

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 11월 2일 (02.11.2017) WIPO | PCT



(10) 국제공개번호
WO 2017/188655 A1

(51) 국제특허분류:

C07C 211/54 (2006.01) C07D 209/56 (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 495/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 491/048 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2017/004215

(22) 국제출원일: 2017년 4월 20일 (20.04.2017)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:

10-2016-0050517 2016년 4월 26일 (26.04.2016) KR
10-2017-0044899 2017년 4월 6일 (06.04.2017) KR

(71) 출원인: 덕산네오룩스 주식회사 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) [KR/KR]; 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 죽골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).

(72) 발명자: 문성윤 (MUN, Soung Yun); 31044 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥3길 19-1, 신비텔 11동 204호, Chungcheongnam-do (KR). 권재택 (KWON, Jae Taek); 31044 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥3길 19 신비텔 9동 406호, Chungcheongnam-do (KR). 김대성 (KIM,

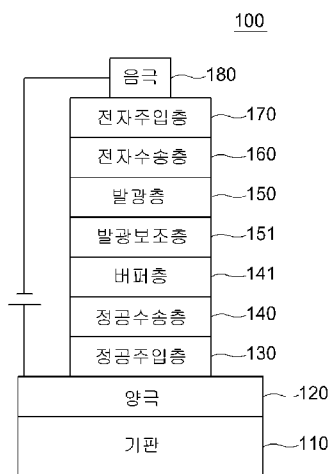
Dae Sung); 17090 경기도 용인시 처인구 지삼로590번길 9, 용인행정타운두산위브2단지 201동 1004호, Gyeonggi-do (KR). 박무진 (PARK, Moo Jin); 31100 충청남도 천안시 서북구 부성8길 29 계룡리슈빌아파트 103동 1405호, Chungcheongnam-do (KR). 이정욱 (LEE, Jung Wook); 54044 전라북도 군산시 서당길 11 현대아파트 104동 305호, Jeollabuk-do (KR). 이선희 (LEE, Sun Hee); 18436 경기도 화성시 동탄공원로1길 6-60 우림필유타운하우스아파트 112동 403호, Gyeonggi-do (KR). 송현주 (SONG, Hyun Ju); 31044 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥3길 21 신비텔 12동 302호, Chungcheongnam-do (KR). 이범성 (LEE, Bum Sung); 18441 경기도 화성시 탄요1길 98 내플애 타운하우스 29동 2호, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 특허법인 주원 (B&IP-JOOWON PATENT AND LAW FIRM); 06050 서울특별시 강남구 언주로 711, 건설회관 9층 (논현동), Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA,

(54) Title: COMPOUND FOR ORGANIC ELECTRIC ELEMENT, ORGANIC ELECTRIC ELEMENT USING SAME, AND ELECTRONIC DEVICE COMPRISING SAME ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT

(54) 발명의 명칭: 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치



(57) Abstract: Provided are an organic electric element and an electronic device comprising the same. According to the present invention, the organic electric element uses a mixture of compounds as a phosphorescent host material which can achieve a high light-emitting efficiency and a low driving voltage and can greatly improve a lifespan in an organic electric element.

(57) 요약서: 본 발명에 따른 화합물의 혼합물을 인광 호스트 물질로 이용함으로써, 유기전기소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압을 달성할 수 있으며, 또한 소자의 수명을 크게 향상시킬 수 있는 유기전기소자, 그 전자장치를 제공한다.

110 ... Substrate
120 ... Anode
130 ... Hole injection layer
140 ... Hole transport layer
141 ... Buffer layer
150 ... Light-emitting layer
151 ... Auxiliary light-emitting layer
160 ... Electron transport layer
170 ... Electron injection layer
180 ... Cathode



LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))
- 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

명세서

발명의 명칭: 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

기술분야

- [1] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물 층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 헤테로원자를 포함하고 있는 다환 고리화합물의 경우 물질 구조에 따른 특성의 차이가 매우 커서 유기전기소자의 재료로 다양한 층에 적용되고 있다. 특히 환의 개수 및 fused 위치, 헤테로원자의 종류와 배열에 따라 밴드 갭(HOMO, LUMO), 전기적 특성, 화학적 특성, 물성 등이 상이한 특징을 갖고 있어, 이를 이용한 다양한 유기전기소자의 층에 대한 적용 개발이 진행되어 왔다.
- [5] 그 대표적인 예로 하기 특허문헌 1 내지 특허문헌4에서는 다환 고리화합물 중 5환 고리 화합물에 대해 헤테로 종류 및 배열, 치환기 종류, fused 위치 등에 따른 성능을 보고하고 있다.
- [6]
- [7] [특허문헌 1]: 미국 등록특허 5843607
- [8] [특허문헌 2]: 일본 공개특허 1999-162650
- [9] [특허문헌 3]: 한국 공개특허 2008-0085000
- [10] [특허문헌 4]: 미국 공개특허 2010-0187977
- [11] [특허문헌 5]: 한국 공개특허 2011-0018340
- [12] [특허문헌 6]: 한국 공개특허 2009-0057711
- [13]
- [14] 특허문헌 1 및 특허문헌 2는 5환 고리 화합물 내 헤테로원자가 질소(N)로만 구성된 인돌로카바졸 코어를 사용하였으며, 인돌로카바졸의 N에 치환 또는 비치환된 아릴기를 사용한 실시예를 보고 하고 있다. 하지만 상기 선행발명 1의

경우 치환기로 알킬기, 아미노기, 알콕시기 등이 치환 또는 비치환된 단순 아릴기만 존재하여 다환 고리화합물의 치환기 효과에 대해 서 입증하기에는 매우 부족하였으며, 정공 수송 재료로서의 사용만 기재되어 있고, 인광 호스트 재료로서의 사용은 기재되어 있지 않았다.

- [15] 특허문헌 3 및 특허문헌 4는 상기 특허문헌 1 및 특허문헌 2와 동일한 5환 고리 화합물 내 헤테로원자가 N인 인돌로카바졸 포 코어에 각각 아릴기와 N을 함하는 피리딘, 피리미딘, 트리아진 등이 치환된 화합물을 기재하고 있지만, 인광 그린 호스트 물질에 대한 사용 예만 기재되어 있으며, 인돌로카바졸 코어에 치환되는 다른 헤테로고리 화합물에 대한 성능에 대해서는 기재되어 있지 않았다.
- [16] 특허문헌 5는 5환 고리화합물 내 헤테로원자를 질소(N), 산소(O), 황(S), 탄소 등이 기재되어 있으나, 성능 측정 데이터에는 모두 서로 동일한 동형 헤테로원자를 사용한 실시예만 존재하여, 이형 헤테로원자를 포함하는 5환 고리 화합물의 성능적 특성을 확인할 수 없었다.
- [17] 따라서 상기 특허문헌에서는 동형 헤테로원자를 포함하는 5환 고리화합물이 갖는 낮은 전하 캐리어 이동도 및 낮은 산화 안정성에 대한 해결방안이 기재되어있지 않았다.
- [18] 5환 고리 화합물 분자가 일반적으로 적층될 때, 인접한 π -전자가 많아짐에 따라 강한 전기적 상호작용을 갖게 되는데, 이는 전하 캐리어 이동도와 밀접한 연관이 있으며, 특히 N-N type인 동형의 5환 고리화합물은 분자가 적층될 때, 분자간의 배열순서가 edge-to-face 형태를 갖게 되는 반면, 헤테로원자가 서로 다른 이형의 5환 고리화합물은 분자의 패킹구조가 역방향으로 마주보는 파이-적층구조(antiparallelcofacial π -stacking structure)를 가져 분자간의 배열 순서가 face-to-face 형태를 갖게 된다. 이 적층구조의 원인인 비대칭으로 배치된 헤테로원자 N에 치환되는 치환기의 입체효과로 인하여 상대적으로 높은 캐리어 이동도 및 높은 산화안정성을 야기시킨다고 보고 되었다. (*Org. Lett.* 2008, **10**, 1199)
- [19] 특허문헌 6에서는 7환 이상의 다양한 다환 고리 화합물에 대하여 형광 호스트 물질로 사용한 예가 보고 되었다.
- [20]
- [21] 상기 내용과 같이 다환 고리화합물에 대한 fused 위치 및 고리 개수, 헤테로원자의 배열, 종류에 따른 특성 변화에 대해서는 아직도 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다.
- [22] 특히 인광 발광 도펀트 재료를 이용하는 인광형 유기전기소자에 있어서 호스트 물질의 LUMO, 및 HOMO level 은 유기전기소자의 효율 및 수명에 매우 큰 영향을 주는 요인으로서 이는 발광층 내 전자 및 정공 주입을 효율적으로 조절 가능하냐에 따라 발광층 내 charge balance 조절, 도펀트 켄칭(quenching) 및 정공 수송층 계면에서의 발광으로 인한 효율 저하 및 수명 저하를 방지할 수 있기 때문이다.

- [23] 형광 및 인광 발광용 호스트 물질의 경우 최근들어 TADF(Thermal activated delayed fluorescent), Exciplex 등을 이용한 유기전기소자의 효율 증가 및 수명 증가 등을 연구하고 있으며, 특히 호스트 물질에서 도펀트 물질로의 에너지 전달 방법 규명에 많은 연구가 진행되고 있다.
- [24] TADF (Thermal activated delayed fluorescent), exciplex에 대한 발광층 내 에너지 전달 규명은 여러가지 방법들이 있지만, PL lifetime (TRTP) 측정법으로 손쉽게 확인할 수 있다.
- [25] TRTP (Time resolved transient PL) 측정법은 펄스 광원을 호스트 박막에 조사한 후, 시간에 따른 스펙트럼의 감소(Decay time)를 관찰하는 방식으로 에너지 전달 및 발광 지연시간 관찰을 통해 에너지 전달 방식을 규명할 수 있는 측정방법이다. 상기 TRTP 측정은 형광과 인광의 구분 및 mixed 호스트 물질 내에서의 에너지 전달방식, exciplex 에너지 전달방식, TADF 에너지 전달 방식 등을 구분해 줄 수 있는 측정방법이다.
- [26] 이처럼 호스트 물질로부터 도펀트 물질로 에너지가 전달되는 방식에 따라 효율 및 수명에 영향을 주는 다양한 요인들이 존재하며, 물질에 따라 에너지 전달 방식이 상이하어, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 호스트 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광층의 호스트 물질에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

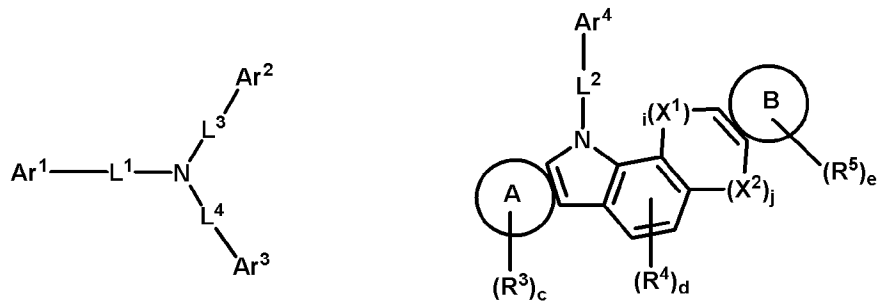
- [27] 본 발명은 상기와 같은 인광 호스트 물질의 문제점을 해결하기 위하여 제안된 것으로, 인광 도펀트를 포함하는 인광 발광형 유기전기소자의 호스트 물질에 대한 HOMO level 조절을 통한 발광층 내 charge balance 조절 및 효율, 수명을 향상시킬 수 있는 화합물 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [28] 본 발명은 인광 발광형 유기전기소자의 발광층 내 효율적인 정공 주입을 조절하기 위해 주성분으로서 특정의 제 1호스트 재료에 특정의 제 2호스트 재료를 조합하여 함유함으로써, 발광층과 인접층의 에너지 장벽을 작게 할 수 있고, 발광층 내 charge balance를 최대화 시켜 유기전기소자의 고효율, 고수명을 제공하는 것이다.
- [29] 본 발명은 제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은, 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 하기 화학식 (1)로 표시되는 제 1호스트 화합물 및 하기 화학식 (2) 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[30] 화학식 (1) 화학식 (2)

[31]



[32]

[33] 또한, 본 발명은 상기 화학식들로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

[34]

발명의 효과

[35] 본 발명에 따른 혼합물을 인광 호스트 물질로 이용함으로써, 유기전기소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압을 달성할 수 있으며, 또한 소자의 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[36] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

[37] 100 : 유기전기소자, 110 : 기판

[38] 120 : 제 1전극(양극), 130 : 정공주입층

[39] 140 : 정공수송층, 141 : 버퍼층

[40] 150 : 발광층, 151 : 발광보조층

[41] 160 : 전자수송층, 170 : 전자주입층

[42] 180 : 제 2전극(음극)

[43] 도 2는 화합물 3-6의 ^1H NMR 결과를 나타낸다.

[44] 도 3은 화합물 3-6의 ^{13}C NMR 결과를 나타낸다.

[45] 도 4는 화합물 3-8의 ^1H NMR 결과를 나타낸다.

[46] 도 5는 화합물 3-8의 ^{13}C NMR 결과를 나타낸다.

[47] 도 6은 화합물 3-7의 ^1H NMR 결과를 나타낸다.

[48] 도 7은 화합물 3-7의 ^{13}C NMR 결과를 나타낸다.

[49] 도 8은 화합물 3-101(화합물 P1-1)의 ^1H NMR 결과를 나타낸다.

[50] 도 9는 화합물 3-101(화합물 P1-1)의 ^{13}C NMR 결과를 나타낸다.

[51]

발명의 실시를 위한 형태

[52] 이하, 본 발명의 실시예를 참조하여 상세하게 설명한다. 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

- [53] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성 요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성 요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.
- [54] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다:
- [55] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [56] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.
- [57] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.
- [58] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.
- [59] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기", "알케닐기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [60] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [61] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [62] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [63] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [64] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기일 수 있다.

[65]

[66] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.

[67] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

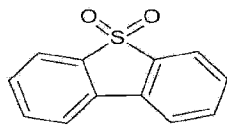
[68] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[69] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[70] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[71] 또한 "헤테로고리기"는 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

[72]



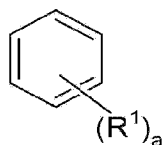
[73] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

[74] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화고리를 포함한다.

[75] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

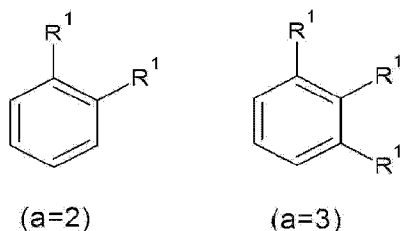
- [76] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.
- [77] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.
- [78] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알켄일기, C₂~C₂₀의 알킨일기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.
- [79] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[80]



- [81] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하는 것을 의미하는데, 즉 a가 0인 경우는 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 모두 수소가 결합된 것을 의미하며, 이때 탄소에 결합된 수소의 표시를 생략하고 화학식이나 화합물을 기재 할 수 있다. 또한, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 예컨대 아래와 같이 결합할 수 있고, a가 4 내지 6의 정수인 경우에도 이와 유사한 방식으로 벤젠고리의 탄소에 결합하며, a가 2 이상의 정수인 경우 R¹은 서로 같거나 상이할 수 있다.

[82]



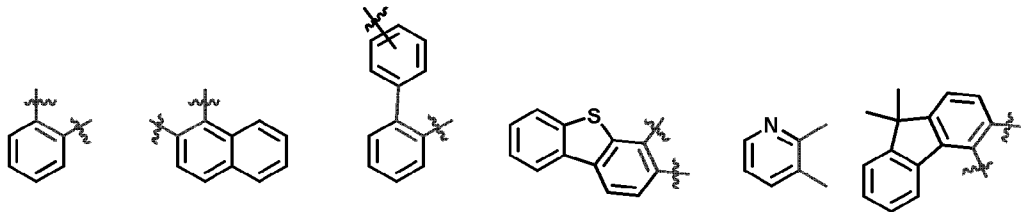
- [83] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "오소(ortho)", "메타(meta)", "파라(para)"는 모든 치환기의 치환 위치를 뜻하며, 오소(ortho) 위치란 치환기의 위치가 바로 이웃하는 화합물을 나타내고, 일례로 벤젠일 경우

1, 2 자리를 뜻하고, 메타(meta) 위치란 바로 이웃 치환위치의 다음 치환위치를 나타내며 벤젠을 예시로 했을 때 1, 3자리를 뜻하며, 파라(para) 위치란 메타(meta) 위치의 다음 치환위치로써 벤젠을 예시로 했을 때 1, 4자리를 뜻한다. 보다 상세한 치환위치 예에 대한 설명은 하기와 같고, 오소-(ortho-), 메타-(meta-) 위치는 non-linear한 type, 파라-(para-) 위치는 linear한 type으로 치환됨을 확인할 수 있다.

[84]

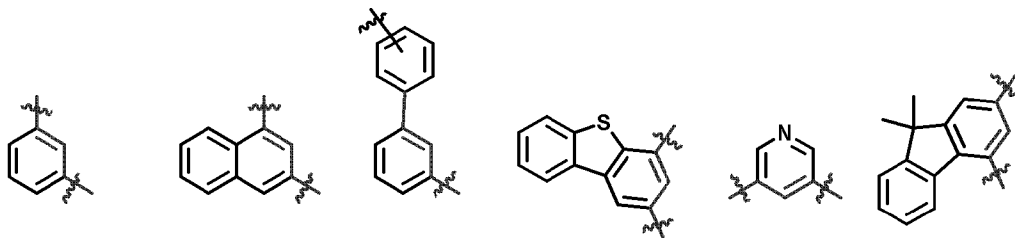
[85] [ortho-위치의 예시]

[86]



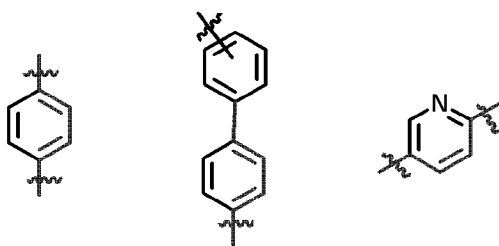
[87] [meta-위치의 예시]

[88]



[89] [para-위치의 예시]

[90]



[91]

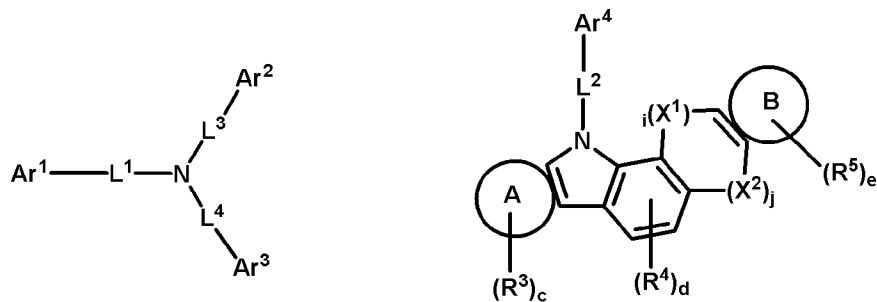
[92] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물 및 이를 포함하는 유기전기소자에 대하여 설명한다.

[93]

[94] 본 발명은 제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은, 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 인광성 발광층으로서 하기 화학식 1로 표시되는 제 1호스트 화합물 및 하기 화학식 2 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[95] 화학식 (1) 화학식 (2)

[96]



[97] {상기 화학식 (1) 및 (2)에서,

[98] 1) Ar^1 , Ar^2 , Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕실기; 및 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되며,

[99] 2) c 및 e는 0~10의 정수이고, d는 0~2의 정수이며, R^3 , R^4 및 R^5 는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕실기; $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및 $-L'-N(R^a)(R^b)$; (여기서 상기 L'은 단일결합; $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; 및 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R^a 및 R^b 은 서로 독립적으로 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택됨), 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 c, d 및 e가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^3 끼리 혹은 복수의 R^4 끼리 혹은 복수의 R^5 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,

[100] Ar^1 내지 Ar^4 , R^1 내지 R^5 가 아릴기인 경우, 바람직하게는 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴기, 더욱 바람직하게는 $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴기이며,

[101] Ar^1 내지 Ar^4 , R^1 내지 R^5 가 헤테로고리기인 경우, 바람직하게는 $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기이다.

[102] 상기 Ar^1 내지 Ar^4 , R^1 내지 R^5 가 아릴기인 경우, 구체적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 스틸베닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 쿼터페닐기, 크라이세닐기 등일 수 있다

[103] 상기 Ar^1 내지 Ar^4 , R^1 내지 R^5 가 헤테로고리기인 경우, 구체적으로 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 피라진, 트리아졸기,

아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살린, 다이벤조퀴녹살린, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 인돌로카바졸, 아크리딘, 페녹사진, 벤조피리다진, 벤조피리미딘, 카볼린, 벤조카볼린, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기, 티에노티오펜, 벤조싸이에노피리딘, 벤조싸이에노피리미딘, 벤조퓨로피리미딘, 다이메틸벤조인테노피리미딘, 페난트로퓨로피리미딘, 나프토포로피리미딘, 나프토포싸이에노피리미딘, 다이벤조싸이오펜, 싸이안트렌, 다이하이드로벤조티오펜피라진, 다이하이드로벤조퓨로피라진, 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

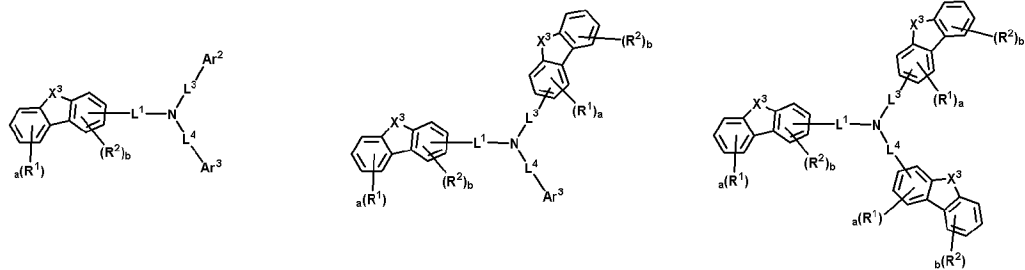
- [104] 3) L^1, L^2, L^3 및 L^4 는 단일결합; $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; 및 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고,
- [105] 4) A 및 B는 각각 독립적으로 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 또는 $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤테로고리기이며,
- [106] 단, A, B 모두 치환 또는 비치환된 C_6 의 아릴기(페닐기)인 경우에는, d가 2이며 R^4 끼리 결합하여 고리를 형성하여 방향족 또는 헤테로고리를 형성하고,
- [107] 5) i, j는 0 또는 1 이고,
- [108] 단, $i+j$ 는 1 이상이며, 여기서 i 또는 j가 0일 경우는 직접결합을 의미하고,
- [109] 6) X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 NR' , O, S, 또는 $CR'R''$ 이고;
- [110] R' 및 R'' 는 각각 독립적으로 수소; $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; $C_3 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; 또는 $C_1 \sim C_{50}$ 의 알킬기;이며,
- [111] R' 과 R'' 은 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,
- [112] (여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 아릴렌기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기, 아릴옥시기는 각각 중수소; 할로젠; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기 또는 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; $-L'-N(R^a)(R^b)$; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬싸이오기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알콕실기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기; 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤테로고리기; $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기; $C_7 \sim C_{20}$ 의 아릴알킬기 및 $C_8 \sim C_{20}$ 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환 될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 '고리'란 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.))

[113] 더불어 상기 화학식 (1), (2)로 표시되는 화합물을 제공한다.

[114] 또한, 본 발명은 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 (3) 내지 하기 화학식 (5) 중의 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[115] 화학식 (3) 화학식 (4) 화학식 (5)

[116]



[117] {상기 화학식 (3) 내지 (5)에서,

[118] 1) L^1 , L^3 , L^4 , L' , R^a , R^b , Ar^2 및 Ar^3 은 상기에서 정의된 바와 같고,

[119] 2) X^3 은 O 또는 S이고,

[120] 3) a는 0~4의 정수이고, b는 0~3의 정수이며, R^1 및 R^2 는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕실기; $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및 $-L'-N(R^a)(R^b)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^1 끼리 혹은 복수의 R^2 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.}

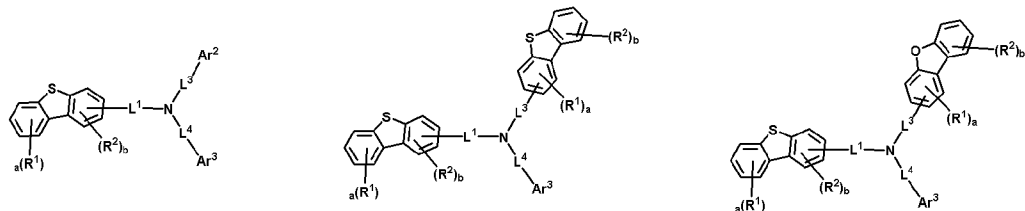
[121]

[122] 또한 본 발명은 상기 화학식 (1)로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (6) 내지 (14)중에 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[123]

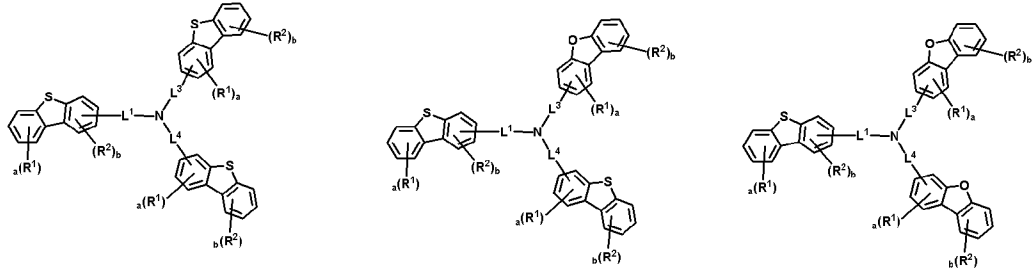
[124] 화학식 (6) 화학식 (7) 화학식 (8)

[125]



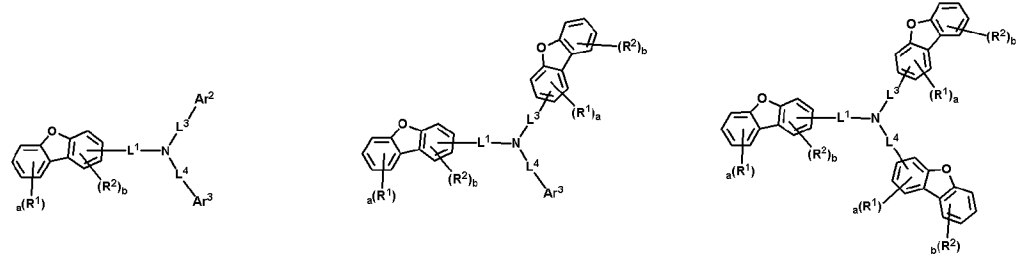
[126] 화학식 (9) 화학식 (10) 화학식 (11)

[127]



[128] 화학식 (12) 화학식 (13) 화학식 (14)

[129]



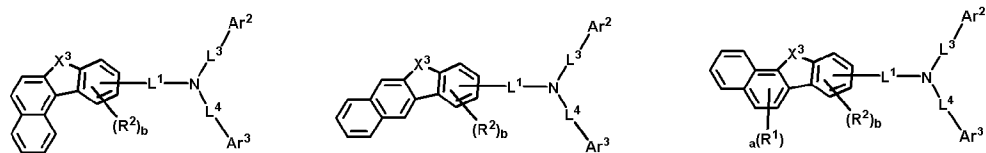
[130] {상기 화학식 (6) 내지 (14)에서, L^1 , L^3 , L^4 , Ar^2 , Ar^3 , R^1 , R^2 , a , b 은 상기 화학식 (1)에서 정의된 바와 같다.}

[131]

[132] 또 다른 일 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 (15) 내지 (23) 중에 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

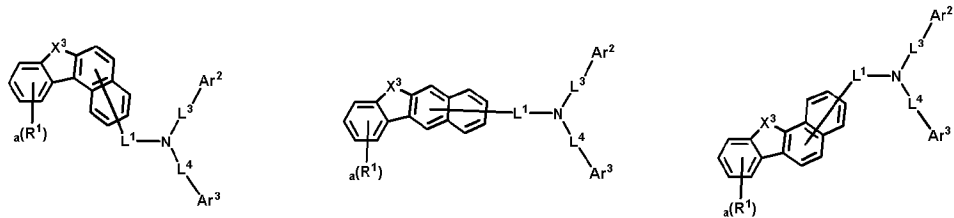
[133] 화학식 (15) 화학식 (16) 화학식 (17)

[134]



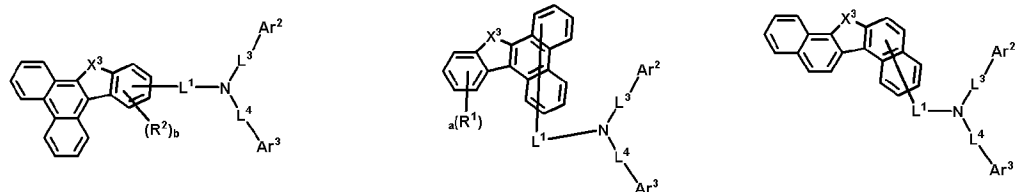
[135] 화학식 (18) 화학식 (19) 화학식 (20)

[136]



[137] 화학식 (21) 화학식 (22) 화학식 (23)

[138]



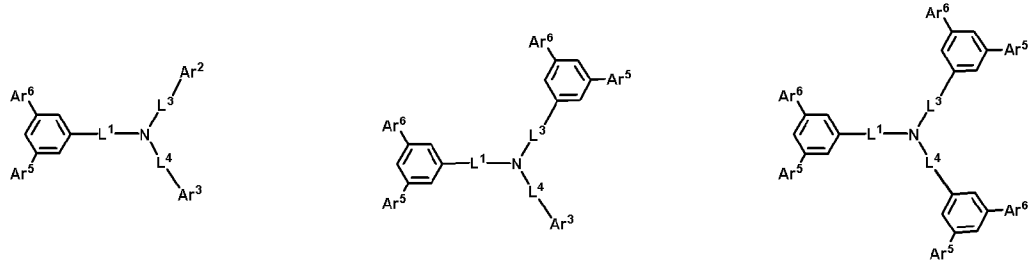
[139] {상기 화학식 (15) 내지 (23)에서, L^1 , L^3 , L^4 , Ar^2 , Ar^3 , R^1 , R^2 , a , b 은 상기 화학식 (1)에서 정의된 바와 같다.}

[140]

[141] 또 다른 예로, 상기 화학식 (1)로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (24) 내지 (26)중에 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[142] 화학식 (24) 화학식 (25) 화학식 (26)

[143]



[144] {상기 화학식 (24) 내지 (26)에서,

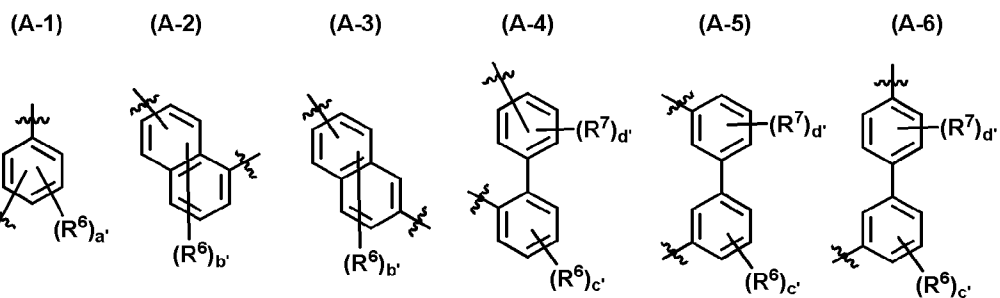
[145] 1) L¹, L³, L⁴, L', R^a, R^b, Ar², Ar³은 상기에서 정의된 바와 같고,

[146] 2) Ar⁵ 및 Ar⁶는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기 C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택된다.}

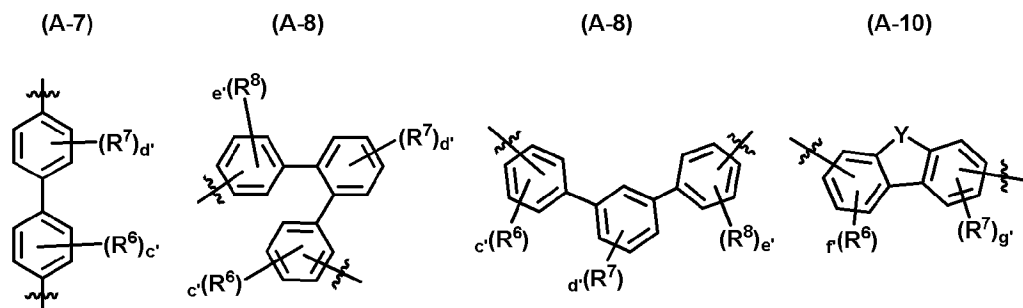
[147]

[148] 본 발명에서는 또한, 상기 화학식 (1)에서 L¹, L³, L⁴가 하기 화학식 (A-1) 내지 (A-12) 중에 어느 하나인 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[149]



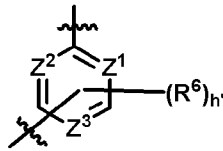
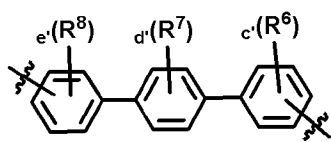
[150]



[151]

(A-11)

(A-12)



[152] {상기 화학식 (A-1) 내지 (A-12)에서,

[153] 1) a', c', d', e' 은 0~4의 정수; b' 은 0~6의 정수; f, g'는 0~3의 정수, , h'는 0 또는 1의 정수이며,

[154] 2) R⁶, R⁷ 및 R⁸은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 f, g'가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R⁶끼리 혹은 복수의 R⁷끼리 혹은 이웃한 R⁶과 R⁷은 서로 결합하여 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,

[155] 2) Y는 NR', O, S 또는 CR'R''이고,

[156] L', R^a, R^b, R', R''은 상기에서 정의된 바와 같으며,[157] 3) Z¹, Z² 및 Z³은 CR' 또는 N이고, 적어도 하나는 N이다.}

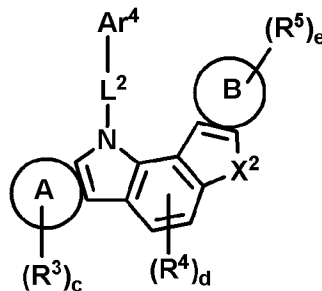
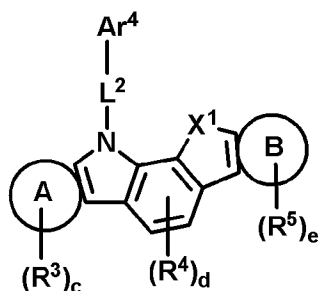
[158]

[159] 본 발명의 일 실시예로, 상기 화학식 (1)에서 L¹, L³, L⁴ 중 적어도 하나가 반드시 페닐기이고 m(메타)-위치로 치환된 것을 특징으로 하는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[160] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (27) 또는 화학식 (28)로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[161] 화학식 (27) 화학식 (28)

[162]

[163] {상기 화학식 (27) 및 (28)에서, R³, R⁴, R⁵, Ar⁴, L², c, d, e, A, B, X¹, X²는 상기 화학식 (2)에서 정의한 바와 같다.}

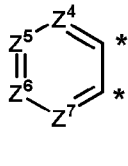
[164]

[165] 또한 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 (2)의 A, B가 하기 화학식 (B-1)

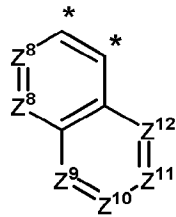
내지 (B-7)로 이루어진 군에서 선택되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[166]

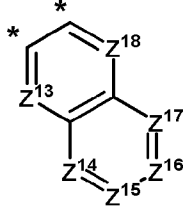
(B-1)



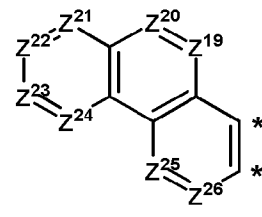
(B-2)



(B-3)

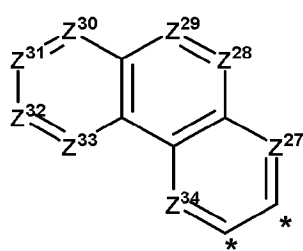


(B-4)

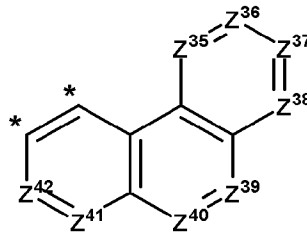


[167]

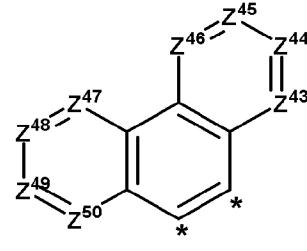
(B-5)



(B-6)



(B-7)



[168] {상기 화학식 B-1 내지 B-7에서,

[169] 1) Z⁴ 내지 Z⁵⁰은 CR' 또는 N이고,

[170] 2) R'은 상기에서 정의된 바와 같고,

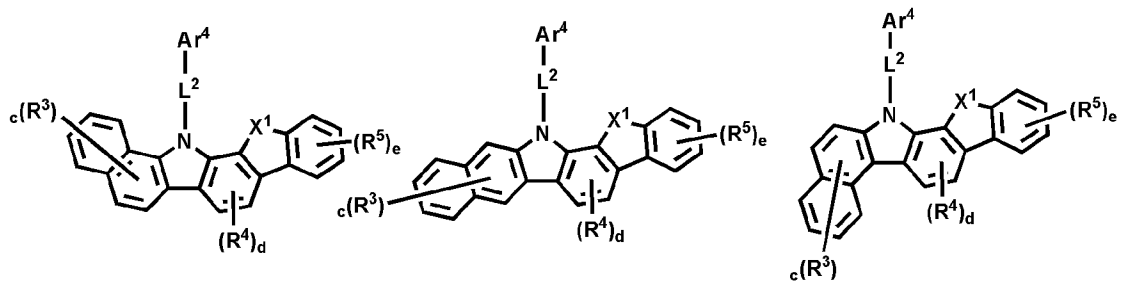
[171] 3) *는 축합되는 위치를 나타낸다.}

[172]

[173] 또한 본 발명은, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (29) 내지 화학식 (48) 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

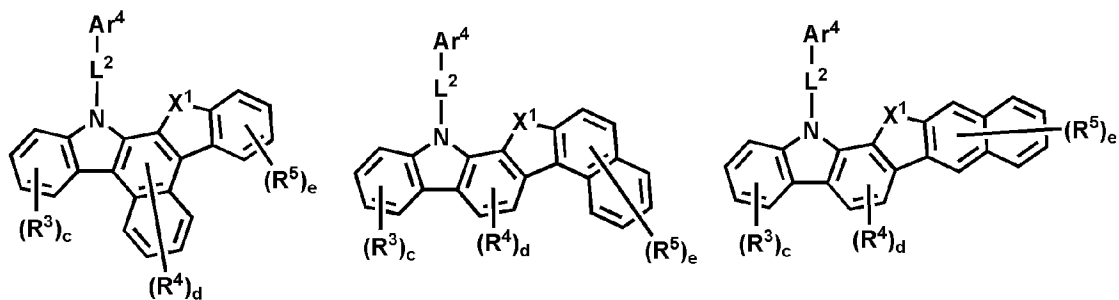
[174] 화학식 (29) 화학식 (30) 화학식 (31)

[175]



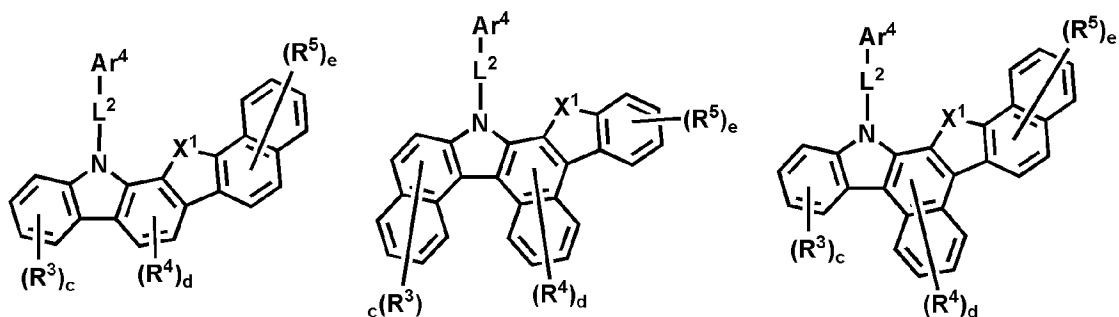
[176] 화학식 (32) 화학식 (33) 화학식 (34)

[177]



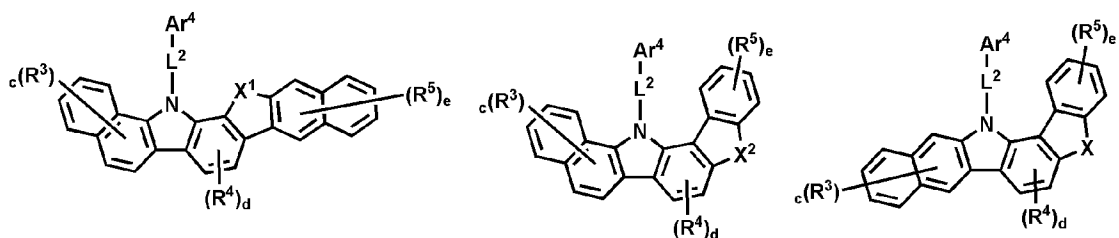
[178] 화학식 (35) 화학식 (36) 화학식 (37)

[179]



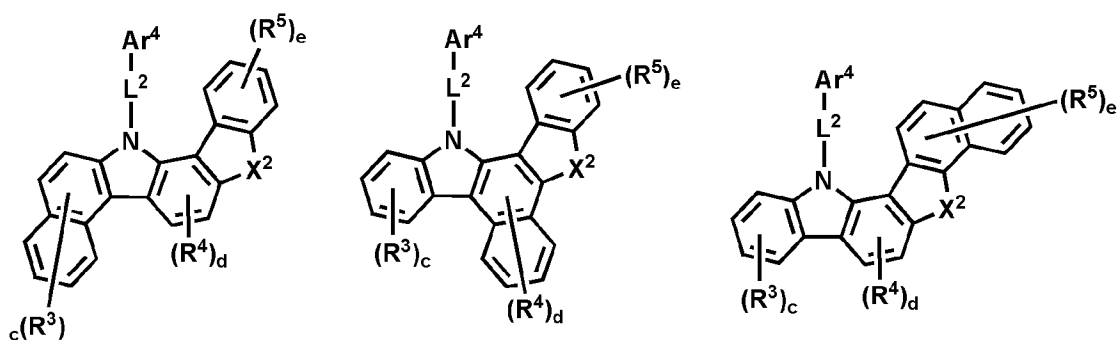
[180] 화학식 (38) 화학식 (39) 화학식 (40)

[181]



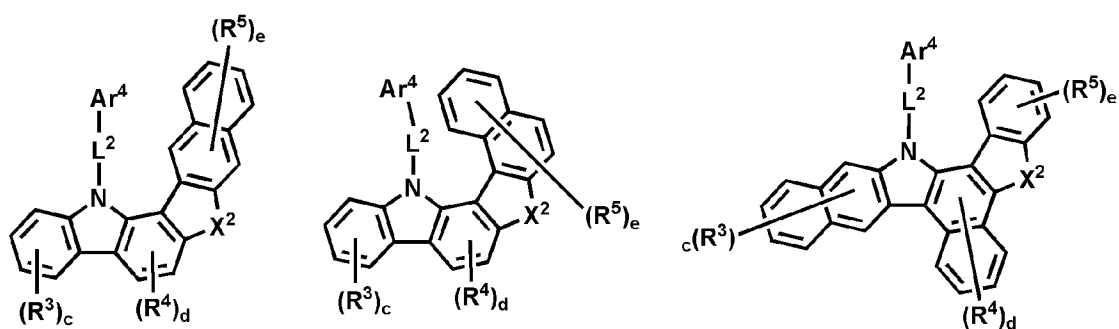
[182] 화학식 (41) 화학식 (42) 화학식 (43)

[183]



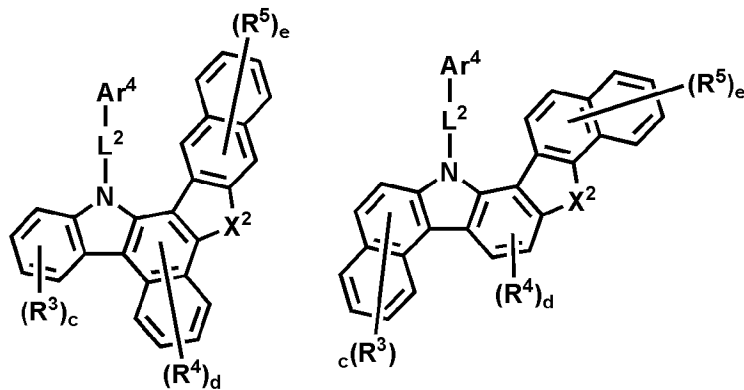
[184] 화학식 (44) 화학식 (45) 화학식 (46)

[185]



[186] 화학식 (47) 화학식 (48)

[187]



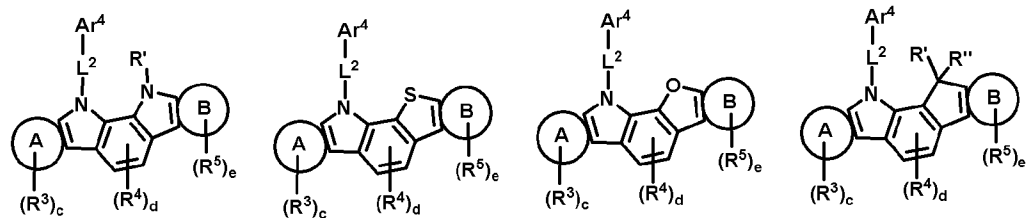
[188] {상기 화학식 (29) 내지 (48)에서, 상기 Ar⁴, X¹, X², R³, R⁴, L², R⁵, c, d, e는 상기에서 정의된 바와 같다.}

[189]

[190] 본 발명의 일 측면에서, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (49) 내지 화학식 (56) 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

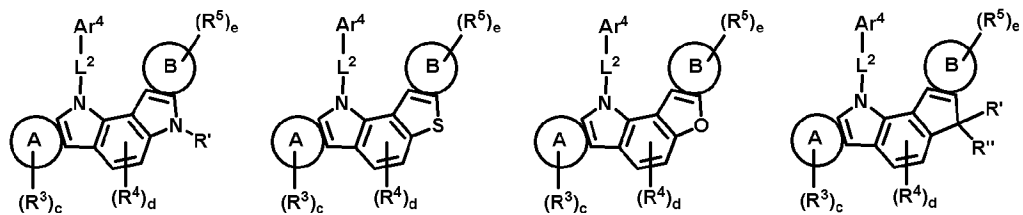
[191] 화학식 (49) 화학식 (50) 화학식 (51) 화학식 (52)

[192]



[193] 화학식 (53) 화학식 (54) 화학식 (55) 화학식 (56)

[194]

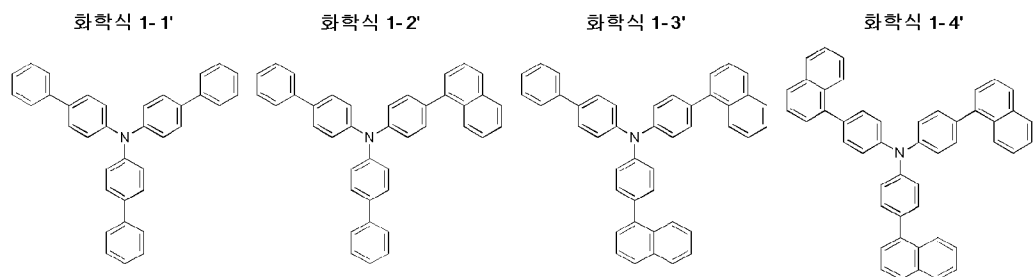


[195] {상기 화학식 (49) 내지 (56)에서, R³, R⁴, R⁵, R', R'', L², Ar⁴, c, d, e, A, B은 상기에서 정의된 바와 같다.}

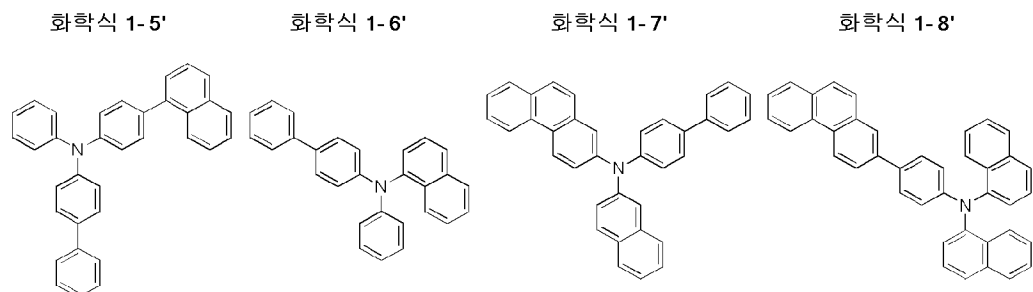
[196]

[197] 본 발명은 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화합물 1-1' 내지 화합물 1-82' 을 포함한다.

