합성

[805]

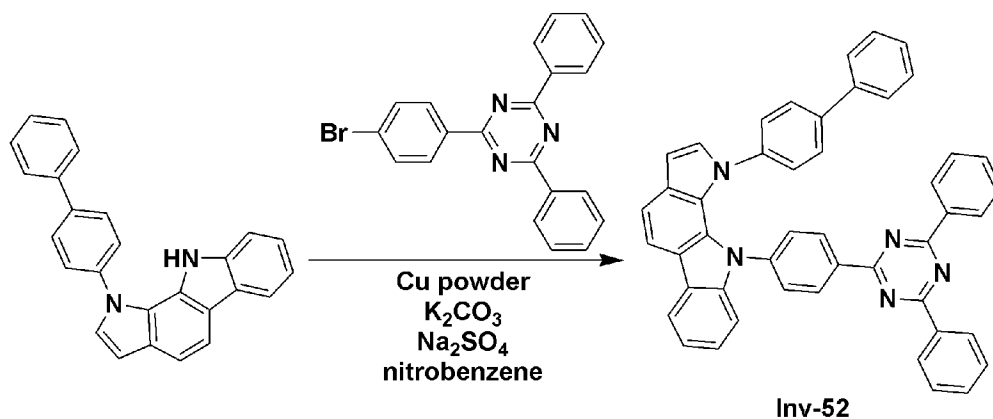


[806] IC-1 대신 IC-14를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-51 (3.85 g, 69 %)를 얻었다.

[807] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[808] [합성 예 52] Inv-52의 합성

[809]



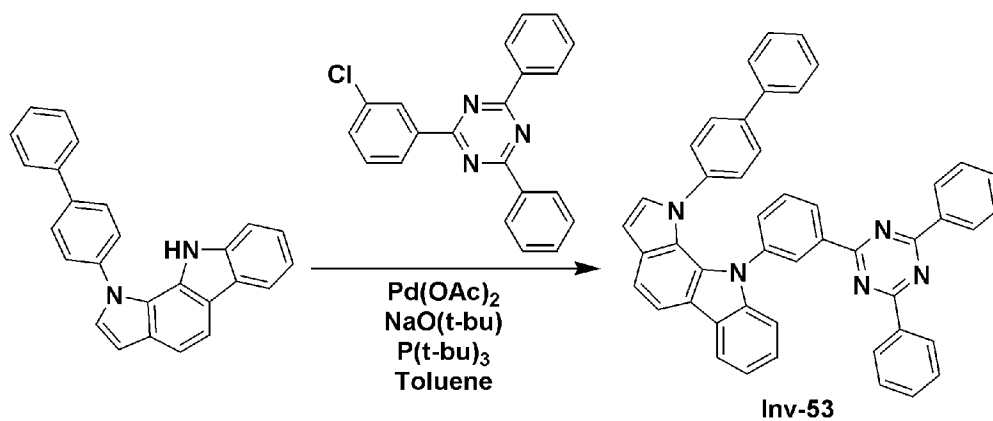
[810] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-15와

2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-52 (2.90 g, 52 %)를 얻었다.

[811] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[812] [합성 예 53] Inv-53의 합성

[813]

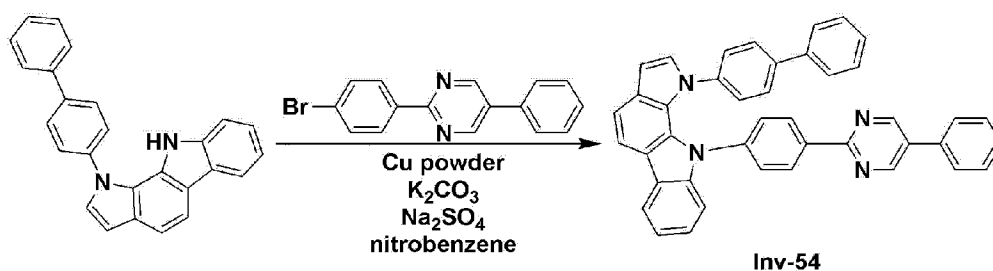


[814] IC-1 대신 IC-15를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-53 (3.85 g, 69 %)를 얻었다.

[815] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[816] [합성 예 54] Inv-54의 합성

[817]



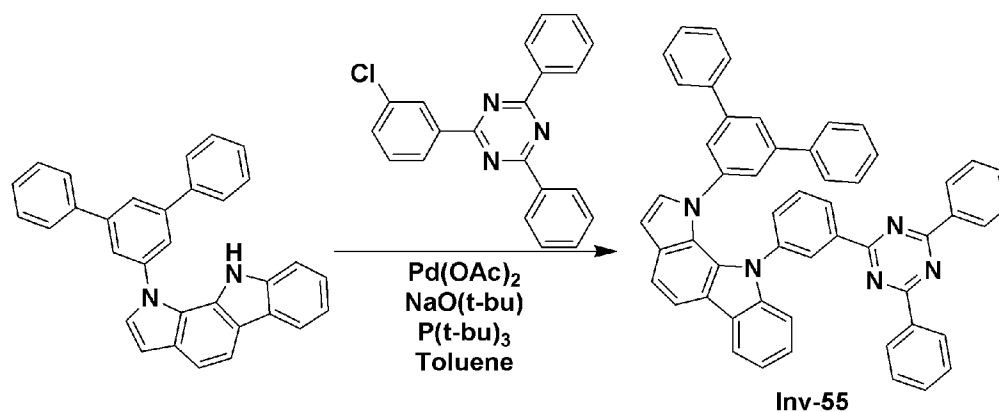
[818] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-15와 2-(4-bromophenyl)-5-phenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적

화합물인 Inv-54 (2.66 g, 54 %)를 얻었다.

[819] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[820] [합성 예 55] Inv-55의 합성

[821]

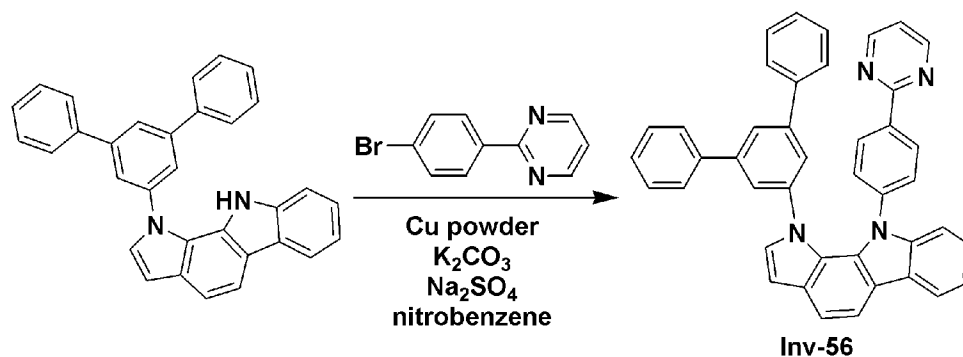


[822] IC-1 대신 IC-16을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-55 (3.48 g, 68 %)를 얻었다.

[823] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[824] [합성 예 56] Inv-56의 합성

[825]

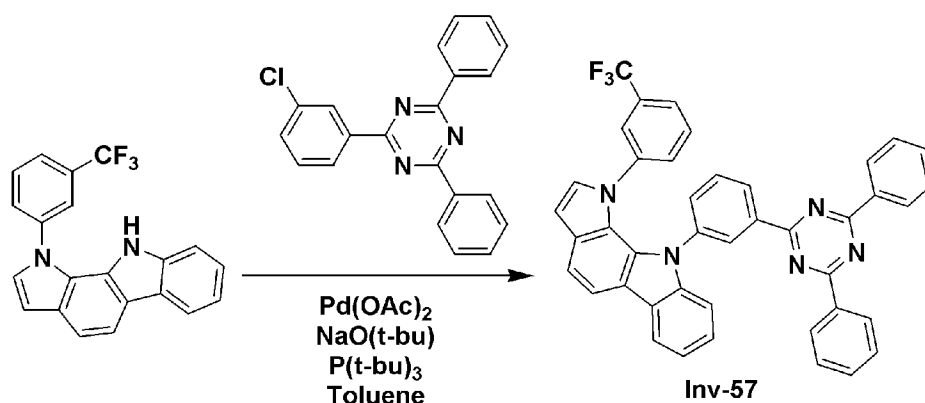


[826] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-16과 2-(4-bromophenyl)pyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-56 (1.99 g, 49 %)를 얻었다.

[827] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[828] [합성 예 57] Inv-57의 합성

[829]

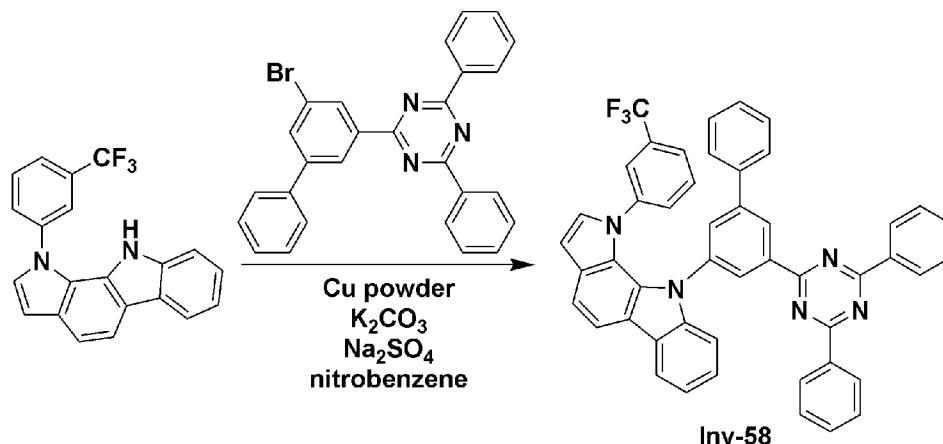


[830] IC-1 대신 IC-17을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-57 (4.00 g, 71 %)를 얻었다.

[831] GC-Mass (이론치: 657.21 g/mol, 측정치: 657 g/mol)

[832] [합성 예 58] Inv-58의 합성

[833]



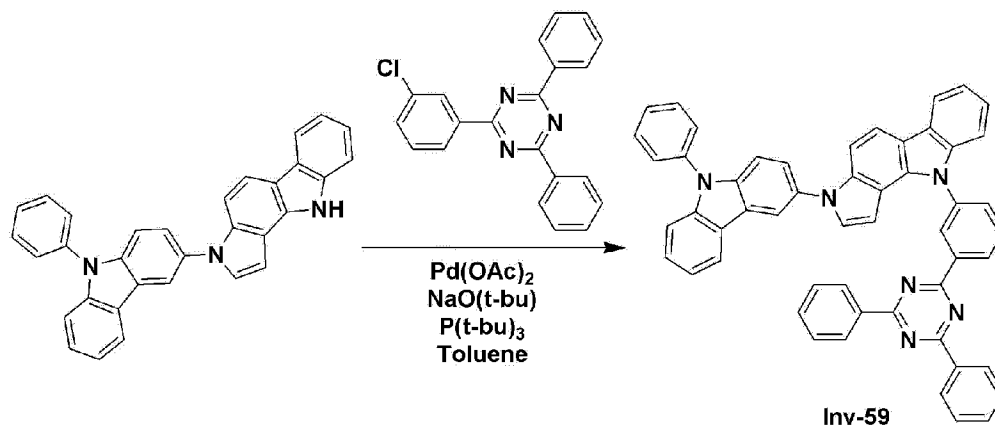
[834] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-17과

2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-58 (2.89 g, 46 %)를 얻었다.

[835] GC-Mass (이론치: 733.25 g/mol, 측정치: 733 g/mol)

[836] [합성 예 59] Inv-59의 합성

[837]

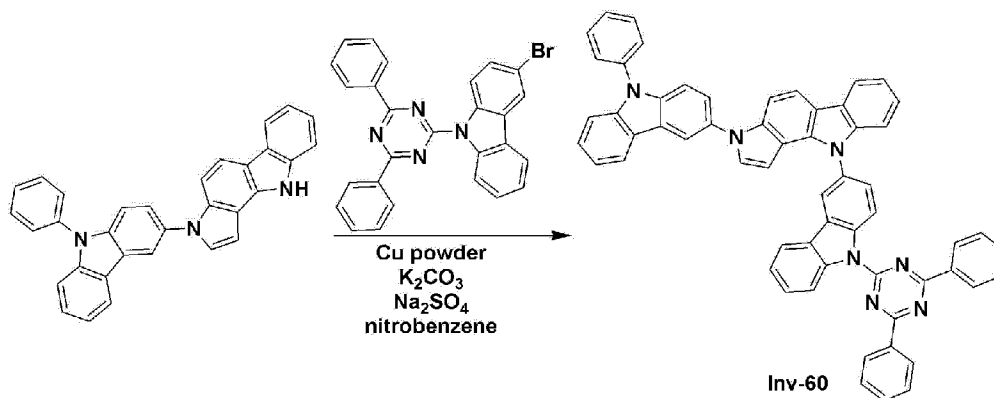


[838] IC-1 대신 IC-18을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-59 (3.49 g, 69 %)를 얻었다.

[839] GC-Mass (이론치: 754.28 g/mol, 측정치: 754 g/mol)

[840] [합성 예 60] Inv-60의 합성

[841]

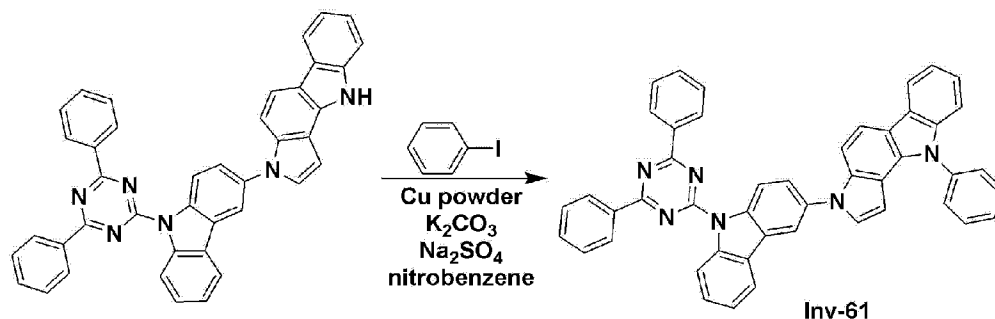


[842] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-18과 3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-60 (2.49 g, 44 %)를 얻었다.

[843] GC-Mass (이론치: 843.31 g/mol, 측정치: 843 g/mol)

[844] [합성 예 61] Inv-61의 합성

[845]

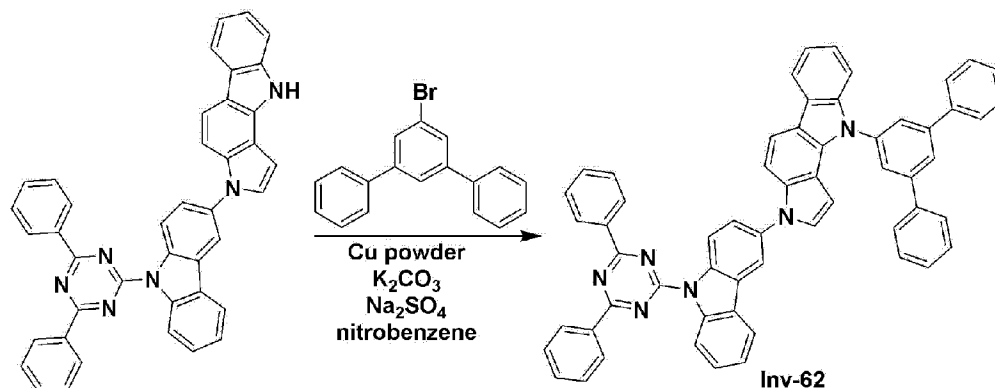


[846] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-19와 iodobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-61 (1.62 g, 48 %)를 얻었다.

