



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0022325
(43) 공개일자 2018년03월06일

- | | |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C07C 211/54</i> (2006.01) <i>C07D 487/04</i> (2006.01)
 <i>C07D 491/048</i> (2006.01) <i>C07D 495/04</i> (2006.01)
 <i>C07F 7/08</i> (2006.01) <i>C09K 11/06</i> (2006.01)
 <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C07C 211/54</i> (2013.01)
 <i>C07D 487/04</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2016-0107615
 (22) 출원일자 2016년08월24일
 심사청구일자 2017년12월22일</p> | <p>(71) 출원인
 덕산네오룩스 주식회사
 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32</p> <p>(72) 발명자
 이문재
 충청남도 천안시 동남구 통정3로 68 필하우스아파트 112동 104호
 문성윤
 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥3길 19-1 신비텔 11동 204호
 (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
 특허법인주원</p> |
|--|---|

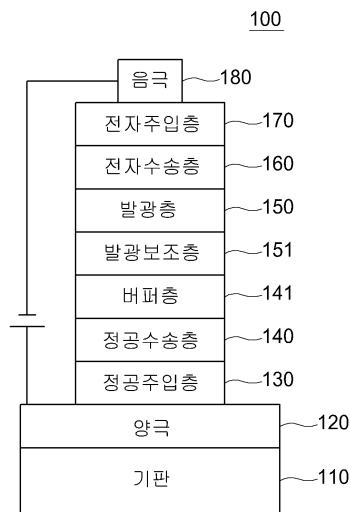
전체 청구항 수 : 총 21 항

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

(57) 요약

본 발명에 따른 화합물의 혼합물을 인광 호스트 물질로 이용함으로써, 유기전기소자의 높은 발광효율, 낮은 구동 전압을 달성할 수 있으며, 또한 소자의 수명을 크게 향상시킬 수 있는 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 491/048 (2013.01)
C07D 495/04 (2013.01)
C07F 7/0818 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/006 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
C09K 2211/1014 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1037 (2013.01)

(72) 발명자

권재택

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 19 신비텔
9동 406호

김대성

경기도 용인시 처인구 지삼로590번길 9 용인행정타
운 두산위브 2단지 201동 1004호

박무진

충청남도 천안시 서북구 부성8길 29 계룡리슈빌아
파트 103동 1405호

이정욱

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 17 신비텔
9동 406호

최연희

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 17 신비텔
9동 405호

정호영

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 21 신비텔
12동 204호

이범성

경기도 화성시 탄요1길 98 내뜰애타운하우스 29동
2호

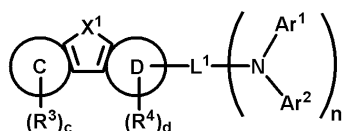
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물

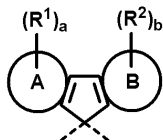
화학식 1



{상기 화학식 1에서,

1) X^1 은 CR^aR^b 또는 화학식 1-a이고,

화학식 1-a



상기 화학식 1-a에서, 점선은 X^1 으로부터의 결합을 나타내며,

2) R^a 및 R^b 는 서로 독립적으로 수소; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; 및 C_2-C_{20} 의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며,

3) Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; 플루오렌일기; C_6-C_{60} 의 방향족고리와 C_3-C_{60} 의 지방족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고,

4) 또한 Ar^1 과 Ar^2 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

5) n 은 1 또는 2의 정수이며, n 이 2일 경우 2개의 Ar^1 은 각각 동일하거나 상이하고, 2개의 Ar^2 는 각각 동일하거나 상이하며,

6) L^1 은 단일결합; C_6-C_{60} 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되고,

7) A, B, C 및 D는 서로 독립적으로 C_6-C_{20} 의 아릴기 또는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기이며,

8) a , b 및 c 는 서로 독립적으로 0 내지 6의 정수이고, d 는 0 내지 5의 정수이며,

9) R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의

헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b, c 및 d가 2 이상인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R¹끼리 혹은 복수의 R²끼리 혹은 복수의 R³끼리 혹은 복수의 R⁴끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,

10) 상기 L^a는 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되고,

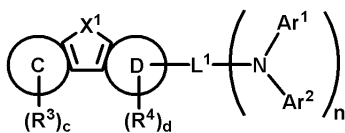
11) 상기 R^c 및 R^d는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기;로 이루어진 군에서 선택되고,

여기서, 상기 아릴기, 플루오렌일기, 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; $-L^a-N(R^c)(R^d)$; 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 치환될 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.}

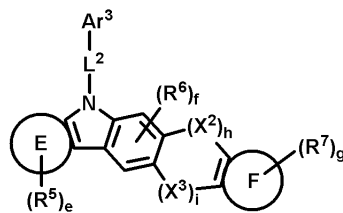
청구항 2

제 1전극, 제 2전극 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 1 호스트 화합물 및 하기 화학식 2로 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

화학식 1



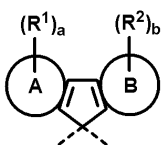
화학식 2



{상기 화학식 1 및 화학식 2에서,

1) X¹은 CR^aR^b 또는 하기 화학식 1-a이고,

화학식 1-a



상기 화학식 1-a에서, 점선은 X^1 으로부터의 결합을 나타내며,

2) X^2 및 X^3 은 서로 독립적으로 $N-L^3-Ar^4$, O, S, CR^aR^b 또는 상기 화학식 1-a이며, 이때 상기 화학식 1-a에서 점선은 X^2 또는 X^3 으로부터의 결합을 나타내고,

3) R^a 및 R^b 는 서로 독립적으로 수소; C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며,

4) h 및 i는 0 또는 1의 정수이고, 단, h+i는 1 이상이며, 여기서 h 또는 i가 0일 경우는 직접결합을 의미하고,

5) Ar^1 , Ar^2 , Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아틸기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; 플루오렌일기; C_6-C_{60} 의 방향족 고리와 C_3-C_{60} 의 지방족 고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아틸옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, (여기서 상기 L^a 는 단일결합; C_6-C_{60} 의 아틸렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R^c 및 R^d 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기;로 이루어진 군에서 선택됨)

6) 또한 Ar^1 과 Ar^2 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

7) n은 1 또는 2의 정수이며, n이 2일 경우 2개의 Ar^1 은 각각 동일하거나 상이하고, 2개의 Ar^2 는 각각 동일하거나 상이하며,

8) L^1 , L^2 및 L^3 은 서로 독립적으로 단일결합; C_6-C_{60} 의 아틸렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되며,

9) a, b, c, e 및 g는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수이고, d는 0 내지 5의 정수이고, f는 0 내지 2의 정수이며,

10) R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 및 R^7 은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아틸옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b, c, d, e 및 g가 2 이상인 경우 및 f가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^1 끼리 혹은 복수의 R^2 끼리 혹은 복수의 R^3 끼리 혹은 복수의 R^4 끼리 혹은 복수의 R^5 끼리 혹은 복수의 R^6 끼리 혹은 복수의 R^7 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,

11) A, B, C, D, E 및 F는 서로 독립적으로 C_6-C_{20} 의 아틸기 또는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기이며,

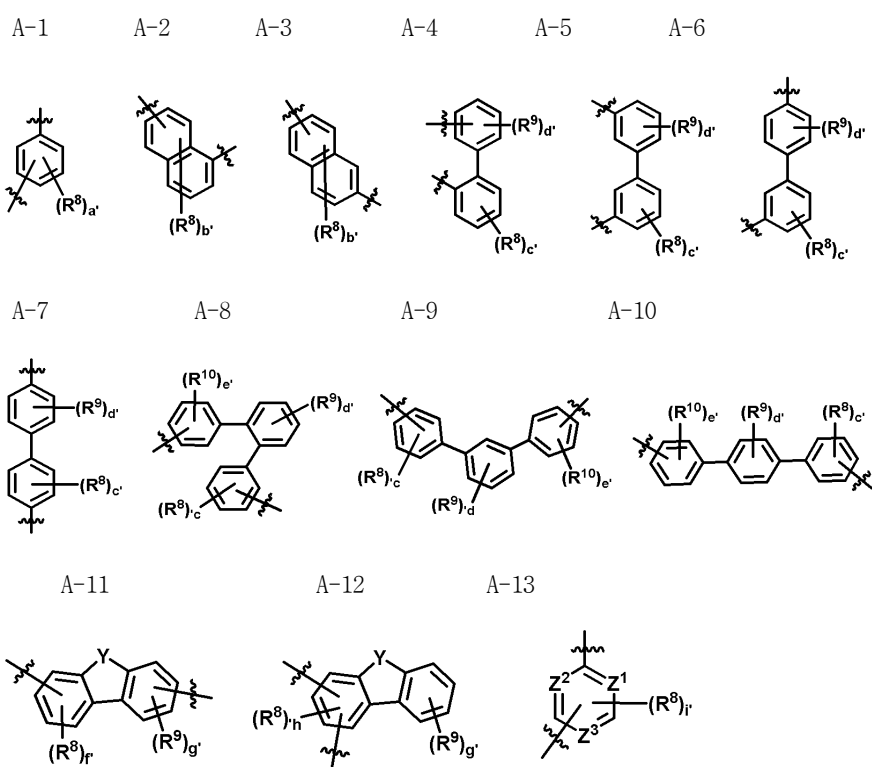
단, E 및 F 모두 치환 또는 비치환된 C_6 의 아틸기(페닐기)인 경우에는 제외하며,

여기서, 상기 아틸기, 플루오렌일기, 아틸렌기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기, 아틸옥시기는 각각 중수소; 할로젠; C_1-C_{20} 의 알킬기 또는 C_6-C_{20} 의 아틸기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기;

붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; $-L^a-N(R^c)(R^d)$; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; 플루오렌일기; C_2-C_{20} 의 헤테로고리기; C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 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 3

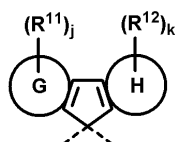
제 2항에 있어서, 상기 화학식 1 및 2의 L^1 , L^2 및 L^3 가 하기 화학식 A-1 내지 A-13 중에 어느 하나인 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자



{상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-13에서,

1) Y는 $N-L^4-Ar^5$, O, S, CR^eR^f 또는 하기 화학식 1-b이고,

화학식 1-b



상기 화학식 1-b에서, 점선은 Y로부터의 결합을 나타내고,

2) L^4 는 상기 청구항 2에서 L^3 의 정의와 동일하고,

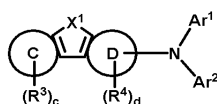
3) Ar^5 는 상기 청구항 2에서 Ar^4 의 정의와 동일하며,

- 4) R^e 및 R^f 는 상기 청구항 2에서 R^a 의 정의와 동일하고,
- 5) R^{11} 및 R^{12} 는 상기 청구항 2에서 R^1 의 정의와 동일하고,
- 6) G 및 H는 상기 청구항 2에서 A의 정의와 동일하고,
- 7) j 및 k는 상기 청구항 2에서 a의 정의와 동일하고,
- 8) a' , c' , d' 및 e' 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, b' 은 0 내지 6의 정수이며, f' 및 g' 는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, h' 는 0 내지 2의 정수이며, i' 는 0 또는 1의 정수이고,
- 9) R^8 , R^9 및 R^{10} 은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a' , b' , c' , d' , e' , f' 및 g' 가 2 이상인 경우 및 h' 가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^8 끼리 혹은 복수의 R^9 끼리 혹은 복수의 R^{10} 끼리 혹은 이웃한 R^8 과 R^9 또는 R^9 과 R^{10} 은 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,
- 10) L^a 는 상기 청구항 2에서 L^a 의 정의와 동일하고, R^c 및 R^d 는 상기 청구항 2에서 R^c 및 R^d 의 정의와 동일하고,
- 11) Z^1 , Z^2 및 Z^3 은 서로 독립적으로 CR^{13} 또는 N이고, Z^1 , Z^2 및 Z^3 중 적어도 하나는 N이며,
- 12) R^{13} 은 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 이웃한 R^8 과 R^{13} 은 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있다.}

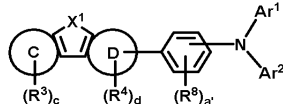
청구항 4

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

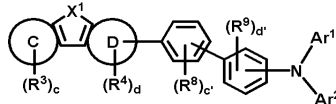
화학식 1-1



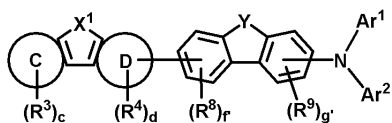
화학식 1-2



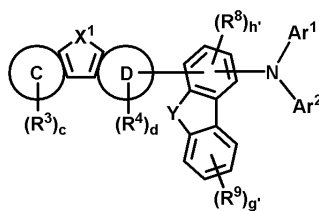
화학식 1-3



화학식 1-4



화학식 1-5

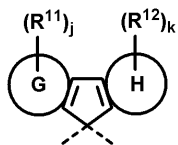


{상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5에서,

- 1) X^1 , C, D, R^3 , R^4 , c, d, Ar^1 및 Ar^2 는 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같고,

2) Y는 $N-L^4-Ar^5$, O, S, CR^eR^f 또는 하기 화학식 1-b이고,

화학식 1-b



상기 화학식 1-b에서, 점선은 Y로부터의 결합을 나타내며,

3) L^4 는 상기 청구항 2에서 L^3 의 정의와 동일하고,

4) Ar^5 는 상기 청구항 2에서 Ar^4 의 정의와 동일하고,

5) R^e 및 R^f 는 상기 청구항 2에서 R^a 의 정의와 동일하고,

6) R^{11} 및 R^{12} 는 상기 청구항 2에서 R^1 의 정의와 동일하고,

7) G 및 H는 상기 청구항 2에서 A의 정의와 동일하고,

8) j 및 k는 상기 청구항 2에서 a의 정의와 동일하고,

9) a' , c' 및 d' 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, f' 및 g' 는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이고 h' 는 0 내지 2의 정수이며,

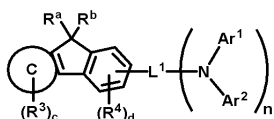
10) R^8 및 R^9 는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a' , c' , d' , f' 및 g' 가 2 이상인 경우 및 h' 가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^8 끼리 혹은 복수의 R^9 끼리 혹은 이웃한 R^8 과 R^9 가 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,

11) L^a , R^c 및 R^d 는 상기 청구항 2에서 L^a , R^c 및 R^d 의 정의와 동일하다.}

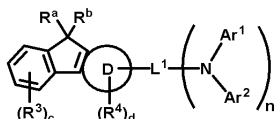
청구항 5

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-6 내지 화학식 1-20 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

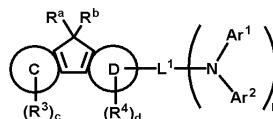
화학식 1-6



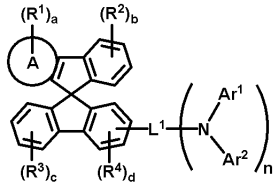
화학식 1-7



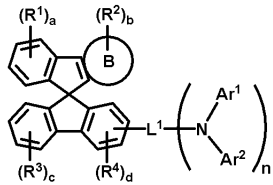
화학식 1-8



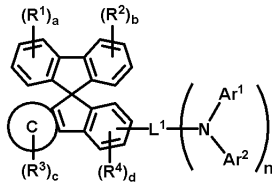
화학식 1-9



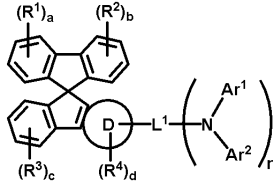
화학식 1-10



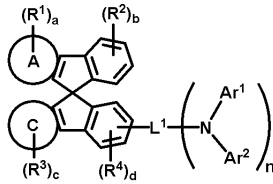
화학식 1-11



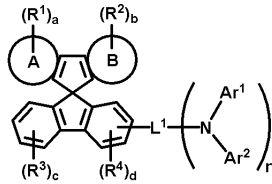
화학식 1-12



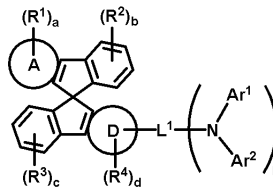
화학식 1-13



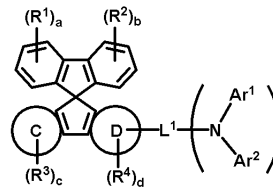
화학식 1-14



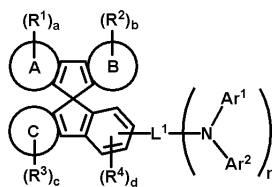
화학식 1-15



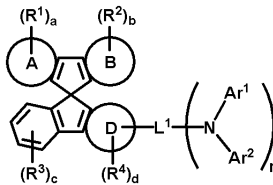
화학식 1-16



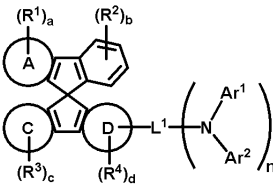
화학식 1-17



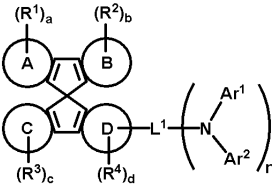
화학식 1-18



화학식 1-19



화학식 1-20



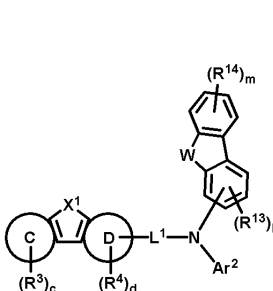
{상기 화학식 1-6 내지 화학식 1-20에서,

- 1) R^a , R^b , R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , a , b , c , d , L^1 , Ar^1 , Ar^2 및 n 은 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같고,
- 2) A , B , C 및 D 는 C_{10} 의 아틸기이다.}

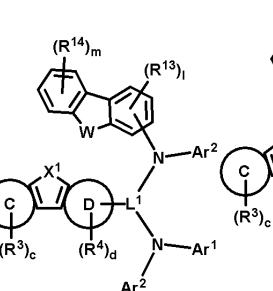
청구항 6

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-21 내지 화학식 1-23 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

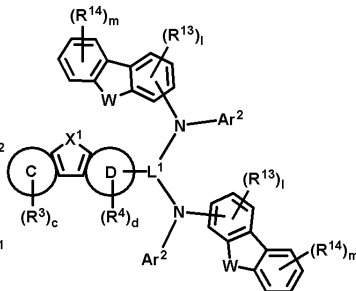
화학식 1-21



화학식 1-22



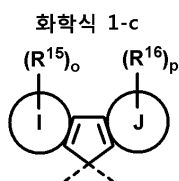
화학식 1-23



{상기 화학식 1-21 내지 화학식 1-23에서,

1) C, D, R³, R⁴, c, d, L¹, Ar¹ 및 Ar²는 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같고,

2) W는 N-L⁵-Ar⁶, O, S, CR^gR^h 또는 하기 화학식 1-c이며,



상기 화학식 1-c에서, 점선은 W로부터의 결합을 나타내고,

3) L⁵는 상기 청구항 2에서 L³의 정의와 동일하고, Ar⁶는 상기 청구항 2에서 Ar⁴의 정의와 동일하며,

4) R^g 및 R^h는 상기 청구항 2에서 R^a의 정의와 동일하고,

5) R¹⁵ 및 R¹⁶은 상기 청구항 2에서 R¹의 정의와 동일하고,

6) I 및 J는 상기 청구항 2에서 A의 정의와 동일하고,

7) o 및 p는 상기 청구항 2에서 a의 정의와 동일하고,

8) l은 0 내지 3의 정수이고, m은 0 내지 4의 정수이며,

9) R¹³ 및 R¹⁴는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 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^a-N(R^c)(R^d);로 이루어진 군에서 선택되고, 복수의 R¹³끼리 혹은 복수의 R¹⁴끼리 혹은 이웃한 R¹³과 R¹⁴가 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,

10) L^a, R^c 및 R^d는 상기 청구항 2에서 L^a, R^c 및 R^d의 정의와 동일하며,

11) 2개의 Ar²는 각각 동일하거나 상이하고, 2개의 W는 각각 동일하거나 상이하며, 복수의 R¹³ 및 복수의 R¹⁴는 서로 동일하거나 상이하다.}

청구항 7

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1에서 n이 1인 경우의 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

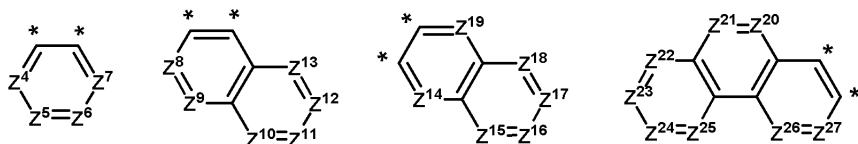
청구항 8

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1에서 n이 2인 경우의 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

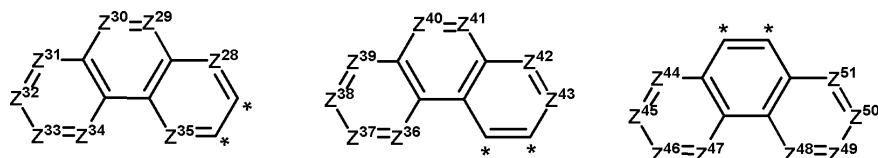
청구항 9

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 A, B, C, D, E 및 F가 하기 화학식 B-1 내지 화학식 B-7로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

화학식 B-1 화학식 B-2 화학식 B-3 화학식 B-4



화학식 B-5 화학식 B-6 화학식 B-7



{상기 화학식 B-1 내지 화학식 B-7에서,

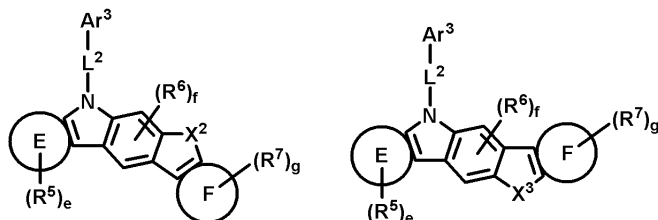
- (1) Z^4 내지 Z^{51} 은 CR^i 또는 N이며,
- (2) R^i 는 상기 청구항 2에서 R^a 의 정의와 동일하고,
- (3) *는 축합되는 위치를 나타낸다.}

청구항 10

제 2항에 있어서, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 3 또는 화학식 4로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

화학식 3

화학식 4



{상기 화학식 3 및 4에서,

E, F, R^5 , R^6 , R^7 , e, f, g, L^2 , Ar^3 , X^2 및 X^3 은 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같다.}

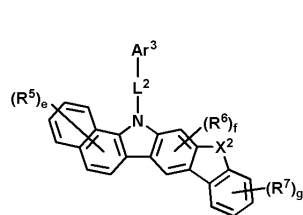
청구항 11

제 2항에 있어서, 상기 화학식 2의 R^6 이 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 만드니 형성하고 있는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

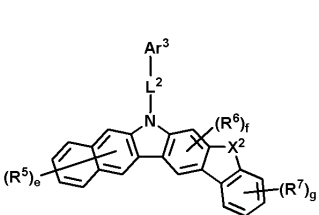
청구항 12

제 2항에 있어서, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 5-1 내지 화학식 5-24 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

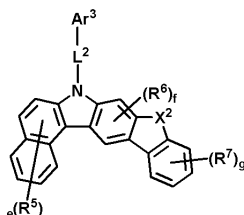
화학식 5-1



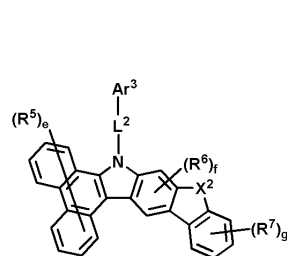
화학식 5-2



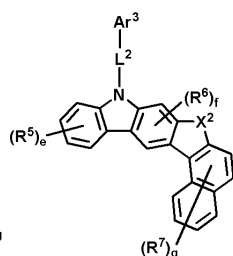
화학식 5-3



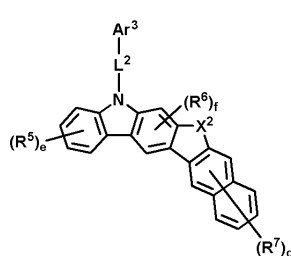
화학식 5-4



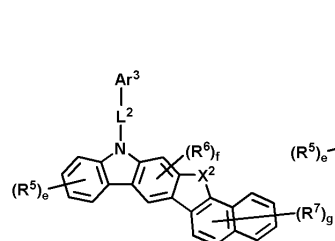
화학식 5-5



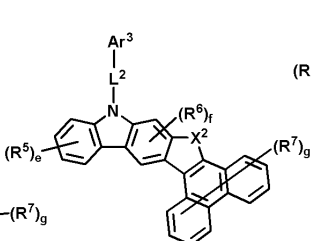
화학식 5-6



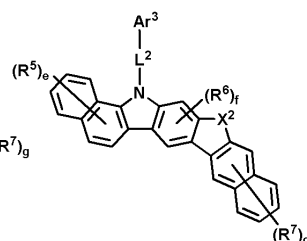
화학식 5-7



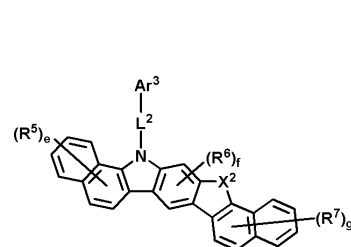
화학식 5-8



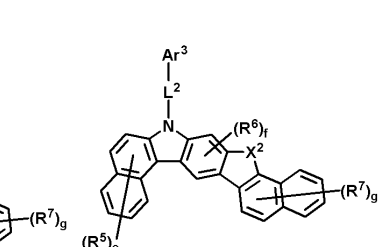
화학식 5-9



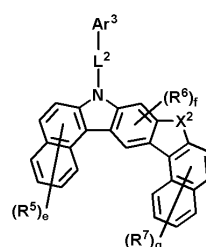
화학식 5-10



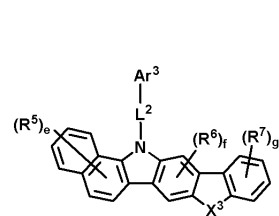
화학식 5-11



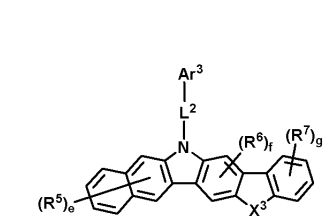
화학식 5-12



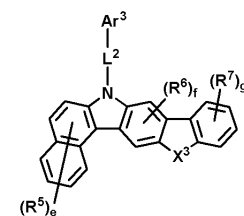
화학식 5-13



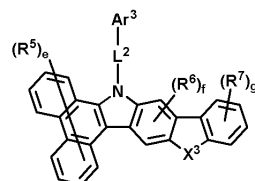
화학식 5-14



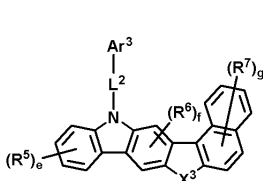
화학식 5-15



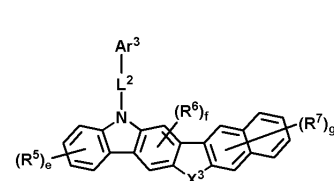
화학식 5-16



화학식 5-17



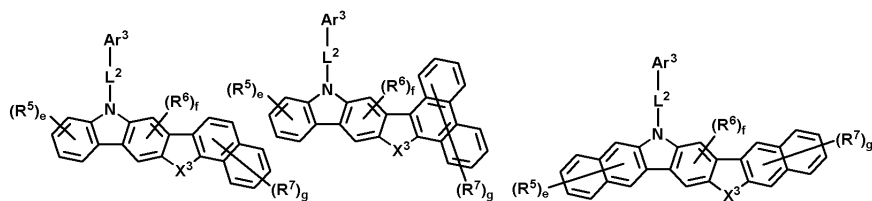
화학식 5-18



화학식 5-19

화학식 5-20

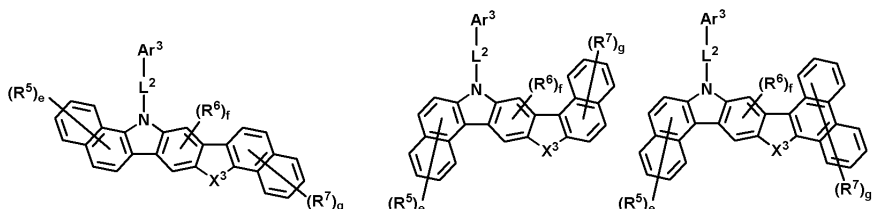
화학식 5-21



화학식 5-22

화학식 5-23

화학식 5-24



{상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-24에서,

R^5 , R^6 , R^7 , e , f , g , L^2 , Ar^3 , X^2 및 X^3 은 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같다.}

청구항 13

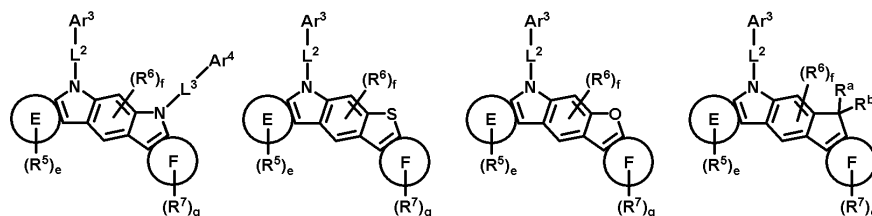
제 2항에 있어서, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 6-1 내지 화학식 6-8 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

화학식 6-1

화학식 6-2

화학식 6-3

화학식 6-4

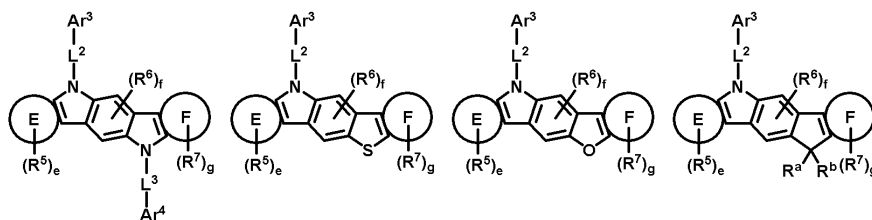


화학식 6-5

화학식 6-6

화학식 6-7

화학식 6-8

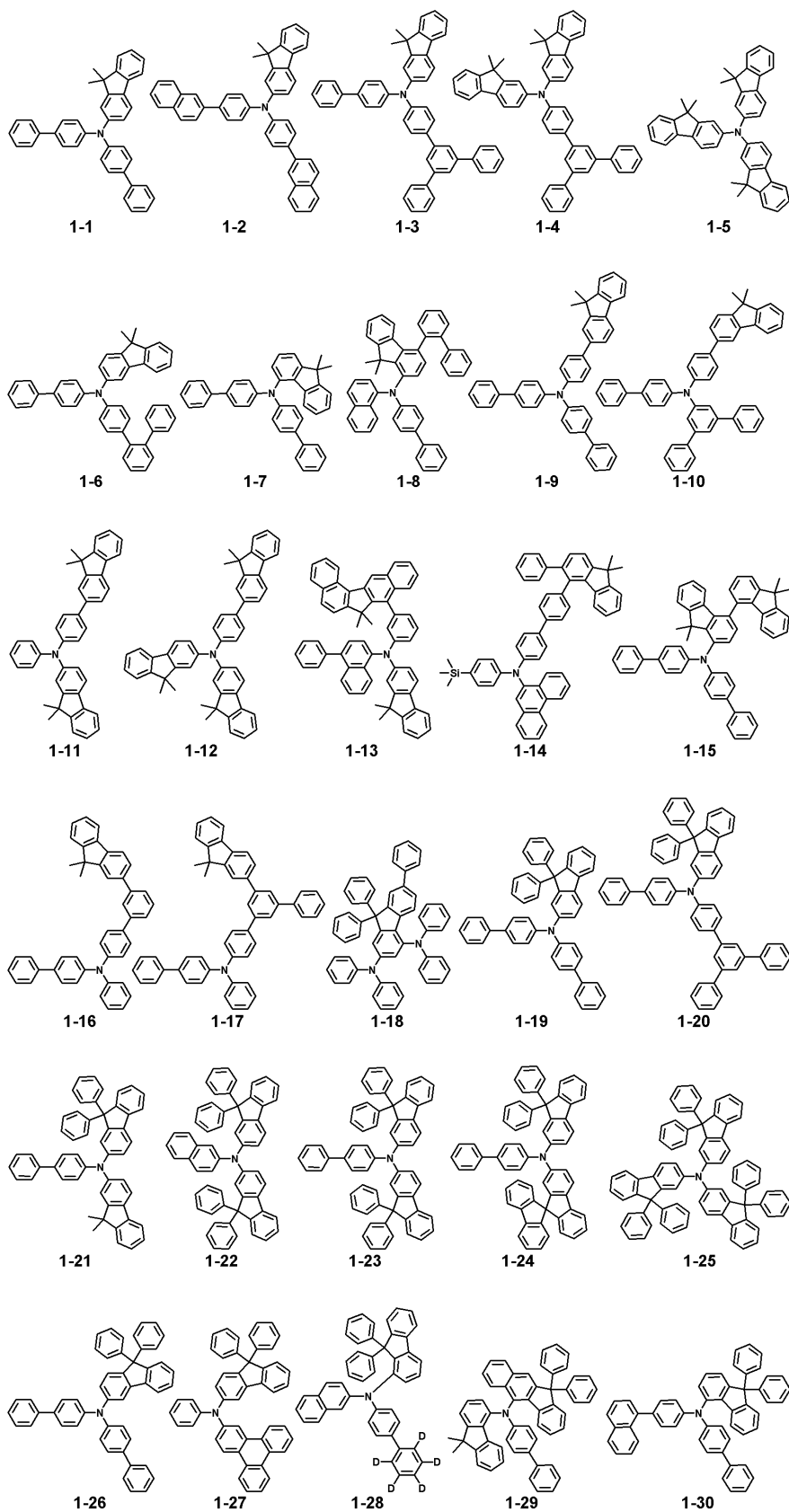


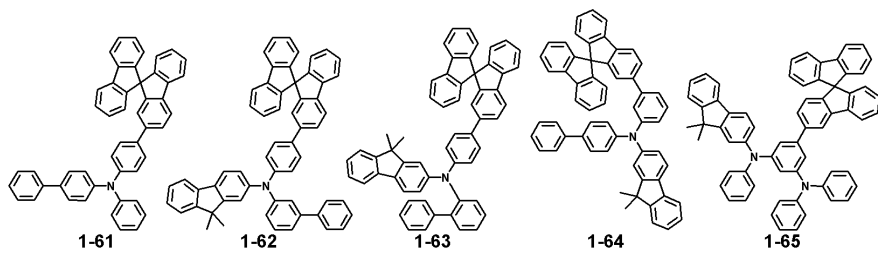
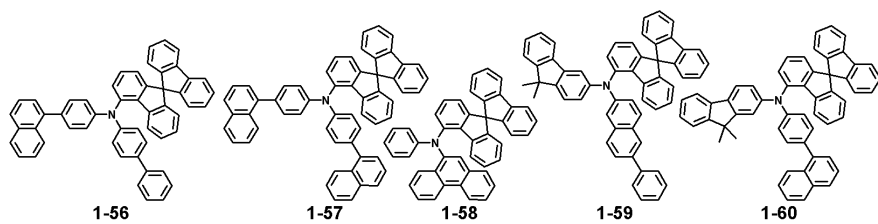
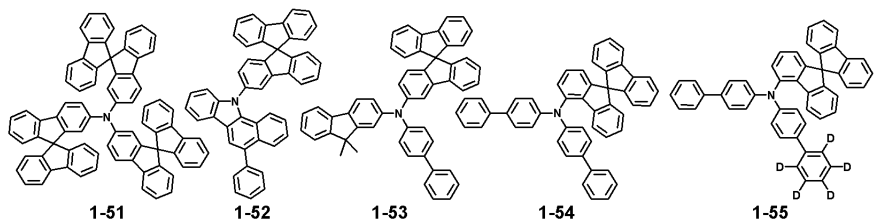
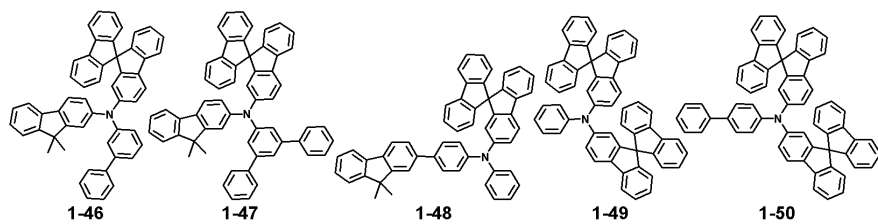
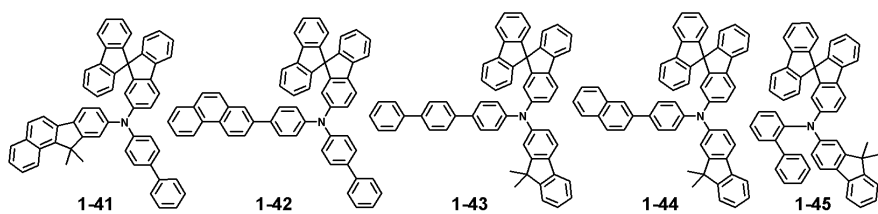
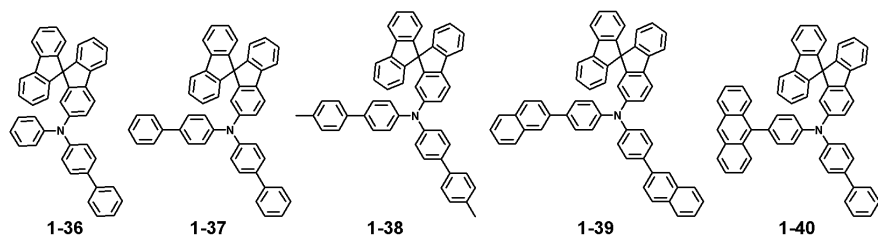
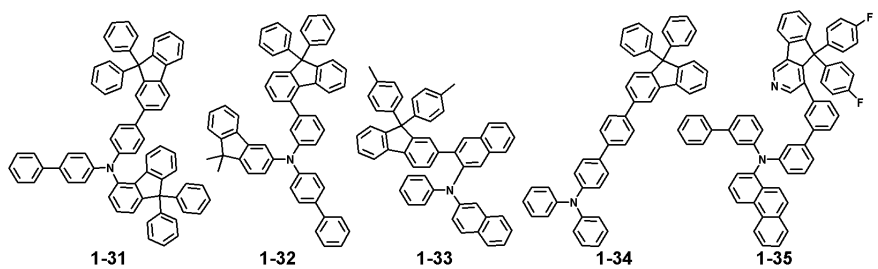
{상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-8에서,