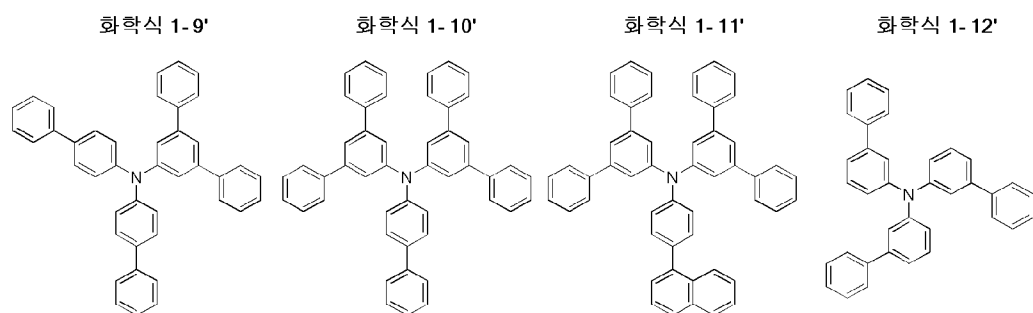
[198]



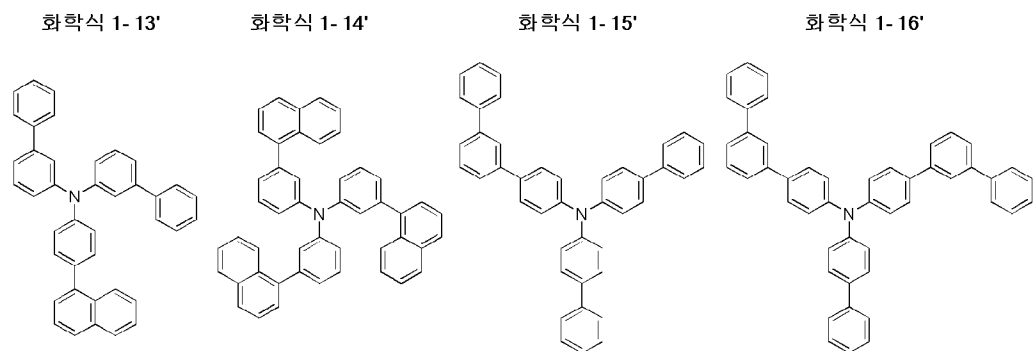
[199]



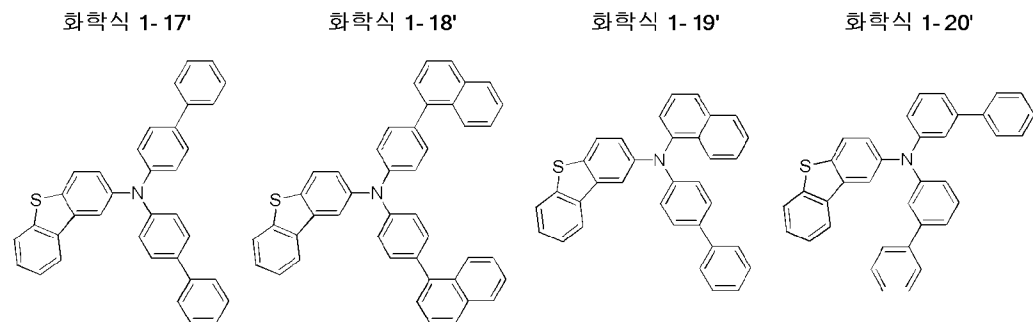
[200]



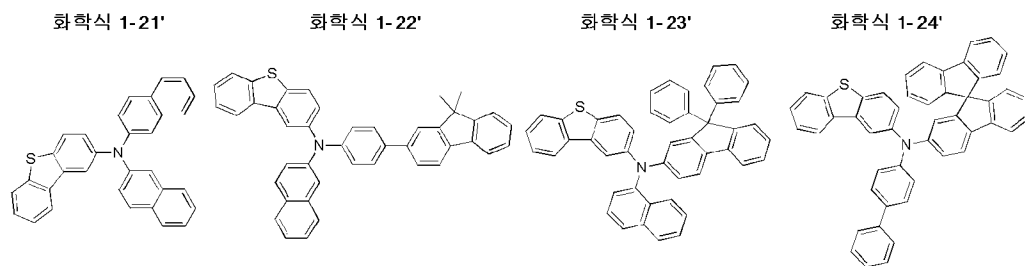
[201]



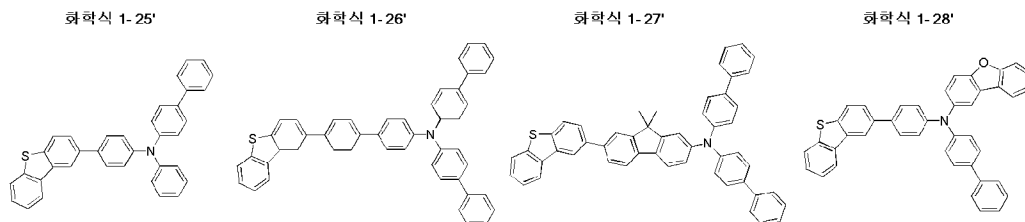
[202]



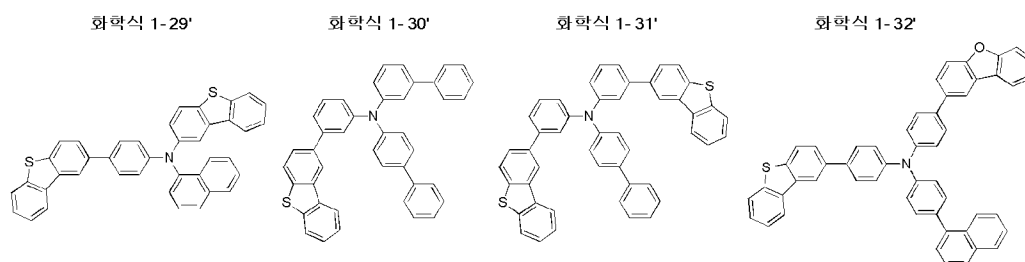
[203]



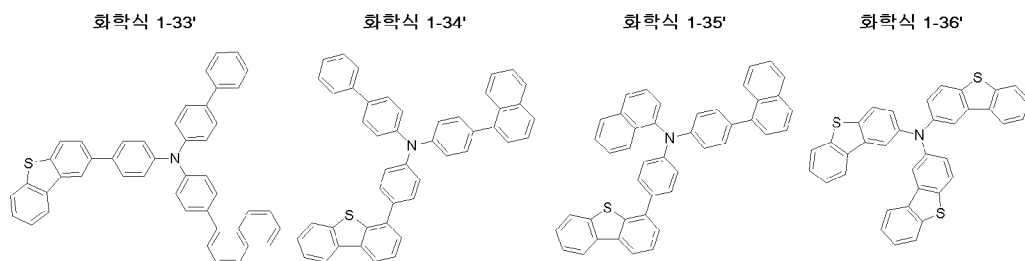
[204]



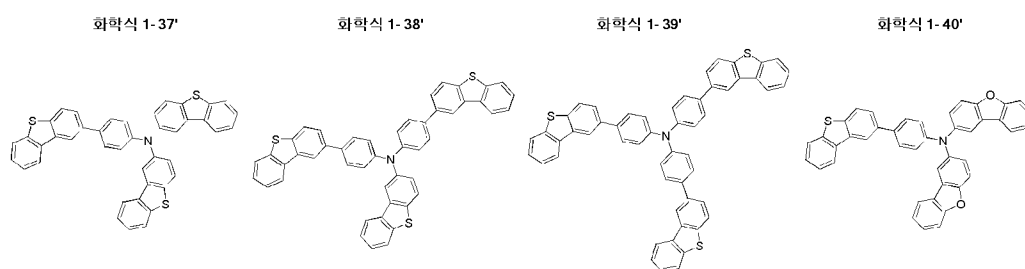
[205]



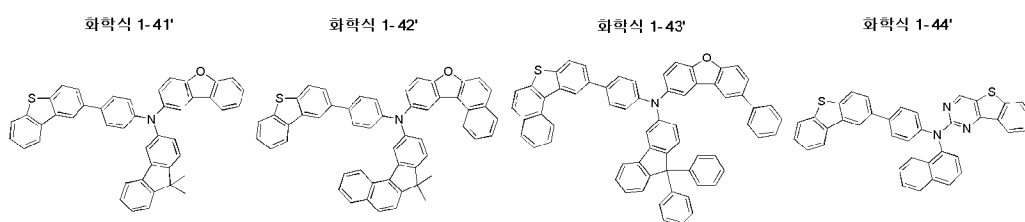
[206]



[207]

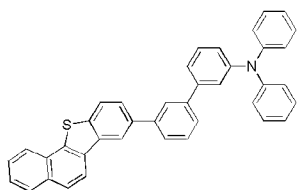


[208]

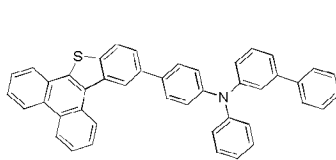


[209]

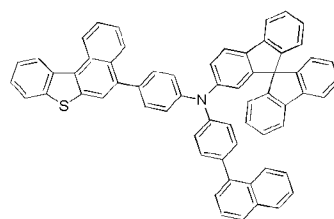
화학식 1-45'



화학식 1-46'

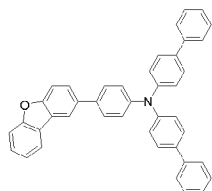


화학식 1-47'

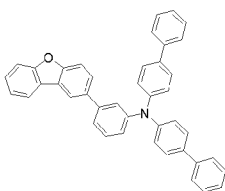


[210]

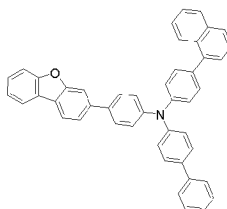
화학식 1-48'



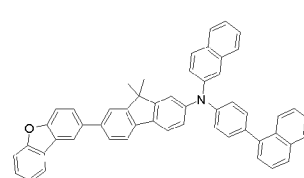
화학식 1-49'



화학식 1-50'

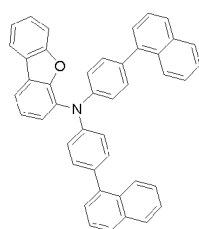


화학식 1-51'

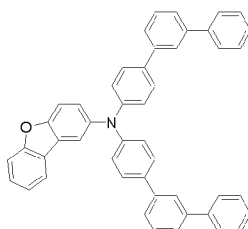


[211]

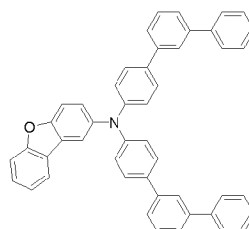
화학식 1-52'



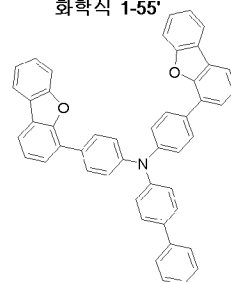
화학식 1-53'



화학식 1-54'

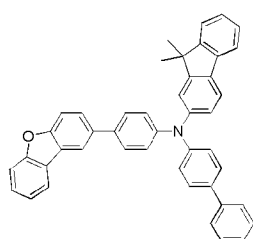


화학식 1-55'

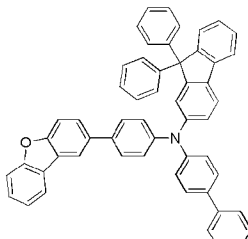


[212]

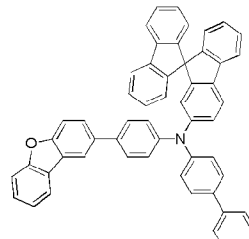
화학식 1-56'



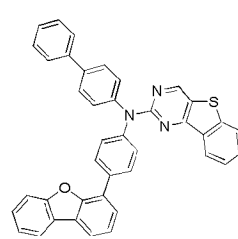
화학식 1-57'



화학식 1-58'

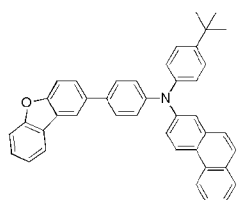


화학식 1-59'

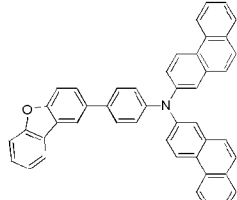


[213]

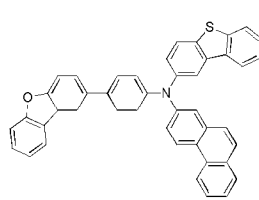
화학식 1-60'



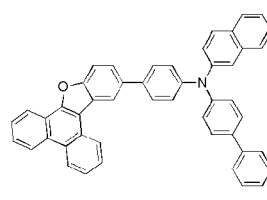
화학식 1-61'



화학식 1-62'

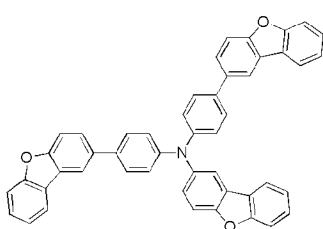


화학식 1-63'

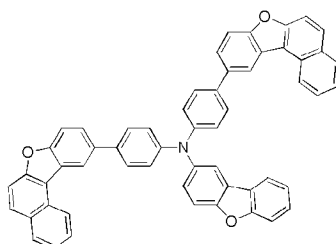


[214]

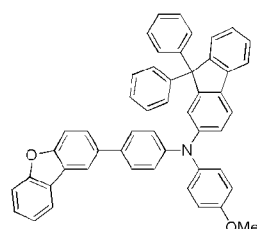
화학식 1-64'



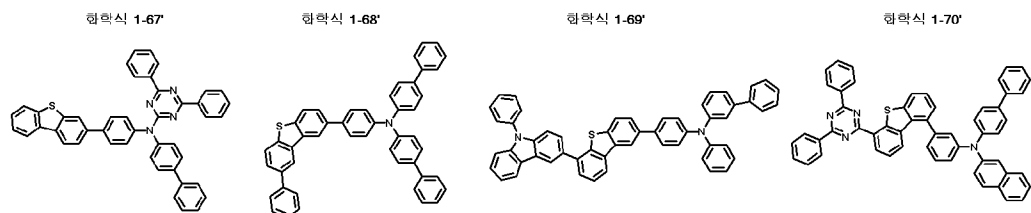
화학식 1-65'



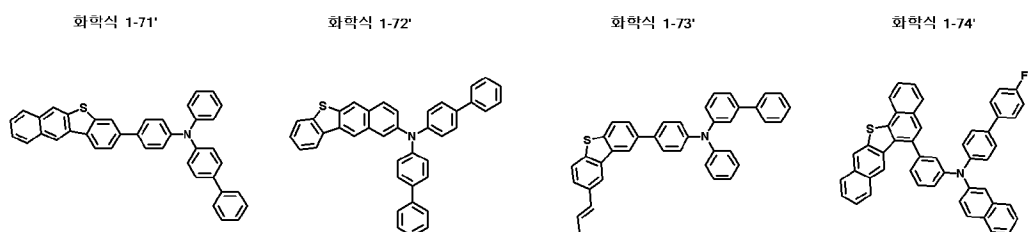
화학식 1-66'



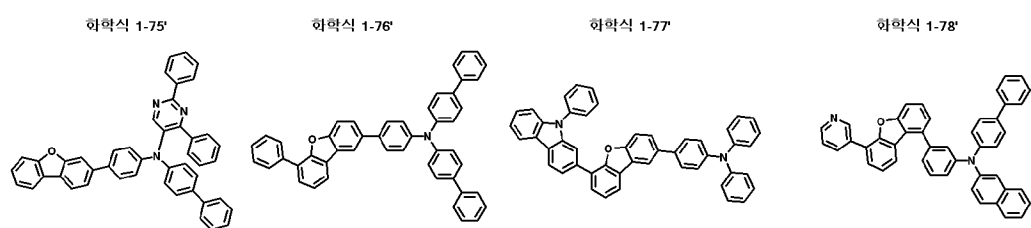
[215]



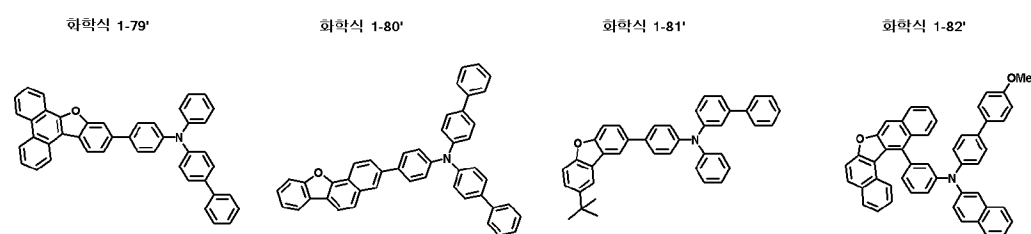
[216]



[217]



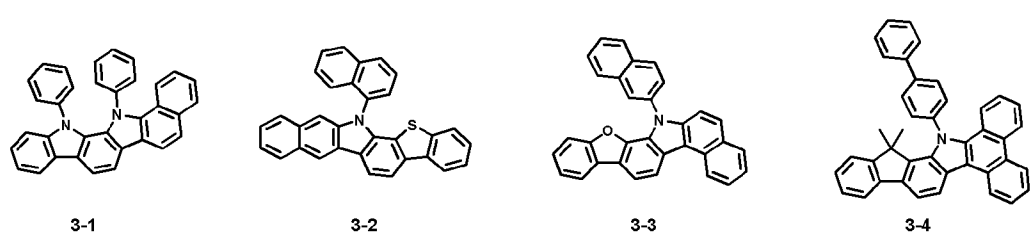
[218]



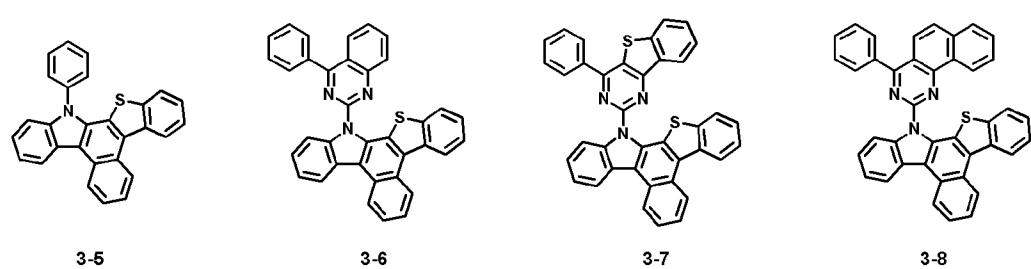
[219]

[220] 또한 본 발명은 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화합물 3-1 내지 3-86, P1-1 내지 P1-45, P2-1 내지 P2-10, P3-1 내지 P3-45, P4-1 내지 P4-10, P5-1 내지 P5-45, P6-1 내지 P6-15를 포함한다.

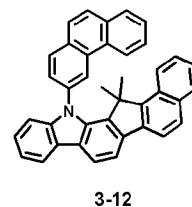
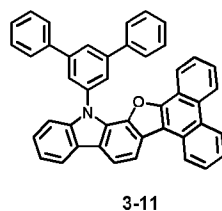
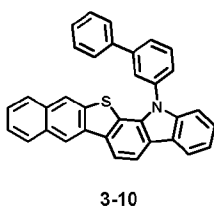
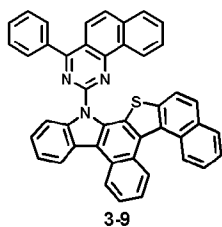
[221]



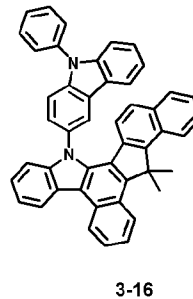
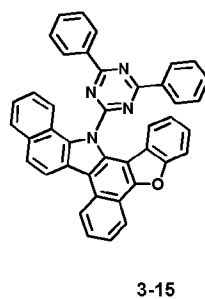
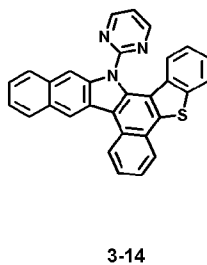
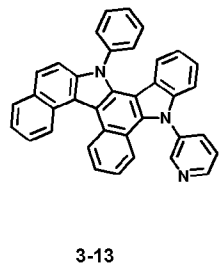
[222]



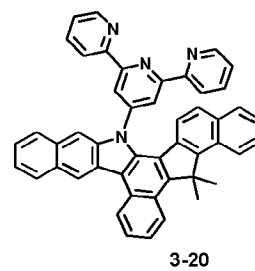
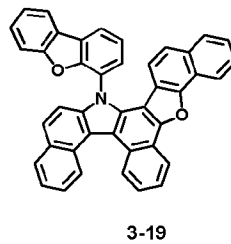
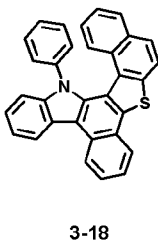
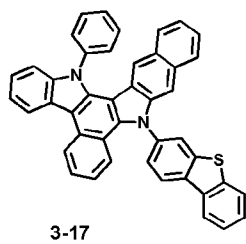
[223]



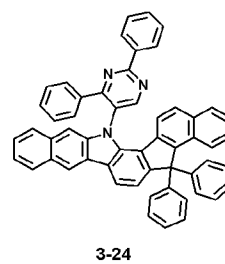
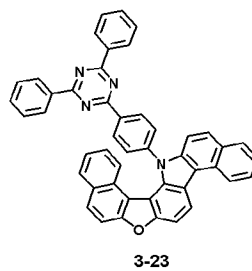
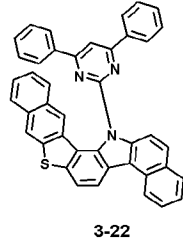
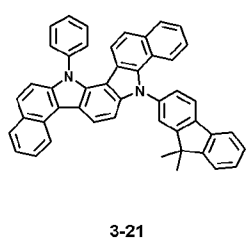
[224]



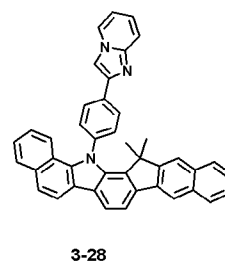
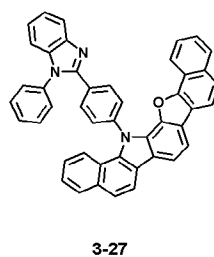
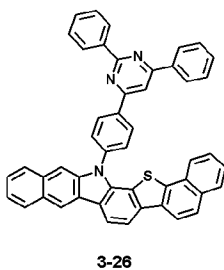
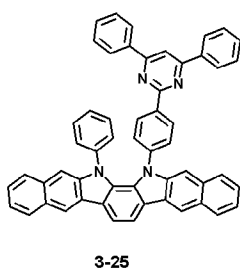
[225]



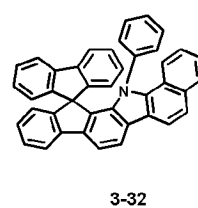
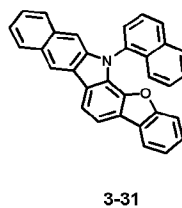
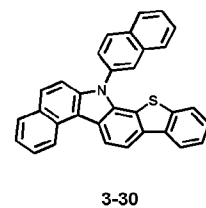
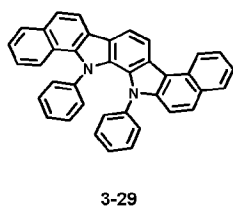
[226]



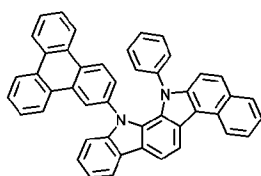
[227]



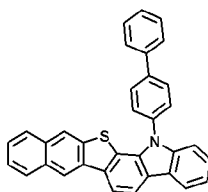
[228]



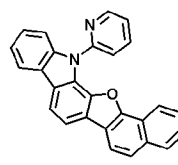
[229]



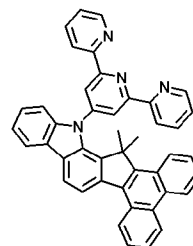
3-33



3-34

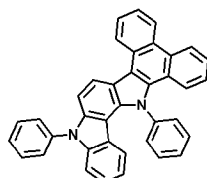


3-35

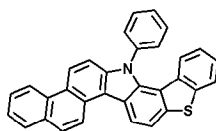


3-36

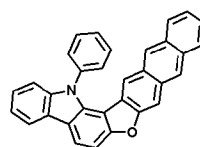
[230]



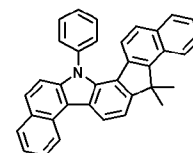
3-37



3-38

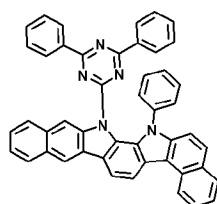


3-39

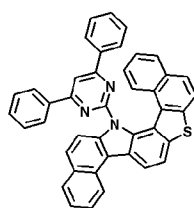


3-40

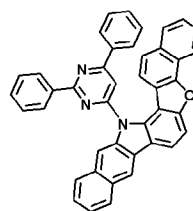
[231]



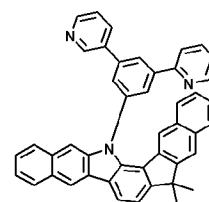
3-41



3-42

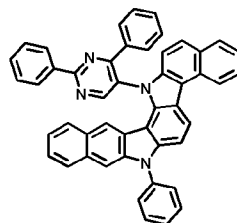


3-43

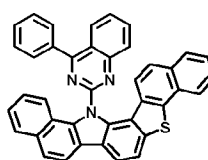


3-44

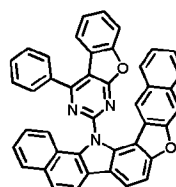
[232]



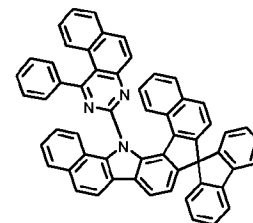
3-45



3-46

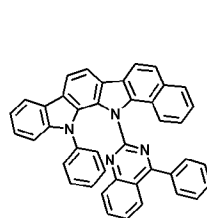


3-47

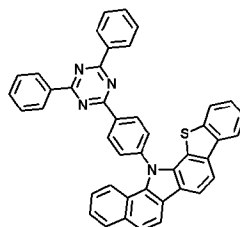


3-48

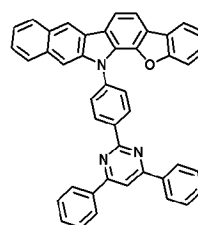
[233]



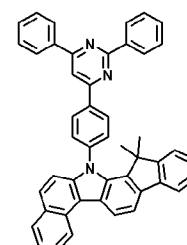
3-49



3-50

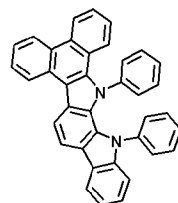


3-51

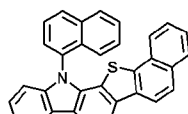


3-52

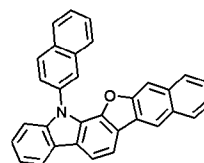
[234]



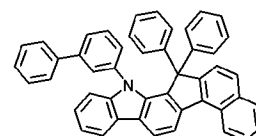
3-53



3-54

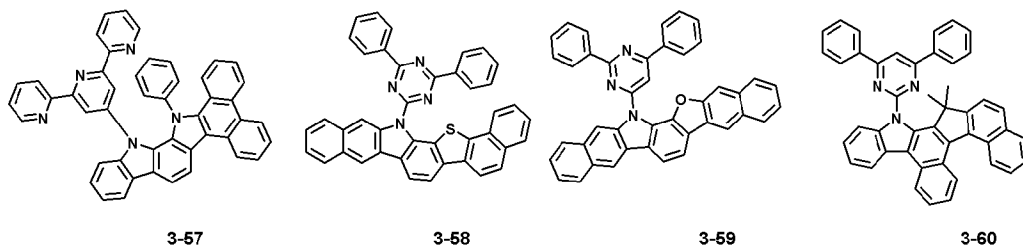


3-55

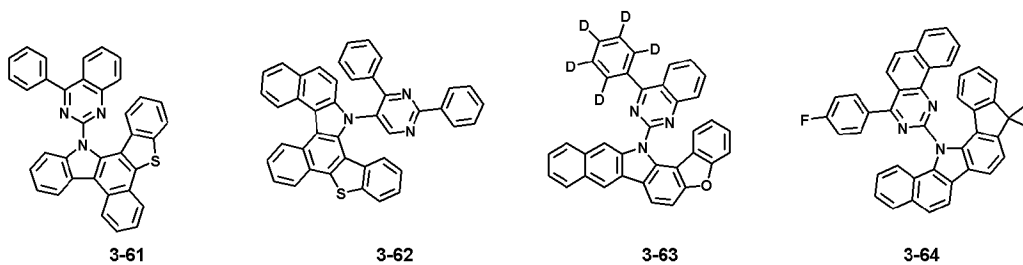


3-56

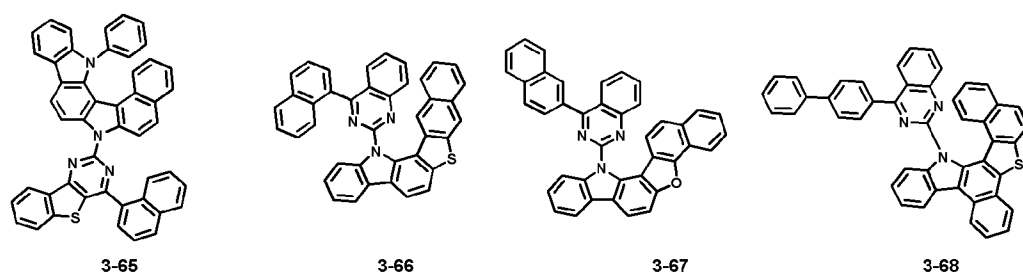
[235]



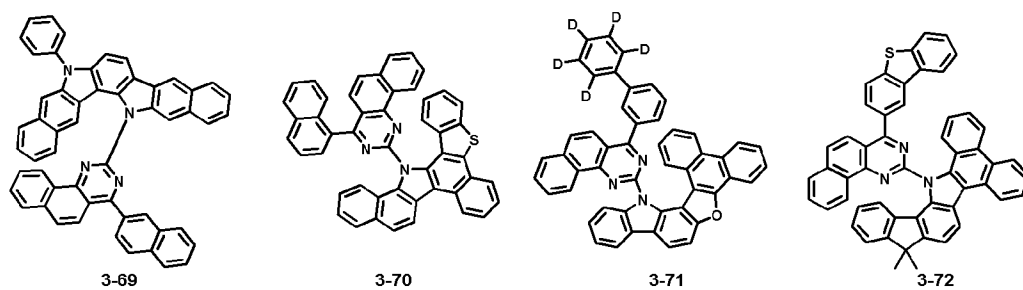
[236]



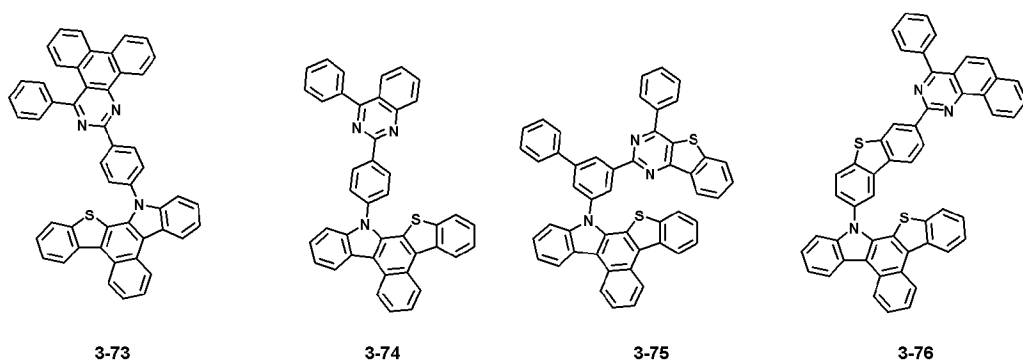
[237]



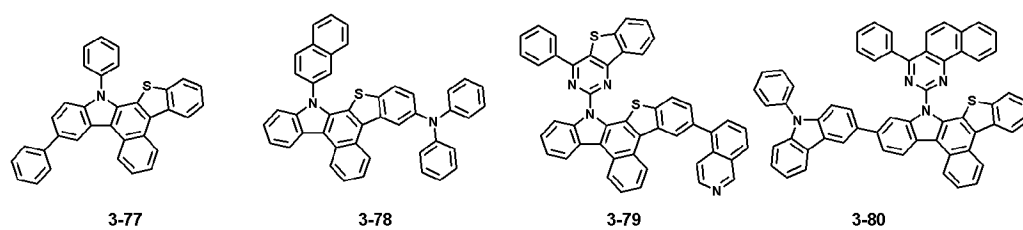
[238]



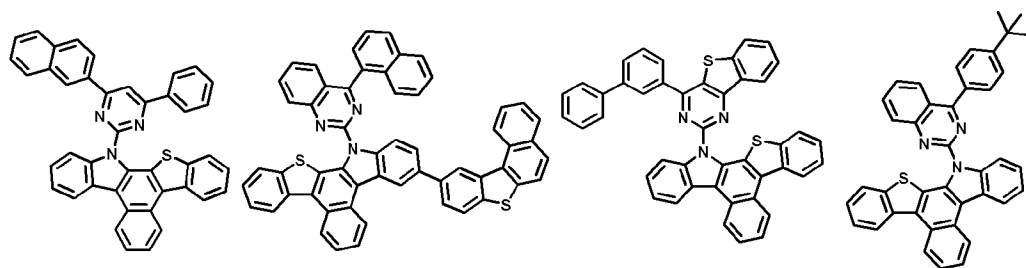
[239]



[240]



[241]



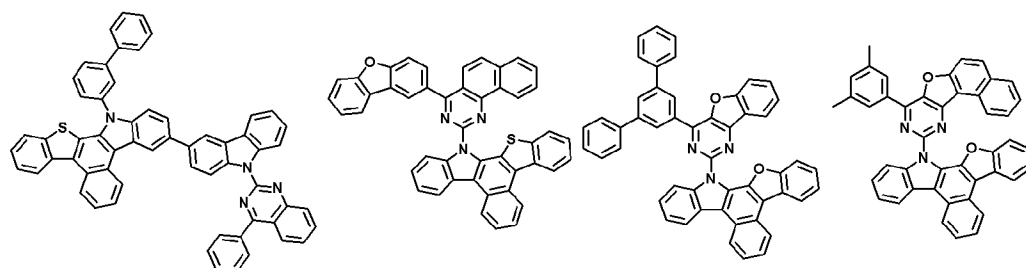
3-81

3-82

3-83

3-84

[242]



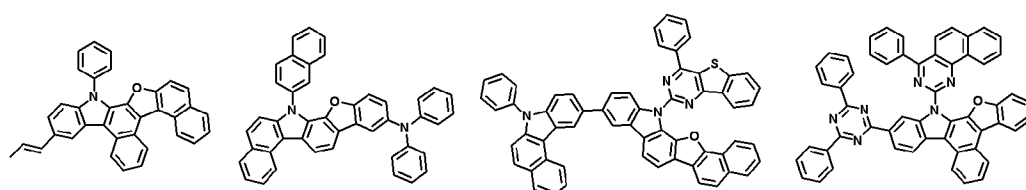
3-85

3-86

3-87

3-88

[243]



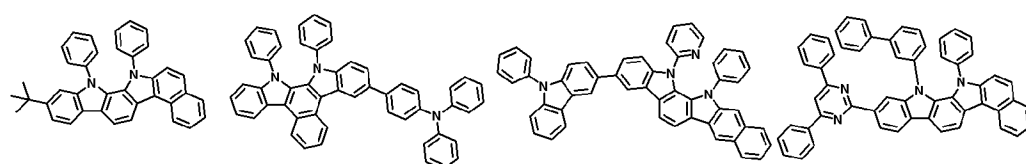
3-89

3-90

3-91

3-92

[244]



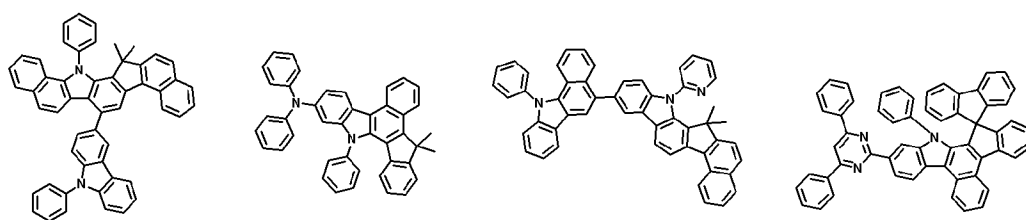
3-93

3-94

3-95

3-96

[245]



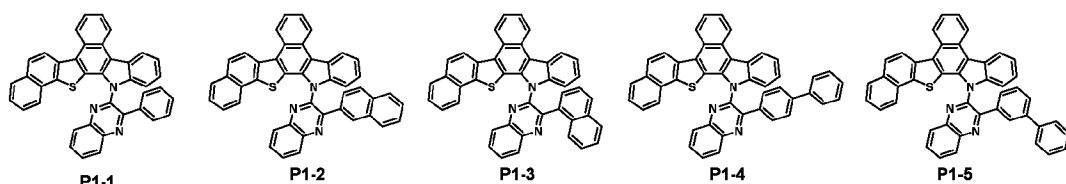
3-97

3-98

3-99

3-100

[246]



P1-1

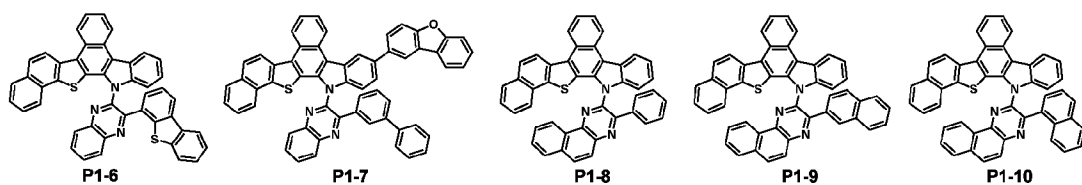
P1-2

P1-3

P1-4

P1-5

[247]



P1-6

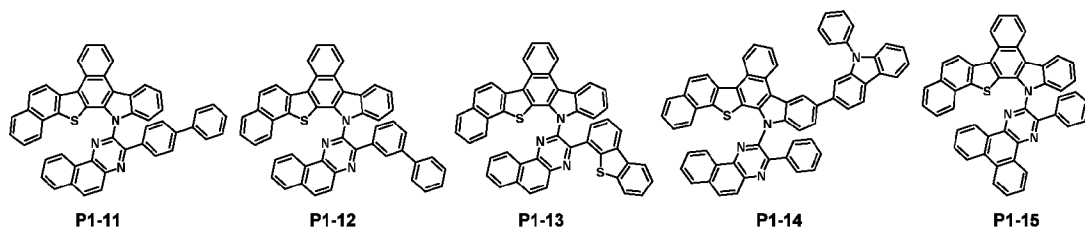
P1-7

P1-8

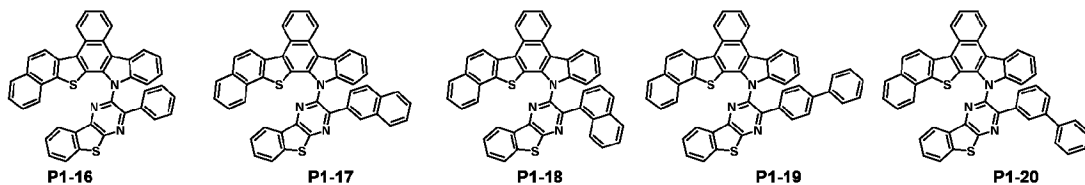
P1-9

P1-10

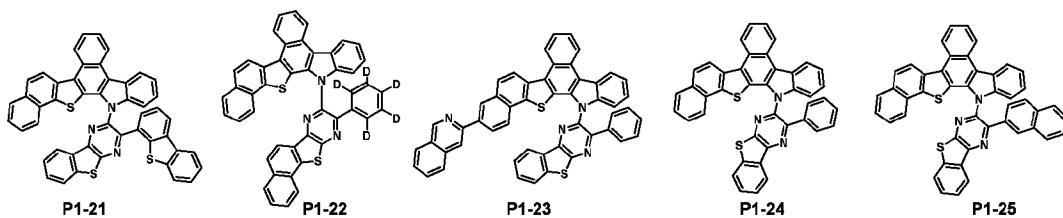
[248]



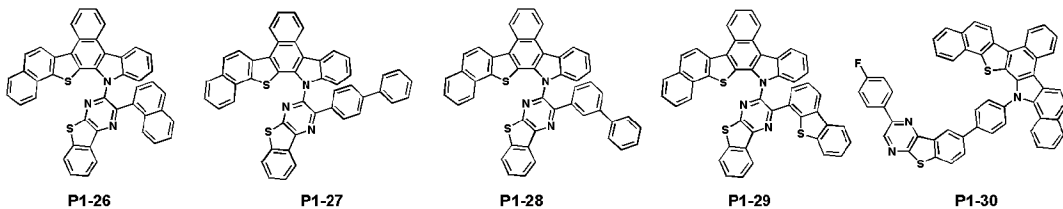
[249]



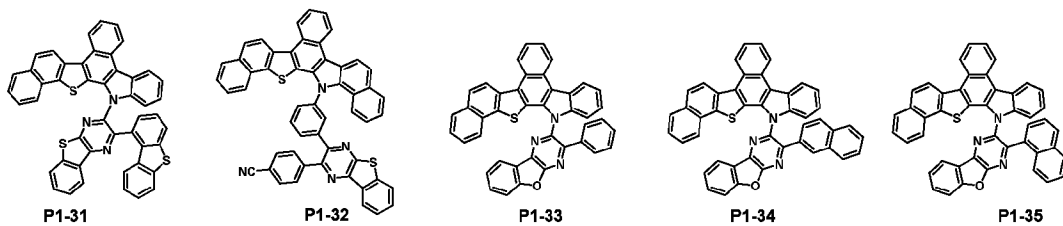
[250]



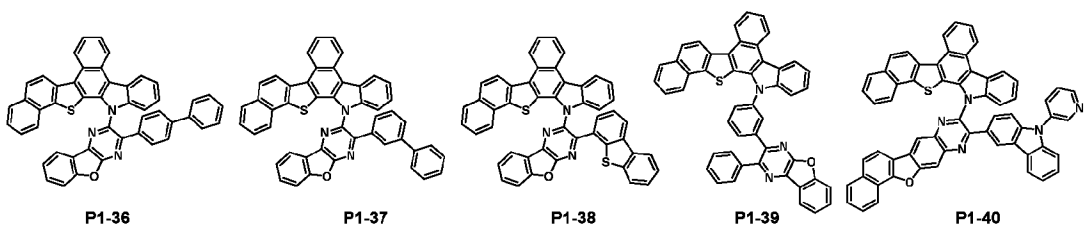
[251]



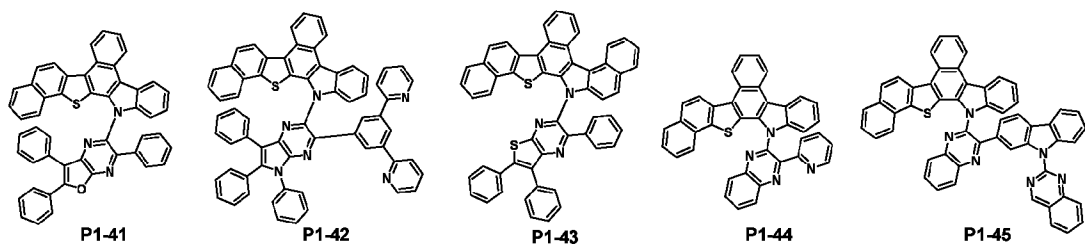
[252]



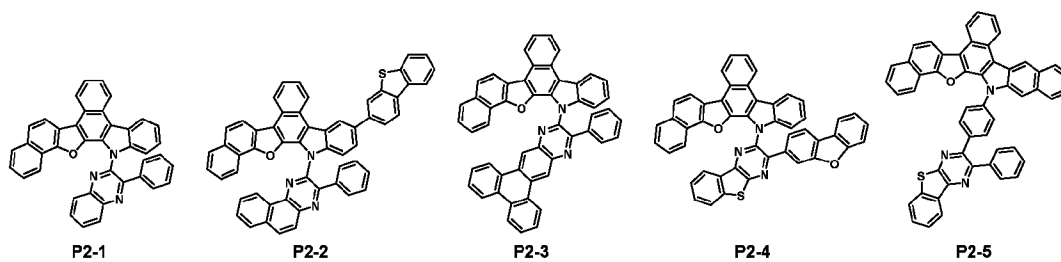
[253]



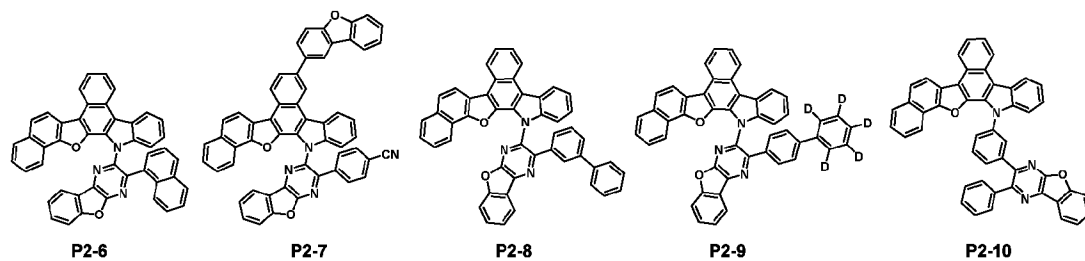
[254]



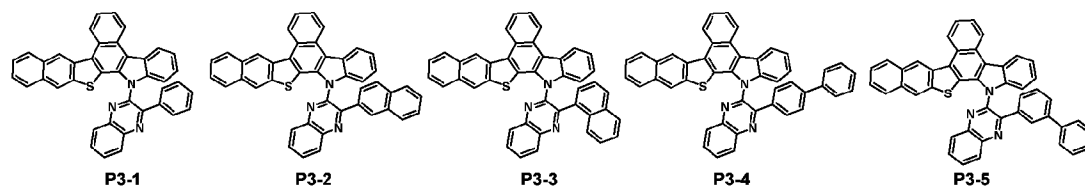
[255]



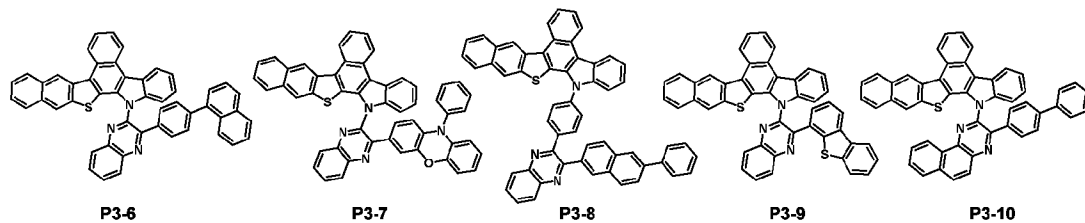
[256]



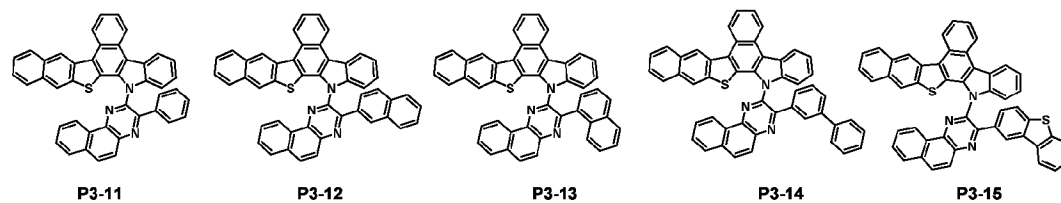
[257]



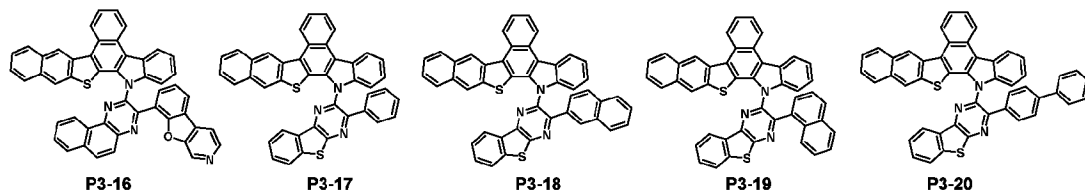
[258]



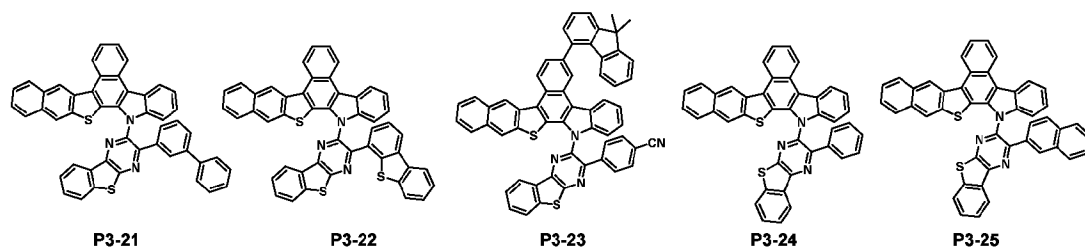
[259]



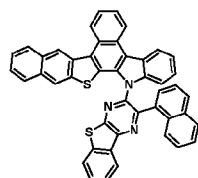
[260]



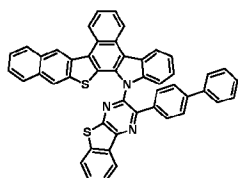
[261]



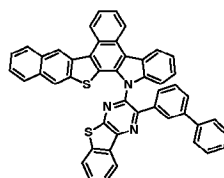
[262]



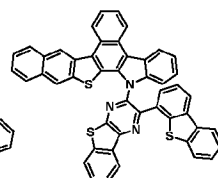
P3-26



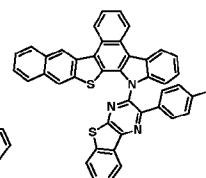
P3-27



P3-28

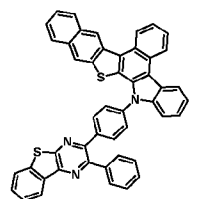


P3-29

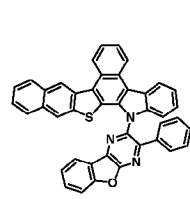


P3-30

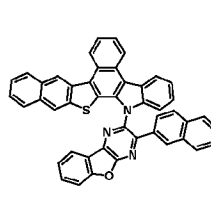
[263]



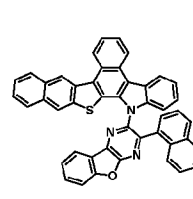
P3-31



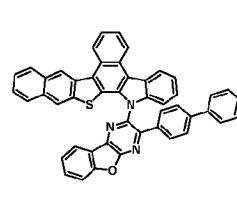
P3-32



P3-33

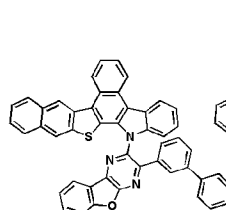


P3-34

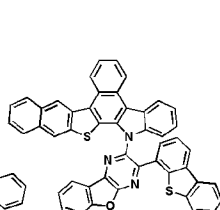


P3-35

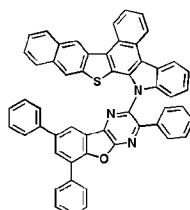
[264]



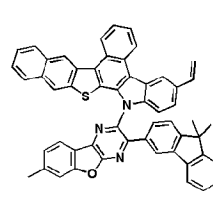
P3-36



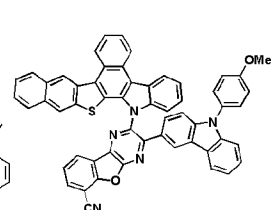
P3-37



P3-38

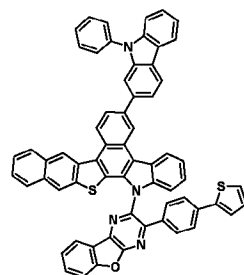


P3-39

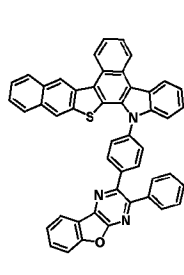


P3-40

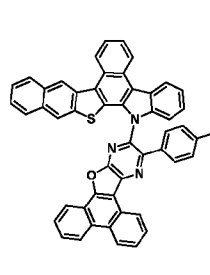
[265]



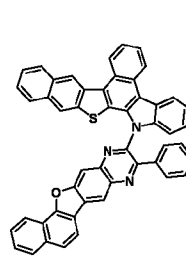
P3-41



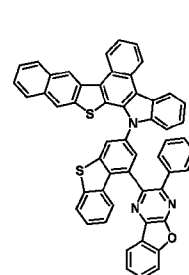
P3-42



P3-43

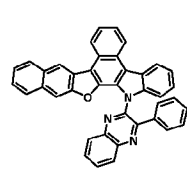


P3-44

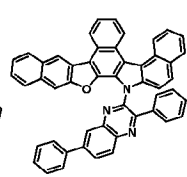


P3-45

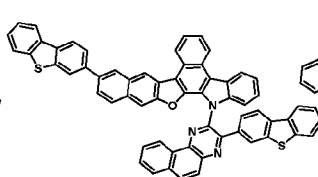
[266]



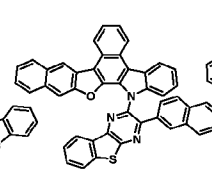
P4-1



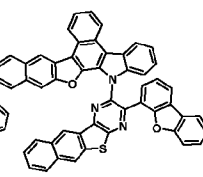
P4-2



P4-3

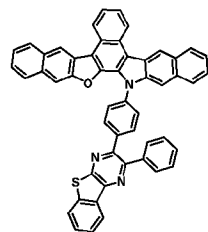


P4-4

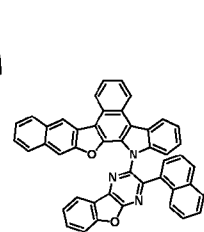


P4-5

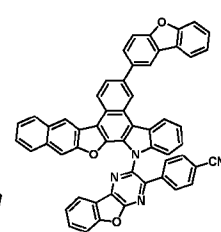
[267]



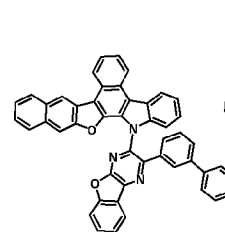
P4-6



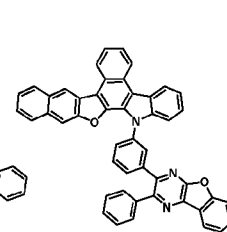
P4-7



P4-8

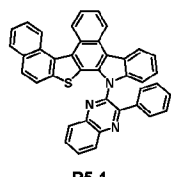


P4-9

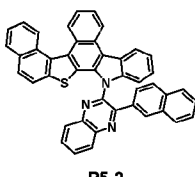


P4-10

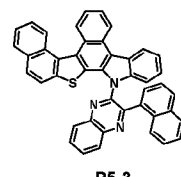
[268]



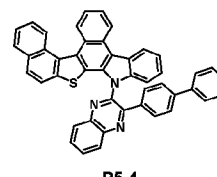
P5-1



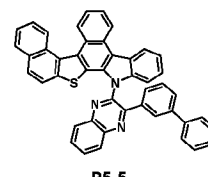
P5-2



P5-3

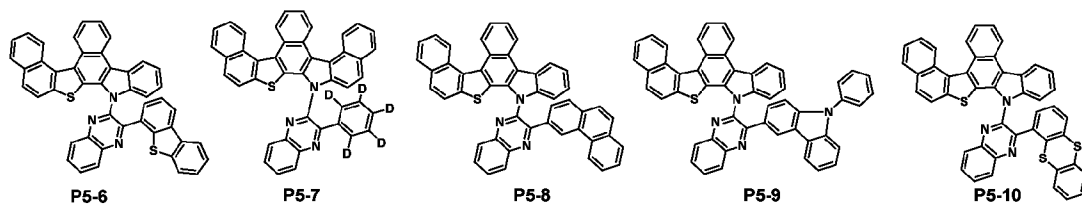


P5-4

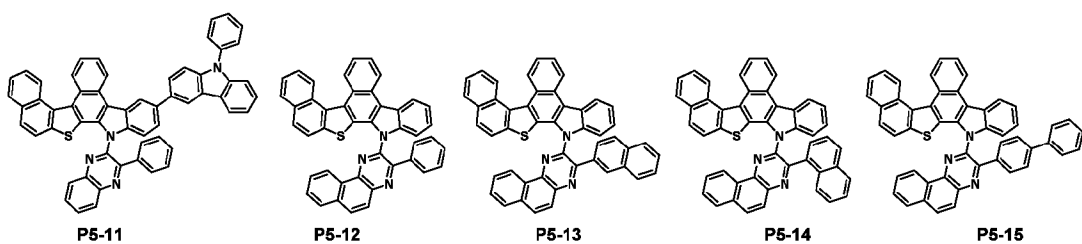


P5-5

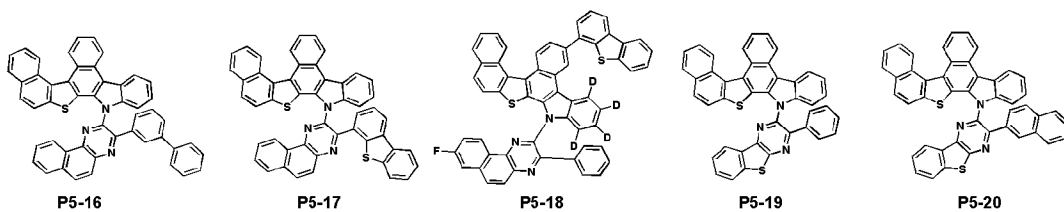
[269]



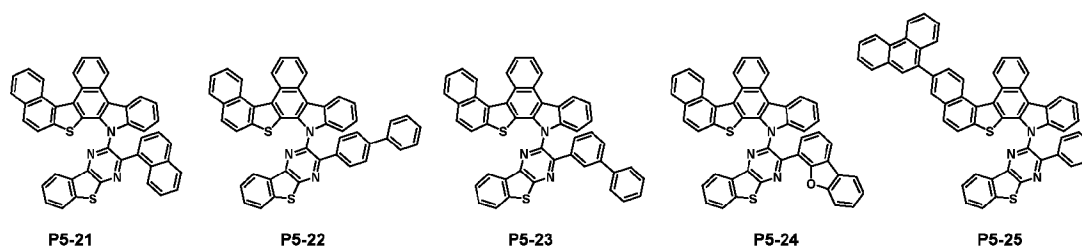
[270]



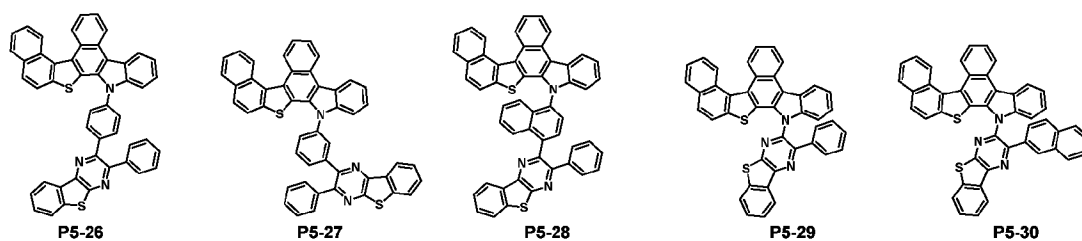
[271]



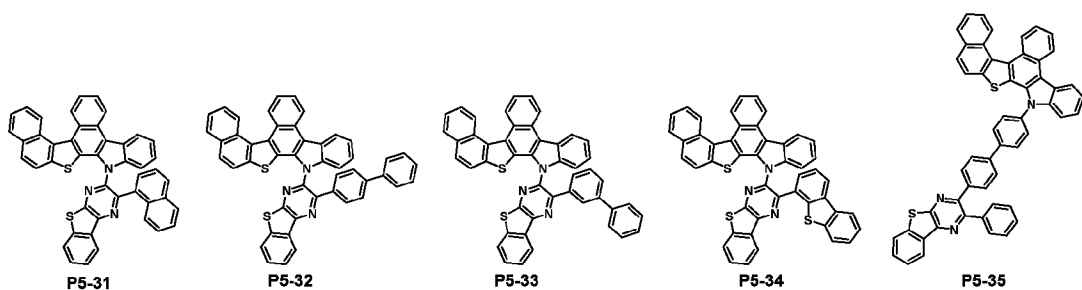
[272]



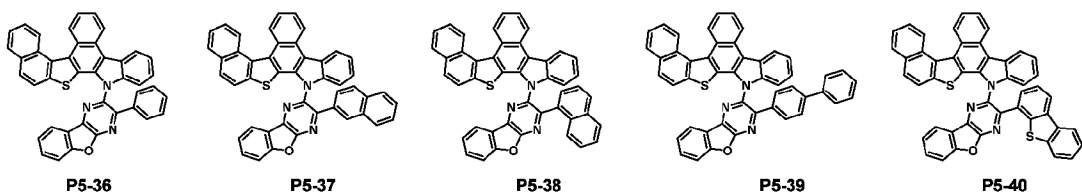
[273]



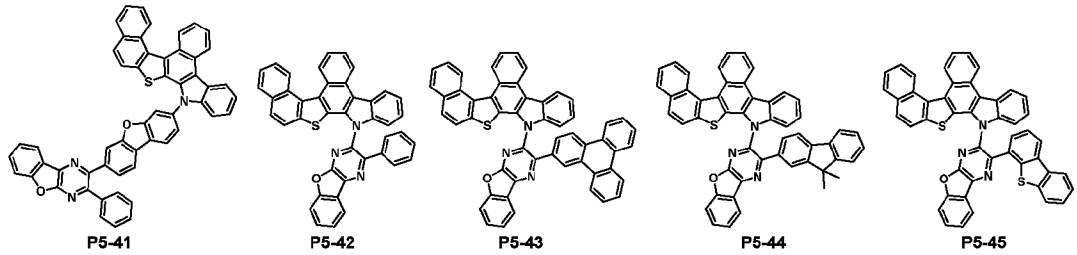
[274]



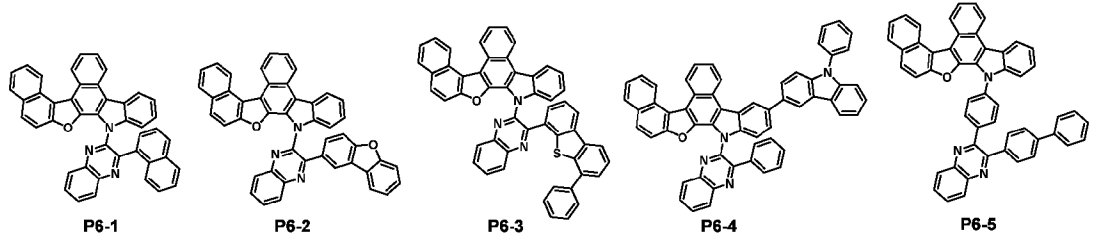
[275]



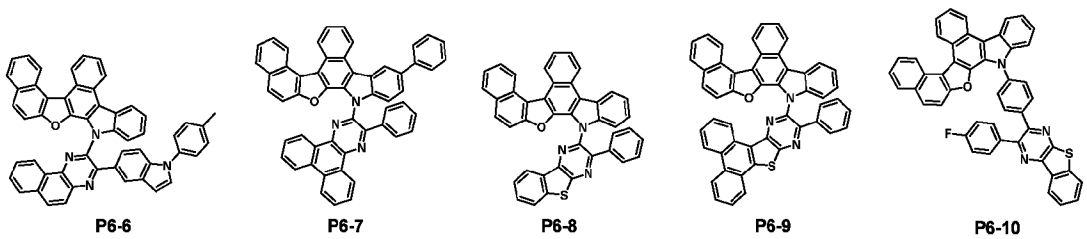
[276]



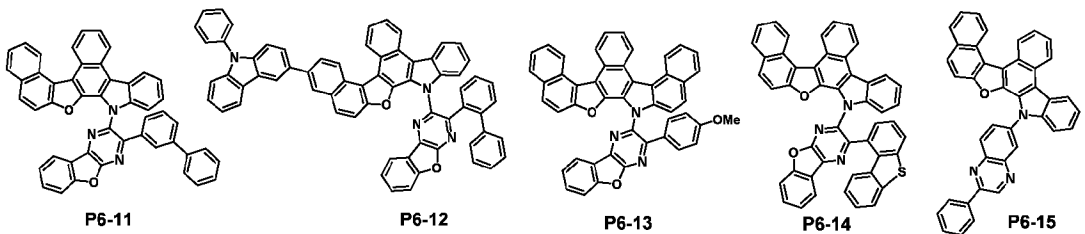
[277]



[278]



[279]



[280]

[281] 도 1을 참조하여 설명하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(120)과 제 2전극(180) 사이에 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[282] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 전자수송보조층, 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[283] 또한, 미도시하였지만 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층을 더 포함할 수 있다.