[847] GC-Mass (이론치: 678.25 g/mol, 측정치: 678 g/mol)

[848] [합성 예 62] Inv-62의 합성

[849]



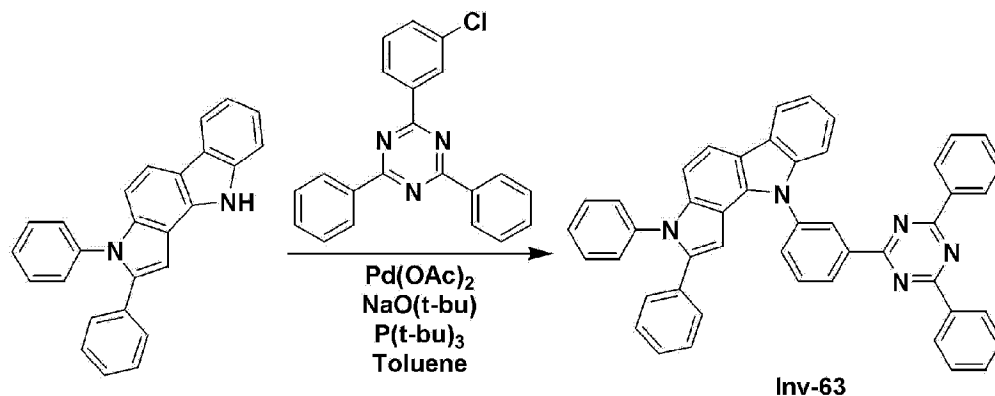
[850] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-19와 1-bromo-3,5-diphenylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-62

(1.94 g, 47 %)를 얻었다.

[851] GC-Mass (이론치: 830.32 g/mol, 측정치: 830 g/mol)

[852] [합성 예 63] Inv-63의 합성

[853]

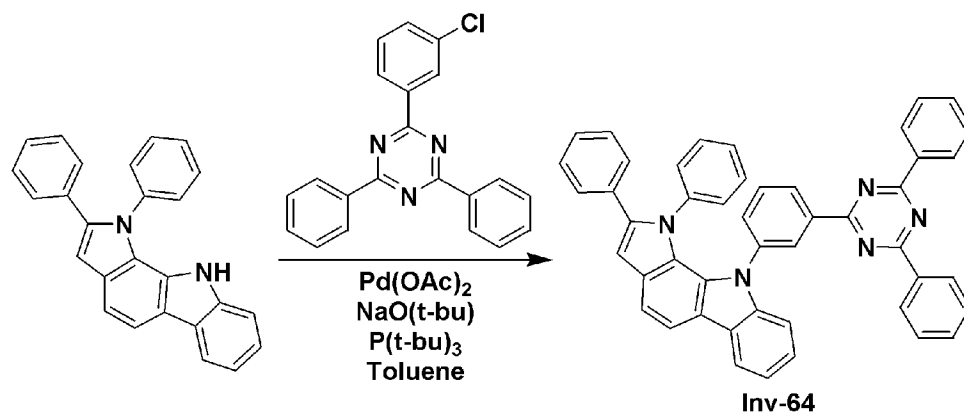


[854] IC-1 대신 IC-20을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-63 (3.79 g, 68 %)를 얻었다.

[855] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[856] [합성 예 64] Inv-64의 합성

[857]

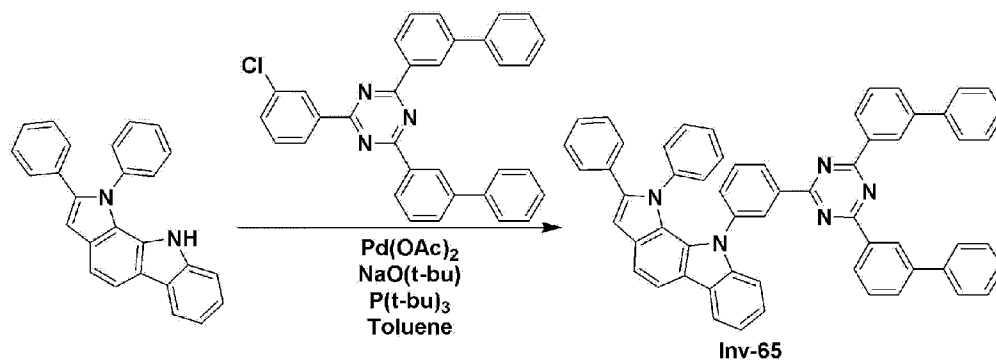


[858] IC-1 대신 IC-21을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-64 (4.18 g, 75 %)를 얻었다.

[859] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665.26 g/mol)

[860] [합성 예 65] Inv-65의 합성

[861]



[862] IC-1과 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 IC-21과

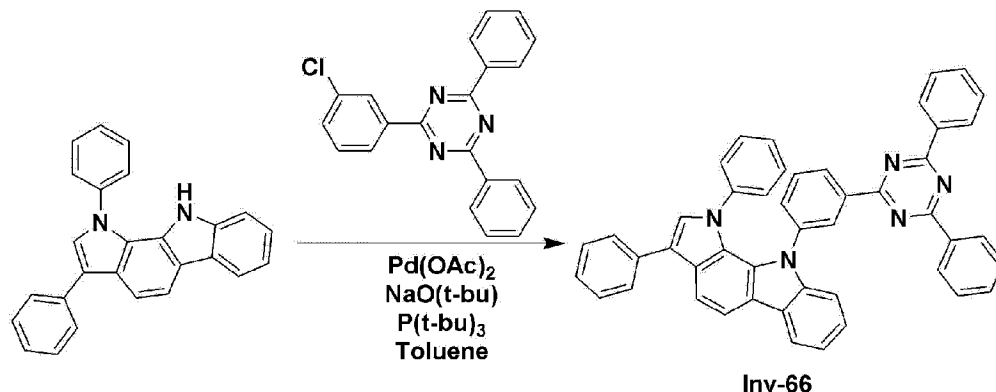
2,4-di(biphenyl-3-yl)-6-(3-chlorophenyl)-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는

상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-65 (5.07 g, 74 %)를 얻었다.

[863] GC-Mass (이론치: 817.32 g/mol, 측정치: 817 g/mol)

[864] [합성예 66] Inv-66의 합성

[865]

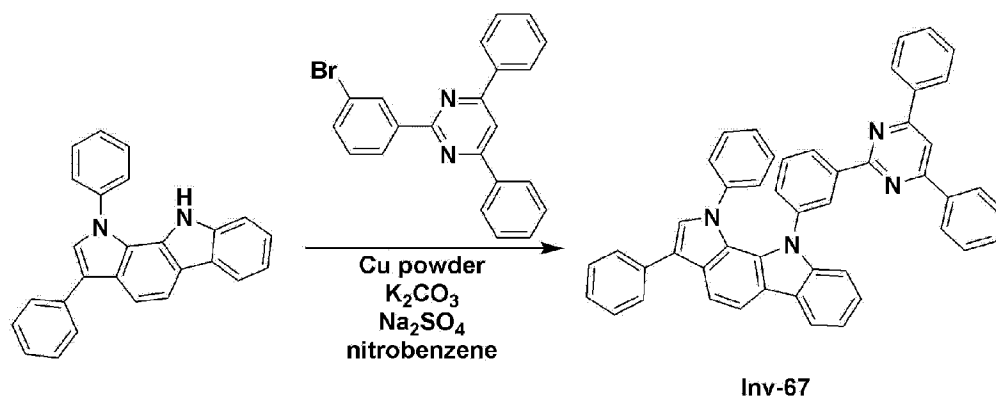


[866] IC-1 대신 IC-22를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-66 (4.01 g, 72 %)를 얻었다.

[867] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[868] [합성예 67] Inv-67의 합성

[869]

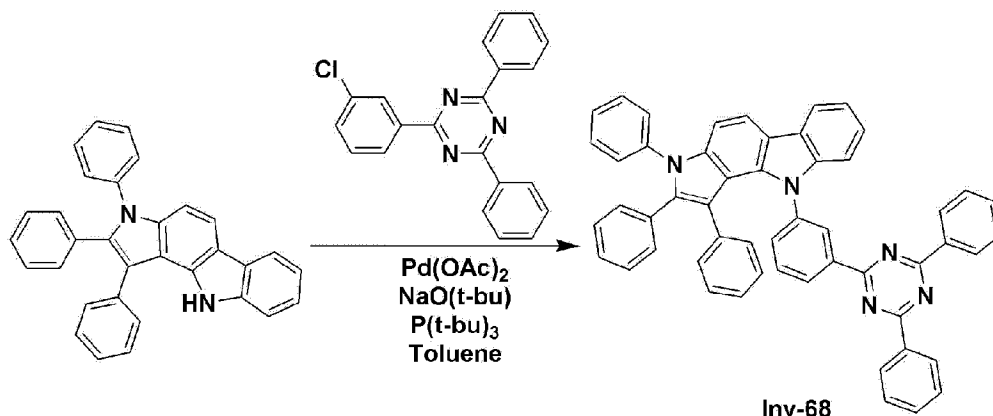


[870] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-22과 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-67 (2.84 g, 51 %)를 얻었다.

[871] GC-Mass (이론치: 664.26 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[872] [합성예 68] Inv-68의 합성

[873]

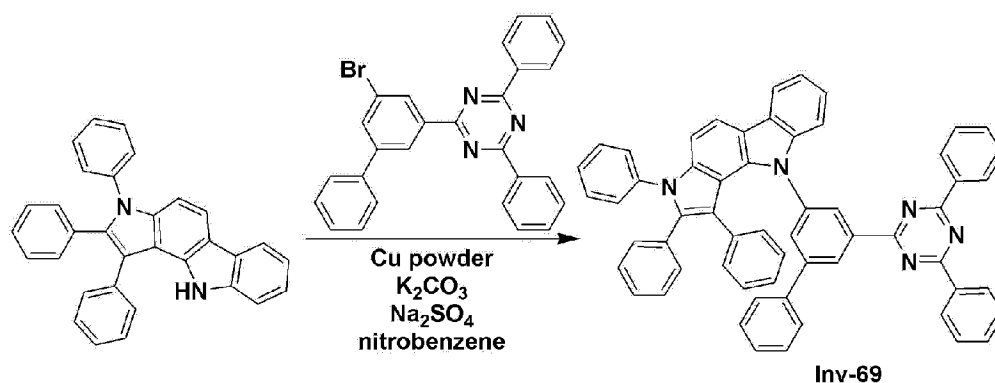


[874] IC-1 대신 IC-23을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-68 (3.74 g, 73 %)를 얻었다.

[875] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[876] [합성예 69] Inv-69의 합성

[877]

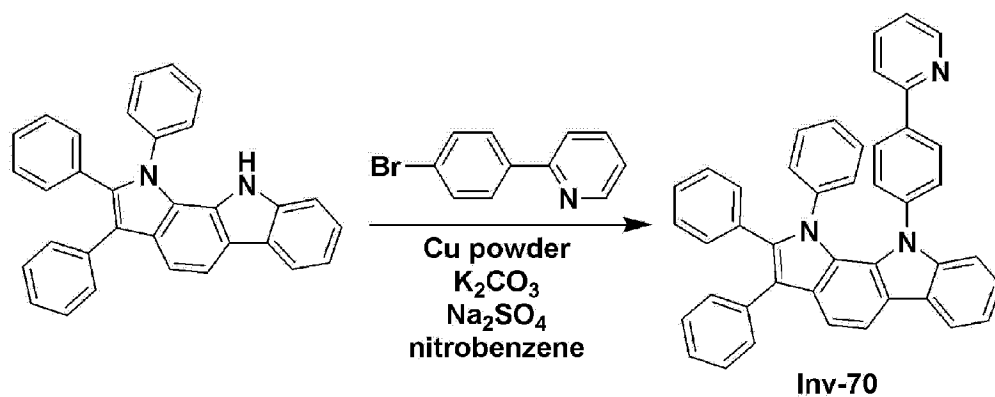


[878] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-23과 2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-69 (2.71 g, 48 %)를 얻었다.

[879] GC-Mass (이론치: 817.32 g/mol, 측정치: 817 g/mol)

[880] [합성예 70] Inv-70의 합성

[881]



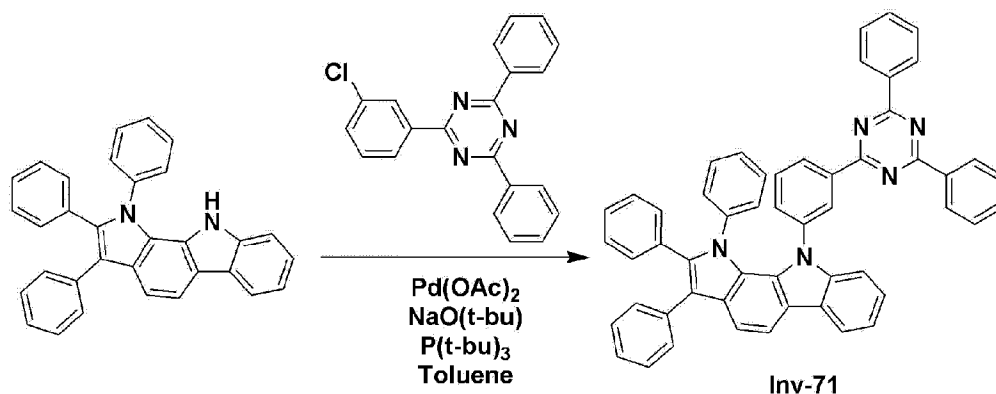
[882] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-24와 2-(4-bromophenyl)pyridine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-70

(2.07 g, 51 %)를 얻었다.

[883] GC-Mass (이론치: 587.24 g/mol, 측정치: 587 g/mol)

[884] [합성 예 71] Inv-71의 합성

[885]

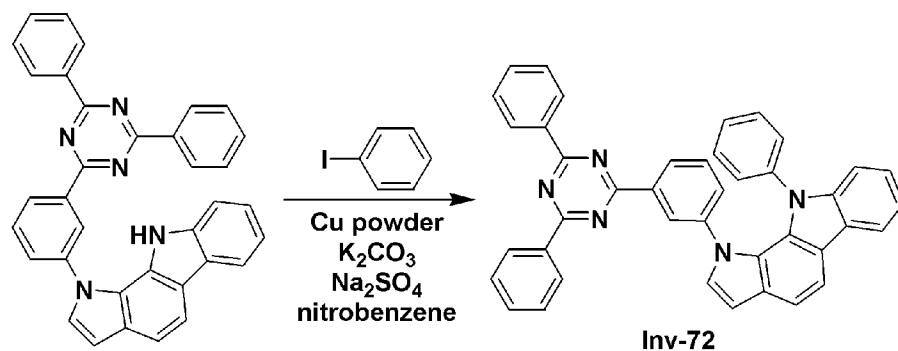


[886] IC-1 대신 IC-24를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-71 (4.00 g, 78 %)를 얻었다.

[887] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[888] [합성 예 72] Inv-72의 합성

[889]

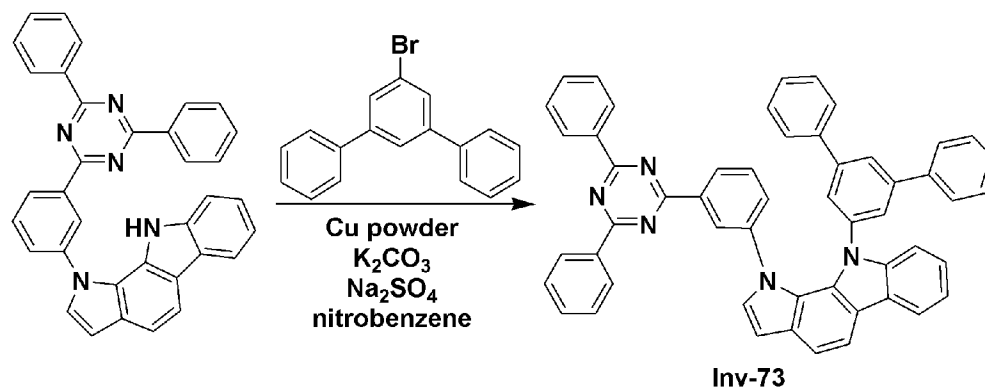


[890] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-25와 iodobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-72 (1.83 g, 53 %)를 얻었다.