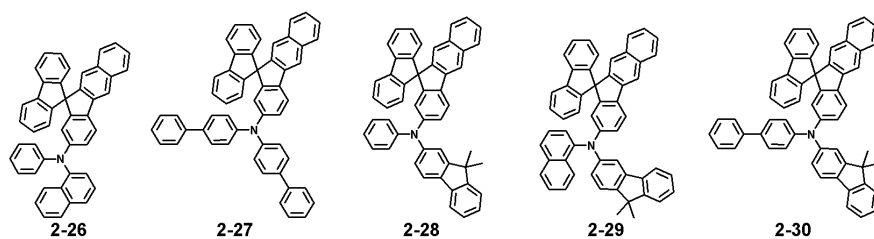
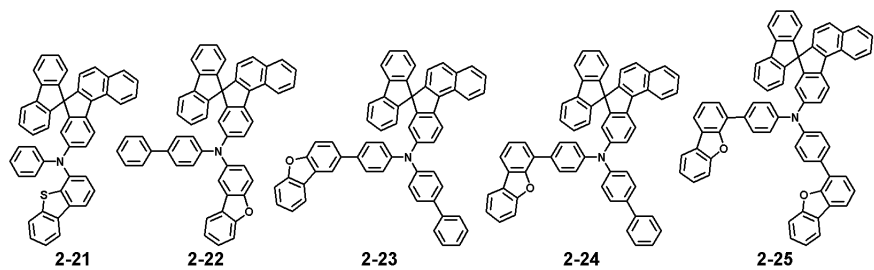
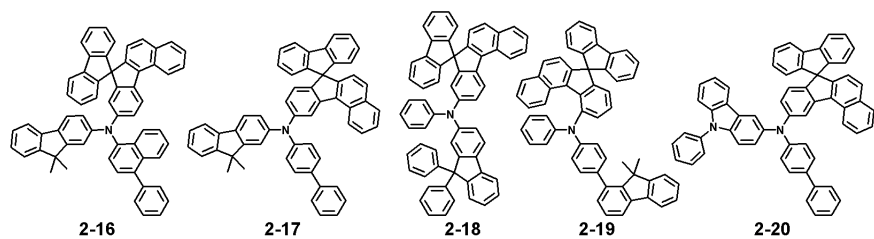
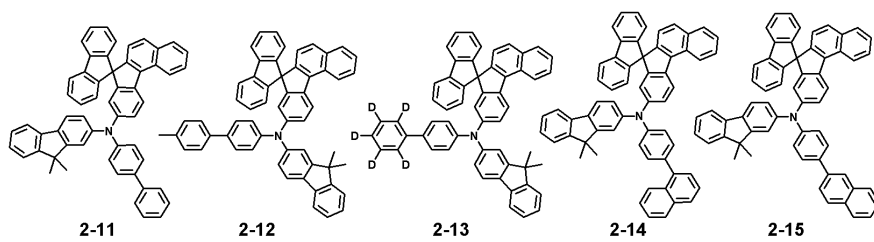
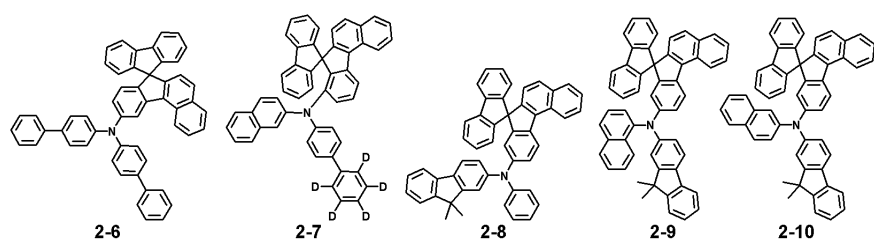
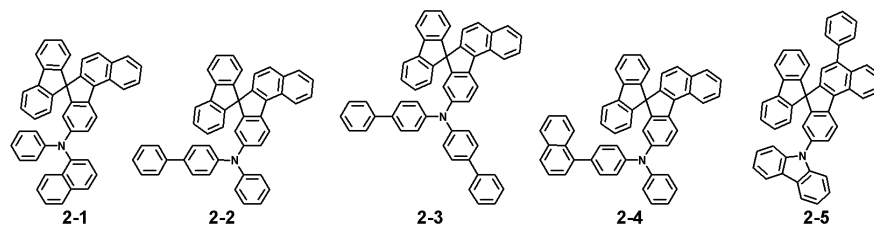
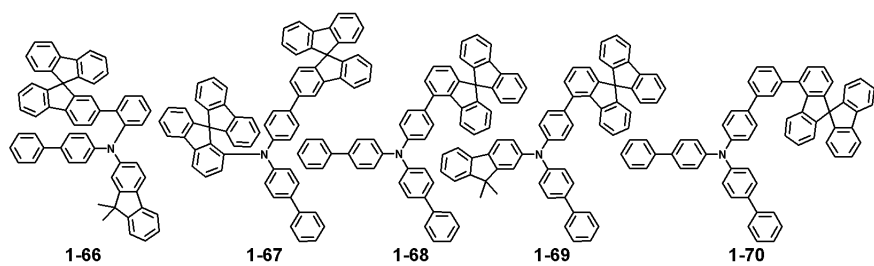
E , F , R^5 , R^6 , R^7 , R^a , R^b , e , f , g , L^2 , L^3 , Ar^3 및 Ar^4 는 상기 청구항 2에서 정의된 바와 같다.}

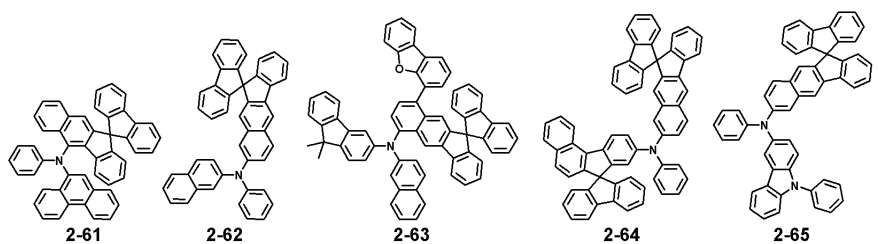
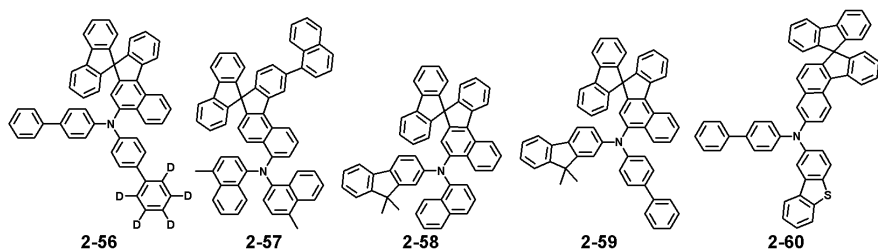
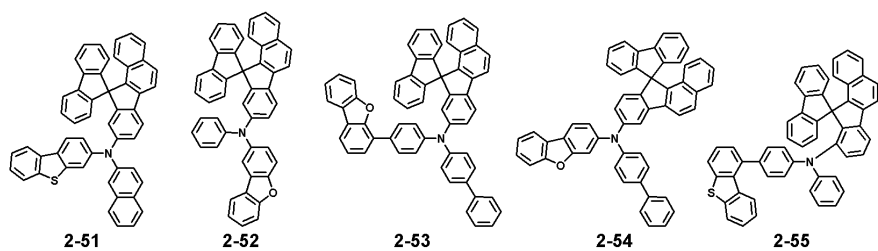
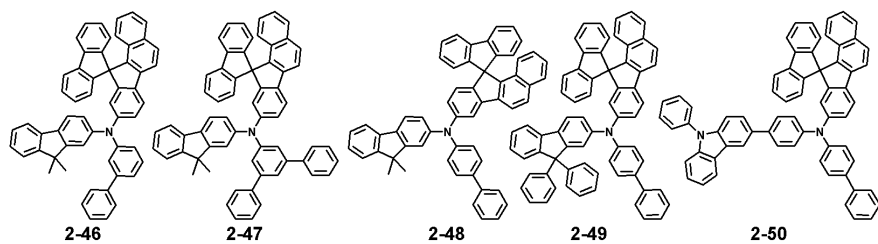
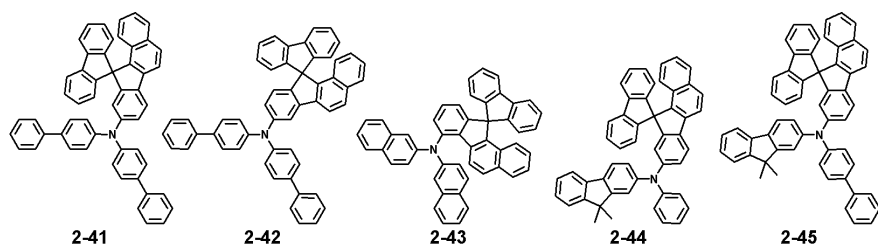
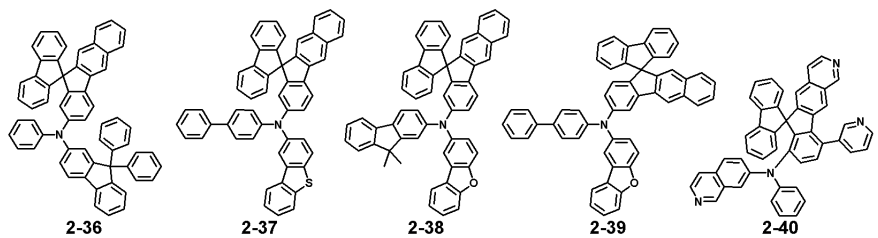
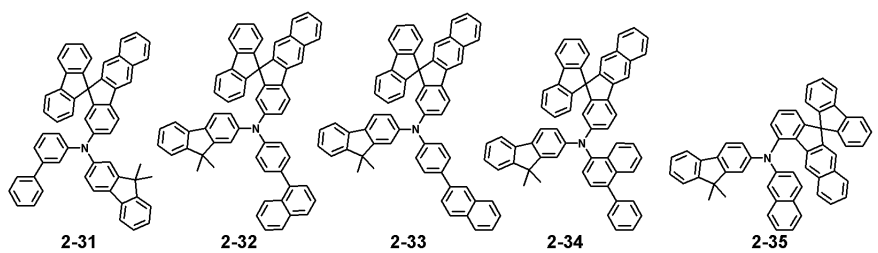
청구항 14

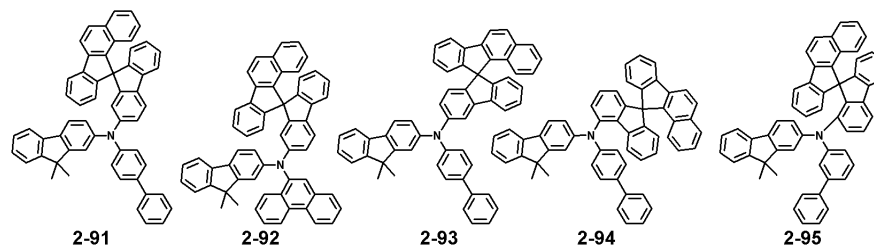
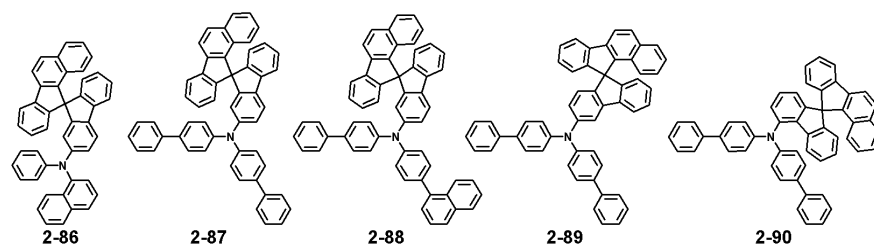
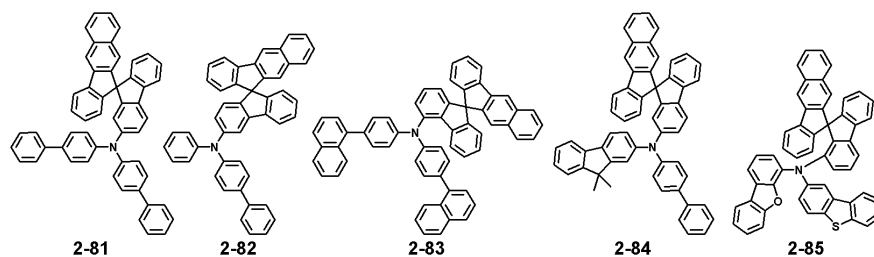
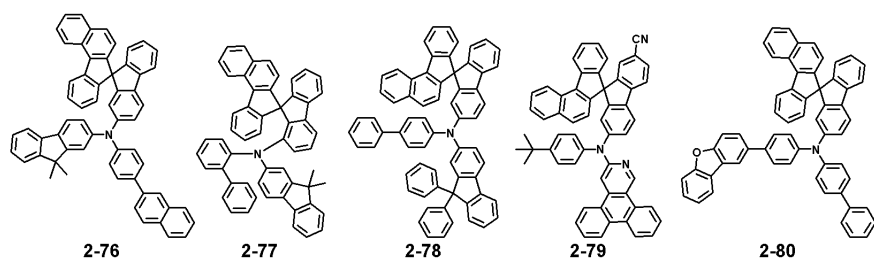
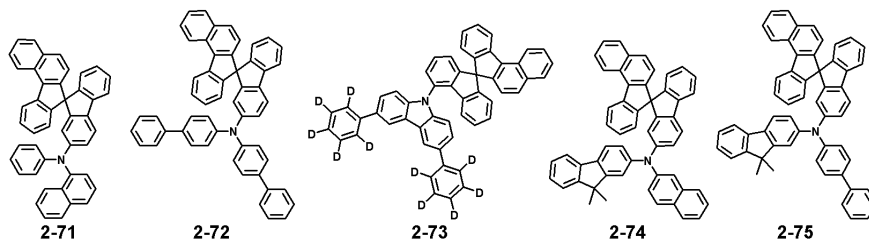
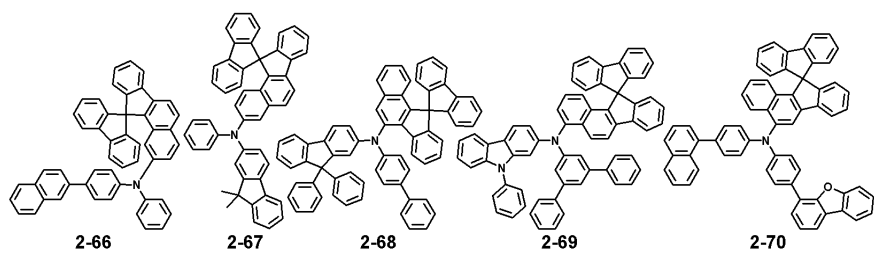
제 2항에 있어서, 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화합물 1-1 내지 화합물 1-70 및 화합물 2-1 내지 화합물 2-115 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

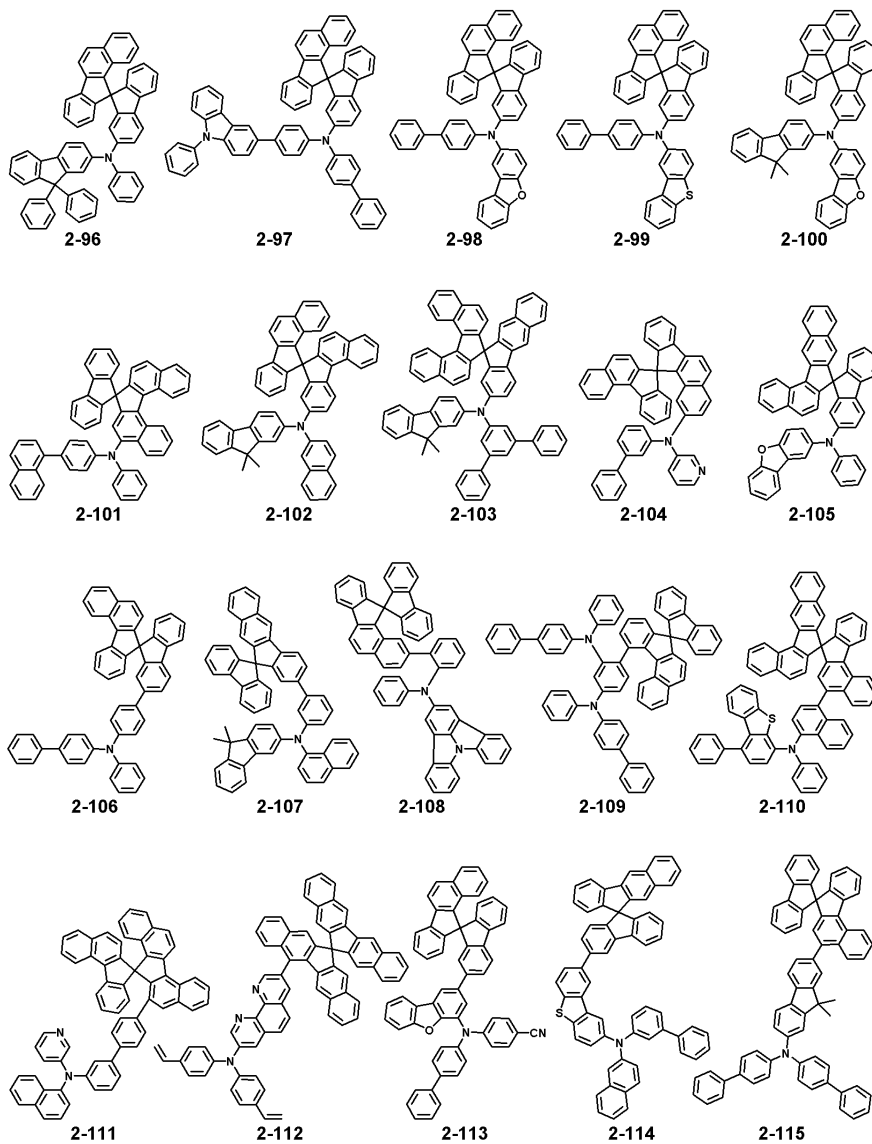






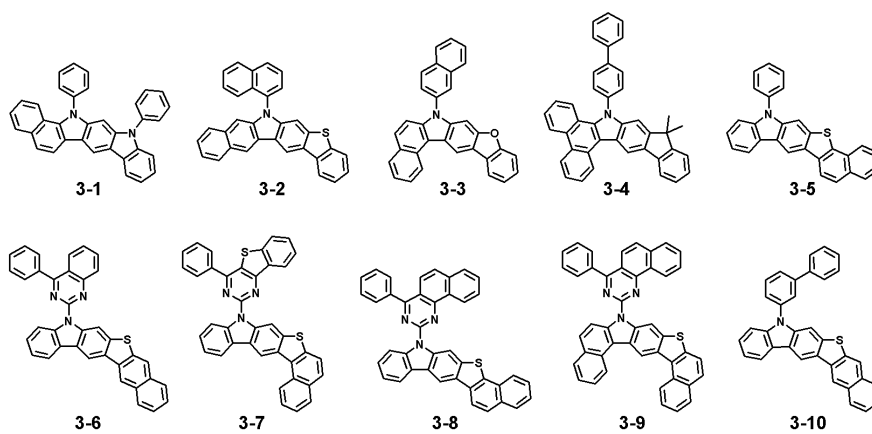


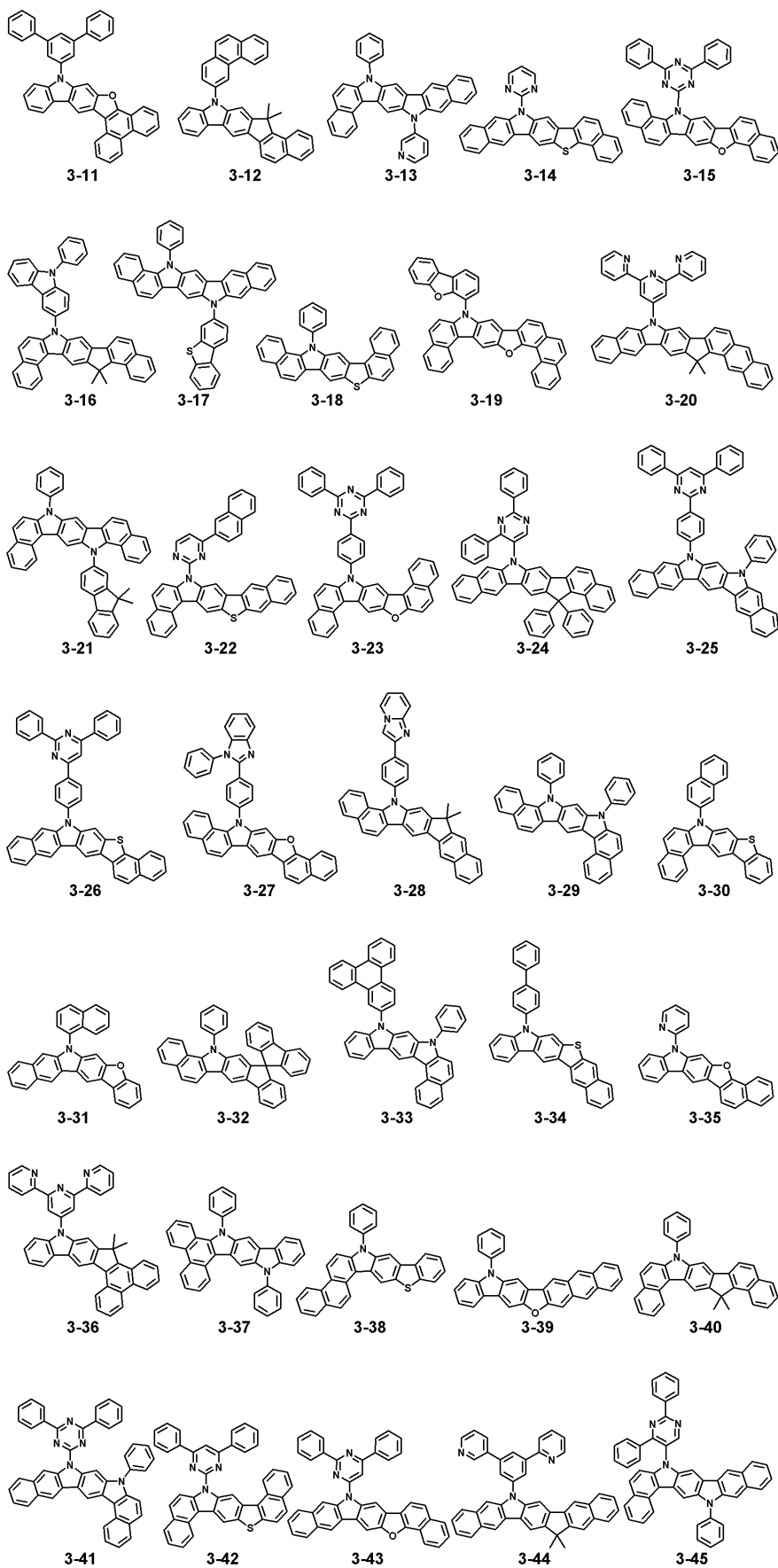


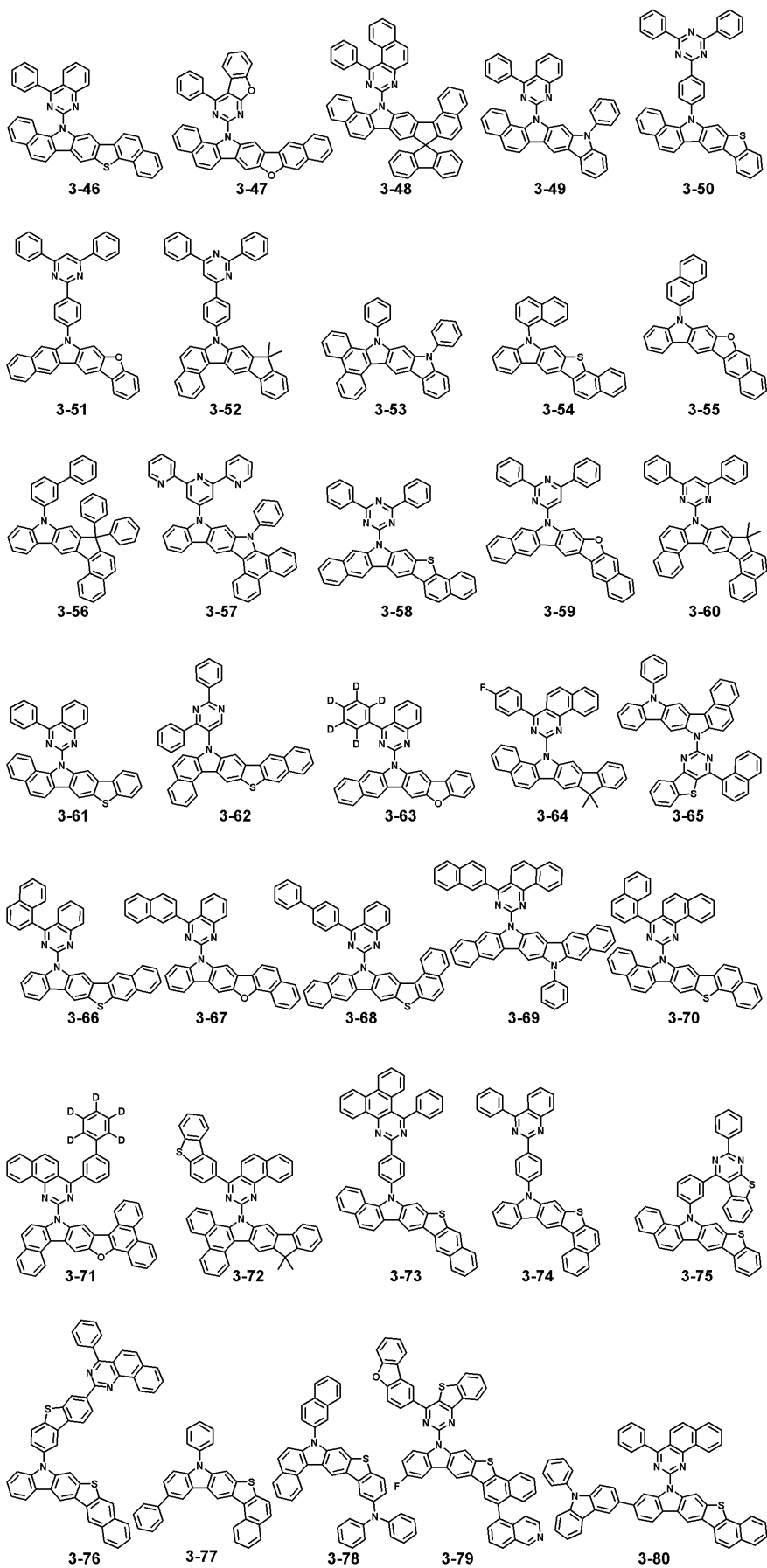


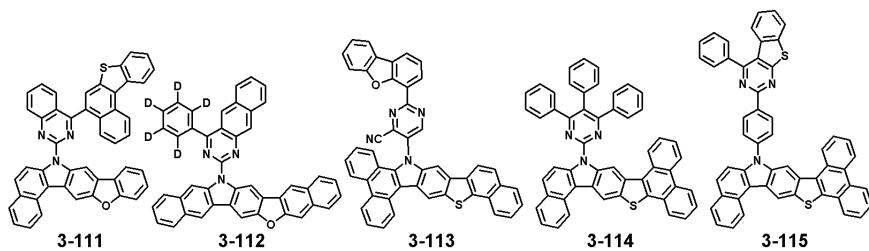
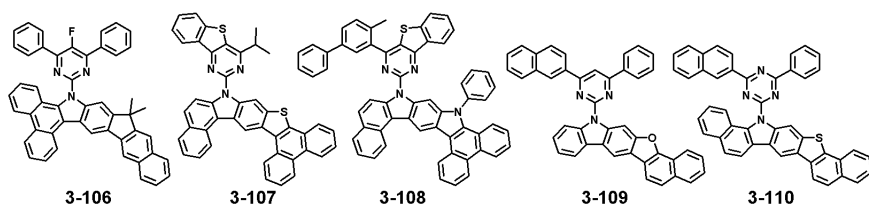
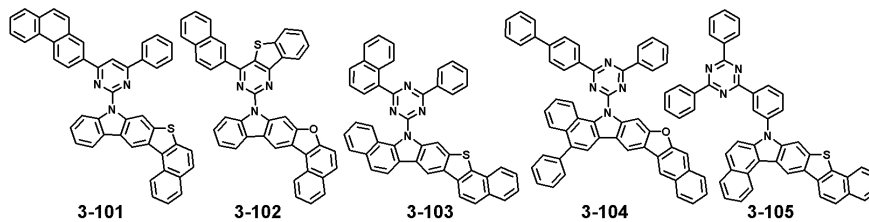
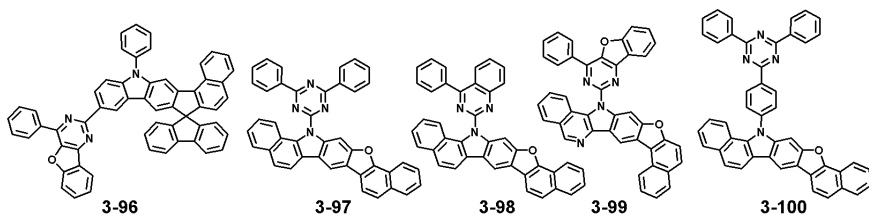
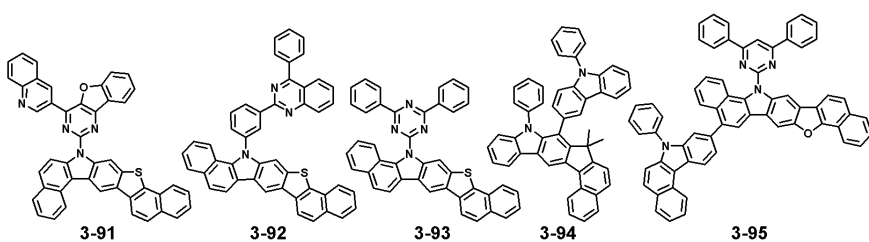
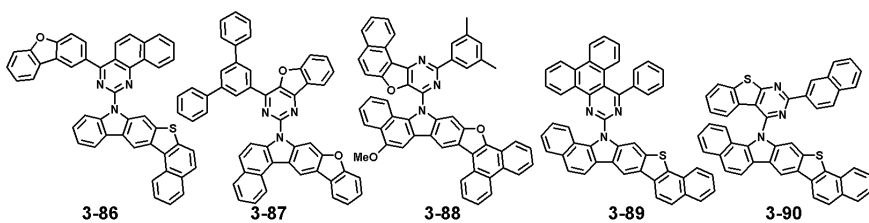
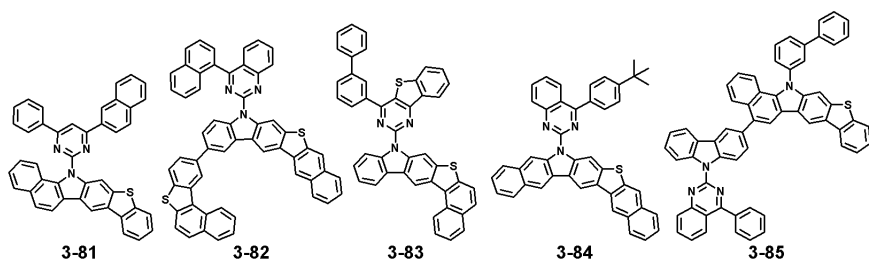
청구항 15

제 2항에 있어서, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화합물 3-1 내지 화합물 3-115 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자









청구항 16

제 2항에 있어서, 제 1전극과 발광층 사이에 1층 이상의 정공수송대역층을 포함하고, 상기 정공수송대역층은 정공수송층, 발광보조층 또는 이 둘을 모두 포함하며, 상기 정공수송대역층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

청구항 17

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물이 1:9 내지 9:1 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

청구항 18

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물이 1:9 또는 5:5로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

청구항 19

제 2항에 있어서, 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물이 2:8 또는 3:7로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

청구항 20

제 2항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자 장치

청구항 21

제 20항에 있어서, 상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터 및 단색 또는 백색 조명용소자 중 적어도 어느 하나인 것을 특징으로 하는 전자 장치

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 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.

[0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 헤테로원자를 포함하고 있는 다환 고리화합물의 경우 물질 구조에 따른 특성의 차이가 매우 커서 유기전기소자

의 재료로 다양한 층에 적용되고 있다.

- [0005] 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.
- [0006] 그 대표적인 예로 하기 특허문헌 1 내지 특허문헌 5에서는 다환 고리화합물 중 5환 고리화합물에 대해 헤테로 종류 및 배열, 치환기 종류, fused 위치 등에 따른 성능을 보고하고 있다.
- [0008] [특허문헌 1] : 미국 등록특허 5843607
- [0009] [특허문헌 2] : 일본 공개특허 1999-162650
- [0010] [특허문헌 3] : 한국 공개특허 2008-0085000
- [0011] [특허문헌 4] : 미국 공개특허 2010-0187977
- [0012] [특허문헌 5] : 한국 공개특허 2011-0018340
- [0013] [특허문헌 6] : 한국 공개특허 2009-0057711
- [0015] 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 보고하고 있다. 하지만 상기 선행발명 1의 경우 치환기로 알킬기, 아미노기, 알콕시기 등이 치환 또는 비치환된 단순 아릴기만 존재하여 다환 고리 화합물의 치환기 효과에 대해서 입증하기에는 매우 부족하였으며, 정공 수송 재료로서의 사용만 기재되어 있고, 인광 호스트 재료로서의 사용은 기재되어 있지 않았다.
- [0016] 특허문헌 3 및 특허문헌 4는 상기 특허문헌 1 및 특허문헌 2와 동일한 5환 고리화합물 내 헤테로원자가 N인 인돌로카바졸 코어에 각각 아릴기와 N을 함유하는 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.
- [0017] 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 고리화합물의 성능적 특성을 확인할 수 없었다.
- [0018] 따라서 상기 특허문헌에서는 동형 헤테로원자를 포함하는 5환 고리화합물이 갖는 낮은 전하 캐리어 이동도 및 낮은 산화 안정성에 대한 해결방안이 기재되어있지 않았다.
- [0019] 5환 고리화합물 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-적층 구조(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)
- [0020] 특허문헌 6에서는 7환 이상의 다양한 다환 고리화합물에 대하여 형광 호스트 물질로 사용한 예가 보고되었다.
- [0021] 상기 내용과 같이 다환 고리화합물에 대한 fused 위치 및 고리 개수, 헤테로원자의 배열, 종류에 따른 특성 변화에 대해서는 아직도 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다.
- [0022] 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 퀸칭(quenching) 및 정공수송층 계면에서의 발광으로 인한 효율 저하 및 수명 저하를 방지할 수 있기 때문이다.
- [0023] 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.

[0024] TADF (Thermal activated delayed fluorescent), exciplex에 대한 발광층 내 에너지 전달 규명은 여러 가지 방법들이 있지만, PL lifetime (TRTP) 측정법으로 손쉽게 확인할 수 있다.

[0025] 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.

[0026] 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 내용

해결하려는 과제

[0027] 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 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

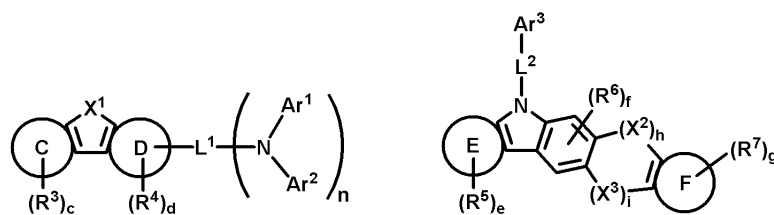
[0028] 본 발명은 인광 발광형 유기전기소자의 발광층 내 효율적인 정공 주입을 조절하기 위해 주성분으로서 특정의 제 1호스트 재료에 특정의 제 2호스트 재료를 조합하여 함유함으로써, 발광층과 인접층의 에너지 장벽을 작게 할 수 있고, 발광층 내 charge balance를 최대화시켜 유기전기소자의 고효율, 고수명을 제공하는 것이다.

[0029] 본 발명은 제 1전극, 제 2전극 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은, 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 제 1호스트 화합물 및 하기 화학식 2로 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[0030] 화학식 1

화학식 2

[0031]



[0032] 또한, 본 발명은 상기 화학식들로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치를 제공한다.

발명의 효과

[0033] 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

[0034] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0035] 이하, 본 발명의 실시예를 참조하여 상세하게 설명한다. 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능

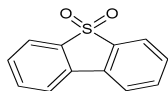
에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

- [0036] 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 구성 요소와 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.
- [0037] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.
- [0038] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [0039] 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.
- [0040] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.
- [0041] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.
- [0042] 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.
- [0043] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0044] 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.
- [0045] 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.
- [0046] 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.
- [0047] 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.
- [0048] 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.
- [0049] 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.
- [0050] 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.
- [0051] 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.

[0052] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[0053] 또한 "헤테로고리기"는 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.



[0054]

[0055] 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.

[0056] 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.

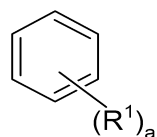
[0057] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0058] 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.