[284] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택

및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[285] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.

[286] 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.

[287]

[288] 이에 따라, 본 발명은 상기 유기전기소자에서 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[289] 또한 본 발명에서 상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 롤투롤 공정 중 어느 하나에 의해 형성되고, 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.

[290] 또 다른 구체적인 예로서, 본 발명은 상기 유기물층에서 상기 발광층이 인광 발광층인 유기전기소자를 제공한다.

[291] 또한 본 발명은 상기 유기물층의 발광층에서 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물이 1:9 내지 9:1 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 포함되는 유기전기소자를 제공한다.

[292] 또한, 본 발명은 상기 유기물층의 발광층에서 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물이 1:9 내지 5:5 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다. 보다 바람직하게는 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물의 혼합비율이 2:8 또는 3:7로 발광층에 포함된다.

[293]

[294] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[295] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue)

발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stack) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

[296] 또한 본 발명은 상기한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치 ; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치를 제공한다.

[297] 또 다른 측면에서 상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치를 본 발명에서 제공한다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말기일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[298]

[299] 이하에서, 본 발명의 상기 화학식 (1),(2)로 표시되는 화합물의 합성에 및 본 발명의 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명의 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[300]

[301] [합성예 1]

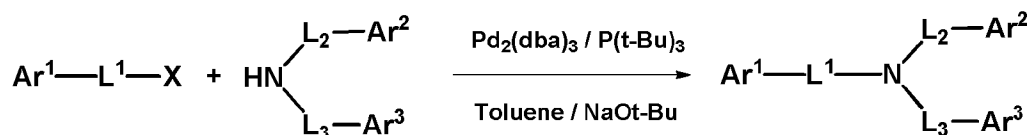
[302]

[303] 본 발명에 따른 화학식 (1)로 표시되는 화합물(final product 1)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1 과 Sub 2가 반응하여 제조된다.

[304]

[305] <반응식 1>

[306]



Sub 1

Sub 2

Final Products 1

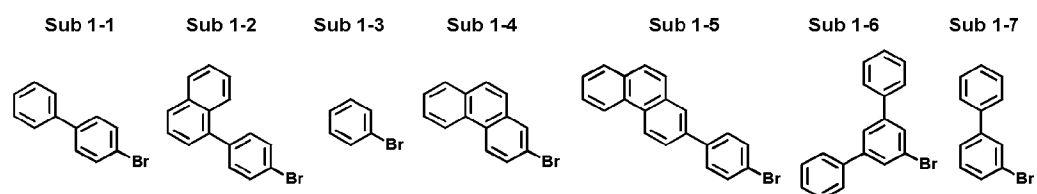
X = Br, I, Cl

[307]

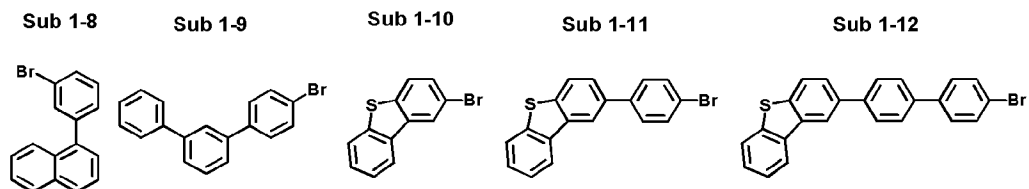
[308] Sub 1 의 예시

[309] 반응식 1의 Sub 1의 예시는 하기와 같으며 이에 한정된 것은 아니다.

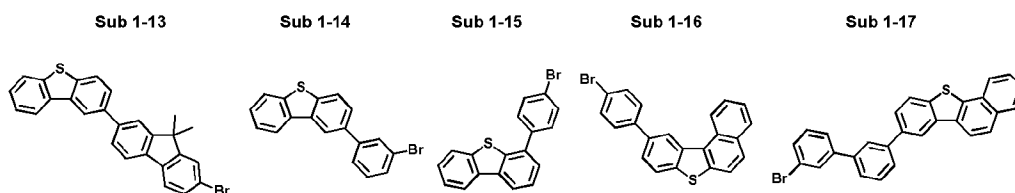
[310]



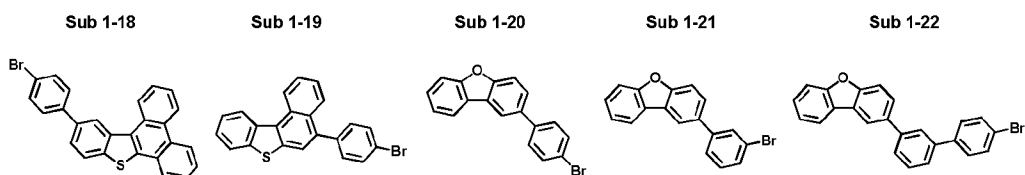
[311]



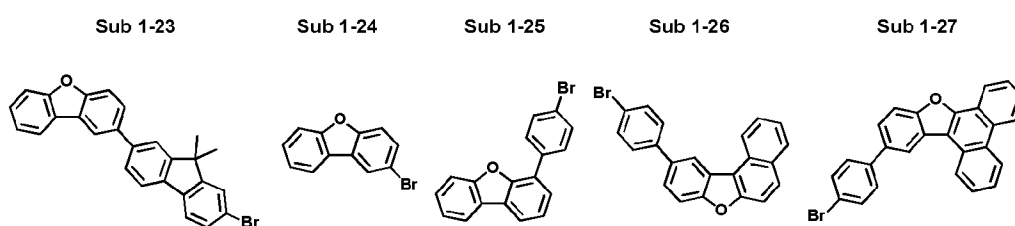
[312]



[313]



[314]



[315]

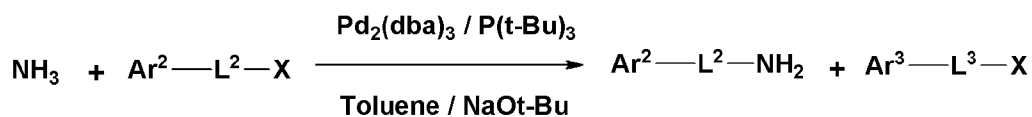
[316] Sub 2의 합성 예시

[317] 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[318]

[319] <반응식 2>

[320]

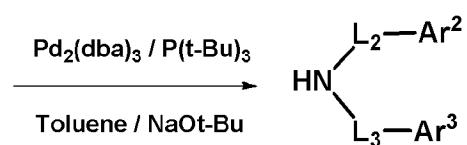


Sub 2-1'
X = Br, I, Cl

Sub 2-2'

Sub 2-3'
X = Br, I, Cl

[321]

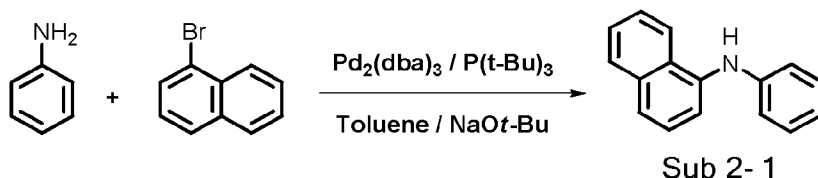


Sub 2

[322]

[323] [Sub 2-1의 예시]

[324]

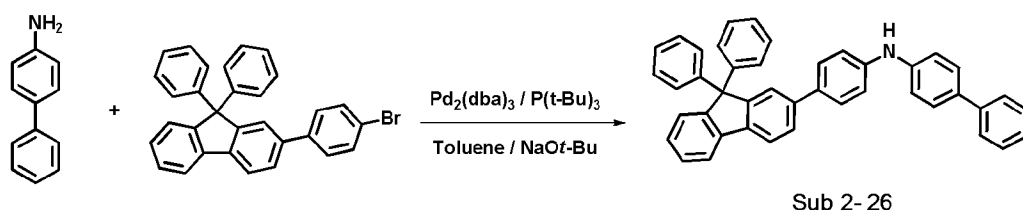


[325] 둥근바닥플라스크에 Aniline (15 g, 161.1 mmol), 1-bromonaphthalene (36.7 g, 177.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (7.37 g, 8.05 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (3.26 g, 16.1 mmol), NaOt-Bu (51.08 g, 531.5 mmol), toluene (1690 mL)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 2-1를 25.4 g 얻었다. (수율: 72%)

[326]

[327] [Sub 2-26의 예시]

[328]



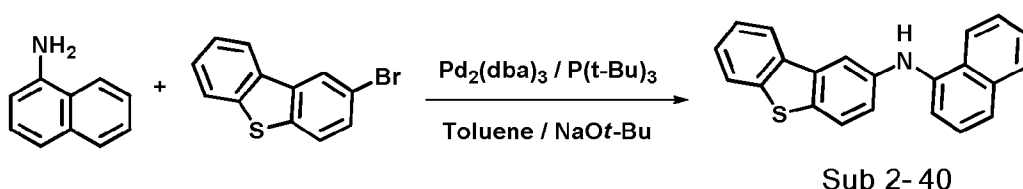
[329] 둥근바닥플라스크에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (15 g, 88.6 mmol), 2-(4-bromophenyl)-9,9-diphenyl-9H-fluorene (46.2 g, 97.5 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.06 g, 4.43 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.8 g, 8.86 mmol), NaOt-Bu (28.1 g, 292.5 mmol), toluene (931 mL)을 상기 Sub 2-1과 동일한 방법으로 실험하여 Sub 2-26을 34.9 g 얻었다.

[330] (수율 : 70%)

[331]

[332] [Sub 2-40의 예시]

[333]



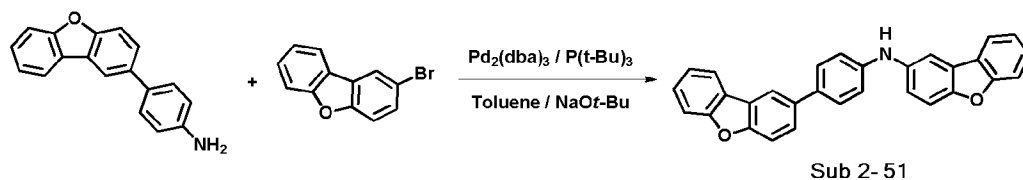
[334] 둥근바닥플라스크에 naphthalen-1-amine (15 g, 104.8 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (30.3 g, 115.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.8 g, 5.24 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (2.12 g, 10.48 mmol), NaOt-Bu (33.22 g, 345.7 mmol), toluene (1100 mL)을 상기 Sub 2-1과 동일한 방법으로 실험하여 Sub 2-40을 24.9 g 얻었다.

[335] (수율 : 73%)

[336]

[337] [Sub 2-51의 예시]

[338]



[339]

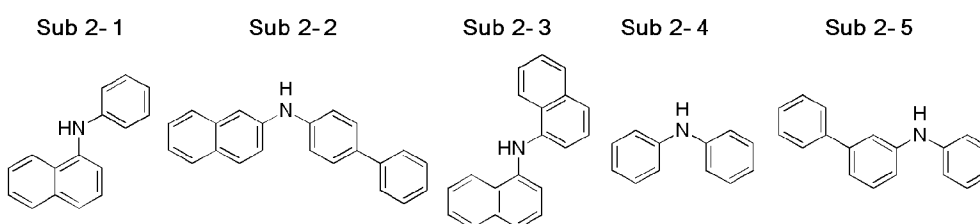
둥근바닥플라스크에 4-(dibenzo[b,d]furan-2-yl)aniline (15 g, 57.85 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (15.7 g, 63.63 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.65 g, 2.89 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.17 g, 5.78 mmol), NaOt-Bu (18.35 g, 190.9 mmol), toluene (607 mL)을 상기 Sub 2-1과 동일한 방법으로 실험하여 Sub 2-51을 17.2 g 얻었다. (수율 : 70%)

[340]

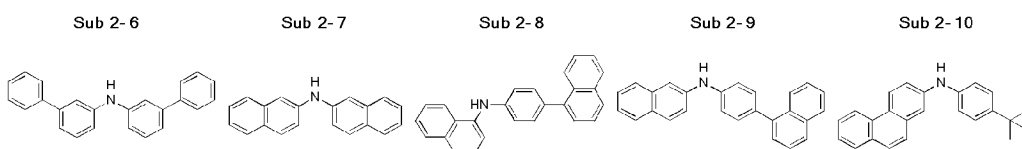
[341]

상기 합성법과 동일한 방법으로 하기 Sub 2-1 ~ Sub 2-52를 합성하였으며, Sub 2가 이에 한정되는 것은 아니다.

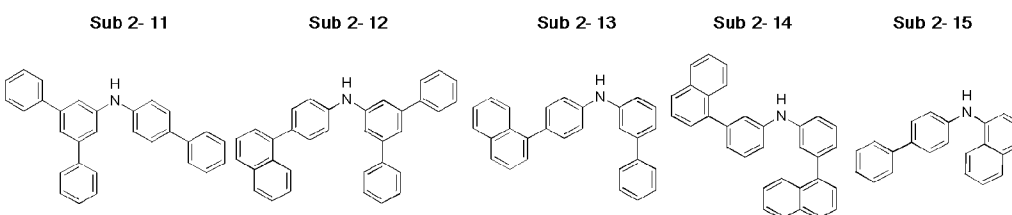
[342]



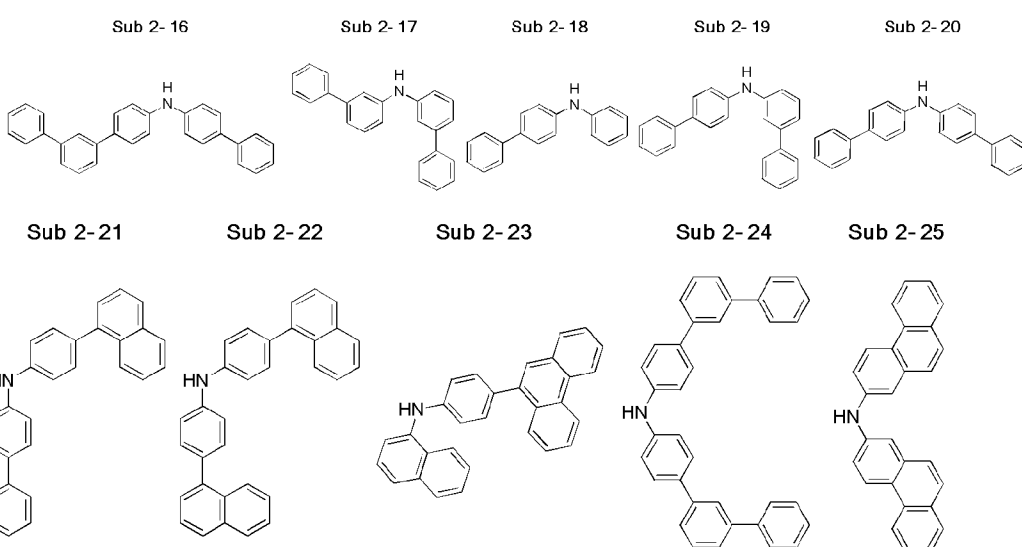
[343]



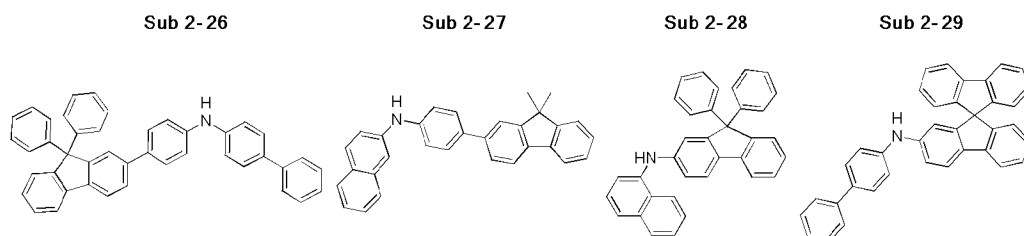
[344]



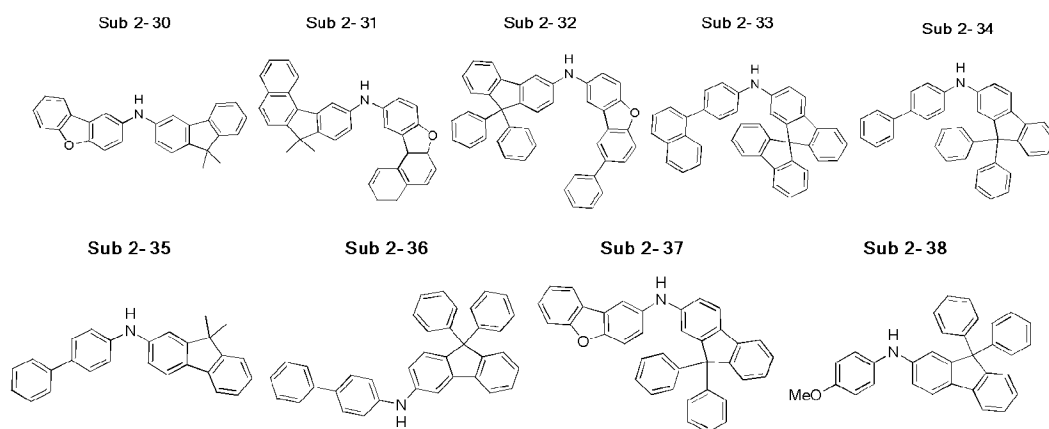
[345]



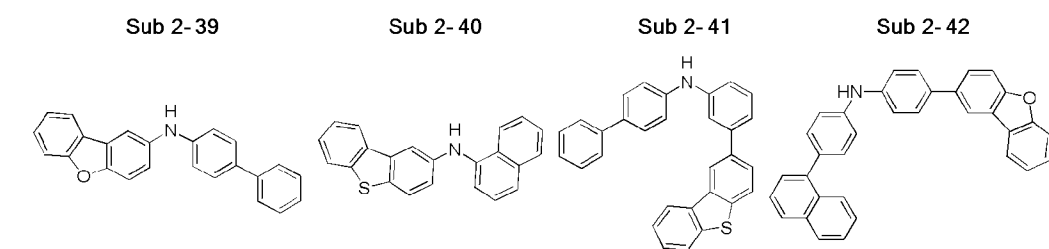
[346]



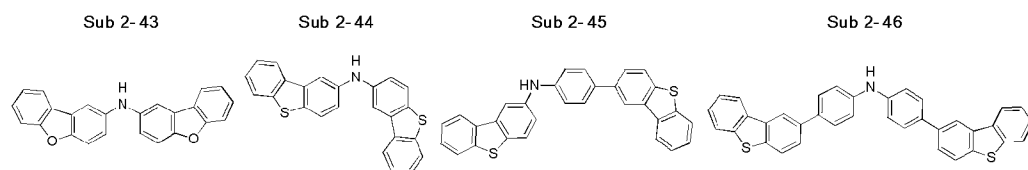
[347]



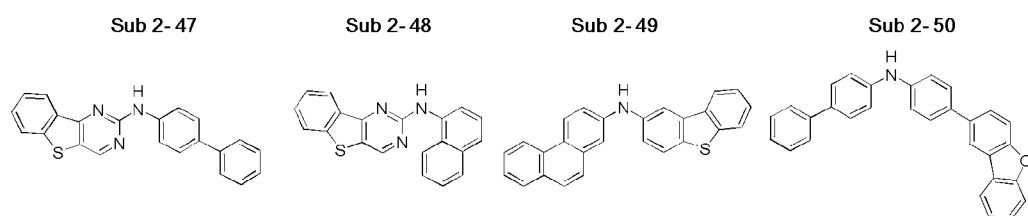
[348]



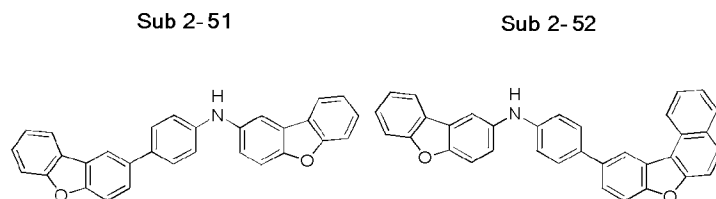
[349]



[350]



[351]



[352]

[353] [표1]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)	Sub 2-2	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.38))
Sub 2-3	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)	Sub 2-4	m/z=169.09(C ₁₂ H ₁₁ N=169.22))
Sub 2-5	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)	Sub 2-6	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41))
Sub 2-7	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)	Sub 2-8	m/z=345.15(C ₂₆ H ₁₉ N=345.44))
Sub 2-9	m/z=345.15(C ₂₆ H ₁₉ N=345.44)	Sub 2-10	m/z=325.18(C ₂₄ H ₂₃ N=325.45))
Sub 2-11	m/z=397.18(C ₃₀ H ₂₃ N=397.51)	Sub 2-12	m/z=447.20(C ₃₄ H ₂₅ N=447.57))
Sub 2-13	m/z=371.17(C ₂₈ H ₂₁ N=371.47)	Sub 2-14	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.53))
Sub 2-15	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.38)	Sub 2-16	m/z=397.18(C ₃₀ H ₂₃ N=397.51))
Sub 2-17	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 2-18	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.32))
Sub 2-19	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 2-20	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41))
Sub 2-21	m/z=371.17(C ₂₈ H ₂₁ N=371.47)	Sub 2-22	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.53))
Sub 2-23	m/z=395.17(C ₃₀ H ₂₁ N=395.49)	Sub 2-24	m/z=473.21(C ₃₆ H ₂₇ N=473.61))
Sub 2-25	m/z=369.15(C ₂₈ H ₁₉ N=369.46)	Sub 2-26	m/z=561.25(C ₄₃ H ₃₁ N=561.71))
Sub 2-27	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.54)	Sub 2-28	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.58))
Sub 2-29	m/z=483.20(C ₃₇ H ₂₅ N=483.60)	Sub 2-30	m/z=375.16(C ₂₇ H ₂₁ NO=375.46)
Sub 2-31	m/z=475.19(C ₃₅ H ₂₅ NO=475.58)	Sub 2-32	m/z=575.22(C ₄₃ H ₂₉ NO=575.70)

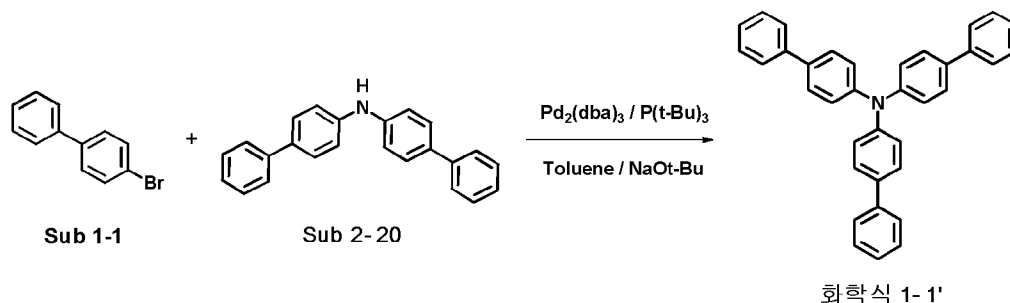
Sub 2-33	m/z=533.21(C ₄₁ H ₂₇ N=533.66)	Sub 2-34	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.62)
Sub 2-35	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.48)	Sub 2-36	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.62)
Sub 2-37	m/z=499.19(C ₃₇ H ₂₅ NO=499.60)	Sub 2-38	m/z=439.19(C ₃₂ H ₂₅ NO=439.55)
Sub 2-39	m/z=335.13(C ₂₄ H ₁₇ NO=335.40)	Sub 2-40	m/z=325.09(C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)
Sub 2-41	m/z=427.14(C ₃₀ H ₂₁ NS=427.56)	Sub 2-42	m/z=461.18(C ₃₄ H ₂₃ NO=461.55)
Sub 2-43	m/z=349.11(C ₂₄ H ₁₅ NO ₂ =349.38)	Sub 2-44	m/z=381.06(C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)
Sub 2-45	m/z=457.10(C ₃₀ H ₁₉ NS ₂ =457.61)	Sub 2-46	m/z=533.13(C ₃₆ H ₂₃ NS ₂ =533.70)
Sub 2-47	m/z=353.10(C ₂₂ H ₁₅ N ₃ S=353.44)	Sub 2-48	m/z=327.0(C ₂₀ H ₁₃ N ₃ S=327.40)
Sub 2-49	m/z=375.11(C ₂₆ H ₁₇ NS=375.48)	Sub 2-50	m/z=411.16(C ₃₀ H ₂₁ NO=411.49)
Sub 2-51	m/z=425.14(C ₃₀ H ₁₉ NO ₂ =425.48)	Sub 2-52	m/z=475.16(C ₃₄ H ₂₁ NO ₂ =475.54)

[354]

[355] Final Product 합성 예시

[356] 1-1' 의 합성

[357]



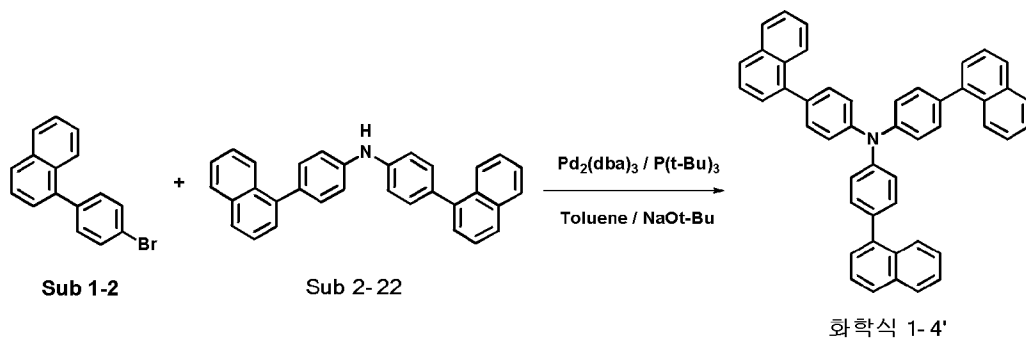
[358] 둥근바닥플라스크에 di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine (10 g, 31.1 mmol), 4-bromo-1,1'-biphenyl (8 g, 34.2 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.42 g, 1.56 mmol), P(t-Bu)₃ (0.63 g, 3.11 mmol), NaOt-Bu (9.87 g, 102.7 mmol), toluene (330 mL)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여

Product 1-1'를 11.3 g 얻었다. (수율: 77%)

[359]

[360] 1-4'의 합성

[361]

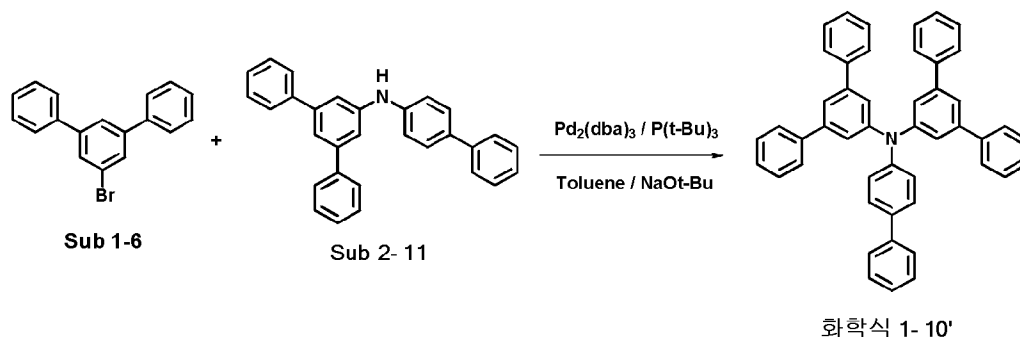


[362] 둥근바닥플라스크에 bis(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)amine (10 g, 23.7 mmol), 1-(4-bromophenyl)naphthalene (7.4 g, 26.1 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.09 g, 1.19 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.5 g, 2.4 mmol), NaOt-Bu (7.52 g, 78.3 mmol), toluene (250 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-4'를 11.5 g 얻었다. (수율 : 78%)

[363]

[364] 1-10'의 합성

[365]

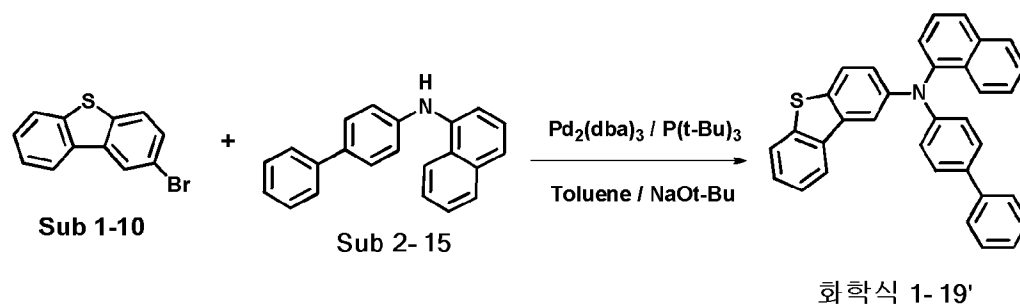


[366] 둥근바닥플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-[1,1':3,1''-terphenyl]-5'-amine (10 g, 25.2 mmol), 5'-bromo-1,1':3,1''-terphenyl (8.56 g, 27.7 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.15 g, 1.26 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.51 g, 2.52 mmol), NaOt-Bu (7.98 g, 83.02 mmol), toluene (264 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-10'을 11.8 g 얻었다. (수율 : 75%)

[367]

[368] 1-19'의 합성

[369]

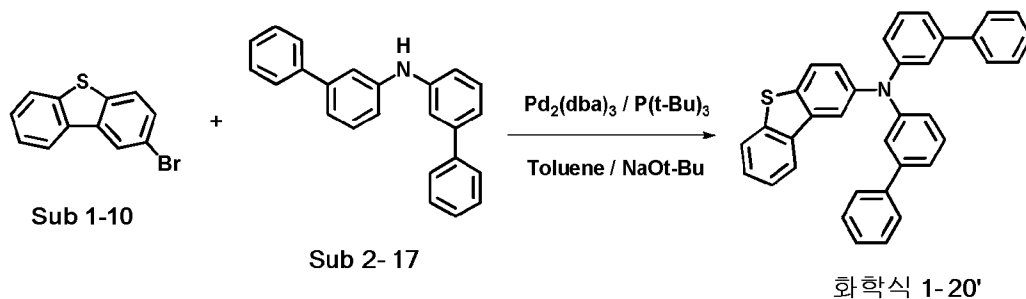


[370] 둥근바닥플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-1-amine (10 g, 33.6 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (9.8 g, 37.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.55 g, 1.7 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.68 g, 3.38 mmol), NaOt-Bu (10.76 g, 112 mmol), toluene (355 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-19'을 12.3 g 얻었다. (수율 : 76%)

[371]

[372] 1-20'의 합성

[373]

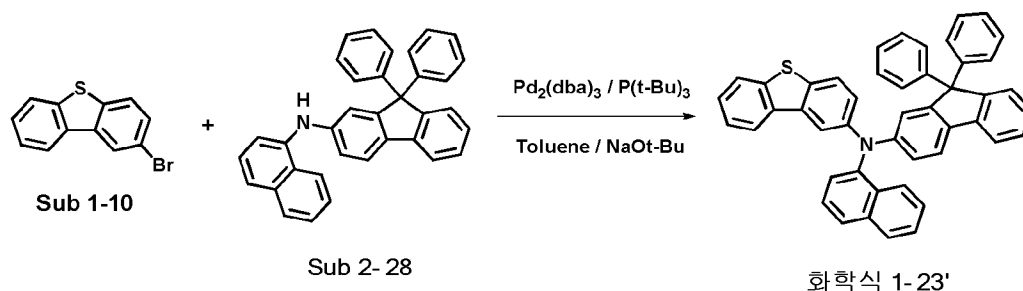


[374] 둥근바닥플라스크에 di([1,1'-biphenyl]-3-yl)amine (10 g, 31.1 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (9 g, 34.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.42 g, 1.56 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.63 g, 3.11 mmol), NaOt-Bu (9.87 g, 102.7 mmol), toluene (327 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-20'을 12.2g 얻었다. (수율 : 78%)

[375]

[376] 1-23'의 합성

[377]

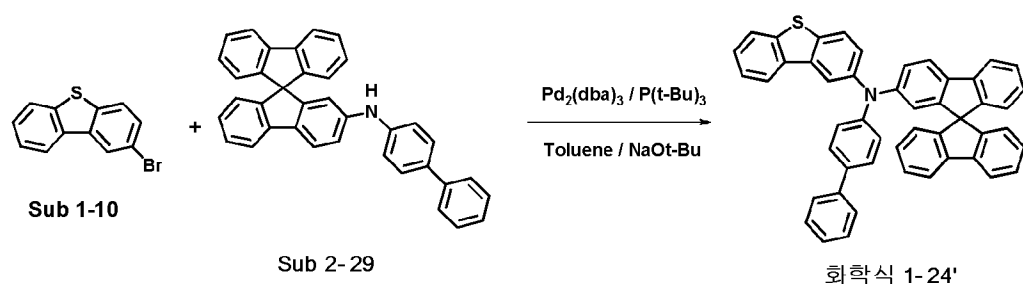


[378] 둥근바닥플라스크에 N-(naphthalen-1-yl)-9,9-diphenyl-9H-fluoren-2-amine (10 g, 21.8 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (6.3 g, 23.9 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1 g, 1.09 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.44 g, 2.2 mmol), NaOt-Bu (6.9 g, 71.8 mmol), toluene (230 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-23'을 10.2 g 얻었다. (수율 : 73%)

[379]

[380] 1-24'의 합성

[381]

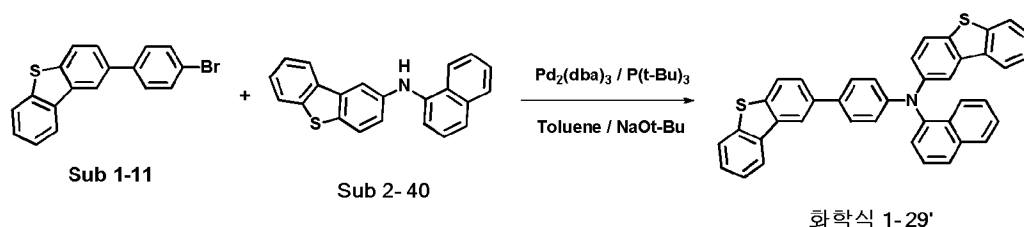


[382] 둥근바닥플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine (10 g, 20.7 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (6 g, 22.7 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.95 g, 1.03 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.42 g, 2.07 mmol), NaOt-Bu (6.55 g, 68.2 mmol), toluene (220 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-24'을 10.2 g 얻었다. (수율 : 74%)

[383]

[384] 1-29'의 합성

[385]

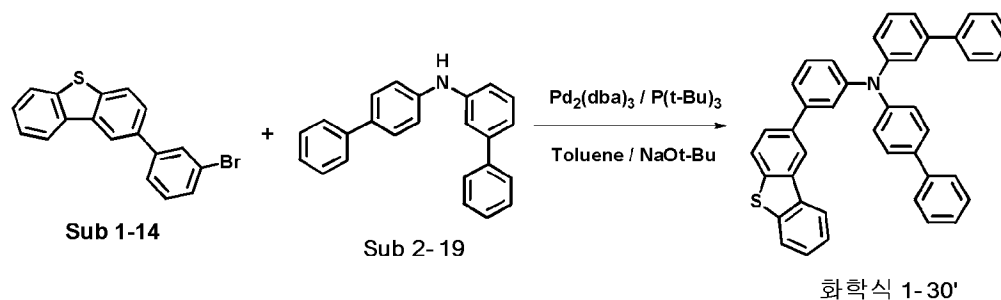


[386] 둥근바닥플라스크에 N-(naphthalen-1-yl)dibenzo[b,d]thiophen-2-amine (10 g, 30.7 mmol), 2-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (11.5 g, 33.8 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.41 g, 1.54 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.62 g, 3.07 mmol), NaOt-Bu (9.75 g, 101.4 mmol), toluene (325 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-29'을 12.9 g 얻었다. (수율 : 72%)

[387]

[388] 1-30'의 합성

[389]

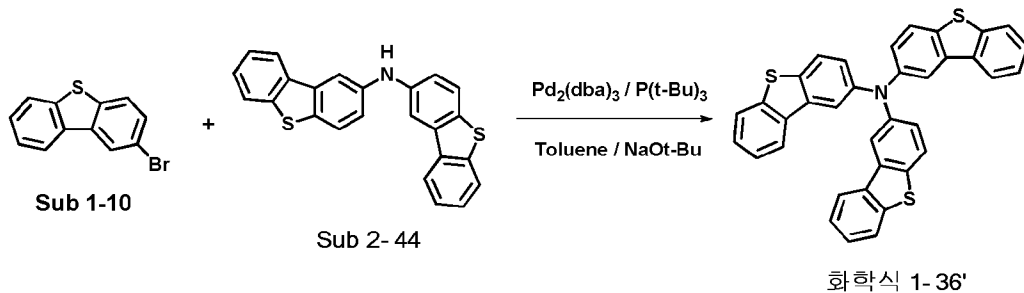


[390] 둥근바닥플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-[1,1'-biphenyl]-3-amine (10 g, 31.1 mmol), 2-(3-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (11.6 g, 34.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.42 g, 1.55 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.63 g, 3.11 mmol), NaOt-Bu (9.9 g, 103 mmol), toluene (330 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-30'을 12.8 g 얻었다. (수율 : 71%)

[391]

[392] 1-36'의 합성

[393]

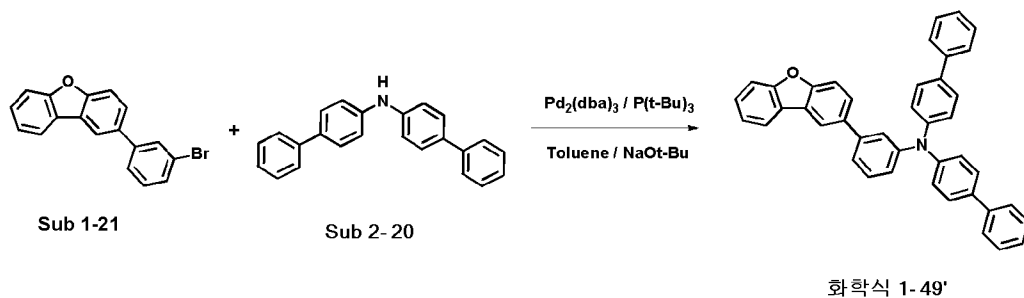


[394] 둥근바닥플라스크에 bis(dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)amine (10 g, 26.2 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (7.59 g, 28.8 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.2 g, 1.31 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.53 g, 2.62 mmol), NaOt-Bu (8.31 g, 86.5 mmol), toluene (275 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-36'을 11.4 g 얻었다. (수율 : 77%)

[395]

[396] 1-49'의 합성

[397]

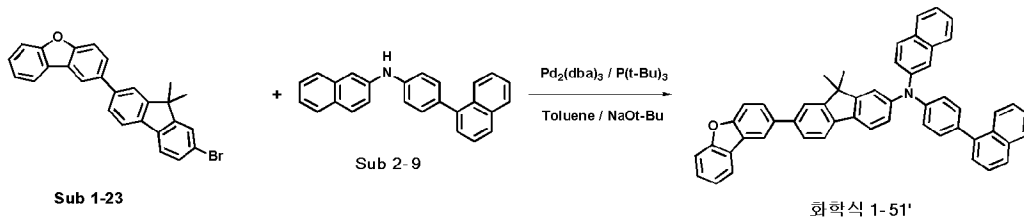


[398] 둥근바닥플라스크에 di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine (10 g, 31.1 mmol), 2-(3-bromophenyl)dibenzo[b,d]furan (11.1 g, 34.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.42 g, 1.56 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.63 g, 3.11 mmol), NaOt-Bu (9.9 g, 103 mmol), toluene (330 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-49'을 13.3 g 얻었다. (수율 : 76%)

[399]

[400] 1-51'의 합성

[401]

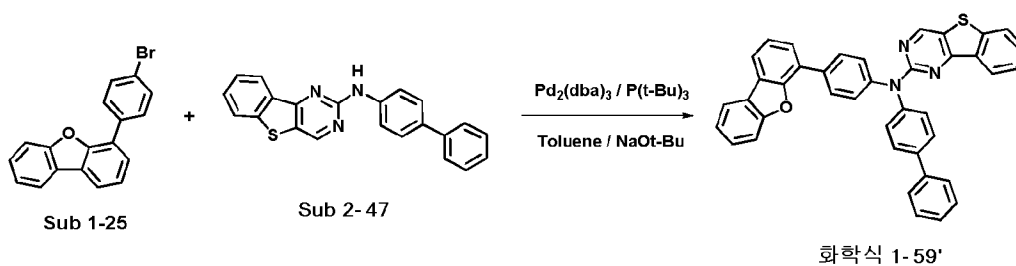


[402] 둥근바닥플라스크에 N-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)naphthalen-2-amine (10 g, 28.9 mmol), 2-(7-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)dibenzo[b,d]furan (14 g, 32 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.33 g, 1.45 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.59 g, 2.9 mmol), NaOt-Bu (9.2 g, 95.5 mmol), toluene (310 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-51'을 14.5 g 얻었다. (수율 : 71%)

[403]

[404] 1-59'의 합성

[405]



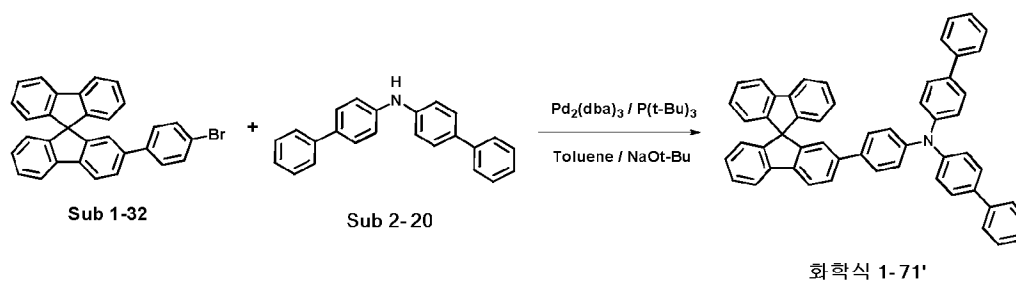
[406] 둥근바닥플라스크에

N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)benzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidin-2-amine (10 g, 28.3 mmol), 4-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]furan (10.1 g, 31.1 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.3 g, 1.41 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.57 g, 2.83 mmol), NaOt-Bu (8.98 g, 93.4 mmol), toluene (300 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-59'을 12.3 g 얻었다. (수율 : 73%)

[407]

[408] 1-71'의 합성

[409]

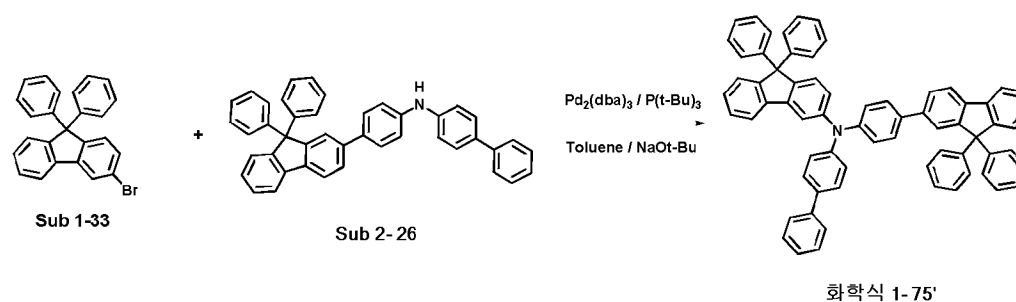


[410] 둥근바닥플라스크에 di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine (10 g, 31.1 mmol), 2-(4-bromophenyl)-9,9'-spirobi[fluorene] (16.1 g, 34.2 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.42 g, 1.56 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.63 g, 3.11 mmol), NaOt-Bu (9.87 g, 102.7 mmol), toluene (330 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-71'을 15.5 g 얻었다. (수율 : 70%)

[411]

[412] 1-75'의 합성

[413]



[414] 둥근바닥플라스크에

N-(4-(9,9-diphenyl-9H-fluoren-2-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-amine (10 g, 17.8 mmol), 3-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (7.78 g, 19.6 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.82 g, 0.89 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.36 g, 1.78 mmol), NaOt-Bu (5.65 g, 58.75 mmol), toluene

(190 mL)을 상기 1-1'과 동일한 방법으로 실험하여 Product 1-75'을 11.3 g 얻었다.
(수율 : 72%)

[415]

[416] [표2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1'	m/z=473.21(C ₃₆ H ₂₇ N=473.61)	1-2'	m/z=523.23(C ₄₀ H ₂₉ N=523.66)
1-3'	m/z=573.25(C ₄₄ H ₃₁ N=573.72)	1-4'	m/z=623.26(C ₄₈ H ₃₃ N=623.78)
1-5'	m/z=447.20(C ₃₄ H ₂₅ N=447.57)	1-6'	m/z=371.17(C ₂₈ H ₂₁ N=371.47)
1-7'	m/z=471.20(C ₃₆ H ₂₅ N=471.59)	1-8'	m/z=521.21(C ₄₀ H ₂₇ N=521.65)
1-9'	m/z=549.25(C ₄₂ H ₃₁ N=549.70)	1-10'	m/z=625.28(C ₄₈ H ₃₅ N=625.80)
1-11'	m/z=675.29(C ₅₂ H ₃₇ N=675.86)	1-12'	m/z=473.21(C ₃₆ H ₂₇ N=473.61)
1-13'	m/z=523.23(C ₄₀ H ₂₉ N=523.66)	1-14'	m/z=623.26(C ₄₈ H ₃₃ N=623.78)
1-15'	m/z=549.25(C ₄₂ H ₃₁ N=549.70)	1-16'	m/z=625.28(C ₄₈ H ₃₅ N=625.80)
1-17'	m/z=503.17(C ₃₆ H ₂₅ NS=503.66)	1-18'	m/z=603.20(C ₄₄ H ₂₉ NS=603.77)
1-19'	m/z=477.16(C ₃₄ H ₂₃ NS=477.62)	1-20'	m/z=503.17(C ₃₆ H ₂₅ NS=503.66)
1-21'	m/z=451.14(C ₃₂ H ₂₁ NS=451.58)	1-22'	m/z=593.22(C ₄₃ H ₃₁ NS=593.78)
1-23'	m/z=641.22(C ₄₇ H ₃₁ NS=641.82)	1-24'	m/z=665.22(C ₄₉ H ₃₁ NS=665.84)
1-25'	m/z=503.17(C ₃₆ H ₂₅ NS=503.66)	1-26'	m/z=655.23(C ₄₈ H ₃₃ NS=655.85)
1-27'	m/z=695.26(C ₅₁ H ₃₇ NS=695.91)	1-28'	m/z=593.18(C ₄₂ H ₂₇ NOS=593.73)
1-29'	m/z=583.14(C ₄₀ H ₂₅ NS ₂ =583.76)	1-30'	m/z=579.20(C ₄₂ H ₂₉ NS=579.75)
1-31'	m/z=685.19(C ₄₈ H ₃₁ NS ₂ =685.90)	1-32'	m/z=719.23(C ₅₂ H ₃₃ NOS=719.89)
1-33'	m/z=629.22(C ₄₆ H ₃₁ NS=629.81)	1-34'	m/z=629.22(C ₄₆ H ₃₁ NS=629.81)
1-35'	m/z=603.20(C ₄₄ H ₂₉ NS=603.77)	1-36'	m/z=563.08(C ₃₆ H ₂₁ NS ₃ =563.75)
1-37'	m/z=639.11(C ₄₂ H ₂₅ NS ₃ =639.85)	1-38'	m/z=715.15(C ₄₈ H ₂₉ NS ₃ =715.95)
1-39'	m/z=791.18(C ₅₄ H ₃₃ NS ₃ =792.04)	1-40'	m/z=607.16(C ₄₂ H ₂₅ NO ₂ S=607.72)
1-41'	m/z=633.21(C ₄₅ H ₃₁ NOS=633.80)	1-42'	m/z=733.24(C ₅₃ H ₃₅ NOS=733.92)
1-43'	m/z=883.29(C ₆₅ H ₄₁ NOS=884.09)	1-44'	m/z=585.13(C ₃₈ H ₂₃ N ₃ S ₂ =585.74)

1-45'	m/z=553.19(C ₄₀ H ₂₇ NS=553.71)	1-46'	m/z=603.20(C ₄₄ H ₂₉ NS=603.77)
1-47'	m/z=841.28(C ₆₃ H ₃₉ NS=842.06)	1-48'	m/z=563.22(C ₄₂ H ₂₉ NO=563.69)
1-49'	m/z=563.22(C ₄₂ H ₂₉ NO=563.69)	1-50'	m/z=613.24(C ₄₆ H ₃₁ NO=613.76)
1-51'	m/z=703.29(C ₅₃ H ₃₇ NO=703.87)	1-52'	m/z=587.22(C ₄₄ H ₂₉ NO=587.71)
1-53'	m/z=639.26(C ₄₈ H ₃₃ NO=639.78)	1-54'	m/z=639.26(C ₄₈ H ₃₃ NO=639.78)
1-55'	m/z=653.24(C ₄₈ H ₃₁ NO ₂ =653.77)	1-56'	m/z=603.26(C ₄₅ H ₃₃ NO=603.75)
1-57'	m/z=727.29(C ₅₅ H ₃₇ NO=727.89)	1-58'	m/z=725.27(C ₅₅ H ₃₅ NO=725.87)
1-59'	m/z=595.17(C ₄₀ H ₂₅ N ₃ OS=595.71)	1-60'	m/z=567.26(C ₄₂ H ₃₃ NO=567.72)
1-61'	m/z=611.22(C ₄₆ H ₂₉ NO=611.73)	1-62'	m/z=617.18(C ₄₄ H ₂₇ NOS=617.76)
1-63'	m/z=637.24(C ₄₈ H ₃₁ NO=637.77)	1-64'	m/z=667.21(C ₄₈ H ₂₉ NO ₃ =667.75)
1-65'	m/z=767.25(C ₅₆ H ₃₃ NO ₃ =767.87)	1-66'	m/z=681.27(C ₅₀ H ₃₅ NO ₂ =681.82)
1-67'	m/z=658.22(C ₄₅ H ₃₀ N ₄ S=658.82)	1-68'	m/z=655.23(C ₄₈ H ₃₃ NS=655.86)
1-69'	m/z=744.26(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ S=744.96)	1-70'	m/z=784.27(C ₅₅ H ₃₆ N ₄ S=784.98)
1-71'	m/z=553.19(C ₄₀ H ₂₇ NS=553.72)	1-72'	m/z=553.19(C ₄₀ H ₂₇ NS=553.72)
1-73'	m/z=543.20(C ₃₉ H ₂₉ NS=543.73)	1-74'	m/z=671.21(C ₄₈ H ₃₀ FNS=671.83)
1-75'	m/z=641.25(C ₄₆ H ₃₁ N ₃ O=641.77)	1-76'	m/z=639.26(C ₄₈ H ₃₃ NO=639.80)
1-77'	m/z=652.25(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ O=652.80)	1-78'	m/z=614.24(C ₄₅ H ₃₀ N ₂ O=614.75)
1-79'	m/z=587.22(C ₄₄ H ₂₉ NO=587.72)	1-80'	m/z=613.24(C ₄₆ H ₃₁ NO=613.76)

1-81'	m/z=543.26(C ₄₀ H ₃₃ NO=543.71)	1-82'	m/z=667.25(C ₄₉ H ₃₃ NO ₂ =667.81)
-------	---	-------	---

[417]

[418] [합성예 2]

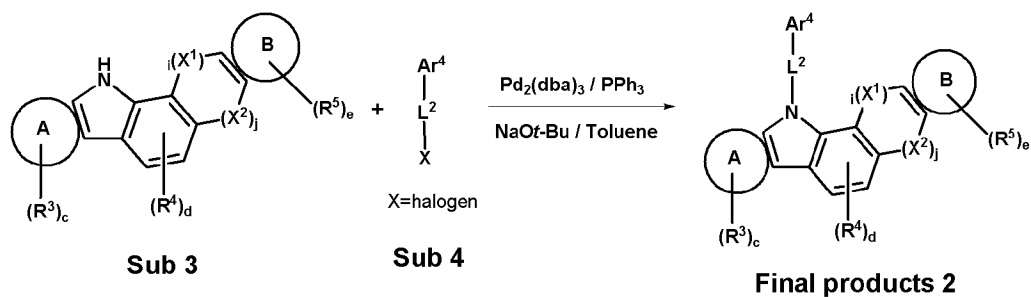
[419]

[420] 본 발명에 따른 화학식 (2)로 표시되는 화합물(final product 2)은 하기 반응식 3과 같이 Sub 3과 Sub4 가 반응하여 제조된다.