[891] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[892] [합성 예 73] Inv-73의 합성

[893]



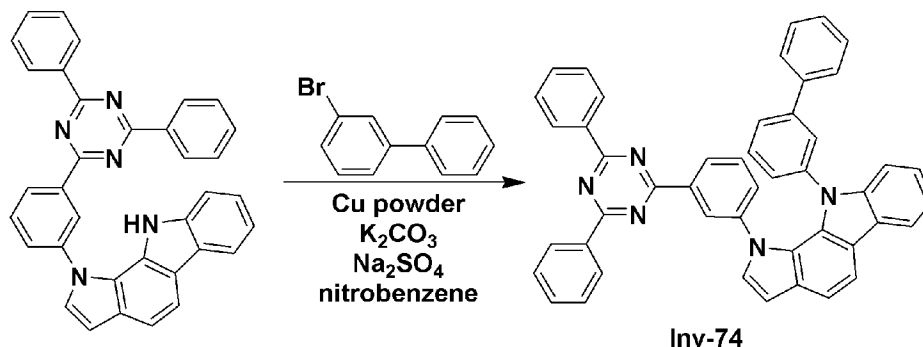
[894] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-25와 1-bromo-3,5-diphenylbenzene을 사용하는

것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-73 (2.25 g, 52 %)를 얻었다.

[895] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[896] [합성 예 74] Inv-74의 합성

[897]



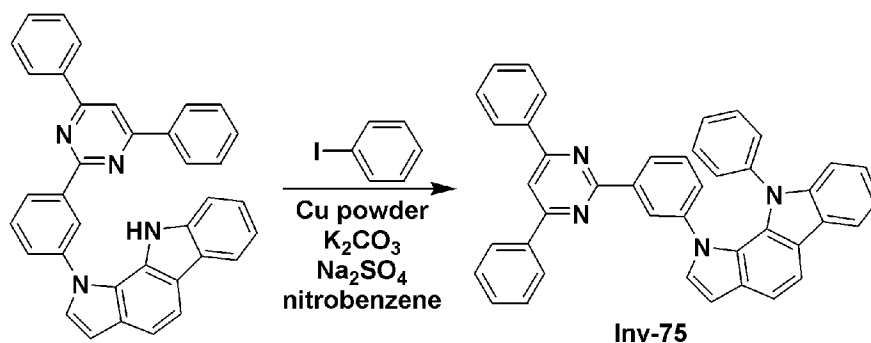
[898] IC-1 대신 IC-25를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-74 (1.91 g, 49 %)를 얻었다.

[899] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[900]

[901] [합성 예 75] Inv-75의 합성

[902]

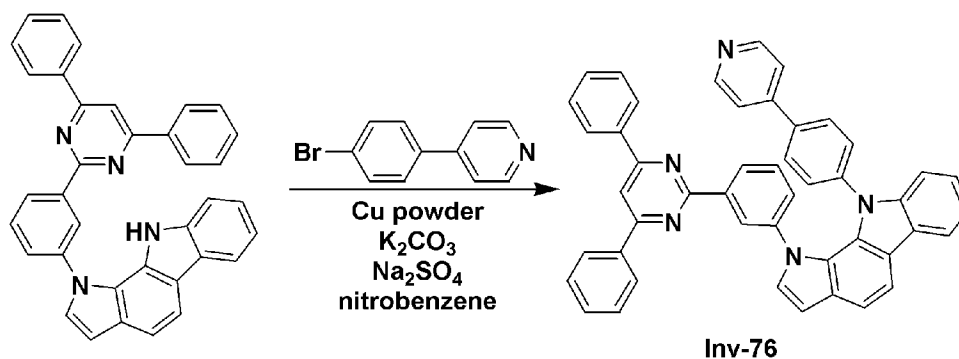


[903] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-26과 iodobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-75 (1.55 g, 45 %)를 얻었다.

[904] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[905] [합성 예 76] Inv-76의 합성

[906]



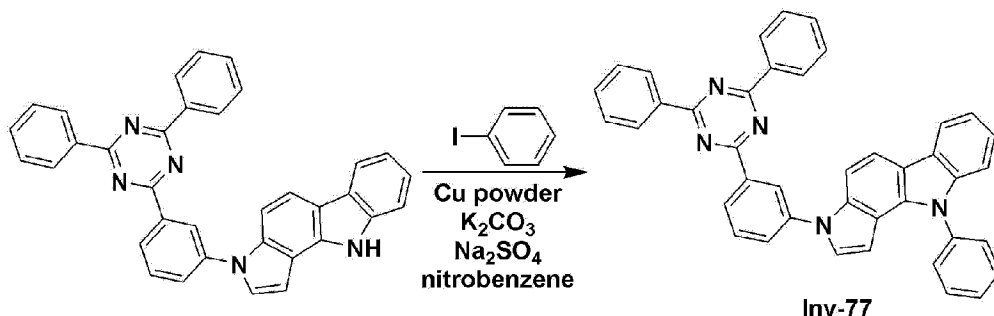
[907] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-26과 4-(4-bromophenyl)pyridine을 사용하는

것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-76 (1.83 g, 47 %)를 얻었다.

[908] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[909] [합성 예 77] Inv-77의 합성

[910]

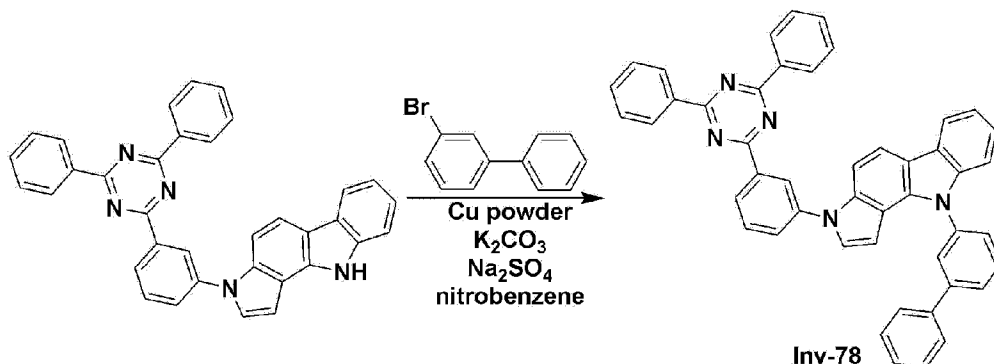


[911] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-27과 iodobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-77 (1.48 g, 43 %)를 얻었다.

[912] GC-Mass (이론치: 589.23 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[913] [합성 예 78] Inv-78의 합성

[914]

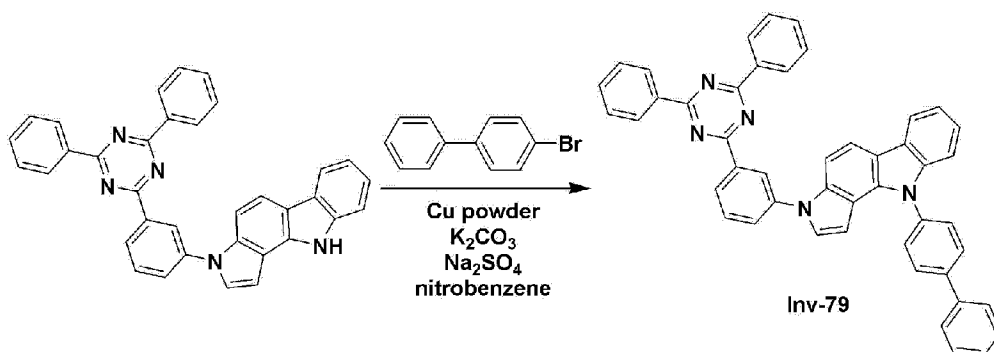


[915] IC-1 대신 IC-27을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-78 (1.87 g, 48 %)를 얻었다.

[916] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[917] [합성 예 79] Inv-79의 합성

[918]



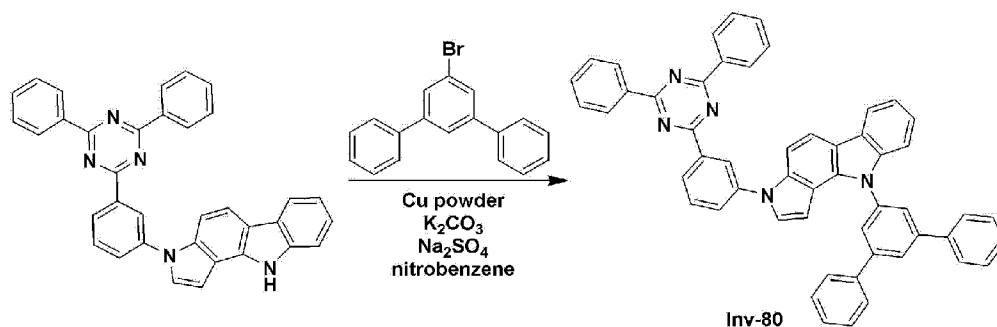
[919] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-27과 4-bromobiphenyl을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-79 (1.75

g, 45 %)를 얻었다.

[920] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665.26 g/mol)

[921] [합성 예 80] Inv-80의 합성

[922]

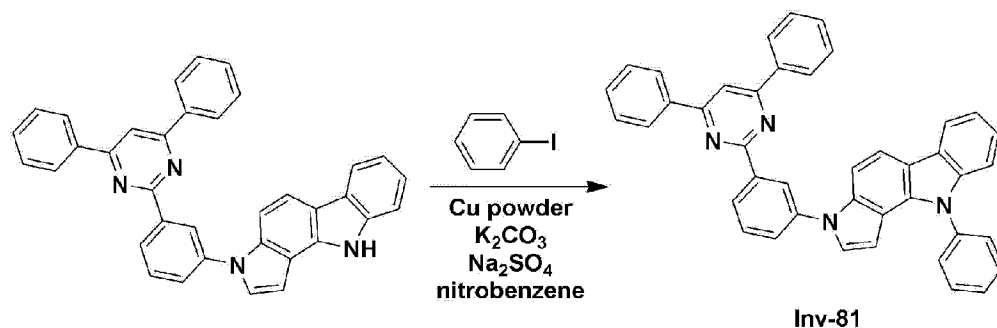


[923] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-27과 1-bromo-3,5-diphenylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-80 (2.12 g, 49 %)를 얻었다.

[924] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[925] [합성 예 81] Inv-81의 합성

[926]

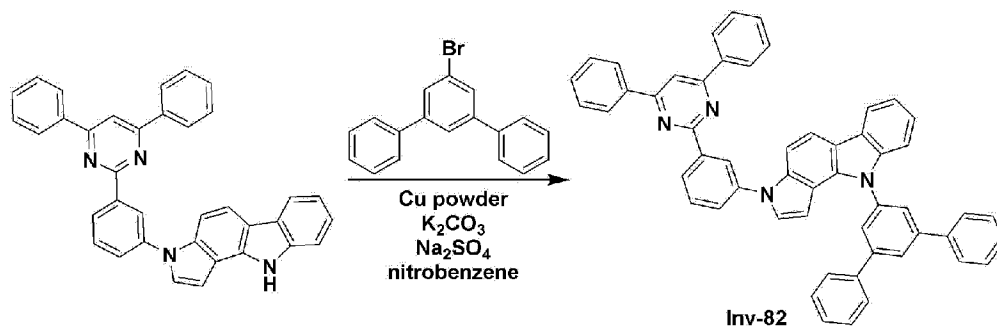


[927] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-28과 iodobenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-81 (1.79 g, 52 %)를 얻었다.

[928] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[929] [합성 예 82] Inv-82의 합성

[930]

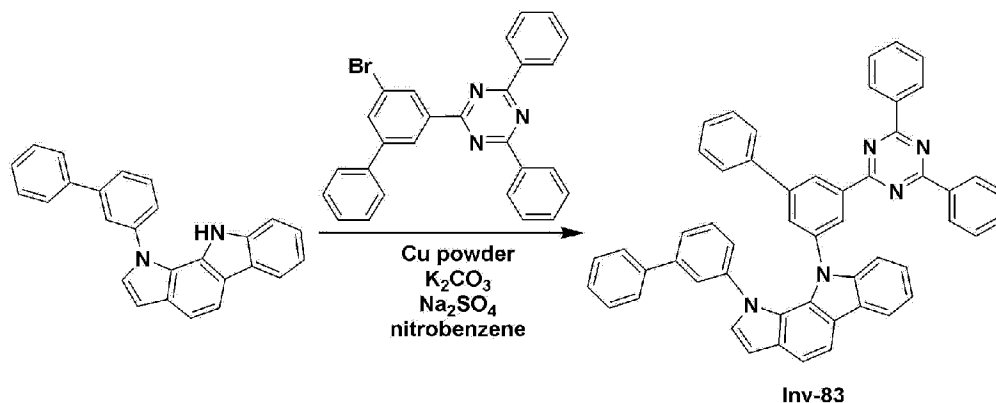


[931] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-28과 1-bromo-3,5-diphenylbenzene을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-82 (1.99 g, 46 %)를 얻었다.

[932] GC-Mass (이론치: 740.29 g/mol, 측정치: 740 g/mol)

[933] [합성 예 83] Inv-83의 합성

[934]



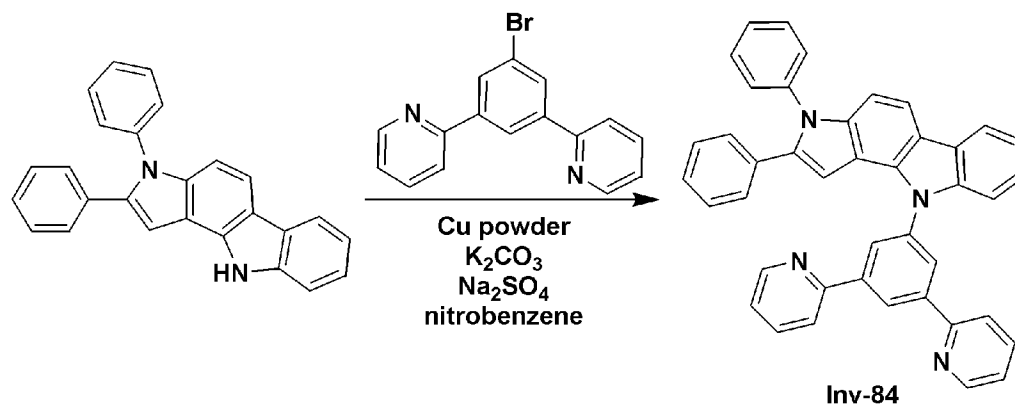
[935] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-14와

2-(5-bromobiphenyl-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-83 (3.54 g, 57 %)를 얻었다.

[936] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[937] [합성 예 84] Inv-84의 합성

[938]

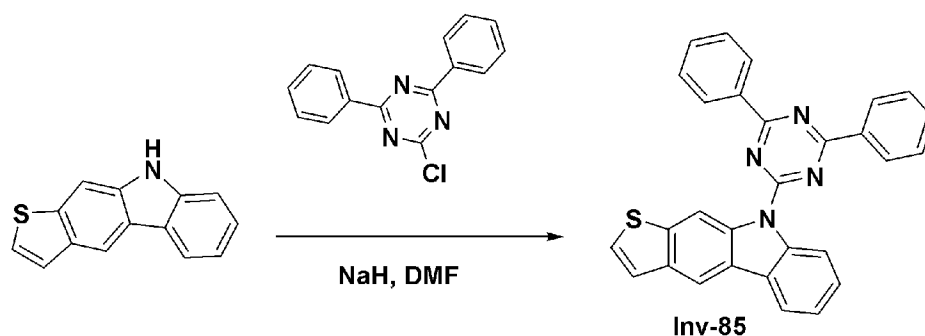


[939] IC-1과 3-bromobiphenyl 대신 IC-20과 2,2'-(5-bromo-1,3-phenylene)dipyridine을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-84 (2.61 g, 53 %)를 얻었다.