[0059] 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.

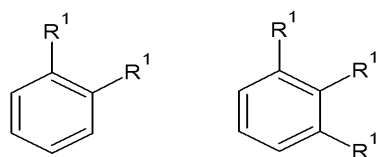
[0060] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알켄일기, C₂~C₂₀의 알킨일기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[0061] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.



[0062]

[0063] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R¹은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.



(a=2)

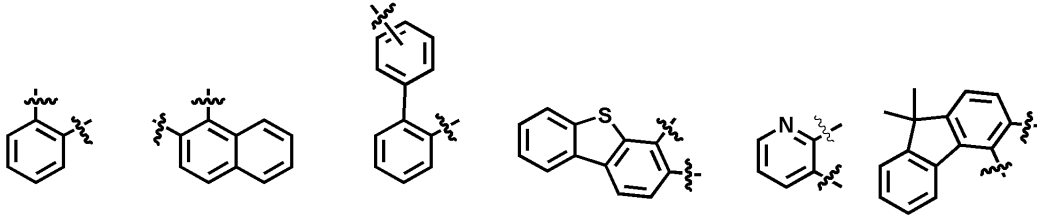
(a=3)

[0064]

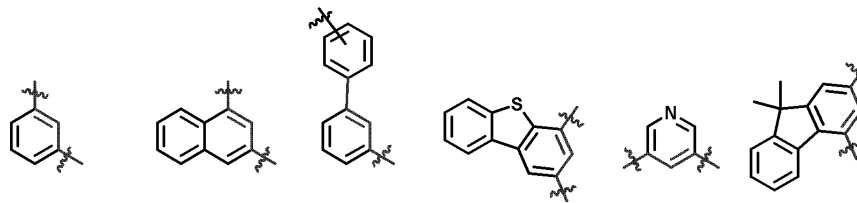
[0065] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "오소(ortho)", "메타(meta)", "파라(para)"는 모든

치환기의 치환 위치를 뜻하며, 오소(ortho) 위치란 치환기의 위치가 바로 이웃하는 화합물을 나타내고, 일 예로 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.

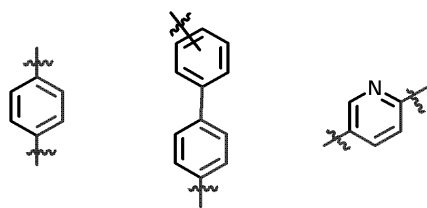
[ortho-위치의 예시]



[meta-위치의 예시]



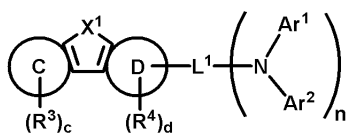
[para-위치의 예시]



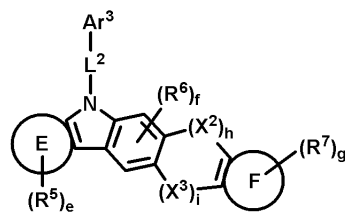
이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물 및 이를 포함하는 유기전기소자에 대하여 설명한다.

본 발명은 제 1전극, 제 2전극 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 2로 표시되는 제 2호스트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

화학식 1



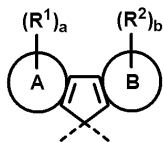
화학식 2



{상기 화학식 1 및 화학식 2에서,

1) X^1 은 CR^aR^b 또는 하기 화학식 1-a이고,

[0081] 화학식 1-a



[0082]

[0083] 상기 화학식 1-a에서, 점선은 X^1 으로부터의 결합을 나타내며,

[0084] 2) X^2 및 X^3 은 서로 독립적으로 $N-L^3-Ar^4$, O, S, CR^aR^b 또는 상기 화학식 1-a이며, 이때 상기 화학식 1-a에서 점선은 X^2 또는 X^3 으로부터의 결합을 나타내고,

[0085] 3) R^a 및 R^b 는 서로 독립적으로 수소; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며,

[0086] 4) h 및 i는 0 또는 1의 정수이고, 단, h+i는 1 이상이며, 여기서 h 또는 i가 0일 경우는 직접결합을 의미하고,

[0087] 5) Ar^1 , Ar^2 , Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; 플루오렌일기; C_6-C_{60} 의 방향족 고리와 C_3-C_{60} 의 지방족 고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, (여기서 상기 L^a 는 단일결합; C_6-C_{60} 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R^c 및 R^d 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기;로 이루어진 군에서 선택됨)

[0088] 6) 또한 Ar^1 과 Ar^2 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0089] 7) n은 1 또는 2의 정수이며, n이 2일 경우 2개의 Ar^1 은 각각 동일하거나 상이하고, 2개의 Ar^2 는 각각 동일하거나 상이하며,

[0090] 8) L^1 , L^2 및 L^3 은 서로 독립적으로 단일결합; C_6-C_{60} 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되며,

[0091] 9) a, b, c, e 및 g는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수이고, d는 0 내지 5의 정수이고, f는 0 내지 2의 정수이며,

[0092] 10) R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 및 R^7 은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b, c, d, e 및 g가 2 이상인 경우 및 f가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^1 끼리 혹은 복수의 R^2 끼리 혹은 복수의 R^3 끼리 혹은 복수의 R^4 끼리 혹은 복수의 R^5 끼리 혹은 복수의 R^6 끼리 혹은 복수의 R^7 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,

[0093] 11) A, B, C, D, E 및 F는 서로 독립적으로 C₆-C₂₀의 아릴기 또는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기이며,

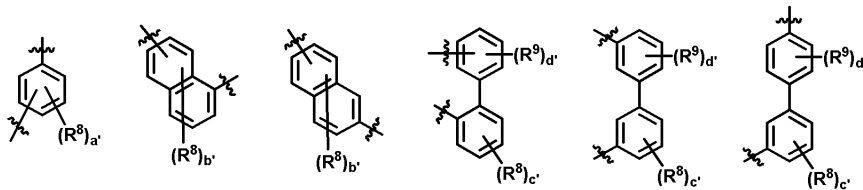
[0094] 단, E 및 F 모두 치환 또는 비치환된 C₆의 아릴기(페닐기)인 경우에는 제외하며,

[0095] 여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 아릴렌기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기, 아릴 옥시기는 각각 중수소; 할로젠; C₁-C₂₀의 알킬기 또는 C₆-C₂₀의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L^a-N(R^c)(R^d); C₁-C₂₀의 알킬사이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알 킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌닐기; C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 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 포함한 다.}

[0097] 더불어 본 발명은 상기 화학식 1 및 2로 표시되는 화합물을 제공한다.

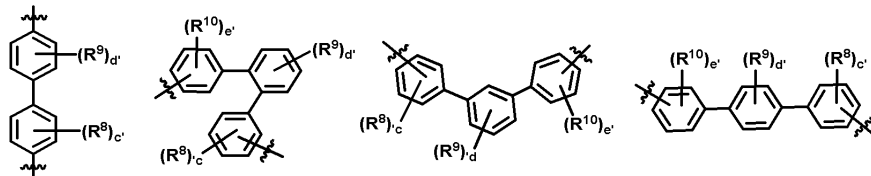
[0098] 또한, 상기 화학식 1 및 2의 L¹, L² 및 L³가 하기 화학식 A-1 내지 A-13 중에 어느 하나인 화합물인 것을 특징으 로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[0099] A-1 A-2 A-3 A-4 A-5 A-6



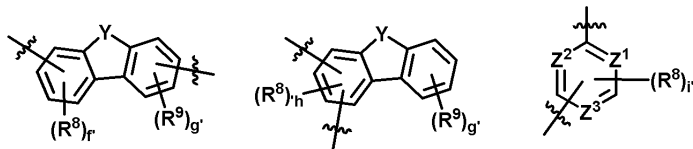
[0100]

[0101] A-7 A-8 A-9 A-10



[0102]

[0103] A-11 A-12 A-13

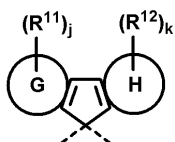


[0104]

[0105] {상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-13에서,

[0106] 1) Y는 N-L⁴-Ar⁵, O, S, CR^eR^f 또는 하기 화학식 1-b이고,

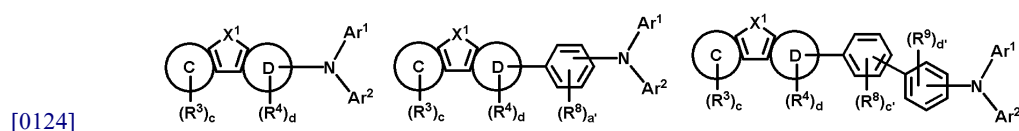
[0107] 화학식 1-b



[0108]

- [0109] 상기 화학식 1-b에서, 점선은 Y로부터의 결합을 나타내고,
- [0110] 2) L^4 는 상기 L^3 의 정의와 동일하고,
- [0111] 3) Ar^5 는 상기 Ar^4 의 정의와 동일하며,
- [0112] 4) R^e 및 R^f 는 상기 R^a 의 정의와 동일하고,
- [0113] 5) R^{11} 및 R^{12} 는 상기 R^1 의 정의와 동일하고,
- [0114] 6) G 및 H는 상기 A의 정의와 동일하고,
- [0115] 7) j 및 k는 상기 a의 정의와 동일하고,
- [0116] 8) a' , c' , d' 및 e' 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, b' 는 0 내지 6의 정수이며, f' 및 g' 는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, h' 는 0 내지 2의 정수이며, i' 는 0 또는 1의 정수이고,
- [0117] 9) R^8 , R^9 및 R^{10} 은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a' , b' , c' , d' , e' , f' 및 g' 가 2 이상인 경우 및 h' 가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^8 끼리 혹은 복수의 R^9 끼리 혹은 복수의 R^{10} 끼리 혹은 이웃한 R^8 과 R^9 또는 R^9 과 R^{10} 은 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,
- [0118] 10) L^a 는 상기 L^a 의 정의와 동일하고, R^c 및 R^d 는 상기 R^c 및 R^d 의 정의와 동일하고,
- [0119] 11) Z^1 , Z^2 및 Z^3 은 서로 독립적으로 CR^{13} 또는 N이고, Z^1 , Z^2 및 Z^3 중 적어도 하나는 N이며,
- [0120] 12) R^{13} 은 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$;로 이루어진 군에서 선택되고, 이웃한 R^8 과 R^{13} 은 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있다.}
- [0122] 또한 본 발명은 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5 중 어느 하나인 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

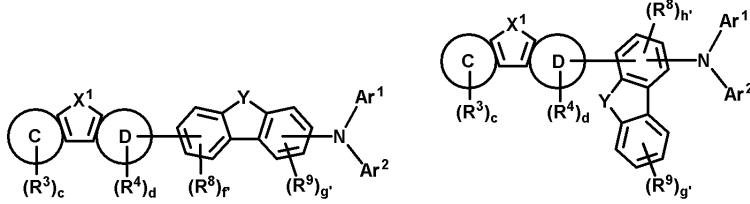
- [0123] 화학식 1-1 화학식 1-2 화학식 1-3



[0125]

화학식 1-4

화학식 1-5



[0126]

[0127]

{상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5에서,

[0128]

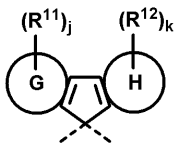
1) X^1 , C, D, R^3 , R^4 , c, d, Ar^1 및 Ar^2 는 상기에서 정의된 바와 같고,

[0129]

2) Y는 $N-L^4-Ar^5$, O, S, CR^eR^f 또는 하기 화학식 1-b이고,

[0130]

화학식 1-b



[0131]

[0132]

상기 화학식 1-b에서, 점선은 Y로부터의 결합을 나타내며,

[0133]

3) L^4 는 상기 L^3 의 정의와 동일하고,

[0134]

4) Ar^5 는 상기 Ar^4 의 정의와 동일하고,

[0135]

5) R^e 및 R^f 는 상기 R^a 의 정의와 동일하고,

[0136]

6) R^{11} 및 R^{12} 는 상기 R^1 의 정의와 동일하고,

[0137]

7) G 및 H는 상기 A의 정의와 동일하고,

[0138]

8) j 및 k는 상기 a의 정의와 동일하고,

[0139]

9) a' , c' 및 d' 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, f' 및 g' 는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이고 h' 는 0 내지 2의 정수이며,

[0140]

10) R^8 및 R^9 는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L^a-N(R^c)(R^d)$ 로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a' , c' , d' , f' 및 g' 가 2 이상인 경우 및 h' 가 2인 경우는 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R^8 끼리 혹은 복수의 R^9 끼리 혹은 이웃한 R^8 과 R^9 가 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있다.}

[0142]

또한 본 발명은, 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-6 내지 화학식 1-20 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다.

[0143] 화학식 1-6 화학식 1-7 화학식 1-8

[0144]

[0145]

화학식 1-9

화학식 1-10

화학식 1-11

[0146]

[0147]

화학식 1-12

화학식 1-13

화학식 1-14

[0148]

[0149]

화학식 1-15

화학식 1-16

화학식 1-17

[0150]

[0151]

화학식 1-18

화학식 1-19

화학식 1-20

[0152]

[0153]

{상기 화학식 1-6 내지 화학식 1-20에서,

[0154]

1) R^a , R^b , R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , a, b, c, d, L^1 , Ar^1 , Ar^2 및 n은 상기에서 정의된 바와 같고,

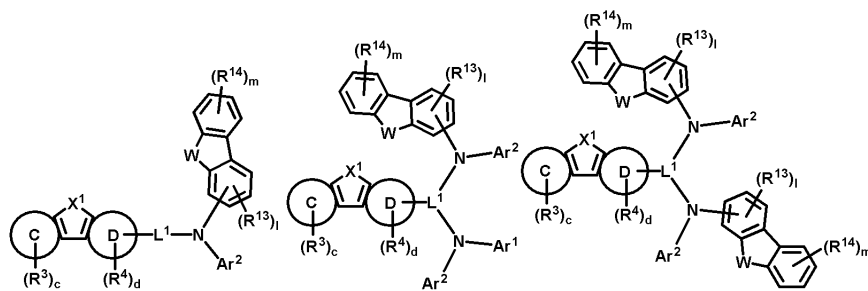
[0155]

2) A, B, C 및 D는 C_{10} 의 아틸기이다.}

[0157]

또한 본 발명은 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화학식 1-21 내지 화학식 1-23 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다.

[0158] 화학식 1-21 화학식 1-22 화학식 1-23

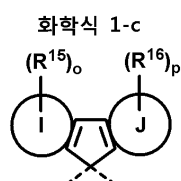


[0159]

[0160] {상기 화학식 1-21 내지 화학식 1-23에서,

[0161] 1) C, D, R³, R⁴, c, d, L¹, Ar¹ 및 Ar²는 상기에서 정의된 바와 같고,

[0162] 2) W는 N-L⁵-Ar⁶, O, S, CR^gR^h 또는 하기 화학식 1-c이며,



[0163]

[0164] 상기 화학식 1-c에서, 점선은 W로부터의 결합을 나타내고,

[0165] 3) L⁵는 상기 L³의 정의와 동일하고, Ar⁶는 상기 Ar⁴의 정의와 동일하며,

[0166] 4) R^g 및 R^h는 상기 R^a의 정의와 동일하고,

[0167] 5) R¹⁵ 및 R¹⁶은 상기 R¹의 정의와 동일하고,

[0168] 6) I 및 J는 상기 A의 정의와 동일하고,

[0169] 7) o 및 p는 상기 a의 정의와 동일하고,

[0170] 8) l은 0 내지 3의 정수이고, m은 0 내지 4의 정수이며,

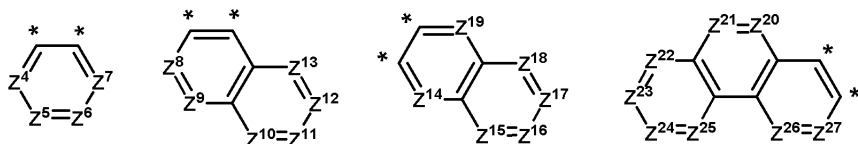
[0171] 9) R¹³ 및 R¹⁴는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L^a-N(R^c)(R^d);로 이루어진 군에서 선택되고, 복수의 R¹³끼리 혹은 복수의 R¹⁴끼리 혹은 이웃한 R¹³과 R¹⁴가 서로 결합하여 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0172] 10) 2개의 Ar²는 각각 동일하거나 상이하고, 2개의 W는 각각 동일하거나 상이하며, 복수의 R¹³ 및 복수의 R¹⁴는 서로 동일하거나 상이하다.}

[0174] 또한 본 발명의 일 예에서, 상기 화학식 1에서 n이 1인 경우의 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 또한 상기 화학식 1에서 n이 2인 경우의 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

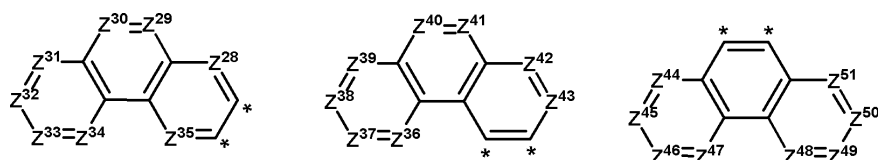
[0176] 본 발명의 일 예로, 상기 A, B, C, D, E 및 F가 하기 화학식 B-1 내지 화학식 B-7 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0177] 화학식 B-1 화학식 B-2 화학식 B-3 화학식 B-4



[0178]

[0179] 화학식 B-5 화학식 B-6 화학식 B-7



[0180]

[0181] {상기 화학식 B-1 내지 화학식 B-7에서,

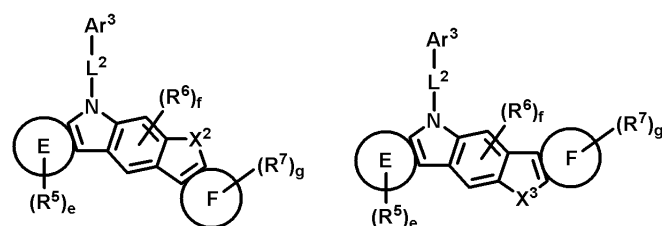
[0182] (1) Z^4 내지 Z^{51} 은 CR^i 또는 N이며,

[0183] (2) R^i 는 상기 R^a 의 정의와 동일하고,

[0184] (3) *는 축합되는 위치를 나타낸다.}

[0186] 또 다른 측면에서 본 발명은 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 3 또는 화학식 4로 표시되는 화합물을 포함한다.

[0187] 화학식 3 화학식 4



[0188]

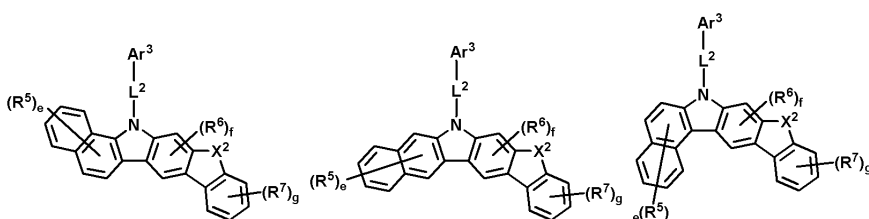
[0189] {상기 화학식 3 및 4에서,

[0190] E, F, R^5 , R^6 , R^7 , e, f, g, L^2 , Ar^3 , X^2 및 X^3 은 상기에서 정의된 바와 같다.}

[0192] 또한 본 발명은 상기 화학식 2의 R^6 이 방향족고리 또는 헤테로방향족 고리를 반드시 형성하고 있는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[0194] 또한 본 발명은, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 5-1 내지 화학식 5-24 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다.

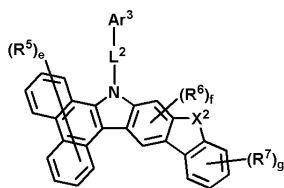
[0195] 화학식 5-1 화학식 5-2 화학식 5-3



[0196]

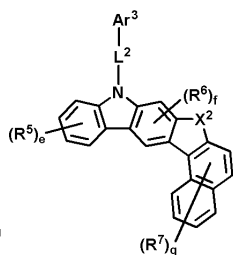
[0197]

화학식 5-4

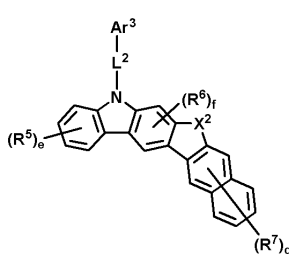


[0198]

화학식 5-5

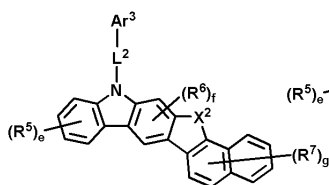


화학식 5-6

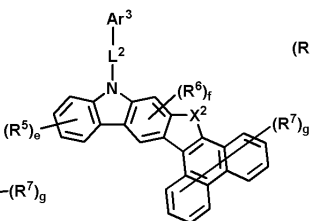


[0199]

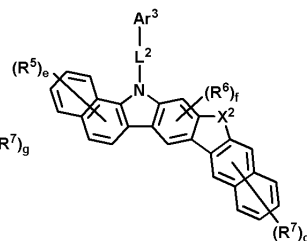
화학식 5-7



화학식 5-8



화학식 5-9



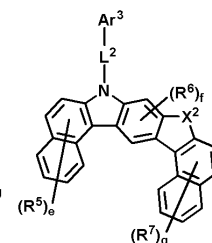
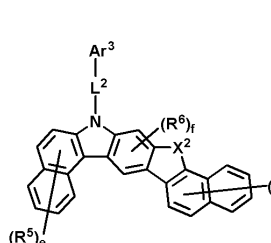
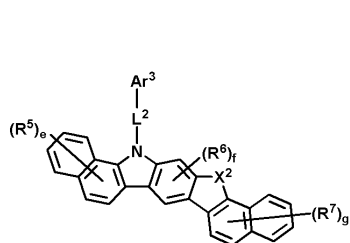
[0200]

[0201]

화학식 5-10

화학식 5-11

화학식 5-12



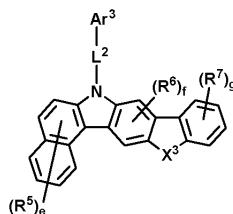
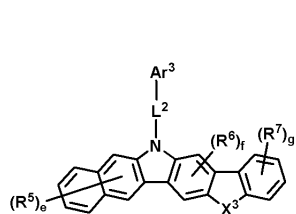
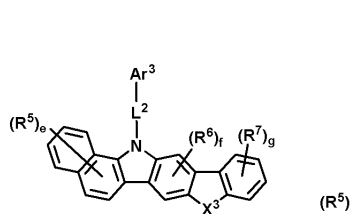
[0202]

[0203]

화학식 5-13

화학식 5-14

화학식 5-15



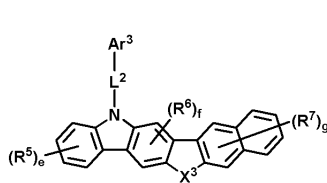
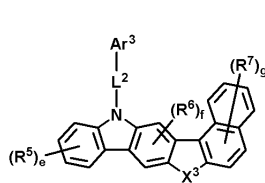
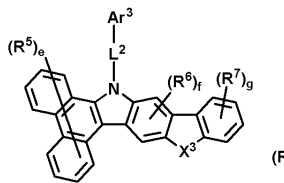
[0204]

[0205]

화학식 5-16

화학식 5-17

화학식 5-18



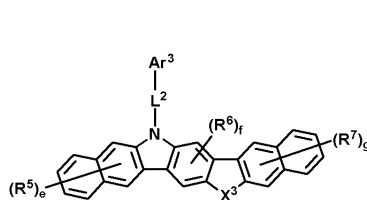
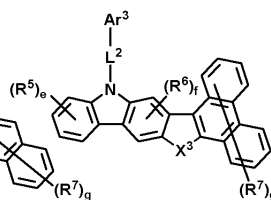
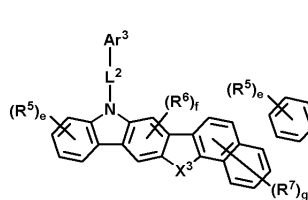
[0206]

[0207]

화학식 5-19

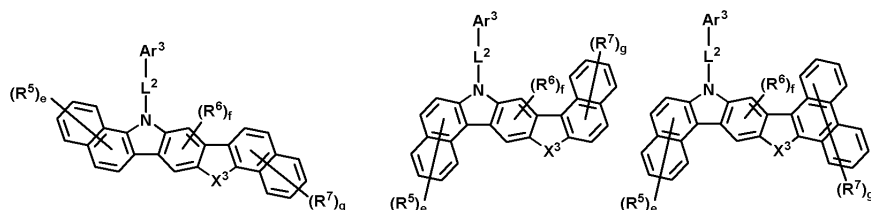
화학식 5-20

화학식 5-21



[0208]

[0209] 화학식 5-22 화학식 5-23 화학식 5-24



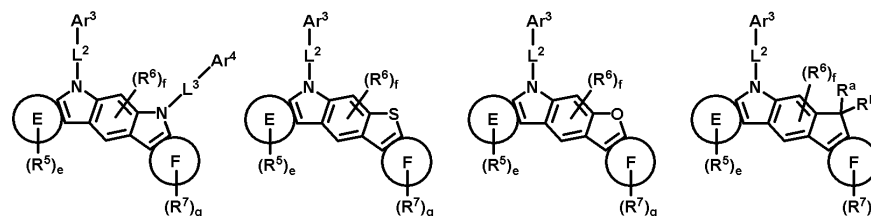
[0210]

[0211] {상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-24에서,

[0212] R^5 , R^6 , R^7 , e , f , g , L^2 , Ar^3 , X^2 및 X^3 은 상기에서 정의된 바와 같다.}

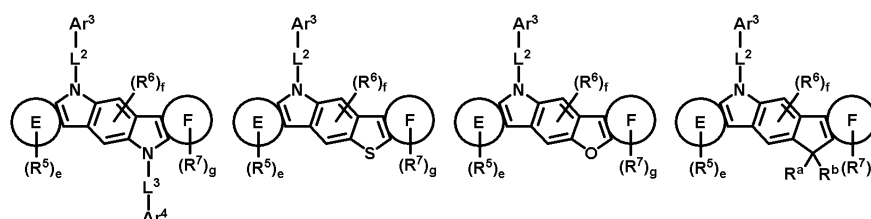
[0214] 본 발명은, 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화학식 6-1 내지 화학식 6-8로 이루어진 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

[0215] 화학식 6-1 화학식 6-2 화학식 6-3 화학식 6-4



[0216]

[0217] 화학식 6-5 화학식 6-6 화학식 6-7 화학식 6-8

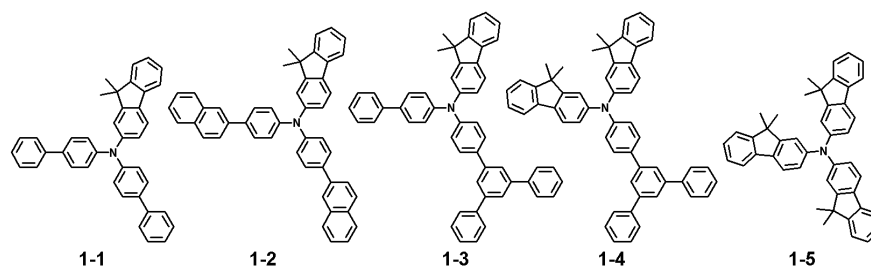


[0218]

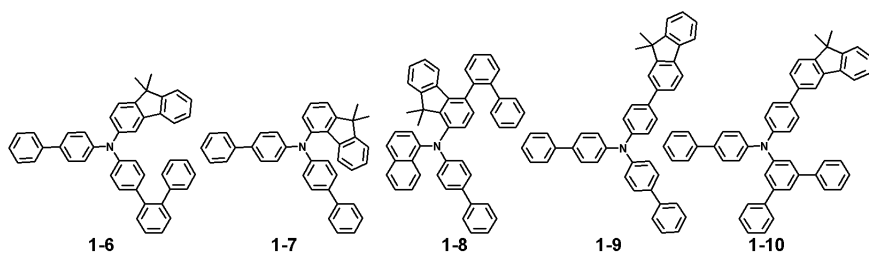
[0219] {상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-8에서,

[0220] E , F , R^5 , R^6 , R^7 , R^a , R^b , e , f , g , L^2 , L^3 , Ar^3 및 Ar^4 는 상기에서 정의된 바와 같다.}

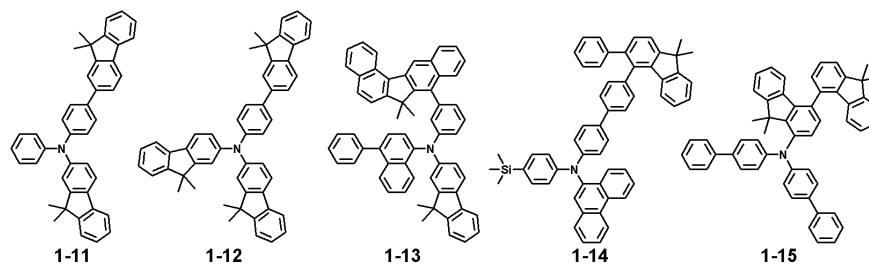
[0222] 본 발명에서 상기 화학식 1로 나타내는 제 1호스트 화합물이 하기 화합물 1-1 내지 화합물 1-70 및 화합물 2-1 내지 화합물 2-115 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다.



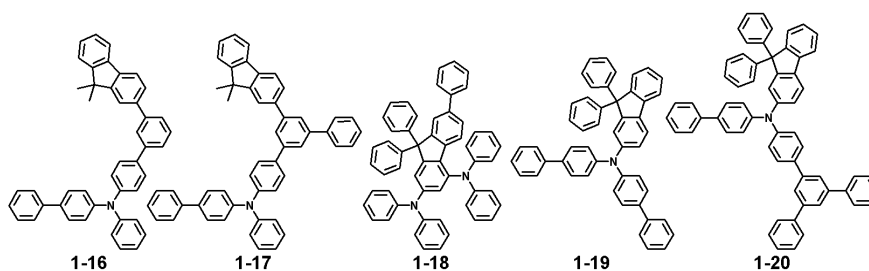
[0223] 1-1 1-2 1-3 1-4 1-5



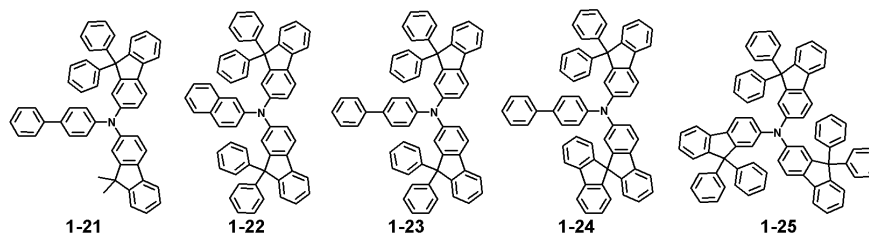
[0224]



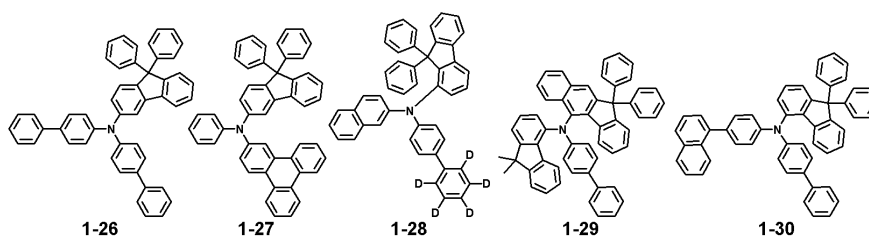
[0225]



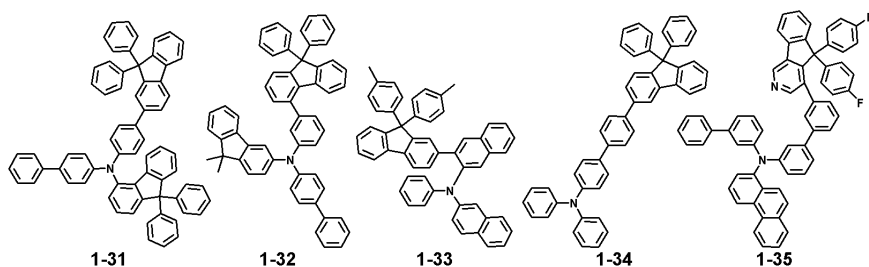
[0226]



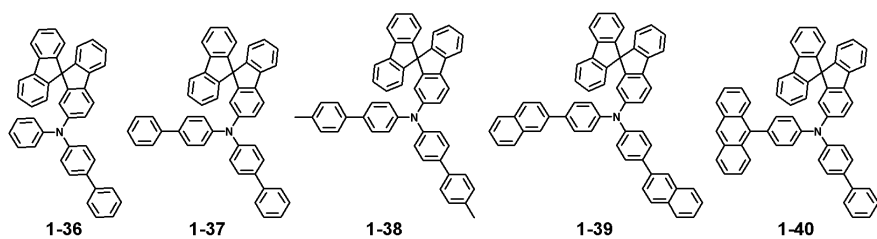
[0227]



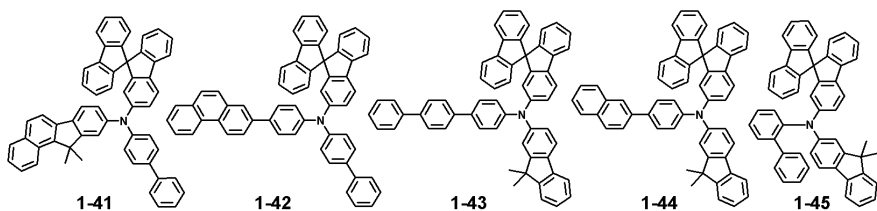
[0228]



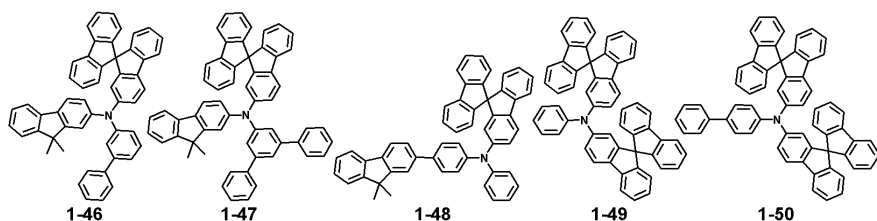
[0229]



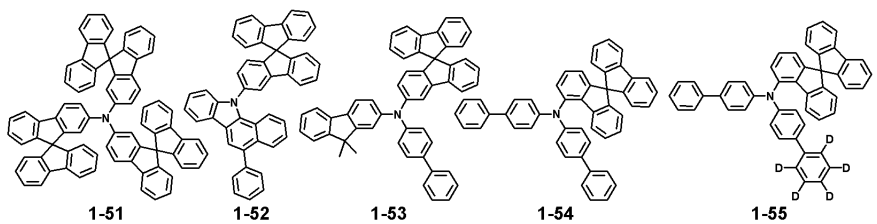
[0230]



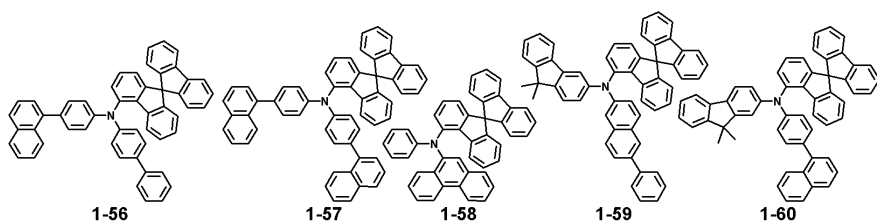
[0231]



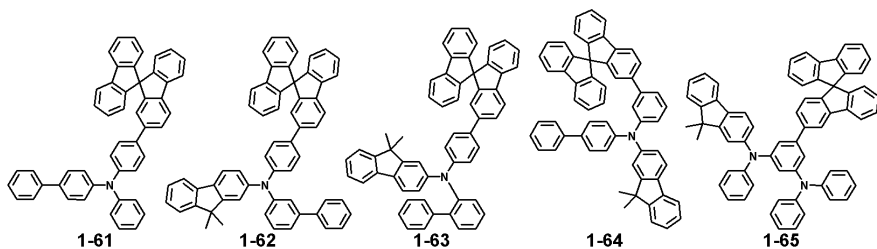
[0232]



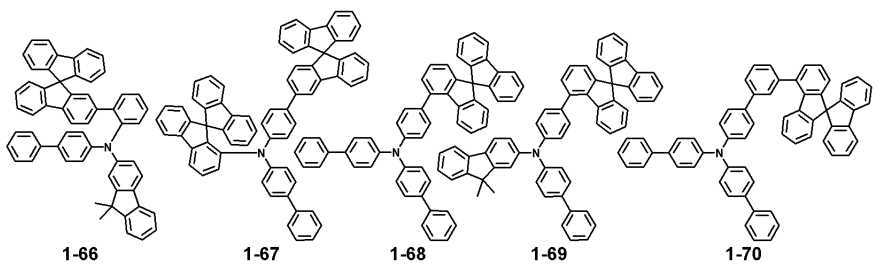
[0233]