[421]

[422] <반응식 3>

[423]



[424]

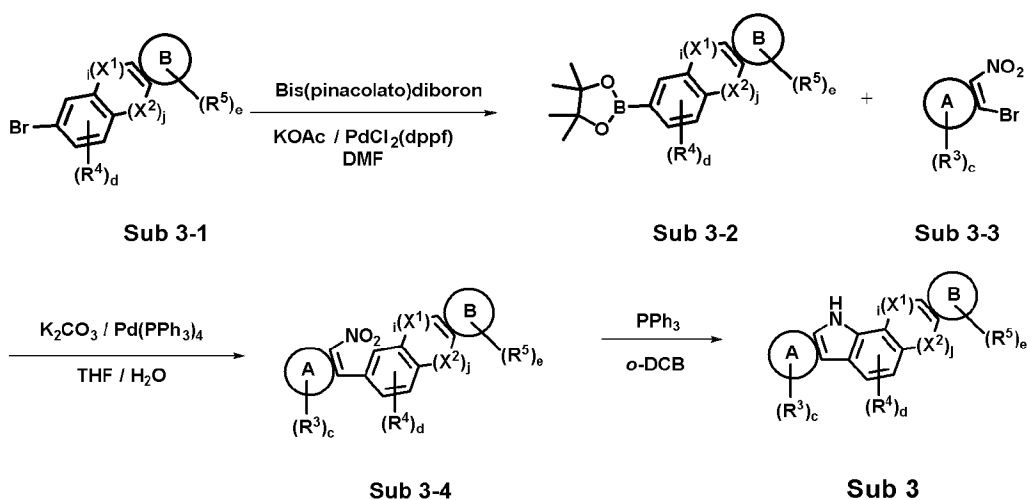
[425] Sub 3합성 예시

[426] 반응식 4의 Sub 3은 하기 반응식 5의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

[427]

[428] <반응식 4>

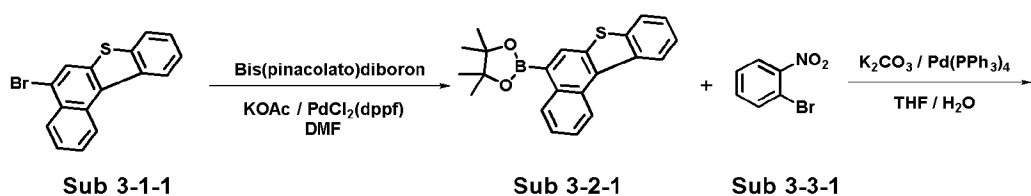
[429]



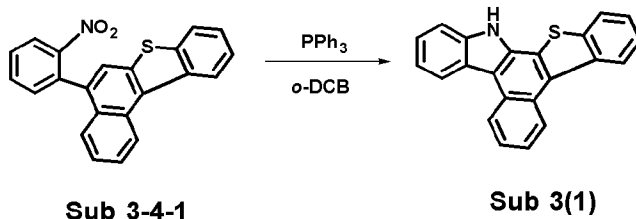
[430]

[431] Sub 3(1) 합성 예시

[432]



[433]



[434]

[435] Sub 3-2-1 합성법

[436] 5-bromobenzo[*b*]naphtha[1,2-*d*]thiophene (50 g, 155 mmol), bis(pinacolato)diboron (43.4 g, 171 mmol), KOAc (46 g, 466 mmol), PdCl₂(dppf) (3.8 g, 4.7 mmol)를 DMF (980 mL) 용매에 녹인 후, 120 °C에서 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 CH₂Cl₂와 methanol 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 Sub 3-2-1 (45 g, 80%)를 얻었다.

[437]

[438] Sub 3-4-1 합성법

[439] 상기에서 얻은 Sub 3-2-1 (40 g, 111 mmol), bromo-2-nitrobenzene (26.91 g, 133 mmol), K₂CO₃ (46.03 g, 333 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.7 g, 6.66 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣은 후 THF (490 mL)와 물 (245 mL)을 넣어 녹인 후 80 °C에서 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column을 이용하여 분리하여 원하는 Sub 3-4-1 (27.6 g, 70%)를 얻었다.

[440]

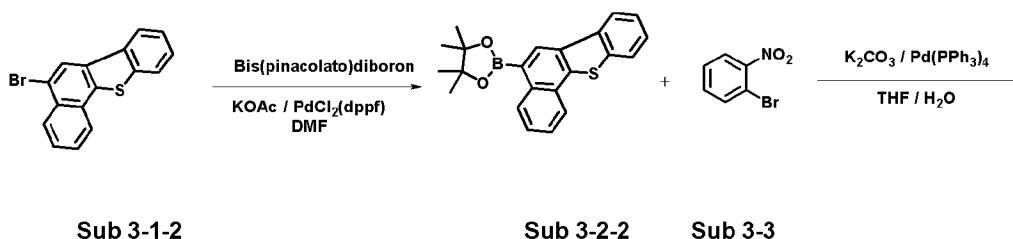
[441] Sub 3(1) 합성법

[442] 상기에서 얻은 Sub 3-4-1 (20 g, 56.3 mmol)과 triphenylphosphine (37 g, 141 mmol)을 *o*-dichlorobenzene (235 mL)에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압 증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 silicagel column 및 재결정하여 원하는 Sub 3(1) (13.6 g, 75%)를 얻었다.

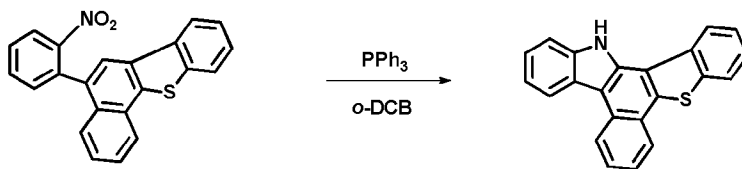
[443]

[444] Sub 3(2) 합성 예시

[445]



[446]



Sub 3-4-2

Sub 3(2)

[447]

[448] Sub 3-2-2 합성법

[449] 5-bromobenzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene (50 g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.6 g, 176 mmol), KOAc (47 g, 479 mmol), PdCl₂(dppf) (3.91 g, 4.8 mmol), DMF (1L)를 상기 Sub 3-2-1 의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-2 (45 g, 78%)를 얻었다.

[450]

[451] Sub 3-4-2 합성법

[452] 상기에서 얻은 Sub 3-2-2 (40 g, 111 mmol), bromo-2-nitrobenzene (26.91 g, 133 mmol), K₂CO₃ (46.03 g, 333 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.7 g, 6.7 mmol), THF (490 mL), 물 (245 mL) 을 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-2 (25.6g, 65%)를 얻었다.

[453]

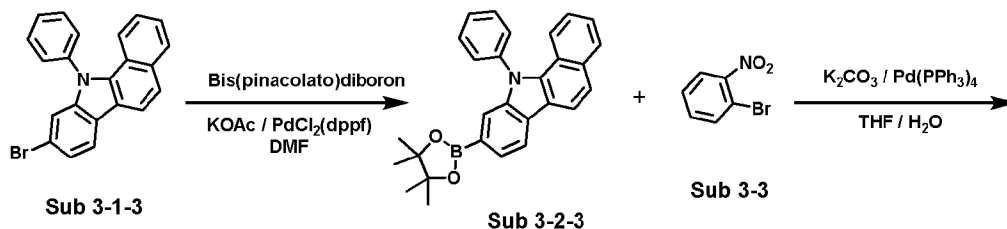
[454] Sub 3(2) 합성법

[455] 상기에서 얻은 Sub 3-4-2 (20 g, 56.3 mmol), triphenylphosphine (44.28 g, 0.17 mol), *o*-dichlorobenzene (235 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(2) (12 g, 66%)를 얻었다.

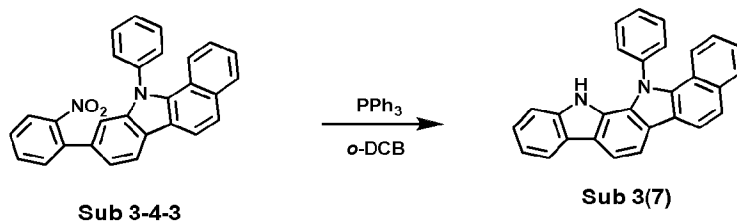
[456]

[457] Sub 3(7) 합성 예시

[458]



[459]



Sub 3-4-3

Sub 3(7)

[460]

[461] Sub 3-2-3 합성법

[462] 9-bromo-11-phenyl-11H-benzo[a]carbazole (50 g, 134 mmol), bis(pinacolato)diboron (37.5 g, 148 mmol), KOAc (40 g, 403 mmol), PdCl₂(dppf) (3.3 g, 4.0 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-3 (45.1 g, 80%)를 얻었다.

[463]

[464] Sub 3-4-3 합성법

[465] 상기에서 얻은 Sub 3-2-3 (46.1 g, 111 mmol), Sub 3-3 (26.7 g, 131 mmol), K₂CO₃ (45.6 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.63 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-3 (29.6 g, 65%)를 얻었다.

[466]

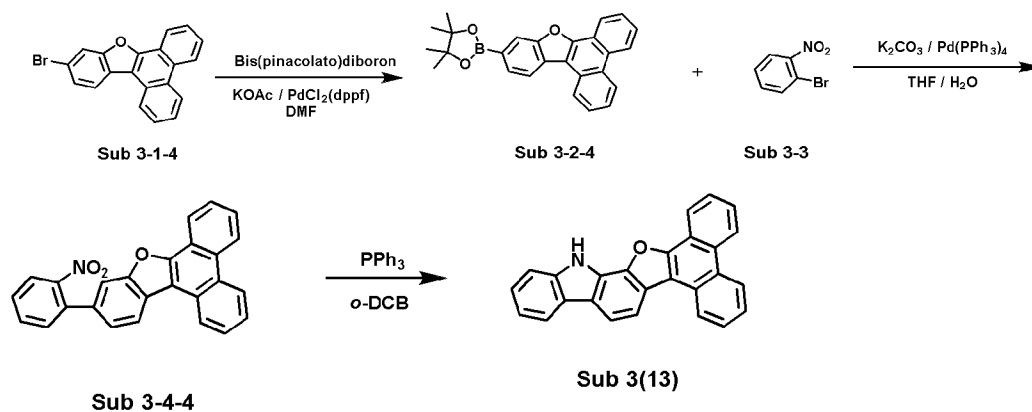
[467] Sub 3(7) 합성법

[468] 상기에서 얻은 Sub 3-4-3 (20.7 g, 50 mmol), triphenylphosphine (32.7 g, 125 mmol)을 *o*-dichlorobenzene (205 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(7) (13.0 g, 68%)를 얻었다.

[469]

[470] Sub 3(13) 합성 예시

[471]



[472]

[473] Sub 3-2-4 합성법

[474] Sub 3-1-4 (55.6 g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.7 g, 176 mmol), KOAc (47.1 g, 480 mmol), PdCl₂(dppf) (3.92 g, 4.8 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-4 (47.9 g, 76%)를 얻었다.

[475]

[476] Sub 3-4-4 합성법

[477] 얻은 Sub 3-2-4 (43.4 g, 110 mmol), Sub 3-3 (26.7 g, 132 mmol), K₂CO₃ (45.6 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.63 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-4 (27.4 g, 64%)를 얻었다.

[478]

[479] Sub 3(13) 합성법

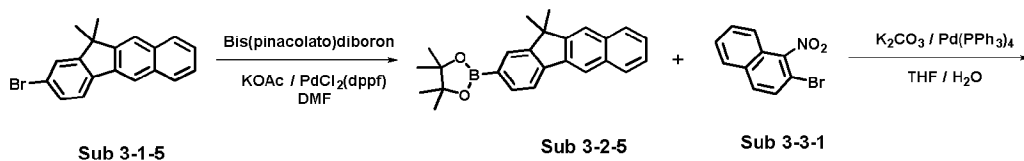
[480] 상기에서 얻은 Sub 3-4-4 (19.5 g, 50.1 mmol), triphenylphosphine (32.8 g, 125.2

mmol), *o*-dichlorobenzene (205 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(13) (11.5 g, 64%)를 얻었다.

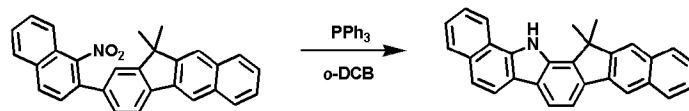
[481]

[482] Sub 3(26) 합성 예시

[483]



[484]



[485]

[486] Sub 3-2-5 합성법

[487] Sub 3-1-5 (51.7 g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.7 g, 176 mmol), KOAc (47.1 g, 480 mmol), PdCl₂(dppf) (3.92 g, 4.8 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-5 (46.2 g, 78%)를 얻었다.

[488]

[489] Sub 3-4-5 합성법

[490] 상기에서 얻은 Sub 3-2-5 (40.7 g, 110 mmol), Sub 3-3-1 (33.2 g, 132 mmol), K₂CO₃ (45.6 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.62 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-5 (30.6g, 67%)를 얻었다.

[491]

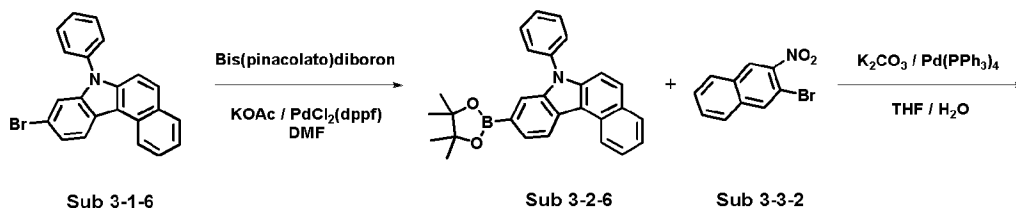
[492] Sub 3(26) 합성법

[493] 얻은 Sub 3-4-5 (20.8 g, 50.1 mmol), triphenylphosphine (32.8 g, 125 mmol)을 *o*-dichlorobenzene (205 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(26) (11.9g, 62%)를 얻었다.

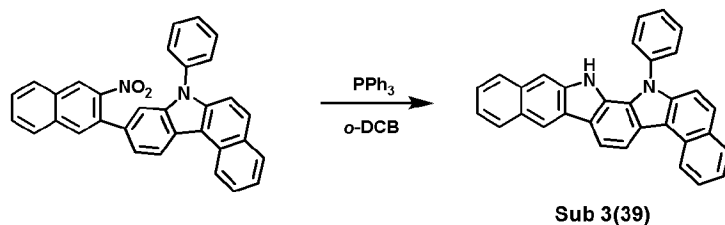
[494]

[495] Sub 3(39) 합성 예시

[496]



[497]



[498]

[499] Sub 3-2-6 합성법

[500] Sub 3-1-6 (59.6 g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.7 g, 176 mmol), KOAc (47.1 g, 480 mmol), PdCl₂(dppf) (3.92 g, 4.8 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-6 (50.4 g, 75%)를 얻었다.

[501]

[502] Sub 3-4-6 합성법

[503] 상기에서 얻은 Sub 3-2-6 (46.1 g, 110 mmol), Sub 3-3-2 (33.3 g, 132 mmol), K₂CO₃ (45.6 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.63 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-6 (32.2g, 63%)를 얻었다.

[504]

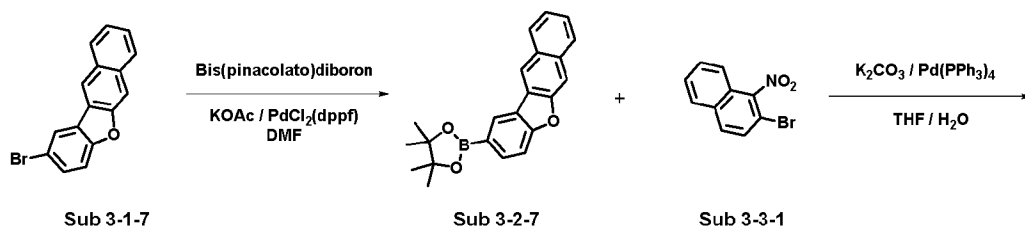
[505] Sub 3(39) 합성법

[506] 얻은 Sub 3-4-6 (23.2g, 50 mmol), triphenylphosphine (32.7 g, 125 mmol), *o*-dichlorobenzene (205 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(39) (14.1 g, 65%)를 얻었다.

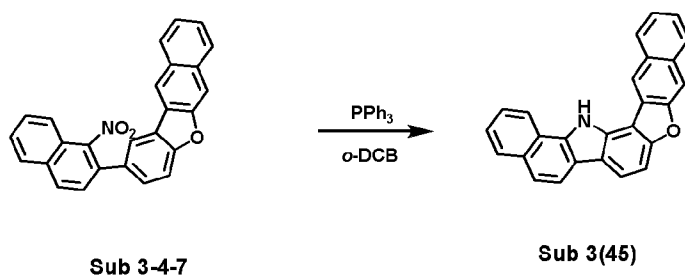
[507]

[508] Sub 3(45) 합성 예시

[509]



[510]



[511]

[512] Sub 3-2-7 합성법

[513] Sub 3-1-7 (47.5 g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.7 g, 176 mmol), KOAc

(47.1 g, 480 mmol), PdCl₂(dppf) (3.92 g, 4.8 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-7 (43.0 g, 78%)를 얻었다.

[514]

[515] Sub 3-4-7 합성법

[516] 상기에서 얻은 Sub 3-2-7 (37.9 g, 110 mmol), Sub 3-3-1 (33.3 g, 132 mmol), K₂CO₃ (45.7 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.64 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-7 (27.4g, 64%)를 얻었다.

[517]

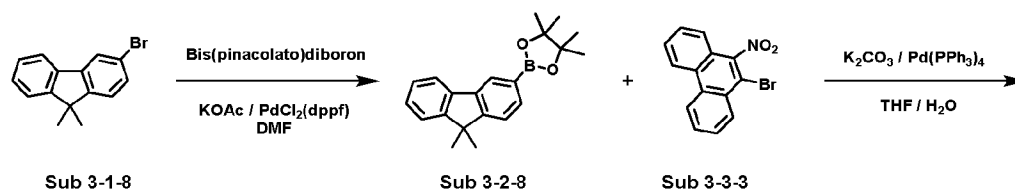
[518] Sub 3(45) 합성법

[519] 상기에서 얻은 Sub 3-4-7 (19.5g, 50.1 mmol), triphenylphosphine (32.8 g, 125 mmol), *o*-dichlorobenzene (205 mL)를 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(45) (12.0g, 67%)를 얻었다.

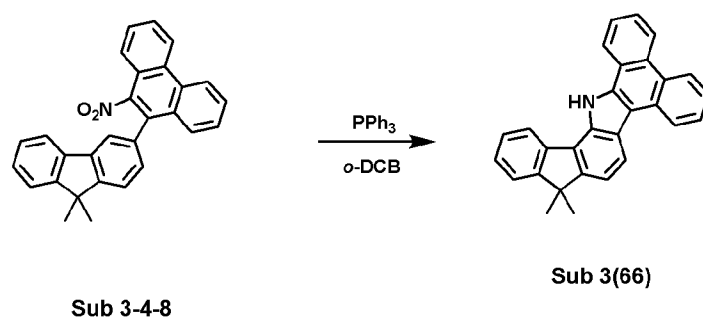
[520]

[521] Sub 3(66) 합성 예시

[522]



[523]



[524]

[525] Sub 3-2-2 합성법

[526] Sub 3-1-8 (43.7g, 160 mmol), bis(pinacolato)diboron (44.7 g, 176 mmol), KOAc (47.1 g, 480 mmol), PdCl₂(dppf) (3.9 g, 4.8 mmol)을 상기 Sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-2-8 (38.4g, 75%)를 얻었다.

[527]

[528] Sub 3-4-8 합성법

[529] 상기에서 얻은 Sub 3-2-8 (35.2 g, 110 mmol), Sub 3-3-3 (39.9 g, 132 mmol), K₂CO₃ (45.6 g, 330 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.6 g, 6.6 mmol) 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3-4-8 (31.5g, 69%)를 얻었다.

[530]

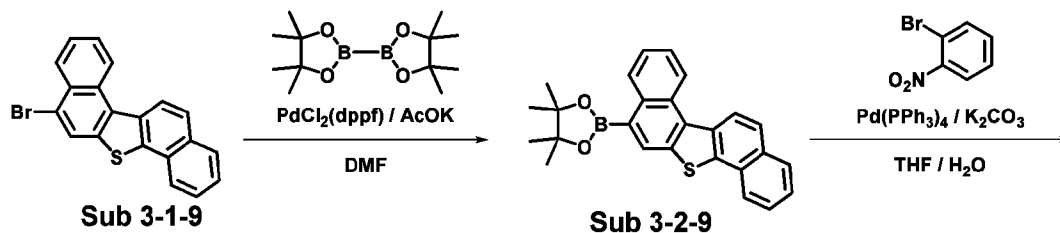
[531] Sub 3(66) 합성법

[532] 상기에서 얻은 Sub 3-4-8 (20.8 g, 50 mmol), triphenylphosphine (32.8 g, 125 mmol), *o*-dichlorobenzene (205 mL)을 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 Sub 3(66) (12.5g, 65%)를 얻었다.

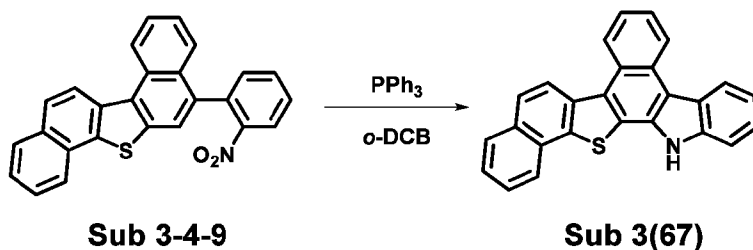
[533]

[534] Sub 3(67) 합성 예시

[535]



[536]



[537] Sub 3-2-9 합성법

[538] Sub 3-1-9 (70g, 192.69mmol), DMF (1214ml), Bis(pinacolato)diboron (53.83g, 211.96mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.23g, 5.78mmol), KOAc (56.73g, 578.08mmol)를 상기 sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 64.05g (수율: 81%)를 얻었다.

[539] Sub 3-4-9 합성

[540] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-2-9 (63.2g, 154.02mmol), THF (216ml), 1-bromo-2-nitrobenzene (34.22g, 169.42mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.23g, 4.62mmol), K₂CO₃ (44.40g, 462.06mmol), 물 (108ml)을 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 45.59g (수율: 73%)을 얻었다.

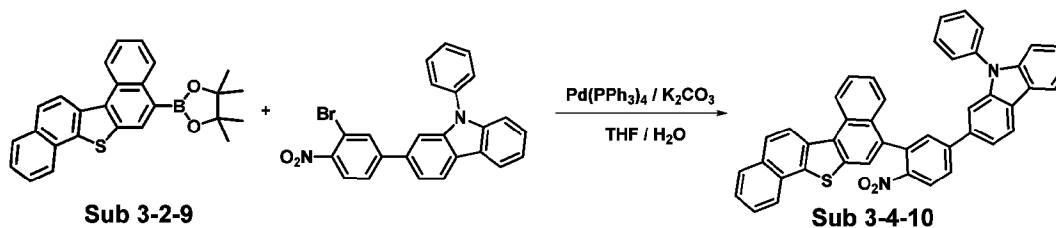
[541] Sub 3(67) 합성

[542] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-4-9 (45.50, 112.22mmol), *o*-dichlorobenzene (224ml), triphenylphosphine (88.30g, 336.65mmol)을 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 31.85g (수율: 76%)를 얻었다.

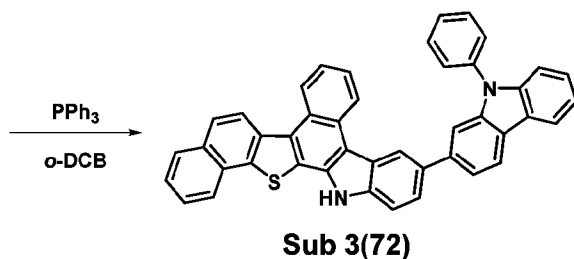
[543]

[544] Sub 3(72) 합성예

[545]



[546]



[547] (1) Sub 3-4-10 합성

[548] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-2-9 (41g, 99.92mmol)에 2-(3-bromo-4-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole (44.29g, 99.92mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.46g, 3.00mmol), K₂CO₃ (41.43g, 299.75mmol), THF (440ml), 물 (220ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-4-1 합성법을 사용하여 생성물 47.82g (수율: 74%)을 얻었다.

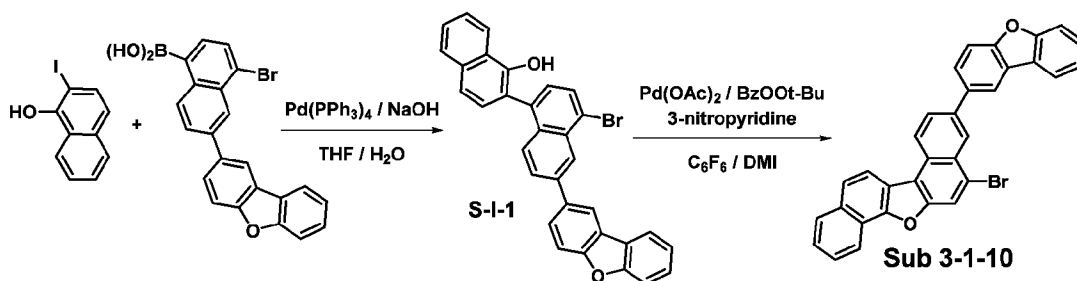
[549] (2) Sub 3(72) 합성

[550] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-4-10 (47g, 72.67mmol)에 triphenylphosphine (57.18g, 218.01mmol), *o*-dichlorobenzene (145ml)을 첨가하고 상기 Sub 3(1) 합성법을 사용하여 생성물 28.15g (수율: 63%)를 얻었다.

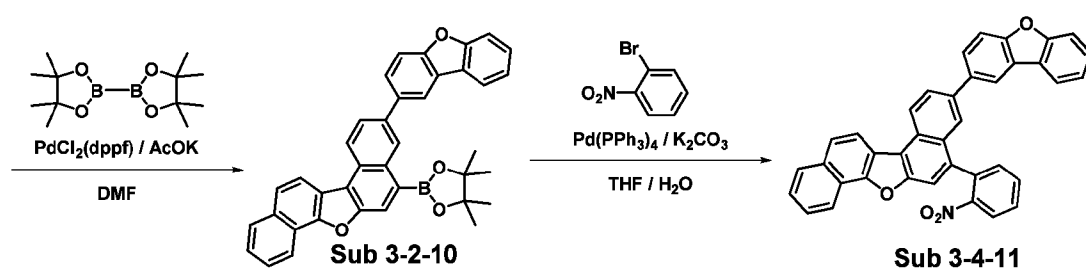
[551]

[552] Sub 3(74) 합성예

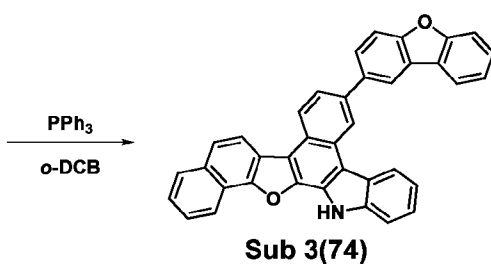
[553]



[554]



[555]



[556] 1) S-I-1 합성

[557] (4-bromo-6-(dibenzo[b,d]furan-2-yl)naphthalen-1-yl)boronic acid (100g,

239.77mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF (1055ml)로 녹인 후에, 2-iodonaphthalen-1-ol (64.75g, 239.77mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.16g, 3.60mmol), NaOH (14.39g, 359.65mmol), 물 (527ml)을 첨가하고 80 °C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 86.51g (수율: 70%)을 얻었다.

[558] 2) Sub 3-1-10 합성

[559] 출발물질인 S-I-1 (86g, 166.86mmol)를 둥근바닥플라스크에 Pd(OAc)₂ (3.75g, 16.69mmol), 3-nitropyridine (2.07g, 16.69mmol)과 함께 넣고 C₆F₆ (250ml), DMI (167ml)로 녹인 후, *tert*-butyl peroxybenzoate (64.82g, 333.71mmol)를 첨가하고 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 62.53g (수율: 73%)를 얻었다.

[560] 3) Sub 3-2-10 합성

[561] 상기 합성에서 얻어진 3-1-10 (62.50g, 121.74mmol), DMF (609ml), Bis(pinacolato)diboron (34.01g, 133.91mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.67g, 3.65mmol), KOAc (35.84g, 365.22mmol)를 상기 sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 51.86g (수율: 76%)를 얻었다.

[562] 4) Sub 3-4-10 합성

[563] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-2-10 (51.8g, 92.42mmol)에 1-bromo-2-nitrobenzene (18.67g, 92.42mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.2g, 2.77mmol), K₂CO₃ (38.32g, 277.27mmol), THF (407ml), 물 (203ml)을 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 43.13g (수율: 84%)을 얻었다.

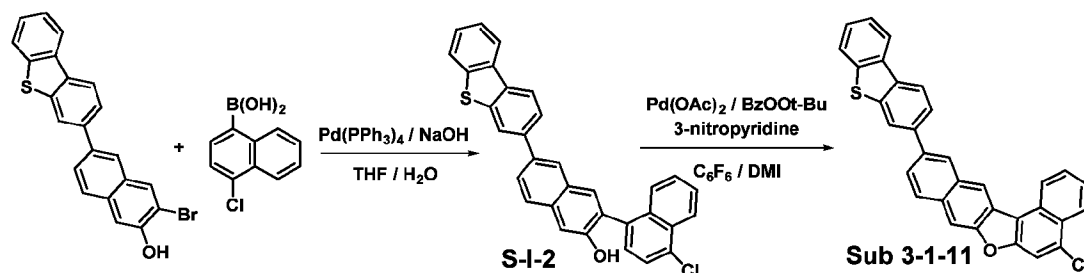
[564] 5) Sub 3(74) 합성

[565] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-4-10 (43g, 77.4mmol)에 triphenylphosphine (60.9g, 232.19mmol), *o*-dichlorobenzene (155ml)을 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 31.61g (수율: 78%)를 얻었다.

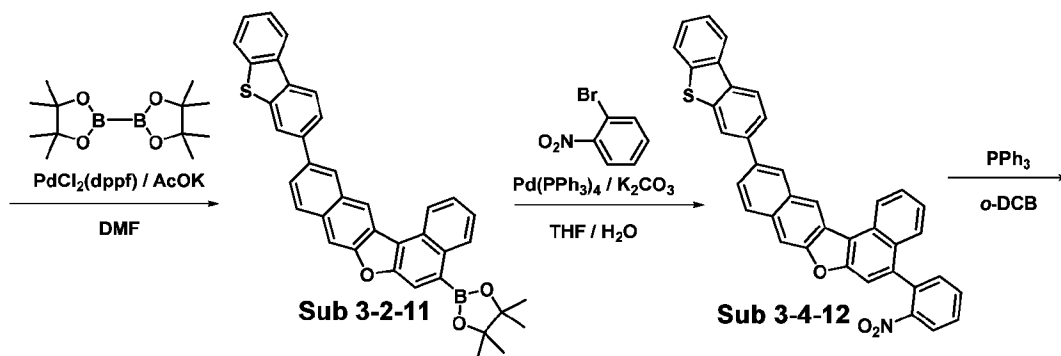
[566]

[567] Sub 3(75) 합성예

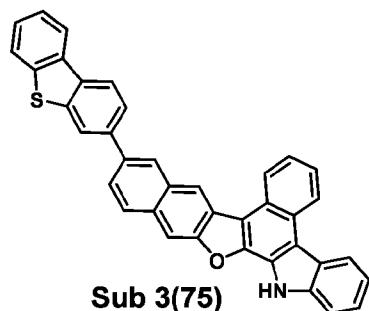
[568]



[569]



[570]



[571]

[572] 1) S-I-2 합성

[573] (4-chloronaphthalen-1-yl)boronic acid (31.07g, 150.5mmol), THF (662ml), 3-bromo-6-(dibenzo[b,d]thiophen-3-yl)naphthalen-2-ol (61g, 150.5mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (2.61g, 2.26mmol), NaOH (9.03g, 225.75mmol), 물 (331ml)을 상기 S-I-1의 합성방법을 사용하여 생성물 51.31g (수율: 70%)을 얻었다.

[574] 2) Sub 3-1-11 합성

[575] S-I-2 (51g, 104.72mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (2.35g, 10.47mmol), 3-nitropyridine (1.30g, 10.47mmol)과 함께 넣고 C_6F_6 (157.1ml), DMI (104ml)로 녹인 후, *tert*-butyl peroxybenzoate (40.68g, 209.44mmol)를 상기 3-1-10의 합성방법을 사용하여 생성물 36.57g (수율: 72%)를 얻었다.

[576] 3) Sub 3-2-11 합성

[577] 상기 합성에서 얻어진 3-1-11 (36g, 74.23mmol), DMF (371ml), Bis(pinacolato)diboron (20.73g, 81.65mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (1.63g, 2.23mmol), KOAc (21.85g, 222.68mmol)를 상기 sub 3-2-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 34.23g (수율: 80%)를 얻었다.

[578] 4) Sub 3-4-12 합성

[579] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-2-11 (34g, 58.97mmol)에 1-bromo-2-nitrobenzene (11.91g, 58.97mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (2.04g, 1.77mmol), K_2CO_3 (24.45g, 176.92mmol), THF (259ml), 물 (129ml)을 상기 Sub 3-4-1의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 27.64g (수율: 82%)을 얻었다.

[580] 5) Sub 3(75) 합성

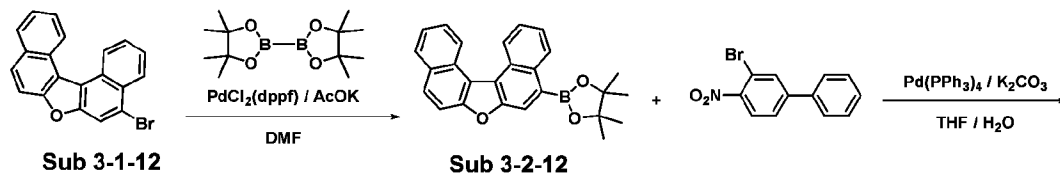
[581] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-6 (27.5g, 48.11mmol)에 triphenylphosphine

(37.85g, 144.32mmol), *o*-dichlorobenzene (96ml)을 첨가하고 상기 Sub 3(1)의 실험방법과 동일하게 진행하여 생성물 20.25g (수율: 78%)를 얻었다.

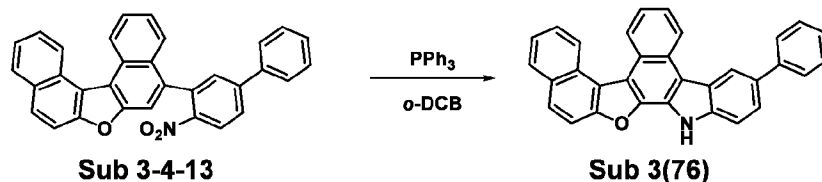
[582]

[583] Sub 3(76) 합성예

[584]



[585]



[586] 1) Sub 3-2-12

[587] Sub 3-1-12 (20g, 57.60mmol), DMF (288ml), Bis(pinacolato)diboron (16.09g, 63.36mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.26g, 1.73mmol), KOAc (16.96g, 172.81mmol)를 상기 Sub 3-2-1 합성방법을 사용하여 생성물 17.94g (수율: 79%)를 얻었다.

[588] 2) Sub 3-4-13

[589] 상기 합성에서 얻어진 3-2-12 (17g, 43.12mmol)에 3-bromo-4-nitro-1,1'-biphenyl (11.99g, 43.12mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.49g, 1.29mmol), K₂CO₃ (17.88g, 129.35mmol), THF (189ml), 물 (94ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-4-1 합성법을 사용하여 생성물 15.45g (수율: 77%)을 얻었다.

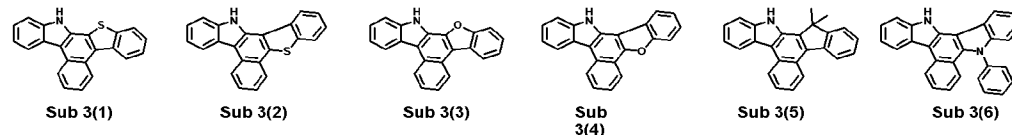
[590] 3) Sub 3(76) 합성

[591] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-2-12 (15g, 32.22mmol)에 triphenylphosphine (25.36g, 96.67mmol), *o*-dichlorobenzene (64ml)을 첨가하고 상기 Sub 3(1) 합성법을 사용하여 생성물 11.73g (수율: 84%)를 얻었다.

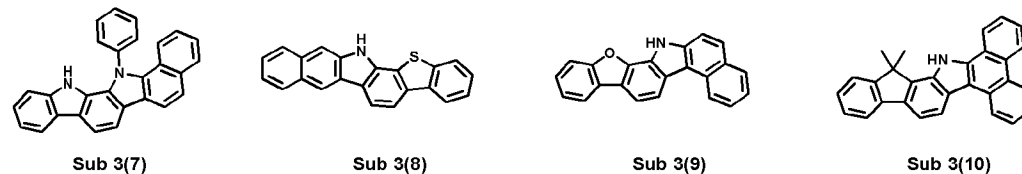
[592]

[593] Sub 3의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

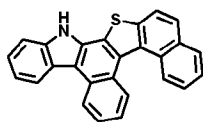
[594]



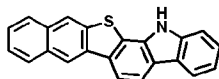
[595]



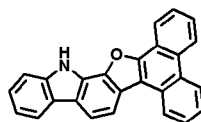
[596]



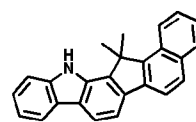
Sub 3(11)



Sub 3(12)

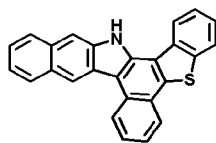


Sub 3(13)

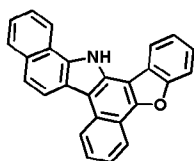


Sub 3(14)

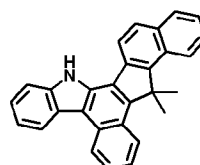
[597]



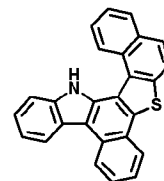
Sub 3(15)



Sub 3(16)

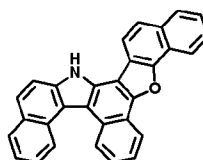


Sub 3(17)

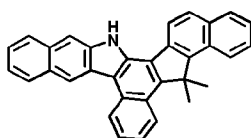


Sub 3(18)

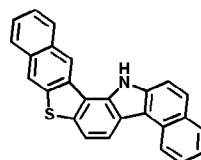
[598]



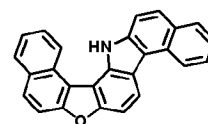
Sub 3(19)



Sub 3(20)

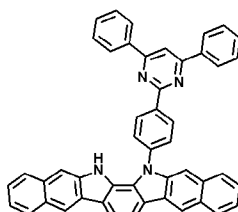


Sub 3(21)

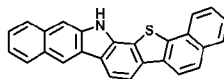


Sub 3(22)

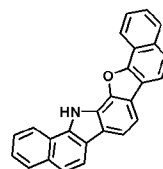
[599]



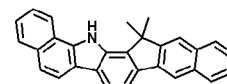
Sub 3(23)



Sub 3(24)

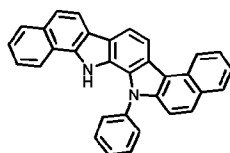


Sub 3(25)

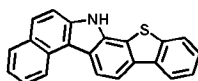


Sub 3(26)

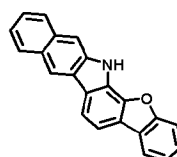
[600]



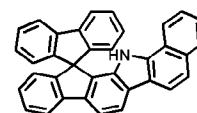
Sub 3(27)



Sub 3(28)

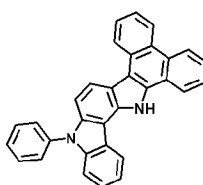


Sub 3(29)

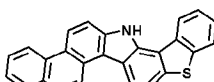


Sub 3(30)

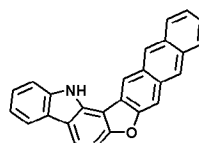
[601]



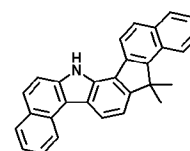
Sub 3(35)



Sub 3(36)

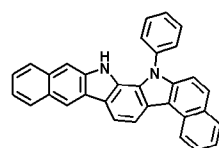


Sub 3(37)

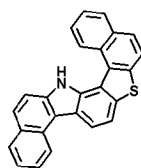


Sub 3(38)

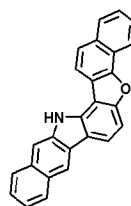
[602]



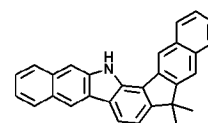
Sub 3(39)



Sub 3(40)

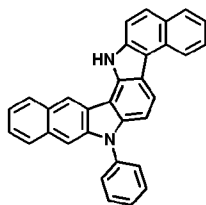


Sub 3(41)

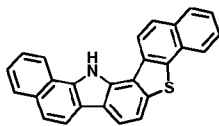


Sub 3(42)

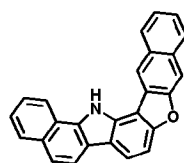
[603]



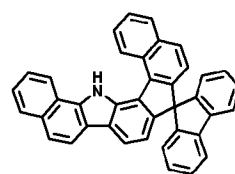
Sub 3(43)



Sub 3(44)

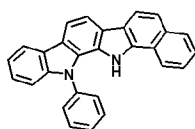


Sub 3(45)

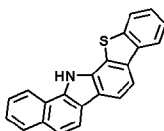


Sub 3(46)

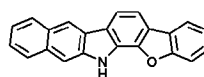
[604]



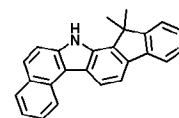
Sub 3(47)



Sub 3(48)

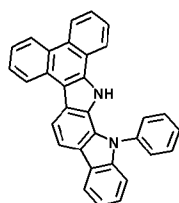


Sub 3(49)

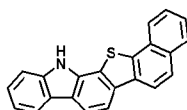


Sub 3(50)

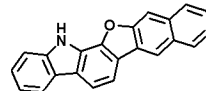
[605]



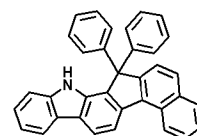
Sub 3(51)



Sub 3(52)

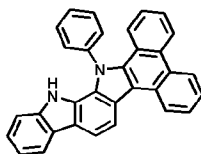


Sub 3(53)

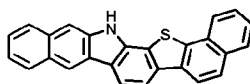


Sub 3(54)

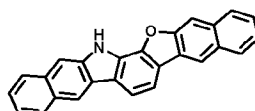
[606]



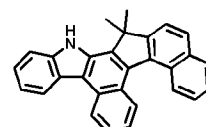
Sub 3(55)



Sub 3(56)

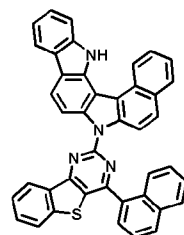


Sub 3(57)

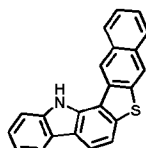


Sub 3(58)

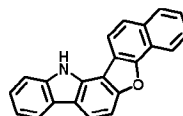
[607]



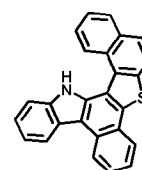
Sub 3(59)



Sub 3(60)

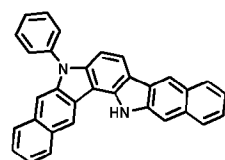


Sub 3(61)

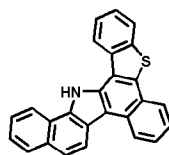


Sub 3(62)

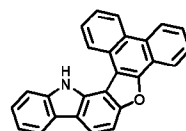
[608]



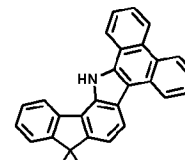
Sub 3(63)



Sub 3(64)

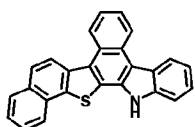


Sub 3(65)

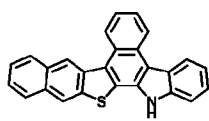


Sub 3(66)

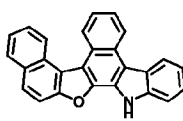
[609]



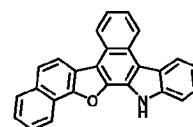
Sub 3(67)



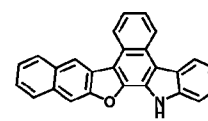
Sub 3(68)



Sub 3(69)

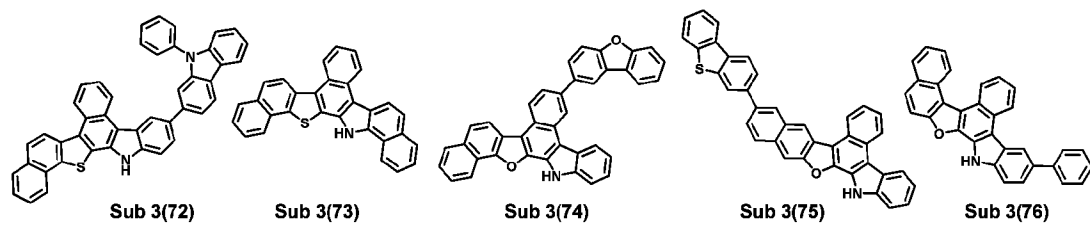


Sub 3(70)



Sub 3(71)

[610]



[611]

[612] [표3]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 3(1)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 3(2)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(3)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.34)	Sub 3(4)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.34)
Sub 3(5)	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)	Sub 3(6)	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.46)
Sub 3(7)	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.47)	Sub 3(8)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(9)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(10)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(11)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3(12)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(13)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(14)	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)
Sub 3(15)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3(16)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3(17)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3(18)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(19)	m/z=407.13(C ₃₀ H ₁₇ NO=407.47)	Sub 3(20)	m/z=433.18(C ₃₃ H ₂₃ N=433.55)
Sub 3(21)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3(22)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3(23)	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.80)	Sub 3(24)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(25)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(26)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(27)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(28)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(29)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(30)	m/z=455.17(C ₃₅ H ₂₁ N=455.56)
Sub 3(31)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(32)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)

Sub 3(33)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(34)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(35)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =439.53)	Sub 3(36)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(37)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(38)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(39)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(40)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(41)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(42)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(43)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(44)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(45)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(46)	m/z=505.18(C ₃₉ H ₂₃ N=505.62)
Sub 3(47)	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.47)	Sub 3(48)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(49)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(50)	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)
Sub 3(51)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(52)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(53)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(54)	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.58)
Sub 3(55)	m/z= 432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(56)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(57)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(58)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3(59)	m/z=616.17(C ₄₂ H ₂₄ N ₄ S=616.74)	Sub 3(60)	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3(61)	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3(62)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(63)	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3(64)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(65)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(66)	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)

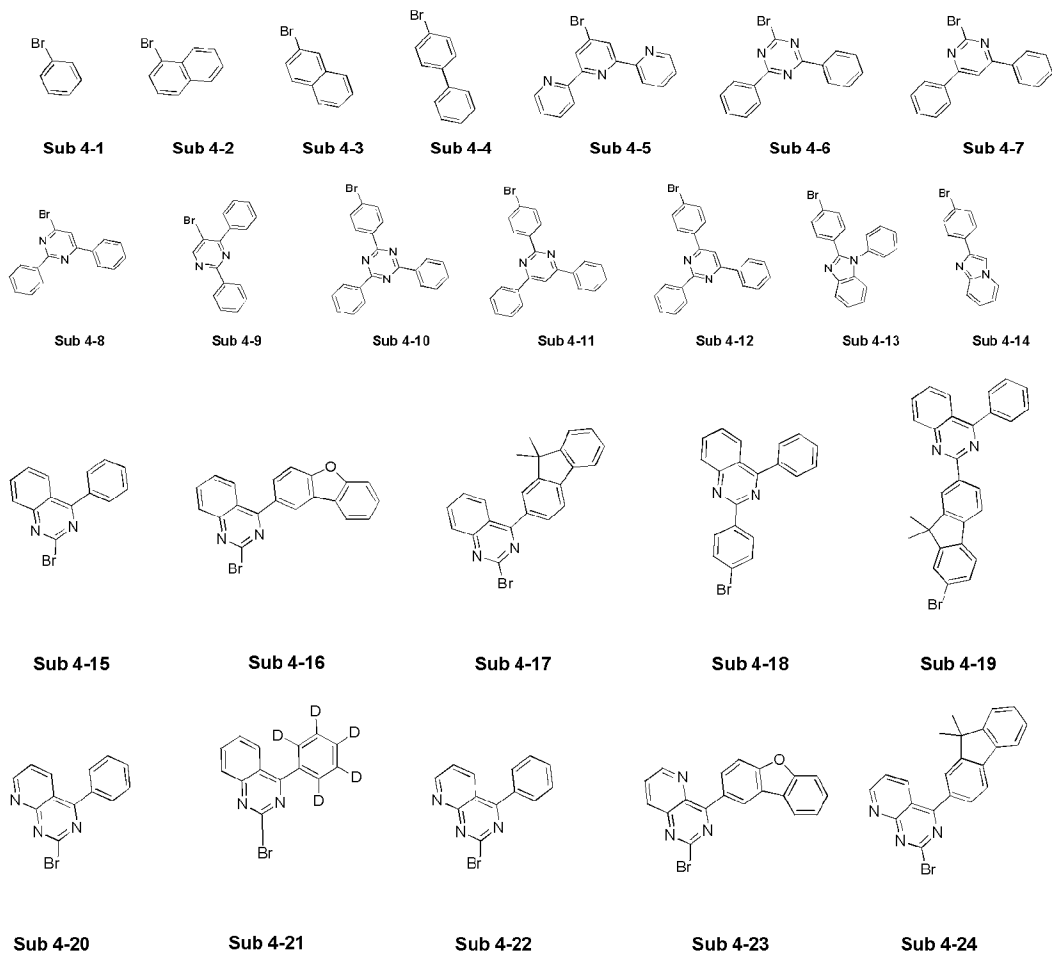
Sub 3(67)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3(68)	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3(69)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(70)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3(71)	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3(72)	m/z=614.18(C ₄₄ H ₂₆ N ₂ S=614.77)
Sub 3(73)	m/z=423.11(C ₃₀ H ₁₇ NS=423.53)	Sub 3(74)	m/z=523.16(C ₃₈ H ₂₁ NO ₂ =523.59)
Sub 3(75)	m/z=539.13(C ₃₈ H ₂₁ NOS=539.65)	Sub 3(76)	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)

[613]

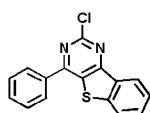
[614] Sub 4 예시

[615] Sub 4의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

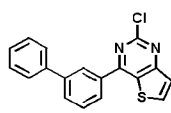
[616]



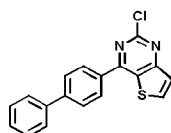
[617]



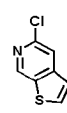
Sub 4-25



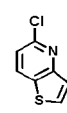
Sub 4-26



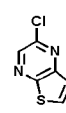
Sub 4-27



Sub 4-28

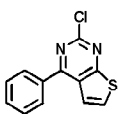


Sub 4-29

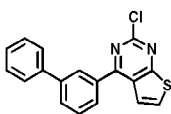


Sub 4-30

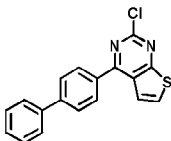
[618]



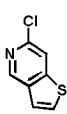
Sub 4-31



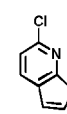
Sub 4-32



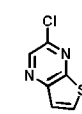
Sub 4-33



Sub 4-34

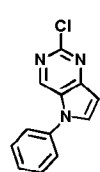


Sub 4-35

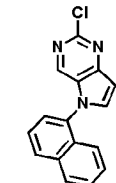


Sub 4-36

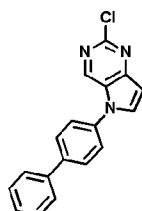
[619]



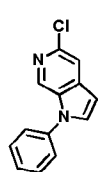
Sub 4-37



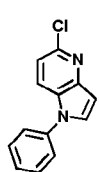
Sub 4-38



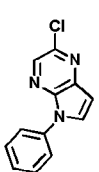
Sub 4-39



Sub 4-40

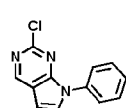


Sub 4-41

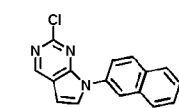


Sub 4-42

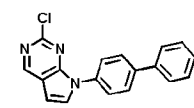
[620]



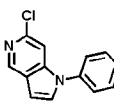
Sub 4-43



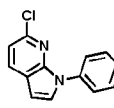
Sub 4-44



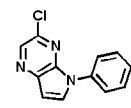
Sub 4-45



Sub 4-46

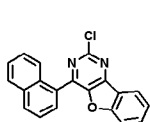


Sub 4-47

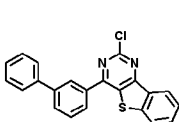


Sub 4-48

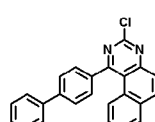
[621]



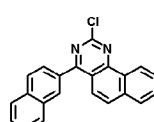
Sub 4-49



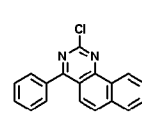
Sub 4-50



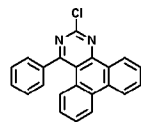
Sub 4-51



Sub 4-52

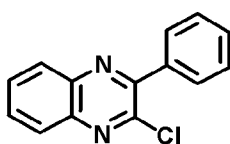


Sub 4-53



Sub 4-54

[622]



Sub 4-55

[623]

[624] [표4]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 4-1	m/z=155.96(C ₆ H ₅ Br=157.01)	Sub 4-2	m/z=205.97(C ₁₀ H ₇ Br=207.07)
Sub 4-3	m/z=205.97(C ₁₀ H ₇ Br=207.07)	Sub 4-4	m/z=231.99(C ₁₂ H ₉ Br=233.10)
Sub 4-5	m/z=309.02(C ₁₇ H ₁₂ BrN=310.19)	Sub 4-6	m/z=311.01(C ₁₅ H ₁₀ BrN ₃ =312.16)
Sub 4-7	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 4-8	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)
Sub 4-9	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 4-10	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.26)
Sub 4-11	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)	Sub 4-12	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)
Sub 4-13	m/z=348.03(C ₁₉ H ₁₃ BrN ₂ =349.22)	Sub 4-14	m/z=271.99(C ₁₃ H ₉ BrN ₂ =273.13)
Sub 4-15	m/z=283.99(C ₁₄ H ₉ BrN ₂ =285.14)	Sub 4-16	m/z=374.01(C ₂₀ H ₁₁ BrN ₂ O=375.22)
Sub 4-17	m/z=400.06(C ₂₃ H ₁₇ BrN ₂ =401.30)	Sub 4-18	m/z=360.03(C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)
Sub 4-19	m/z=476.09(C ₂₉ H ₂₁ BrN ₂ =477.39)	Sub 4-20	m/z=284.99(C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)
Sub 4-21	m/z=289.03(C ₁₄ H ₄ D ₅ BrN ₂ =290.2)	Sub 4-22	m/z=284.99(C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)
Sub 4-23	m/z=375.00(C ₁₉ H ₁₀ BrN ₃ O=376.2)	Sub 4-24	m/z=401.05(C ₂₂ H ₁₆ BrN ₃ =402.29)
Sub 4-25	m/z=296.02(C ₁₆ H ₉ ClN ₂ S=296.77)	Sub 4-26	m/z=322.03(C ₁₈ H ₁₁ ClN ₂ S=322.81)
Sub 4-27	m/z=322.03(C ₁₈ H ₁₁ ClN ₂ S=322.81)	Sub 4-28	m/z=168.98(C ₇ H ₄ ClNS=169.63)
Sub 4-29	m/z=168.98(C ₇ H ₄ ClNS=169.63))	Sub 4-30	m/z=169.97(C ₆ H ₃ ClN ₂ S=170.62)
Sub 4-31	m/z=246.00(C ₁₂ H ₇ ClN ₂ S=246.72)	Sub 4-32	m/z=322.03(C ₁₈ H ₁₁ ClN ₂ S=322.81)

Sub 4-33	m/z=322.03(C ₁₈ H ₁₁ ClN ₂ S=322.81)	Sub 4-34	m/z=168.98(C ₇ H ₄ ClNS=169.63)
Sub 4-35	m/z=168.98(C ₇ H ₄ ClNS=169.63))	Sub 4-36	m/z=169.97(C ₆ H ₃ ClN ₂ S=170.62)
Sub 4-37	m/z=229.04(C ₁₂ H ₈ ClN ₃ =229.67)	Sub 4-38	m/z=279.06(C ₁₆ H ₁₀ ClN ₃ =279.72)
Sub 4-39	m/z=305.07(C ₁₈ H ₁₂ ClN ₃ =305.76)	Sub 4-40	m/z=228.05(C ₁₃ H ₉ ClN ₂ =228.68)
Sub 4-41	m/z=228.05(C ₁₃ H ₉ ClN ₂ =228.68)	Sub 4-42	m/z=229.04(C ₁₂ H ₈ ClN ₃ =229.67)
Sub 4-43	m/z=229.04(C ₁₂ H ₈ ClN ₃ =229.67)	Sub 4-44	m/z=279.06(C ₁₆ H ₁₀ ClN ₃ =279.72)
Sub 4-45	m/z=305.07(C ₁₈ H ₁₂ ClN ₃ =305.76)	Sub 4-46	m/z=228.05(C ₁₃ H ₉ ClN ₂ =228.68)
Sub 4-47	m/z=228.05(C ₁₃ H ₉ ClN ₂ =228.68)	Sub 4-48	m/z=229.04(C ₁₂ H ₈ ClN ₃ =229.67)
Sub 4-49	m/z=330.1(C ₂₀ H ₁₁ ClN ₂ O=330.77)	Sub 4-50	m/z=372.05(C ₂₂ H ₁₃ ClN ₂ S=372.87)
Sub 4-51	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ ClN ₂ =366.85)	Sub 4-52	m/z=340.08(C ₂₂ H ₁₃ ClN ₂ =340.81)
Sub 4-53	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ ClN ₂ =290.75)	Sub 4-54	m/z=340.08(C ₂₂ H ₁₃ ClN ₂ =340.81)
Sub 4-55	(m/z=240.05(C ₁₄ H ₉ ClN ₂ =240.69)		

[625]

[626] Sub 5의 합성

[627] 반응식 3의 Final Product 2의 Ar⁴가 인 경우 하기와 같은 반응 경로에

의해 Final Product 2'가 합성될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

[628] 상기 R^c는 상기에서 정의한 R³, R⁴, R⁵와 동일하며, R^c 중 하나는 R^{c'}이며, R^{c'}은 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도

하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1 \sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1 \sim C_{30}$ 의 알콕실기; $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및 $-L^1-N(R^a)(R^b)$ 로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

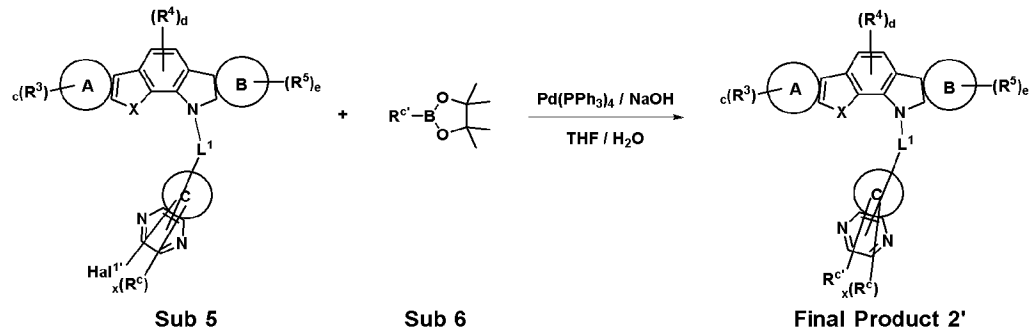
[629] x 는 0 내지 10의 정수 중 어느 하나이고,

[630] C환은 상기에서 정의한 A 또는 B와 동일하다.