[940] GC-Mass (이론치: 588.23 g/mol, 측정치: 588 g/mol)

[941] [합성 예 85] Inv-85의 합성

[942]

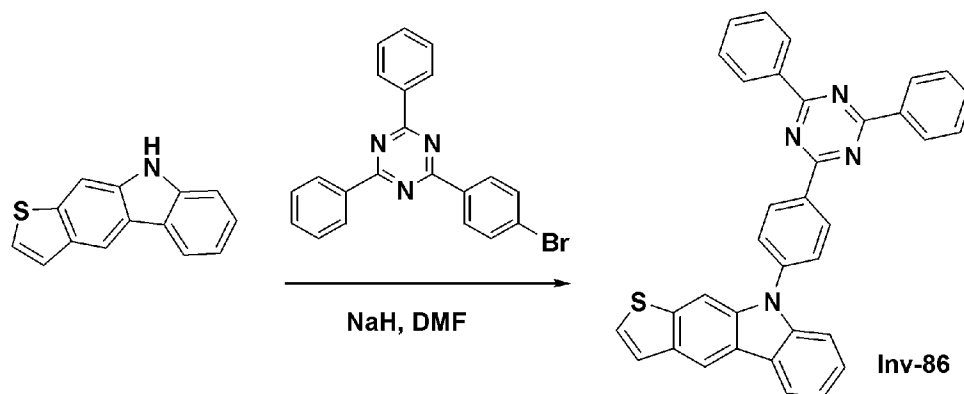


[943] 질소 기류 하에서 IC-29a (2.23 g, 10.0 mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.21 g, 12.0 mmol), NaH (0.29 g, 12.0 mmol) 및 DMF(30 ml)를 혼합하고 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 filter한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 Inv-85 (3.77 g, yield : 83%)를 얻었다.

[944] GC-Mass (이론치: 454.55 g/mol, 측정치: 454 g/mol)

[945] [합성 예 86] Inv-86의 합성

[946]

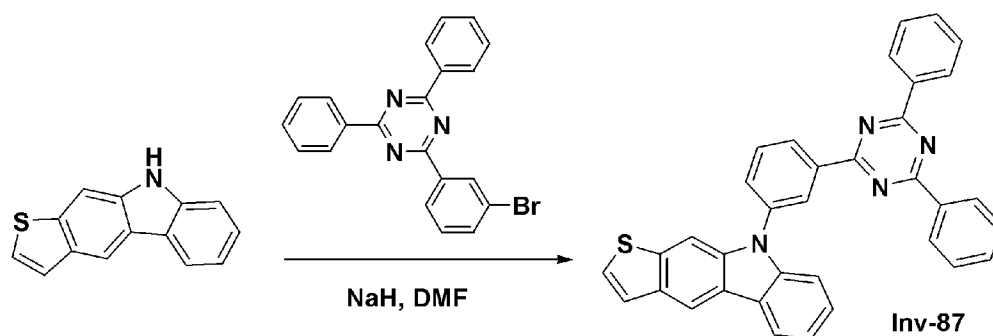


[947] 질소 기류 하에서 IC-29a (2.23 g, 10.0 mmol), 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.66 g, 12.0 mmol), NaH (0.29 g, 12.0 mmol) 및 DMF(30 ml)를 혼합하고 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 filter한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 Inv-86 (3.45 g, yield : 65%)을 얻었다.

[948] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[949] [합성 예 87] Inv-87의 합성

[950]

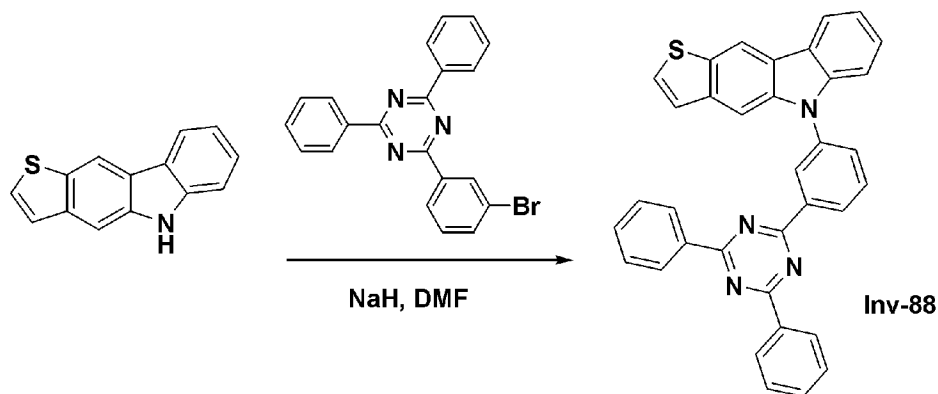


[951] 질소 기류 하에서 IC-29a (2.23 g, 10.0 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.66 g, 12.0 mmol), NaH (0.29 g, 12.0 mmol) 및 DMF(30 ml)를 혼합하고 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 filter한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 Inv-87 (3.77 g, yield : 71%)을 얻었다.

[952] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[953] [합성 예 88] Inv-88의 합성

[954]

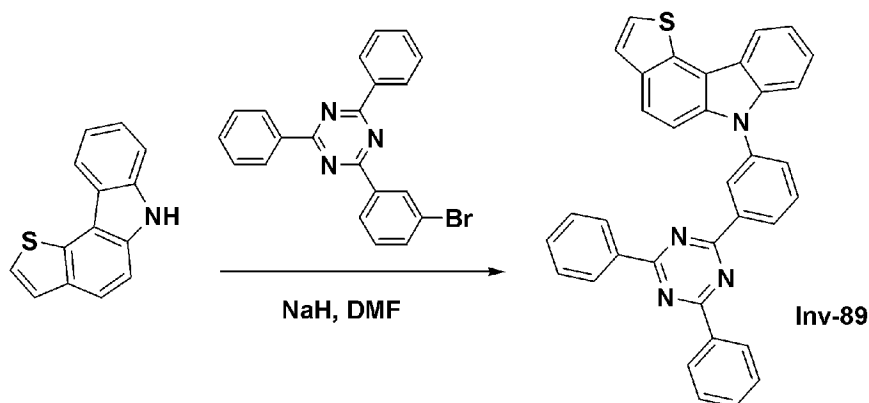


[955] IC-29a 대신 IC-29b (2.23 g, 10.0 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 87과 동일한 과정을 수행하여 Inv-88 (3.45 g, yield : 65%)을 얻었다.

[956] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[957] [합성예 89] Inv-89의 합성

[958]

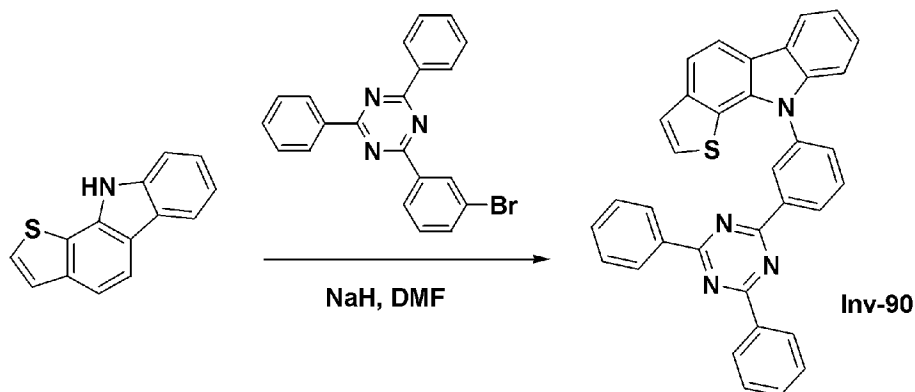


[959] IC-29a 대신 IC-30 (2.23 g, 10.0 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 87과 동일한 과정을 수행하여 Inv-89 (3.33 g, yield : 63%)을 얻었다.

[960] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[961] [합성예 90] Inv-90의 합성

[962]

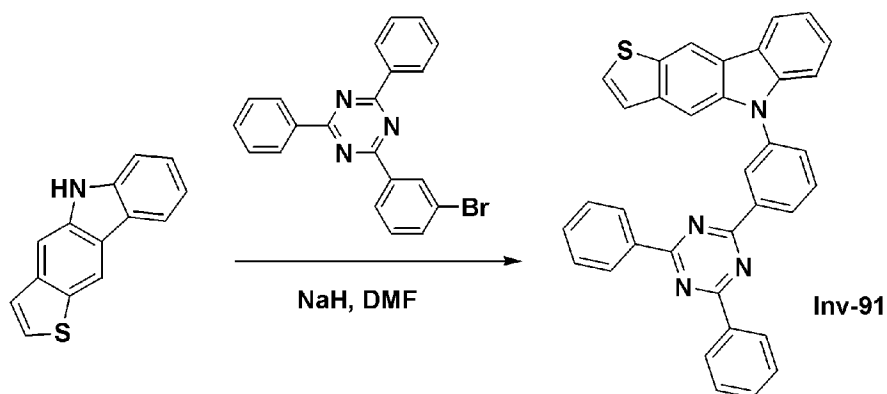


[963] IC-29a 대신 IC-31a (2.23 g, 10.0 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 87과 동일한 과정을 수행하여 Inv-90 (3.18 g, yield : 60%)을 얻었다.

[964] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[965] [합성 예 91] Inv-91의 합성

[966]

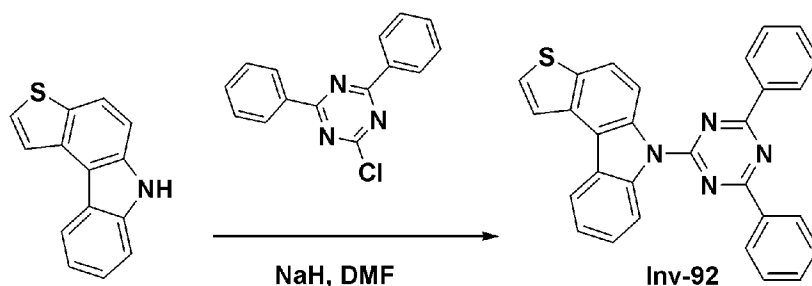


[967] IC-29a 대신 IC-31b (2.23 g, 10.0 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 87과 동일한 과정을 수행하여 Inv-91 (3.28 g, yield : 62%)을 얻었다.

[968] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[969] [합성 예 92] Inv-92의 합성

[970]

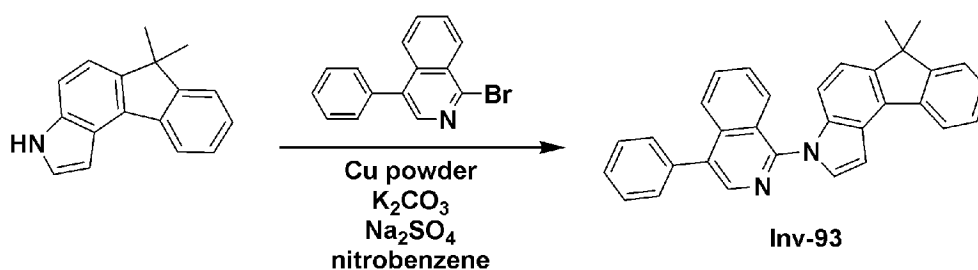


[971] IC-29a 대신 IC-32 (2.23 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 85와 동일한 과정을 수행하여 Inv-92 (3.50 g, yield : 77%)을 얻었다.

[972] GC-Mass (이론치: 454.55 g/mol, 측정치: 454 g/mol)

[973] [합성 예 93] Inv-93의 합성

[974]

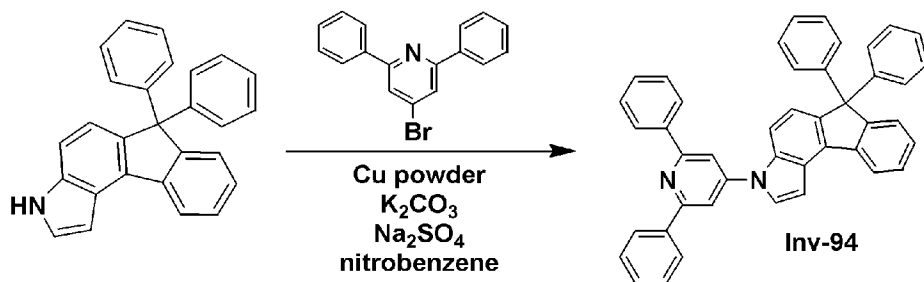


[975] IC-1와 3-bromobiphenyl 대신 IC-33과 1-bromo-4-phenylisoquinoline을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-93(3.26 g, 수율 58%)를 얻었다.

[976] GC-Mass (이론치: 436.19 g/mol, 측정치: 436 g/mol)

[977] [합성 예 94] Inv-94의 합성

[978]

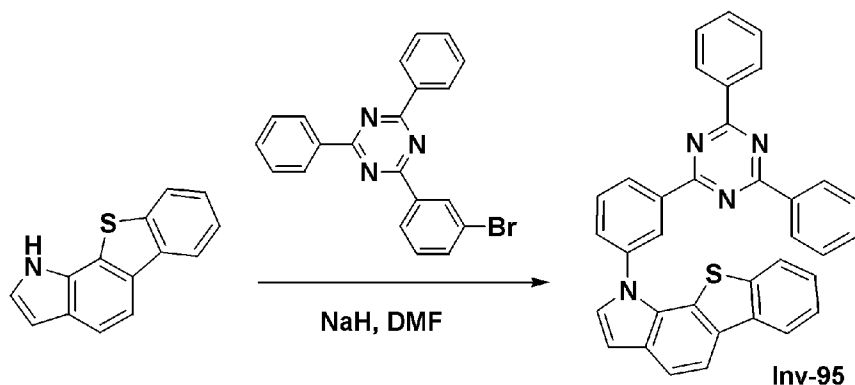


[979] IC-1와 3-bromobiphenyl 대신 IC-34와 4-bromo-2,6-diphenylpyridine을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-94(3.11 g, 수율 63%)를 얻었다.

[980] GC-Mass (이론치: 586.24 g/mol, 측정치: 586 g/mol)

[981] [합성 예 95] Inv-95의 합성

[982]

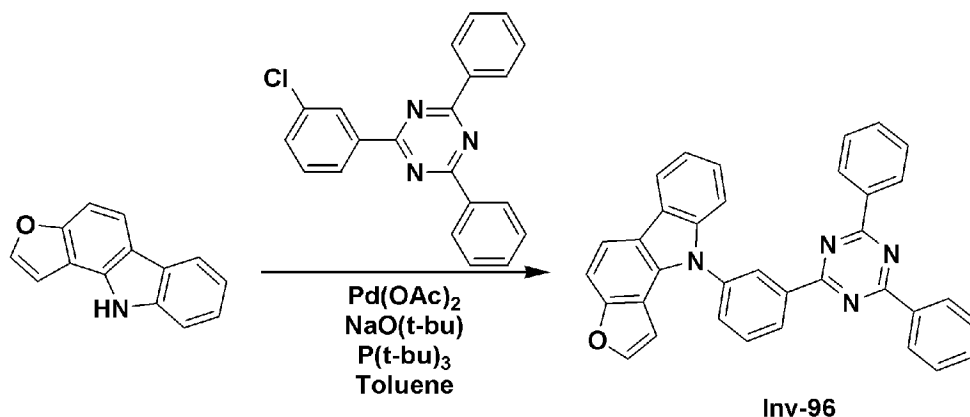


[983] IC-29a 대신 IC-35 (2.23 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 87와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-95 (3.40 g, yield : 64%)를 얻었다.