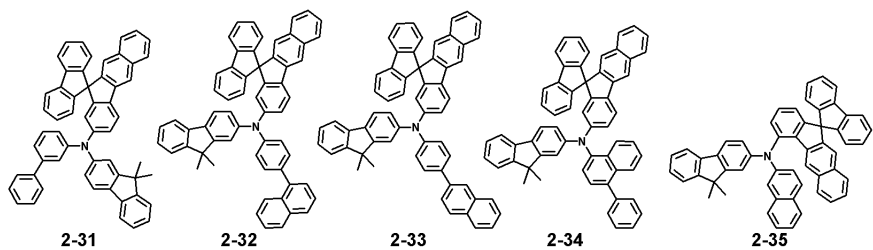
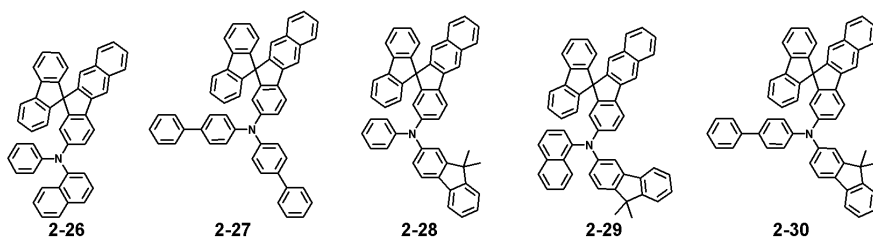
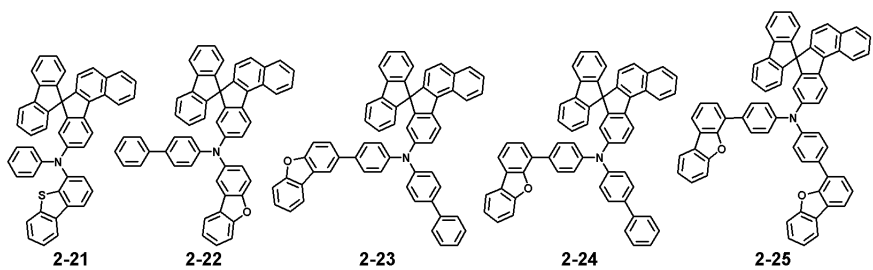
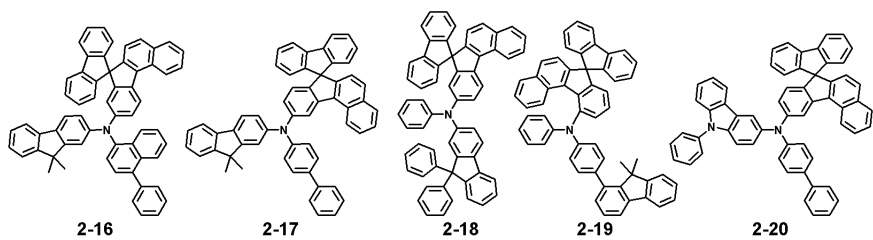
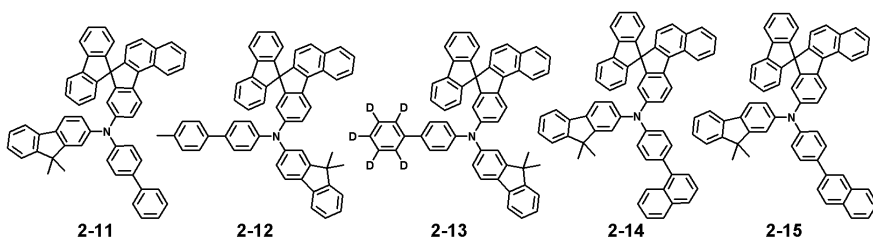
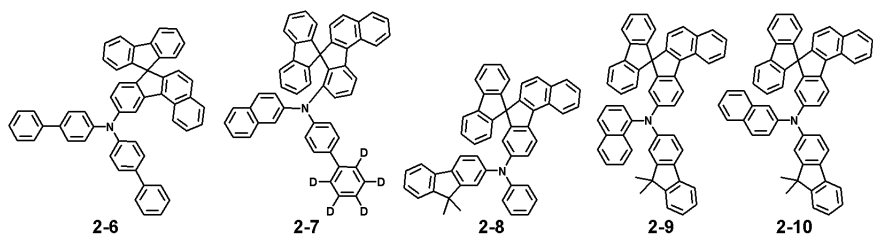
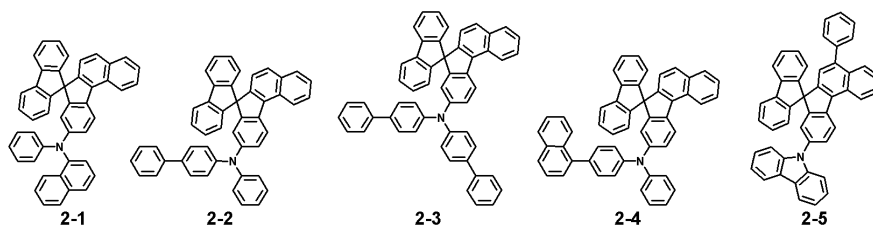
[0234]

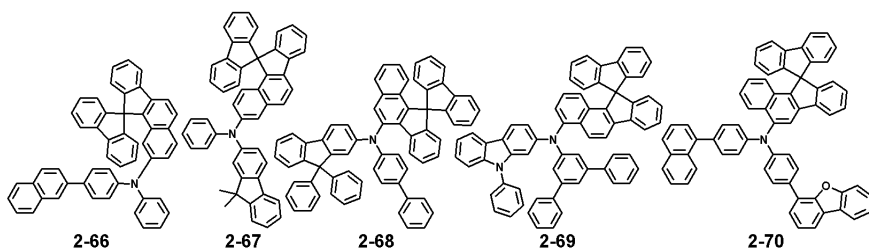
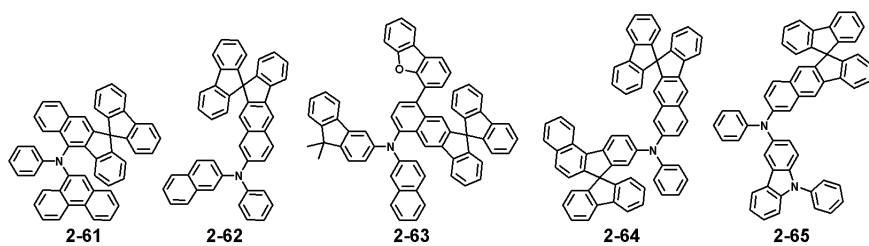
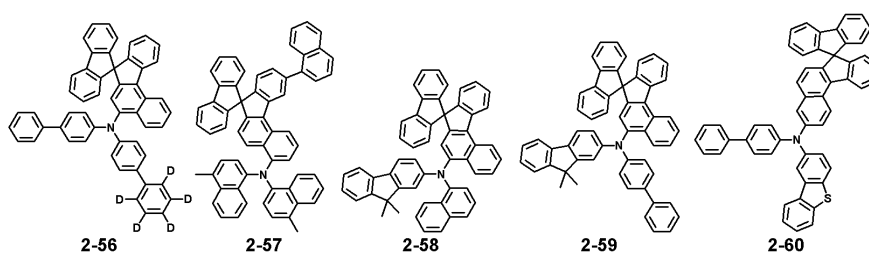
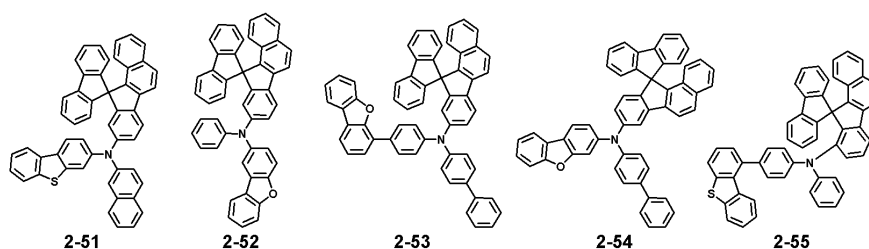
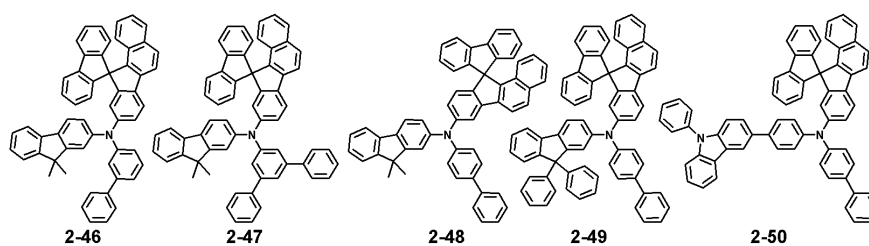
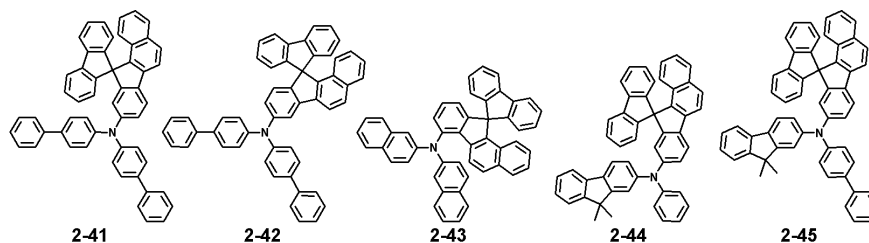
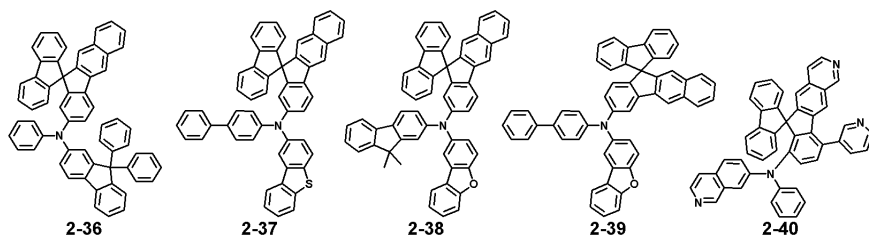


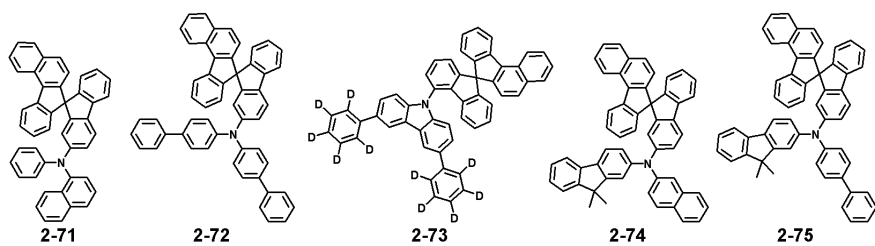
[0235]



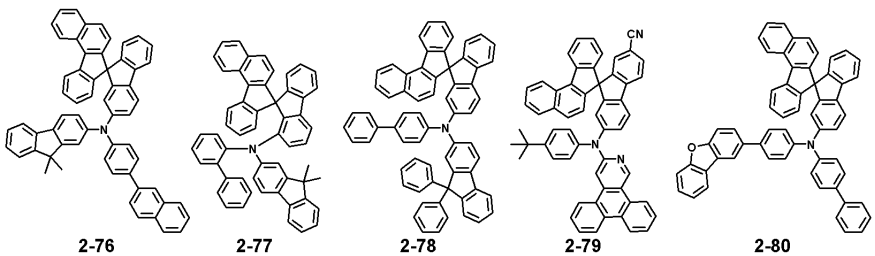
[0236]



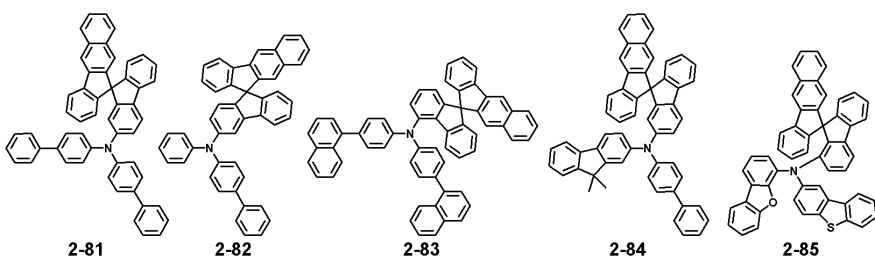




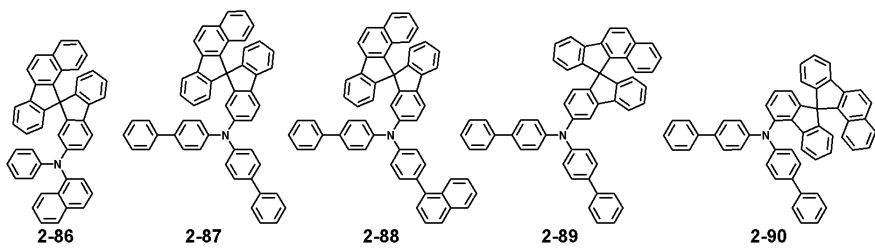
[0251]



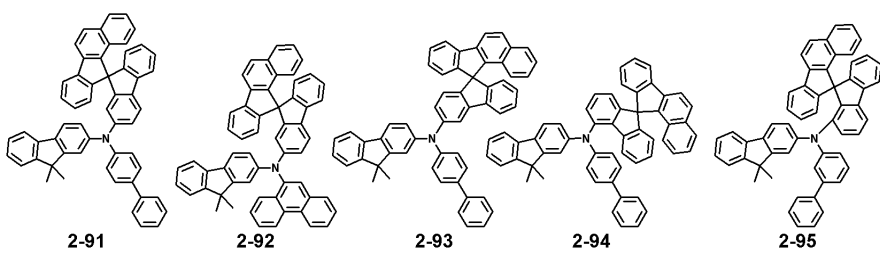
[0252]



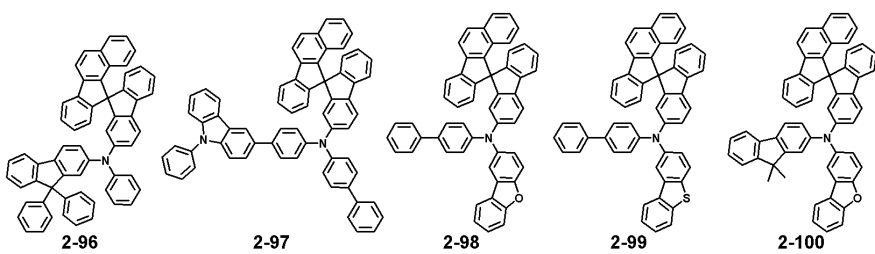
[0253]



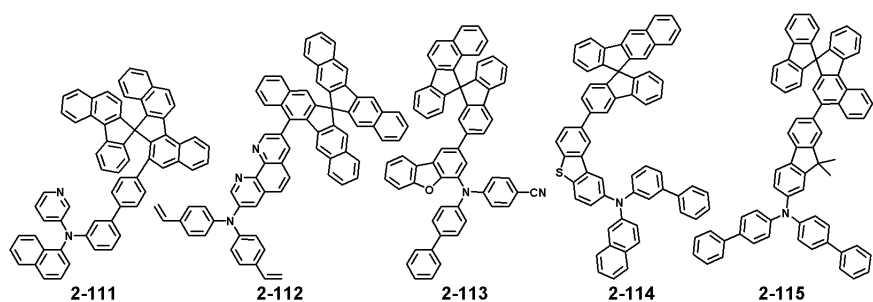
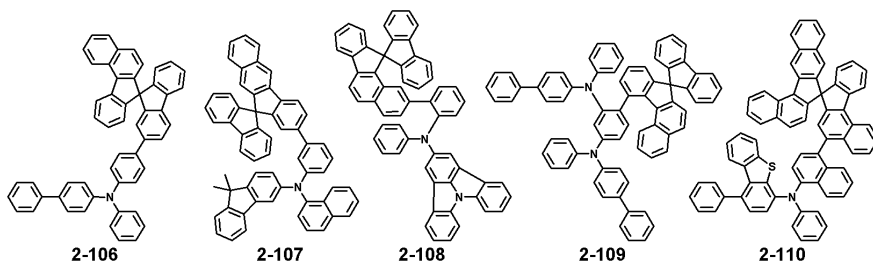
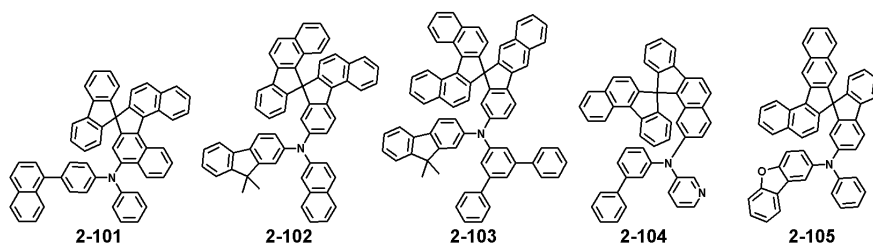
[0254]



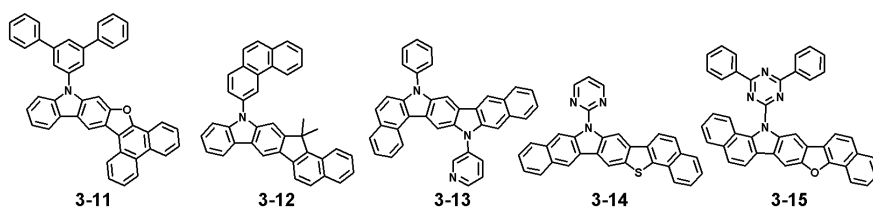
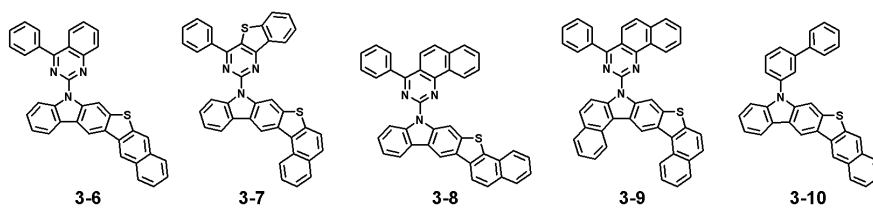
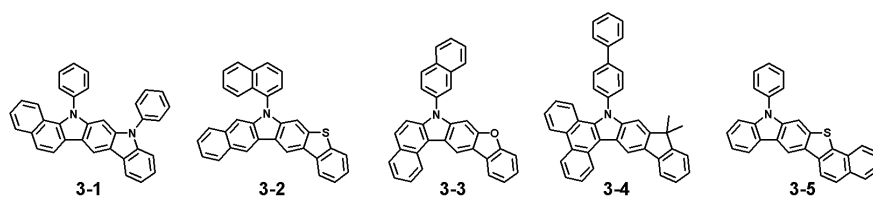
[0255]

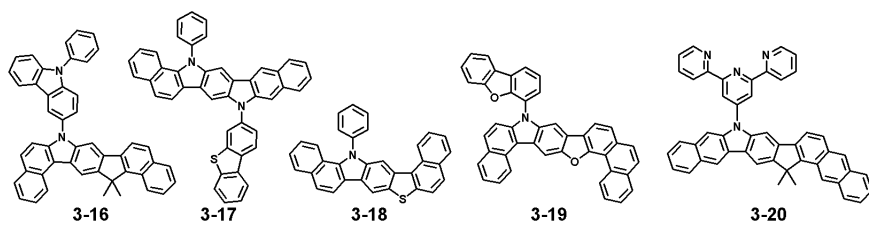


[0256]

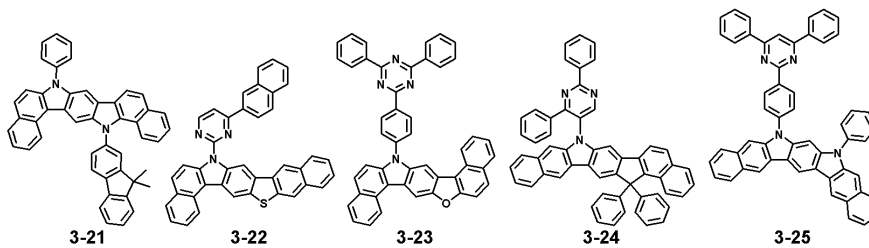


또한 본 발명에서 상기 화학식 2로 나타내는 제 2호스트 화합물이 하기 화합물 3-1 내지 화합물 3-115 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다.

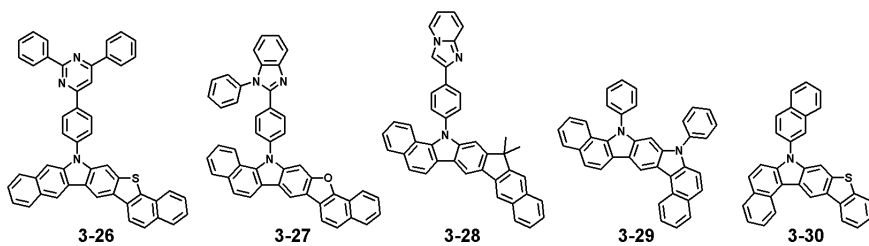




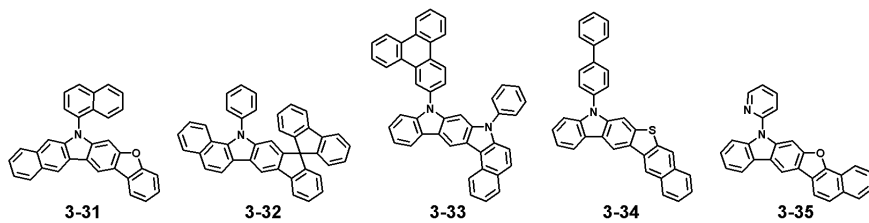
[0265]



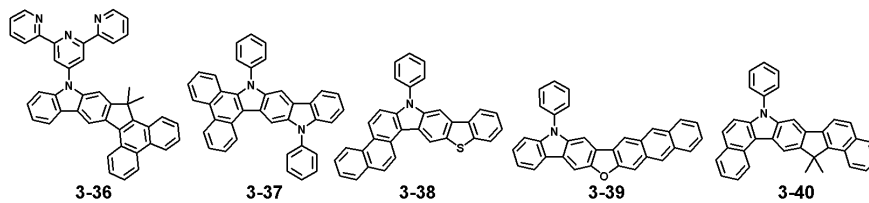
[0266]



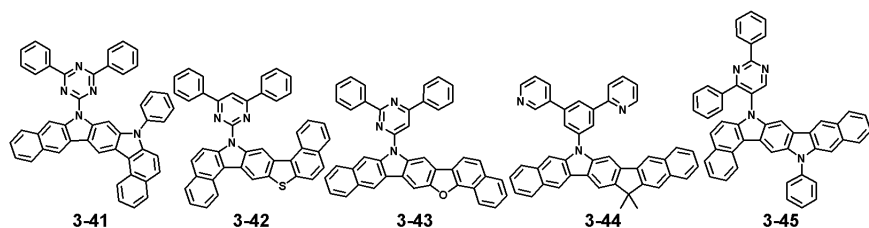
[0267]



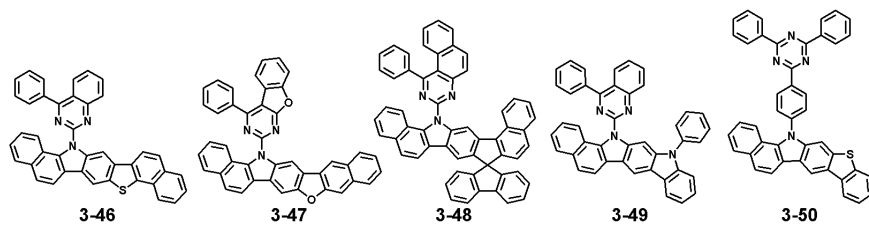
[0268]



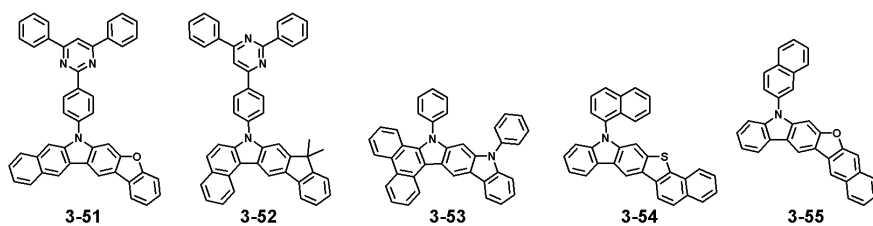
[0269]



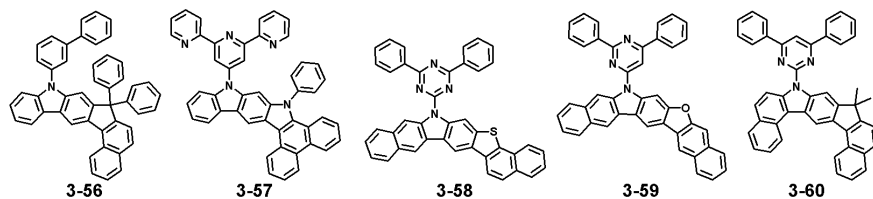
[0270]



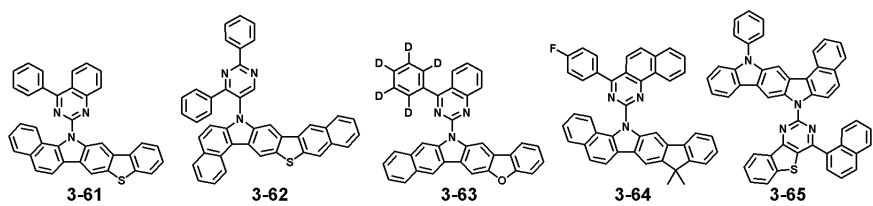
[0271]



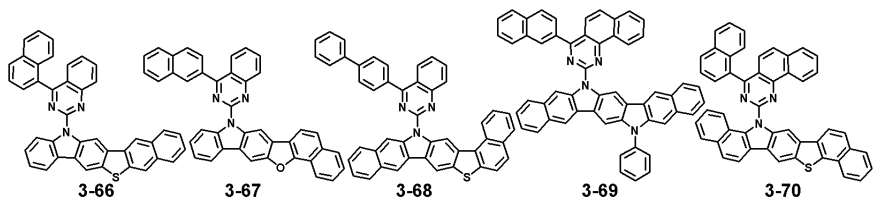
[0272]



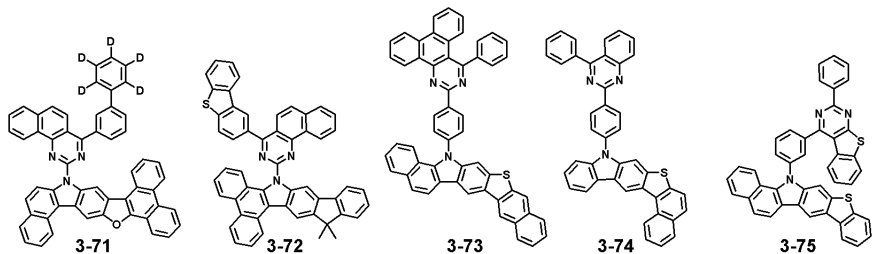
[0273]



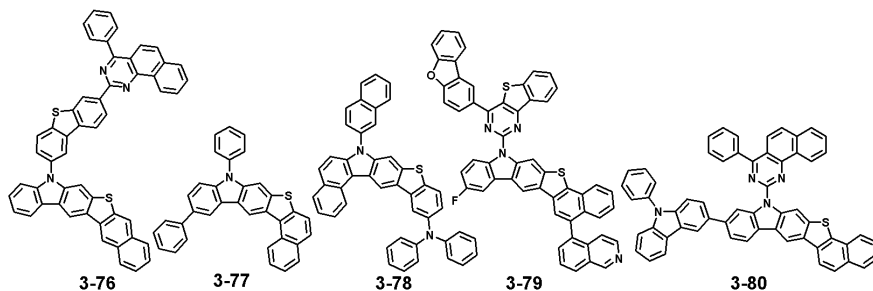
[0274]



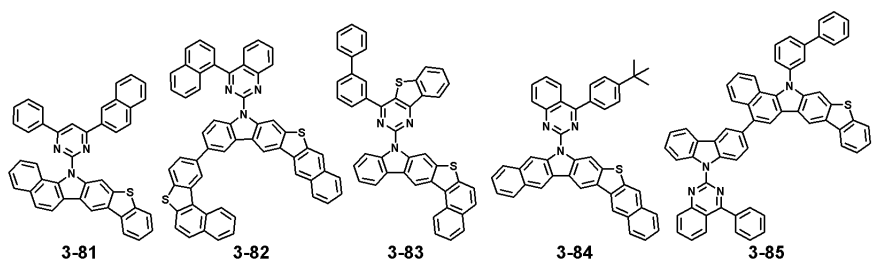
[0275]



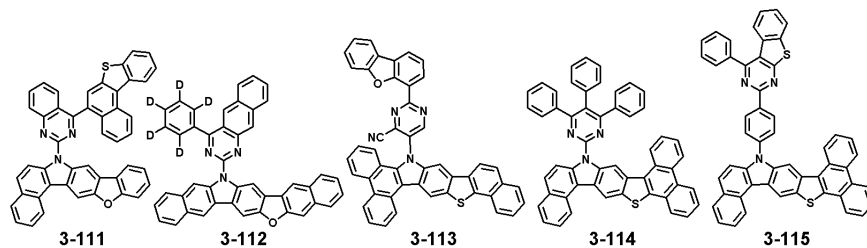
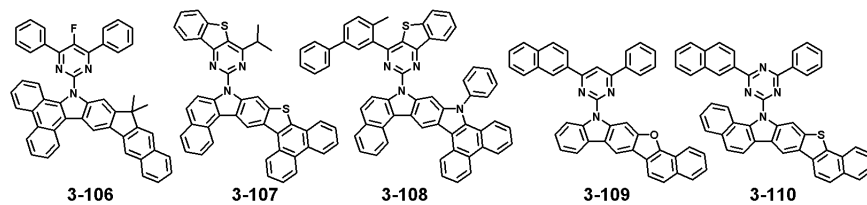
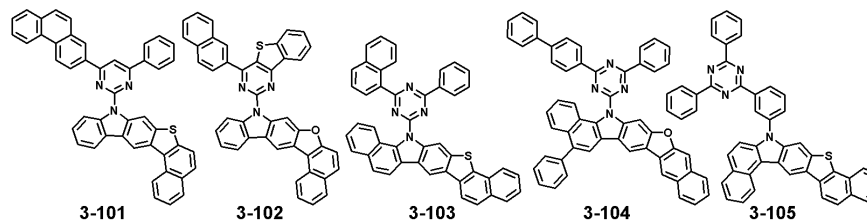
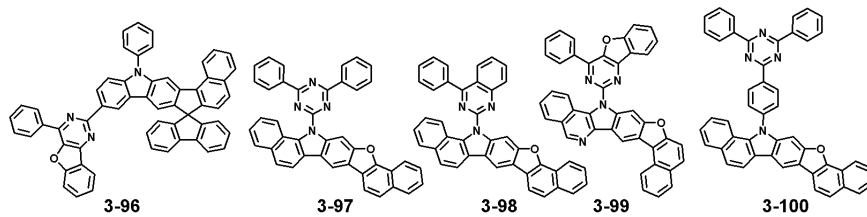
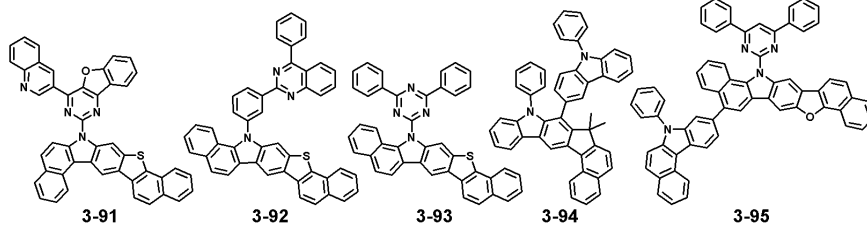
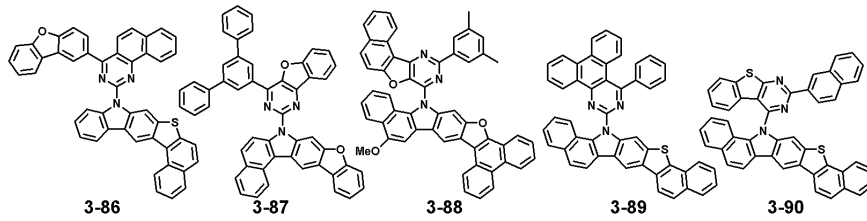
[0276]



[0277]



[0278]



도 1을 참조하여 설명하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기관(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 1전극(120)이 캐소드이고 제 2전극(180)이 애노드일 수 있다.

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.

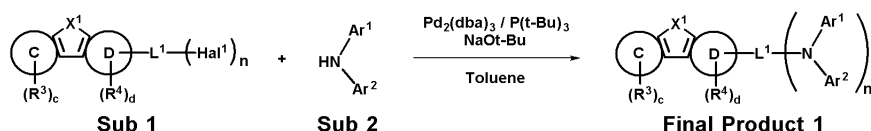
- [0288] 또한, 미도시하였지만 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층을 더 포함할 수 있다.
- [0289] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.
- [0290] 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 정공수송층(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.
- [0291] 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.
- [0292] 또한, 상기 제 1전극과 발광층 사이에 1층 이상의 정공수송대역층을 포함하고, 상기 정공수송대역층은 정공수송층, 발광보조층 또는 이 둘을 모두 포함하며, 상기 정공수송대역층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공할 수 있다.
- [0293] 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.
- [0294] 또한 본 발명에서 상기 유기물층은 스펀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 몰투몰 공정 중 어느 하나에 의해 형성되고, 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.
- [0295] 또한 본 발명은 상기 유기물층의 발광층에서 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물이 1:9 내지 9:1 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 포함되는 유기전기소자를 제공한다.
- [0296] 또한, 본 발명은 상기 유기물층의 발광층에서 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물이 1:9 또는 5:5 중 어느 하나의 비율로 혼합되어 발광층에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다. 보다 바람직하게는 상기 화학식 1 및 상기 화학식 2로 나타내는 화합물의 혼합비율이 2:8 또는 3:7로 발광층에 포함된다.
- [0298] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [0299] 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 상호 평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 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.
- [0300] 또한 본 발명은 상기한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치를 제공한다.
- [0301] 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 미래의 유무선 통신단말기일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[0303] 이하에서, 본 발명의 상기 화학식 1 및 2로 표시되는 화합물의 합성에 및 본 발명의 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명의 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0305] **[합성예 1]**

[0306] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(final product 1)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 합성되며, 이에 한정되는 것은 아니다. X^1 , C, D, R^3 , R^4 , c, d, Ar^1 , Ar^2 , L^1 및 n은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하며, Hal^1 은 Br 또는 Cl이다.

[0307] <반응식 1>

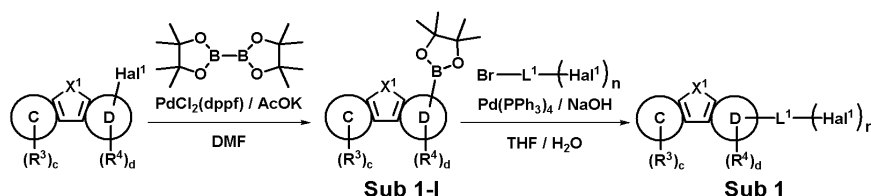


[0308]

[0310] **I. Sub 1의 합성**

[0311] 상기 반응식 1의 Sub 1에 대한 합성 방법은 본 출원인의 한국등록특허 10-1520955호 (2015.05.11일자 등록공고), 한국등록특허 10-1530885호 (2015.06.17일자 등록공고), 한국등록특허 10-1530886호 (2015.06.17일자 등록공고), 한국등록특허 10-1614740호 (2016.04.18일자 등록공고), 한국출원특허 2013-0056221 (2013.05.20일자 출원), 한국출원특허 2015-0035780 (2015.03.16일자 출원), 한국출원특허 2015-0083505 (2015.06.12일자 출원)에 개시된 합성방법을 사용하였다. L^1 이 단일결합이 아닐 경우 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, Hal^1 은 Br 또는 Cl이다.

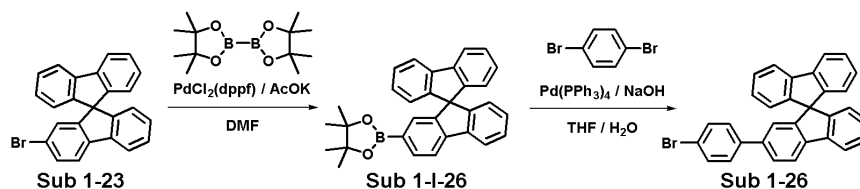
[0312] <반응식 2>



[0313]

[0315] Sub 1에 속하는 구체적 화합물의 합성에는 다음과 같다.

[0317] **1. Sub 1-26 합성예**



[0318]

[0319] **(1) Sub 1-I-26 합성**

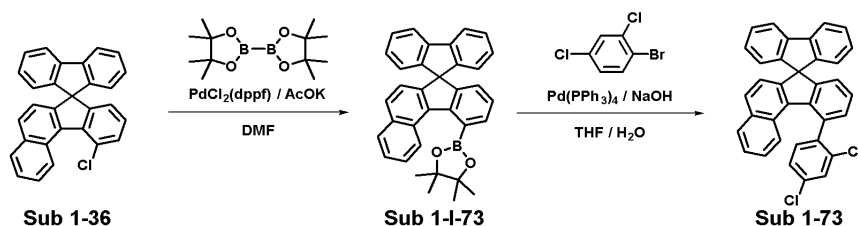
[0320] Sub 1-23 (CAS Registry Number: 171408-76-7) (38.80 g, 98.15 mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF (490 ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (27.42 g, 107.97 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.40 g, 2.94 mmol), KOAc (28.90 g, 294.46 mmol)를 첨가하고 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물

32.13 g (수율: 74%)을 얻었다.

(2) Sub 1-26 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-26 (32.13 g, 72.63 mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF (370 ml)로 녹인 후에, 1,4-dibromobenzene (CAS Registry Number: 106-37-6) (22.27 g, 94.42 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.52 g, 2.18 mmol), NaOH (8.72 g, 217.89 mmol), 물 (185 ml)을 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 23.97 g (수율: 70%)을 얻었다.