[631]

[632] <반응식 5>

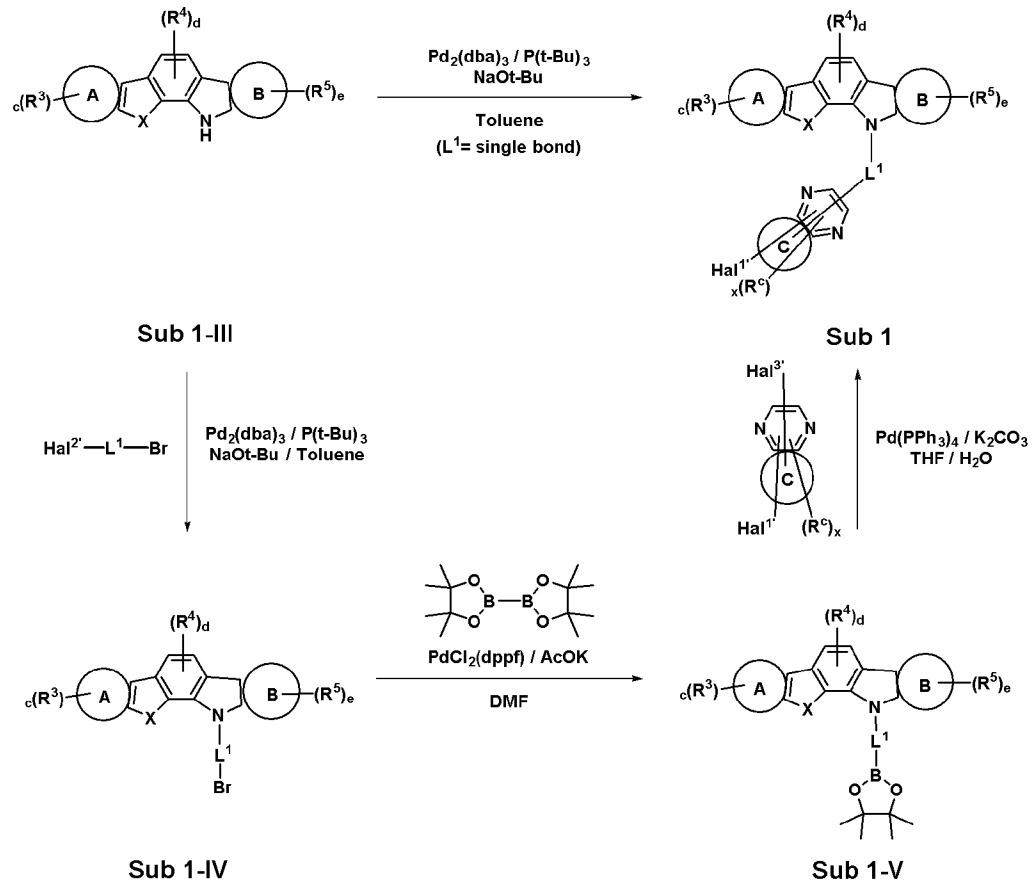
[633]



[634]

[635] <반응식 6>

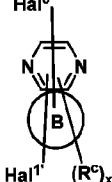
[636]



[637] $Hal^{2'} = I, Br$

[638] Hal^{1'}, Hal^{3'} = Cl, Br

[639]

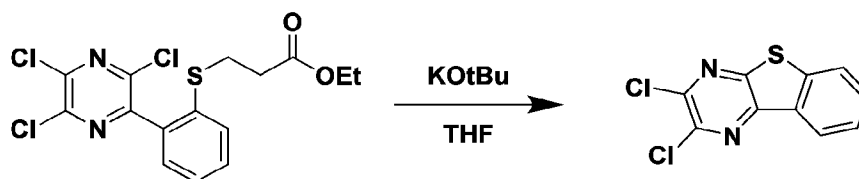
[640] 상기 반응식 6에서, ()의 반응물의 경우는 하기와 같이 4개의 문헌을

참조하여 합성하였다.

[641] 1) 주식회사 두산이 출원한 한국 등록특허 제 10-1488560호 (2015.02.03 일자 등록공고)에 개시된 합성방법을 사용하였다. (반응식 A 참조)

[642] <반응식 A>

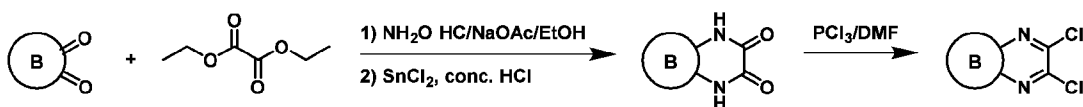
[643]



[644] 2) BASF가 출원한 국제 공개특허 PCT-EP2015-068240 호 (최우선출원일 2014.08.08)에 개시된 합성방법을 사용하였다. <반응식 B 참조>

[645] <반응식 B>

[646]

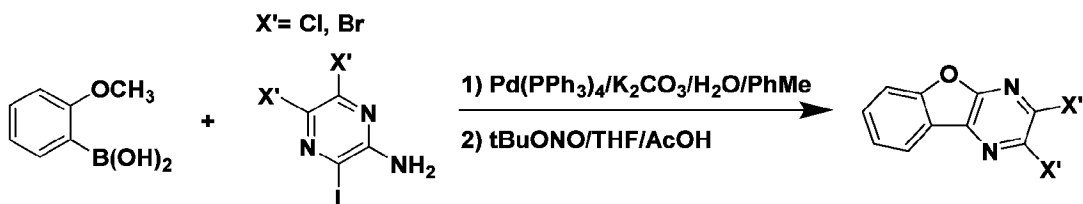


[647]

[648] 3) Soochow University가 출원한 중국 공개특허 제 2016-10316704 호 (출원일 2016.05.13)에 개시된 합성방법을 사용하였다. <반응식 C 참조>

[649] <반응식 C>

[650]



[651]

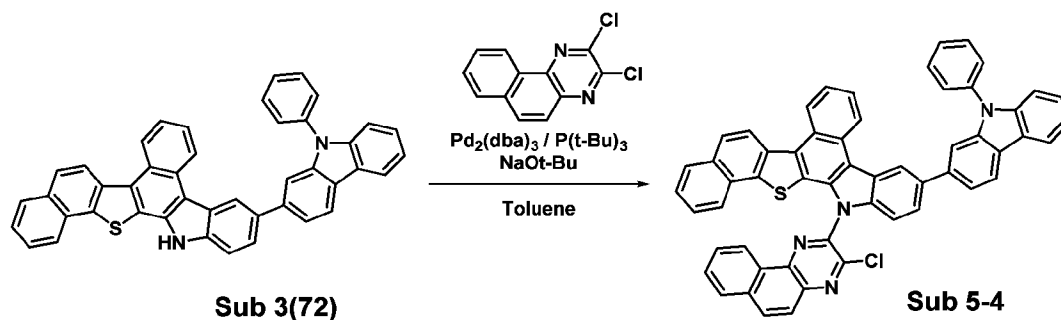
[652] 4) 엘지디스플레이 주식회사가 출원한 한국 공개특허 제 2015-0130953 호 (최우선출원일 2014.12.05)에 개시된 합성방법을 사용하였다. <화합물 6의 합성 참조>

[653]

[654] Sub 5의 합성예

[655] Sub 5-4 합성예

[656]

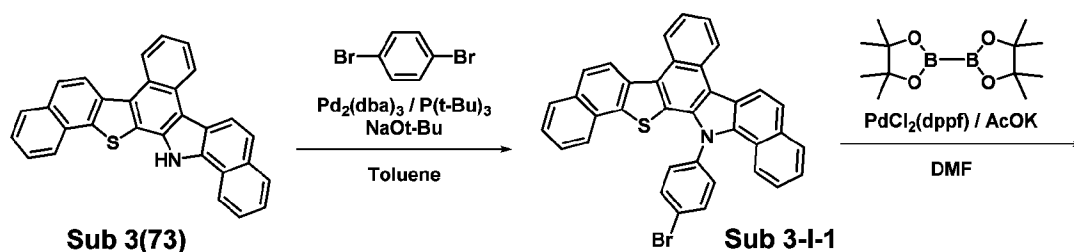


[657] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(72) (28g, 45.55mmol)을, 둥근바닥플라스크에 toluene (228ml)으로 녹인 후에, 2,3-dichlorobenzofuran (12.48g, 50.10mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.25g, 1.37mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.74g, 3.64mmol), NaOt-Bu (13.13g, 136.64mmol)을 첨가하고 100°C 에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 15.07g (수율: 40%)를 얻었다.

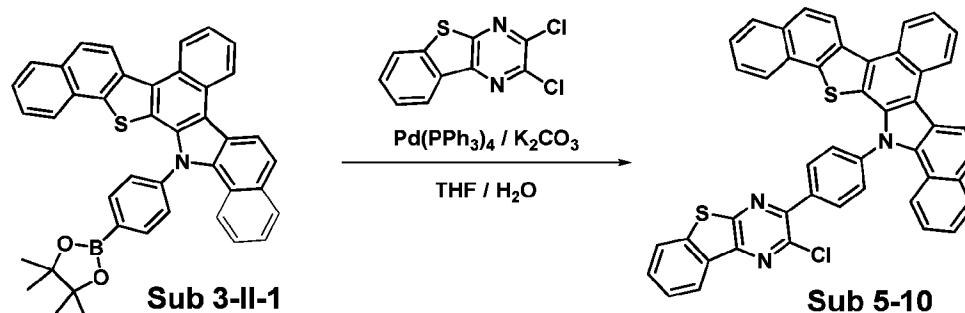
[658]

[659] Sub 5-10 합성에

[660]



[661]



[662] (1) Sub 3-I-1 합성

[663] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(73) (28g, 66.11mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (694ml)으로 녹인 후에, 1,4-dibromobenzene (17.16g, 72.72mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.91g, 0.99mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.67g, 3.31mmol), NaOt-Bu (9.53g, 99.17mmol)을 첨가하고 100°C 에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 27.16g (수율: 71%)를 얻었다.

[664] (2) Sub 3-II-1 합성

[665] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-1 (27.16g, 46.95mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF (235ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (13.11g, 51.64mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$

(1.03g, 1.41mmol), KOAc (13.82g, 140.84mmol)를 첨가하고 120 °C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 22.03g (수율: 75%)를 얻었다.

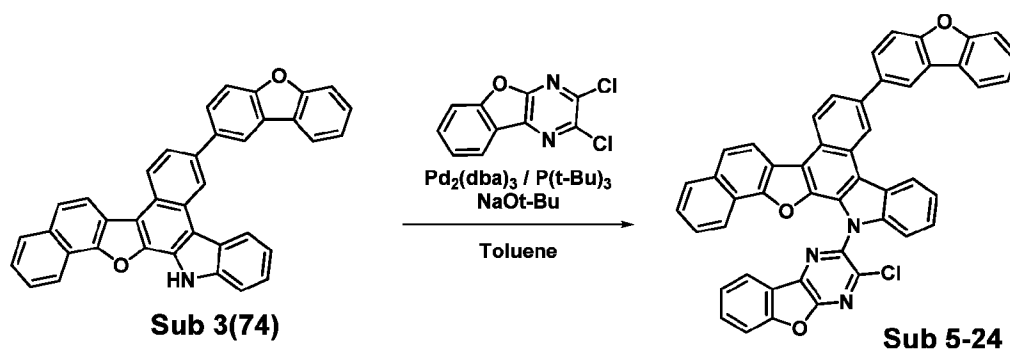
[666] (3) Sub 5-10 합성

[667] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-1 (22.03g, 35.21mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (155ml)로 녹인 후에, 2,3-dichlorobenzo[4,5]thieno[2,3-b]pyrazine (8.98g, 35.21mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.61g, 0.53mmol), K₂CO₃ (7.30g, 52.82mmol), 물 (77.47ml)을 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.61g (수율: 38%)을 얻었다.

[668]

[669] Sub 5-24 합성예

[670]

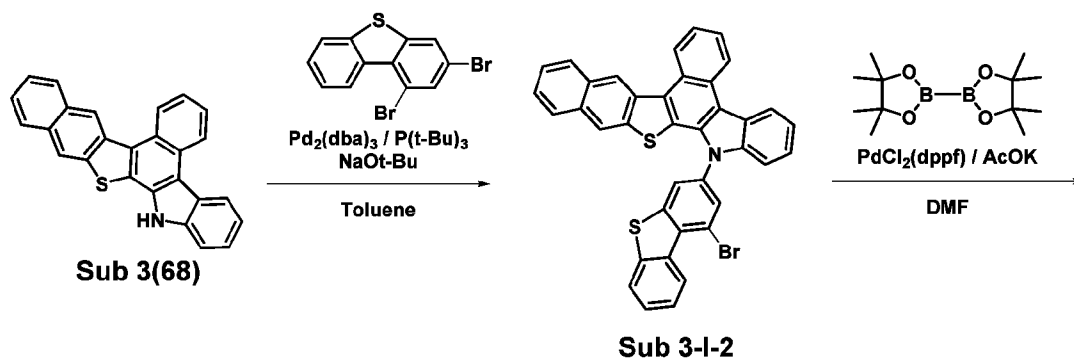


[671] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(74) (31.61g, 60.37mmol), 2,3-dichlorobenzo[4,5]thieno[2,3-b]pyrazine (15.88g, 66.41mmol), Pd₂(dba)₃ (1.66g, 1.81mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.98g, 4.83mmol), NaOt-Bu (17.41g, 181.11mmol), toluene (302ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 18.41g (수율: 42%)를 얻었다.

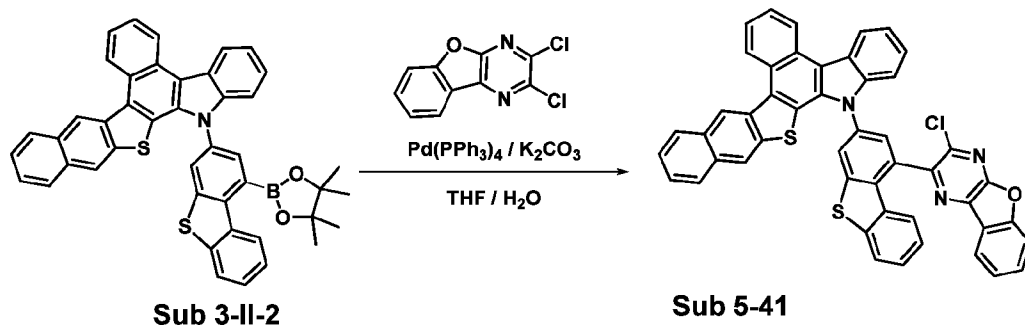
[672]

[673] Sub 5-41 합성예

[674]



[675]



[676] 1) Sub 3-I-2 합성

[677] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(68) (53g, 141.91mmol)에

1,3-dibromodibenzo[b,d]thiophene (48.54g, 141.91mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.95g, 2.13mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.44g, 7.10mmol), NaOt-Bu (20.46g, 212.87mmol), toluene (1490ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 32.42g (수율: 36%)를 얻었다.

[678] 2) Sub 3-II-2 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-2 (32g, 50.42mmol), DMF (252ml), Bis(pinacolato)diboron (14.09g, 55.47mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (1.11g, 1.51mmol), KOAc (14.85g, 151.27mmol)를 상기 Sub 3-II-1 합성방법을 사용하여 생성물 25.09g (수율: 73%)를 얻었다.

[680] 3) Sub 5-41 합성

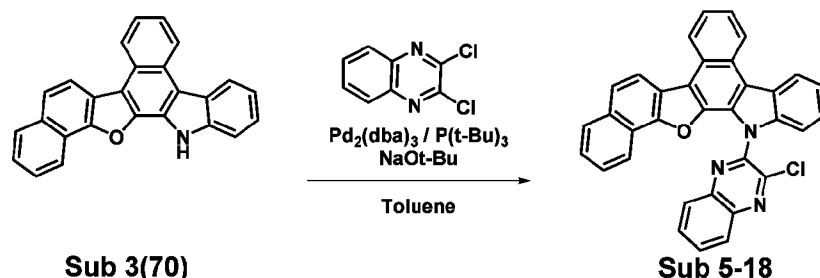
[681] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-2 (25g, 36.67mmol)에

2,3-dichlorobenzofuro[2,3-b]pyrazine (8.77g, 36.67mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.64g, 0.55mmol), K_2CO_3 (7.60g, 55.01mmol), THF (161ml), 물 (80ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-10 합성법을 사용하여 생성물 11.40g (수율: 41%)을 얻었다.

[682]

[683] Sub 5-18 합성예

[684]

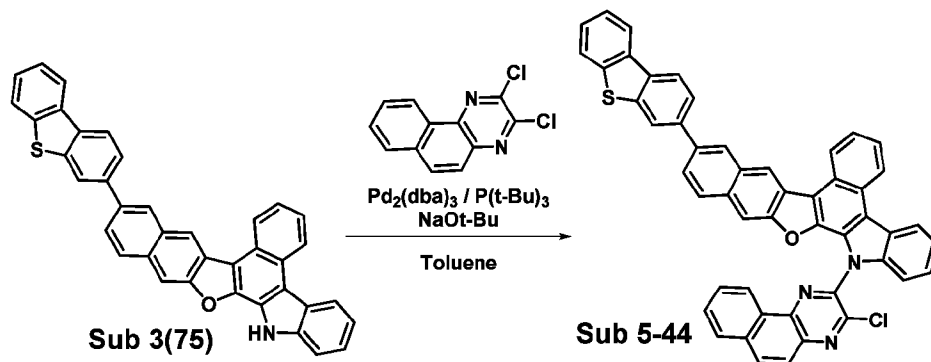


상기 합성에서 얻어진 Sub 3(70) (10.5g, 29.38mmol)에 2,3-dichloroquinoxaline (5.85g, 29.38mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.40g, 0.44mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.30g, 1.47mmol), NaOt-Bu (4.23g, 44.07mmol), toluene (308ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 11g (수율: 72%)를 얻었다.

[686]

[687] Sub 5-44 합성예

[688]



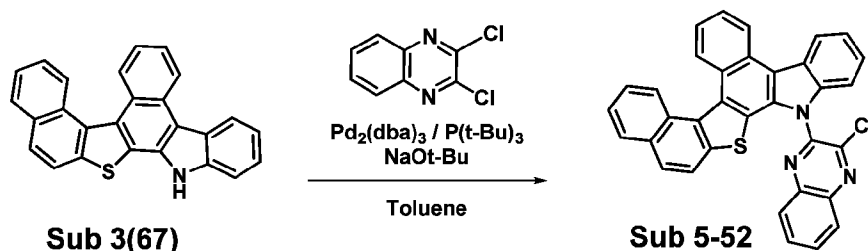
[689] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(75) (20g, 37.06mmol)에

2,3-dichlorobenzof[quinoxaline (9.23g, 37.06mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.51g, 0.56mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.37g, 1.85mmol), NaOt-Bu (5.34g, 55.59mmol), toluene (389ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 11.15g (수율: 40%)를 얻었다.

[690]

[691] Sub 5-52 합성예

[692]

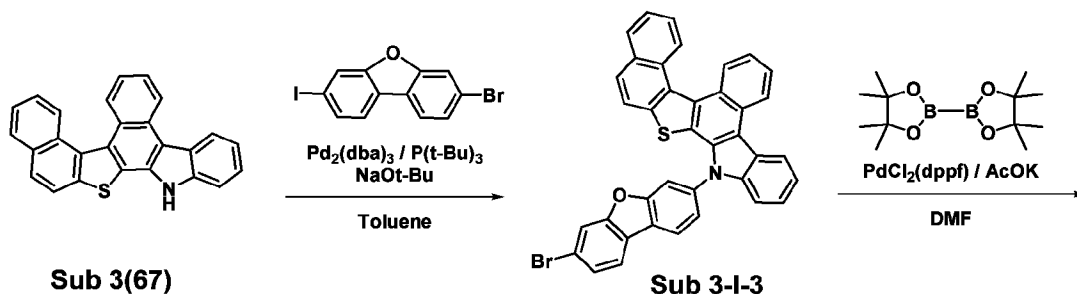


[693] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(67) (12g, 32.13mmol)에 2,3-dichloroquinoxaline (6.40g, 32.13mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.44g, 0.48mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.33g, 1.61mmol), NaOt-Bu (4.63g, 48.20mmol), toluene (337ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 11.71g (수율: 68%)를 얻었다.

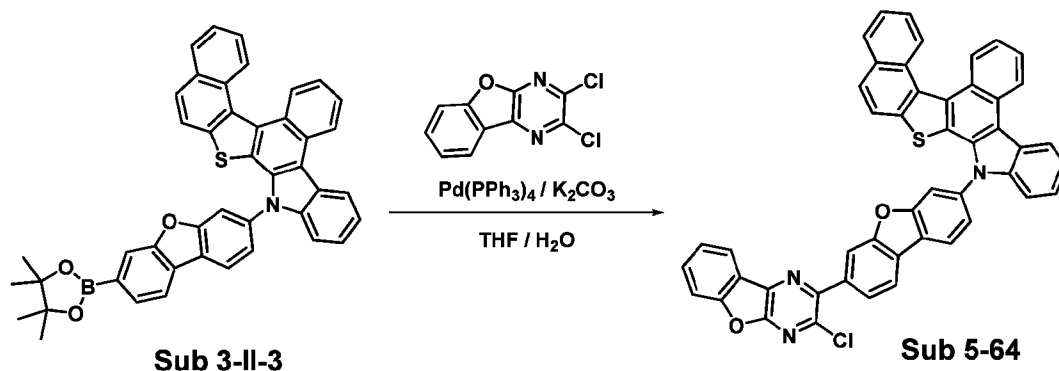
[694]

[695] Sub 5-64 합성예

[696]



[697]



[698] 1) Sub 3-I-3 합성

[699] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(67) (39g, 104.43mmol)에 3-bromo-7-iododibenzo[b,d]furan (38.95g, 104.43mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.43g, 1.57mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.06g, 5.22mmol), NaOt-Bu (15.05g, 156.64mmol), toluene (1096ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 38.76g (수율: 60%)를 얻었다.

[700] 2) Sub 3-II-3 합성

[701] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-3 (38.5g, 62.24mmol), DMF (311ml), Bis(pinacolato)diboron (17.39g, 68.47mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (1.37g, 1.87mmol), KOAc (18.33g, 186.73mmol)를 상기 Sub 3-II-1 합성방법을 사용하여 생성물 31.49g (수율: 76%)를 얻었다.

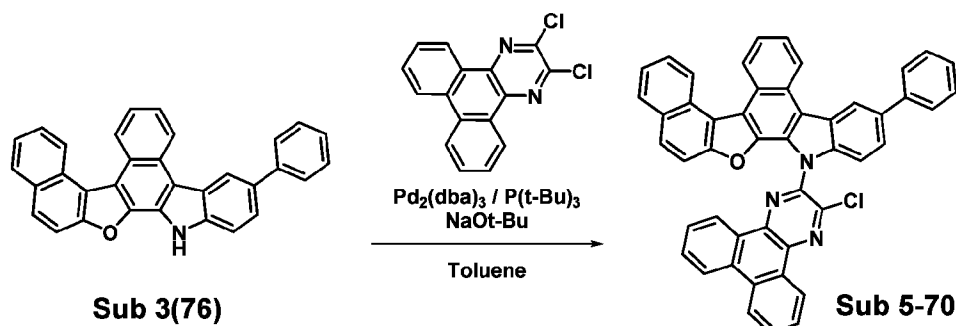
[702] 3) Sub 5-64 합성

[703] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-3 (31g, 46.57mmol)에 2,3-dichlorobenzofuro[2,3-b]pyrazine (11.13g, 46.57mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.81g, 0.70mmol), K_2CO_3 (9.66g, 69.86mmol), THF (205ml), 물 (102ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 11.06g (수율: 32%)을 얻었다.

[704]

[705] Sub 5-70 합성예

[706]



[707] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3(76) (11g, 25.37mmol)에

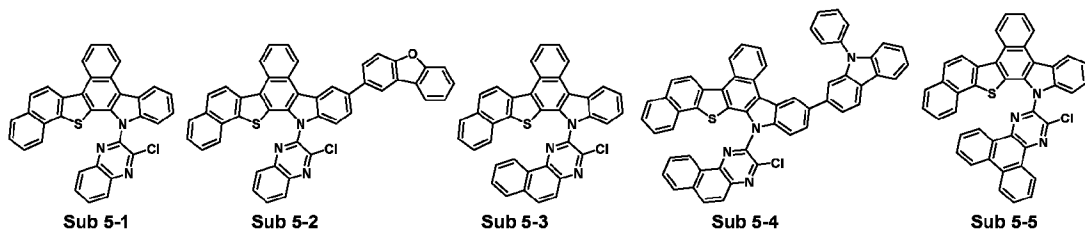
2,3-dichlorodibenzo[f,h]quinoxaline (7.59g, 25.37mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.35g, 0.38mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.26g, 1.27mmol), NaOt-Bu (3.66g, 38.06mmol), toluene (266ml)을 첨가하고 상기 Sub 5-4 합성법을 사용하여 생성물 11.13g (수율:

63%)를 얻었다.

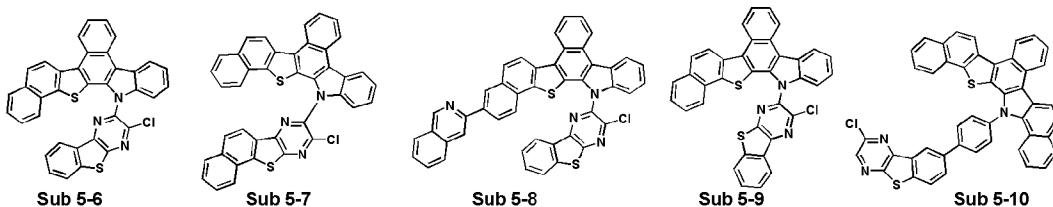
[708]

[709] Sub 5의 예시

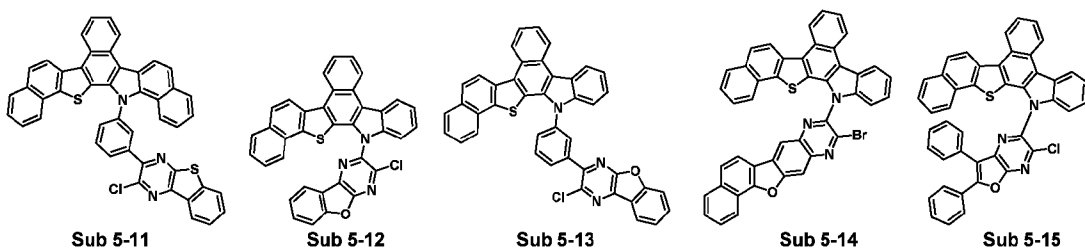
[710]



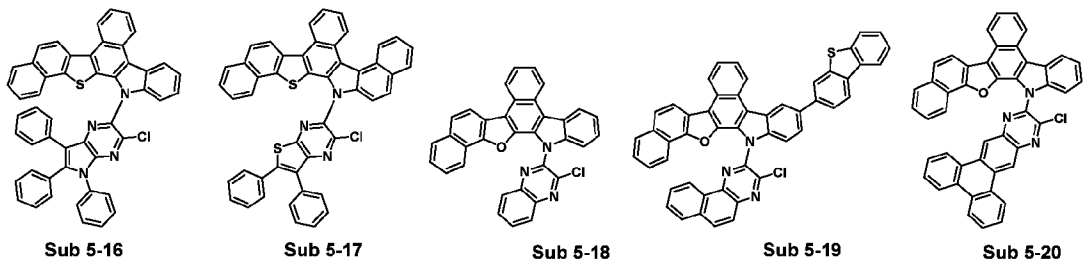
[711]



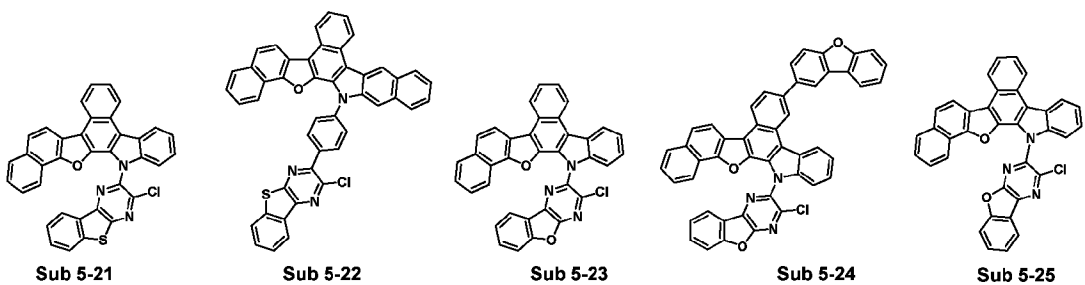
[712]



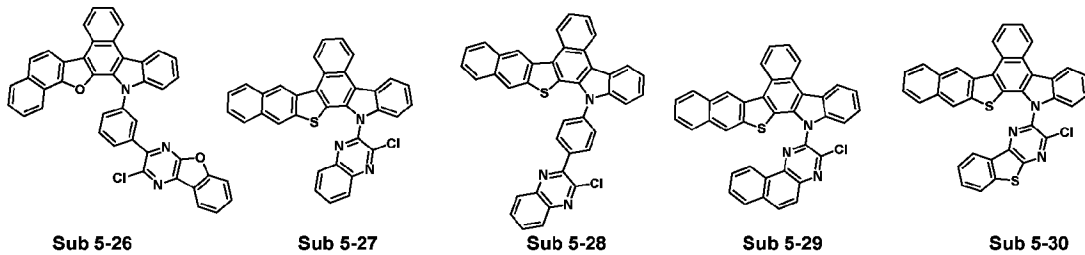
[713]



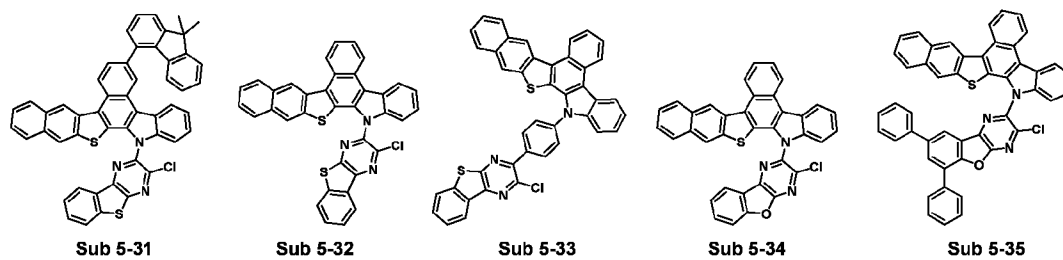
[714]



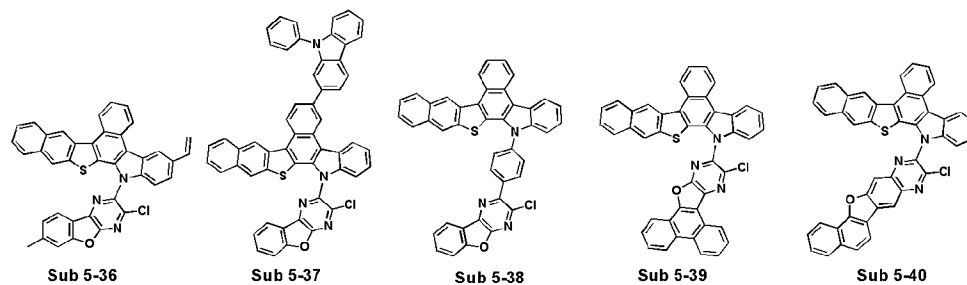
[715]



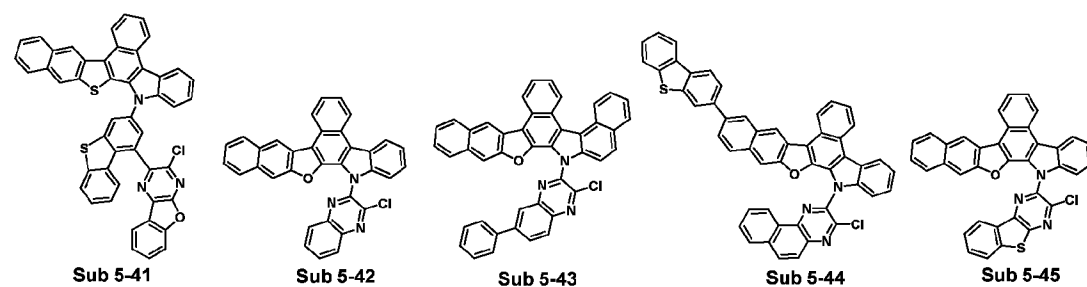
[716]



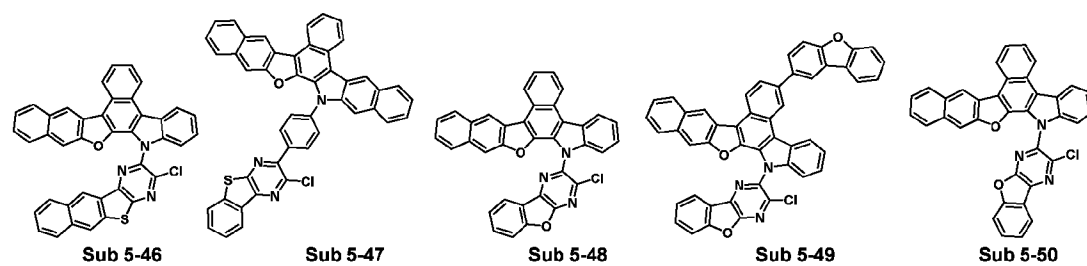
[717]



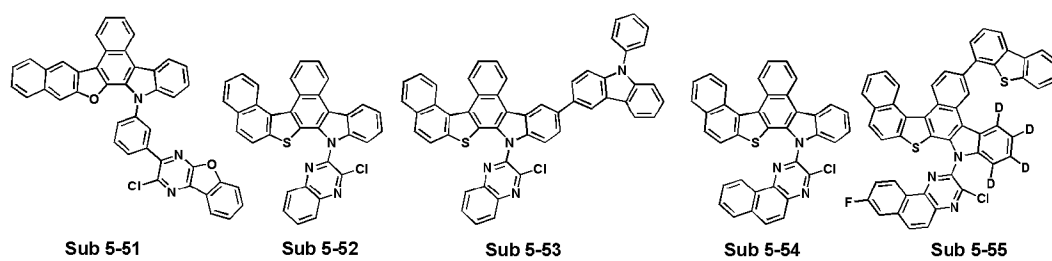
[718]



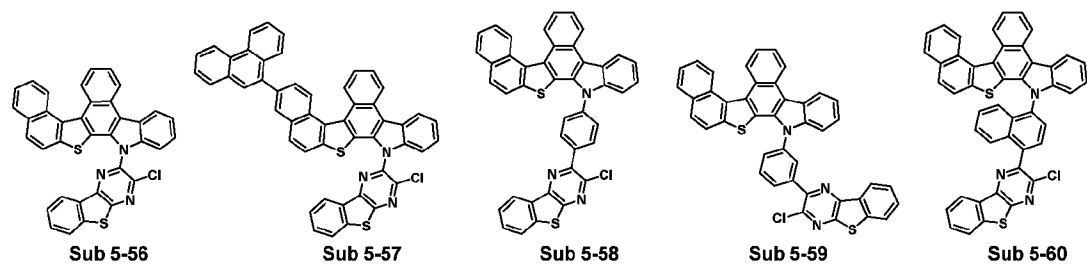
[719]



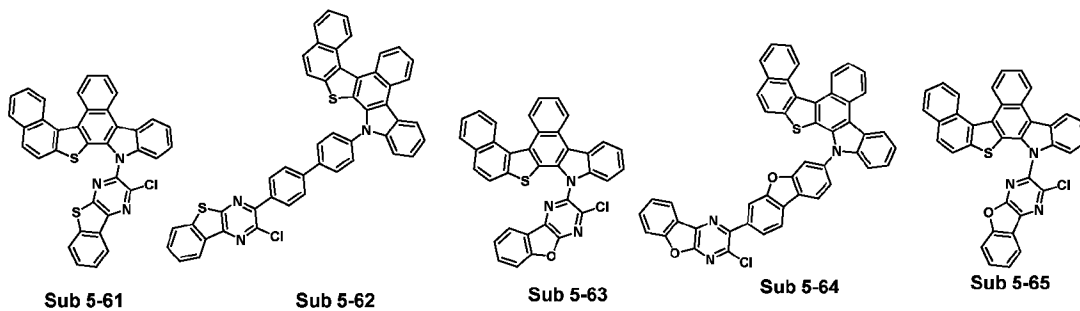
[720]



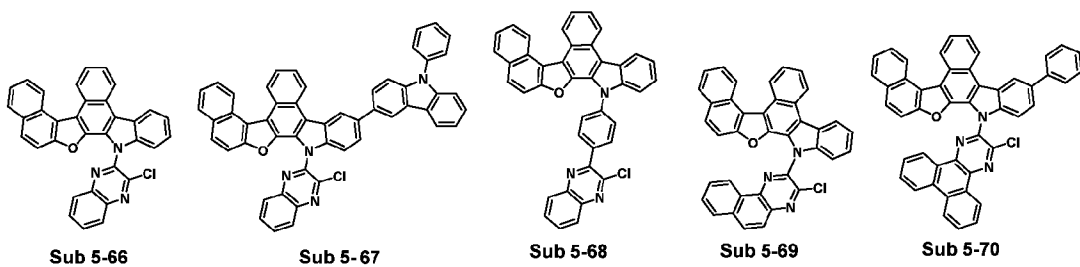
[721]



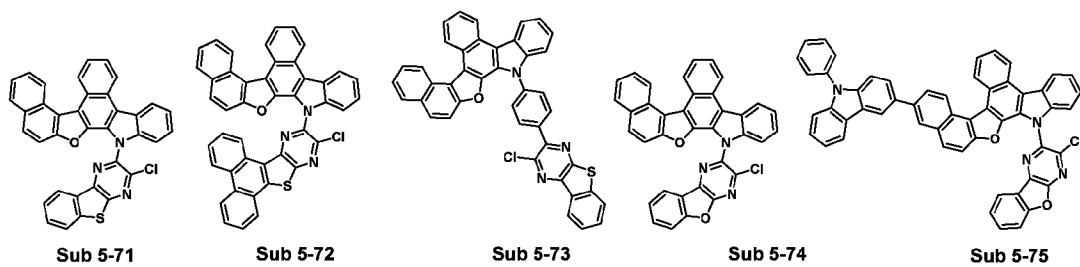
[722]



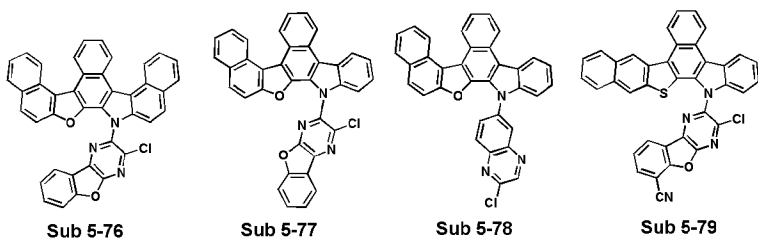
[723]



[724]



[725]



[726]

[727] [표5]

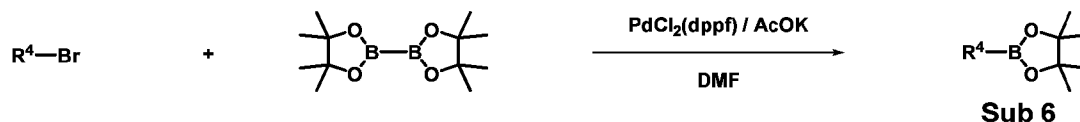
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 5-1	m/z=541.05(C ₃₂ H ₁₆ ClN ₃ S ₂ =542.07)	Sub 5-4	m/z=782.14(C ₅₀ H ₂₇ ClN ₄ S ₂ =783.36)
Sub 5-10	m/z=717.11(C ₄₆ H ₂₄ ClN ₃ S ₂ =718.29)	Sub 5-18	m/z=519.11(C ₃₄ H ₁₈ ClN ₃ O=519.99)
Sub 5-24	m/z=725.15(C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ O ₃ =726.19)	Sub 5-41	m/z=757.10(C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ OS ₂ =758.31)
Sub 5-44	m/z=751.15(C ₅₀ H ₂₆ ClN ₃ OS=752.29)	Sub 5-52	m/z=535.09(C ₃₄ H ₁₈ ClN ₃ S=536.05)
Sub 5-64	m/z=741.13(C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ O ₂ S=742.25)	Sub 5-70	m/z=695.18(C ₄₈ H ₂₆ ClN ₃ O=696.21)

[728]

[729] Sub 6의 합성

[730] 상기 반응식 5의 Sub 6는 반응식의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[731]

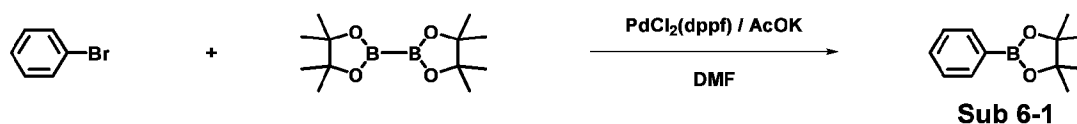


[732] Sub 2에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[733] 1. Sub 6-1 합성예

[734] <반응식 24>

[735]



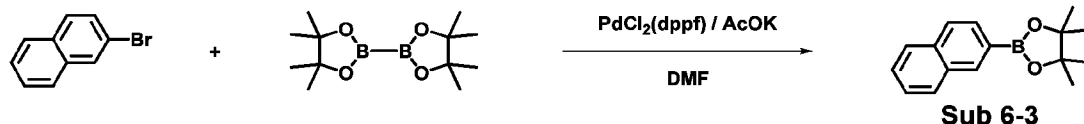
[736] 출발물질인 bromobenzene (29.16 g, 185.72 mmol)를 둥근바닥플라스크에 DMF (930ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (51.88 g, 204.29 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.55 g, 5.57 mmol), KOAc (54.68 g, 557.16 mmol)를 첨가하고 90 °C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 31.84 g (수율: 84%)를 얻었다.

[737]

[738] 2. Sub 6-3 합성예

[739] <반응식 25>

[740]



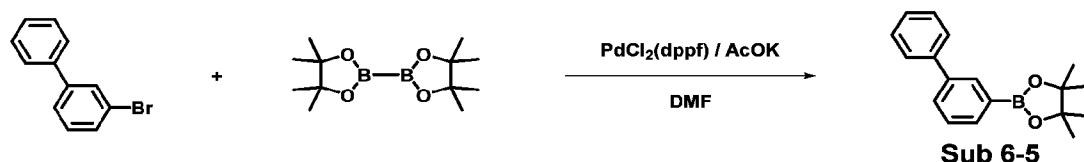
[741] 출발물질인 2-bromonaphthalene (21.53 g, 103.97 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (29.04 g, 114.37 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.55 g, 3.12 mmol), KOAc (30.61 g, 311.92 mmol), DMF (520ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 21.14 g (수율: 80%)를 얻었다.

[742]

[743] 3. Sub 6-5 합성예

[744] <반응식 26>

[745]



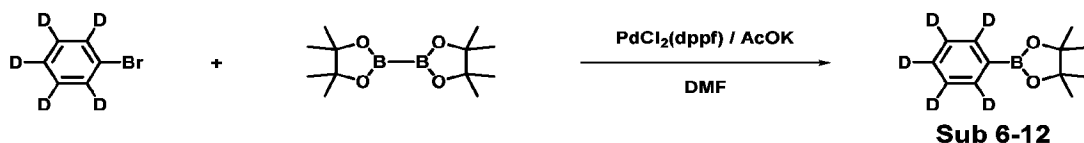
[746] 출발물질인 3-bromo-1,1'-biphenyl (16.24 g, 69.67 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (19.46 g, 76.63 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.71 g, 2.09 mmol), KOAc (20.51 g, 209.00 mmol), DMF (350ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 15.81 g (수율: 81%)를 얻었다.

[747]

[748] 4. Sub 6-12 합성예

[749] <반응식 27>

[750]



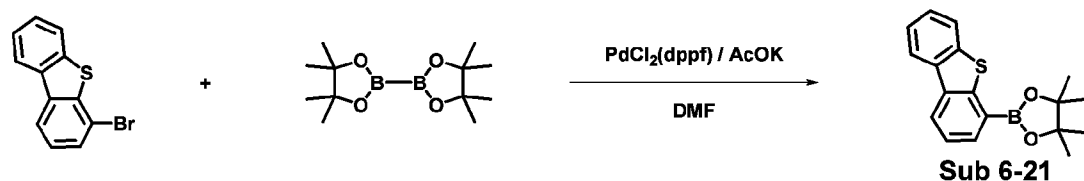
[751] 출발물질인 1-bromobenzene-2,3,4,5,6-d5 (10.85 g, 66.96 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (18.70 g, 73.65 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.64 g, 2.01 mmol), KOAc (19.71 g, 200.88 mmol), DMF (335ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 10.22 g (수율: 73%)를 얻었다.

[752]

[753] 5. Sub 6-21 합성예

[754] <반응식 28>

[755]



[756] 출발물질인 4-bromodibenzo[b,d]thiophene (14.23 g, 54.08 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (15.11 g, 59.48 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.32 g, 1.62 mmol),

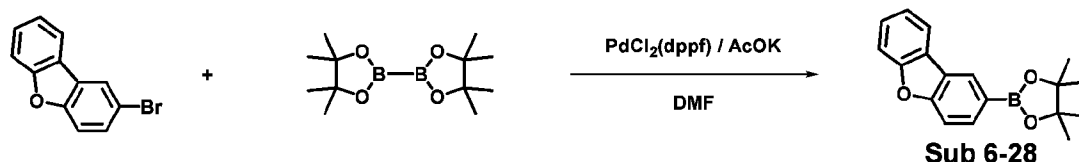
KOAc (15.92 g, 162.23 mmol), DMF (270ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 13.76 g (수율: 82%)를 얻었다.

[757]

[758] 6. Sub 6-28 합성예

[759] <반응식 29>

[760]



[761] 출발물질인 2-bromodibenzo[b,d]furan (16.35 g, 66.17 mmol)에

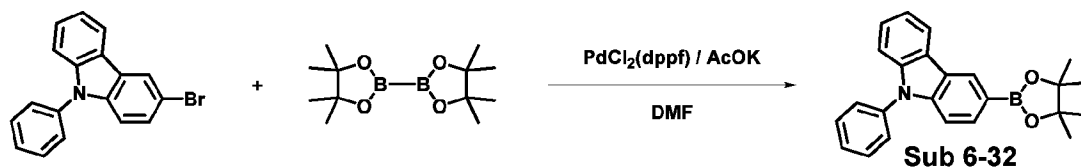
Bis(pinacolato)diboron (18.48 g, 72.79 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.62 g, 1.99 mmol), KOAc (19.48 g, 198.51 mmol), DMF (330ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 16.74 g (수율: 86%)를 얻었다.

[762]

[763] 7. Sub 6-32 합성예

[764] <반응식 30>

[765]



[766] 출발물질인 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (12.17 g, 37.77 mmol)에

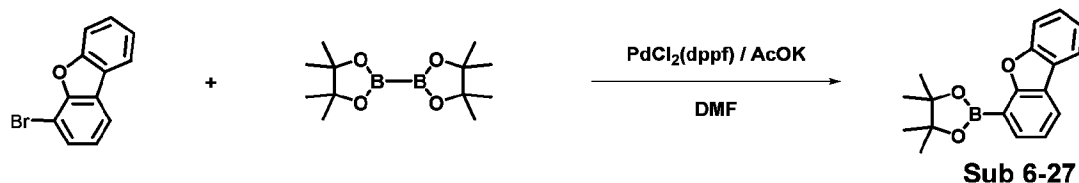
Bis(pinacolato)diboron (10.55 g, 41.55 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (0.93 g, 1.13 mmol), KOAc (11.12 g, 113.31 mmol), DMF (190ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 10.46 g (수율: 75%)를 얻었다.