[984] GC-Mass (이론치: 530.64 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[985] [합성 예 96] Inv-96의 합성

[986]



[987] 질소 기류 하에서 IC-36 (3 g, 14.48 mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (5.97 g, 17.37 mmol), Pd(OAc)₂ (0.16 g, 5 mol%), NaO(t-bu) (2.78 g, 28.95 mmol), P(t-bu)₃ (0.29 g, 1.45 mmol) 및 Toluene (100 ml)을 혼합하고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다.

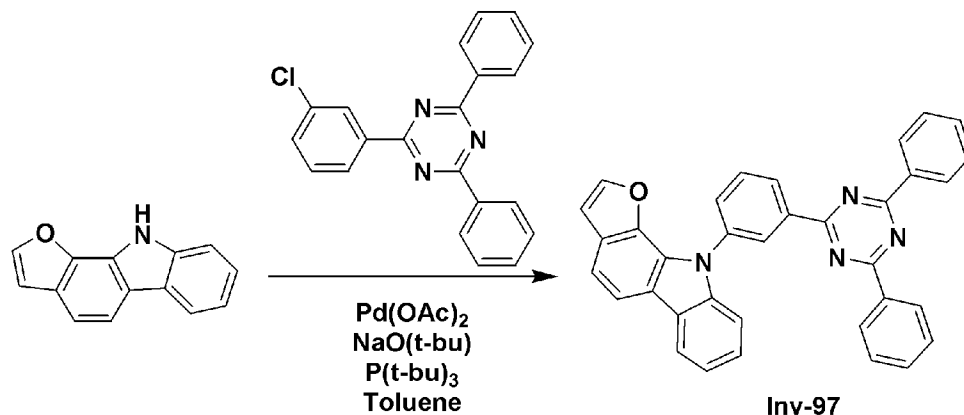
[988] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고,

컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 2:1 (v/v))로 정제하여 Inv-96 (5.59 g, 수율 75 %)을 얻었다.

[989] GC-Mass (이론치: 514.18 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[990] [합성 예 97] Inv-97의 합성

[991]

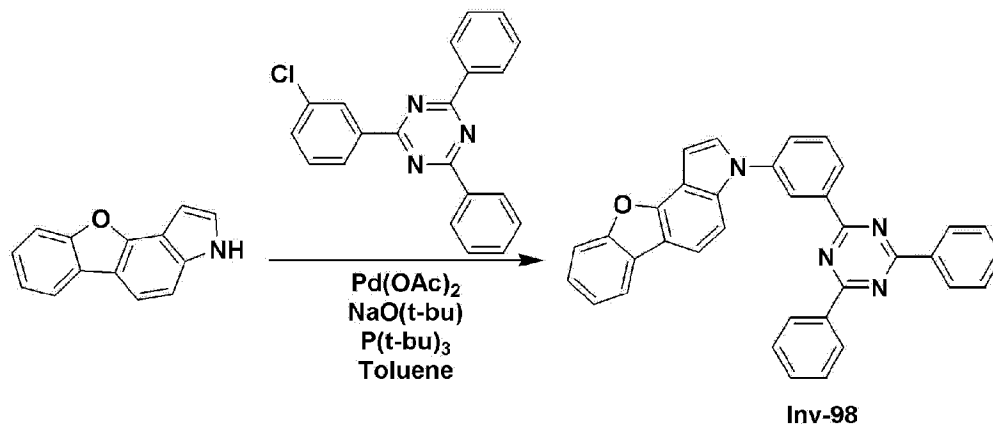


[992] IC-36 대신 IC-37을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-97 (5.29 g, 71 %)를 얻었다.

[993] GC-Mass (이론치: 514.18 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[994] [합성 예 98] Inv-98의 합성

[995]

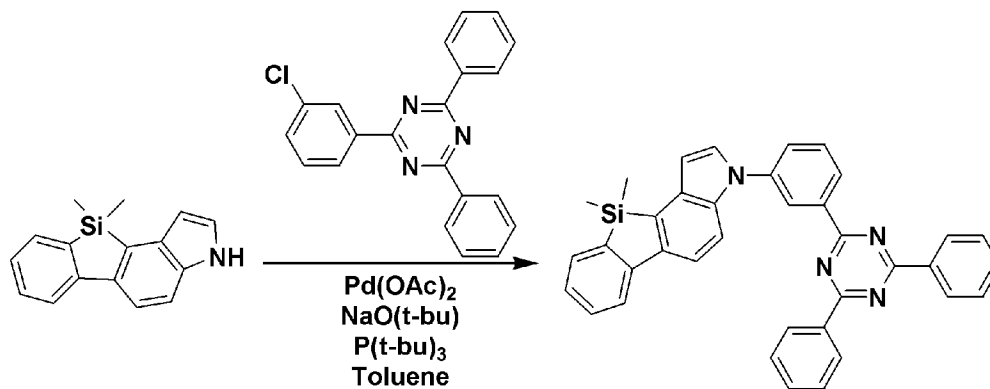


[996] IC-36 대신 IC-38을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-98(5.44 g, 73 %)를 얻었다.

[997] GC-Mass (이론치: 514.18 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[998] [합성 예 99] Inv-99의 합성

[999]

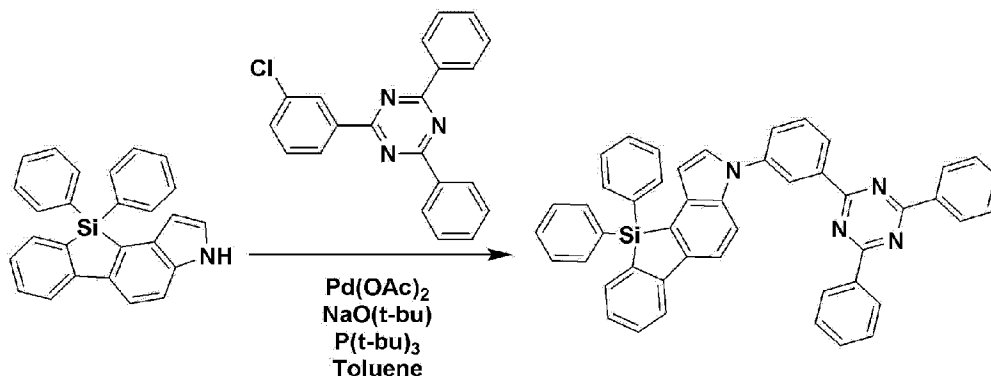
**Inv-99**

[1000] IC-36 대신 IC-39을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-99(4.62 g, 69 %)를 얻었다.

[1001] GC-Mass (이론치: 556.21 g/mol, 측정치: 556 g/mol)

[1002] [합성 예 100] Inv-100의 합성

[1003]

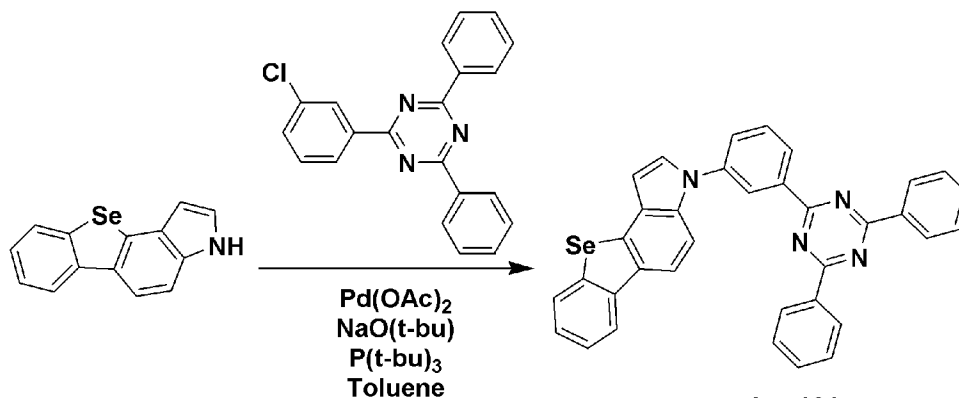
**Inv-100**

[1004] IC-36 대신 IC-40을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-100 (3.66 g, 67 %)를 얻었다.

[1005] GC-Mass (이론치: 680.24 g/mol, 측정치: 680 g/mol)

[1006] [합성 예 101] Inv-101의 합성

[1007]

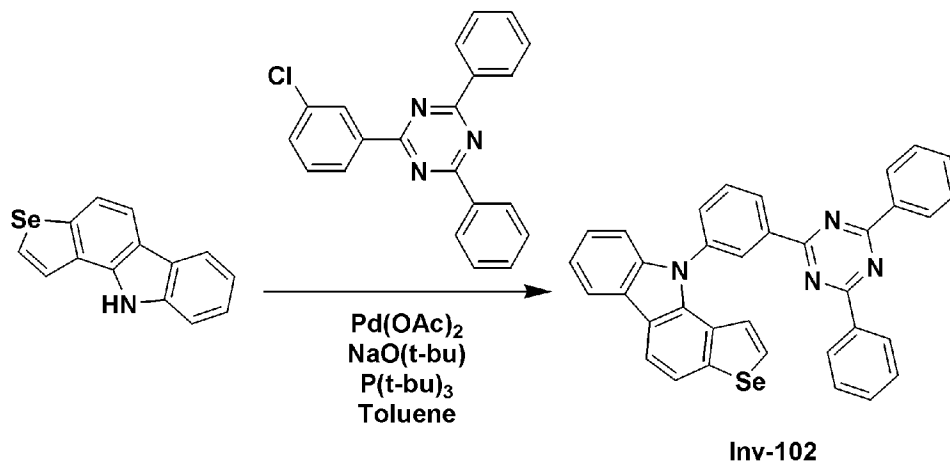
**Inv-101**

[1008] IC-36 대신 IC-41을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-101(4.87 g, 76 %)를 얻었다.

[1009] GC-Mass (이론치: 578.10 g/mol, 측정치: 578 g/mol)

[1010] [합성 예 102] Inv-102의 합성

[1011]

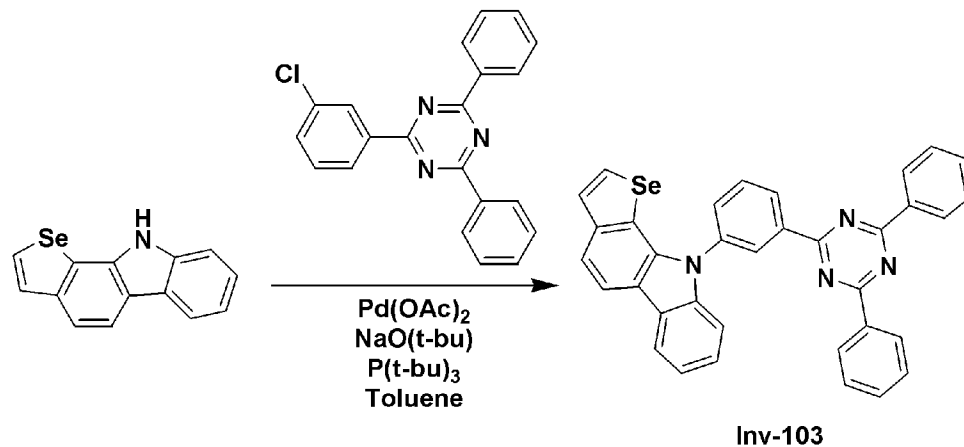


[1012] IC-36 대신 IC-42을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-102(4.75 g, 74 %)를 얻었다.

[1013] GC-Mass (이론치: 578.10 g/mol, 측정치: 578 g/mol)

[1014] [합성 예 103] Inv-103의 합성

[1015]

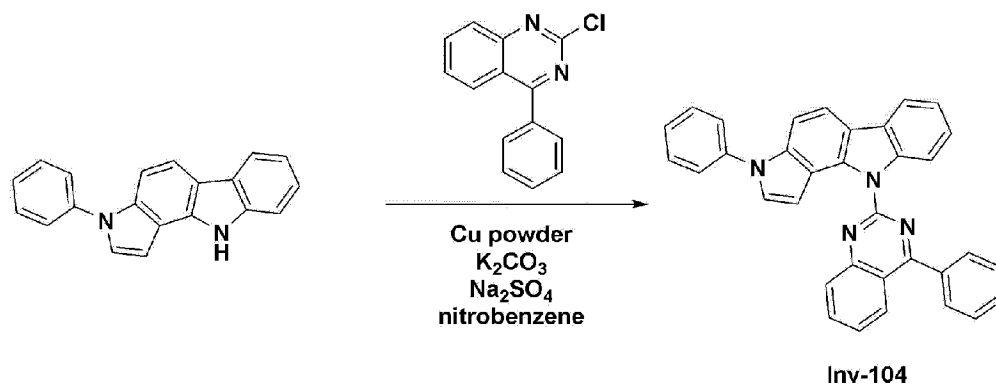


[1016] IC-36 대신 IC-43을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 96과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv-103 (4.68 g, 73 %)를 얻었다.

[1017] GC-Mass (이론치: 578.10 g/mol, 측정치: 578 g/mol)

[1018] [합성 예 104] Inv-104의 합성

[1019]



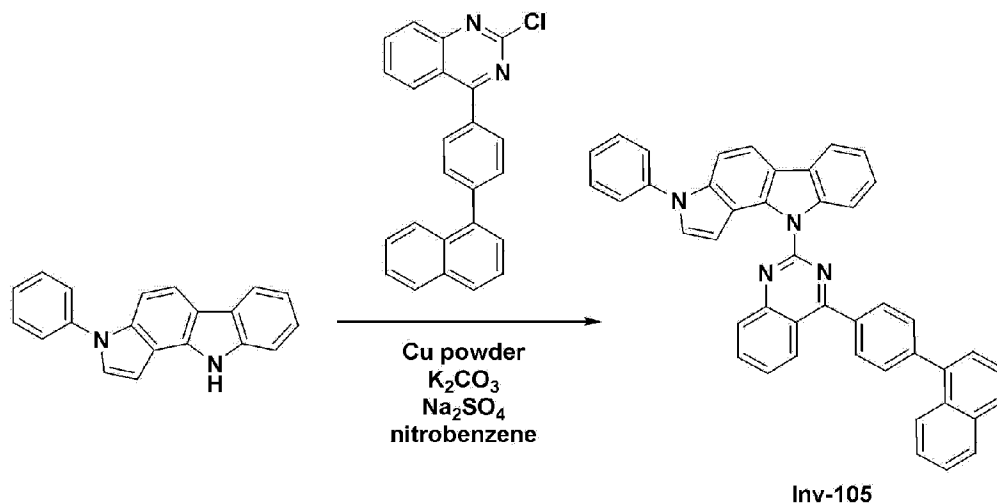
[1020] 질소 기류 하에서 IC-1 (10g, 35.44 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline (10.2 g, 42.53 mmol), Cu powder (0.22 g, 3.544 mmol), K₂CO₃ (9.8 g, 70.88mmol), Na₂SO₄ (10 g, 70.88 mmol), nitrobenzene (350ml)를 혼합하고 190°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[1021] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 Inv-104 (8.6 g, 수율 50%)을 얻었다.