2. Sub 1-73 합성예



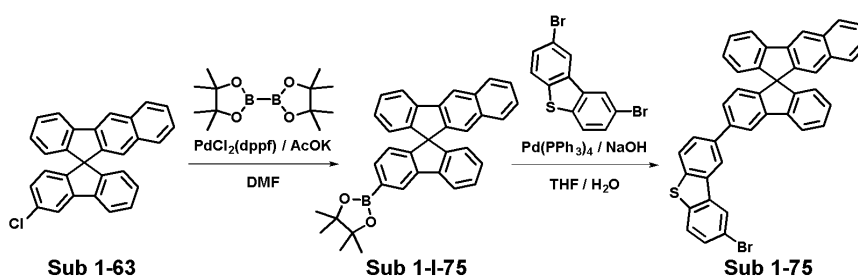
(1) Sub 1-I-73 합성

Sub 1-36 (CAS Registry Number: 1800333-62-3) (50.31 g, 125.49 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (35.05 g, 138.04 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.07 g, 3.76 mmol), KOAc (36.95 g, 376.47 mmol), DMF (630 ml)를 첨가하고 상기 Sub 1-I-26 합성법을 사용하여 생성물 37.69 g (수율: 61%)을 얻었다.

(2) Sub 1-73 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-73 (37.69 g, 76.54 mmol)에 1-bromo-2,4-dichlorobenzene (CAS Registry Number: 1193-72-2) (22.48 g, 99.50 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.65 g, 2.30 mmol), NaOH (9.18 g, 229.62 mmol), THF (390 ml), 물 (195 ml)을 첨가하고 상기 Sub 1-26 합성법을 사용하여 생성물 24.66 g (수율: 63%)을 얻었다.

3. Sub 1-75 합성예



(1) Sub 1-I-75 합성

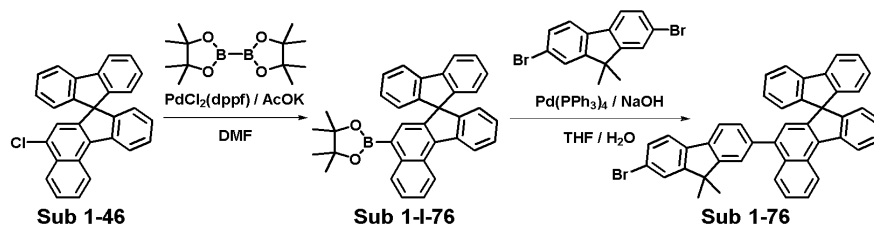
Sub 1-63 (CAS Registry Number: 1793062-76-6) (46.40 g, 115.74 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (32.33 g, 127.31 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.84 g, 3.47 mmol), KOAc (34.08 g, 347.21 mmol), DMF (580 ml)를 첨가하고 상기 Sub 1-I-26 합성법을 사용하여 생성물 37.04 g (수율: 65%)을 얻었다.

(2) Sub 1-75 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-75 (37.04 g, 75.22 mmol)에 2,8-dibromodibenzo[b,d]thiophene (CAS Registry Number: 31574-87-5) (33.45 g, 97.78 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.61 g, 2.26 mmol), NaOH (9.03 g, 225.66 mmol), THF (380 ml), 물 (190 ml)을 첨가하고 상기 Sub 1-26 합성법을 사용하여 생성물 32.10 g (수율: 68%)을 얻었다.

다.

4. Sub 1-76 합성예



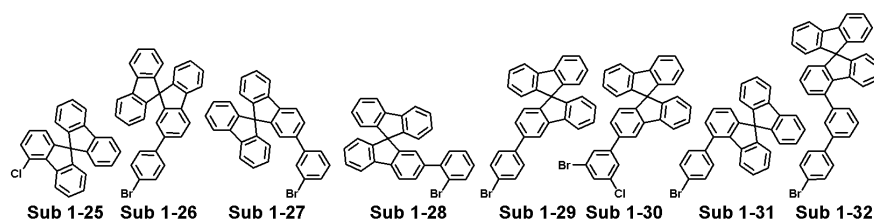
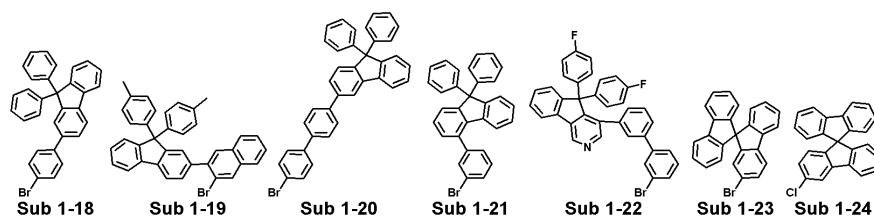
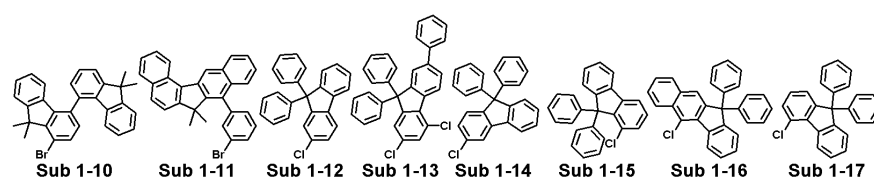
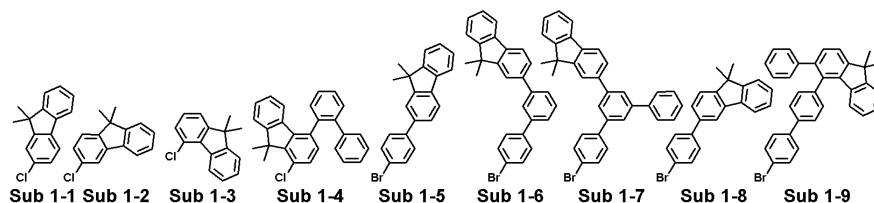
(1) Sub 1-I-76 합성

Sub 1-46 (CAS Registry Number: 1800298-96-7) (39.31 g, 98.05 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (27.39 g, 107.86 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.40 g, 2.94 mmol), KOAc (28.87 g, 294.16 mmol), DMF (490 ml)를 첨가하고 상기 Sub 1-I-26 합성법을 사용하여 생성물 33.80 g (수율: 70%)을 얻었다.

(2) Sub 1-76 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-76 (33.80 g, 68.64 mmol)에 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (CAS Registry Number: 28320-32-3) (31.42 g, 89.23 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.38 g, 2.06 mmol), NaOH (8.24 g, 205.92 mmol), THF (350 ml), 물 (175 ml)을 첨가하고 상기 Sub 1-26 합성법을 사용하여 생성물 28.89 g (수율: 66%)을 얻었다.

Sub 1에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 1은 Sub 1에 속하는 일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.



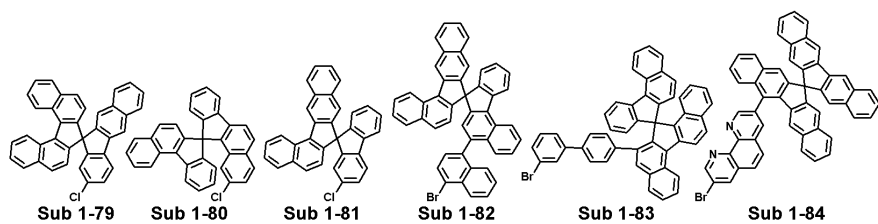
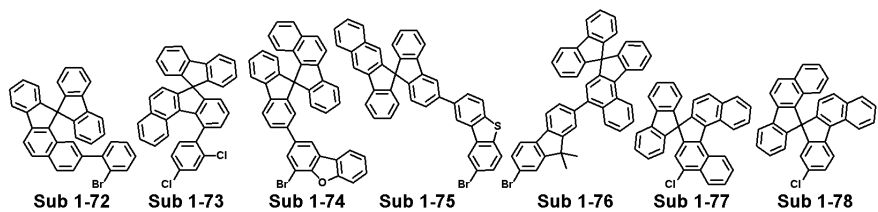
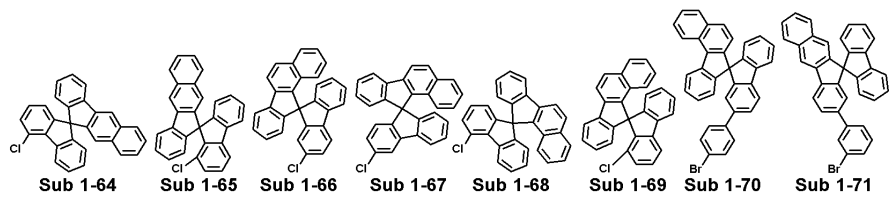
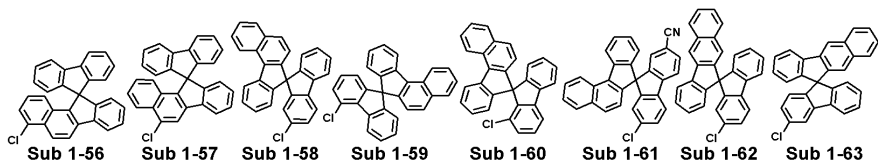
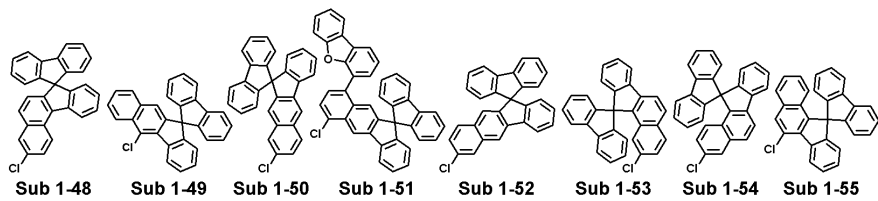
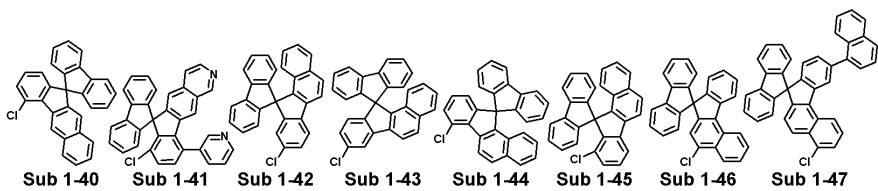
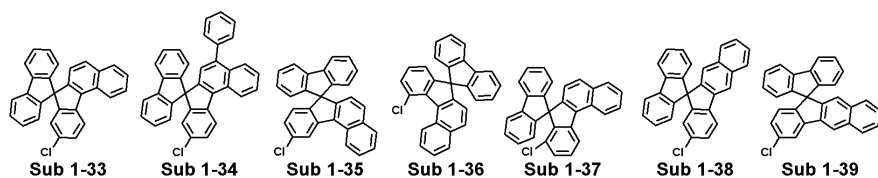


표 1

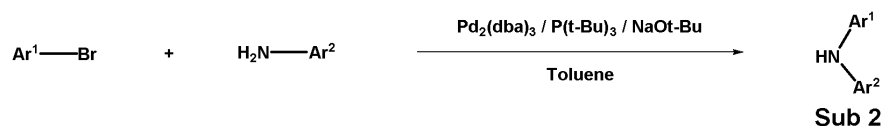
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=228.07(C ₁₅ H ₁₃ Cl=228.72)	Sub 1-2	m/z=228.07(C ₁₅ H ₁₃ Cl=228.72)
Sub 1-3	m/z=228.07(C ₁₅ H ₁₃ Cl=228.72)	Sub 1-4	m/z=380.13(C ₂₇ H ₂₁ Cl=380.92)
Sub 1-5	m/z=348.05(C ₂₁ H ₁₇ Br=349.27)	Sub 1-6	m/z 424.08(C ₂₇ H ₂₁ Br=425.37)
Sub 1-7	m/z=500.11(C ₃₃ H ₂₅ Br=501.47)	Sub 1-8	m/z=348.05(C ₂₁ H ₁₇ Br=349.27)

Sub 1-9	m/z=500.11(C ₃₃ H ₂₅ Br=501.47)	Sub 1-10	m/z=464.11(C ₃₀ H ₂₅ Br=465.43)
Sub 1-11	m/z=448.08(C ₂₉ H ₂₁ Br=449.39)	Sub 1-12	m/z=352.10(C ₂₅ H ₁₇ Cl=352.86)
Sub 1-13	m/z=462.09(C ₃₁ H ₂₀ Cl ₂ =463.40)	Sub 1-14	m/z=352.10(C ₂₅ H ₁₇ Cl=352.86)
Sub 1-15	m/z=352.10(C ₂₅ H ₁₇ Cl=352.86)	Sub 1-16	m/z=402.12(C ₂₉ H ₁₉ Cl=402.92)
Sub 1-17	m/z=352.10(C ₂₅ H ₁₇ Cl=352.86)	Sub 1-18	m/z=472.08(C ₃₁ H ₂₁ Br=473.41)
Sub 1-19	m/z=550.13(C ₃₇ H ₂₇ Br=551.53)	Sub 1-20	m/z=548.11(C ₃₇ H ₂₅ Br=549.51)
Sub 1-21	m/z=472.08(C ₃₁ H ₂₁ Br=473.41)	Sub 1-22	m/z=585.09(C ₃₆ H ₂₂ BrF ₂ N=586.48)
Sub 1-23	m/z=394.04(C ₂₅ H ₁₅ Br=395.30)	Sub 1-24	m/z=350.09(C ₂₅ H ₁₅ Cl=350.85)
Sub 1-25	m/z=350.09(C ₂₅ H ₁₅ Cl=350.85)	Sub 1-26	m/z=470.07(C ₃₁ H ₁₉ Br=471.40)
Sub 1-27	m/z=470.07(C ₃₁ H ₁₉ Br=471.40)	Sub 1-28	m/z=470.07(C ₃₁ H ₁₉ Br=471.40)
Sub 1-29	m/z=470.07(C ₃₁ H ₁₉ Br=471.40)	Sub 1-30	m/z=504.03(C ₃₁ H ₁₈ BrCl=505.84)
Sub 1-31	m/z=470.07(C ₃₁ H ₁₉ Br=471.40)	Sub 1-32	m/z=546.10(C ₃₇ H ₂₃ Br=547.50)
Sub 1-33	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-34	m/z=476.13(C ₃₅ H ₂₁ Cl=477.00)
Sub 1-35	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-36	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-37	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-38	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-39	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-40	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-41	m/z=478.12(C ₃₃ H ₁₉ ClN ₂ =478.98)	Sub 1-42	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-43	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-44	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-45	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-46	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-47	m/z=526.15(C ₃₉ H ₂₃ Cl=527.06)	Sub 1-48	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-49	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-50	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-51	m/z=566.14(C ₄₁ H ₂₃ ClO=567.08)	Sub 1-52	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-53	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-54	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-55	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-56	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-57	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-58	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-59	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-60	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-61	m/z=425.10(C ₃₀ H ₁₆ ClN=425.92)	Sub 1-62	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-63	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-64	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-65	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-66	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-67	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-68	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)
Sub 1-69	m/z=400.10(C ₂₉ H ₁₇ Cl=400.91)	Sub 1-70	m/z=520.08(C ₃₅ H ₂₁ Br=521.46)
Sub 1-71	m/z=520.08(C ₃₅ H ₂₁ Br=521.46)	Sub 1-72	m/z=520.08(C ₃₅ H ₂₁ Br=521.46)
Sub 1-73	m/z=510.09(C ₃₅ H ₂₀ Cl ₂ =511.45)	Sub 1-74	m/z=610.09(C ₄₁ H ₂₃ BrO=611.54)
Sub 1-75	m/z=626.07(C ₄₁ H ₂₃ BrS=627.60)	Sub 1-76	m/z=636.15(C ₄₄ H ₂₉ Br=637.62)
Sub 1-77	m/z=450.12(C ₃₃ H ₁₉ Cl=450.97)	Sub 1-78	m/z=450.12(C ₃₃ H ₁₉ Cl=450.97)
Sub 1-79	m/z=500.13(C ₃₇ H ₂₁ Cl=501.03)	Sub 1-80	m/z=450.12(C ₃₃ H ₁₉ Cl=450.97)
Sub 1-81	m/z=450.12(C ₃₃ H ₁₉ Cl=450.97)	Sub 1-82	m/z=670.13(C ₄₇ H ₂₇ Br=671.64)
Sub 1-83	m/z=696.15(C ₄₉ H ₂₉ Br=697.68)	Sub 1-84	m/z=772.15(C ₅₃ H ₂₉ BrN ₂ =773.73)

II. Sub 2의 합성

상기 반응식 1의 Sub 2에 대한 합성 방법은 본 출원인의 한국등록특허 제 10-1251451호 (2013.04.05일자 등록공고)에 개시된 합성방법을 사용하였다. 하기 반응식 3의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

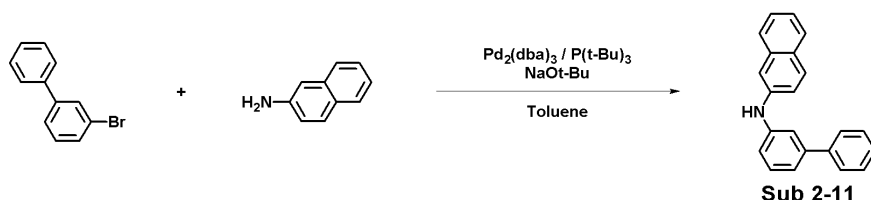
[0362] <반응식 3>



[0363]

[0365] Sub 2에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다.

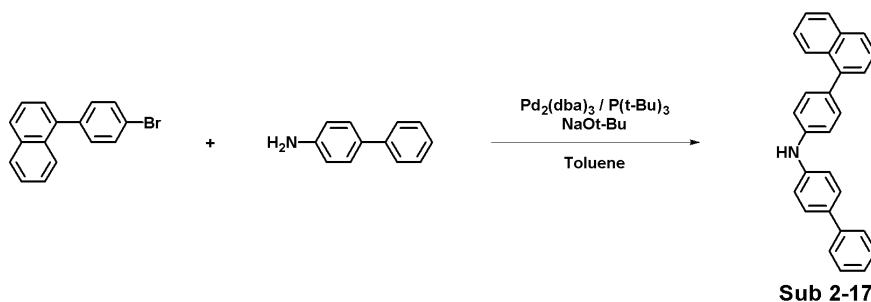
[0366] 1. Sub 2-11 합성예



[0367]

[0368] 출발물질인 3-bromo-1,1'-biphenyl (CAS Registry Number: 2113-57-7) (10.99 g, 47.15 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (330 ml)으로 녹인 후에, naphthalen-2-amine (CAS Registry Number: 91-59-8) (7.43 g, 51.86 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.30 g, 1.41 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.76 g, 3.77 mmol), NaOt-Bu (13.59 g, 141.44 mmol)을 첨가하고 80℃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 11.14 g (수율: 80%)을 얻었다.

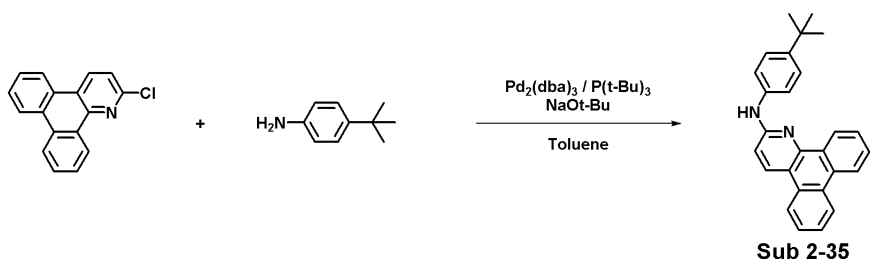
[0370] 2. Sub 2-17 합성예



[0371]

[0372] 출발물질인 1-(4-bromophenyl)naphthalene (CAS Registry Number: 204530-94-9) (20.23 g, 71.44 mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (CAS Registry Number: 92-67-1) (13.30 g, 78.59 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.96 g, 2.14 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.16 g, 5.72 mmol), NaOt-Bu (20.60 g, 214.33 mmol), toluene (500 ml)을 첨가하고 상기 Sub 2-11 합성법을 사용하여 생성물 22.29 g (수율: 84%)을 얻었다.

[0374] 3. Sub 2-35 합성예

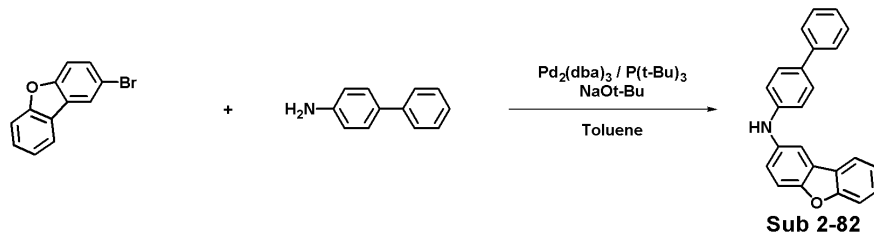


[0375]

[0376] 출발물질인 2-chlorodibenzo[f,h]quinoline (CAS Registry Number: 1417779-49-7) (20.60 g, 78.11 mmol)에

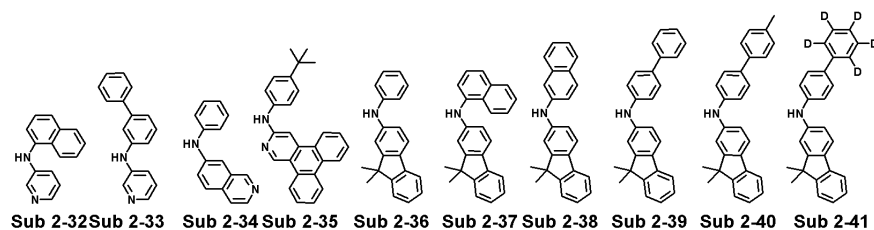
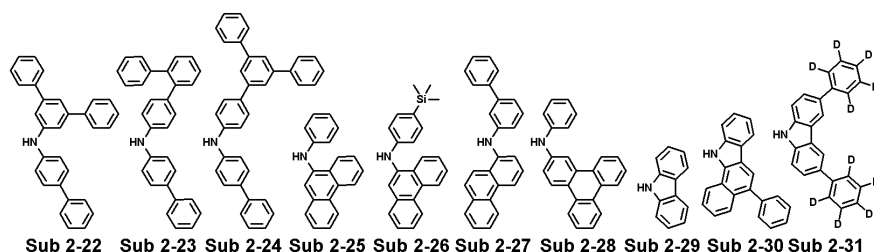
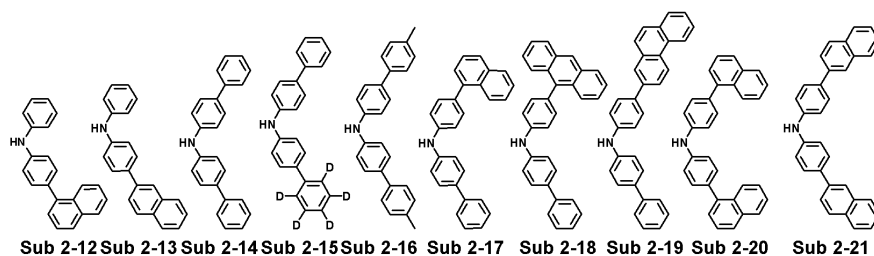
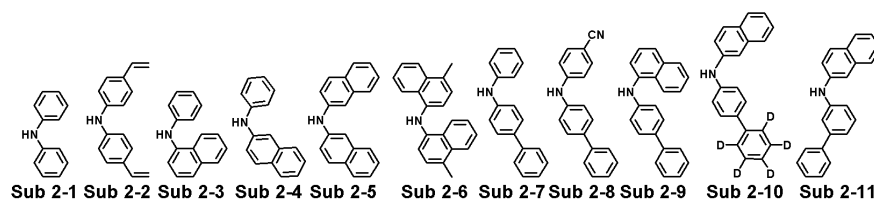
4-(tert-butyl)aniline (CAS Registry Number: 769-92-6) (12.82 g, 85.92 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.15 g, 2.34 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.26 g, 6.25 mmol), NaOt-Bu (22.52 g, 234.34 mmol), toluene (550 ml)을 첨가하고 상기 Sub 2-11 합성법을 사용하여 생성물 15.88 g (수율: 54%)을 얻었다.

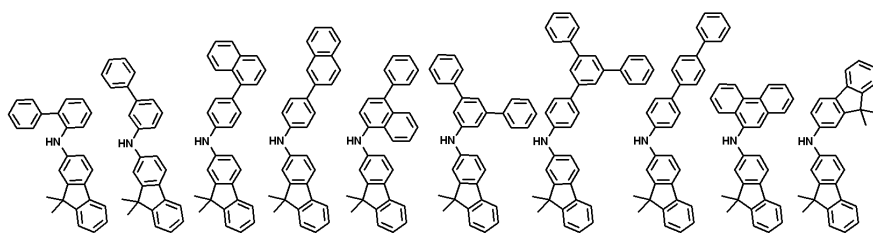
4. Sub 2-82 합성예



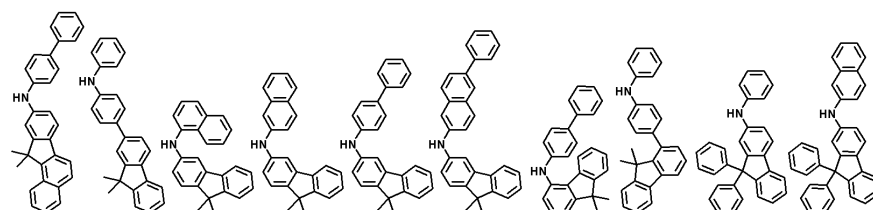
출발물질인 2-bromodibenzo[b,d]furan (CAS Registry Number: 86-76-0) (15.52 g, 62.81 mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (CAS Registry Number: 92-67-1) (11.69 g, 69.09 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.73 g, 1.88 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1.02 g, 5.02 mmol), NaOt-Bu (18.11 g, 188.43 mmol), toluene (440 ml)을 첨가하고 상기 Sub 2-11 합성법을 사용하여 생성물 16.22 g (수율: 77%)을 얻었다.

Sub 2에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 2는 Sub 2에 속하는 일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.

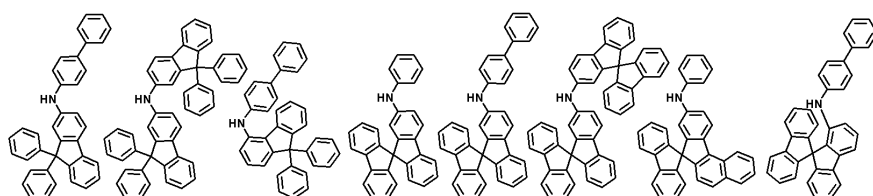




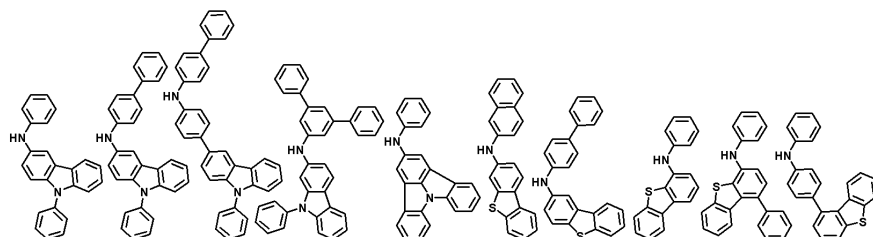
Sub 2-42 Sub 2-43 Sub 2-44 Sub 2-45 Sub 2-46 Sub 2-47 Sub 2-48 Sub 2-49 Sub 2-50 Sub 2-51



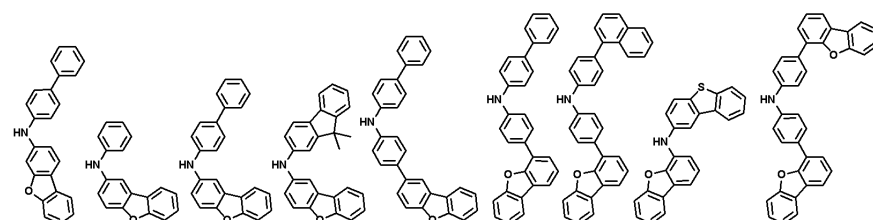
Sub 2-52 Sub 2-53 Sub 2-54 Sub 2-55 Sub 2-56 Sub 2-57 Sub 2-58 Sub 2-59 Sub 2-60 Sub 2-61



Sub 2-62 Sub 2-63 Sub 2-64 Sub 2-65 Sub 2-66 Sub 2-67 Sub 2-68 Sub 2-69



Sub 2-70 Sub 2-71 Sub 2-72 Sub 2-73 Sub 2-74 Sub 2-75 Sub 2-76 Sub 2-77 Sub 2-78 Sub 2-79



Sub 2-80 Sub 2-81 Sub 2-82 Sub 2-83 Sub 2-84 Sub 2-85 Sub 2-86 Sub 2-87 Sub 2-88

표 2

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=169.09(C ₁₂ H ₁₁ N=169.23)	Sub 2-2	m/z=221.12(C ₁₆ H ₁₅ N=221.30)
Sub 2-3	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.29)	Sub 2-4	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.29)
Sub 2-5	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.35)	Sub 2-6	m/z=297.15(C ₂₂ H ₁₉ N=297.40)
Sub 2-7	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.33)	Sub 2-8	m/z=270.12(C ₁₉ H ₁₄ N ₂ =270.34)
Sub 2-9	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.39)	Sub 2-10	m/z=300.17(C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.42)
Sub 2-11	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.39)	Sub 2-12	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.39)
Sub 2-13	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.39)	Sub 2-14	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.42)
Sub 2-15	m/z=326.18(C ₂₄ H ₁₄ D ₅ N=326.45)	Sub 2-16	m/z=349.18(C ₂₆ H ₂₃ N=349.48)
Sub 2-17	m/z=371.17(C ₂₈ H ₂₁ N=371.48)	Sub 2-18	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.54)

Sub 2-19	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.54)	Sub 2-20	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.54)
Sub 2-21	m/z=421.18(C ₃₂ H ₂₃ N=421.54)	Sub 2-22	m/z=397.18(C ₃₀ H ₂₃ N=397.52)
Sub 2-23	m/z=397.18(C ₃₀ H ₂₃ N=397.52)	Sub 2-24	m/z=473.21(C ₃₆ H ₂₇ N=473.62)
Sub 2-25	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.35)	Sub 2-26	m/z=341.16(C ₂₃ H ₂₃ Si=341.53)
Sub 2-27	m/z=345.15(C ₂₆ H ₁₉ N=345.45)	Sub 2-28	m/z=319.14(C ₂₄ H ₁₇ N=319.41)
Sub 2-29	m/z=167.07(C ₁₂ H ₉ N=167.21)	Sub 2-30	m/z=293.12(C ₂₂ H ₁₅ N=293.37)
Sub 2-31	m/z=329.20(C ₂₄ H ₇ D ₁₀ N=329.47)	Sub 2-32	m/z=220.10(C ₁₅ H ₁₂ N ₂ =220.28)
Sub 2-33	m/z=246.12(C ₁₇ H ₁₄ N ₂ =246.31)	Sub 2-34	m/z=220.10(C ₁₅ H ₁₂ N ₂ =220.28)
Sub 2-35	m/z=376.19(C ₂₇ H ₂₄ N ₂ =376.50)	Sub 2-36	m/z=285.15(C ₂₁ H ₁₉ N=285.39)
Sub 2-37	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.45)	Sub 2-38	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.45)
Sub 2-39	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-40	m/z=375.20(C ₂₈ H ₂₅ N=375.52)
Sub 2-41	m/z=366.21(C ₂₇ H ₁₈ D ₅ N=366.52)	Sub 2-42	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)
Sub 2-43	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-44	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.55)
Sub 2-45	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.55)	Sub 2-46	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.55)
Sub 2-47	m/z=437.21(C ₃₃ H ₂₇ N=437.59)	Sub 2-48	m/z=513.25(C ₃₉ H ₃₁ N=513.68)
Sub 2-49	m/z=437.21(C ₃₃ H ₂₇ N=437.59)	Sub 2-50	m/z=385.18(C ₂₉ H ₂₃ N=385.51)
Sub 2-51	m/z=401.21(C ₃₀ H ₂₇ N=401.55)	Sub 2-52	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.55)
Sub 2-53	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-54	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.45)
Sub 2-55	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.45)	Sub 2-56	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)
Sub 2-57	m/z=411.20(C ₃₁ H ₂₅ N=411.55)	Sub 2-58	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)
Sub 2-59	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-60	m/z=409.18(C ₃₁ H ₂₃ N=409.53)
Sub 2-61	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.59)	Sub 2-62	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.63)
Sub 2-63	m/z=649.28(C ₅₀ H ₃₅ N=649.84)	Sub 2-64	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.63))
Sub 2-65	m/z=407.17(C ₃₁ H ₂₁ N=407.52)	Sub 2-66	m/z=483.20(C ₃₇ H ₂₅ N=483.61)
Sub 2-67	m/z=645.25(C ₅₀ H ₃₁ N=645.81)	Sub 2-68	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.58)
Sub 2-69	m/z=483.20(C ₃₇ H ₂₅ N=483.61)	Sub 2-70	m/z=334.15(C ₂₄ H ₁₈ N ₂ =334.42)
Sub 2-71	m/z=410.18(C ₃₀ H ₂₂ N ₂ =410.52)	Sub 2-72	m/z=486.21(C ₃₆ H ₂₆ N ₂ =486.62)
Sub 2-73	m/z=486.21(C ₃₆ H ₂₆ N ₂ =486.62)	Sub 2-74	m/z=332.13(C ₂₄ H ₁₆ N ₂ =332.41)
Sub 2-75	m/z=325.09(C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-76	m/z=351.11(C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-77	m/z=275.08(C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 2-78	m/z=351.11(C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-79	m/z=351.11(C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-80	m/z=335.13(C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)
Sub 2-81	m/z=259.10(C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)	Sub 2-82	m/z=335.13(C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)
Sub 2-83	m/z=375.16(C ₂₇ H ₂₁ NO=375.47)	Sub 2-84	m/z=411.16(C ₃₀ H ₂₁ NO=411.50)
Sub 2-85	m/z=411.16(C ₃₀ H ₂₁ NO=411.50)	Sub 2-86	m/z=461.18(C ₃₄ H ₂₃ NO=461.56)
Sub 2-87	m/z=365.09(C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)	Sub 2-88	m/z=501.17(C ₃₆ H ₂₃ NO ₂ =501.59)

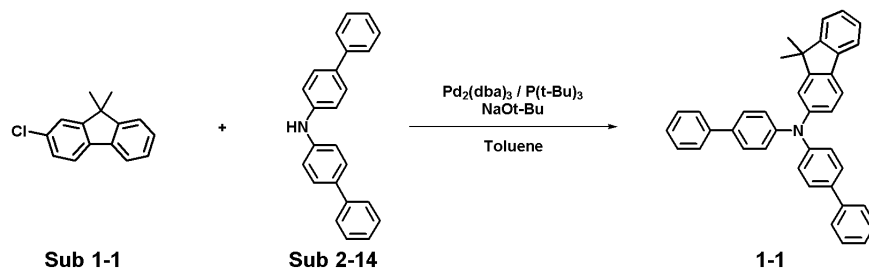
[0395]

III. Final products 1 합성

[0396]

Sub 1 (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 Toluene으로 녹인 후에, Sub 2 (1 당량), Pd₂(dba)₃ (0.03 당량), (t-Bu)₃P (0.06 당량), NaOt-Bu (3 당량)을 100℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Final product 1을 얻었다.

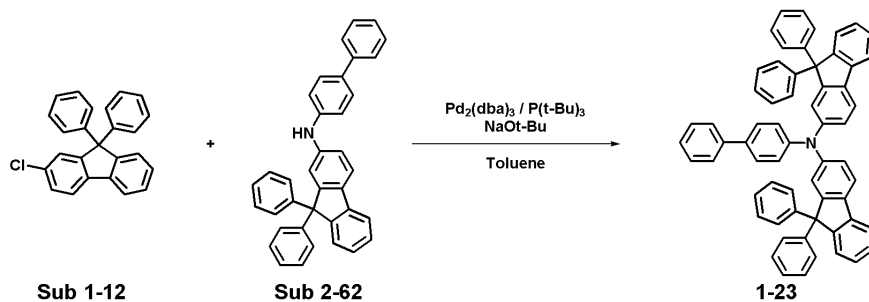
[0398] 1. 1-1 합성예



[0399]

[0400] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-1 (9.70 g, 42.41 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (445 ml)으로 녹인 후에, Sub 2-14 (14.99 g, 46.65 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.17 g, 1.27 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.51 g, 2.54 mmol), NaOt-Bu (12.23 g, 127.23 mmol)을 첨가하고 100℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 16.34 g (수율: 75%)을 얻었다.

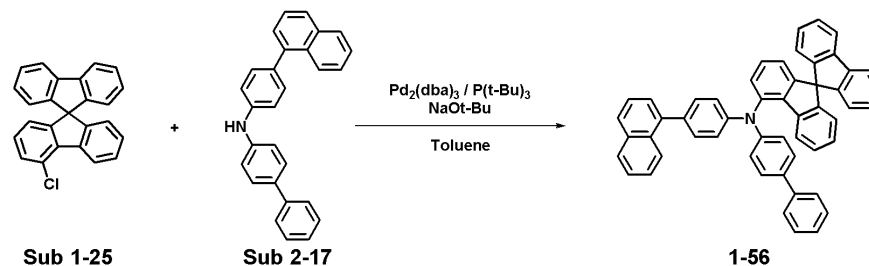
[0402] 2. 1-23 합성예



[0403]

[0404] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-12 (10.00 g, 28.34 mmol)에 Sub 2-62 (15.14 g, 31.17 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.78 g, 0.85 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.34 g, 1.70 mmol), NaOt-Bu (8.17 g, 85.02 mmol), toluene (300 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 15.46 g (수율: 68%)을 얻었다.