[767]

[768] 8. Sub 6-27 합성예

[769] <반응식 31>

[770]



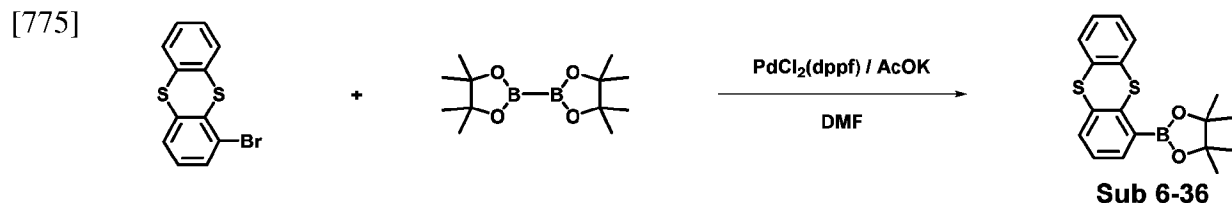
[771] 출발물질인 1-bromodibenzo[b,d]furan (16.78 g, 67.91 mmol)에

Bis(pinacolato)diboron (18.97 g, 74.70 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.66 g, 2.04 mmol), KOAc (19.99 g, 203.73 mmol), DMF (340ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 15.98 g (수율: 80%)를 얻었다.

[772]

[773] 9. Sub 6-36 합성예

[774] <반응식 32>

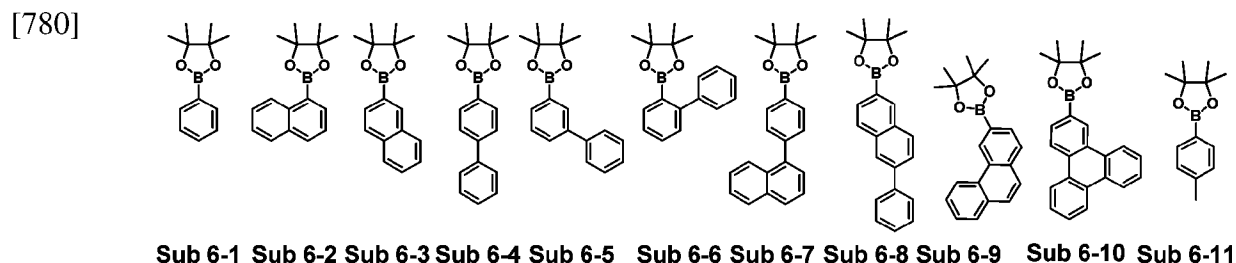


[776] 출발물질인 1-bromothianthrene (13.31 g, 45.09 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (12.59 g, 49.60 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.10 g, 1.35 mmol), KOAc (13.27 g, 135.26 mmol), DMF (225ml)를 첨가하고 상기 Sub 6-1 합성법을 사용하여 생성물 10.34 g (수율: 67%)를 얻었다.

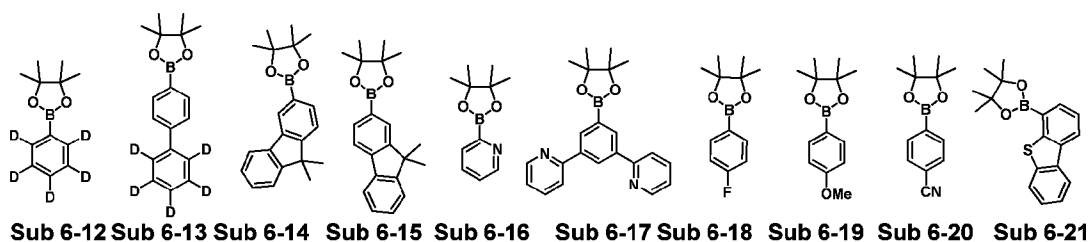
[777]

[778] Sub 6에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 6은 Sub 6에 속하는 일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.

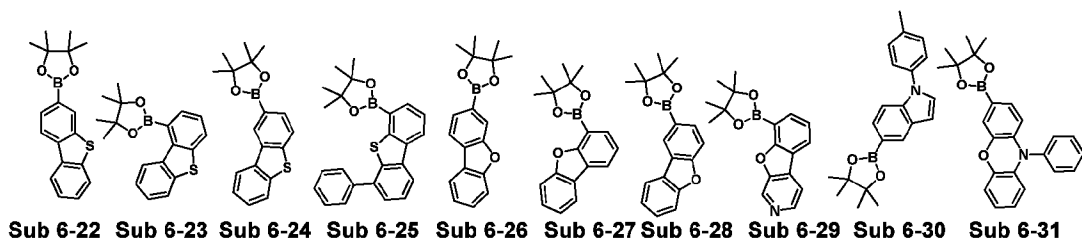
[779]



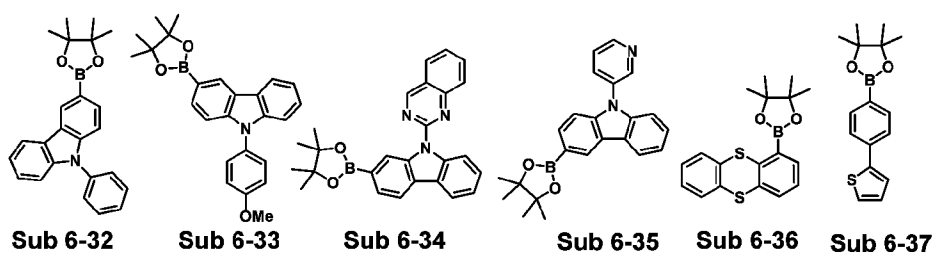
[781]



[782]



[783]



[784]

[785] [표6]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 6-1	m/z=204.13(C ₁₂ H ₁₇ BO ₂ =204.08)	Sub 6-3	m/z=254.15(C ₁₆ H ₁₉ BO ₂ = 254.14)
Sub 6-5	m/z=280.16(C ₁₈ H ₂₁ BO ₂ =280.17)	Sub 6-12	m/z=209.16(C ₁₂ H ₁₂ D ₅ BO ₂ =209 .11)
Sub 6-21	m/z=310.12(C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S=310.2 2)	Sub 6-28	m/z=294.14(C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.1 6)
Sub 6-32	m/z=369.19(C ₂₄ H ₂₄ BNO ₂ =369. 27)	Sub 6-27	m/z=294.14(C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.1 6)
Sub 6-36	m/z=342.09(C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S ₂ =342. 28)		

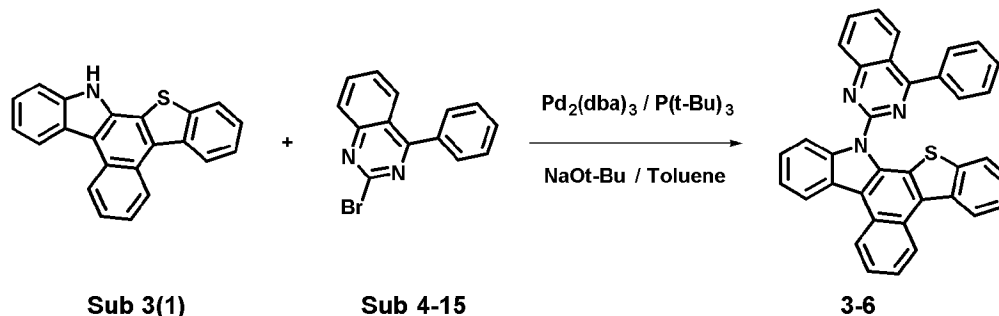
[786]

[787] Final products 2합성 예시

[788]

[789] 3-6 합성예시

[790]

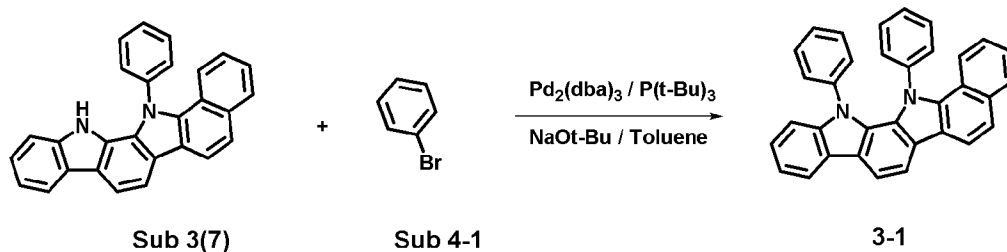


[791] Sub 3(1) (15.3g, 47.3 mmol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 toluene (500 mL)으로 녹인 후에, Sub 4-15(14.8g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.1 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156.1 mmol)을 첨가하고 100°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 17.0g (수율: 68%)를 얻었다.

[792]

[793] 3-1 합성예시

[794]

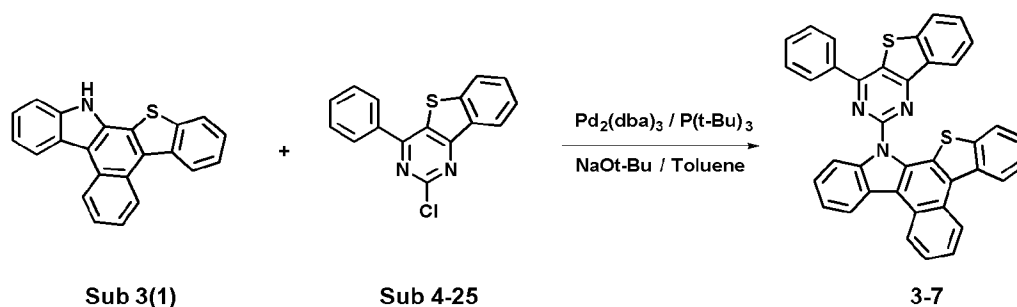


[795] Sub 3(7) (18.1g, 47.3 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-1(8.2g, 52.0 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.0 g, 2.2 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.9 g, 4.4 mmol), NaOt-Bu (12.7 g, 132 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 15.6g (수율: 72%)를 얻었다.

[796]

[797] 3-7 합성예시

[798]

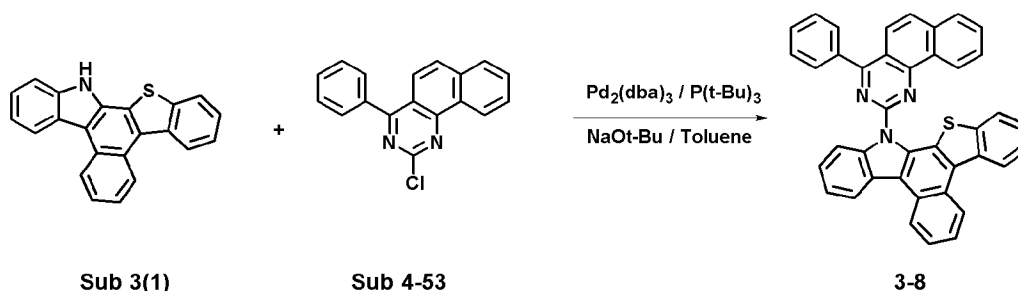


[799] Sub 3(1) (15.3g, 47.3 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-25(15.4g, 52.0 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.4 g, 2.6 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 19.3g (수율: 70%)를 얻었다.

[800]

[801] 3-8 합성예시

[802]

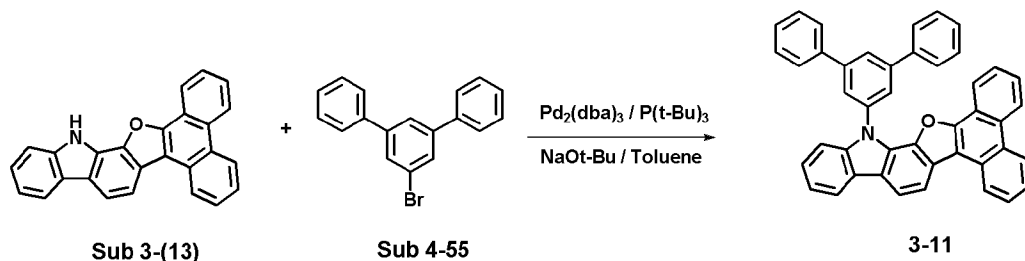


[803] Sub 3(1) (15.3g, 47.3 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-53(15.1g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.4 g, 2.6 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 19.4g (수율: 71%)를 얻었다.

[804]

[805] 3-11 합성예시

[806]

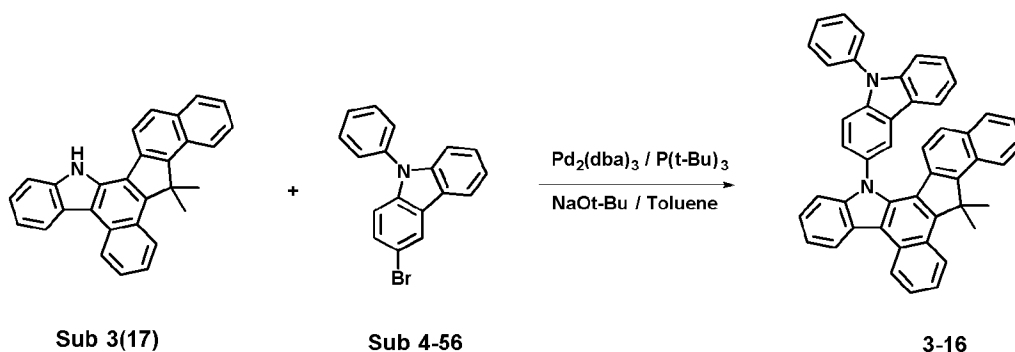


[807] Sub 3(13) (16.9g, 47.3 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-55(16.1g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 20.2g (수율: 73%)를 얻었다.

[808]

[809] 3-16 합성예시

[810]

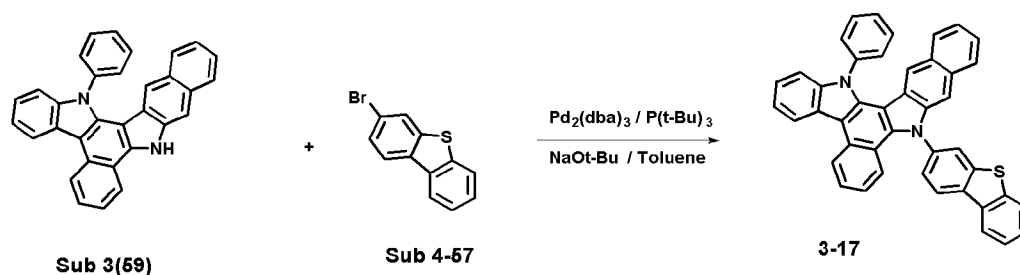


[811] Sub 3(17) (18.1g, 47.2 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-56(16.7g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 19.8g (수율: 67%)를 얻었다.

[812]

[813] 3-17 합성예시

[814]

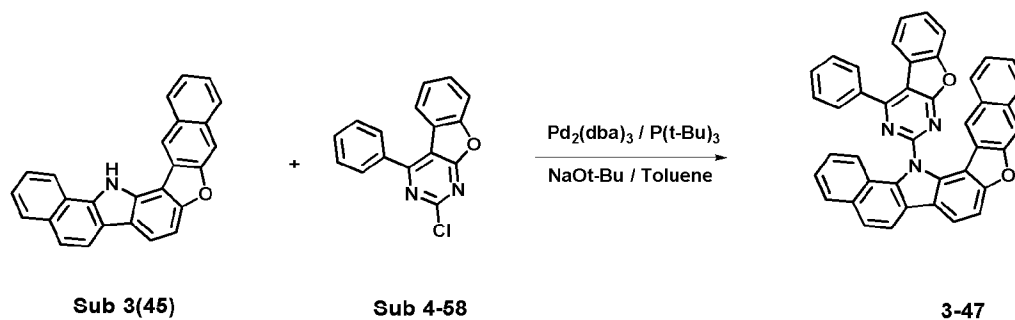


[815] Sub 3(59) (20.5g, 47.4 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-57(13.7g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol)을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 20.1g (수율: 69%)를 얻었다.

[816]

[817] 3-47 합성예시

[818]

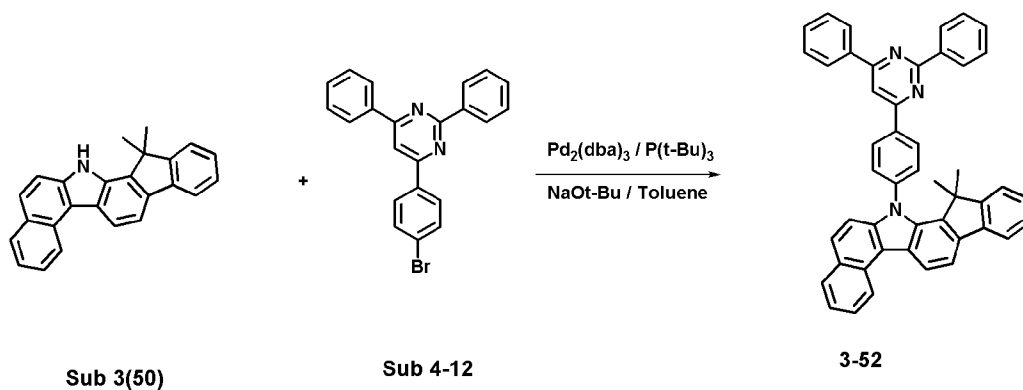


[819] Sub 3(45) (16.9g, 47.3 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-58(14.6g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol) 을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 20.5g (수율: 72%)를 얻었다.

[820]

[821] 3-52 합성예시

[822]

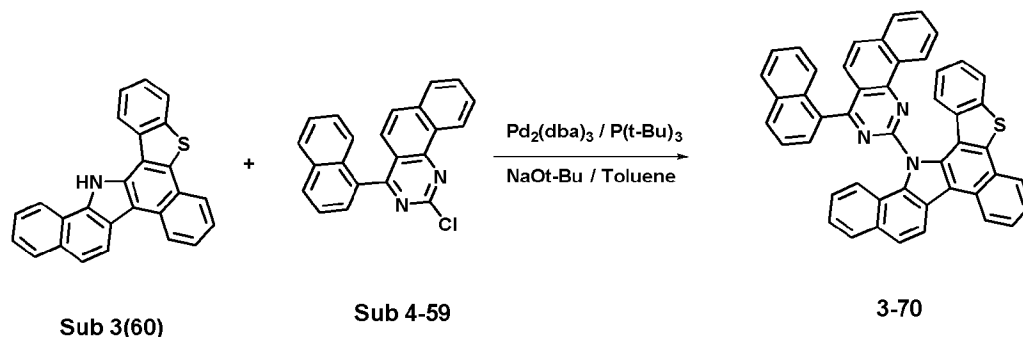


[823] Sub 3(50) (15.8g, 47.4 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-12(20.2g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol) 을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 20.0g (수율: 66%)를 얻었다.

[824]

[825] 3-70 합성예시

[826]

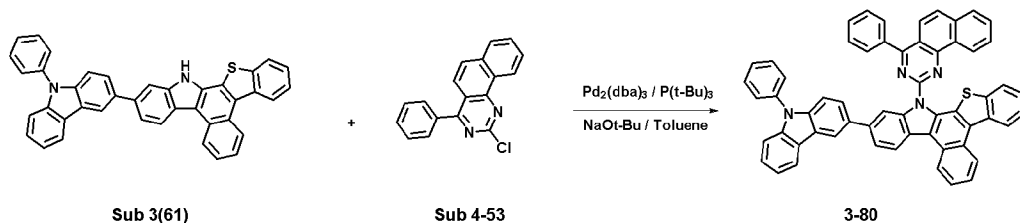


[827] Sub 3(60) (17.7g, 47.4 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-59(17.8g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol) 을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 22.8g (수율: 71%)를 얻었다.

[828]

[829] 3-80 합성예시

[830]

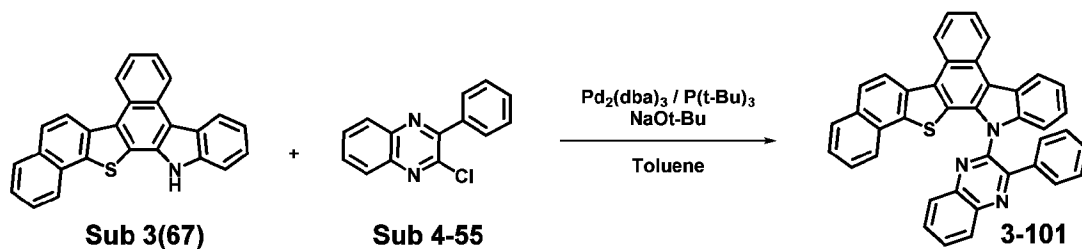


[831] Sub 3(61) (26.8g, 47.4 mmol), toluene (500 mL), Sub 4-53(15.1g, 52.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.4 g, 2.6 mmol), P(*t*-Bu)₃ (1.05 g, 5.2 mmol), NaOt-Bu (15 g, 156 mmol) 을 상기 3-6의 합성법을 이용하여 최종 생성물 26.4g (수율: 68%)를 얻었다.

[832]

[833] 3-101 합성예시

[834]



[835] Sub 3(67) (10g, 26.78mmol), toluene (281ml), Sub 4-55 (7.09g, 29.45mmol), Pd₂(dba)₃ (0.74g, 0.80mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.54g, 2.68mmol), NaOt-Bu (7.72g, 80.33mmol)을 상기 Sub 3-6의 합성법을 이용하여 생성물 11.91g (수율: 77%)를 얻었다.

[836]

[837] [표7]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
3-1	m/z=458.18(C ₃₄ H ₂₂ N ₂ =458.56)	3-2	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.57)
3-3	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)	3-4	m/z=535.23(C ₄₁ H ₂₉ N=535.69)
3-5	m/z=399.11(C ₂₈ H ₁₇ NS=399.51)	3-6	m/z=527.15(C ₃₆ H ₂₁ N ₃ S=527.65)
3-7	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.73)	3-8	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)
3-9	m/z=627.18(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S=627.77)	3-10	m/z=475.14(C ₃₄ H ₂₁ NS=475.61)
3-11	m/z=585.21(C ₄₄ H ₂₇ NO=585.71)	3-12	m/z=509.21(C ₃₉ H ₂₇ N=509.65)
3-13	m/z=509.19(C ₃₇ H ₂₃ N ₃ =509.61)	3-14	m/z=451.11(C ₃₀ H ₁₇ N ₃ S=451.55)
3-15	m/z=588.20(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ O=588.67)	3-16	m/z=624.26(C ₄₇ H ₃₂ N ₂ =624.79)
3-17	m/z=614.18(C ₄₄ H ₂₆ N ₂ S=614.77)	3-18	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.57)
3-19	m/z=573.17(C ₄₂ H ₂₃ NO ₂ =573.65)	3-20	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.81)
3-21	m/z=624.26(C ₄₇ H ₃₂ N ₂ =624.79)	3-22	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)
3-23	m/z=664.23(C ₄₇ H ₂₈ N ₄ O=664.77)	3-24	m/z=737.28(C ₅₅ H ₃₅ N ₃ =737.91)
3-25	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.89)	3-26	m/z= 679.21(C ₄₈ H ₂₉ N ₃ S=679.84)
3-27	m/z=625.22(C ₄₅ H ₂₇ N ₃ O=625.73)	3-28	m/z=575.24(C ₄₂ H ₂₉ N ₃ =575.72)
3-29	m/z=508.19(C ₃₈ H ₂₄ N ₂ =508.62)	3-30	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.57)
3-31	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)	3-32	m/z=531.20(C ₄₁ H ₂₅ N=531.66)
3-33	m/z=608.23(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ =608.74)	3-34	m/z=475.14(C ₃₄ H ₂₁ NS=475.61)
3-35	m/z=384.13(C ₂₇ H ₁₆ N ₂ O=384.44)	3-36	m/z=614.25(C ₄₄ H ₃₀ N ₄ =614.75)
3-37	m/z=508.19(C ₃₈ H ₂₄ N ₂ =508.62)	3-38	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.57)
3-39	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)	3-40	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.59)
3-41	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.78)	3-42	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)
3-43	m/z=587.20(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ O=587.68)	3-44	m/z=613.25(C ₄₅ H ₃₁ N ₃ =613.76)

3-45	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.80)	3-46	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)
3-47	m/z=601.18(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ O ₂ =601.67)	3-48	m/z=759.27(C ₅₇ H ₃₃ N ₃ S=759.91)
	)		
3-49	m/z=589.22(C ₄₂ H ₂₆ N ₄ =586.70)	3-50	m/z=630.19(C ₄₃ H ₂₆ N ₄ S=630.77)
3-51	m/z=613.22(C ₄₄ H ₂₇ N ₃ O=613.72)	3-52	m/z=639.27(C ₄₇ H ₃₃ N ₃ =639.80)
3-53	m/z=508.19(C ₃₈ H ₂₄ N ₂ =508.62)	3-54	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.57)
3-55	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)	3-56	m/z=609.25(C ₄₇ H ₃₁ N=609.77)
3-57	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.78)	3-58	m/z=604.17(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ S=604.73)
3-59	m/z=587.20(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ O=587.68)	3-60	m/z=613.25(C ₄₅ H ₃₁ N ₃ =613.76)
3-61	m/z=527.15(C ₃₆ H ₂₁ N ₃ S=527.65)	3-62	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)
3-63	m/z=511.17(C ₃₆ H ₂₁ N ₃ O=511.58)	3-64	m/z=587.24(C ₄₃ H ₂₉ N ₃ =587.73)
3-65	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.84)	3-66	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)
3-67	m/z=561.18(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O=561.64)	3-68	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=653.80)
3-69	m/z=736.26(C ₅₄ H ₃₂ N ₄ =736.88)	3-70	m/z=677.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S=677.83)
3-71	m/z=687.23(C ₅₀ H ₂₉ N ₃ O=687.80)	3-72	m/z=743.24(C ₅₃ H ₃₃ N ₃ S=743.93)
3-73	m/z=703.21(C ₅₀ H ₂₉ N ₃ S=703.86)	3-74	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)
3-75	m/z=735.18(C ₅₀ H ₂₉ N ₃ S ₂ =735.92)	3-76	m/z=759.18(C ₅₂ H ₂₉ N ₃ S ₂ =759.95)
3-77	m/z=475.14(C ₃₄ H ₂₁ NS=475.61)	3-78	m/z=616.20(C ₄₄ H ₂₈ N ₂ S=616.78)
3-79	m/z=710.16(C ₄₇ H ₂₆ N ₄ S ₂ =710.87)	3-80	m/z=818.25(C ₅₈ H ₃₄ N ₄ S=819.00)
3-81	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)	3-82	m/z=809.20(C ₅₆ H ₃₁ N ₃ S ₂ =810.01)
3-83	m/z=659.15(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S ₂ =659.83)	3-84	m/z=583.21(C ₄₀ H ₂₉ N ₃ S=583.75)
3-85	m/z=844.27(C ₆₀ H ₃₆ N ₄ S=845.04)	3-86	m/z=667.17(C ₄₆ H ₂₅ N ₃ OS=667.79)
			)

3-87	m/z=703.23(C ₅₀ H ₂₉ N ₃ O ₂ =703.80)	3-88	m/z=629.21(C ₄₄ H ₂₇ N ₃ O ₂ =629.72)
3-89	m/z=473.18(C ₃₅ H ₂₃ NO=473.58)	3-90	m/z=600.22(C ₄₄ H ₂₈ N ₂ O=600.72)
3-91	m/z=858.25(C ₆₀ H ₃₄ N ₄ OS=859.02)	3-92	m/z=792.26(C ₅₅ H ₃₂ N ₆ O=792.90)
3-93	m/z=514.24(C ₃₈ H ₃₀ N ₂ =514.67)	3-94	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.87)
3-95	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.85)	3-96	m/z=764.29(C ₅₆ H ₃₆ N ₄ =764.93)
3-97	m/z=700.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₂ =700.89)	3-98	m/z=576.26(C ₄₃ H ₃₂ N ₂ =576.74)
3-99	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.87)	3-100	m/z=761.28(C ₅₇ H ₃₅ N ₃ =761.93)

[838]

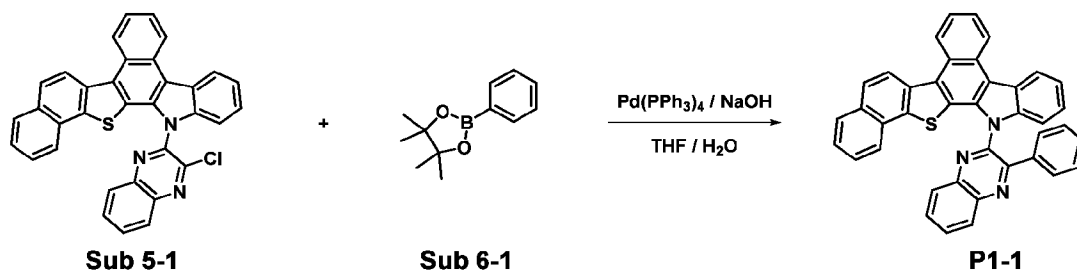
[839] Final Product 2' 합성

[840] Sub 4 (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 THF로 녹인 후에, Sub 5 (1 당량), Pd(PPh₃)₄ (0.04 당량), NaOH (3 당량), 물을 첨가하고 70°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물 (final product 2')를 얻었다.

[841]

[842] P1-1 합성에 (3-101을 상이한 합성방법에 의해 제조한 경우)

[843]

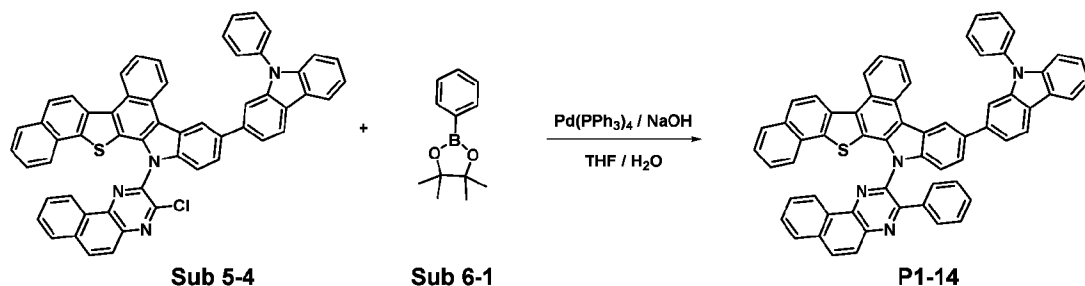


[844] Sub 5-1 (9g, 16.79mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF(74ml)로 녹인 후에, Sub 6-1 (3.43g, 16.79mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.78g, 0.67mmol), NaOH (2.01g, 50.37mmol), 물(37ml)을 첨가하고 70°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 7.47g를 얻었다. (수율: 77%)

[845]

[846] P1-14 합성에

[847]

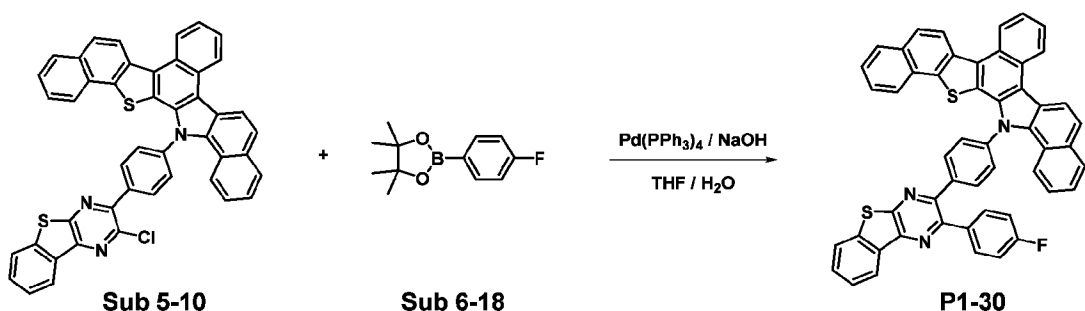


[848] Sub 5-4 (9g, 10.88mmol), THF(48ml), Sub 6-1 (2.22g, 10.88mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.5g, 0.44mmol), NaOH (1.31g, 32.63mmol), 물(24ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 6.71g를 얻었다. (수율: 71%)

[849]

[850] P1-30 합성예

[851]

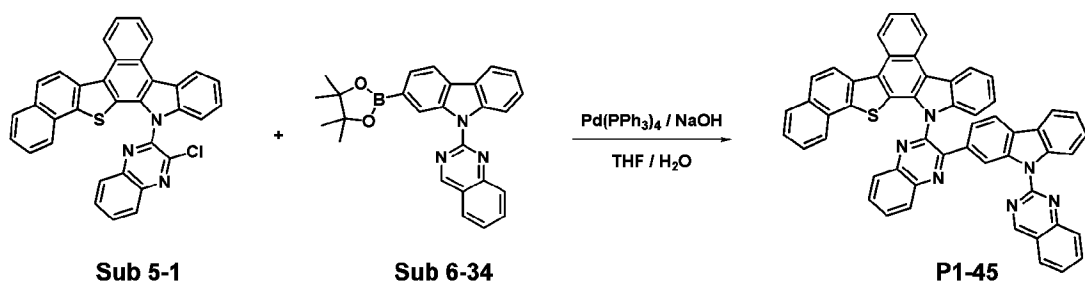


[852] Sub 5-10 (11g, 15.31mmol), THF(67ml), Sub 6-18 (3.4g, 15.31mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.71g, 0.61mmol), NaOH (1.84g, 45.94mmol), 물(34ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 7.51g를 얻었다. (수율: 63%)

[853]

[854] P1-45 합성예

[855]

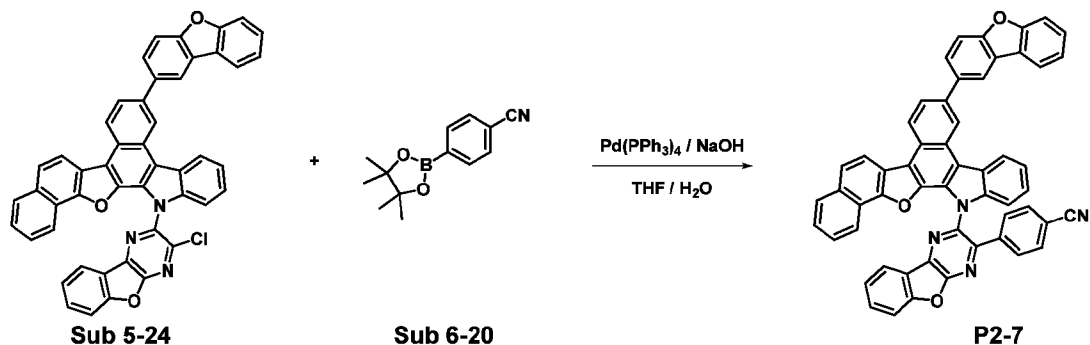


[856] Sub 5-1 (11g, 20.52mmol), THF(90ml), Sub 6-34 (8.65g, 20.52mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.95g, 0.82mmol), NaOH (2.46g, 61.56mmol), 물(45ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 9.95g를 얻었다. (수율: 61%)

[857]

[858] P2-7 합성예

[859]

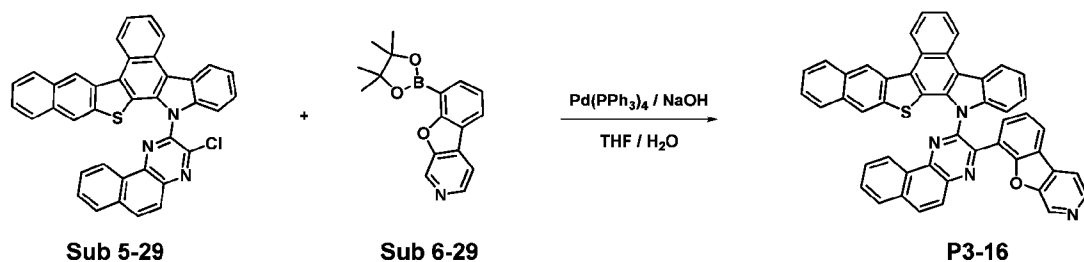


[860] Sub 5-24 (11g, 15.15mmol), THF(66ml), Sub 6-20 (3.47g, 15.15mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.61mmol), NaOH (1.82g, 45.44mmol), 물(33ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 7.69g를 얻었다. (수율: 64%)

[861]

[862] P3-16 합성예

[863]

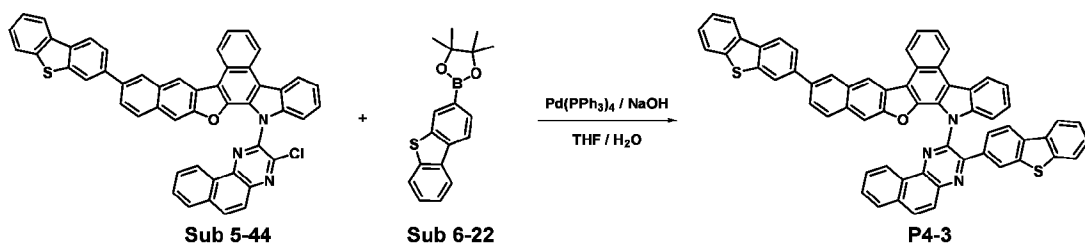


[864] Sub 5-29 (11g, 18.77mmol), THF(82ml), Sub 6-29 (5.54g, 18.77mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.87g, 0.75mmol), NaOH (2.25g, 56.30mmol), 물(41ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.5g를 얻었다. (수율: 63%)

[865]

[866] P4-3 합성예

[867]

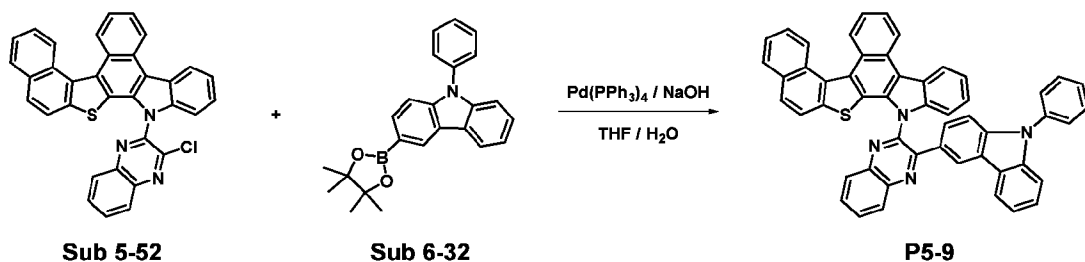


[868] Sub 5-44 (11g, 14.62mmol), THF(64ml), Sub 6-22 (4.54g, 14.62mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.68g, 0.58mmol), NaOH (1.75g, 43.87mmol), 물(32ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.03g를 얻었다. (수율: 61%)

[869]

[870] P5-9 합성예

[871]

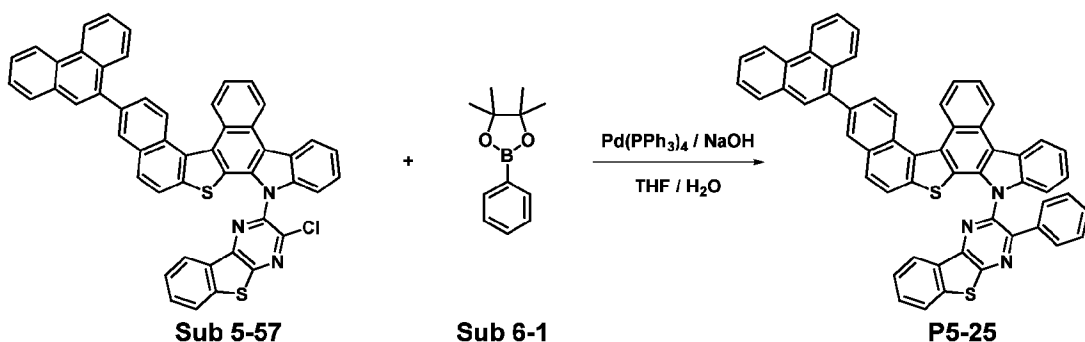


[872] Sub 5-52 (11g, 20.52mmol), THF(90ml), Sub 6-32 (7.58g, 20.52mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.95g, 0.82mmol), NaOH (2.46g, 61.56mmol), 물(45ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 10.98g를 얻었다. (수율: 72%)

[873]

[874] P5-25 합성예

[875]

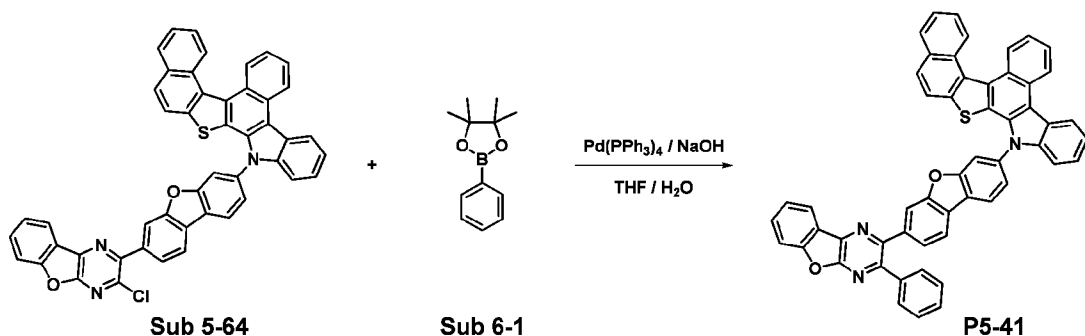


[876] Sub 5-57 (11g, 14.32mmol), THF(63ml), Sub 6-1 (2.92g, 14.32mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.66g, 0.57mmol), NaOH (1.72g, 42.95mmol), 물(31ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.35g를 얻었다. (수율: 72%)

[877]

[878] P5-41 합성예

[879]

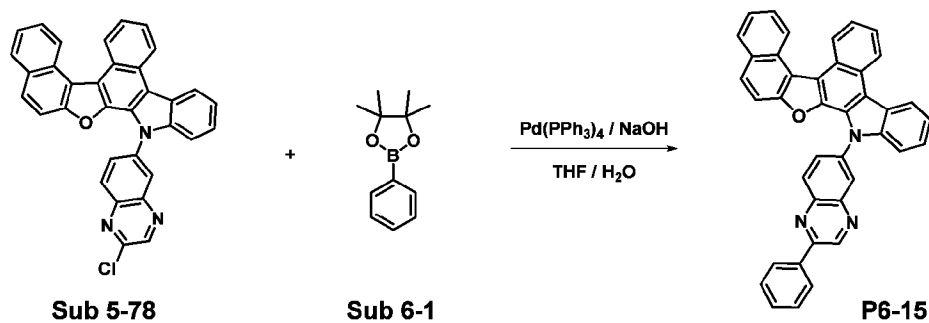


[880] Sub 5-64 (11g, 14.82mmol), THF(65ml), Sub 6-1 (3.02g, 14.82mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.69g, 0.59mmol), NaOH (1.78g, 44.46mmol), 물(32ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.83g를 얻었다. (수율: 76%)

[881]

[882] P6-15 합성예

[883]



[884] Sub 5-78 (11g, 21.15mmol), THF(93ml), Sub 6-1 (4.32g, 21.15mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.98g, 0.85mmol), NaOH (2.54g, 63.46mmol), 물(46ml)을 상기 P1-1 합성방법을 사용하여 생성물 9.27g를 얻었다. (수율: 78%)

[885]

[886] [표8]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P1-1	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)	P1-2	m/z=627.18(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S=627.77)
P1-4	m/z=868.27(C ₆₂ H ₃₆ N ₄ S=869.06)	P1-6	m/z=683.15(C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ =683.85)
P1-8	m/z=627.18(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S=627.77)	P1-14	m/z=868.27(C ₆₂ H ₃₆ N ₄ S=869.06)
P1-16	m/z=633.13(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ S ₂ =633.79)	P1-26	m/z=683.15(C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ =683.85)
P1-30	m/z=777.17(C ₅₂ H ₂₈ FN ₃ S ₂ =777.94)	P1-34	m/z=667.17(C ₄₆ H ₂₅ N ₃ OS=667.79)
P1-39	m/z=693.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ -OS=693.82)	P1-44	m/z=578.16(C ₃₉ H ₂₂ N ₄ S=578.69)
P1-45	m/z=794.23(C ₅₄ H ₃₀ N ₆ S=794.94)	P2-1	m/z=561.18(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O=561.64)
P2-4	m/z=707.17(C ₄₈ H ₂₅ N ₃ -O ₂ S=707.81)	P2-5	m/z=743.20(C ₅₂ H ₂₉ N ₃ -OS=743.88)
P2-7	m/z=792.22(C ₅₅ H ₂₈ N ₄ -O ₃ =792.85)	P2-9	m/z=682.24(C ₄₈ H ₂₂ D ₅ N ₃ O ₂ =682.79)
P3-1	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)	P3-2	m/z=627.18(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S=627.77)
P3-4	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=653.80)	P3-15	m/z=733.16(C ₅₀ H ₂₇ N ₃ S ₂ =733.91)
P3-16	m/z=718.18(C ₄₉ H ₂₆ N ₄ OS=718.83)	P3-19	m/z=683.15(C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ =683.85)
P3-36	m/z=693.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ -OS=693.82)	P3-44	m/z=717.19(C ₅₀ H ₂₇ N ₃ -OS=717.85)
P3-45	m/z=799.18(C ₅₄ H ₂₉ N ₃ -OS ₂ =799.97)	P4-1	m/z=561.18(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O=561.64)
P4-2	m/z=687.23(C ₅₀ H ₂₉ N ₃ O=687.80)	P4-3	m/z=899.21(C ₆₂ H ₃₃ N ₃ OS ₂ =900.09)
P4-9	m/z=677.21(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ O ₂ =677.76)	P5-1	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.71)
P5-2	m/z=627.18(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S=627.77)	P5-7	m/z=632.21(C ₄₄ H ₂₀ D ₅ N ₃ S=632.80)
P5-8	m/z=677.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S=677.83)	P5-9	m/z=742.22(C ₅₂ H ₃₀ N ₄ S=742.90)
P5-11	m/z=818.25(C ₅₈ H ₃₄ N ₄ S=819.00)	P5-24	m/z=723.14(C ₄₈ H ₂₅ N ₃ OS ₂ =723.87)
P5-25	m/z=809.20(C ₅₆ H ₃₁ N ₃ S ₂ =810.01)	P5-26	m/z=709.16(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S ₂ =709.89)

P5-31	m/z=683.15(C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ =683.85)	P5-41	m/z=783.20(C ₅₄ H ₂₇₉ N ₃ O ₂ S=783.91)
P5-42	m/z=617.16(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ OS=617.73)	P5-44	m/z=733.22(C ₅₁ H ₃₁ N ₃ OS=733.89)
P6-1	m/z=611.20(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ O=611.70)	P6-2	m/z=651.19(C ₄₆ H ₂₅ N ₃ O ₂ =651.73)
P6-3	m/z=743.20(C ₅₂ H ₂₉ N ₃ OS=743.88)	P6-5	m/z=713.25(C ₅₂ H ₃₁ N ₃ O=713.84)
P6-7	m/z=737.25(C ₅₄ H ₃₁ N ₃ O=737.86)	P6-12	m/z=918.30(C ₆₆ H ₃₈ N ₄ O ₂ =919.06)
P6-15	m/z=561.18(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O=561.64)		

[887]

[888]

한편, 상기 화학식 1,2로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응 (J. mater. Chem.1999, 9, 2095.), Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응 (Org. Lett.2011, 13, 5504), Grignard 반응, Cyclic Dehydration 반응 및 PPh₃-mediated reductive cyclization 반응 (J. Org. Chem. 2005, 70, 5014.)등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1, 2에 정의된 다른 치환기 (R¹내지 R⁴, Ar¹내지 Ar⁴, L¹내지 L², X¹내지 X²)가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다. 예컨대, 반응식 1에서 Sub 1 +Sub 2 -> Final Product 1 반응, 반응식 2에서 Sub 2를 합성하는 반응, 반응식 3에서 Sub 3 +Sub 4 -> Final Product 2 반응, 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응에 기초한 것이고, 반응식 4에서 Sub 3-2 +Sub 3-3 -> Sub 3-4 반응은 Suzuki cross-coupling 반응에 기초한 것이며, 반응식 4에서 Sub 3-4 -> Sub 3 반응은 PPh₃-mediated reductivecyclization 반응 (J. Org. Chem. 2005, 70, 5014.)에 기초한 것이다. 구체적으로 명시되지 않은 치환기가 결합되더라도 상기 반응들은 진행할 것이다.