[1022] GC-Mass (이론치: 486.18 g/mol, 측정치: 486 g/mol)

[1023] [합성 예 105] Inv-105의 합성

[1024]



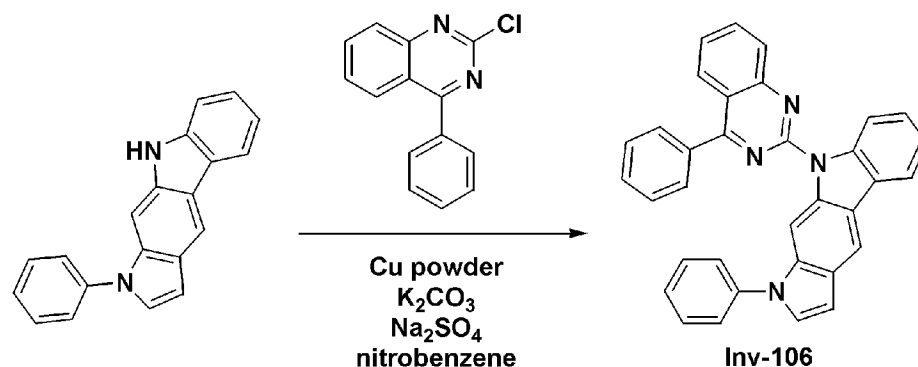
[1025] 2-chloro-4-phenylquinazoline 대신

2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline를 사용한 것을 제외하고는 상기 합성 예 104와 동일한 과정을 수행하여 Inv-105을 얻었다.

[1026] GC-Mass (이론치: 612.23 g/mol, 측정치: 612 g/mol)

[1027] [합성 예 106] Inv-106의 합성

[1028]

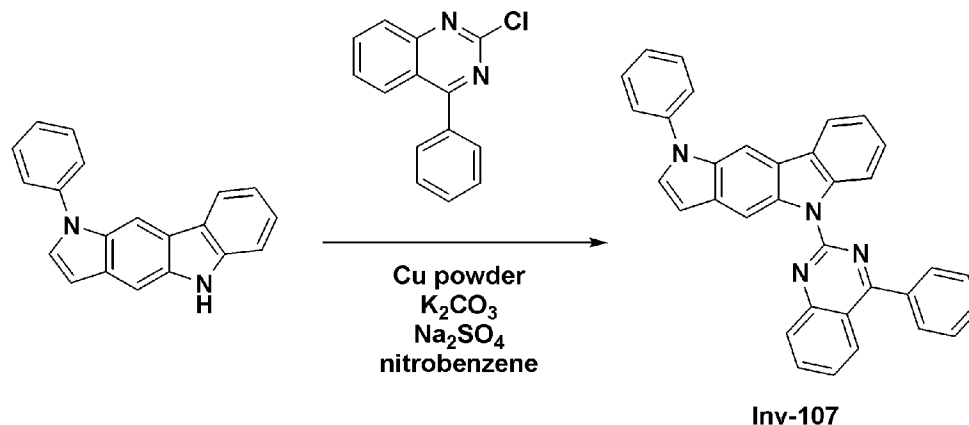


[1029] IC-1 대신 IC-2를 사용한 것을 제외하고는 상기 합성 예 104와 동일한 과정을 수행하여 Inv-106을 얻었다.

[1030] GC-Mass (이론치: 486.18 g/mol, 측정치: 486 g/mol)

[1031] [합성 예 107] Inv-107의 합성

[1032]

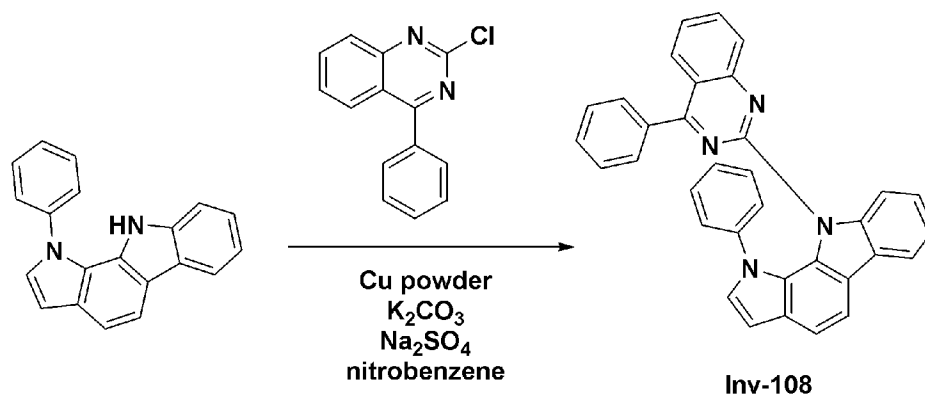


[1033] IC-1 대신 IC-4를 사용한 것을 제외하고는 상기 합성에 104와 동일한 과정을 수행하여 Inv-107를 얻었다.

[1034] GC-Mass (이론치: 486.18 g/mol, 측정치: 486 g/mol)

[1035] [합성예 108] Inv-108의 합성

[1036]



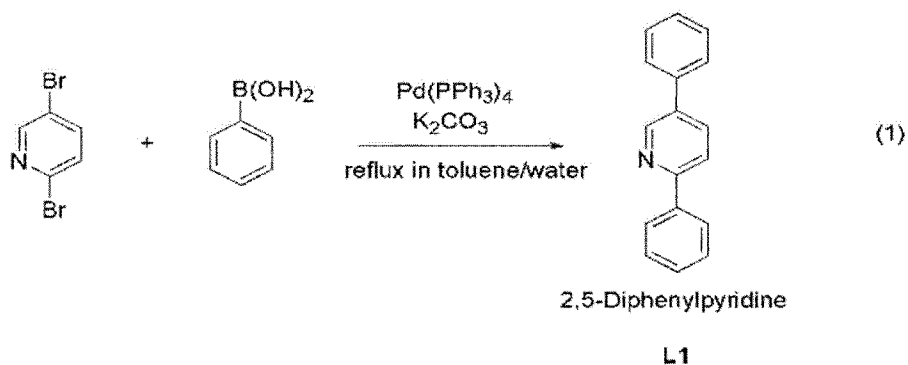
[1037] IC-1 대신 IC-3을 사용한 것을 제외하고는 상기 합성에 104와 동일한 과정을 수행하여 Inv-108을 얻었다.

[1038] GC-Mass (이론치: 486.18 g/mol, 측정치: 486 g/mol)

[1039] [합성예 109] 화합물 1의 합성

[1040] <단계 1> 2,5-Diphenylpyridine (L1)의 합성

[1041]

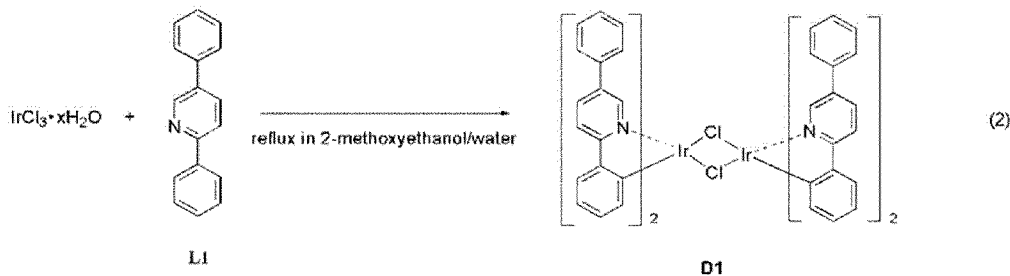


[1042] 질소 기류 하에서 23.70 g (0.1 mol)의 2,5-dibromopyridine, 30.48 g (0.25 mol)의 phenylboronic acid, 41.46 g (0.3 mol)의 무수 K₂CO₃와 800 ml/300 ml의 toluene/H₂O를 넣고 교반하였다. 40°C에서 5.78 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80°C에서

12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 2,5-Diphenylpyridine (L1) 19.20 g (yield: 83 %)을 얻었다.

[1043] <단계 2> 2,5-Diphenylpyridinato iridium dimer (D1)의 합성

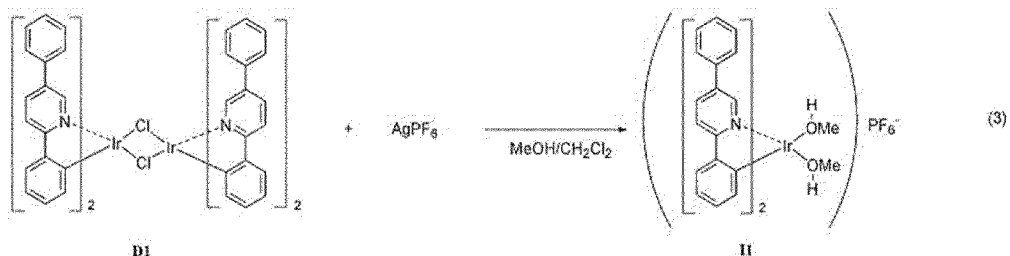
[1044]



[1045] 질소 기류 하에서 5.0 g (13.8 mmol)의 $\text{IrCl}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ 와 상기 L1(9.6 g, 41.4 mmol)을 120 ml의 2-methoxyethanol과 40 ml의 물 혼합용매에 넣어 20 시간 동안 환류시켰다. 반응혼합물을 실온까지 온도를 내린 후 생성된 침전물을 여과하고 아세톤과 에탄올 1:1 비율의 용매로 생성물을 정제하여 D1 (9.31 g, 수율 98 %)을 얻었다.

[1046] <단계 3> 용매 배위 양이온성 중간체 (II)의 합성

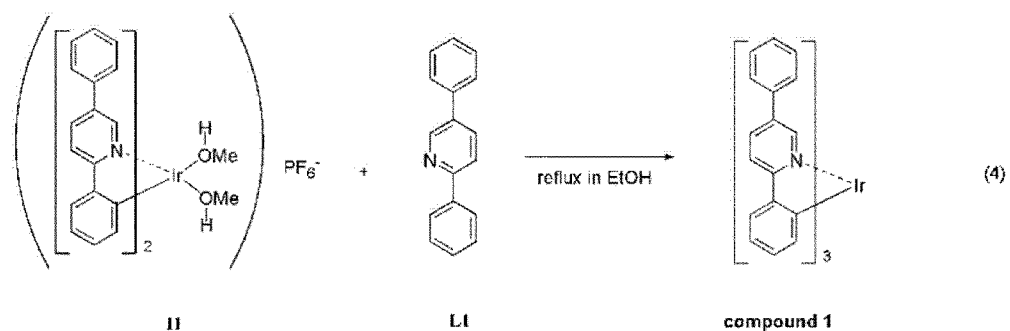
[1047]



[1048] 상기 D1(8.0 g, 5.81 mmol)과 AgPF_6 (3.67 g, 14.53 mmol)을 메틸렌클로라이드 300 ml와 메탄올 100 ml의 혼합용매에 넣어주고 질소 기류하에서 6시간동안 실온에서 교반시킨다. 반응 혼합물을 셀라이트를 통과시켜 AgCl 를 제거하고 여액을 감압 증류하여 90 % 정도의 용매를 제거한 다음 추가로 에틸에테르와 헥산을 넣어주어 목적하는 중간체 화합물 II (8.62 g, 수율 86 %)을 분리하였다.

[1049] <단계 4> 화합물 1의 합성

[1050]



[1051] 상기 중간체 화합물 II (8.62 g, 10.0 mmol)와 L1 (6.94 g, 30 mmol)을 300 ml의 에탄올에 넣어 20시간 동안 질소 대기 하에서 환류시켰다. 반응이 종결된 후

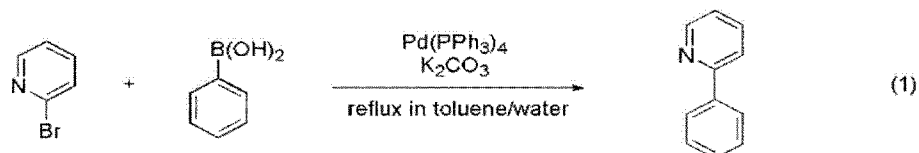
여과하여 얻어진 침전물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 compound 1 (8.12 g, 수율 92 %)을 얻었다.

[1052] GC-Mass (이론치: 883.07 g/mol, 측정치: 883 g/mol)

[1053] [합성예 110] 화합물 9의 합성

[1054] <단계 1> 2-phenylpyridine (L2)의 합성

[1055]

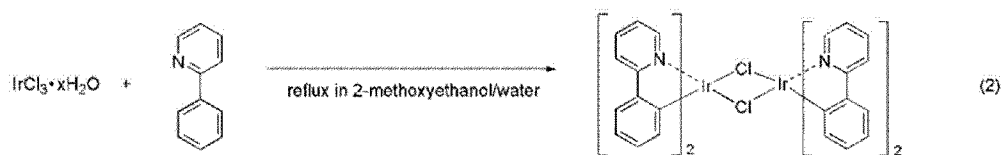


L2

[1056] 2,5-dibromopyridine 대신 2-bromopyridine을 사용한 것을 제외하고 상기 합성예 109의 <단계 1>과 동일한 방법을 이용하여 L2 (13.2 g, 수율 85 %)를 얻었다.

[1057] <단계 2> 2-phenylpyridinato iridium dimer (D2)의 합성

[1058]



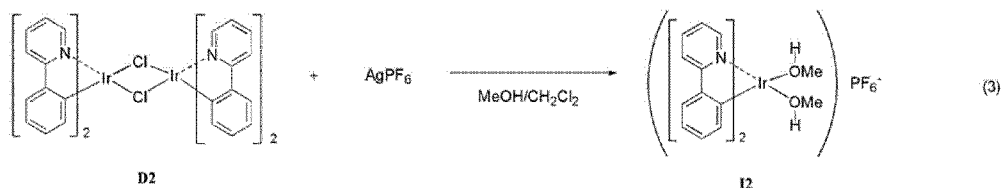
L2

D2

[1059] L1 대신 상기 L2를 사용한 것을 제외하고 상기 합성예 109의 <단계 2>와 동일한 방법을 이용하여 D2 (7.59 g, 수율 92 %)를 얻었다.

[1060] <단계 3> 용매 배위 양이온성 중간체 (I2)의 합성

[1061]



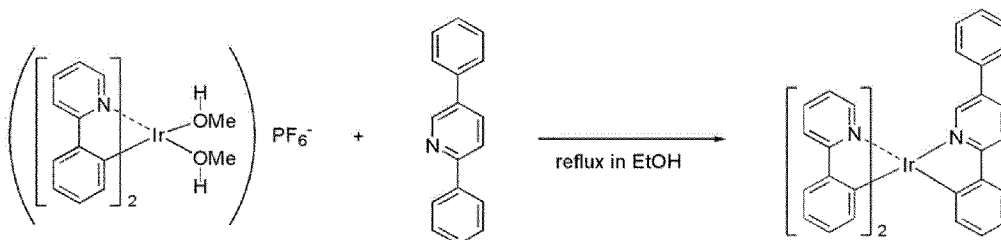
D2

I2

[1062] D1 대신 상기 D2를 사용한 것을 제외하고 상기 합성예 109의 <단계 3>과 동일한 방법을 이용하여 중간체 화합물 I2 (6.28 g, 수율 85 %)를 얻었다.

[1063] <단계 4> 화합물 9의 합성

[1064]



I2

L1

compound 9

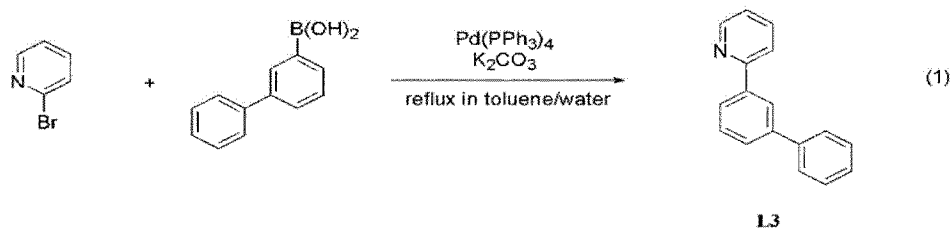
[1065] I1 대신 상기 I2를 사용한 것을 제외하고 상기 합성예 109의 <단계 4>와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물인 compound 9 (6.07 g, 수율 83 %)를 얻었다.