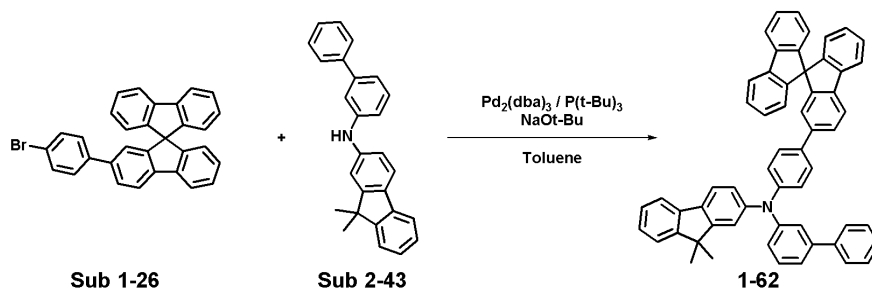
[0406] 3. 1-56 합성예



[0407]

[0408] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-25 (9.90 g, 28.22 mmol)에 Sub 2-17 (11.53 g, 31.04 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.78 g, 0.85 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.34 g, 1.69 mmol), NaOt-Bu (8.14 g, 84.65 mmol), toluene (300 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 15.10 g (수율: 78%)을 얻었다.

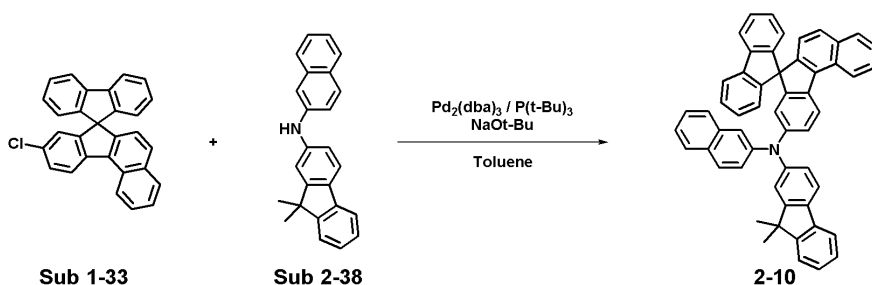
[0410] 4. 1-62 합성예



[0411]

[0412] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-26 (11.00 g, 23.33 mmol)에 Sub 2-43 (9.28 g, 25.67 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.64 g, 0.70 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.28 g, 1.40 mmol), NaOt-Bu (6.73 g, 70.00 mmol), toluene (245 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 12.46 g (수율: 71%)을 얻었다.

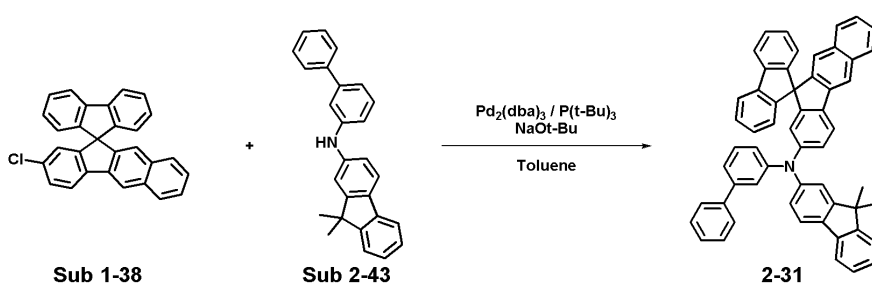
[0414] 5. 2-10 합성예



[0415]

[0416] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-33 (12.60 g, 31.43 mmol)에 Sub 2-38 (11.60 g, 34.57 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.86 g, 0.94 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.38 g, 1.89 mmol), NaOt-Bu (9.06 g, 94.29 mmol), toluene (330 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 13.86 g (수율: 63%)을 얻었다.

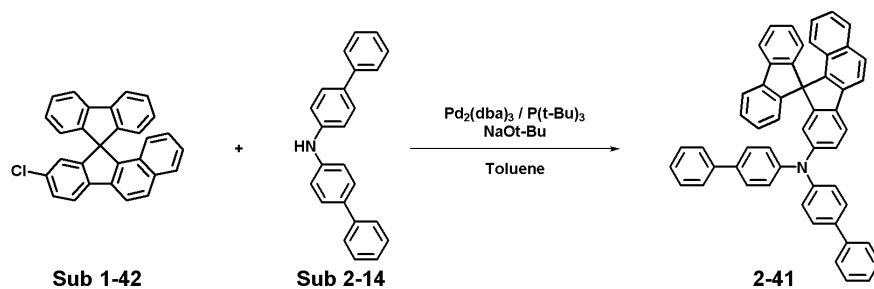
[0418] 6. 2-31 합성예



[0419]

[0420] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-38 (11.90 g, 29.68 mmol)에 Sub 2-43 (11.80 g, 32.65 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 (8.56 g, 89.05 mmol), toluene (310 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 14.65 g (수율: 68%)을 얻었다.

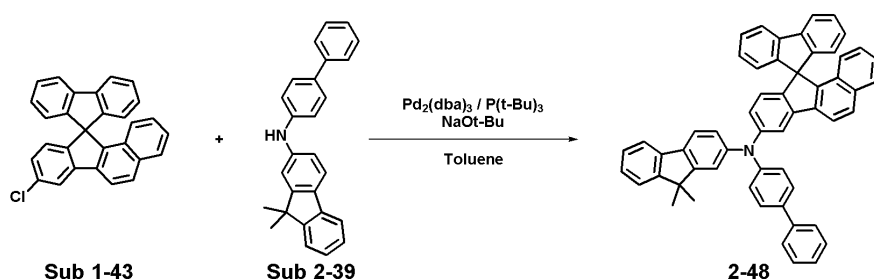
[0422] 7. 2-41 합성예



[0423]

[0424] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-42 (12.00 g, 29.93 mmol)에 Sub 2-14 (10.58 g, 32.93 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.82 g, 0.90 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.36 g, 1.80 mmol), NaOt-Bu (8.63 g, 89.80 mmol), toluene (315 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 14.78 g (수율: 72%)을 얻었다.

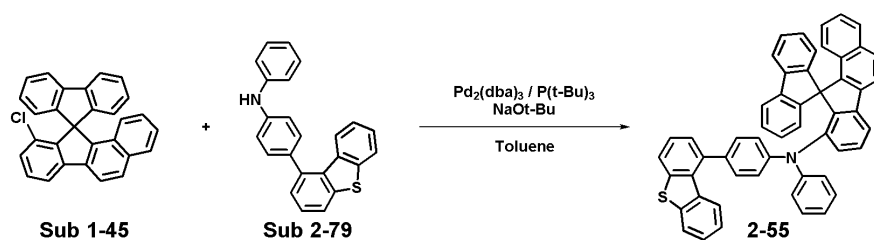
[0426] 8. 2-48 합성예



[0427]

[0428] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-43 (11.30 g, 28.19 mmol)에 Sub 2-39 (11.21 g, 31.00 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.77 g, 0.85 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.34 g, 1.69 mmol), NaOt-Bu (8.13 g, 84.56 mmol), toluene (295 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 14.32 g (수율: 70%)을 얻었다.

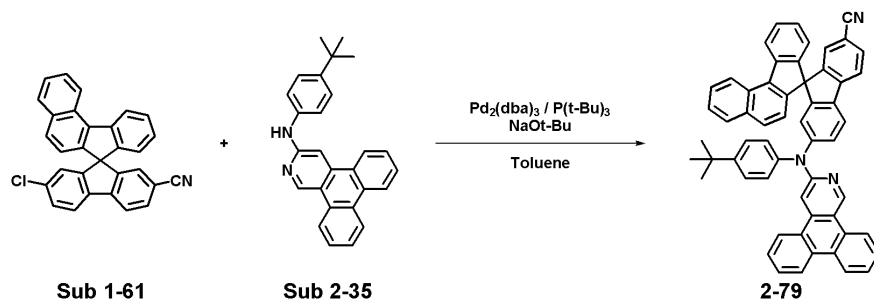
[0430] 9. 2-55 합성예



[0431]

[0432] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-45 (13.00 g, 32.43 mmol)에 Sub 2-79 (12.54 g, 35.67 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.89 g, 0.97 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.39 g, 1.95 mmol), NaOt-Bu (9.35 g, 97.28 mmol), toluene (340 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 11.84 g (수율: 51%)을 얻었다.

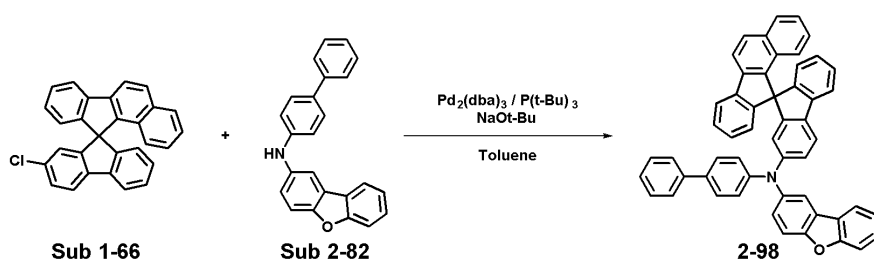
[0434] 10. 2-79 합성예



[0435]

[0436] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-61 (12.80 g, 30.05 mmol)에 Sub 2-35 (12.45 g, 33.06 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.83 g, 0.90 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.36 g, 1.80 mmol), NaOt-Bu (8.67 g, 90.16 mmol), toluene (315 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 10.59 g (수율: 46%)을 얻었다.

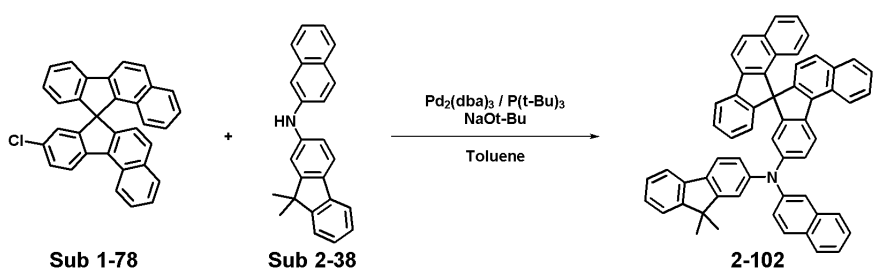
[0438] 11. 2-98 합성예



[0439]

[0440] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-66 (12.70 g, 31.68 mmol)에 Sub 2-82 (11.69 g, 34.85 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.87 g, 0.95 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.38 g, 1.90 mmol), NaOt-Bu (9.13 g, 95.03 mmol), toluene (330 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 14.41 g (수율: 65%)을 얻었다.

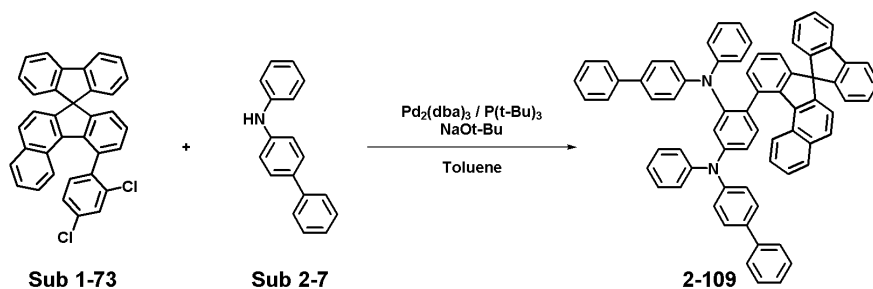
[0442] 12. 2-102 합성예



[0443]

[0444] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-78 (12.40 g, 27.50 mmol)에 Sub 2-38 (10.15 g, 30.25 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.76 g, 0.82 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.33 g, 1.65 mmol), NaOt-Bu (7.93 g, 82.49 mmol), toluene (290 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 14.23 g (수율: 69%)을 얻었다.

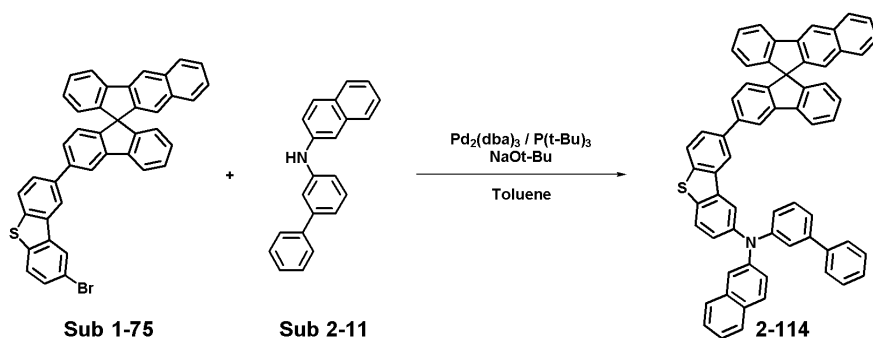
[0446] 13. 2-109 합성예



[0447]

[0448] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-73 (13.25 g, 25.91 mmol)에 Sub 2-7 (13.98 g, 56.99 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.42 g, 1.55 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.06 g, 0.31 mmol), NaOt-Bu (14.94 g, 155.44 mmol), toluene (415 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 13.72 g (수율: 57%)을 얻었다.

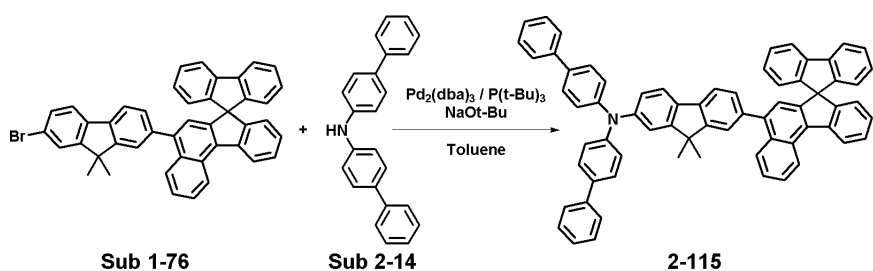
[0450] 14. 2-114 합성예



[0451]

[0452] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-75 (15.00 g, 23.90 mmol)에 Sub 2-11 (7.77 g, 26.29 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.66 g, 0.72 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.29 g, 1.43 mmol), NaOt-Bu (6.89 g, 71.70 mmol), toluene (250 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 12.28 g (수율: 61%)을 얻었다.

[0454] 15. 2-115 합성예



[0455]

[0456] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-76 (14.65 g, 22.98 mmol)에 Sub 2-14 (8.12 g, 25.27 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.63 g, 0.69 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.28 g, 1.38 mmol), NaOt-Bu (6.62 g, 68.93 mmol), toluene (240 ml)을 첨가하고 상기 1-1 합성법을 사용하여 생성물 12.91 g (수율: 64%)을 얻었다.

표 3

[0458]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1	m/z=513.25(C ₃₉ H ₃₁ N=513.68)	1-2	m/z=613.28(C ₄₇ H ₃₅ N=613.80)

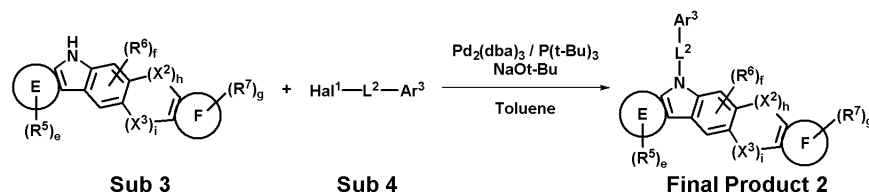
1-3	m/z=665.31(C ₅₁ H ₃₉ N=665.88)	1-4	m/z=705.34(C ₅₄ H ₄₃ N=705.95)
1-5	m/z=593.31(C ₄₅ H ₃₉ N=593.81)	1-6	m/z=589.28(C ₄₅ H ₃₅ N=589.78)
1-7	m/z=513.25(C ₃₉ H ₃₁ N=513.68)	1-8	m/z=639.29(C ₄₉ H ₃₇ N=639.84)
1-9	m/z=589.28(C ₄₅ H ₃₅ N=589.78)	1-10	m/z=665.31(C ₅₁ H ₃₉ N=665.88)
1-11	m/z=553.28(C ₄₂ H ₃₅ N=553.75)	1-12	m/z=669.34(C ₅₁ H ₄₃ N=669.91)
1-13	m/z=779.36(C ₆₀ H ₄₅ N=780.03)	1-14	m/z=761.35(C ₅₆ H ₄₇ NSi=762.08)
1-15	m/z=705.34(C ₅₄ H ₄₃ N=705.95)	1-16	m/z=589.28(C ₄₅ H ₃₅ N=589.78)
1-17	m/z=665.31(C ₅₁ H ₃₉ N=665.88)	1-18	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.94)
1-19	m/z=637.28(C ₄₉ H ₃₅ N=637.83)	1-20	m/z=789.34(C ₆₁ H ₄₃ N=790.02)
1-21	m/z=677.31(C ₅₂ H ₃₉ N=677.89)	1-22	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
1-23	m/z=801.34(C ₆₂ H ₄₃ N=802.03)	1-24	m/z=799.32(C ₆₂ H ₄₁ N=800.02)
1-25	m/z=965.40(C ₇₅ H ₅₁ N=966.24)	1-26	m/z=637.28(C ₄₉ H ₃₅ N=637.83)
1-27	m/z=635.26(C ₄₉ H ₃₃ N=635.81)	1-28	m/z=616.29(C ₄₇ H ₂₈ D ₅ N=616.82)
1-29	m/z=727.32(C ₅₆ H ₄₁ N=727.95)	1-30	m/z=687.29(C ₅₃ H ₃₇ N=687.89)
1-31	m/z=877.37(C ₆₈ H ₄₇ N=878.13)	1-32	m/z=753.34(C ₅₈ H ₄₃ N=753.99)
1-33	m/z=689.31(C ₅₃ H ₃₉ N=689.90)	1-34	m/z=637.28(C ₄₉ H ₃₅ N=637.83)
1-35	m/z=850.32(C ₆₂ H ₄₀ F ₂ N ₂ =851.01)	1-36	m/z=559.23(C ₄₃ H ₂₉ N=559.71)
1-37	m/z=635.26(C ₄₉ H ₃₃ N=635.81)	1-38	m/z=663.29(C ₅₁ H ₃₇ N=663.86)
1-39	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.93)	1-40	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.93)
1-41	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	1-42	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.93)
1-43	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)	1-44	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
1-45	m/z=675.29(C ₅₂ H ₃₇ N=675.88)	1-46	m/z=675.29(C ₅₂ H ₃₇ N=675.88)
1-47	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)	1-48	m/z=675.29(C ₅₂ H ₃₇ N=675.88)
1-49	m/z=721.28(C ₅₆ H ₃₅ N=721.90)	1-50	m/z=797.31(C ₆₂ H ₃₉ N=798.00)
1-51	m/z=959.36(C ₇₅ H ₄₅ N=960.19)	1-52	m/z=607.23(C ₄₇ H ₂₉ N=607.76)
1-53	m/z=675.29(C ₅₂ H ₃₇ N=675.88)	1-54	m/z=635.26(C ₄₉ H ₃₃ N=635.81)
1-55	m/z=640.29(C ₄₉ H ₂₈ D ₅ N=640.84)	1-56	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
1-57	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.93)	1-58	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)
1-59	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	1-60	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
1-61	m/z=635.26(C ₄₉ H ₃₃ N=635.81)	1-62	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)
1-63	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)	1-64	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)
1-65	m/z=842.37(C ₆₄ H ₄₆ N ₂ =843.09)	1-66	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)
1-67	m/z=873.34(C ₆₈ H ₄₃ N=874.10)	1-68	m/z=711.29(C ₅₅ H ₃₇ N=711.91)
1-69	m/z=751.32(C ₅₈ H ₄₁ N=751.97)	1-70	m/z=787.32(C ₆₁ H ₄₁ N=788.01)
2-1	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)	2-2	m/z=609.25(C ₄₇ H ₃₁ N=609.77)
2-3	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-4	m/z=659.26(C ₅₁ H ₃₃ N=659.83)
2-5	m/z=607.23(C ₄₇ H ₂₉ N=607.76)	2-6	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
2-7	m/z=664.29(C ₅₁ H ₂₈ D ₅ N=664.86)	2-8	m/z=649.28(C ₅₀ H ₃₅ N=649.84)
2-9	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)	2-10	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)
2-11	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-12	m/z=739.32(C ₅₇ H ₄₁ N=739.96)
2-13	m/z=730.34(C ₅₆ H ₃₄ D ₅ N=730.97)	2-14	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
2-15	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)	2-16	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
2-17	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-18	m/z=773.31(C ₆₀ H ₃₉ N=773.98)
2-19	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-20	m/z=774.30(C ₅₉ H ₃₈ N ₂ =774.97)
2-21	m/z=639.20(C ₄₇ H ₂₉ NS=639.82)	2-22	m/z=699.26(C ₅₃ H ₃₃ NO=699.85)
2-23	m/z=775.29(C ₅₉ H ₃₇ NO=775.95)	2-24	m/z=775.29(C ₅₉ H ₃₇ NO=775.95)
2-25	m/z=865.30(C ₆₅ H ₃₉ NO ₂ =866.03)	2-26	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)
2-27	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-28	m/z=649.28(C ₅₀ H ₃₅ N=649.84)

2-29	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)	2-30	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
2-31	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-32	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
2-33	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)	2-34	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
2-35	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)	2-36	m/z=773.31(C ₆₀ H ₃₉ N=773.98)
2-37	m/z=715.23(C ₅₃ H ₃₃ NS=715.91)	2-38	m/z=739.29(C ₅₆ H ₃₇ NO=739.92)
2-39	m/z=699.26(C ₅₃ H ₃₃ NO=699.85)	2-40	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.80)
2-41	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-42	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
2-43	m/z=633.25(C ₄₉ H ₃₁ N=633.79)	2-44	m/z=649.28(C ₅₀ H ₃₅ N=649.84)
2-45	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-46	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
2-47	m/z=801.34(C ₆₂ H ₄₃ N=802.03)	2-48	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
2-49	m/z=849.34(C ₆₆ H ₄₃ N=850.08)	2-50	m/z=850.33(C ₆₅ H ₄₂ N ₂ =851.07)
2-51	m/z=689.22(C ₅₁ H ₃₁ NS=689.88)	2-52	m/z=623.22(C ₄₇ H ₂₉ NO=623.76)
2-53	m/z=775.29(C ₅₉ H ₃₇ NO=775.95)	2-54	m/z=699.26(C ₅₃ H ₃₃ NO=699.85)
2-55	m/z=715.23(C ₅₃ H ₃₃ NS=715.91)	2-56	m/z=690.31(C ₅₃ H ₃₀ D ₅ N=690.90)
2-57	m/z=787.32(C ₆₁ H ₄₁ N=788.01)	2-58	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)
2-59	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-60	m/z=715.23(C ₅₃ H ₃₃ NS=715.91)
2-61	m/z=633.25(C ₄₉ H ₃₁ N=633.79)	2-62	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)
2-63	m/z=865.33(C ₆₆ H ₄₃ NO=866.08)	2-64	m/z=821.31(C ₆₄ H ₃₉ N=822.02)
2-65	m/z=698.27(C ₅₃ H ₃₄ N ₂ =698.87)	2-66	m/z=659.26(C ₅₁ H ₃₃ N=659.83)
2-67	m/z=649.28(C ₅₀ H ₃₅ N=649.84)	2-68	m/z=849.34(C ₆₆ H ₄₃ N=850.08)
2-69	m/z=850.33(C ₆₅ H ₄₂ N ₂ =851.07)	2-70	m/z=825.30(C ₆₃ H ₃₉ NO=826.01)
2-71	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)	2-72	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
2-73	m/z=693.32(C ₅₃ H ₂₃ D ₁₀ N=693.92)	2-74	m/z=699.29(C ₅₄ H ₃₇ N=699.90)
2-75	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-76	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)
2-77	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-78	m/z=849.34(C ₆₆ H ₄₃ N=850.08)
2-79	m/z=765.31(C ₅₇ H ₃₉ N ₃ =765.96)	2-80	m/z=775.29(C ₅₉ H ₃₇ NO=775.95)
2-81	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-82	m/z=609.25(C ₄₇ H ₃₁ N=609.77)
2-83	m/z=785.31(C ₆₁ H ₃₉ N=785.99)	2-84	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
2-85	m/z=729.21(C ₅₃ H ₃₁ NOS=729.90)	2-86	m/z=583.23(C ₄₅ H ₂₉ N=583.73)
2-87	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-88	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=)
2-89	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)	2-90	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
2-91	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-92	m/z=749.31(C ₅₈ H ₃₉ N=749.96)
2-93	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-94	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)
2-95	m/z=725.31(C ₅₆ H ₃₉ N=725.94)	2-96	m/z=773.31(C ₆₀ H ₃₉ N=773.98)
2-97	m/z=850.33(C ₆₅ H ₄₂ N ₂ =851.07)	2-98	m/z=699.26(C ₅₃ H ₃₃ NO=699.85)
2-99	m/z=715.23(C ₅₃ H ₃₃ NS=715.91)	2-100	m/z=739.29(C ₅₆ H ₃₇ NO=739.92)
2-101	m/z=709.28(C ₅₅ H ₃₅ N=709.89)	2-102	m/z=749.31(C ₅₈ H ₃₉ N=749.96)
2-103	m/z=901.37(C ₇₀ H ₄₇ N=902.15)	2-104	m/z=660.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ =660.82)
2-105	m/z=673.24(C ₅₁ H ₃₁ NO=673.82)	2-106	m/z=685.28(C ₅₃ H ₃₅ N=685.87)
2-107	m/z=775.32(C ₆₀ H ₄₁ N=776.00)	2-108	m/z=772.29(C ₅₉ H ₃₆ N ₂ =772.95)
2-109	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.18)	2-110	m/z=941.31(C ₇₁ H ₄₃ NS=942.19)
2-111	m/z=836.32(C ₆₄ H ₄₀ N ₂ =837.04)	2-112	m/z=913.35(C ₆₉ H ₄₃ N ₃ =914.12)
2-113	m/z=800.28(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ O=800.96)	2-114	m/z=841.28(C ₆₃ H ₃₉ NS=842.07)
2-115	m/z=877.37(C ₆₈ H ₄₇ N=878.13)		

[합성예 2]

본 발명에 따른 화학식 2로 표시되는 화합물(final product 2)은 하기 반응식 4와 같이 Sub 3과 Sub 4를 반응시켜 합성되며, 이에 한정되는 것은 아니다. E, F, R⁵, R⁶, R⁷, e, f, g, h, i, L², Ar³, X² 및 X³은 화학식 2에서 정의된 것과 동일하며, Hal¹은 Br 또는 Cl이다.

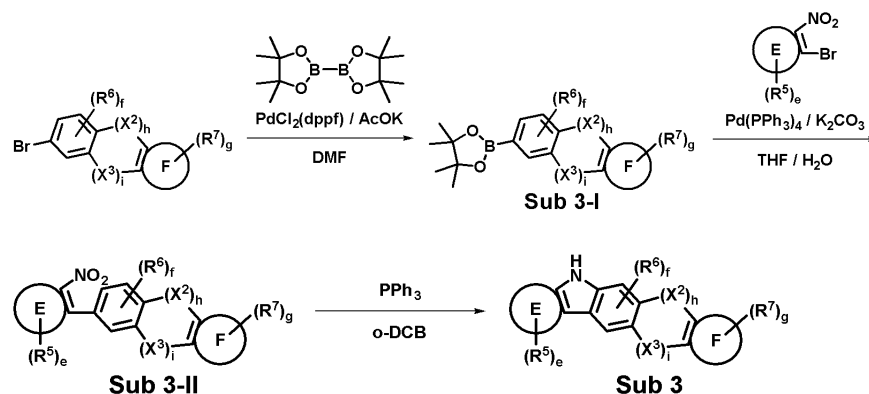
<반응식 4>



I. Sub 3의 합성

상기 반응식 4의 Sub 3은 하기 반응식 5의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

<반응식 5>



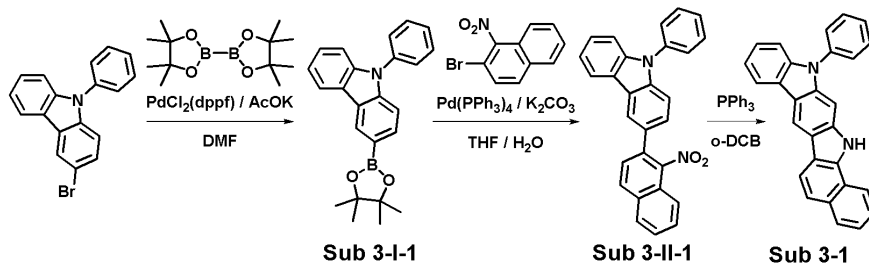
Sub 3-I-1의 합성에서 사용되는 출발물질인 카바졸 유도체는 본 출원인의 한국등록특허 제 10-1535606호 (2015.07.03일자 등록공고)에 개시된 합성방법으로 제조되었다.

Sub 3-I-1의 합성에서 사용되는 출발물질인 다이벤조싸이오오펜 유도체 또는 다이벤조퓨란은 본 출원인의 한국출원특허 2014-0074261 (2014.06.18일자 출원)에 개시된 합성방법으로 제조되었다.

Sub 3-I-1의 합성에서 사용되는 출발물질인 플루오렌 유도체는 본 출원인의 한국출원특허 2013-0056221 (2013.05.20일자 출원), 한국출원특허 2015-0083505 (2015.06.12일자 출원)에 개시된 합성방법으로 제조되었다.

Sub 3에 속하는 구체적 화합물의 합성에는 다음과 같다.

1. Sub 3-1 합성예



(1) Sub 3-I-1 합성

출발물질인 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (CAS Registry Number: 1153-85-1) (74.15 g, 230.13 mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF (1150 ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (64.28 g, 253.14 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (5.64 g, 6.90 mmol), KOAc (67.75 g, 690.39 mmol)를 첨가하고 120℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 64.58 g (수율: 76%)을 얻었다.

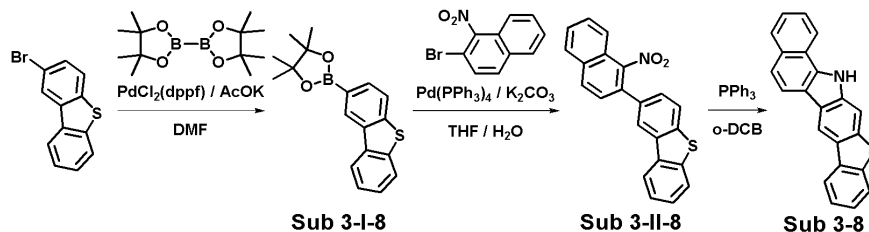
(2) Sub 3-II-1 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-1 (64.58 g, 174.89 mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (780 ml)로 녹인 후에, 2-bromo-1-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-62-0) (44.08 g, 174.89 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.06 g, 5.25 mmol), K₂CO₃ (72.51 g, 524.66 mmol), 물 (390 ml)을 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 57.99 g (수율: 80%)을 얻었다.

(3) Sub 3-1 합성

상기 합성에서 얻어진 3-II-1 (57.99 g, 139.92 mmol)를 둥근바닥플라스크에 o-dichlorobenzene (700 ml)으로 녹인 후에, triphenylphosphine (91.75 g, 349.79 mmol)을 첨가하고 200℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 o-dichlorobenzene을 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 20.34 g (수율: 38%)을 얻었다.

2. Sub 3-8 합성예



(1) Sub 3-I-8 합성

출발물질인 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (CAS Registry Number: 22439-61-8) (64.76 g, 246.10 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (68.74 g, 270.70 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (6.03 g, 7.38 mmol), KOAc (72.46 g, 738.29 mmol), DMF (1230 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 59.55 g (수율: 78%)을 얻었다.

(2) Sub 3-II-8 합성

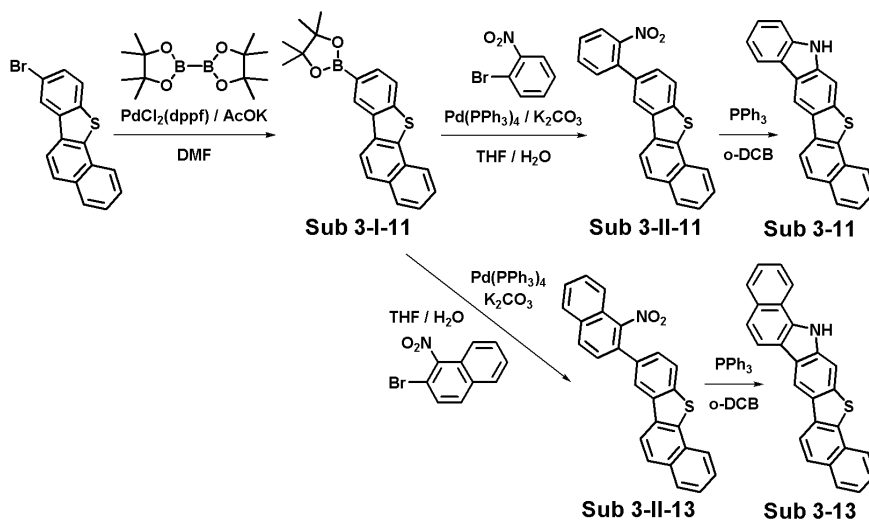
상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-8 (59.55 g, 191.96 mmol)에 2-bromo-1-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-62-0) (48.39 g, 191.96 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.65 g, 5.76 mmol), K₂CO₃ (79.59 g, 575.88 mmol), THF (850 ml), 물 (425 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 51.85 g (수율: 76%)을 얻

었다.

[0491] (3) Sub 3-8 합성

[0492] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-8 (51.85 g, 145.89 mmol)에 triphenylphosphine (95.66 g, 364.72 mmol), *o*-dichlorobenzene (730 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 16.04 g (수율: 34%)를 얻었다.

[0494] 3. Sub 3-11, Sub 3-13 합성예



[0495] (1) Sub 3-I-11 합성

[0496] 출발물질인 8-bromobenzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene (CAS Registry Number: 1628067-29-7) (166.05 g, 530.16 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (148.09 g, 583.17 mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (12.99 g, 15.90 mmol), KOAc (156.09 g, 1590.47 mmol), DMF (2650 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 131.79 g (수율: 69%)을 얻었다.

[0498] (2) Sub 3-II-11 합성

[0499] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-11 (55.69 g, 154.57 mmol)에 1-bromo-2-nitrobenzene (CAS Registry Number: 577-19-5) (31.23 g, 154.57 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (5.36 g, 4.64 mmol), K_2CO_3 (64.09 g, 463.72 mmol), THF (680 ml), 물 (340 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 42.30 g (수율: 77%)을 얻었다.

[0500] (3) Sub 3-11 합성

[0501] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-11 (42.30 g, 119.02 mmol)에 triphenylphosphine (78.04 g, 297.54 mmol), *o*-dichlorobenzene (595 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 11.93 g (수율: 31%)을 얻었다.

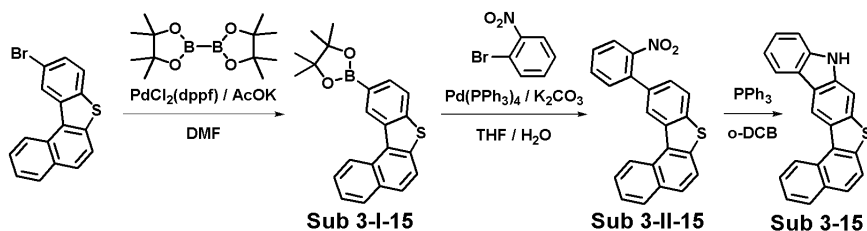
[0502] (4) Sub 3-II-13 합성

[0503] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-11 (48.67 g, 135.09 mmol)에 2-bromo-1-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-62-0) (34.05 g, 135.09 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (4.68 g, 4.05 mmol), K_2CO_3 (56.01 g, 405.27 mmol), THF (600 ml), 물 (300 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 39.99 g (수율: 73%)을 얻었다.

[0504] (5) Sub 3-13 합성

[0505] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-13 (39.99 g, 98.63 mmol)에 triphenylphosphine (64.67 g, 246.57 mmol), *o*-dichlorobenzene (490 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 12.16 g (수율: 33%)을 얻었다.

4. Sub 3-15 합성예



(1) Sub 3-I-15 합성

출발물질인 10-bromobenzo[b]naphtho[1,2-d]thiophene (CAS Registry Number: 1656983-12-8) (66.70 g, 212.96 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (59.49 g, 234.25 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (5.22 g, 6.39 mmol), KOAc (62.70 g, 638.87 mmol), DMF (1065 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 53.71 g (수율: 70%)을 얻었다.

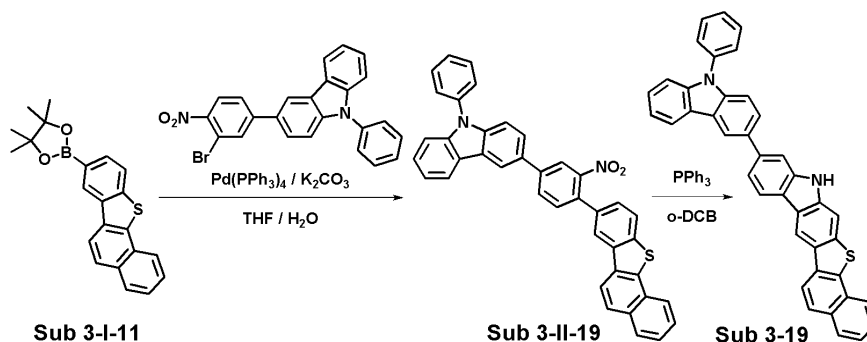
(2) Sub 3-II-15 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-15 (53.71 g, 149.08 mmol)에 1-bromo-2-nitrobenzene (CAS Registry Number: 577-19-5) (30.12 g, 149.08 mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.17 g, 4.47 mmol), K₂CO₃ (61.81 g, 447.24 mmol), THF (660 ml), 물 (330 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 39.74 g (수율: 75%)을 얻었다.

(3) Sub 3-15 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-15 (39.74 g, 111.81 mmol)에 triphenylphosphine (73.32 g, 279.54 mmol), o-dichlorobenzene (560 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 11.57 g (수율: 32%)을 얻었다.