[889]

[890]

유기전기소자의 제조평가

[891]

[892]

실시 예 1) 레드 유기 발광 소자의 제작 및 시험

[893]

[894]

먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 우선 홀 주입층으로서 N¹-(naphthalen-2-yl)-N⁴,N⁴-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N¹-phenylbenzene-1,4-diamine (2-TNATA로 약기함) 막을 진공증착하여 60 nm 두께로 형성하였다. 이어서,

N,N'-Bis(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (이하 NPB로 약기함)을 60 nm 두께로 진공증착하여 홀 수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 호스트로서 화학식 (1)과 화합식 (2)로 표시되는 상기 발명화합물을 3:7으로 혼합한 혼합물을 사용하였으며, 도판트로서는 (piq)₂Ir(acac) [bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate] 을 95:5 중량으로 도핑함으로써 상기 정공수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 홀 저지층으로 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄(이하 BAlq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하고, 전자수송층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄(이하 Alq3로 약칭함)을 40 nm 두께로 성막하였다. 이후, 전자주입층으로 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극으로 사용함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[895]

[896] 이와 같이 제조된 실시예 및 비교예 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

[897]

[898] [비교예 1~3]

[899] 화학식 2로 표시되는 화합물을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[900]

[901] [비교예 4]

[902] 비교화합물1을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[903]

[904] [비교예 5]

[905] 비교화합물2를 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[906]

[907] [비교예 6]

[908] 비교화합물3을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[909]

[910] [비교예 7]

[911] 비교화합물4를 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과

동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[912]

[913] [비교예 8]

[914] 비교화합물1과 비교화합물 2를 혼합하여 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[915]

[916] [비교예 9]

[917] 비교화합물3과 비교화합물 4를 혼합하여 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[918]

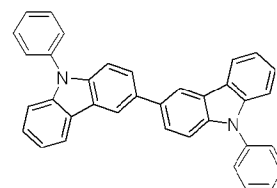
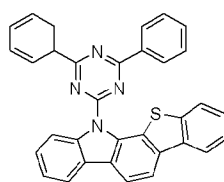
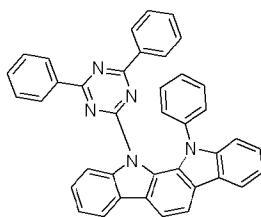
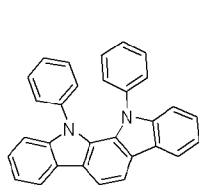
[919]

비교화합물 1

비교화합물 2

비교화합물 3

비교화합물 4



[920]

[921] [표9]

	제 1호스트	제 2호스트	Voltage	Current Density	Brightness(cd/m ²)	Efficiency	LifetimeT(95)
비교예(1)	-	화합물(3-6)	6.1	15.7	2500.0	15.9	108.9
비교예(2)	-	화합물(3-61)	6.3	16.2	2500.0	15.5	104.2
비교예(3)	-	화합물(3-74)	6.4	16.2	2500.0	15.4	103.2
비교예(4)	-	비교화합물 1-	6.9	18.6	2500.0	13.4	84.3
비교예(5)	-	비교화합물 2	6.8	18.3	2500.0	13.7	83.3
비교예(6)	-	비교화합물 3	6.7	17.5	2500.0	14.3	87.4
비교예(7)	-	비교화합물 4	6.9	18.4	2500.0	13.6	82.9
비교예(8)	비교화합물 1	비교화합물 2	5.9	13.0	2500.0	19.3	103.8
비교예(9)	비교화합물 3	비교화합물 4	5.6	10.5	2500.0	23.9	108.9
실시예(1)	화합물(1-4')	화합물(3-6)	4.8	7.1	2500.0	35.0	136.1
실시예(2)	화합물(1-10')	화합물(3-6)	4.7	7.1	2500.0	35.0	136.2
실시예(3)	화합물(1-16')	화합물(3-6)	4.8	7.0	2500.0	35.7	136.2
실시예(4)	화합물(1-21')	화합물(3-6)	4.6	6.6	2500.0	37.6	137.9
실시예(5)	화합물(1-33')	화합물(3-6)	4.9	6.7	2500.0	37.4	137.1
실시예(6)	화합물(1-45')	화합물(3-6)	4.5	6.6	2500.0	37.6	137.7
실시예(7)	화합물(1-48')	화합물(3-6)	4.5	6.4	2500.0	39.3	138.2
실시예(8)	화합물(1-50')	화합물(3-6)	4.8	5.9	2500.0	42.3	143.1
실시예(9)	화합물(1-55')	화합물(3-6)	4.9	6.3	2500.0	39.9	139.8
실시예(10)	화합물(1-56')	화합물(3-6)	4.6	6.4	2500.0	39.1	139.4
실시예(11)	화합물(1-4')	화합물(3-7)	4.8	8.7	2500.0	28.6	125.1

실시예(12)	화합물(1-10')	화합물(3-7)	4.7	8.7	2500.0	28.7	125.8
실시예(13)	화합물(1-16')	화합물(3-7)	4.6	8.8	2500.0	28.3	125.9
실시예(14)	화합물(1-21')	화합물(3-7)	4.6	8.5	2500.0	29.5	127.2
실시예(15)	화합물(1-33')	화합물(3-7)	4.8	8.6	2500.0	29.0	127.5
실시예(16)	화합물(1-45')	화합물(3-7)	4.8	8.5	2500.0	29.4	127.4
실시예(17)	화합물(1-48')	화합물(3-7)	4.8	8.2	2500.0	30.6	128.4
실시예(18)	화합물(1-50')	화합물(3-7)	4.6	8.3	2500.0	30.1	129.8
실시예(19)	화합물(1-55')	화합물(3-7)	4.9	8.3	2500.0	30.2	128.1
실시예(20)	화합물(1-56')	화합물(3-7)	5.0	8.2	2500.0	30.6	128.3
실시예(21)	화합물(1-4')	화합물(3-8)	4.7	8.9	2500.0	28.2	126.3
실시예(22)	화합물(1-10')	화합물(3-8)	4.9	8.9	2500.0	28.1	126.6
실시예(23)	화합물(1-16')	화합물(3-8)	4.5	8.7	2500.0	28.6	125.8
실시예(24)	화합물(1-21')	화합물(3-8)	4.7	8.6	2500.0	29.1	127.1
실시예(25)	화합물(1-33')	화합물(3-8)	4.8	8.6	2500.0	29.1	127.2
실시예(26)	화합물(1-45')	화합물(3-8)	4.6	8.4	2500.0	29.8	127.8
실시예(27)	화합물(1-48')	화합물(3-8)	4.5	8.2	2500.0	30.6	128.8
실시예(28)	화합물(1-50')	화합물(3-8)	4.7	8.3	2500.0	30.0	128.1
실시예(29)	화합물(1-55')	화합물(3-8)	4.8	8.2	2500.0	30.6	128.5
실시예(30)	화합물(1-56')	화합물(3-8)	4.9	8.2	2500.0	30.4	129.1
실시예(31)	화합물(1-4')	화합물(3-9)	4.7	8.6	2500.0	29.0	125.3
실시예(32)	화합물(1-10')	화합물(3-9)	4.8	8.9	2500.0	28.1	126.0
실시예(33)	화합물(1-16')	화합물(3-9)	4.7	8.7	2500.0	28.7	125.8
실시예(34)	화합물(1-21')	화합물(3-9)	4.7	8.4	2500.0	29.7	127.4
실시예(35)	화합물(1-33')	화합물(3-9)	4.9	8.4	2500.0	29.9	127.9
실시예(36)	화합물(1-45')	화합물(3-9)	4.9	8.5	2500.0	29.5	127.9
실시예(37)	화합물(1-48')	화합물(3-9)	4.6	8.1	2500.0	30.7	129.1
실시예(38)	화합물(1-50')	화합물(3-9)	4.9	8.3	2500.0	30.1	129.0
실시예(39)	화합물(1-55')	화합물(3-9)	4.6	8.2	2500.0	30.5	128.7
실시예(40)	화합물(1-56')	화합물(3-9)	4.7	8.1	2500.0	30.9	128.3
실시예(41)	화합물(1-4')	화합물(3-15)	4.7	8.7	2500.0	28.7	126.9

실시예(42)	화합물(1-10')	화합물(3-15)	4.9	8.8	2500.0	28.5	125.2
실시예(43)	화합물(1-16')	화합물(3-15)	4.7	8.7	2500.0	28.6	125.1
실시예(44)	화합물(1-21')	화합물(3-15)	5.0	8.4	2500.0	29.6	127.1
실시예(45)	화합물(1-33')	화합물(3-15)	4.9	8.4	2500.0	29.8	127.2
실시예(46)	화합물(1-45')	화합물(3-15)	4.9	8.4	2500.0	29.9	127.5
실시예(47)	화합물(1-48')	화합물(3-15)	4.6	8.1	2500.0	30.7	128.2
실시예(48)	화합물(1-50')	화합물(3-15)	4.5	8.3	2500.0	30.2	129.5
실시예(49)	화합물(1-55')	화합물(3-15)	4.7	8.2	2500.0	30.4	128.9
실시예(50)	화합물(1-56')	화합물(3-15)	4.9	8.2	2500.0	30.6	129.6
실시예(51)	화합물(1-4')	화합물(3-37)	5.0	8.7	2500.0	28.8	127.0
실시예(52)	화합물(1-10')	화합물(3-37)	4.8	8.8	2500.0	28.6	126.7
실시예(53)	화합물(1-16')	화합물(3-37)	5.0	8.7	2500.0	28.8	125.5
실시예(54)	화합물(1-21')	화합물(3-37)	4.8	8.5	2500.0	29.3	127.5
실시예(55)	화합물(1-33')	화합물(3-37)	4.9	8.5	2500.0	29.3	127.2
실시예(56)	화합물(1-45')	화합물(3-37)	4.8	8.5	2500.0	29.3	127.4
실시예(57)	화합물(1-48')	화합물(3-37)	4.9	8.3	2500.0	30.3	129.1
실시예(58)	화합물(1-50')	화합물(3-37)	4.7	8.1	2500.0	31.0	128.2

실시예(59)	화합물(1-55')	화합물(3-37)	4.9	8.3	2500.0	30.3	129.2
실시예(60)	화합물(1-56')	화합물(3-37)	4.6	8.1	2500.0	30.9	129.6
실시예(61)	화합물(1-4')	화합물(3-46)	4.6	8.7	2500.0	28.8	126.1
실시예(62)	화합물(1-10')	화합물(3-46)	4.8	8.7	2500.0	28.7	125.9
실시예(63)	화합물(1-16')	화합물(3-46)	4.8	8.7	2500.0	28.9	126.2
실시예(64)	화합물(1-21')	화합물(3-46)	4.9	8.6	2500.0	29.2	127.3
실시예(65)	화합물(1-33')	화합물(3-46)	5.0	8.6	2500.0	29.0	127.1
실시예(66)	화합물(1-45')	화합물(3-46)	4.7	8.4	2500.0	29.7	127.0
실시예(67)	화합물(1-48')	화합물(3-46)	4.8	8.2	2500.0	30.3	129.9
실시예(68)	화합물(1-50')	화합물(3-46)	4.5	8.3	2500.0	30.2	129.7
실시예(69)	화합물(1-55')	화합물(3-46)	5.0	8.3	2500.0	30.1	128.3
실시예(70)	화합물(1-56')	화합물(3-46)	5.0	8.1	2500.0	30.8	129.6
실시예(71)	화합물(1-4')	화합물(3-50)	4.5	8.8	2500.0	28.5	126.1
실시예(72)	화합물(1-10')	화합물(3-50)	4.7	8.9	2500.0	28.0	126.7
실시예(73)	화합물(1-16')	화합물(3-50)	4.5	8.6	2500.0	28.9	125.1
실시예(74)	화합물(1-21')	화합물(3-50)	4.6	8.4	2500.0	29.9	127.9
실시예(75)	화합물(1-33')	화합물(3-50)	4.9	8.4	2500.0	29.8	127.4

실시예(76)	화합물(1-45')	화합물(3-50)	4.7	8.6	2500.0	29.2	127.5
실시예(77)	화합물(1-48')	화합물(3-50)	4.7	8.1	2500.0	30.8	128.3
실시예(78)	화합물(1-50')	화합물(3-50)	4.6	8.3	2500.0	30.1	129.0
실시예(79)	화합물(1-55')	화합물(3-50)	4.7	8.3	2500.0	30.2	128.0
실시예(80)	화합물(1-56')	화합물(3-50)	4.7	8.2	2500.0	30.5	129.2
실시예(81)	화합물(1-4')	화합물(3-61)	4.8	8.3	2500.0	30.2	130.5
실시예(82)	화합물(1-10')	화합물(3-61)	4.6	8.2	2500.0	30.5	130.4
실시예(83)	화합물(1-16')	화합물(3-61)	4.6	8.3	2500.0	30.2	130.6
실시예(84)	화합물(1-21')	화합물(3-61)	4.8	7.8	2500.0	32.1	132.6
실시예(85)	화합물(1-33')	화합물(3-61)	4.8	7.8	2500.0	32.2	132.2
실시예(86)	화합물(1-45')	화합물(3-61)	5.0	7.7	2500.0	32.6	132.4
실시예(87)	화합물(1-48')	화합물(3-61)	4.9	7.5	2500.0	33.3	134.7
실시예(88)	화합물(1-50')	화합물(3-61)	4.7	7.5	2500.0	33.1	134.1
실시예(89)	화합물(1-55')	화합물(3-61)	4.7	7.5	2500.0	33.1	133.8
실시예(90)	화합물(1-56')	화합물(3-61)	4.8	7.2	2500.0	34.7	133.7
실시예(91)	화합물(1-4')	화합물(3-74)	4.9	7.8	2500.0	32.1	126.8
실시예(92)	화합물(1-10')	화합물(3-74)	4.8	8.9	2500.0	28.2	125.8

실시예(93)	화합물(1-16')	화합물(3-74)	4.9	8.8	2500.0	28.4	126.3
실시예(94)	화합물(1-21')	화합물(3-74)	4.5	8.5	2500.0	29.3	127.7
실시예(95)	화합물(1-33')	화합물(3-74)	4.7	8.5	2500.0	29.3	127.2
실시예(96)	화합물(1-45')	화합물(3-74)	4.8	8.5	2500.0	29.4	127.1
실시예(97)	화합물(1-48')	화합물(3-74)	4.6	8.2	2500.0	30.6	128.9
실시예(98)	화합물(1-50')	화합물(3-74)	4.7	8.1	2500.0	30.8	129.0
실시예(99)	화합물(1-55')	화합물(3-74)	4.7	8.2	2500.0	30.7	128.7
실시예(100)	화합물(1-56')	화합물(3-74)	4.9	8.1	2500.0	31.0	129.8

[922]

[923] 상기 표 6 결과로부터 알 수 있듯이, 화학식 1과 화학식 2로 표시되는 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 혼합하여 인광 호스트로 사용할 경우 (실시예 1~100), 단일물질을 사용한 소자(비교예 1~7)에 비해 구동전압, 효율 및 수명을 현저히 개선시키는 것을 확인할 수 있었다.

[924] 상세히 설명하면, 화학식 2로 표시되는 본 발명의 화합물, 비교화합물 1 내지 비교 화합물 4 를 단독으로 인광호스트로 사용한 비교예 1~비교예 7 에 있어서는 본 발명 화합물 (3-6, 3-61, 3-74)을 사용한 비교예 1~ 비교예 3이 비교화합물들을 사용한 비교예 4 ~ 비교예 7보다 높은 효율과 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[925] 또한 상기 단독물질을 사용한 비교예 1 ~ 비교예 7보다 비교화합물 1과 비교화합물 2 또는 비교 화합물 3과 비교 화합물 4를 혼합하여 인광호스트로 사용한 비교예 8, 비교예 9가 좀 더 높은 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 비교예 8과 비교예 9를 비교하여 보면, 동일한 질소 원자를 갖는 5환의 헥테로고리 화합물을 혼합한 비교예 8보다 5환 고리화합물 중 서로 상이한 헥테로원자(N, S)를 갖는 이형 다환 고리화합물을 포함한 혼합물을 사용한 비교예 9가 좀 더 높은 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[926] 그리고 상기 비교예 1~비교예 9의 경우보다 본 발명 화합물인 화학식 1과 화학식 2의 화합물을 혼합하여 호스트로 사용한 실시예 1~실시예 100이 현저히

높은 효율 및 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었으며, 낮은 구동전압을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

- [927] 본 발명자들은 상기 실험결과를 근거로 화학식 1의 물질과 화학식 2의 물질을 혼합한 물질의 경우 각각 물질에 대한 특성 이외의 다른 신규한 특성을 갖는다고 판단하여, 화학식 1의 물질, 화학식 2의 물질, 본 발명 혼합물을 각각 사용하여 PL lifetime을 측정하였다. 그 결과 본 발명 화합물인 화학식 1과 화학식 2를 혼합하였을 경우 단독 화합물일 때와 달리 새로운 PL 파장이 형성되는 것을 확인할 수 있었으며, 새롭게 형성된 PL 파장의 감소 및 소멸 시간은 화학식 1 및 화학식 1물질 각각의 감소 및 소멸시간 보다 작게는 약 60배에서 많게는 약 360배까지 증가하는 하는 것을 확인할 수 있었다. 이는 본 발명화합물을 혼합하여 사용할 경우 각각의 물질이 갖는 에너지 준위를 통해 전자와 정공이 이동되는 것뿐만 아니라, 혼합으로 인하여 형성된 새로운 에너지 준위를 갖는 신규 영역에(exciplex) 의한 전자, 정공 이동 또는 에너지 전달로 효율 및 수명이 증가하는 것으로 판단된다. 이는 결과적으로 상기 본 발명 혼합물을 사용할 경우 혼합 박막이 exciplex 에너지 전달 및 발광 프로세스를 보이는 중요한 예라고 할 수 있다.

- [928] 또한 비교화합물을 혼합한 인광호스트로 사용한 비교예 8~9보다 본 발명의 조합이 우수한 이유는 electron 뿐만 아니라 hole에 대한 안정성, 높은 T1등의 특징이 있는 화학식 2로 표시되는 다환고리 화합물에 hole 특성이 강한 화학식 1로 표시되는 화합물을 혼합할 경우, 높은 T1과 높은 LUMO 에너지 값으로 인해 전자 블로킹 능력이 향상되고, 발광층에 더 많은 hole이 빠르고 쉽게 이동하게 된다. 이에 따라 정공과 전자의 발광층 내 charge balance가 증가되어 정공수송층 계면이 아닌 발광층 내부에서 발광이 잘 이루지고, 그로 인해 HTL 계면에 열화 또한 감소하여 소자 전체의 구동 전압, 효율 그리고 수명이 극대화된다고 판단된다. 또한 화학식 1로 표시되는 화합물 중에서도 Dibenzofuran이 치환되어 있는 화합물이 구동전압, 효율, 수명면에서 가장 우수한 결과를 나타냄을 확인할 수 있었고, Dibenzotuiophen이 치환된 화합물 또한 높은 굴절율로 인해 효율적인 측면에서 우수함을 확인할 수 있었다. 즉, 결론적으로 화학식 1과 화학식 2의 조합이 전기 화학적으로 시너지 작용을 하여 소자 전체의 성능을 향상된 것으로 사료된다.

[929]

[930] 실시 예 2) 혼합비율 별 레드 유기 발광 소자의 제작 및 시험

[931]

[932] [표10]

	제 1호스트	제 2호스트'	혼합 비율 (제1호스트 : 제2호스트)	Volta ge	Curre nt Densi ty	Bright ness(c d/m ²)	Effici ency	Lifeti meT(95)
실시예(101)	화합물 (1-33')	화합물(3-61)	2:8	4.7	7.9	2500.0	31.8	131.9
실시예(102)	화합물 (1-33')	화합물(3-61)	3:7	4.8	7.8	2500.0	32.2	132.2
실시예(103)	화합물 (1-33')	화합물(3-61)	4:6	5.0	8.4	2500.0	29.7	128.7
실시예(104)	화합물 (1-33')	화합물(3-61)	5:5	5.1	9.1	2500.0	27.4	124.1
실시예(105)	화합물 (1-50')	화합물(3-6)	2:8	4.8	5.8	2500.0	43.2	145.6
실시예(106)	화합물 (1-50')	화합물(3-6)	3:7	4.8	5.9	2500.0	42.3	143.1
실시예(107)	화합물 (1-50')	화합물(3-6)	4:6	5.1	6.5	2500.0	38.4	139.1
실시예(108)	화합물 (1-50')	화합물(3-6)	5:5	5.3	7.1	2500.0	35.0	137.9

[933]

[934] 상기 표 7과 같이 본 발명의 화합물의 혼합물을 비율 별(2:8, 3:7, 4:6, 5:5)로 소자를 제작하여 측정하였다. 결과를 자세히 설명하면, 화합물 1-33'과 화합물 3-61의 혼합물 결과에서는 2:8, 3:7의 경우 구동전압, 효율 및 수명의 결과가 유사하게 우수했지만 4:6, 5:5와 같이 제 1호스트의 비율이 증가하면서 구동전압, 효율 및 수명의 결과가 점점 떨어지는 것을 확인하였고, 이는 화합물 1-50'과 화합물 3-6의 혼합물 결과에서도 동일한 양상을 띄었다. 이는 2:8, 3:7과 같이 hole 특성이 강한 화학식 1로 표시되는 화합물이 적정한 양이 혼합될 경우, 발광층 내 charge balance가 극대화되기 때문이라 설명할 수 있다.

[935] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본

명세서에 개시된 실시 예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시 예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다.

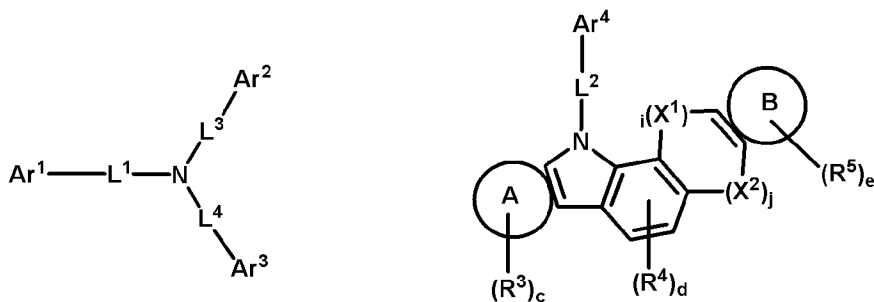
- [936] 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

[937]

[938]

청구범위

- [청구항 1] 제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은, 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 인광성 발광층으로서 하기 화학식 1로 표시되는 제 1호스트 화합물 및 하기 화학식 2 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- 화학식 (1) 화학식 (2)



{상기 화학식 (1) 및 (2)에서,

- 1) Ar¹, Ar², Ar³ 및 Ar⁴는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; 및 C₆~C₃₀의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되며,
- 2) c 및 e는 0~10의 정수이고, d는 0~2의 정수이며, R³, R⁴ 및 R⁵는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R^a)(R^b);(여기서 상기 L'은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R^a 및 R^b은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택됨), 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 c, d 및 e가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R³끼리 혹은 복수의 R⁴끼리 혹은 복수의 R⁵끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,
- 3) L¹, L², L³ 및 L⁴는 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 C₂~C₆₀의

헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고,

4) A 및 B는 각각 독립적으로 C₆~C₂₀의 아릴기 또는 C₂~C₂₀의 헤테로고리기이며,

단, A, B 모두 치환 또는 비치환된 C₆의 아릴기(페닐기)인 경우에는, d가 2이며 R⁴끼리 결합하여 고리를 형성하여 방향족 또는 헤테로고리를 형성하고,

5) i, j는 0 또는 1 이고,

단, i+j는 1 이상이며, 여기서 i 또는 j가 0일 경우는 직접결합을 의미하고,

6) X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 NR', O, S, 또는 CR'R"이고;

R' 및 R"는 각각 독립적으로 수소; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 헤테로고리기; 또는 C₁~C₅₀의 알킬기;이며,

R'과 R"은 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,

(여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 아릴렌기, 헤테로고리기,

융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기, 아릴옥시기는 각각 중수소;

할로젠; C₁-C₂₀의 알킬기 또는 C₆-C₂₀의 아릴기로 치환 또는 비치환된

실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R^a)(R^b);

C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의

알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의

아릴기; 플루오렌일기; C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-

-C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된

하나 이상의 치환기로 더욱 치환 될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은

서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 '고리'란 탄소수 3 내지

60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지

60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며,

포화 또는 불포화 고리를 포함한다.}}

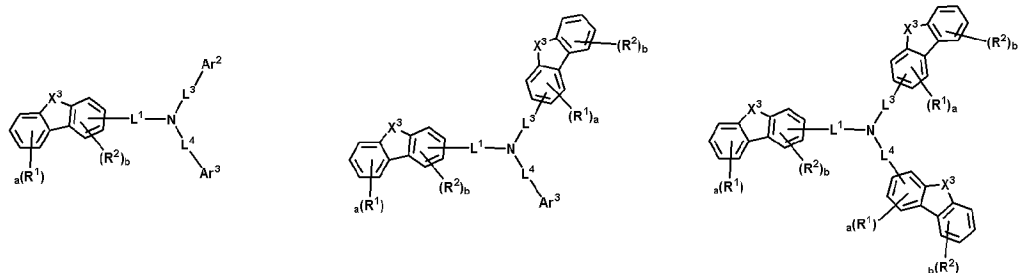
[청구항 2]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기

화학식 (3) 내지 하기 화학식 (5) 중의 어느 하나로 표시되는 것을

특징으로 하는 유기전기소자

화학식 (3) 화학식 (4) 화학식 (5)



{상기 화학식 (3) 내지 (5)에서,

1) L¹, L³, L⁴, L', R^a, R^b, Ar² 및 Ar³은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같고,

2) X^3 은 O 또는 S이고,

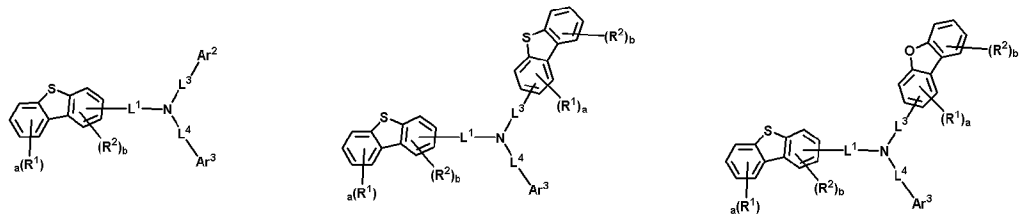
3) a는 0~4의 정수이고, b는 0~3의 정수이며, R^1 및 R^2 는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기;

플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3\sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6\sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2\sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕실기; $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및 $-L^1-N(R^a)(R^b)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^1 끼리 혹은 복수의 R^2 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.}

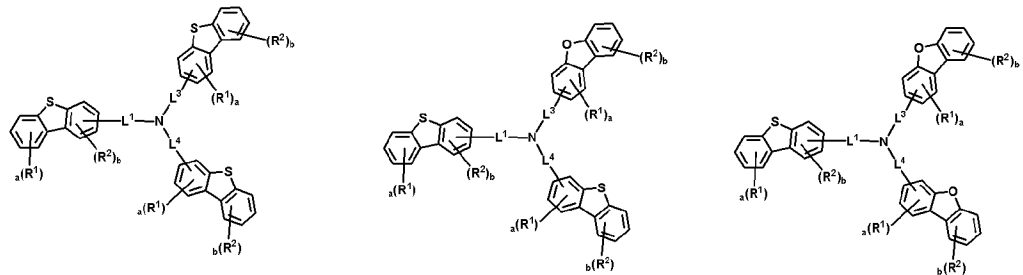
[청구항 3]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (6) 내지 (14)중에 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

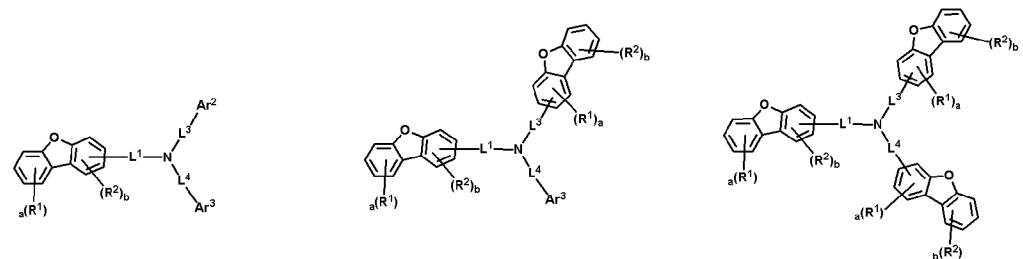
화학식 (6) 화학식 (7) 화학식 (8)



화학식 (9) 화학식 (10) 화학식 (11)



화학식 (12) 화학식 (13) 화학식 (14)

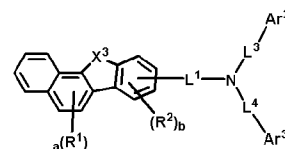
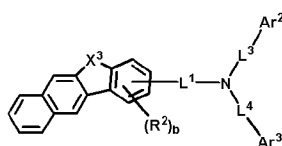
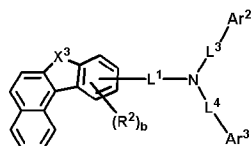


{상기 화학식 (6) 내지 (14)에서, L^1 , L^3 , L^4 , Ar^2 , Ar^3 , R^1 , R^2 , a, b은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같다.}

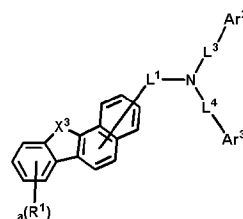
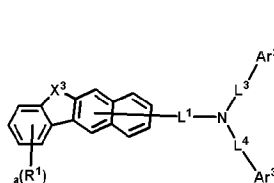
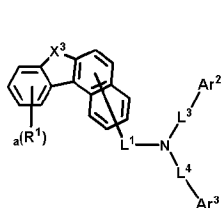
[청구항 4]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 (15) 내지 (23) 중에 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

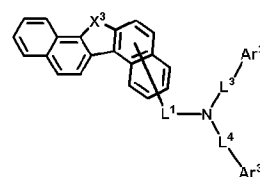
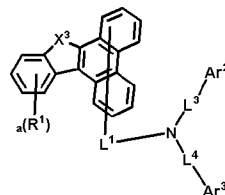
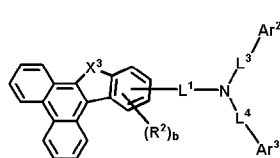
화학식 (15) 화학식 (16) 화학식 (17)



화학식 (18) 화학식 (19) 화학식 (20)



화학식 (21) 화학식 (22) 화학식 (23)



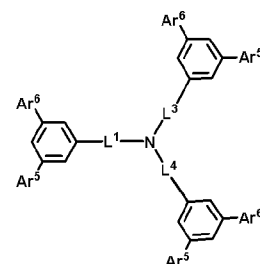
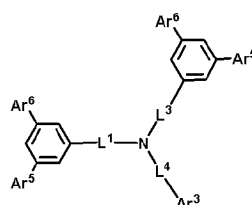
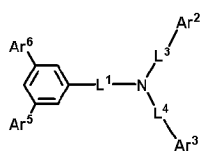
{상기 화학식 (15) 내지 (23)에서, L¹, L³, L⁴, Ar², Ar³, R¹, R², a, b은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같다.}

[청구항 5]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)의 Ar¹, Ar² 및 Ar³이 모두 C₆~C₂₄ 아릴기이고 L¹, L³ 및 L⁴가 단일결합 또는 모두 C₆~C₂₄ 아릴기인 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

[청구항 6]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (24) 내지 (26)중에 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자
화학식 (24) 화학식 (25) 화학식 (26)



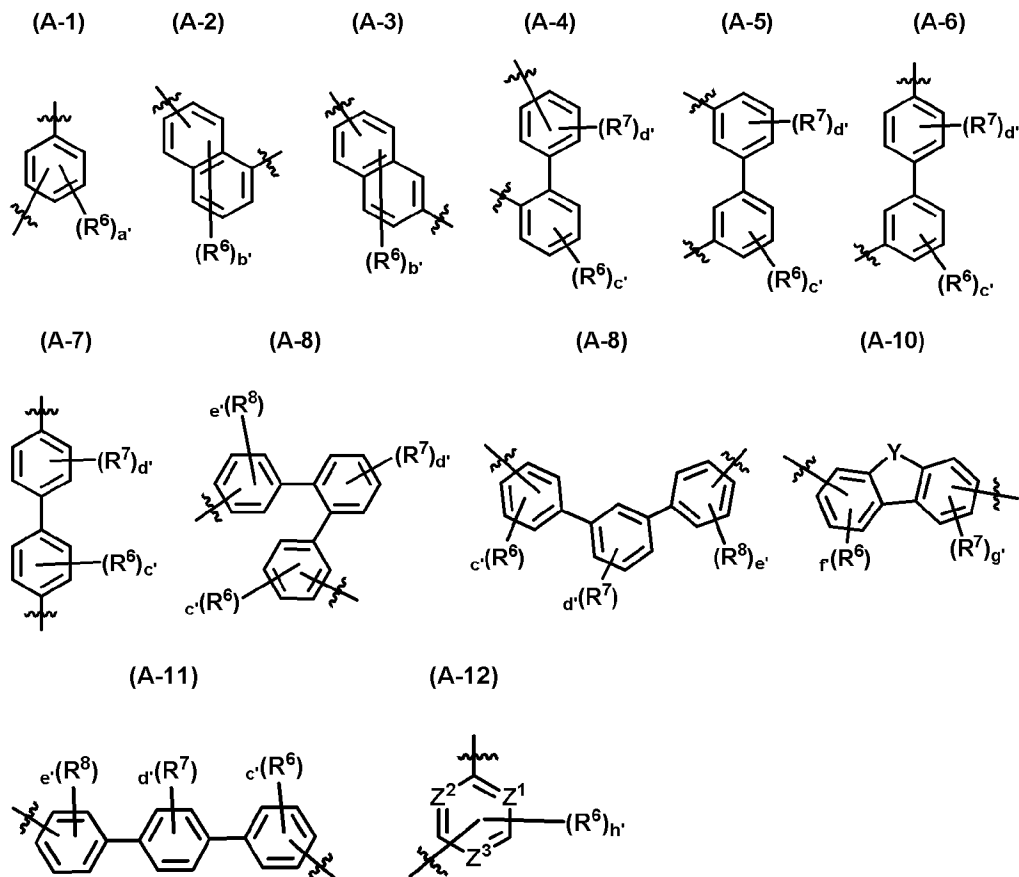
{상기 화학식 (24) 내지 (26)에서,

- 1) L¹, L³, L⁴, L', R^a, R^b, Ar², Ar³은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같고,
- 2) Ar⁵ 및 Ar⁶는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R^a)(R^b);로 이루어진 군에서 선택된다.

[청구항 7]

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)에서 L¹, L³ 및 L⁴가 하기 화학식 (A-1)

내지 (A-12) 중에 어느 하나인 화합물인 것을 특징으로 하는
유기전기소자



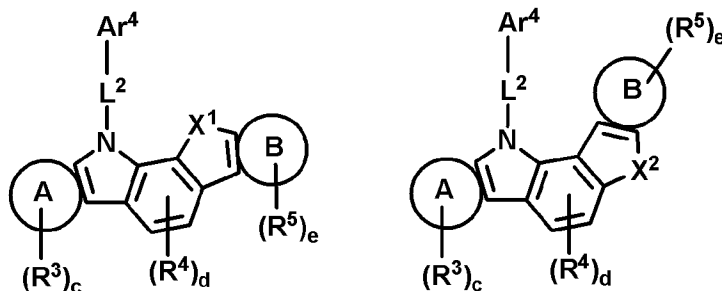
{상기 화학식 (A-1) 내지 (A-12)에서,

- 1) a' , c' , d' , e' 은 0~4의 정수; b' 은 0~6의 정수; f' , g' 는 0~3의 정수, h' 는 0 또는 1의 정수이며,
- 2) R^6 , R^7 및 R^8 은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리; $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리; $C_1 \sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1 \sim C_{30}$ 의 알콕실기; $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및 $-L^1-N(R^a)(R^b)-$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 f' , g' 가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^6 끼리 혹은 복수의 R^7 끼리 혹은 이웃한 R^6 과 R^7 은 서로 결합하여 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,
- 2) Y는 NR' , O, S 또는 $CR'R''$ 이고,
 L^1 , R^a , R^b , R' , R'' 은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같으며,
- 3) Z^1 , Z^2 및 Z^3 은 각각 독립적으로 CR' 또는 N이고, 적어도 하나는 N이다.

[청구항 8]

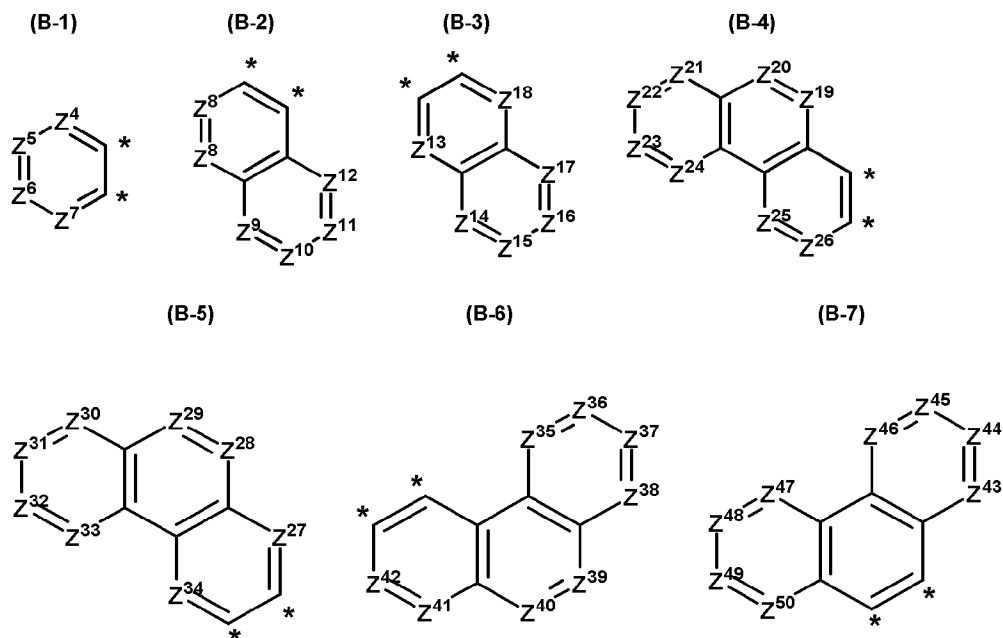
제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)에서 L^1 , L^3 및 L^4 중 적어도 하나가 메타(meta) 위치로 치환된 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

- [청구항 9] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (27) 또는 화학식 (28)로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자
- 화학식 (27) 화학식 (28)



{상기 화학식 (27) 및 (28)에서, R^3 , R^4 , R^5 , Ar^4 , L^2 , c , d , e , A , B , X^1 , X^2 는 상기 청구항 1에서 정의한 바와 같다.}

- [청구항 10] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)의 A , B 가 하기 화학식 (B-1) 내지 (B-7)로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.



{상기 화학식 B-1 내지 B-7에서,

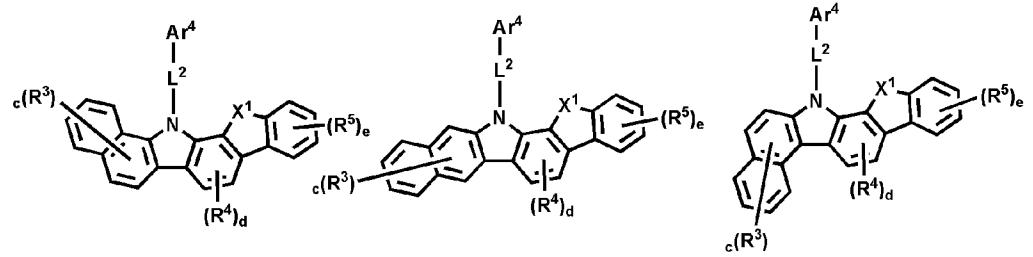
- 1) Z^4 내지 Z^{50} 은 각각 독립적으로 CR' 또는 N 이고,
- 2) R' 은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같고,
- 3) * 는 축합되는 위치를 나타낸다.}

- [청구항 11] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)의 d 가 2이며 R^4 끼리 결합하여 고리를 형성하여 방향족 또는 헤테로고리를 형성하고 있는 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

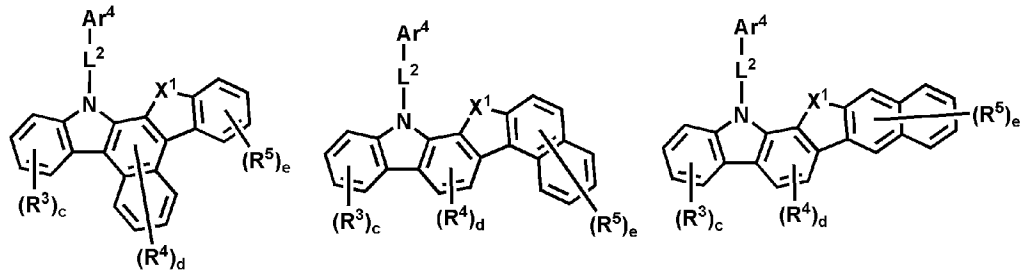
- [청구항 12] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (29) 내지 화학식 (48) 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로

하는 유기전기소자

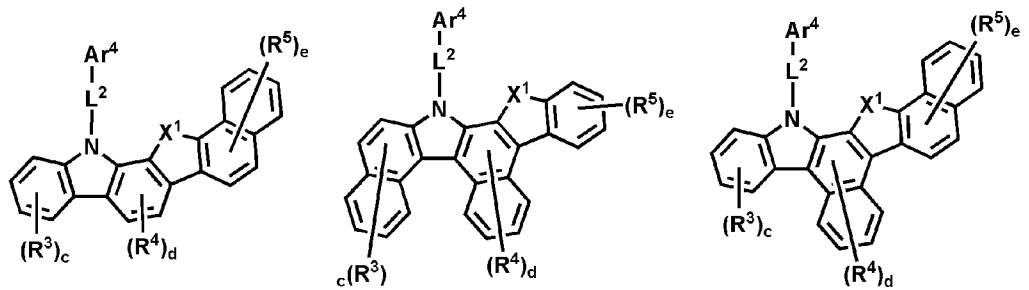
화학식 (29) 화학식 (30) 화학식 (31)



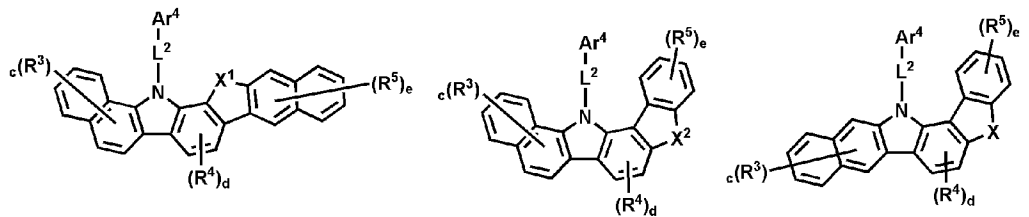
화학식 (32) 화학식 (33) 화학식 (34)



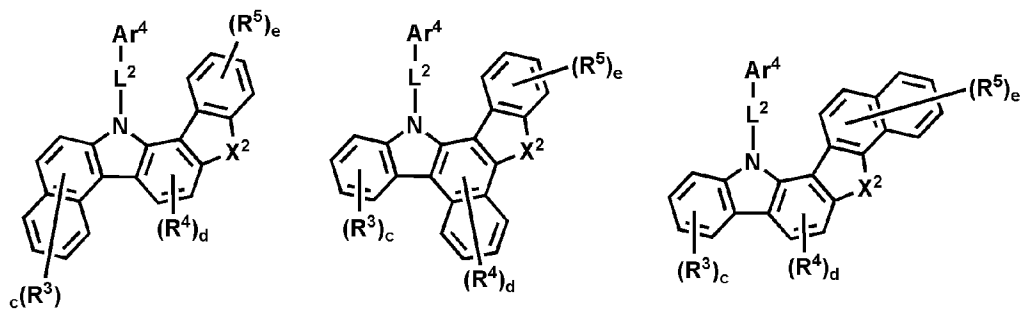
화학식 (35) 화학식 (36) 화학식 (37)



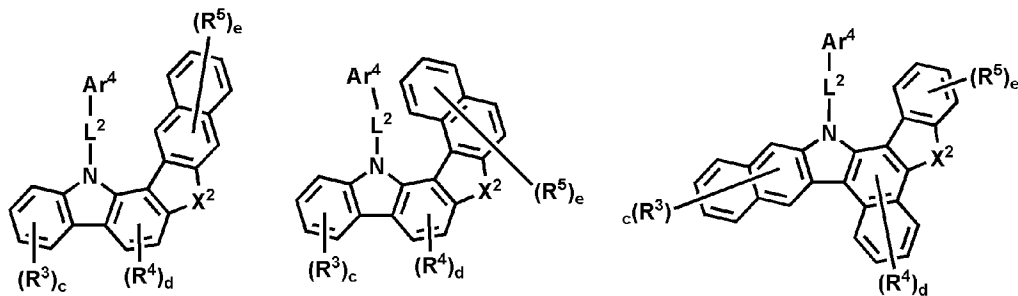
화학식 (38) 화학식 (39) 화학식 (40)



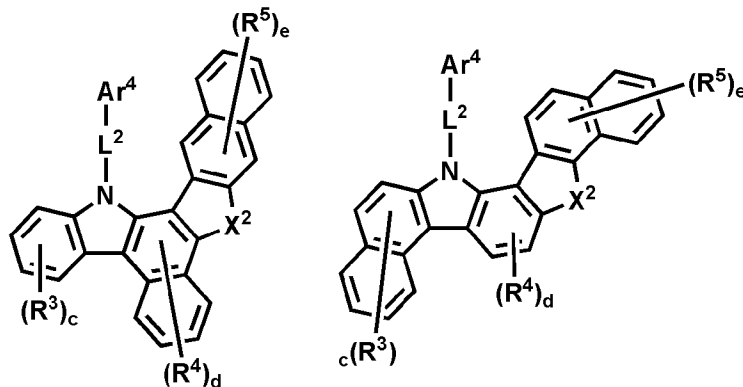
화학식 (41) 화학식 (42) 화학식 (43)



화학식 (44) 화학식 (45) 화학식 (46)



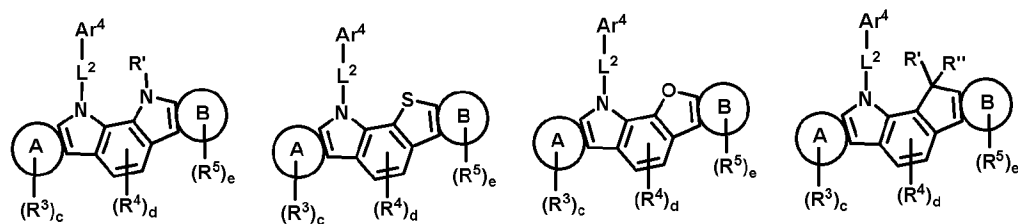
화학식 (47) 화학식 (48)



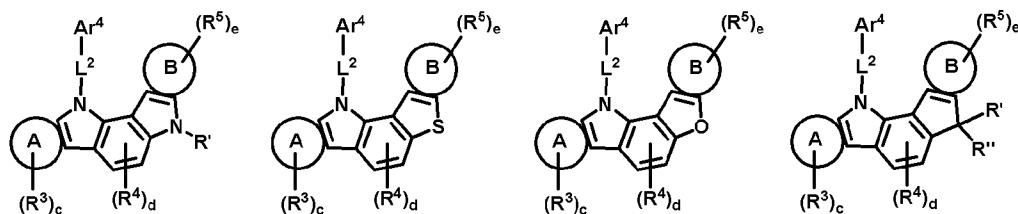
{상기 화학식 (29) 내지 (48)에서, 상기 Ar^4 , X^1 , X^2 , R^3 , L^2 , R^4 , R^5 , c , d , e 는 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같다.}

[청구항 13] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 (49) 내지 화학식 (56) 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

화학식 (49) 화학식 (50) 화학식 (51) 화학식 (52)



화학식 (53) 화학식 (54) 화학식 (55) 화학식 (56)



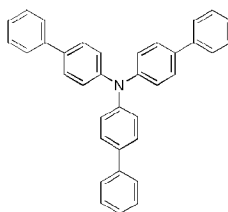
{상기 화학식 (49) 내지 (56)에서,

R^3 , R^4 , R^5 , L^2 , Ar^4 , c , d , e , A , B , R' , R'' 은 상기 청구항 1에서 정의된 바와 같다.}

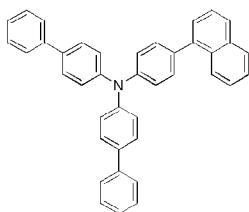
[청구항 14] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기

화합물 1-1' 내지 화합물 1-82' 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

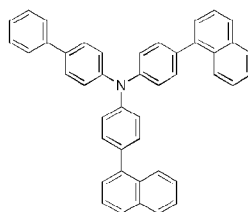
화학식 1-1'



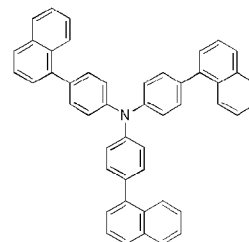
화학식 1-2'



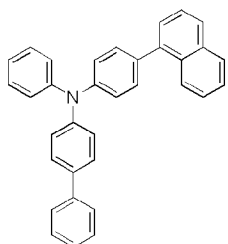
화학식 1-3'



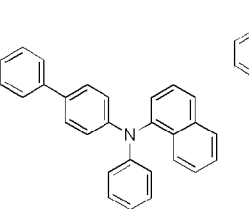
화학식 1-4'



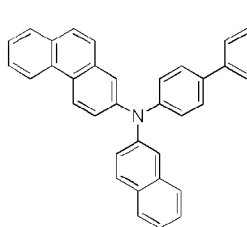
화학식 1-5'



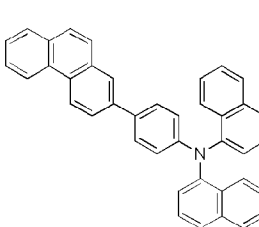
화학식 1-6'



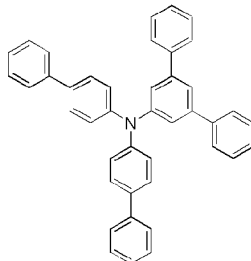
화학식 1-7'



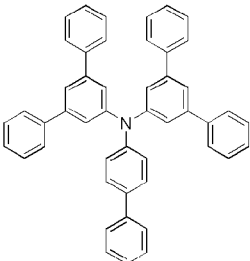
화학식 1-8'



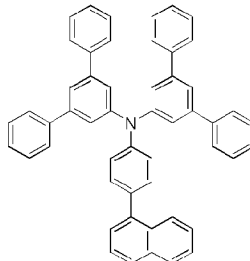
화학식 1-9'



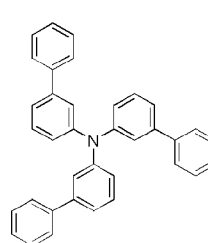
화학식 1-10'



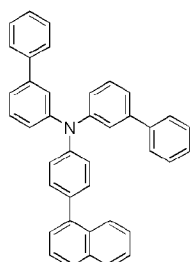
화학식 1-11'



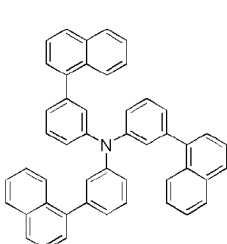
화학식 1-12'



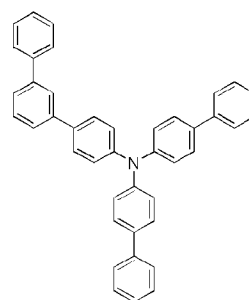
화학식 1-13'



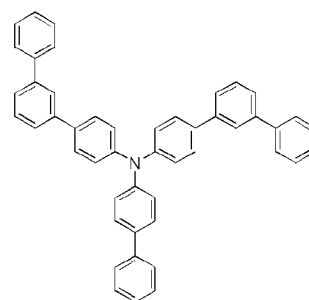
화학식 1-14'



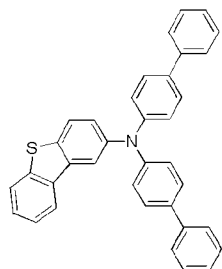
화학식 1-15'



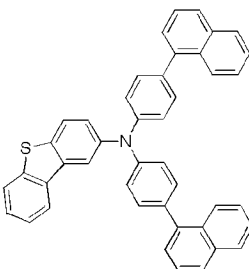
화학식 1-16'



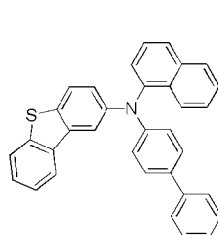
화학식 1-17'



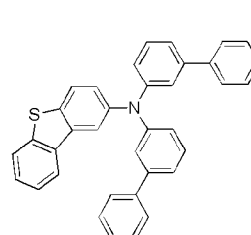
화학식 1-18'



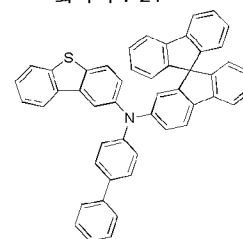
화학식 1-19'



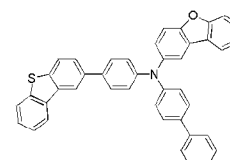
화학식 1-20'



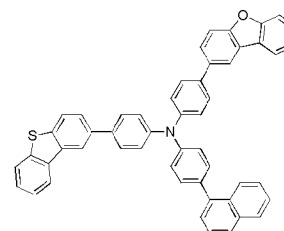
화학식 1-24'



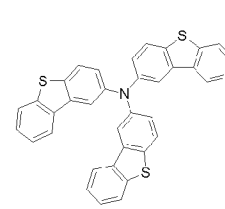
화학식 1-28'



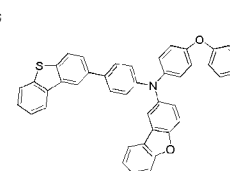
화학식 1-32'



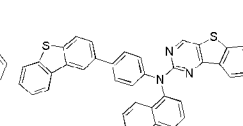
화학식 1-36'



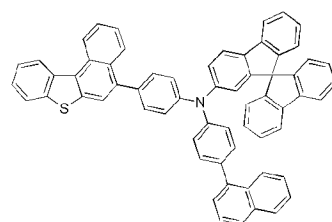
화학식 1-40'



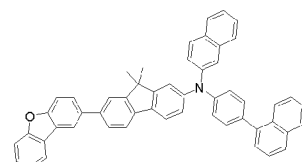
화학식 1-44'



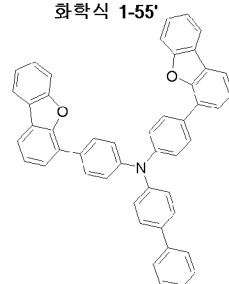
화학식 1-47'



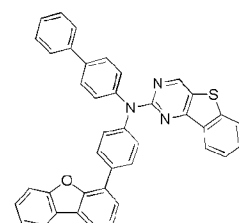
화학식 1-51'



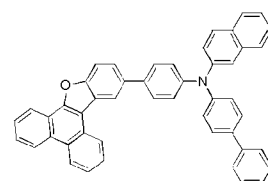
화학식 1-55'



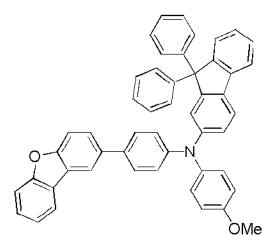
화학식 1- 59'

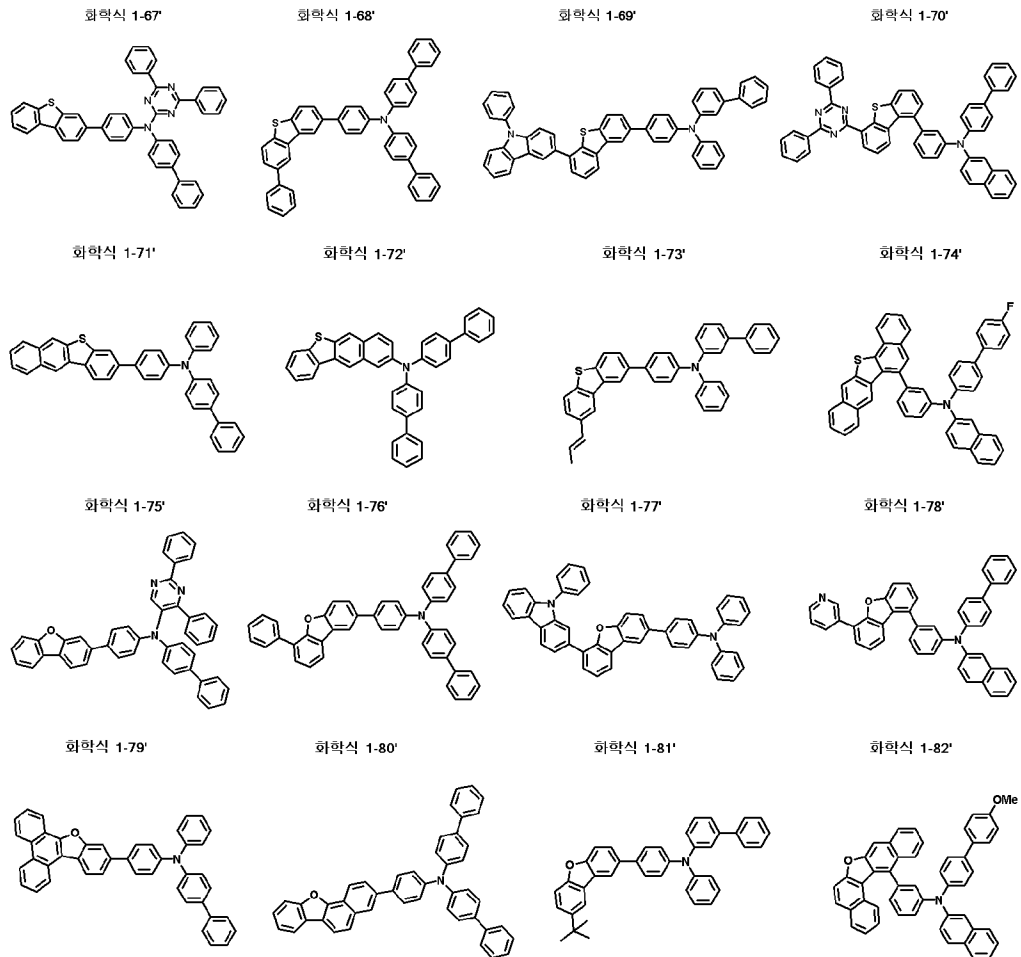


화학식 1-63'

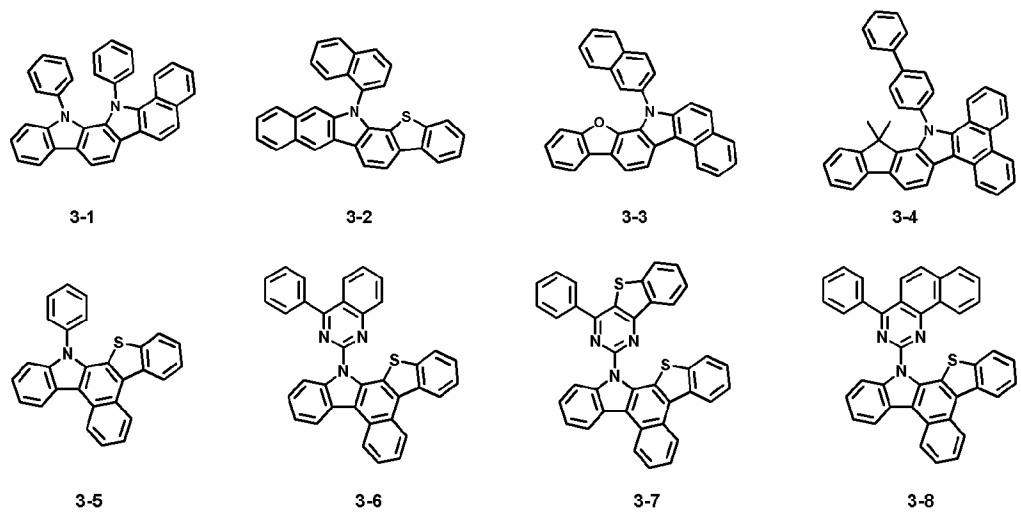


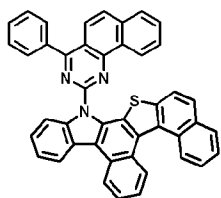
화학식 1-66'



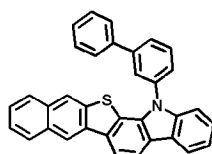


[청구항 15] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화합물 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