[1066] GC-Mass (이론치: 730.88 g/mol, 측정치: 731 g/mol)

[1067] [합성 예 111] 화합물 149의 제조

[1068] <단계 1> 2-biphenyl-3-yl-pyridine (L3)의 합성

[1069]



[1070] phenylboronic acid 대신 3-biphenylboronic acid를 사용한 것을 제외하고 상기 합성에 110의 <단계 1>과 동일한 방법을 이용하여 L3 (20.59 g, 수율 89 %)를 얻었다.

[1071] <단계 2> 화합물 149의 합성

[1072]



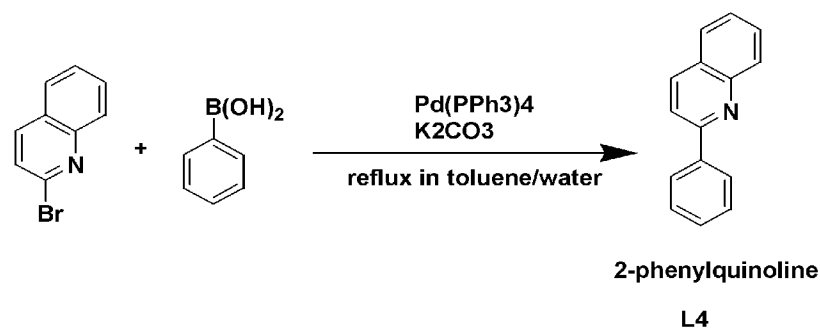
[1073] 질소 기류 하에서 5.0 g (10.0 mmol)의 Ir(acac)₃와 상기 L3 (6.94 g, 30.0 mmol)을 glycerol 30 ml에 넣고 24 시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결된 후 여과하여 얻어진 침전물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 compound 149 (2.47 g, 수율 28 %)을 얻었다.

[1074] GC-Mass (이론치: 883.07 g/mol, 측정치: 883 g/mol)

[1075] [합성 예 112] 화합물 164의 합성

[1076] <단계 1> 2-phenylquinoline (L4)의 합성

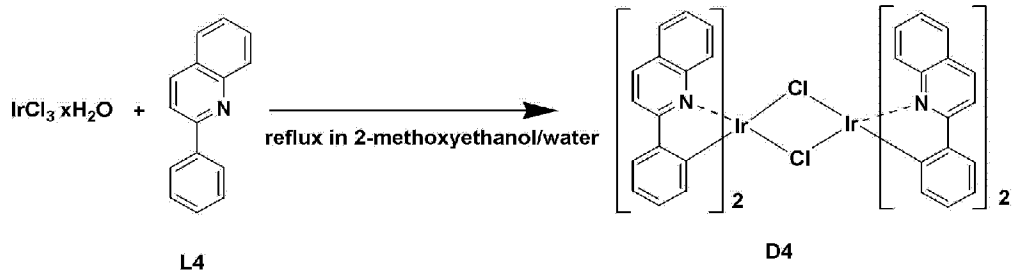
[1077]



[1078] 질소 기류 하에서 20.8 g (0.1 mol)의 2-bromoquinoline, 14.63 g (0.12 mol)의 phenylboronic acid, 41.46 g (0.3 mol)의 무수 K₂CO₃와 800 ml/300 ml의 toluene/H₂O를 넣고 교반하였다. 40°C에서 5.78 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 2-phenylquinoline (L4) 16.40 g (yield: 80 %)을 얻었다.

[1079] <단계 2> 2-phenylquinolinato iridium dimer (D4)의 합성

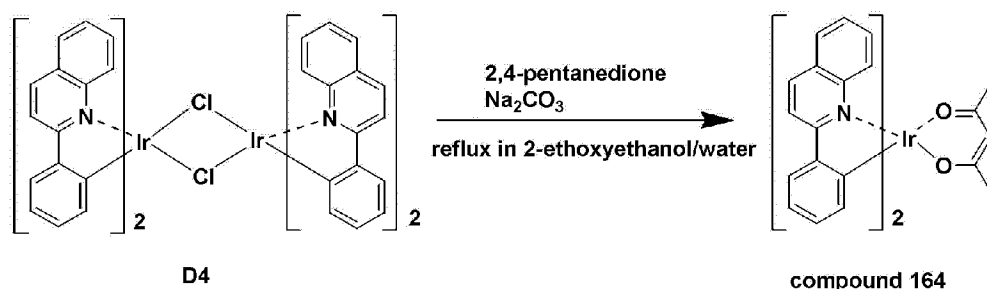
[1080]



[1081] 질소 기류 하에서 5.0 g (13.8 mmol)의 $\text{IrCl}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ 와 상기 L4 (8.49 g, 41.4 mmol)을 120 ml의 2-methoxyethanol과 40 ml의 물 혼합용매에 넣어 20 시간 동안 환류시켰다. 반응혼합물을 실온까지 온도를 내린 후 생성된 침전물을 여과하고 아세톤과 에탄올 1:1 비율의 용매로 생성물을 정제하여 D4 (8.49 g, 수율 95 %)을 얻었다.

[1082] <단계 3> 화합물 164의 합성

[1083]



[1084] 상기 D4(5.01 g, 5.81 mmol)과 2,4-pentanedione (1.74 g, 17.4 mmol), 무수 Na_2CO_3 (4.82 g, 34.86 mmol)을 120 ml의 2-ethoxyethanol에 넣어 환류시켰다. 반응혼합물을 실온까지 온도를 내린 후 생성된 침전물을 여과하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리, 재결정하여 목적물인 compound 164 (2.64 g, 수율 92 %)을 얻었다.

[1085] GC-Mass (이론치: 496.09 g/mol, 측정치: 496 g/mol)

[1086]

[1087] [실시예 1 내지 103]

[1088] 합성에 1 내지 103에서 합성한 화합물 Inv-1 내지 Inv-103 및 합성에 109의 compound 1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1089] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[1090] 이렇게 준비된 ITO 투명 기판(전극) 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/Inv-1 내지 Inv-103 각각의 화합물(90%) + 합성에 109의 화합물 1(10%) (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1091]

[1092] [실시예 104 내지 114]

[1093] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv-3, Inv-5, Inv-6, Inv-7, Inv-8, Inv-18, Inv-21, Inv-23, Inv-30, Inv-31, Inv-87을, 발광 도펀트 물질로서 합성에 110의 compound 9를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1094]

[1095] [실시예 115 내지 125]

[1096] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv-3, Inv-5, Inv-6, Inv-7, Inv-8, Inv-18, Inv-21, Inv-23, Inv-30, Inv-31, Inv-87을, 발광 도펀트 물질로서 합성에 111의 compound 149를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1097]

[1098] [실시예 126 내지 131]

[1099] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv-18, Inv-104, Inv-105, Inv-106, Inv-107, Inv-108을, 발광 도펀트 물질로서 합성에 112의 compound 164를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1100]

[1101] [비교예 1]

[1102] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv-1 대신 CBP를, 발광 도펀트 물질로서 합성에 109의 compound 1 대신 Ir(ppy)₃를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

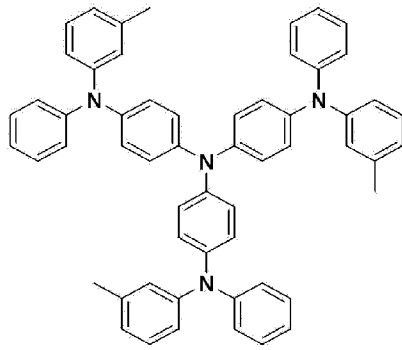
[1103]

[1104] [비교예 2]

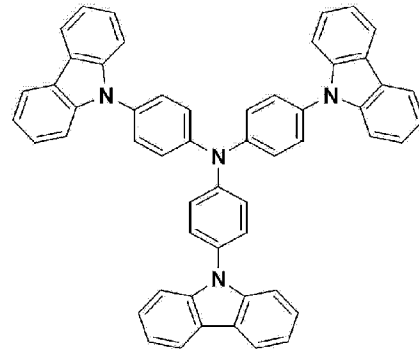
[1105] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv-18 대신 CBP를, 발광 도펀트 물질로서 합성에 112의 화합물 164 대신 Ir(piq)₂(acac)를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 126과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1106] 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, Ir(piq)₂(acac), CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[1107]

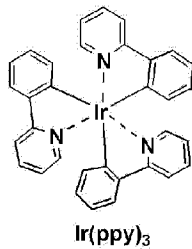
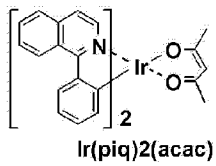
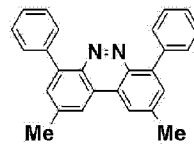


m-MTDATA

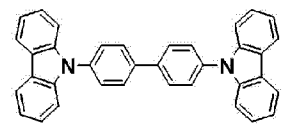


TCTA

[1108]

Ir(ppy)₃Ir(piq)₂(acac)

BCP



CBP

[1109]

[1110]

[1111] [평가예 1]

[1112] 실시예 1 내지 125 및 비교예 1 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 발광피크, 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[1113] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트	도펀트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 1	Inv-1	화합물 1	6.60	545	41.4
실시예 2	Inv-2	화합물 1	6.55	549	42.9
실시예 3	Inv-3	화합물 1	6.52	546	43.2
실시예 4	Inv-4	화합물 1	6.65	546	43.5
실시예 5	Inv-5	화합물 1	6.72	543	41.7
실시예 6	Inv-6	화합물 1	6.68	546	42.1
실시예 7	Inv-7	화합물 1	6.62	546	42.6
실시예 8	Inv-8	화합물 1	6.66	547	42.4
실시예 9	Inv-9	화합물 1	6.85	548	41.8
실시예 12	Inv-12	화합물 1	6.72	549	41.1
실시예 11	Inv-11	화합물 1	6.65	545	42.1
실시예 12	Inv-12	화합물 1	6.62	544	42.8
실시예 13	Inv-13	화합물 1	6.75	546	42.2
실시예 14	Inv-14	화합물 1	6.73	545	42.9
실시예 15	Inv-15	화합물 1	6.72	543	41.2
실시예 16	Inv-16	화합물 1	6.64	546	39.9
실시예 17	Inv-17	화합물 1	6.59	547	40.9
실시예 18	Inv-18	화합물 1	6.61	543	42.6
실시예 19	Inv-19	화합물 1	6.69	548	41.2
실시예 22	Inv-22	화합물 1	6.62	544	42.7
실시예 21	Inv-21	화합물 1	6.65	546	41.3
실시예 22	Inv-22	화합물 1	6.67	548	42.0
실시예 23	Inv-23	화합물 1	6.62	545	41.1
실시예 24	Inv-24	화합물 1	6.75	546	42.0
실시예 25	Inv-25	화합물 1	6.72	547	41.9
실시예 26	Inv-26	화합물 1	6.75	545	42.3
실시예 27	Inv-27	화합물 1	6.64	547	42.2
실시예 28	Inv-28	화합물 1	6.62	548	41.1

실시예 29	Inv-29	화합물 1	6.64	547	42.0
실시예 32	Inv-32	화합물 1	6.72	546	41.8
실시예 31	Inv-31	화합물 1	6.65	543	41.3
실시예 32	Inv-32	화합물 1	6.66	549	42.2
실시예 33	Inv-33	화합물 1	6.64	541	41.3
실시예 34	Inv-34	화합물 1	6.75	546	41.8
실시예 35	Inv-35	화합물 1	6.72	543	42.5
실시예 36	Inv-36	화합물 1	6.69	546	42.9
실시예 37	Inv-37	화합물 1	6.65	544	41.3
실시예 38	Inv-38	화합물 1	6.68	547	41.7
실시예 39	Inv-39	화합물 1	6.61	548	41.6
실시예 42	Inv-42	화합물 1	6.72	544	42.4
실시예 41	Inv-41	화합물 1	6.65	546	42.3
실시예 42	Inv-42	화합물 1	6.62	548	41.2
실시예 43	Inv-43	화합물 1	6.61	545	41.8
실시예 44	Inv-44	화합물 1	6.55	546	42.1
실시예 45	Inv-45	화합물 1	6.66	547	41.0
실시예 46	Inv-46	화합물 1	6.63	546	42.2
실시예 47	Inv-47	화합물 1	6.65	547	41.3
실시예 48	Inv-48	화합물 1	6.62	548	42.1
실시예 49	Inv-49	화합물 1	6.69	545	42.6
실시예 52	Inv-52	화합물 1	6.62	546	41.1
실시예 51	Inv-51	화합물 1	6.72	544	42.5
실시예 52	Inv-52	화합물 1	6.65	546	41.2
실시예 53	Inv-53	화합물 1	6.66	548	41.5
실시예 54	Inv-54	화합물 1	6.67	543	42.0
실시예 55	Inv-55	화합물 1	6.59	547	41.9
실시예 56	Inv-56	화합물 1	6.51	546	42.3
실시예 57	Inv-57	화합물 1	6.55	544	42.3
실시예 58	Inv-58	화합물 1	6.63	546	41.2
실시예 59	Inv-59	화합물 1	6.65	545	42.2

실시예 62	Inv-62	화합물 1	6.65	546	41.3
실시예 61	Inv-61	화합물 1	6.62	542	41.5
실시예 62	Inv-62	화합물 1	6.72	542	42.0
실시예 63	Inv-63	화합물 1	6.72	546	42.3
실시예 64	Inv-64	화합물 1	6.68	546	41.2
실시예 65	Inv-65	화합물 1	6.65	545	41.0
실시예 66	Inv-66	화합물 1	6.71	546	41.1
실시예 67	Inv-67	화합물 1	6.65	547	41.3
실시예 68	Inv-68	화합물 1	6.67	548	41.1
실시예 69	Inv-69	화합물 1	6.62	547	42.1
실시예 72	Inv-72	화합물 1	6.69	544	41.9
실시예 71	Inv-71	화합물 1	6.65	544	41.1
실시예 72	Inv-72	화합물 1	6.73	542	42.3
실시예 73	Inv-73	화합물 1	6.75	544	42.2
실시예 74	Inv-74	화합물 1	6.65	543	41.2
실시예 75	Inv-75	화합물 1	6.74	547	42.7
실시예 76	Inv-76	화합물 1	6.72	547	41.3
실시예 77	Inv-77	화합물 1	6.82	547	42.5
실시예 78	Inv-78	화합물 1	6.65	545	41.1
실시예 79	Inv-79	화합물 1	6.65	547	41.0
실시예 82	Inv-82	화합물 1	6.73	547	42.0
실시예 81	Inv-81	화합물 1	6.73	545	41.5
실시예 82	Inv-82	화합물 1	6.65	546	42.2
실시예 83	Inv-83	화합물 1	6.74	544	41.8
실시예 84	Inv-84	화합물 1	6.72	546	41.3
실시예 85	Inv-85	화합물 1	6.69	547	42.1
실시예 86	Inv-86	화합물 1	6.65	546	42.0
실시예 87	Inv-87	화합물 1	6.62	544	41.3
실시예 88	Inv-88	화합물 1	6.66	543	41.1
실시예 89	Inv-89	화합물 1	6.59	547	40.1
실시예 92	Inv-92	화합물 1	6.62	545	41.9

실시예 91	Inv-91	화합물 1	6.65	548	41.1
실시예 92	Inv-92	화합물 1	6.62	544	40.3
실시예 93	Inv-93	화합물 1	6.72	541	42.2
실시예 94	Inv-94	화합물 1	6.65	545	41.2
실시예 95	Inv-95	화합물 1	6.64	542	40.7
실시예 96	Inv-96	화합물 1	6.59	542	41.3
실시예 97	Inv-97	화합물 1	6.55	544	40.8
실시예 98	Inv-98	화합물 1	6.55	543	41.1
실시예 99	Inv-99	화합물 1	6.68	543	40.8
실시예 100	Inv-100	화합물 1	6.72	544	40.9
실시예 101	Inv-101	화합물 1	6.65	545	41.1
실시예 102	Inv-102	화합물 1	6.72	544	42.3
실시예 103	Inv-103	화합물 1	6.72	544	42.2
실시예 104	Inv-3	화합물 9	6.65	541	41.8
실시예 105	Inv-5	화합물 9	6.52	542	42.7
실시예 106	Inv-6	화합물 9	6.65	542	41.5
실시예 107	Inv-7	화합물 9	6.69	542	42.5
실시예 108	Inv-8	화합물 9	6.62	543	41.9
실시예 109	Inv-18	화합물 9	6.55	542	42.0
실시예 110	Inv-21	화합물 9	6.59	541	42.0
실시예 111	Inv-23	화합물 9	6.72	541	41.5
실시예 112	Inv-30	화합물 9	6.72	541	42.2
실시예 113	Inv-31	화합물 9	6.65	543	41.8
실시예 114	Inv-87	화합물 9	6.59	545	41.3
실시예 115	Inv-3	화합물 149	6.62	522	42.1
실시예 116	Inv-5	화합물 149	6.71	519	41.7
실시예 117	Inv-6	화합물 149	6.65	517	41.3
실시예 118	Inv-7	화합물 149	6.62	518	41.1
실시예 119	Inv-8	화합물 149	6.64	517	42.1
실시예 122	Inv-18	화합물 149	6.59	522	41.9
실시예 121	Inv-21	화합물 149	6.62	518	41.1

실시예 122	Inv-23	화합물 149	6.64	519	42.3
실시예 123	Inv-30	화합물 149	6.62	521	42.2
실시예 124	Inv-31	화합물 149	6.62	522	41.2
실시예 125	Inv-87	화합물 149	6.72	522	42.7
비교예 1	CBP	Ir(ppy) ₃	6.93	516	38.2

[1114] 상기 표 1을 참고하면, 본 발명에 따른 화합물(Inv-1 내지 Inv-103)을 발광층의 호스트로, 본 발명에 따른 화합물(화합물 1, 9 및 149)을 발광층의 도펀트로 적용한 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 종래 유기 전계 발광 소자(비교예1)보다 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내며 도펀트에 따라 다양한 발광 파장을 가짐을 알 수 있다.