5. Sub 3-19 합성예



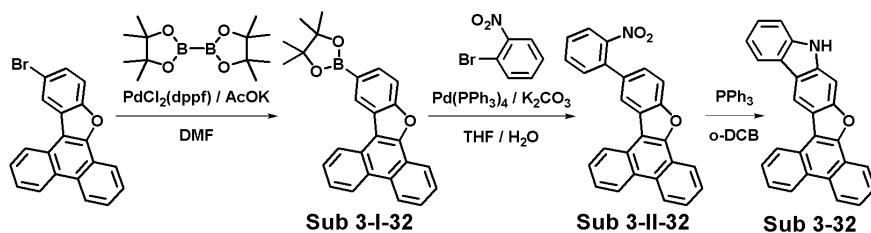
(1) Sub 3-II-19 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-11 (26.70 g, 74.11 mmol)에 3-(4-bromo-3-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole (CAS Registry Number: 1526986-96-8) (32.85 g, 74.11 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.57 g, 2.22 mmol), K₂CO₃ (30.73 g, 222.33 mmol), THF (330 ml), 물 (165 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 30.07 g (수율: 68%)을 얻었다.

(2) Sub 3-19 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-19 (30.07 g, 50.39 mmol)에 triphenylphosphine (33.04 g, 125.98 mmol), o-dichlorobenzene (250 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.24 g (수율: 36%)을 얻었다.

6. Sub 3-32 합성예



(1) Sub 3-I-32 합성

출발물질인 12-bromophenanthro[9,10-b]benzofuran (CAS Registry Number: 1627917-35-4) (69.00 g, 198.73 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (55.51 g, 218.60 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.87 g, 5.96 mmol), KOAc (58.51 g, 596.18 mmol), DMF (995 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 52.50 g (수율: 67%)을 얻었다.

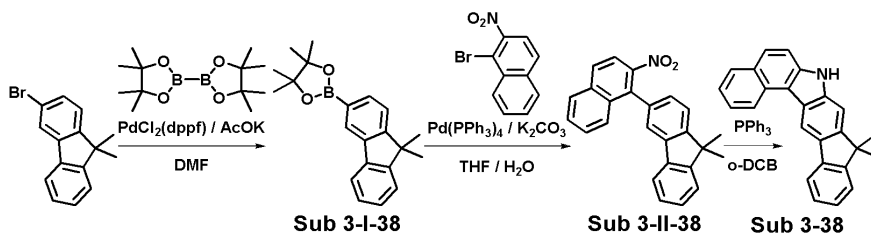
(2) Sub 3-II-32 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-32 (52.50 g, 133.15 mmol)에 1-bromo-2-nitrobenzene (CAS Registry Number: 577-19-5) (26.90 g, 133.15 mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.62 g, 3.99 mmol), K₂CO₃ (55.21 g, 399.46 mmol), THF (590 ml), 물 (295 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 40.44 g (수율: 78%)을 얻었다.

(3) Sub 3-32 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-32 (40.44 g, 103.85 mmol)에 triphenylphosphine (68.10 g, 259.61 mmol), o-dichlorobenzene (520 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 14.48 g (수율: 39%)을 얻었다.

7. Sub 3-38 합성예



(1) Sub 3-I-38 합성

출발물질인 3-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (CAS Registry Number: 1190360-23-6) (61.30 g, 224.40 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (62.68 g, 246.84 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (5.50 g, 6.73 mmol), KOAc (66.07 g, 673.21 mmol), DMF (1120 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 47.43 g (수율: 66%)을 얻었다.

(2) Sub 3-II-38 합성

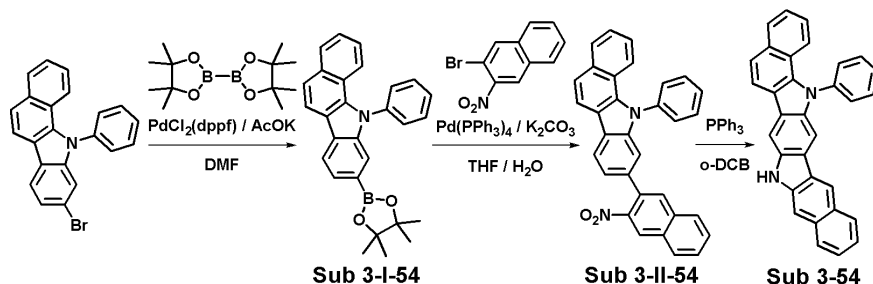
상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-38 (47.43 g, 148.11 mmol)에 1-bromo-2-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-55-1) (37.33 g, 148.11 mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.13 g, 4.44 mmol), K₂CO₃ (61.41 g, 444.32 mmol), THF (660 ml), 물 (330 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 37.89 g (수율: 70%)을 얻었다.

(3) Sub 3-38 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-38 (37.80 g, 103.69 mmol)에 triphenylphosphine (67.99 g, 259.22 mmol), o-dichlorobenzene (520 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 12.45 g (수율: 36%)을 얻었다.

다.

8. Sub 3-54 합성예



(1) Sub 3-I-54 합성

출발물질인 9-bromo-11-phenyl-11H-benzo[a]carbazole (CAS Registry Number: 1374003-98-1) (53.63 g, 144.06 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (40.24 g, 158.47 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.53 g, 4.32 mmol), KOAc (42.41 g, 432.19 mmol), DMF (720 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 50.14 g (수율: 83%)을 얻었다.

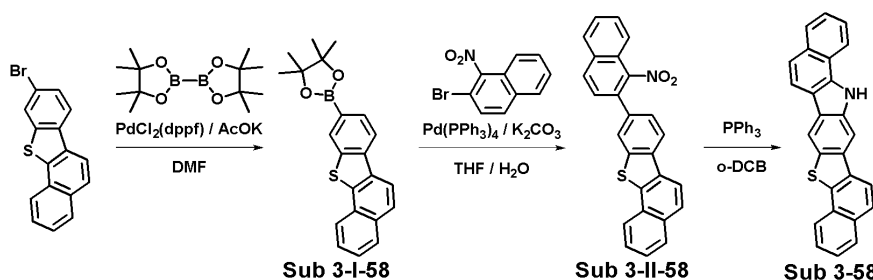
(2) Sub 3-II-54 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-54 (50.14 g, 119.57 mmol)에 2-bromo-3-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 67116-33-0) (30.14 g, 119.57 mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.15 g, 3.59 mmol), K₂CO₃ (49.57 g, 358.72 mmol), THF (530 ml), 물 (265 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 41.10 g (수율: 74%)을 얻었다.

(3) Sub 3-54 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-54 (41.10 g, 88.48 mmol)에 triphenylphosphine (58.02 g, 221.20 mmol), o-dichlorobenzene (440 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 15.69 g (수율: 41%)을 얻었다.

9. Sub 3-58 합성예



(1) Sub 3-I-58 합성

출발물질인 9-bromobenzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene (CAS Registry Number: 1628073-09-5) (59.90 g, 191.25 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (53.42 g, 210.37 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.69 g, 5.74 mmol), KOAc (56.31 g, 573.74 mmol), DMF (955 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 46.85 g (수율: 68%)을 얻었다.

(2) Sub 3-II-58 합성

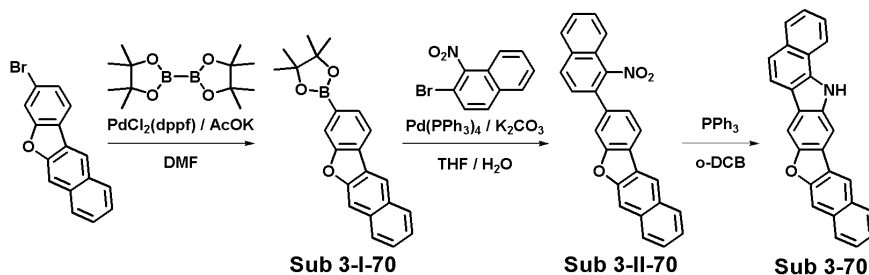
상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-58 (46.85 g, 130.04 mmol)에 2-bromo-1-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-62-0) (32.78 g, 130.04 mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.51 g, 3.90 mmol), K₂CO₃ (53.91 g, 390.11 mmol), THF (580 ml), 물 (290 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 39.54 g (수율: 75%)을 얻었다.

었다.

[0556] (3) Sub 3-58 합성

[0557] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-58 (39.54 g, 97.52 mmol)에 triphenylphosphine (63.94 g, 243.79 mmol), *o*-dichlorobenzene (490 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 11.29 g (수율: 31%)을 얻었다.

[0559] 10. Sub 3-70 합성예



[0561] (1) Sub 3-I-70 합성

[0562] 출발물질인 3-bromonaphtho[2,3-b]benzofuran (CAS Registry Number: 1256544-32-7) (42.53 g, 143.13 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (39.98 g, 157.44 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.51 g, 4.29 mmol), KOAc (42.14 g, 429.38 mmol), DMF (715 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 39.41 g (수율: 80%)을 얻었다.

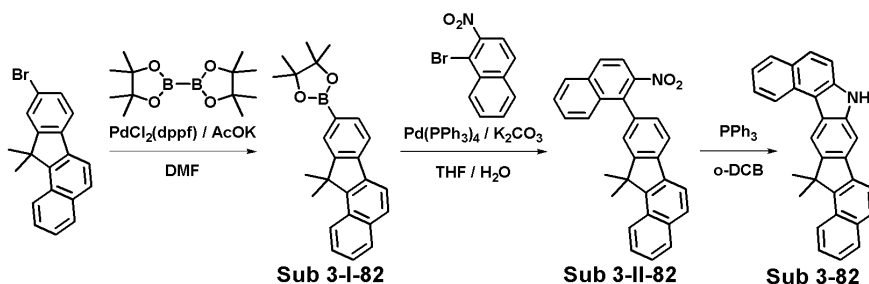
[0563] (2) Sub 3-II-70 합성

[0564] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-70 (39.41 g, 114.49 mmol)에 2-bromo-1-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-62-0) (28.86 g, 114.49 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.97 g, 3.43 mmol), K₂CO₃ (47.47 g, 343.47 mmol), THF (500 ml), 물 (250 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 37.00 g (수율: 83%)을 얻었다.

[0565] (3) Sub 3-70 합성

[0566] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-70 (37.00 g, 95.02 mmol)에 triphenylphosphine (62.30 g, 237.54 mmol), *o*-dichlorobenzene (475 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 11.89 g (수율: 35%)을 얻었다.

[0568] 11. Sub 3-82 합성예



[0570] (1) Sub 3-I-82 합성

[0571] 출발물질인 9-bromo-11,11-dimethyl-11H-benzo[a]fluorene (CAS Registry Number: 1198396-29-0) (76.23 g, 235.84 mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (65.88 g, 259.42 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (5.78 g, 7.08 mmol), KOAc (69.44 g, 707.51 mmol), DMF (1180 ml)를 첨가하고 상기 Sub 3-I-1 합성법을 사용하여 생성물 55.02 g (수율: 63%)을 얻었다.

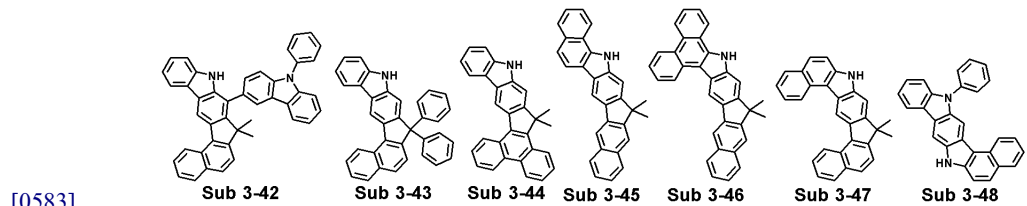
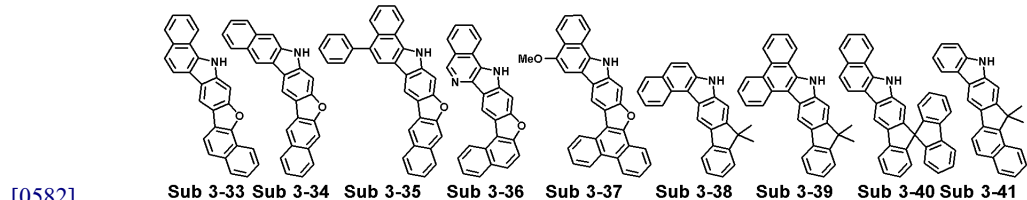
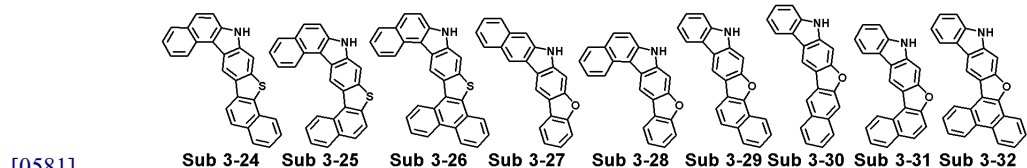
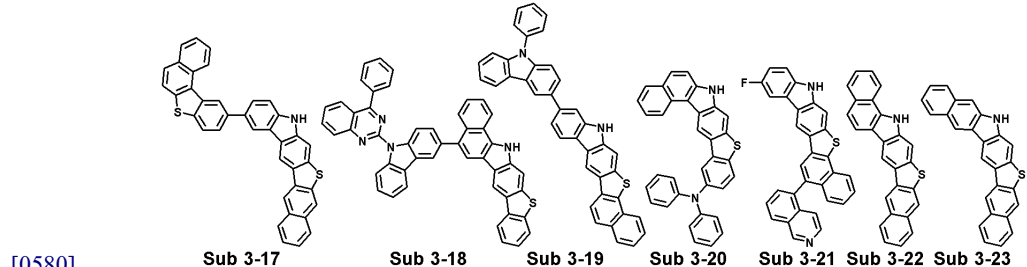
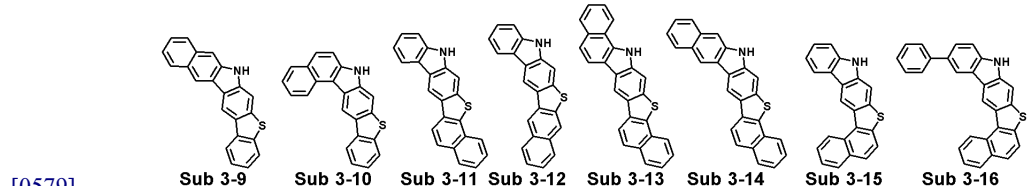
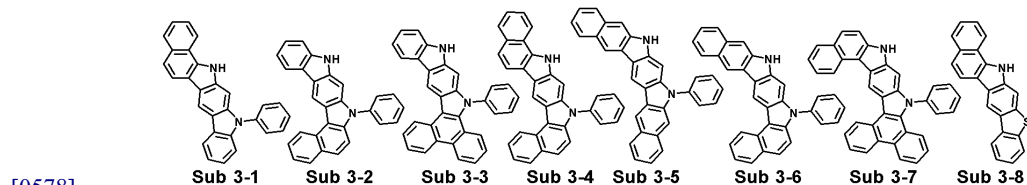
[0572] (2) Sub 3-II-82 합성

[0573] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-I-82 (55.02 g, 148.58 mmol)에 1-bromo-2-nitronaphthalene (CAS Registry Number: 4185-55-1) (37.45 g, 148.58 mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.15 g, 4.46 mmol), K₂CO₃ (61.60 g, 445.75 mmol), THF (660 ml), 물 (330 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-II-1 합성법을 사용하여 생성물 45.07 g (수율: 73%)을 얻었다.

[0574] (3) Sub 3-82 합성

[0575] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-II-82 (45.07 g, 108.47 mmol)에 triphenylphosphine (71.13 g, 271.19 mmol), o-dichlorobenzene (540 ml)을 첨가하고 상기 Sub 3-1 합성법을 사용하여 생성물 12.90 g (수율: 31%)을 얻었다.

[0577] Sub 3에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 4는 Sub 3에 속하는 일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.



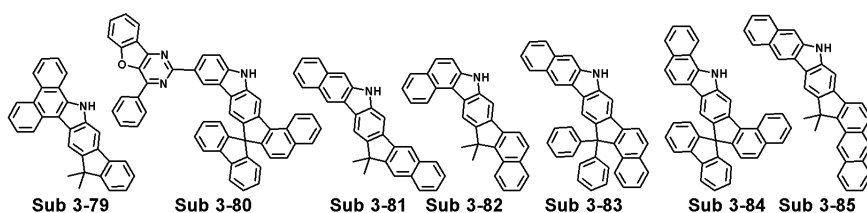
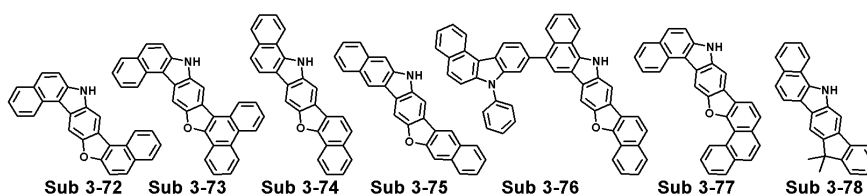
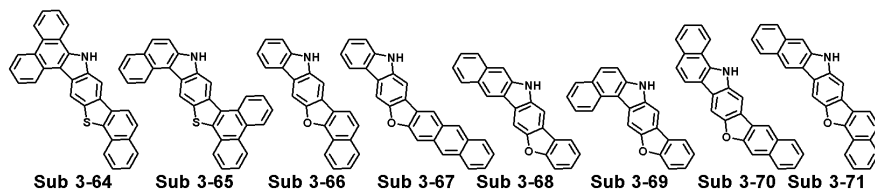
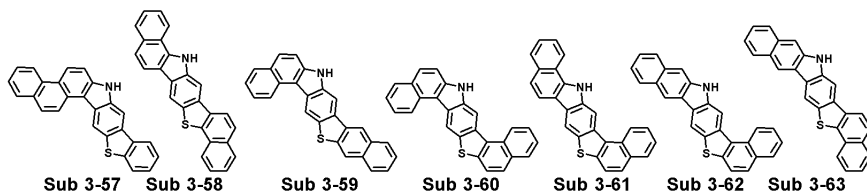
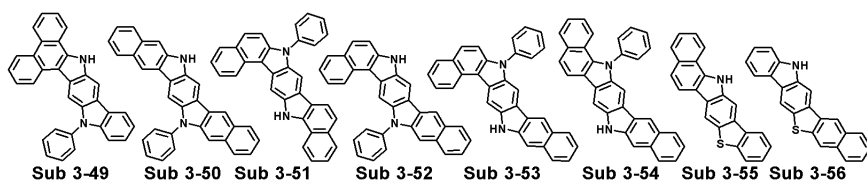


표 4

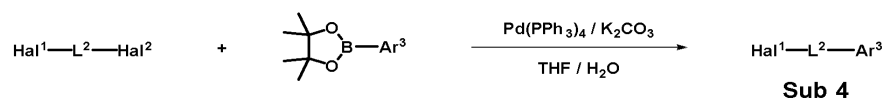
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 3-1	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.47)	Sub 3-2	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.47)
Sub 3-3	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3-4	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)
Sub 3-5	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3-6	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)
Sub 3-7	m/z=482.18(C ₃₆ H ₂₂ N ₂ =482.59)	Sub 3-8	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3-9	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 3-10	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3-11	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 3-12	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3-13	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-14	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-15	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 3-16	m/z=399.11(C ₂₈ H ₁₇ NS=399.51)
Sub 3-17	m/z=555.11(C ₃₈ H ₂₁ NS ₂ =555.71)	Sub 3-18	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.84)
Sub 3-19	m/z=564.17(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ S=564.71)	Sub 3-20	m/z=490.15(C ₃₄ H ₂₂ N ₂ S=490.62)
Sub 3-21	m/z=468.11(C ₃₁ H ₁₇ FN ₂ S=468.55)	Sub 3-22	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-23	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-24	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-25	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-26	m/z=423.11(C ₃₀ H ₁₇ NS=423.53)
Sub 3-27	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3-28	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)
Sub 3-29	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3-30	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)
Sub 3-31	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	Sub 3-32	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)

Sub 3-33	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3-34	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3-35	m/z=433.15(C ₃₂ H ₁₉ NO=433.51)	Sub 3-36	m/z=358.11(C ₂₅ H ₁₄ N ₂ O=358.40)
Sub 3-37	m/z=437.14(C ₃₁ H ₁₉ NO ₂ =437.50)	Sub 3-38	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)
Sub 3-39	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3-40	m/z=455.17(C ₃₅ H ₂₁ N=455.56)
Sub 3-41	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)	Sub 3-42	m/z=574.24(C ₄₃ H ₃₀ N ₂ =574.73)
Sub 3-43	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.58)	Sub 3-44	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3-45	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3-46	m/z=433.18(C ₃₃ H ₂₃ N=433.55)
Sub 3-47	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3-48	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.47)
Sub 3-49	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3-50	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)
Sub 3-51	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3-52	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)
Sub 3-53	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)	Sub 3-54	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.53)
Sub 3-55	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 3-56	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)
Sub 3-57	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-58	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-59	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-60	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-61	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-62	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)
Sub 3-63	m/z=373.09(C ₂₆ H ₁₅ NS=373.47)	Sub 3-64	m/z=423.11(C ₃₀ H ₁₇ NS=423.53)
Sub 3-65	m/z=423.11(C ₃₀ H ₁₇ NS=423.53)	Sub 3-66	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)
Sub 3-67	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3-68	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)
Sub 3-69	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.35)	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=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3-73	m/z=407.13(C ₃₀ H ₁₇ NO=407.47)	Sub 3-74	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)
Sub 3-75	m/z=357.12(C ₂₆ H ₁₅ NO=357.41)	Sub 3-76	m/z=648.22(C ₄₈ H ₂₈ N ₂ O=648.77)
Sub 3-77	m/z=407.13(C ₃₀ H ₁₇ NO=407.47)	Sub 3-78	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)
Sub 3-79	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3-80	m/z=699.23(C ₅₁ H ₂₉ N ₃ O=699.81)
Sub 3-81	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)	Sub 3-82	m/z=383.17(C ₂₉ H ₂₁ N=383.49)
Sub 3-83	m/z=507.20(C ₃₉ H ₂₅ N=507.64)	Sub 3-84	m/z=505.18(C ₃₉ H ₂₃ N=505.62)
Sub 3-85	m/z=433.18(C ₃₃ H ₂₃ N=433.55)		

II. Sub 4의 합성

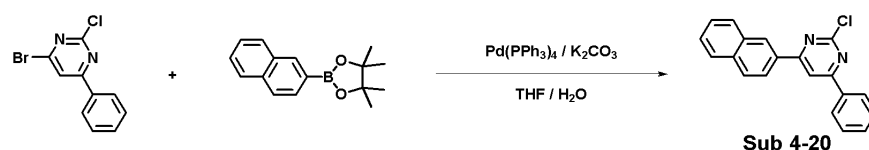
상기 반응식 4의 Sub 4는 반응식 6의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 이때, Hal¹ 및 Hal²는 Br 또는 Cl이다.

<반응식 6>



Sub 4에 속하는 구체적 화합물의 합성에는 다음과 같다.

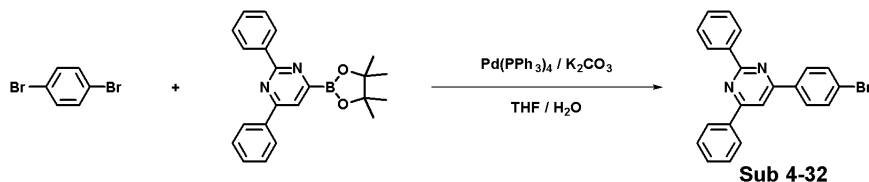
1. Sub 4-20 합성예



출발물질인 4-bromo-2-chloro-6-phenylpyrimidine (CAS Registry Number: 1412955-57-7) (21.85 g, 81.07

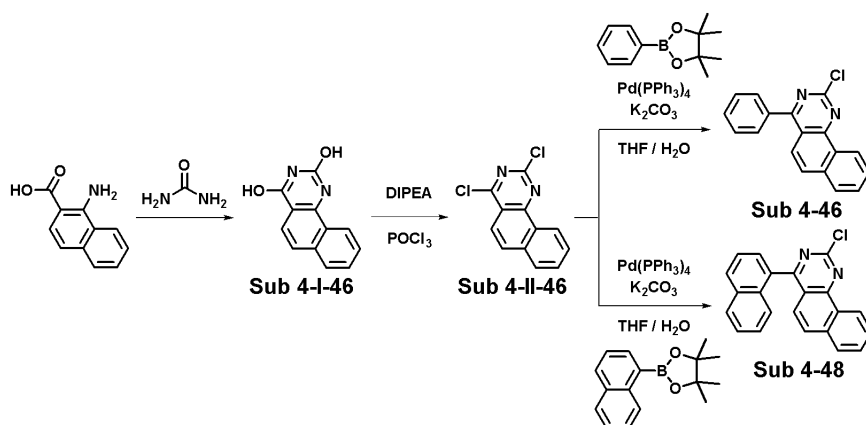
mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF (280 ml)로 녹인 후에, 4,4,5,5-tetramethyl-2-(naphthalen-2-yl)-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 256652-04-7) (22.66 g, 89.17 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.75 g, 3.24 mmol), K₂CO₃ (33.61 g, 243.20 mmol), 물 (140 ml)을 첨가하고 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 19.52 g (수율: 76%)을 얻었다.

2. Sub 4-32 합성예



출발물질인 1,4-dibromobenzene (CAS Registry Number: 106-37-6) (17.80 g, 75.45 mmol)에 2,4-diphenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine (CAS Registry Number: 1402237-88-0) (29.73 g, 83.00 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.49 g, 3.02 mmol), K₂CO₃ (31.28 g, 226.36 mmol), THF (260 ml), 물 (130 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 21.33 g (수율: 73%)를 얻었다.

3. Sub 4-46, Sub 4-48 합성예



(1) Sub 4-I-46 합성

출발물질인 1-amino-2-naphthoic acid (CAS Registry Number: 4919-43-1) (75.11 g, 401.25 mmol)를 둥근바닥 플라스크에 urea (CAS Registry Number: 57-13-6) (168.69 g, 2808.75 mmol)와 함께 넣고 160℃에서 교반하였다. TLC로 반응을 확인한 후, 100℃까지 냉각시키고 물 (200 ml)을 첨가하여 1시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 생성된 고체를 감압여과하고 물로 세척 후 건조하여 생성물 63.86 g (수율: 75%)을 얻었다.

(2) Sub 4-II-46 합성

상기 합성에서 얻어진 Sub 4-I-46 (63.86 g, 300.94 mmol)을 둥근바닥플라스크에 POCl₃ (200 ml)를 상온에서 녹인 후에, *N,N*-Diisopropylethylamine (97.23 g, 752.36 mmol)을 천천히 적가시킨 후, 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 농축한 후 얼음물 (500 ml)을 넣고 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 생성된 고체를 감압여과하고 건조하여 생성물 67.47 g (수율: 90%)을 얻었다.

(3) Sub 4-46 합성

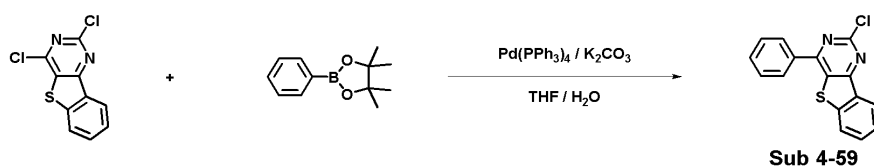
상기 합성에서 얻어진 Sub 4-II-46 (33.60 g, 134.89 mmol)에 2-phenyl-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 24388-23-6) (30.28 g, 148.38 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.23 g, 5.40 mmol),

K₂CO₃ (55.93 g, 404.67 mmol), THF (470 ml), 물 (235 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 22.36 g (수율: 57%)을 얻었다.

[0614] (4) Sub 4-48 합성

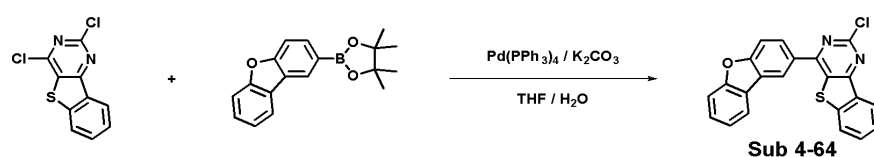
상기 합성에서 얻어진 Sub 4-II-46 (27.05 g, 108.60 mmol)에 4,4,5,5-tetramethyl-2-(naphthalen-1-yl)-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 68716-52-9) (30.36 g, 119.45 mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.02 g, 4.34 mmol), K₂CO₃ (45.03 g, 325.79 mmol), THF (380 ml), 물 (190 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 22.21 g (수율: 60%)을 얻었다.

[0617] 4. Sub 4-59 합성예



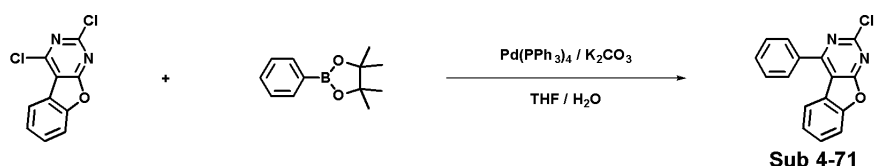
출발물질인 2,4-dichlorobenzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine (CAS Registry Number: 160199-05-3) (38.00 g, 148.95 mmol)에 4,4,5,5-tetramethyl-2-phenyl-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 24388-23-6) (33.44 g, 163.84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.88 g, 5.96 mmol), K₂CO₃ (61.76 g, 446.85 mmol), THF (520 ml), 물 (260 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 17.68 g (수율: 40%)을 얻었다.

[0621] 5. Sub 4-64 합성예



출발물질인 2,4-dichlorobenzo[4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine (CAS Registry Number: 160199-05-3) (35.15 g, 137.78 mmol)에 2-(dibenzo[b,d]furan-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 947770-80-1) (44.58 g, 151.56 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.37 g, 5.51 mmol), K₂CO₃ (57.13 g, 413.33 mmol), THF (480 ml), 물 (240 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 22.92 g (수율: 43%)을 얻었다.

[0625] 6. Sub 4-71 합성예

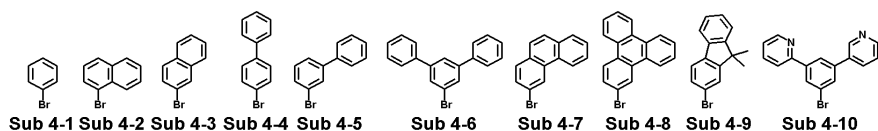


출발물질인 2,4-dichlorobenzofuro[2,3-d]pyrimidine (CAS Registry Number: 1801325-92-7) (41.43 g, 173.30 mmol)에 4,4,5,5-tetramethyl-2-phenyl-1,3,2-dioxaborolane (CAS Registry Number: 24388-23-6) (38.90 g, 190.63 mmol), Pd(PPh₃)₄ (8.01 g, 6.93 mmol), K₂CO₃ (71.86 g, 519.91 mmol), THF (600 ml), 물 (300 ml)을 첨가하고 상기 Sub 4-20 합성법을 사용하여 생성물 18.49 g (수율: 38%)을 얻었다.

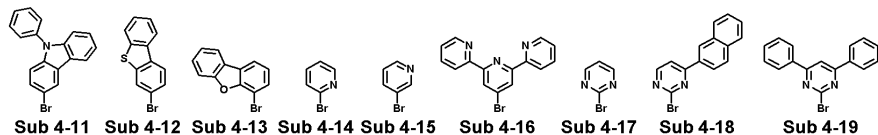
Sub 4에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 5는 Sub 4에 속하는

일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.

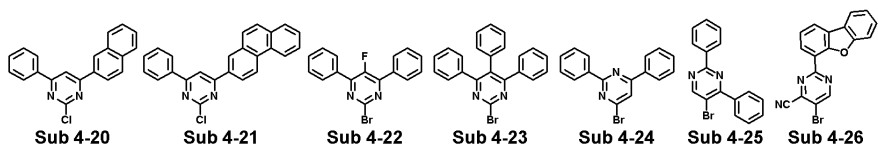
[0630]



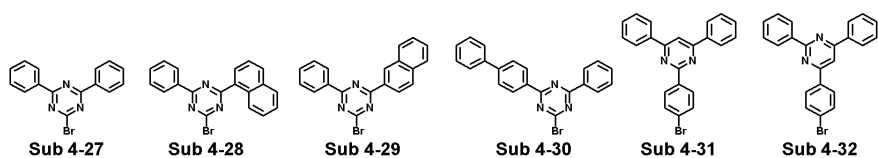
[0631]



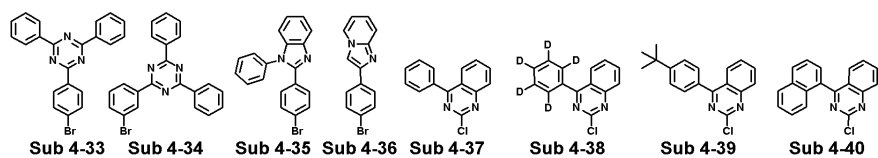
[0632]



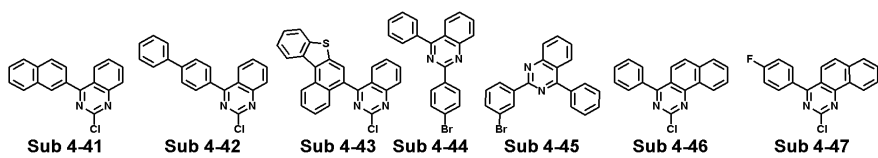
[0633]



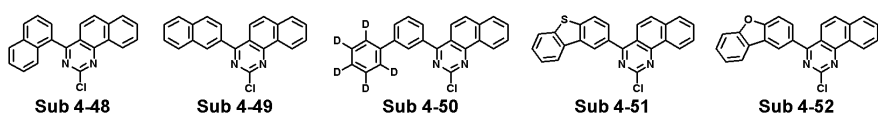
[0634]



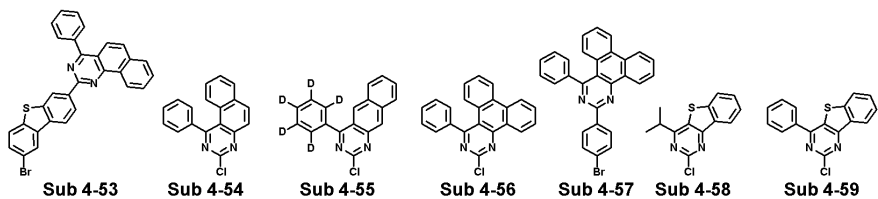
[0635]



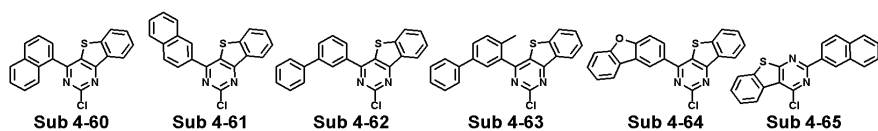
[0636]



[0637]



[0638]



[0639]

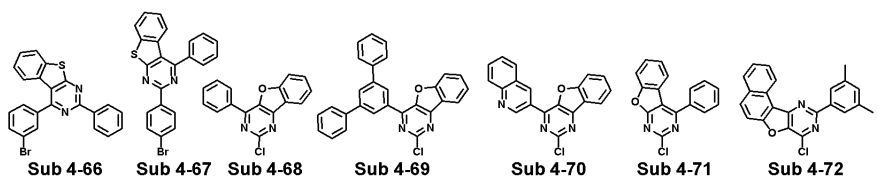


표 5

[0641]

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=233.11)
Sub 4-5	m/z=231.99(C ₁₂ H ₉ Br=233.11)	Sub 4-6	m/z=308.02(C ₁₈ H ₁₃ Br=309.21)
Sub 4-7	m/z=255.99(C ₁₄ H ₉ Br=257.13)	Sub 4-8	m/z=306.00(C ₁₈ H ₁₁ Br=307.19)
Sub 4-9	m/z=272.02(C ₁₅ H ₁₃ Br=273.17)	Sub 4-10	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)
Sub 4-11	m/z=321.02(C ₁₈ H ₁₂ BrN=322.21)	Sub 4-12	m/z=261.95(C ₁₂ H ₇ BrS=263.15)
Sub 4-13	m/z=245.97(C ₁₂ H ₇ BrO=247.09)	Sub 4-14	m/z=156.95(C ₅ H ₄ BrN=158.00)
Sub 4-15	m/z=156.95(C ₅ H ₄ BrN=158.00)	Sub 4-16	m/z=311.01(C ₁₅ H ₁₀ BrN ₃ =312.17)
Sub 4-17	m/z=157.95(C ₄ H ₃ BrN ₂ =158.99)	Sub 4-18	m/z=283.99(C ₁₄ H ₉ BrN ₂ =285.14)
Sub 4-19	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 4-20	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.79)
Sub 4-21	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.85)	Sub 4-22	m/z=328.00(C ₁₆ H ₁₀ BrFN ₂ =329.17)
Sub 4-23	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.28)	Sub 4-24	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)
Sub 4-25	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 4-26	m/z=348.99(C ₁₇ H ₉ BrN ₃ O=350.18)
Sub 4-27	m/z=311.01(C ₁₅ H ₁₀ BrN ₃ =312.17)	Sub 4-28	m/z=361.02(C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.23)
Sub 4-29	m/z=361.02(C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.23)	Sub 4-30	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.27)
Sub 4-31	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.28)	Sub 4-32	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.28)
Sub 4-33	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.27)	Sub 4-34	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.27)
Sub 4-35	m/z=348.03(C ₁₉ H ₁₃ BrN ₂ =349.23)	Sub 4-36	m/z=271.99(C ₁₃ H ₉ BrN ₂ =273.13)
Sub 4-37	m/z=240.05(C ₁₄ H ₉ CIN ₂ =240.69)	Sub 4-38	m/z=245.08(C ₁₄ H ₉ D ₅ CIN ₂ =245.72)
Sub 4-39	m/z=296.11(C ₁₈ H ₁₇ CIN ₂ =296.80)	Sub 4-40	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)
Sub 4-41	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)	Sub 4-42	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.79)
Sub 4-43	m/z=396.05(C ₂₄ H ₁₃ CIN ₂ S=396.89)	Sub 4-44	m/z=360.03(C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.24)
Sub 4-45	m/z=360.03(C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.24)	Sub 4-46	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)
Sub 4-47	m/z=308.05(C ₁₈ H ₁₀ CIFN ₂ =308.74)	Sub 4-48	m/z=340.08(C ₂₂ H ₁₃ CIN ₂ =340.81)
Sub 4-49	m/z=340.08(C ₂₂ H ₁₃ CIN ₂ =340.81)	Sub 4-50	m/z=371.12(C ₂₄ H ₁₀ D ₅ CIN ₂ =371.88)
Sub 4-51	m/z=396.05(C ₂₄ H ₁₃ CIN ₂ S=396.89)	Sub 4-52	m/z=380.07(C ₂₄ H ₁₃ CIN ₂ O=380.83)
Sub 4-53	m/z=516.03(C ₃₀ H ₁₇ BrN ₂ S=517.44)	Sub 4-54	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)
Sub 4-55	m/z=295.09(C ₁₈ H ₆ D ₅ CIN ₂ =295.78)	Sub 4-56	m/z=340.08(C ₂₂ H ₁₃ CIN ₂ =340.81)
Sub 4-57	m/z=460.06(C ₂₈ H ₁₇ BrN ₂ =461.36)	Sub 4-58	m/z=262.03(C ₁₃ H ₁₁ CIN ₂ S=262.76)
Sub 4-59	m/z=296.02(C ₁₆ H ₉ CIN ₂ S=296.77)	Sub 4-60	m/z=346.03(C ₂₀ H ₁₁ CIN ₂ S=346.83)
Sub 4-61	m/z=346.03(C ₂₀ H ₁₁ CIN ₂ S=346.83)	Sub 4-62	m/z=372.05(C ₂₂ H ₁₃ CIN ₂ S=372.87)
Sub 4-63	m/z=386.06(C ₂₃ H ₁₅ CIN ₂ S=386.90)	Sub 4-64	m/z=386.03(C ₂₂ H ₁₁ CIN ₂ OS=386.85)
Sub 4-65	m/z=346.03(C ₂₀ H ₁₁ CIN ₂ S=346.83)	Sub 4-66	m/z=416.00(C ₂₂ H ₁₃ BrN ₂ S=417.32)
Sub 4-67	m/z=416.00(C ₂₂ H ₁₃ BrN ₂ S=417.32)	Sub 4-68	m/z=280.04(C ₁₆ H ₉ CIN ₂ O=280.71)
Sub 4-69	m/z=432.10(C ₂₈ H ₁₇ CIN ₂ O=432.91)	Sub 4-70	m/z=331.05(C ₁₉ H ₁₀ CIN ₃ O=331.76)
Sub 4-71	m/z=280.04(C ₁₆ H ₉ CIN ₂ O=280.71)	Sub 4-72	m/z=358.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ O=358.83)

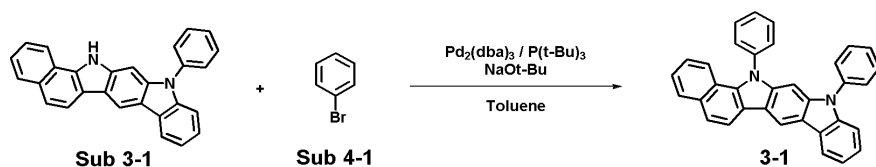
[0643]

III. Final Product 2 합성

[0645]

Sub 3 (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 Toluene으로 녹인 후에, Sub 4 (1.1 당량), Pd₂(dba)₃ (0.03 당량), (t-Bu)₃P (0.06 당량), NaOt-Bu (3 당량)을 100℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Final product 2를 얻었다.