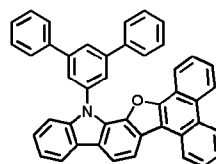




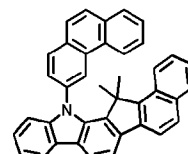
3-9



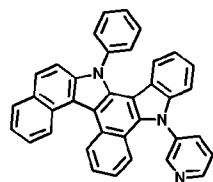
3-10



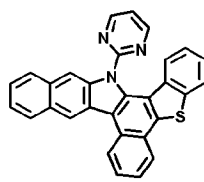
3-11



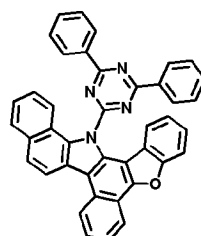
3-12



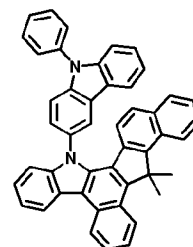
3-13



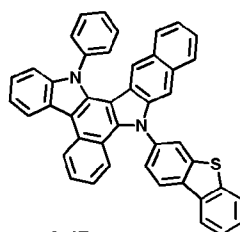
3-14



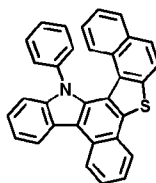
3-15



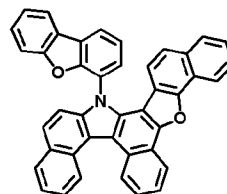
3-16



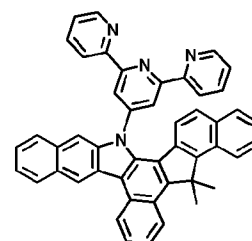
3-17



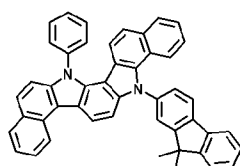
3-18



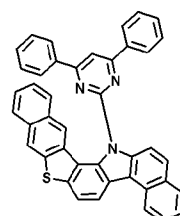
3-19



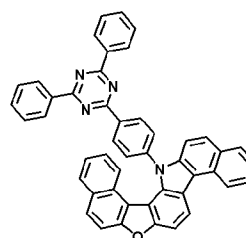
3-20



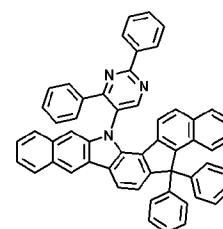
3-21



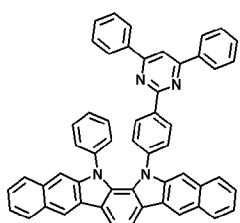
3-22



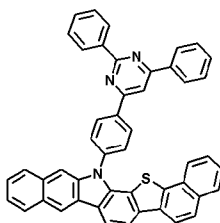
3-23



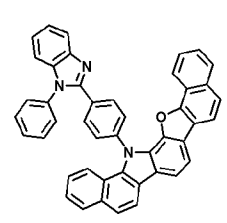
3-24



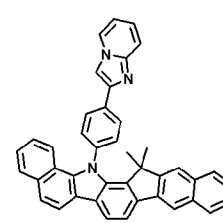
3-25



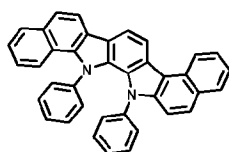
3-26



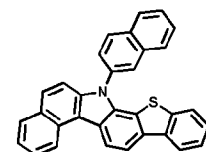
3-27



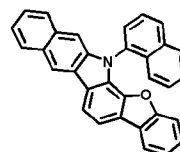
3-28



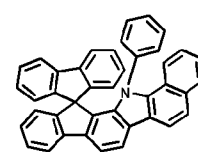
3-29



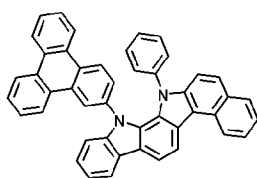
3-30



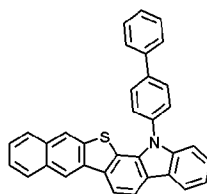
3-31



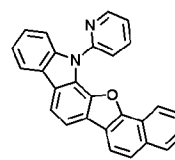
3-32



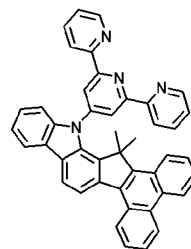
3-33



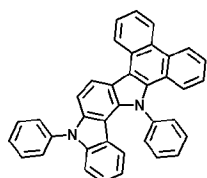
3-34



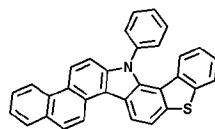
3-35



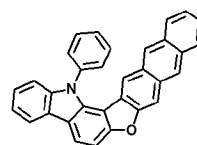
3-36



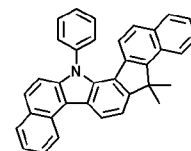
3-37



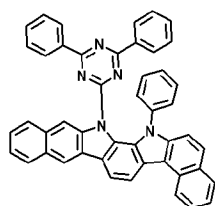
3-38



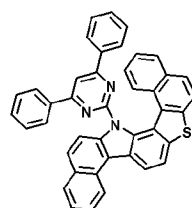
3-39



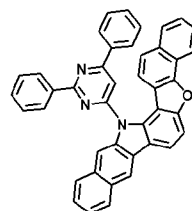
3-40



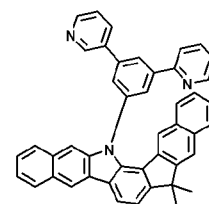
3-41



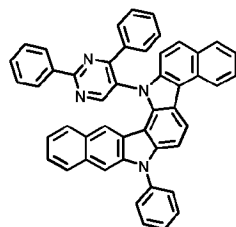
3-42



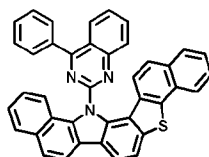
3-43



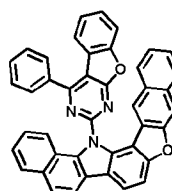
3-44



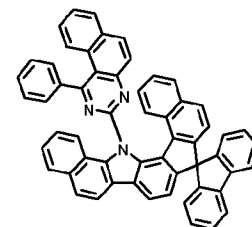
3-45



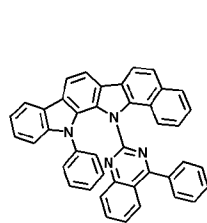
3-46



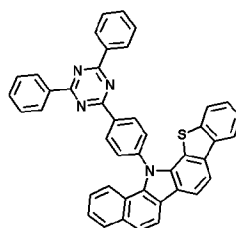
3-47



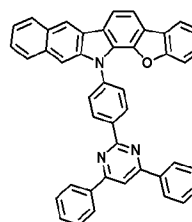
3-48



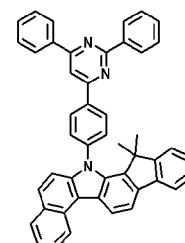
3-49



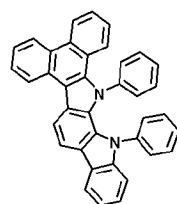
3-50



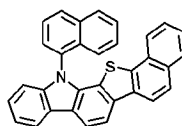
3-51



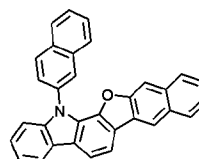
3-52



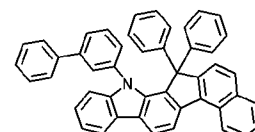
3-53



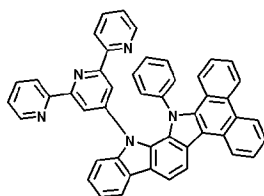
3-54



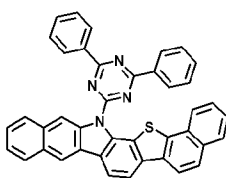
3-55



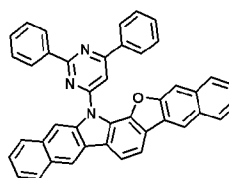
3-56



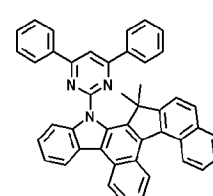
3-57



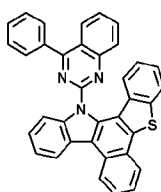
3-58



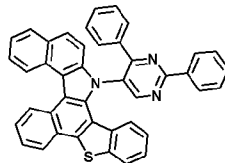
3-59



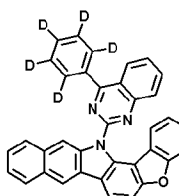
3-60



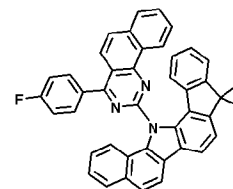
3-61



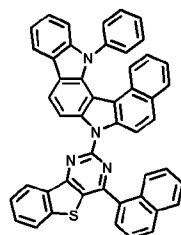
3-62



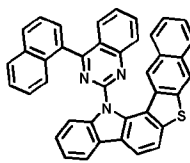
3-63



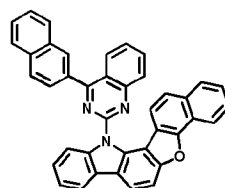
3-64



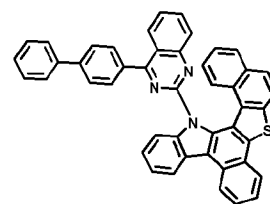
3-65



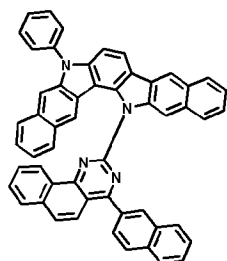
3-66



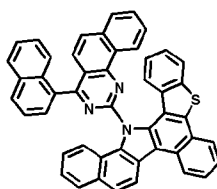
3-67



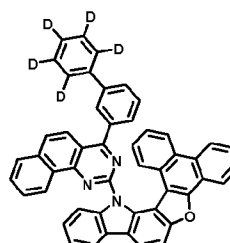
3-68



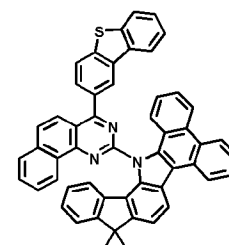
3-69



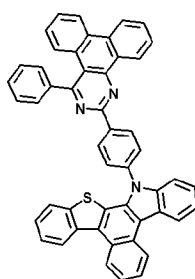
3-70



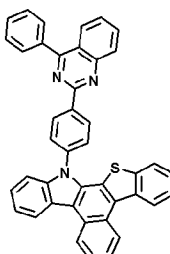
3-71



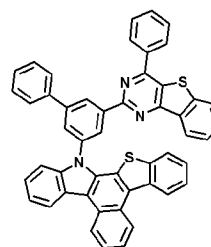
3-72



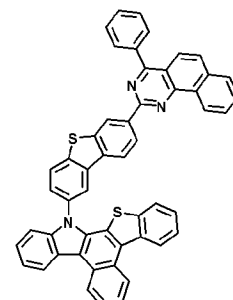
3-73



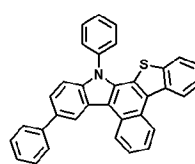
3-74



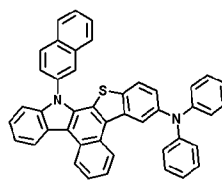
3-75



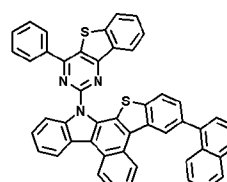
3-76



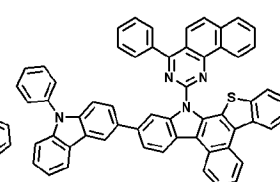
3-77



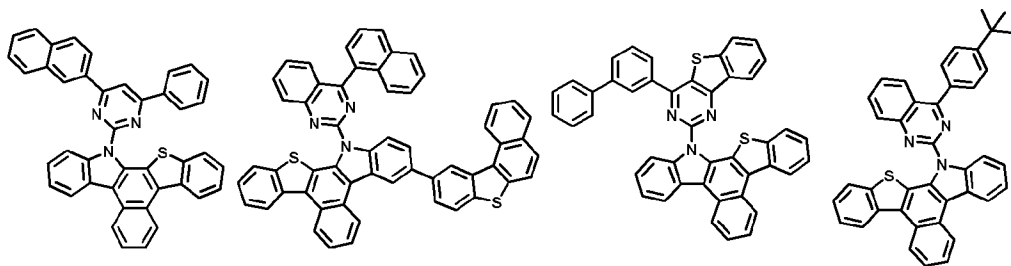
3-78



3-79



3-80

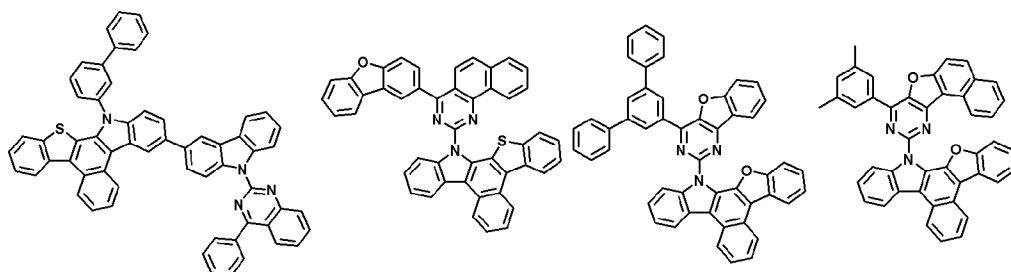


3-81

3-82

3-83

3-84

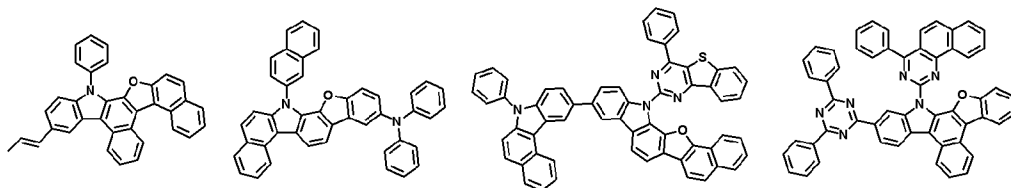


3-85

3-86

3-87

3-88

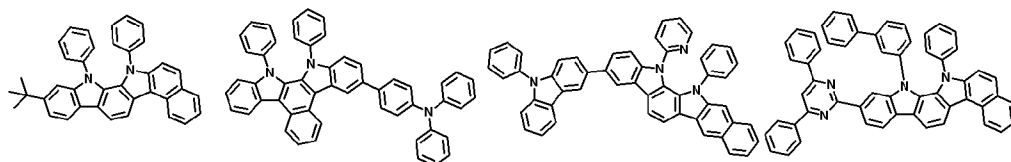


3-89

3-90

3-91

3-92

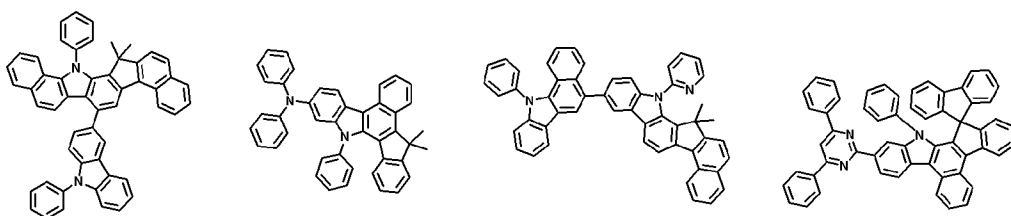


3-93

3-94

3-95

3-96

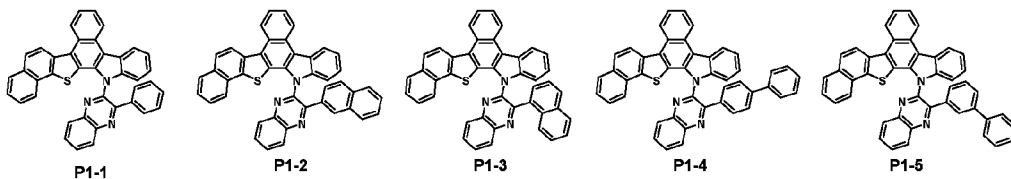


3-97

3-98

3-99

3-100



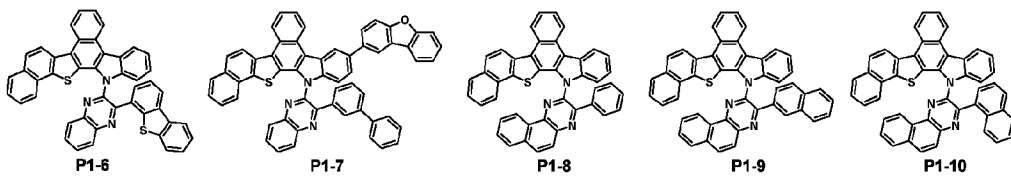
P1-1

P1-2

P1-3

P1-4

P1-5



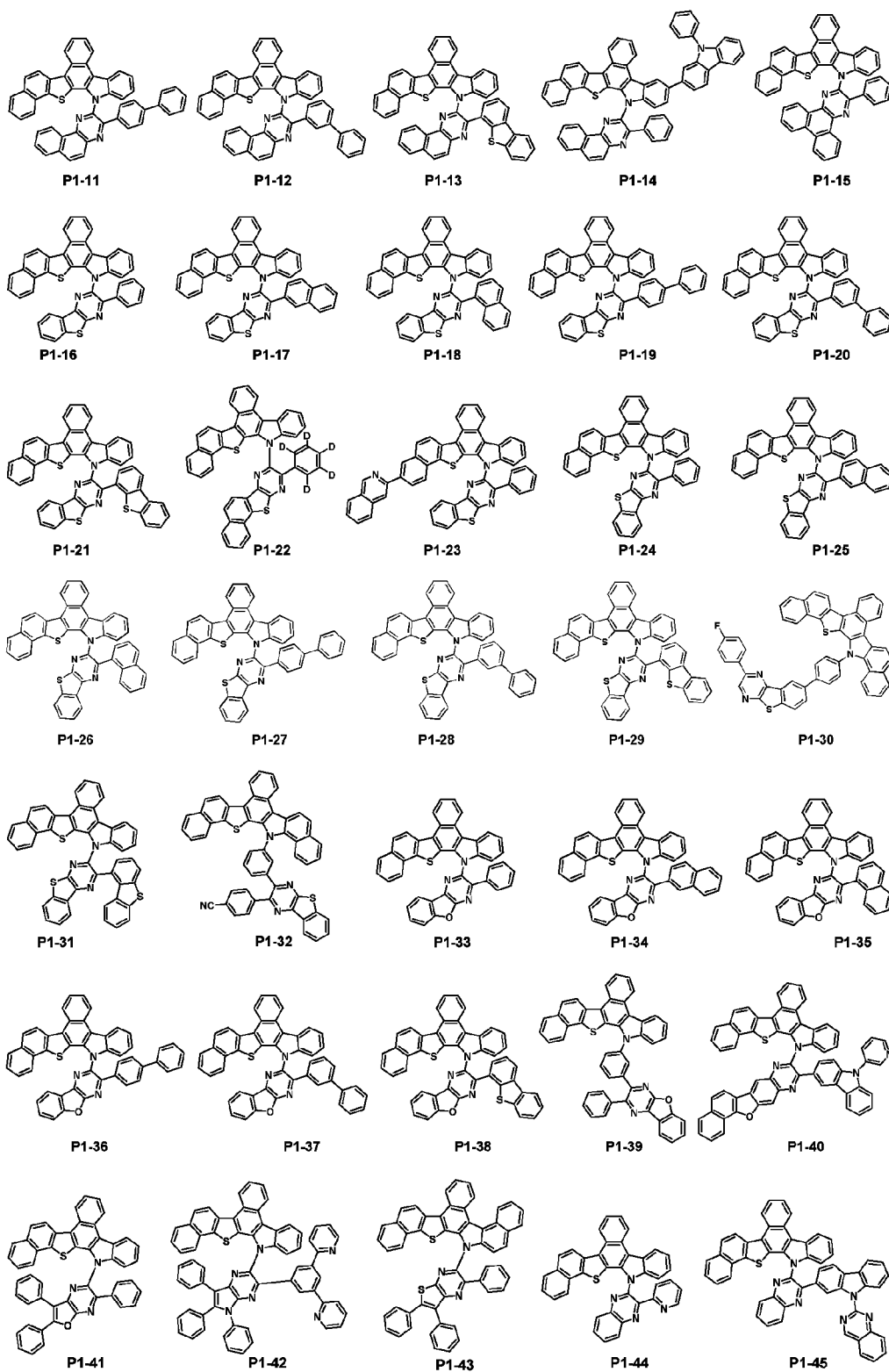
P1-6

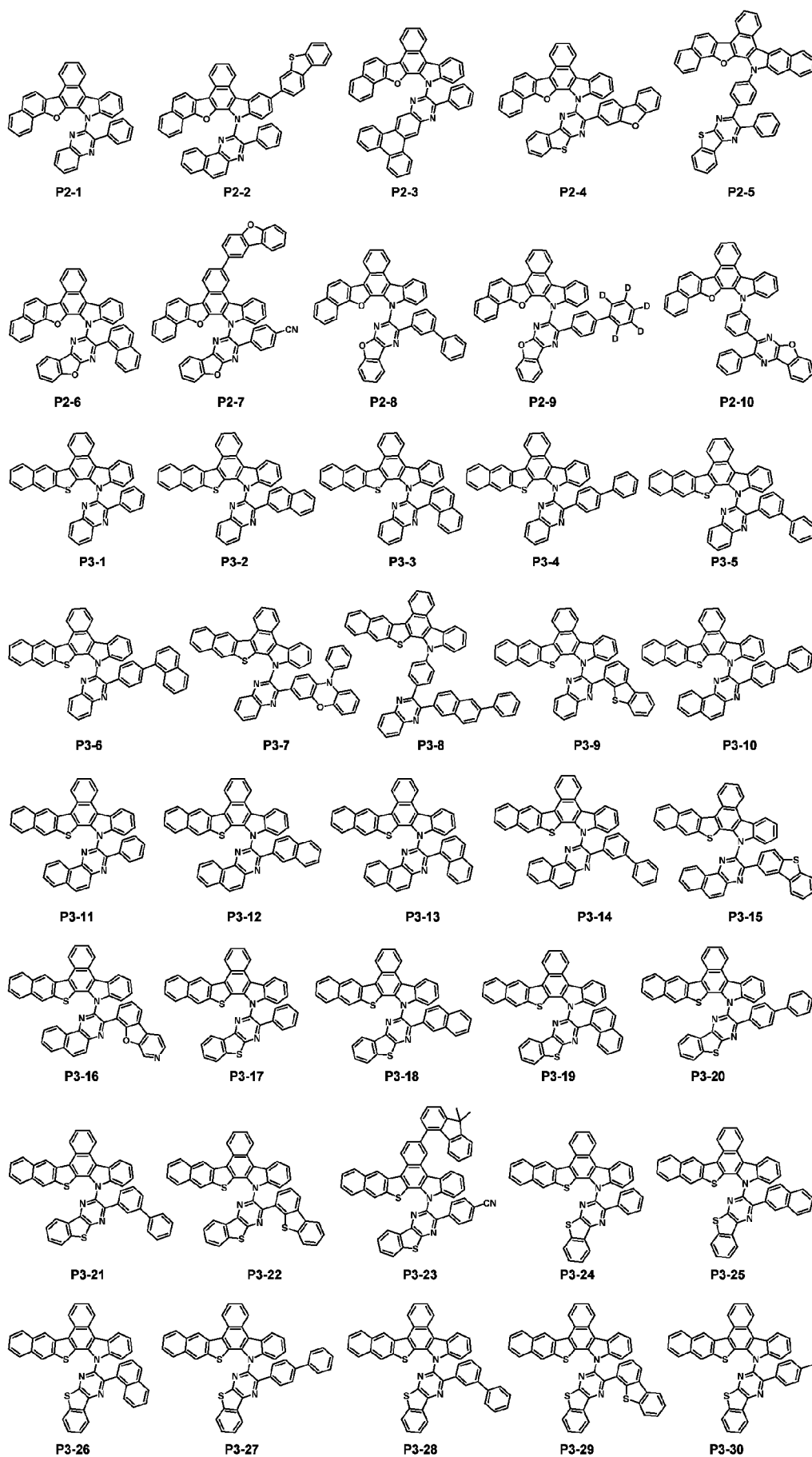
P1-7

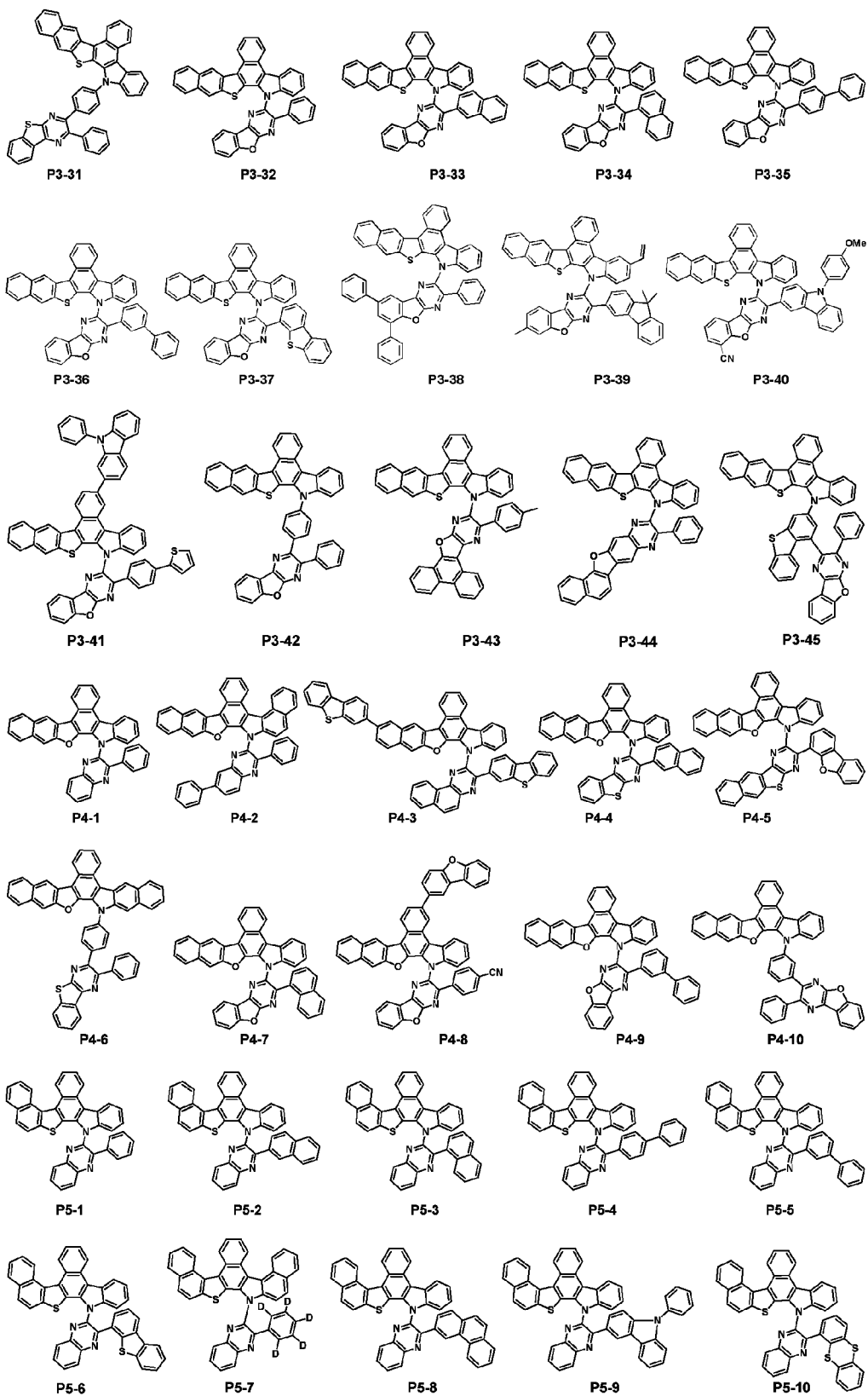
P1-8

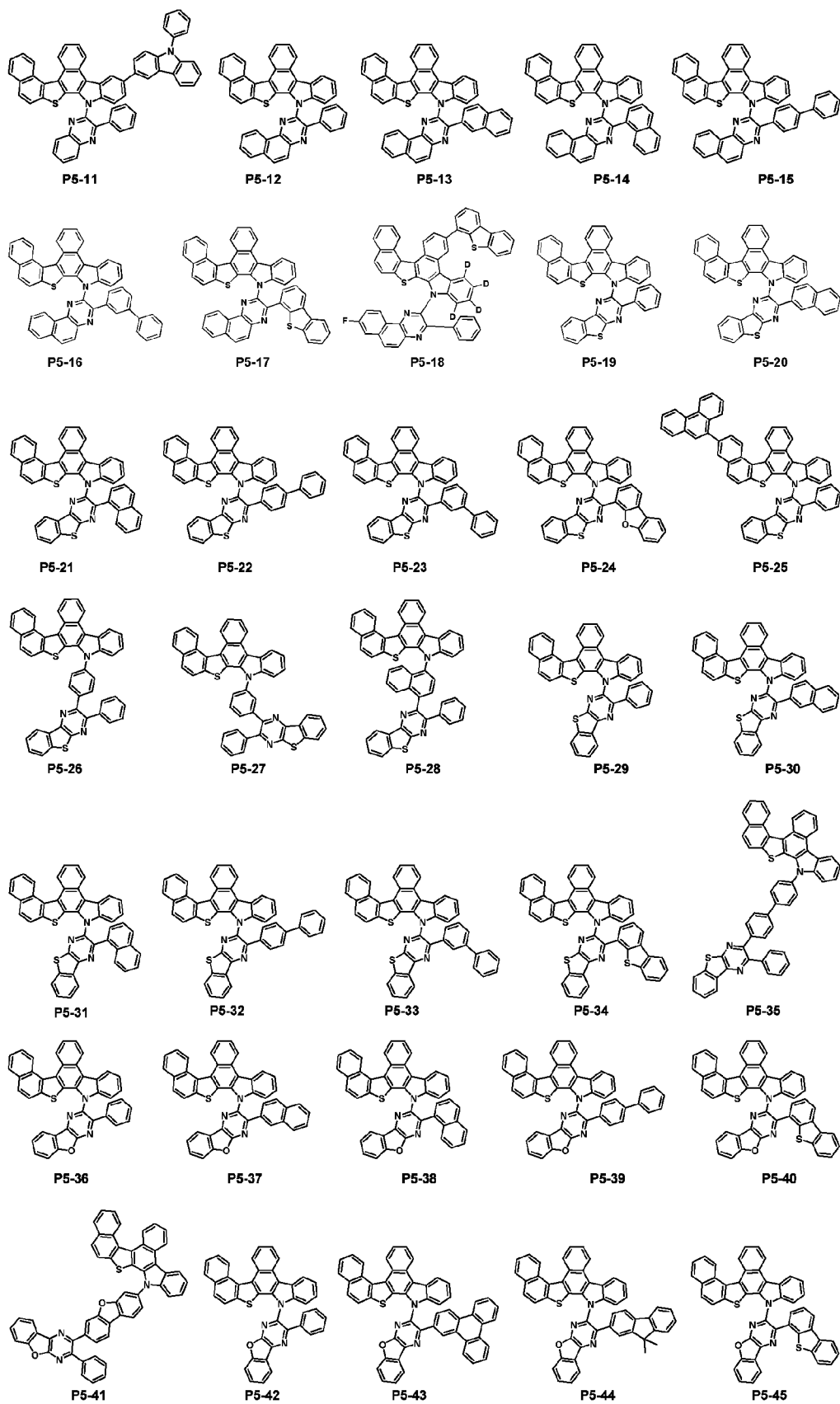
P1-9

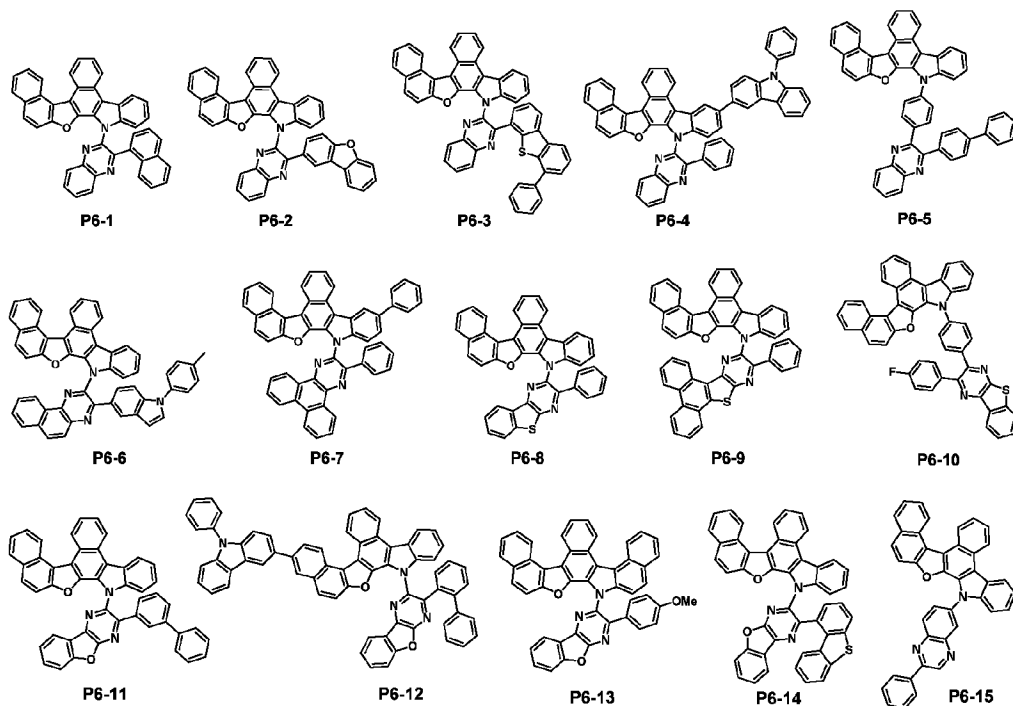
P1-10



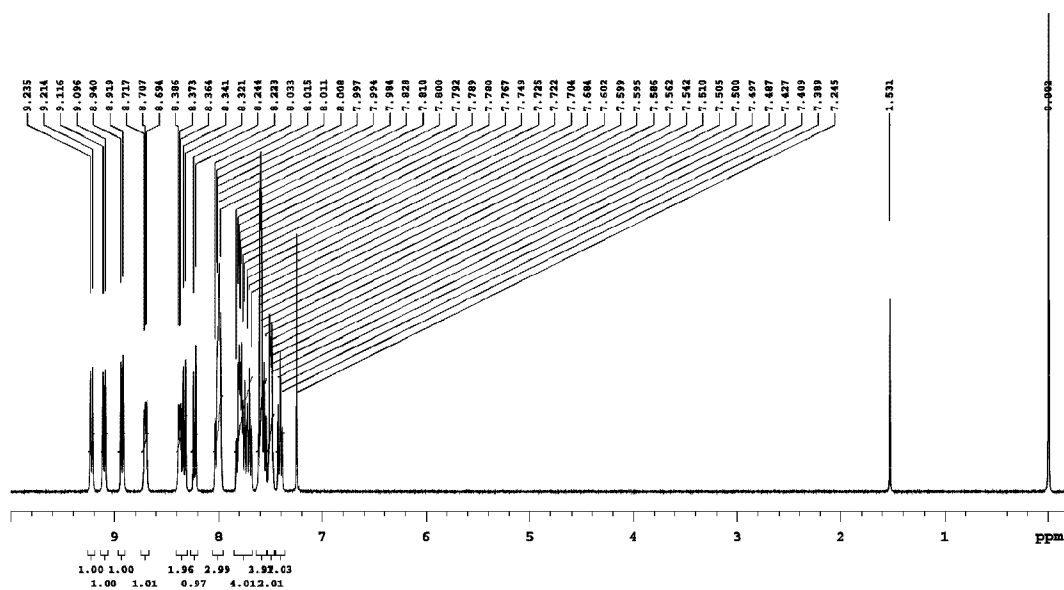




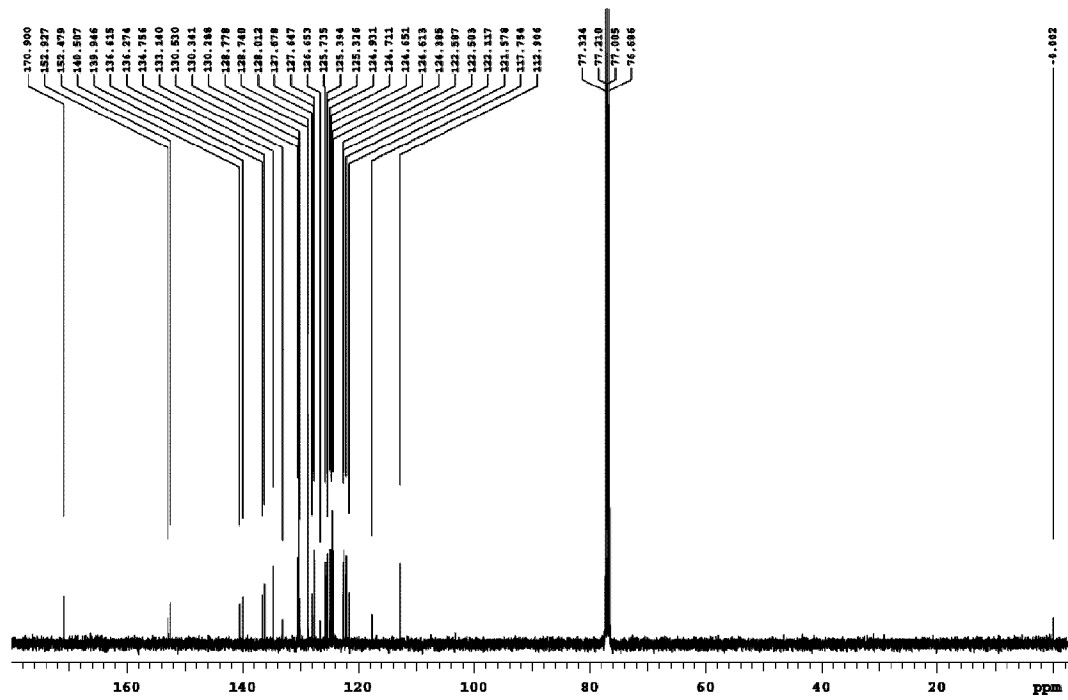




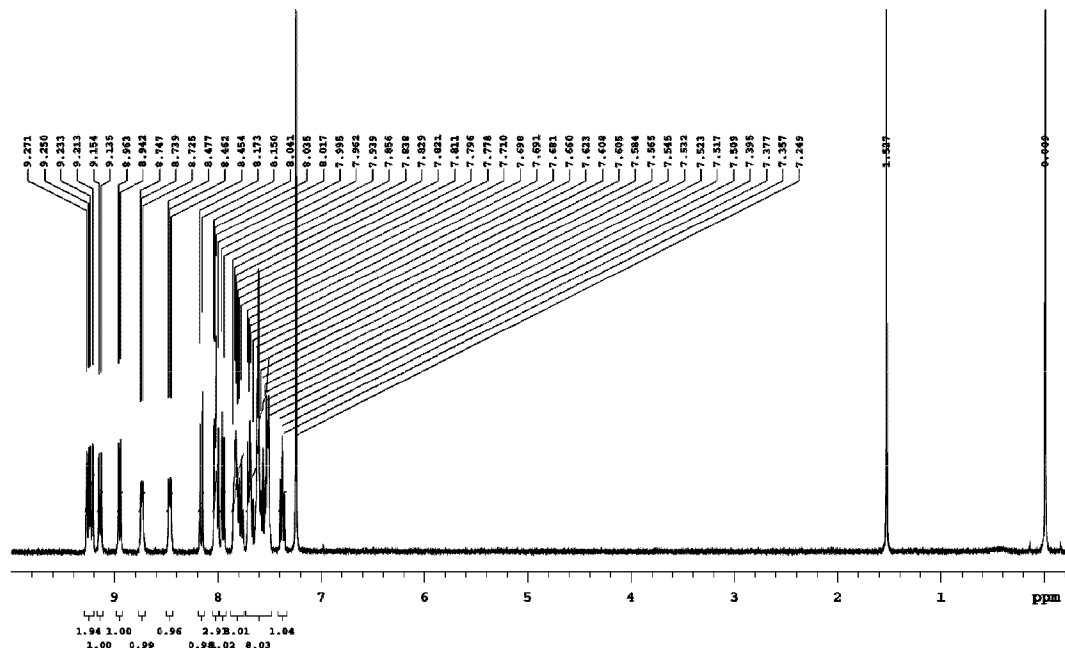
- [청구항 16] 제 1항에 있어서, 상기 발광층이 인광 발광층인 것을 특징으로 하는 유기전기소자
- [청구항 17] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물이 1:9 내지 9:1 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 18] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물이 1:9 내지 5:5 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 19] 제 1항에 있어서, 상기 화학식 (1) 및 상기 화학식 (2)로 나타내는 화합물이 2:8 또는 3:7로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자
- [청구항 20] 제 1항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치
- [청구항 21] 제 20항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치



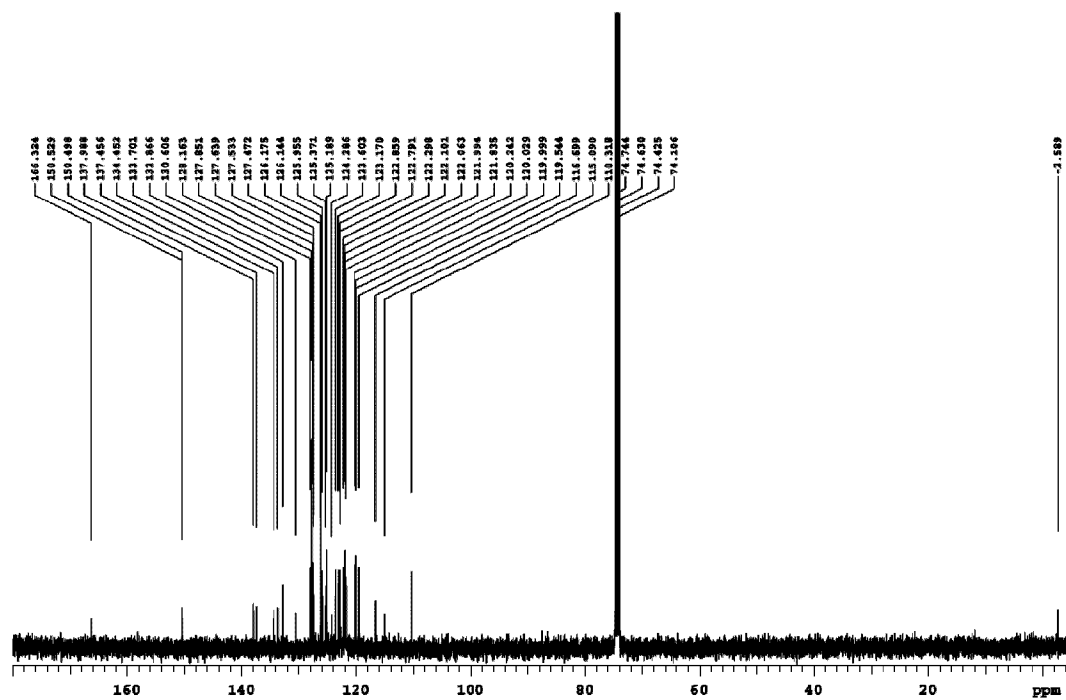
[도3]



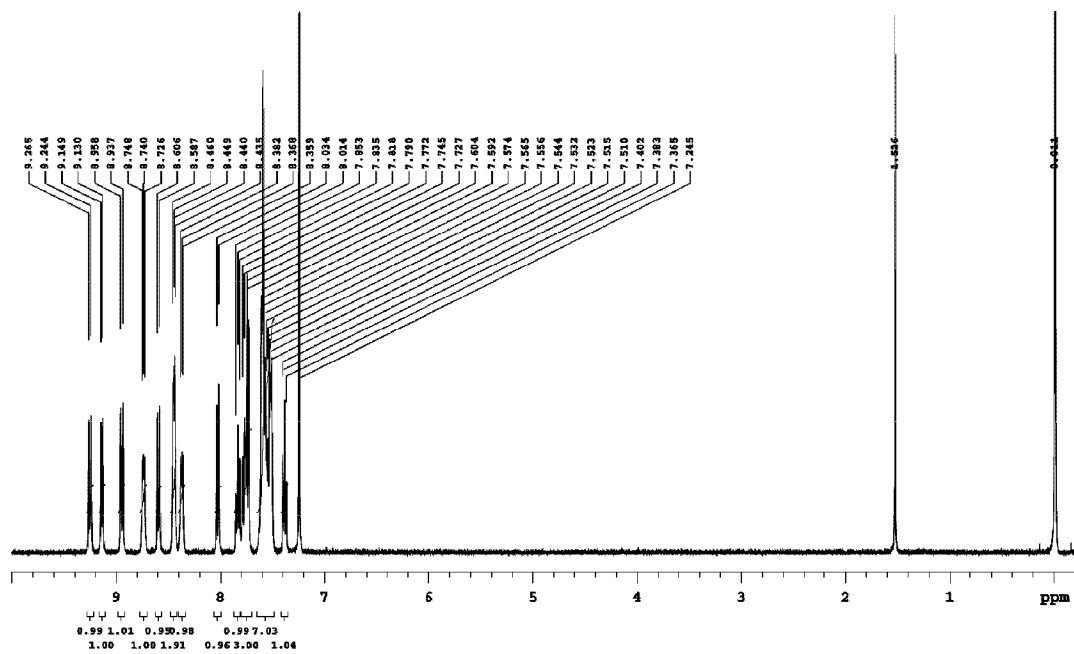
[도4]

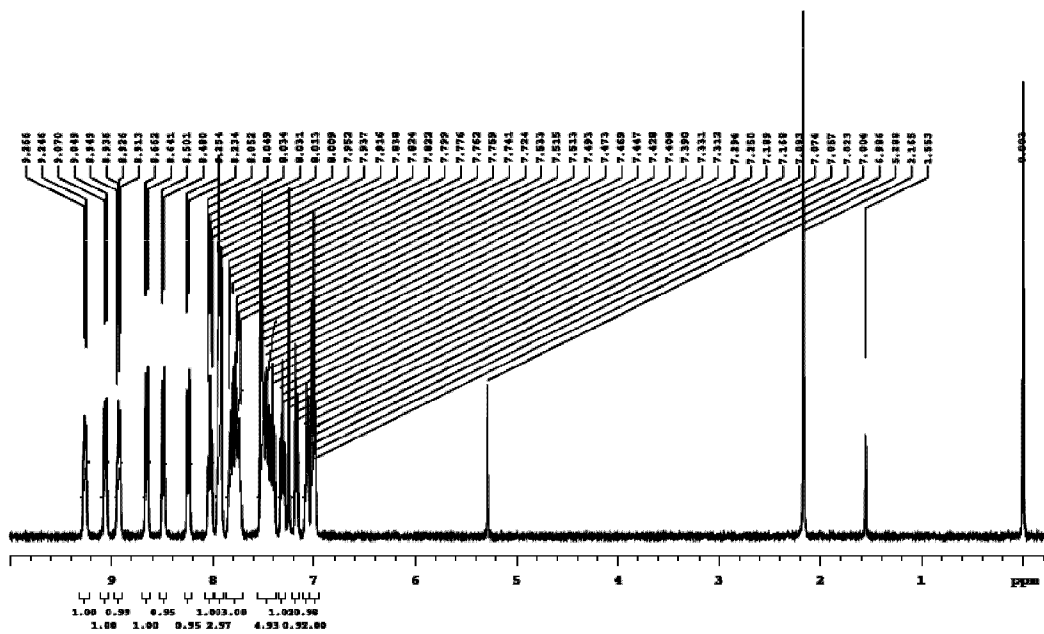
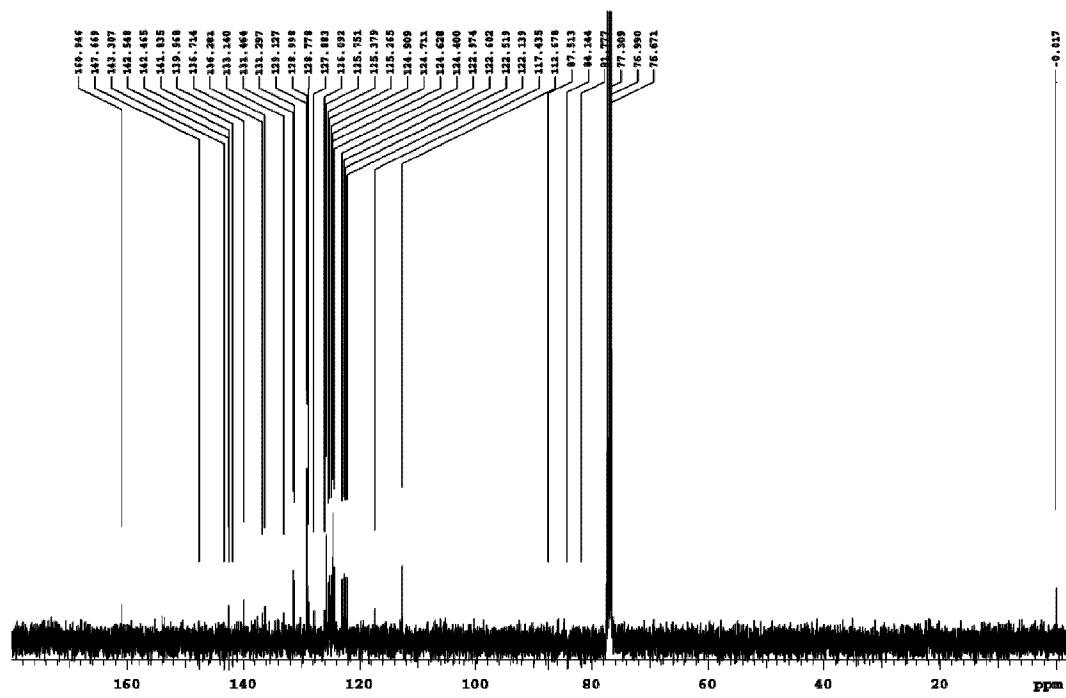


[도5]

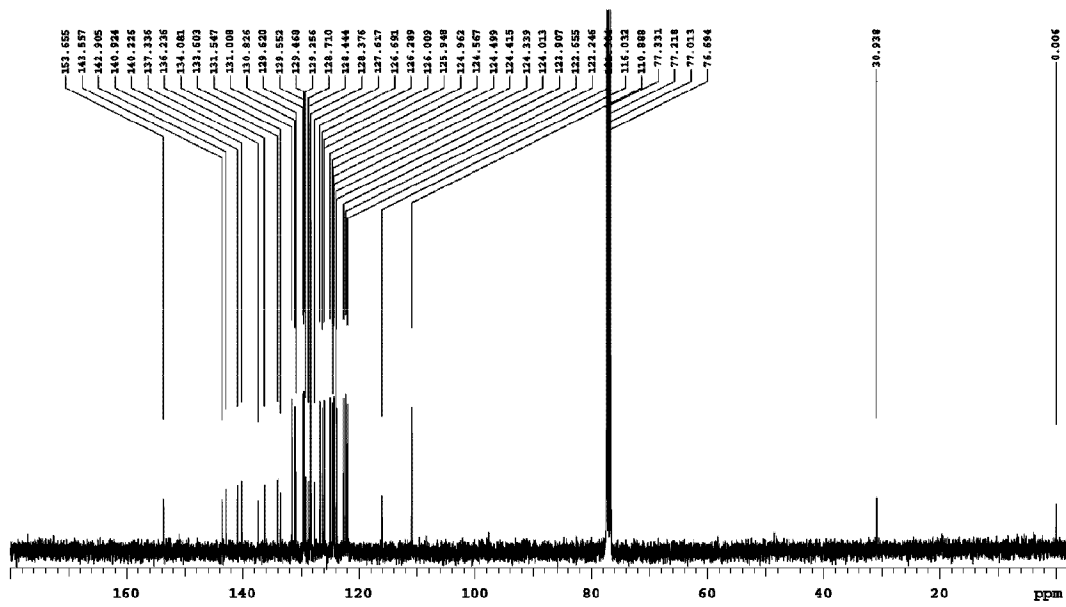


[도6]





[도9]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2017/004215

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07C 211/54(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 495/04(2006.01)i, C07D 491/048(2006.01)i, C07D 209/56(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07C 211/54; H01L 27/32; H05B 33/12; C07D 487/04; H01L 51/00; C07D 209/82; H01L 51/50; C09K 11/06; C07D 495/04; C07D 491/048; C07D 209/56

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & Keywords: tridibenzo[b,d]thiopenphenylamine, dihydrobenzo[a] indole3,2-i]carbazole, light emitting layer, phosphorescence dopant, host, HOMO level

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	KR 10-2013-0021350 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 05 March 2013 See claims 1, 3-5, 9; and paragraphs [0150]-[0154], [0160]-[0165], [0337]-[0338], [0514]-[0517], [0530].	1-21
Y	KR 10-2014-0126610 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 31 October 2014 See claims 1-5.	1-21
Y	US 2016-0028020 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 28 January 2016 See claims 1-8.	1-21
Y	KR 10-2015-0007476 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 21 January 2015 See claims 1, 5-6.	1-21
A	WO 2014-076917 A1 (SONY CORPORATION et al.) 22 May 2014 See page 61, compounds 3-5, 100-103; table 1, examples 8-10; and table 2, examples 23-25.	1-21



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

31 AUGUST 2017 (31.08.2017)

Date of mailing of the international search report

31 AUGUST 2017 (31.08.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/004215

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2013-0021350 A	05/03/2013	TW 201213497 A US 2012-0119197 A1 US 8710493 B2 WO 2011-148909 A1	01/04/2012 17/05/2012 29/04/2014 01/12/2011
KR 10-2014-0126610 A	31/10/2014	US 2014-0319472 A1	30/10/2014
US 2016-0028020 A1	28/01/2016	JP 2016-025360 A KR 10-2016-0012895 A	08/02/2016 03/02/2016
KR 10-2015-0007476 A	21/01/2015	NONE	
WO 2014-076917 A1	22/05/2014	TW 201430101 A US 2016-276602 A1 US 9647220 B2 WO 2014-076917 A1	01/08/2014 22/09/2016 09/05/2017 05/01/2017

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07C 211/54(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 495/04(2006.01)i, C07D 491/048(2006.01)i, C07D 209/56(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07C 211/54; H01L 27/32; H05B 33/12; C07D 487/04; H01L 51/00; C07D 209/82; H01L 51/50; C09K 11/06; C07D 495/04; C07D 491/048; C07D 209/56

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

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

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN (Registry, Caplus), Google & 키워드:트리디벤조[b,d]티
오픈페닐아민, 디히드로벤조[a]인돌[3,2-i]카바졸, 발광층, 인광 도펀트, 호스트, HOMO 레벨

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
Y	KR 10-2013-0021350 A (이데미쓰 고산 가부시기가이샤) 2013.03.05 청구항 1, 3-5, 9; 및 단락 [0150]-[0154], [0160]-[0165], [0337]-[0338], [0514]-[0517], [0530] 참조.	1-21
Y	KR 10-2014-0126610 A (삼성디스플레이 주식회사) 2014.10.31 청구항 1-5 참조.	1-21
Y	US 2016-0028020 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 2016.01.28 청구항 1-8 참조.	1-21
Y	KR 10-2015-0007476 A (덕산하이메탈(주)) 2015.01.21 청구항 1, 5-6 참조.	1-21
A	WO 2014-076917 A1 (SONY CORPORATION 등) 2014.05.22 페이지 61, 화합물 3-5, 100-103; 표 1, 실시예 8-10; 및 표 2, 실시예 23-25 참조.	1-21

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 08월 31일 (31.08.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 08월 31일 (31.08.2017)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



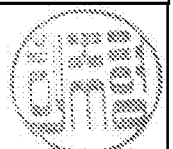
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-8150



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2013-0021350 A	2013/03/05	TW 201213497 A US 2012-0119197 A1 US 8710493 B2 WO 2011-148909 A1	2012/04/01 2012/05/17 2014/04/29 2011/12/01
KR 10-2014-0126610 A	2014/10/31	US 2014-0319472 A1	2014/10/30
US 2016-0028020 A1	2016/01/28	JP 2016-025360 A KR 10-2016-0012895 A	2016/02/08 2016/02/03
KR 10-2015-0007476 A	2015/01/21	없음	
WO 2014-076917 A1	2014/05/22	TW 201430101 A US 2016-276602 A1 US 9647220 B2 WO 2014-076917 A1	2014/08/01 2016/09/22 2017/05/09 2017/01/05