[1115]

[1116] [평가예 2]

[1117] 실시예 126 내지 131 및 비교예 2 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 발광피크, 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[1118] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트	도펀트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 126	Inv-18	화합물 164	6.60	610	14.4
실시예 127	Inv-104	화합물 164	6.55	612	43.9
실시예 128	Inv-105	화합물 164	6.52	619	14.2
실시예 129	Inv-106	화합물 164	6.65	617	13.5
실시예 130	Inv-107	화합물 164	6.72	618	13.7
실시예 131	Inv-108	화합물 164	6.68	617	13.1
비교예 2	CBP	Ir(piq) ₂ (acac)	5.25	620	8.2

[1119] 상기 표 2를 참조하면, 본 발명에 따른 화합물(Inv-18, Inv-104 내지 Inv-108)을 발광층의 호스트로, 본 발명에 따른 화합물(화합물 164)을 발광층의 도펀트로

적용한 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 종래 유기 전계 발광 소자(비교예2)보다 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타낼 수 있다.

산업상 이용가능성

- [1120] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 인돌계 화합물을 발광층의 인광 호스트로, 상기 화학식 3으로 표시되는 이리듐 화합물을 발광층의 인광 도판트로 사용함에 따라 호스트-도판트 사이에서 효율적인 에너지 전달이 이루어져 발광성능, 구동전압 및 수명 등의 특성이 우수하다.

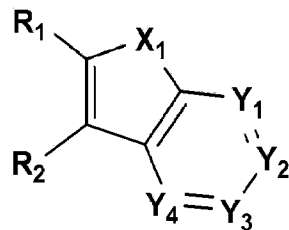
청구범위

[청구항 1]

양극; 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,

상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물과 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]

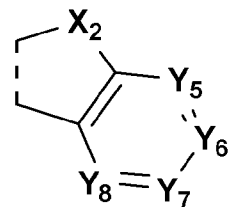


상기 화학식 1에서,

Y₁ 내지 Y₄는 각각 독립적으로, N 또는 CR₃이고,

Y₁과 Y₂, Y₂와 Y₃, 또는 Y₃와 Y₄ 중 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 축합 고리를 형성하며,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 화학식 1의 화합물과 축합이 이루어지는 부위를 의미하며,

Y₅ 내지 Y₈은 각각 독립적으로, N 또는 CR₄이고,

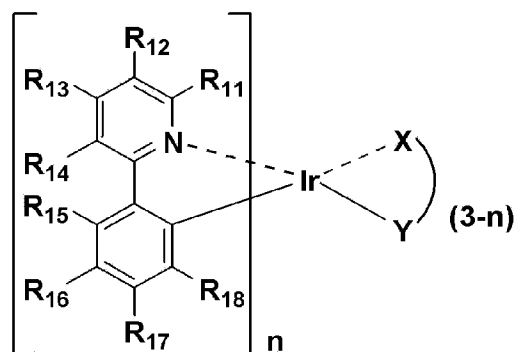
상기 X₁ 및 X₂는 각각 독립적으로, O, S, Se, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃) 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 이루어진 군에서 선택되고, 이때, X₁ 및 X₂ 중에서 적어도 하나는 N(Ar₁)이며,

상기 R₁ 내지 R₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

상기 R_1 내지 R_4 는 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,

상기 R_1 내지 R_4 및 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있고,

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X-Y는 유기 리간드로서, X는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기이고, Y는 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기 또는 핵원자수 3 내지 40의 헤테로아릴기이며,

R_{11} 내지 R_{18} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

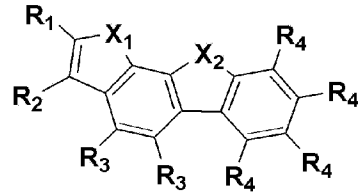
n은 1 내지 3의 정수이다.

[청구항 2]

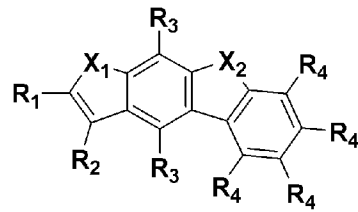
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1a 내지 1f로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

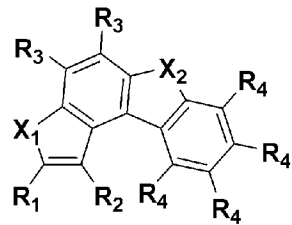
[화학식 1a]



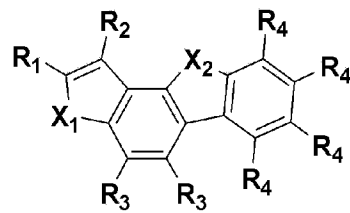
[화학식 1b]



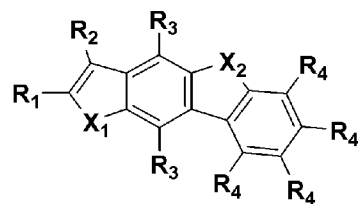
[화학식 1c]



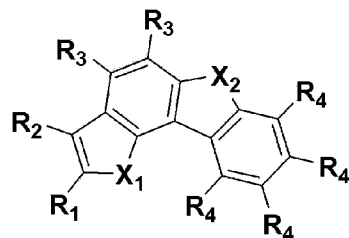
[화학식 1d]



[화학식 1e]



[화학식 1f]



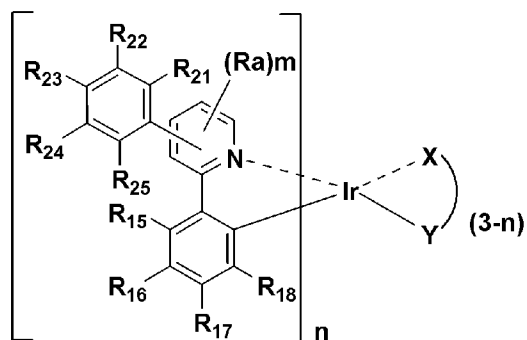
상기 화학식 1a 내지 1f에서, X_1 , X_2 및 R_1 내지 R_4 는 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 3]

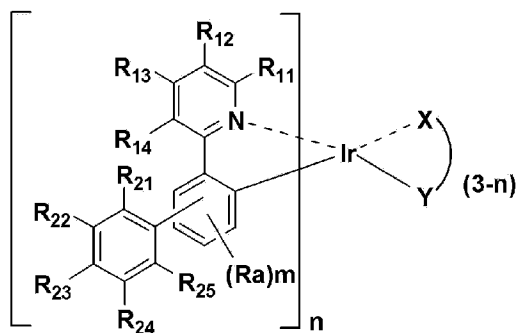
제1항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3a 내지 3d로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

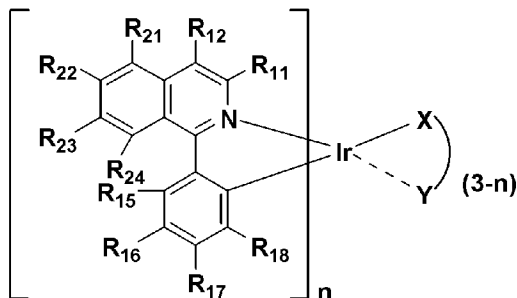
[화학식 3a]



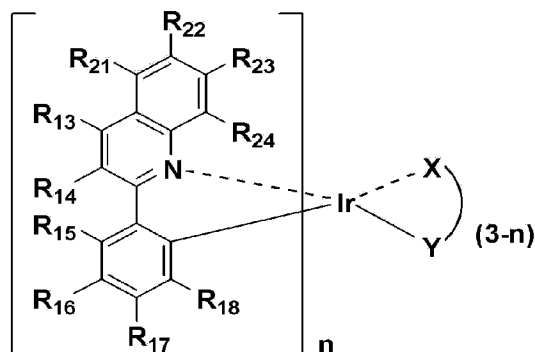
[화학식 3b]



[화학식 3c]



[화학식 3d]



상기 화학식 3a 내지 3d에서, X, Y, n 및 R₁₁ 내지 R₁₈은 제1항에서 정의한 바와 같으며,

상기 R_a 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
상기 m은 0 내지 3의 정수이다.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 화학식 1의 X₁ 및 X₂는 각각 독립적으로, S 또는 N(Ar₁)인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 5]

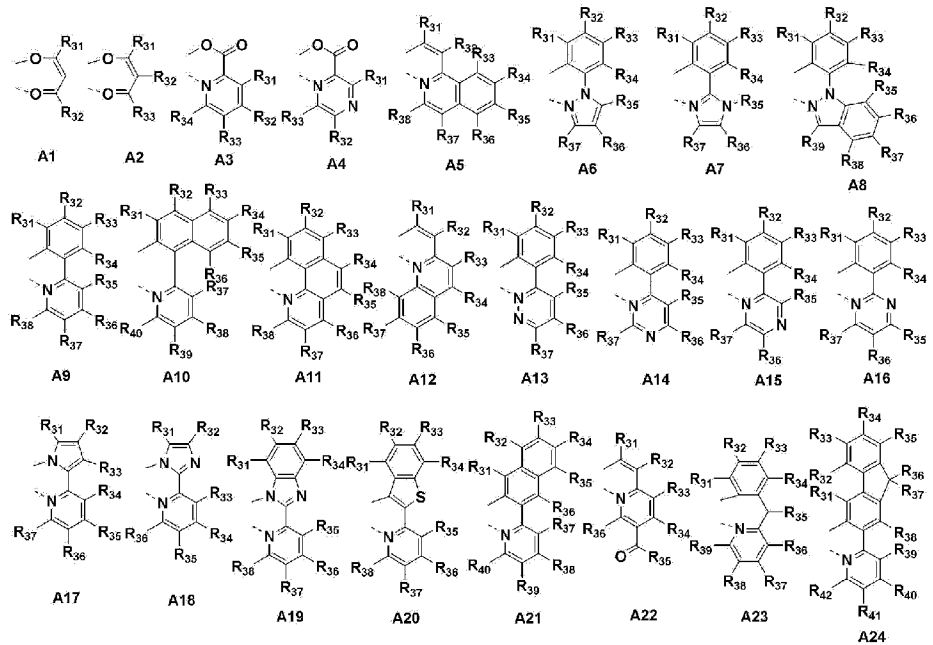
제1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 화학식 3의 X-Y는 하기 A1 내지 A24로 표시되는 구조로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:



상기 R₃₁ 내지 R₄₂는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

[청구항 7]

제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 8]

제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이며,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층의 호스트 물질이고, 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 상기 발광층의 도펀트 물질인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/007669**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i***

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 11/06; C07D 487/04; H05B 33/14; G09F 9/30; C07F 7/10; C07D 491/04; H01L 51/50

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: OLED, indole, iridium, carbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	KR 10-2011-0016031 A (SAMSUNG MOBILE DISPLAY CO., LTD.) 17 February 2011 See chemical formula 1, compounds 1 to 76, [0096], [0118] to [0127]	1-3,5-8 4
X	JP 2012-140367 A (IDEMITSU KOSAN CO LTD) 26 July 2012 See general formulas (1) to (6), [0031]-[0034]	1-8
A	JP 11-144867A (TORAY IND INC) 28 May 1999 See [0015]-[0021]	1-8
A	WO 2011-125020 A1 (BASF SE) 13 October 2011 See claims 1-15	1-8



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

20 DECEMBER 2013 (20.12.2013)

Date of mailing of the international search report

30 DECEMBER 2013 (30.12.2013)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2013/007669

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2011-0016031 A	17/02/2011	CN 101993410 A EP 2292603 A1 EP 2292603 B1 JP 05-211104 B2 JP 2011-037826 A US 2011-0031483 A1 US 8338000 B2	30/03/2011 09/03/2011 03/10/2012 12/06/2013 24/02/2011 10/02/2011 25/12/2012
JP 2012-140367 A	26/07/2012	NONE	
JP 11-144867A	28/05/1999	JP 3924869 B2	06/06/2007
WO 2011-125020 A1	13/10/2011	CN 102933582 A EP 2556075 A1 EP 2556075 A4 JP 2013-528929 A KR 10-2013-0094183 A	13/02/2013 13/02/2013 02/10/2013 11/07/2013 23/08/2013

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

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

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C09K 11/06; C07D 487/04; H05B 33/14; G09F 9/30; C07F 7/10; C07D 491/04; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

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

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: OLED, 인돌, 이리듐, 카바졸

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X A	KR 10-2011-0016031 A (삼성모바일디스플레이주식회사) 2011.02.17 화합식 1, 화합물 1 내지 76, [0096], [0118] 내지 [0127] 참조	1-3, 5-8 4
X	JP 2012-140367 A (IDEMITSU KOSAN CO LTD) 2012.07.26 일반식 (1) 내지 (6), [0031]-[0034] 참조	1-8
A	JP 11-144867A (TORAY IND INC) 1999.05.28 [0015]-[0021] 참조	1-8
A	WO 2011-125020 A1 (BASF SE) 2011.10.13 청구항 1-15 참조	1-8



추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.



대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2013년 12월 20일 (20.12.2013)

국제조사보고서 발송일

2013년 12월 30일 (30.12.2013)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

 대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관

오세주

전화번호 +82-42-481-5596



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2011-0016031 A	2011/02/17	CN 101993410 A EP 2292603 A1 EP 2292603 B1 JP 05-211104 B2 JP 2011-037826 A US 2011-0031483 A1 US 8338000 B2	2011/03/30 2011/03/09 2012/10/03 2013/06/12 2011/02/24 2011/02/10 2012/12/25
JP 2012-140367 A	2012/07/26	없음	
JP 11-144867A	1999/05/28	JP 3924869 B2	2007/06/06
WO 2011-125020 A1	2011/10/13	CN 102933582 A EP 2556075 A1 EP 2556075 A4 JP 2013-528929 A KR 10-2013-0094183 A	2013/02/13 2013/02/13 2013/10/02 2013/07/11 2013/08/23