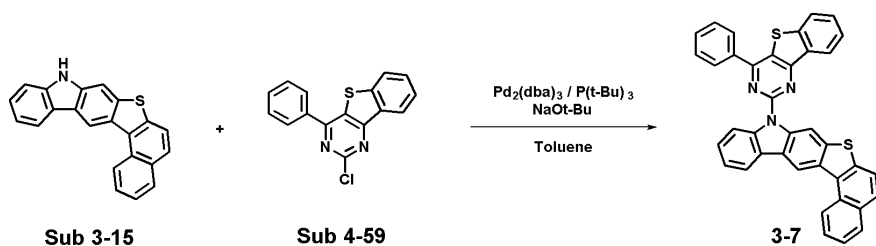
[0647] 1. 3-1 합성예



[0648]

[0649] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-1 (10.35 g, 27.06 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (285ml)으로 녹인 후에, Sub 4-1 (CAS Registry Number: 108-86-1) (4.67 g, 29.77 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.74 g, 0.81 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.33 g, 1.62 mmol), NaOt-Bu (7.80 g, 81.18 mmol)을 첨가하고 100℃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 9.55 g (수율: 77%)을 얻었다.

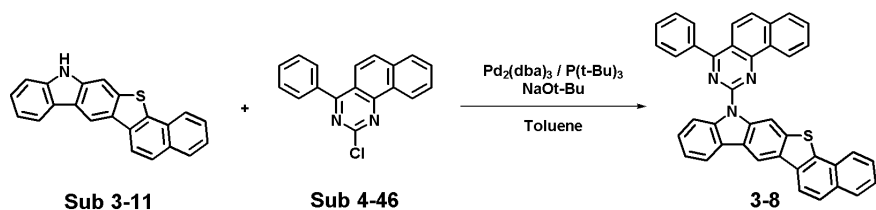
[0651] 2. 3-7 합성예



[0652]

[0653] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-15 (7.60 g, 23.50 mmol)에 Sub 4-59 (7.67 g, 25.85 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.65 g, 0.70 mmol) $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.29 g, 1.41 mmol), NaOt-Bu (6.78 g, 70.50 mmol), toluene (250 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.74 g (수율: 71%)을 얻었다.

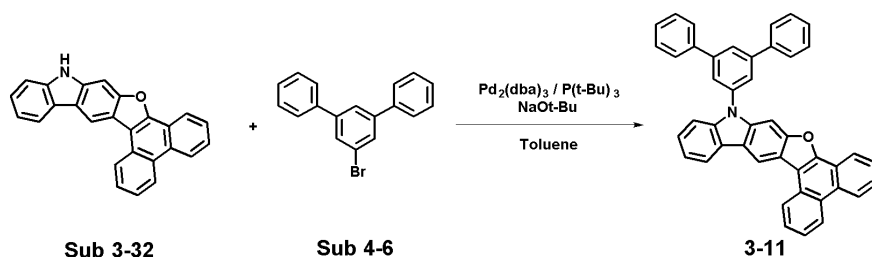
[0655] 3. 3-8 합성예



[0656]

[0657] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-11 (8.00 g, 24.74 mmol)에 Sub 4-46 (7.91 g, 27.21 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.68 g, 0.74 mmol) $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.30 g, 1.48 mmol), NaOt-Bu (7.13 g, 74.21 mmol), toluene (260 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.43 g (수율: 73%)을 얻었다.

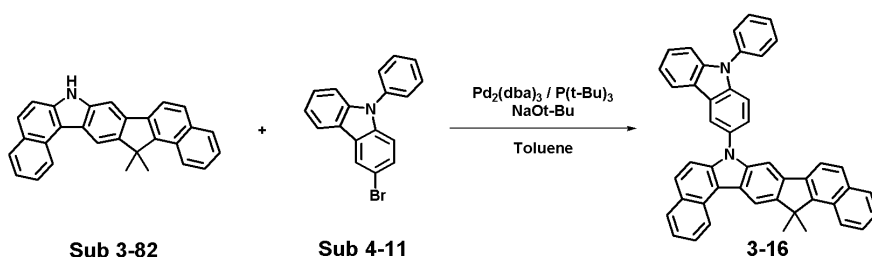
[0659] 4. 3-11 합성예



[0660]

[0661] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-32 (8.12 g, 22.72 mmol)에 Sub 4-6 (CAS Registry Number: 103068-20-8) (7.73 g, 24.99 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.62 g, 0.68 mmol) P(*t*-Bu)₃ (0.28 g, 1.36 mmol), NaOt-Bu (6.55 g, 68.16 mmol), toluene (240 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.85 g (수율: 74%)을 얻었다.

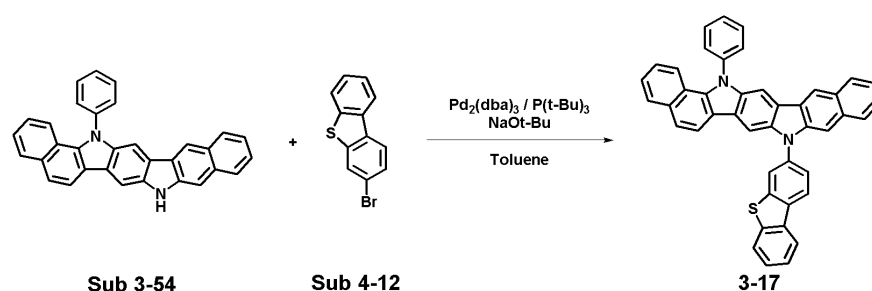
[0663] 5. 3-16 합성예



[0664]

[0665] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-82 (8.40 g, 21.90 mmol)에 Sub 4-11 (CAS Registry Number: 1153-85-1) (7.76 g, 24.09 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.60 g, 0.66 mmol) P(*t*-Bu)₃ (0.27 g, 1.31 mmol), NaOt-Bu (6.32 g, 65.71 mmol), toluene (230 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.31 g (수율: 68%)을 얻었다.

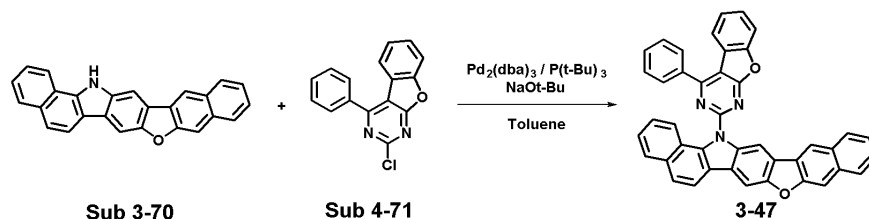
[0667] 6. 3-17 합성예



[0668]

[0669] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-54 (9.27 g, 21.43 mmol)에 Sub 4-12 (CAS Registry Number: 97511-04-1) (6.20 g, 23.58 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.59 g, 0.64 mmol) P(*t*-Bu)₃ (0.26 g, 1.29 mmol), NaOt-Bu (6.18 g, 64.30 mmol), toluene (225 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.09 g (수율: 69%)을 얻었다.

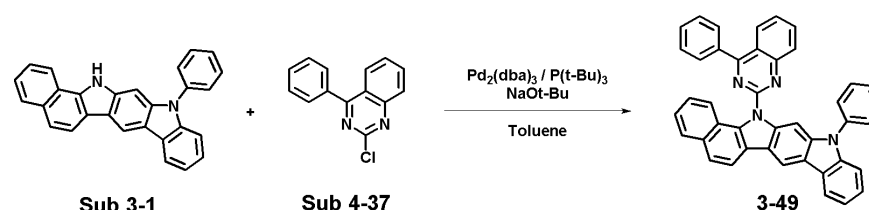
[0671] 7. 3-47 합성예



[0672]

[0673] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-70 (8.09 g, 22.64 mmol)에 Sub 4-71 (6.99 g, 24.90 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.62 g, 0.68 mmol) $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.27 g, 1.36 mmol), NaOt-Bu (6.53 g, 67.91 mmol), toluene (240 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.08 g (수율: 74%)을 얻었다.

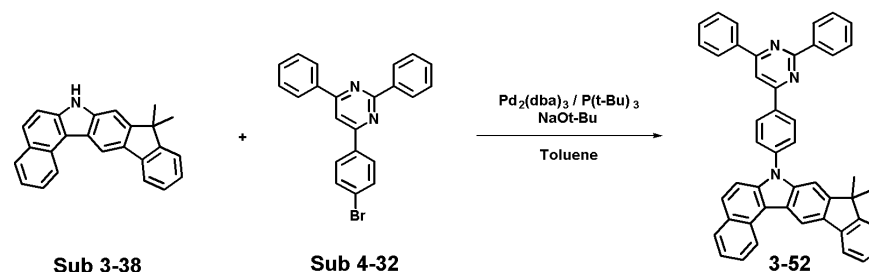
[0675] 8. 3-49 합성예



[0676]

[0677] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-1 (9.48 g, 24.79 mmol)에 Sub 4-37 (CAS Registry Number: 29874-83-7) (6.56 g, 27.26 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.68 g, 0.74 mmol) $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.30 g, 1.49 mmol), NaOt-Bu (7.15 g, 74.36 mmol), toluene (260 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.18 g (수율: 70%)을 얻었다.

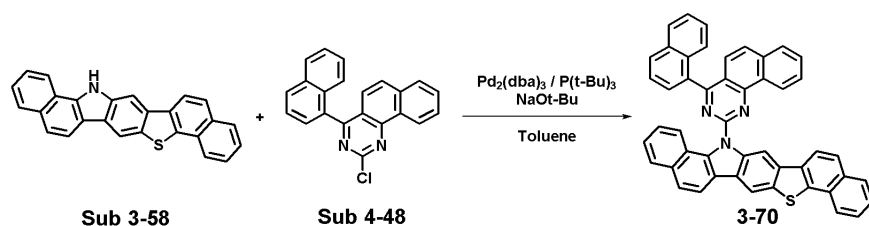
[0679] 9. 3-52 합성예



[0680]

[0681] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-38 (7.50 g, 22.49 mmol)에 Sub 4-32 (9.58 g, 24.74 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.62 g, 0.67 mmol) $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.27 g, 1.35 mmol), NaOt-Bu (6.49 g, 67.48 mmol), toluene (235 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.64 g (수율: 67%)을 얻었다.

[0683] 10. 3-70 합성예

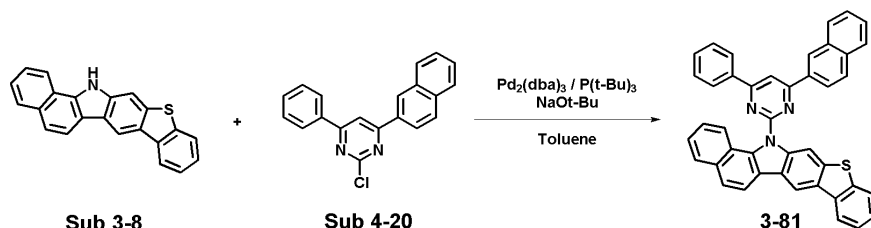


[0684]

[0685] 상기 합성에서 얻어진 Sub 3-58 (7.79 g, 20.86 mmol)에 Sub 4-48 (7.82 g, 22.94 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.57 g,

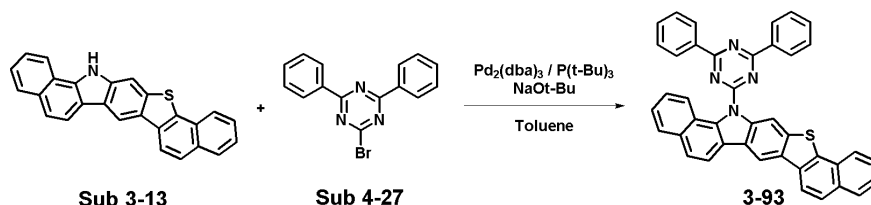
0.63 mmol) $P(t\text{-Bu})_3$ (0.25 g, 1.25 mmol), NaOt-Bu (6.01 g, 62.58 mmol), toluene (220 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.32 g (수율: 73%)을 얻었다.

11. 3-81 합성예



상기 합성에서 얻어진 Sub 3-8 (7.11 g, 21.98 mmol)에 Sub 4-20 (7.66 g, 24.18 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.60 g, 0.66 mmol) $P(t\text{-Bu})_3$ (0.27 g, 1.32 mmol), NaOt-Bu (6.34 g, 65.95 mmol), toluene (230 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 9.42 g (수율: 71%)을 얻었다.

12. 3-93 합성예



상기 합성에서 얻어진 Sub 3-13 (9.14 g, 24.47 mmol)에 Sub 4-27 (CAS Registry Number: 80984-79-8) (8.40 g, 26.92 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.67 g, 0.73 mmol) $P(t\text{-Bu})_3$ (0.30 g, 1.47 mmol), NaOt-Bu (7.06 g, 73.42 mmol), toluene (260 ml)을 첨가하고 상기 3-1 합성법을 사용하여 생성물 10.21 g (수율: 69%)을 얻었다.

표 6

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
3-1	$m/z=458.18(\text{C}_{34}\text{H}_{22}\text{N}_2=458.56)$	3-2	$m/z=449.12(\text{C}_{32}\text{H}_{19}\text{NS}=449.57)$
3-3	$m/z=433.15(\text{C}_{32}\text{H}_{19}\text{NO}=433.51)$	3-4	$m/z=535.23(\text{C}_{41}\text{H}_{29}\text{N}=535.69)$
3-5	$m/z=399.11(\text{C}_{28}\text{H}_{17}\text{NS}=399.51)$	3-6	$m/z=527.15(\text{C}_{36}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{S}=527.65)$
3-7	$m/z=583.12(\text{C}_{38}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{S}_2=583.73)$	3-8	$m/z=577.16(\text{C}_{40}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{S}=577.71)$
3-9	$m/z=627.18(\text{C}_{44}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{S}=627.77)$	3-10	$m/z=475.14(\text{C}_{34}\text{H}_{21}\text{NS}=475.61)$
3-11	$m/z=585.21(\text{C}_{44}\text{H}_{27}\text{NO}=585.71)$	3-12	$m/z=509.21(\text{C}_{39}\text{H}_{27}\text{N}=509.65)$
3-13	$m/z=509.19(\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3=509.61)$	3-14	$m/z=451.11(\text{C}_{30}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{S}=451.55)$
3-15	$m/z=588.20(\text{C}_{41}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{O}=588.67)$	3-16	$m/z=624.26(\text{C}_{47}\text{H}_{32}\text{N}_2=624.79)$
3-17	$m/z=614.18(\text{C}_{44}\text{H}_{26}\text{N}_2\text{S}=614.77)$	3-18	$m/z=449.12(\text{C}_{32}\text{H}_{19}\text{NS}=449.57)$
3-19	$m/z=573.17(\text{C}_{42}\text{H}_{23}\text{NO}_2=573.65)$	3-20	$m/z=664.26(\text{C}_{48}\text{H}_{32}\text{N}_4=664.81)$
3-21	$m/z=624.26(\text{C}_{47}\text{H}_{32}\text{N}_2=624.79)$	3-22	$m/z=577.16(\text{C}_{40}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{S}=577.71)$
3-23	$m/z=664.23(\text{C}_{47}\text{H}_{28}\text{N}_4\text{O}=664.77)$	3-24	$m/z=737.28(\text{C}_{55}\text{H}_{35}\text{N}_3=737.91)$
3-25	$m/z=738.28(\text{C}_{54}\text{H}_{34}\text{N}_4=738.89)$	3-26	$m/z=679.21(\text{C}_{48}\text{H}_{29}\text{N}_3\text{S}=679.84)$
3-27	$m/z=625.22(\text{C}_{45}\text{H}_{27}\text{N}_3\text{O}=625.73)$	3-28	$m/z=575.24(\text{C}_{42}\text{H}_{29}\text{N}_3=575.72)$
3-29	$m/z=508.19(\text{C}_{38}\text{H}_{24}\text{N}_2=508.62)$	3-30	$m/z=449.12(\text{C}_{32}\text{H}_{19}\text{NS}=449.57)$
3-31	$m/z=433.15(\text{C}_{32}\text{H}_{19}\text{NO}=433.51)$	3-32	$m/z=531.20(\text{C}_{41}\text{H}_{25}\text{N}=531.66)$

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 =759.91)
3-49	m/z=586.22(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=516.20(C ₃₆ H ₁₆ D ₅ N ₃ O=516.61)	3-64	m/z=605.23(C ₄₃ H ₂₈ FN ₃ =605.72)
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=742.28(C ₅₄ H ₂₆ D ₅ N ₃ O=742.89)	3-72	m/z=743.24(C ₅₃ H ₃₃ N ₃ S=743.93)
3-73	m/z=753.22(C ₅₄ H ₃₁ N ₃ S=753.92)	3-74	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.74)
3-75	m/z=659.15(C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S ₂ =659.83)	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=818.16(C ₅₃ H ₂₇ FN ₄ OS ₂ =818.94)	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=633.22(C ₄₄ H ₃₁ N ₃ S=633.81)
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=703.80)	3-88	m/z=759.25(C ₅₃ H ₃₃ N ₃ O ₃ =759.87)
3-89	m/z=677.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S=677.83)	3-90	m/z=683.15(C ₄₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ =683.85)
3-91	m/z=668.17(C ₄₅ H ₂₄ N ₄ OS=668.77)	3-92	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=653.80)
3-93	m/z=604.17(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ S=604.73)	3-94	m/z=650.27(C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650.83)
3-95	m/z=878.30(C ₆₄ H ₃₈ N ₄ O=879.04)	3-96	m/z=775.26(C ₅₇ H ₃₃ N ₃ O=775.91)
3-97	m/z=588.20(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ O=588.67)	3-98	m/z=561.18(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O=561.64)
3-99	m/z=602.17(C ₄₁ H ₂₂ N ₄ O ₂ =602.65)	3-100	m/z=664.23(C ₄₇ H ₂₈ N ₄ O=664.77)
3-101	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=653.80)	3-102	m/z=617.16(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ OS=617.73)
3-103	m/z=654.19(C ₄₅ H ₂₆ N ₄ S=654.79)	3-104	m/z=740.26(C ₅₃ H ₃₂ N ₄ O=740.87)
3-105	m/z=680.20(C ₄₇ H ₂₈ N ₄ S=680.83)	3-106	m/z=681.26(C ₄₉ H ₃₂ FN ₃ =681.81)
3-107	m/z=649.16(C ₄₃ H ₂₇ N ₃ S ₂ =649.83)	3-108	m/z=832.27(C ₅₉ H ₃₆ N ₄ S=833.03)
3-109	m/z=587.20(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ O=587.68)	3-110	m/z=654.19(C ₄₅ H ₂₆ N ₄ S=654.79)
3-111	m/z=667.17(C ₄₆ H ₂₅ N ₃ OS=667.79)	3-112	m/z=616.23(C ₄₄ H ₂₀ D ₅ N ₃ O=616.73)
3-113	m/z=692.17(C ₄₇ H ₂₄ N ₄ OS=692.80)	3-114	m/z=729.22(C ₅₂ H ₃₁ N ₃ S=729.90)
3-115	m/z=759.18(C ₅₂ H ₂₉ N ₃ S ₂ =759.95)		

[0697]

한편, 상기에서는 화학식 1 및 화학식 2로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, Miyaura boration 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 PPh_3 -mediated reductive cyclization 반응 (*J. Org. Chem.* 2005, **70**, 5014.)등에 기초한 것으로 구체적 합성에 명시된 치환기 이외에 화학식 1 및 화학식 2에 정의된 다른 치환기 (Ar^1 내지 Ar^3 , L^1 내지 L^2 , R^1 내지 R^7 , X^1 , X^2 , X^3 , A, B, C, D, E, F 등의 치환기)가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[0699] 유기전기소자의 제조평가

[0700] [실시예 1] 내지 [실시예 95] 적색유기전기발광소자 (발광층 혼합 인광호스트)

[0701] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 우선 정공주입층으로서 4,4',4"-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (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 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 호스트로서 화학식 1과 화학식 2로 표시되는 본 발명 화합물(표 7에 기재)을 3:7로 혼합한 혼합물을 사용하였으며, 도판트로서는 $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$ [bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate]을 5% 중량으로 도핑함으로써 상기 정공수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 정공저지층으로 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 BAiq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하고, 전자수송층으로 Bis(10-hydroxybenzo[h]quinolinato)beryllium (이하 BeBq₂로 약칭함)을 50 nm 두께로 성막하였다. 이후, 전자주입층으로 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극으로 사용함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0703] [비교예 1] 내지 [비교예 3]

[0704] 화학식 2로 표시되는 본 발명 화합물을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0706] [비교예 4]

[0707] 비교화합물 1을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0709] [비교예 5]

[0710] 비교화합물 2를 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0712] [비교예 6]

[0713] 비교화합물 3을 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0715] [비교예 7]

[0716] 비교화합물 4를 단독으로 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

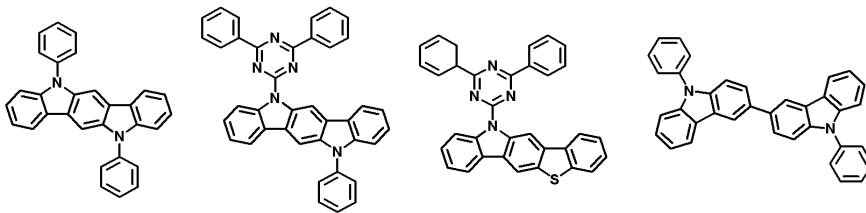
[0718] [비교예 8]

[0719] 비교화합물 1과 비교화합물 2를 혼합하여 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0721] [비교예 9]

[0722] 비교화합물 3과 비교화합물 4를 혼합하여 호스트로 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0724] 비교화합물 1 비교화합물 2 비교화합물 3 비교화합물 4



[0725]

[0727] 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 95 및 비교예 1 내지 비교예 9에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch) 사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500 cd/m² 기준휘도에서 맥사이언스사의 수명측정장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 7과 같다.

표 7

[0729]

비교예(1)	-	화합물 3-6	6.6	19.2	2500	13.0	100.1
비교예(2)	-	화합물 3-61	6.9	19.8	2500	12.6	98.1
비교예(3)	-	화합물 3-74	7.0	20.3	2500	12.3	101.4
비교예(4)	-	비교화합물 1	7.3	22.3	2500	11.2	76.2
비교예(5)	-	비교화합물 2	7.2	21.4	2500	11.7	78.8
비교예(6)	-	비교화합물 3	7.2	20.8	2500	12.0	83.3
비교예(7)	-	비교화합물 4	7.4	22.1	2500	11.3	74.2
비교예(8)	비교화합물 1	비교화합물 2	6.5	15.0	2500	16.7	104.8
비교예(9)	비교화합물 3	비교화합물 4	6.4	13.8	2500	18.1	107.1
실시예(1)	화합물 1-10	화합물 3-6	5.7	8.1	2500	30.9	128.4
실시예(2)	화합물 1-23	화합물 3-6	5.7	8.2	2500	30.6	128.8
실시예(3)	화합물 1-56	화합물 3-6	5.6	7.7	2500	32.4	131.0
실시예(4)	화합물 2-3	화합물 3-6	5.8	8.0	2500	31.3	130.2
실시예(5)	화합물 2-11	화합물 3-6	5.5	7.6	2500	32.7	132.8
실시예(6)	화합물 2-27	화합물 3-6	5.7	7.8	2500	32.2	131.6
실시예(7)	화합물 2-31	화합물 3-6	5.5	7.6	2500	32.9	132.7
실시예(8)	화합물 2-41	화합물 3-6	5.7	8.0	2500	31.2	130.4
실시예(9)	화합물 2-48	화합물 3-6	5.5	7.6	2500	33.0	133.7
실시예(10)	화합물 2-98	화합물 3-6	5.7	7.7	2500	32.5	131.2
실시예(11)	화합물 1-10	화합물 3-7	5.7	9.8	2500	25.6	123.3
실시예(12)	화합물 1-23	화합물 3-7	5.8	9.8	2500	25.6	123.1
실시예(13)	화합물 1-56	화합물 3-7	5.8	9.4	2500	26.5	124.8
실시예(14)	화합물 2-3	화합물 3-7	5.9	9.6	2500	26.1	124.0
실시예(15)	화합물 2-11	화합물 3-7	5.7	9.3	2500	26.9	125.4
실시예(16)	화합물 2-27	화합물 3-7	5.8	9.4	2500	26.5	123.6
실시예(17)	화합물 2-31	화합물 3-7	5.8	9.3	2500	27.0	125.2

실시예(18)	화합물 2-41	화합물 3-7	5.8	9.6	2500	26.0	123.7
실시예(19)	화합물 2-48	화합물 3-7	5.7	9.3	2500	27.0	125.4
실시예(20)	화합물 2-98	화합물 3-7	5.8	9.4	2500	26.6	124.2
실시예(21)	화합물 1-10	화합물 3-8	5.8	9.7	2500	25.7	123.0
실시예(22)	화합물 1-23	화합물 3-8	5.8	9.8	2500	25.6	123.0
실시예(23)	화합물 1-56	화합물 3-8	5.9	9.5	2500	26.4	124.8
실시예(24)	화합물 2-3	화합물 3-8	5.9	9.6	2500	26.0	124.2
실시예(25)	화합물 2-11	화합물 3-8	5.7	9.3	2500	26.9	125.3
실시예(26)	화합물 2-27	화합물 3-8	5.8	9.4	2500	26.5	124.6
실시예(27)	화합물 2-31	화합물 3-8	5.8	9.3	2500	27.0	125.1
실시예(28)	화합물 2-41	화합물 3-8	5.8	9.6	2500	26.1	124.7
실시예(29)	화합물 2-48	화합물 3-8	5.7	9.3	2500	26.9	125.0
실시예(30)	화합물 2-98	화합물 3-8	5.8	9.4	2500	26.6	124.8
실시예(31)	화합물 1-70	화합물 3-9	5.8	10.5	2500	23.8	122.0
실시예(32)	화합물 2-23	화합물 3-9	5.9	9.8	2500	25.4	122.6
실시예(33)	화합물 2-24	화합물 3-9	5.7	9.9	2500	25.2	122.9
실시예(34)	화합물 2-53	화합물 3-9	5.8	10.1	2500	24.7	121.6
실시예(35)	화합물 2-80	화합물 3-9	5.9	10.1	2500	24.7	122.1
실시예(36)	화합물 1-10	화합물 3-15	5.7	10.5	2500	23.9	121.7
실시예(37)	화합물 1-23	화합물 3-15	5.9	10.5	2500	23.9	121.5
실시예(38)	화합물 1-56	화합물 3-15	5.8	10.2	2500	24.6	121.0
실시예(39)	화합물 2-3	화합물 3-15	5.9	10.3	2500	24.2	121.9
실시예(40)	화합물 2-11	화합물 3-15	5.9	9.9	2500	25.3	122.8
실시예(41)	화합물 2-27	화합물 3-15	5.8	10.1	2500	24.7	121.2
실시예(42)	화합물 2-31	화합물 3-15	5.8	9.9	2500	25.2	123.0
실시예(43)	화합물 2-41	화합물 3-15	5.7	10.4	2500	24.1	122.0
실시예(44)	화합물 2-48	화합물 3-15	5.9	9.9	2500	25.2	122.9
실시예(45)	화합물 2-98	화합물 3-15	5.8	10.1	2500	24.9	121.7
실시예(46)	화합물 1-10	화합물 3-37	6.0	11.3	2500	22.2	120.0
실시예(47)	화합물 1-23	화합물 3-37	6.0	11.3	2500	22.0	120.5
실시예(48)	화합물 1-56	화합물 3-37	6.0	10.9	2500	22.9	120.3
실시예(49)	화합물 2-3	화합물 3-37	5.9	11.1	2500	22.5	120.3
실시예(50)	화합물 2-11	화합물 3-37	5.8	10.6	2500	23.5	120.9
실시예(51)	화합물 2-27	화합물 3-37	6.0	10.8	2500	23.1	120.4
실시예(52)	화합물 2-31	화합물 3-37	5.8	10.7	2500	23.4	120.8
실시예(53)	화합물 2-41	화합물 3-37	6.0	11.1	2500	22.4	120.1
실시예(54)	화합물 2-48	화합물 3-37	5.8	10.7	2500	23.3	120.8
실시예(55)	화합물 2-98	화합물 3-37	6.0	10.9	2500	22.9	120.4
실시예(56)	화합물 1-39	화합물 3-46	5.8	9.6	2500	26.1	124.5
실시예(57)	화합물 1-68	화합물 3-46	5.8	9.8	2500	25.6	123.2
실시예(58)	화합물 2-15	화합물 3-46	5.7	9.3	2500	26.9	125.2
실시예(59)	화합물 2-33	화합물 3-46	5.8	9.3	2500	26.9	125.1
실시예(60)	화합물 2-49	화합물 3-46	5.8	9.2	2500	27.1	125.7
실시예(61)	화합물 1-39	화합물 3-50	5.8	9.4	2500	26.6	123.8
실시예(62)	화합물 1-68	화합물 3-50	5.9	9.8	2500	25.4	122.9
실시예(63)	화합물 2-15	화합물 3-50	5.7	9.2	2500	27.1	125.7
실시예(64)	화합물 2-33	화합물 3-50	5.8	9.2	2500	27.0	125.8
실시예(65)	화합물 2-49	화합물 3-50	5.8	9.3	2500	26.8	125.1
실시예(66)	화합물 1-10	화합물 3-61	5.7	9.2	2500	27.2	125.5
실시예(67)	화합물 1-23	화합물 3-61	5.7	9.2	2500	27.2	125.4
실시예(68)	화합물 1-56	화합물 3-61	5.7	8.8	2500	28.4	127.0
실시예(69)	화합물 2-3	화합물 3-61	5.6	8.9	2500	28.0	126.9
실시예(70)	화합물 2-11	화합물 3-61	5.7	8.5	2500	29.6	127.8
실시예(71)	화합물 2-27	화합물 3-61	5.7	8.7	2500	28.8	126.7
실시예(72)	화합물 2-31	화합물 3-61	5.7	8.5	2500	29.4	127.8
실시예(73)	화합물 2-41	화합물 3-61	5.7	9.0	2500	27.8	127.2
실시예(74)	화합물 2-48	화합물 3-61	5.6	8.4	2500	29.7	127.9
실시예(75)	화합물 2-98	화합물 3-61	5.7	8.8	2500	28.5	126.8

실시예(76)	화합물 1-39	화합물 3-74	5.9	9.6	2500	26.0	124.7
실시예(77)	화합물 1-68	화합물 3-74	5.8	9.7	2500	25.7	123.3
실시예(78)	화합물 2-15	화합물 3-74	5.8	9.3	2500	26.8	125.0
실시예(79)	화합물 2-33	화합물 3-74	5.8	9.3	2500	26.8	125.1
실시예(80)	화합물 2-49	화합물 3-74	5.8	9.2	2500	27.1	125.7
실시예(81)	화합물 1-39	화합물 3-81	5.9	9.5	2500	26.4	124.9
실시예(82)	화합물 1-68	화합물 3-81	5.8	9.8	2500	25.5	123.0
실시예(83)	화합물 2-15	화합물 3-81	5.7	9.2	2500	27.1	125.8
실시예(84)	화합물 2-33	화합물 3-81	5.7	9.2	2500	27.2	125.7
실시예(85)	화합물 2-49	화합물 3-81	5.9	9.3	2500	26.9	125.2
실시예(86)	화합물 1-10	화합물 3-93	5.9	9.8	2500	25.5	122.9
실시예(87)	화합물 1-23	화합물 3-93	5.8	9.8	2500	25.6	123.0
실시예(88)	화합물 1-56	화합물 3-93	5.8	9.4	2500	26.5	123.9
실시예(89)	화합물 2-3	화합물 3-93	5.9	9.6	2500	26.1	124.2
실시예(90)	화합물 2-11	화합물 3-93	5.7	9.3	2500	26.9	125.2
실시예(91)	화합물 2-27	화합물 3-93	5.7	9.4	2500	26.5	123.9
실시예(92)	화합물 2-31	화합물 3-93	5.8	9.3	2500	27.0	125.4
실시예(93)	화합물 2-41	화합물 3-93	5.8	9.6	2500	26.0	124.7
실시예(94)	화합물 2-48	화합물 3-93	5.7	9.3	2500	27.0	125.0
실시예(95)	화합물 2-98	화합물 3-93	5.8	9.4	2500	26.5	123.9

[0731] 상기 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 화학식 1과 화학식 2로 표시되는 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 혼합하여 인광 호스트로 사용할 경우 (실시예 1 내지 실시예 95), 단일물질을 사용한 소자(비교예 1 내지 비교예 7)에 비해 구동전압, 효율 및 수명을 현저히 개선시키는 것을 확인 할 수 있었다.

[0732] 상세히 설명하면, 화학식 2로 표시되는 본 발명의 화합물, 비교화합물 1 내지 비교화합물 4를 단독으로 인광호스트로 사용한 비교예 1 내지 비교예 7에 있어서는 본 발명 화합물 (3-6, 3-61, 3-74)을 사용한 비교예 1 내지 비교예 3이 비교화합물을 사용한 비교예 4 내지 비교예 7보다 높은 효율과 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[0733] 또한 상기 단독물질을 사용한 비교예 1 내지 비교예 7보다 비교화합물 1과 비교화합물 2 또는 비교화합물 3과 비교화합물 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 헤테로고리 화합물을 혼합한 비교예 8보다 5환 고리화합물 중 서로 상이한 헤테로원자(N, S)를 갖는 이형 다환 고리화합물을 포함한 혼합물을 사용한 비교예 9가 좀 더 높은 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[0734] 그리고 상기 비교예 1 내지 비교예 9의 경우보다 본 발명 화합물인 화학식 1과 화학식 2의 화합물을 혼합하여 호스트로 사용한 실시예 1 내지 실시예 95가 현저히 높은 효율 및 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었으며, 낮은 구동전압을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[0735] 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 2의 물질 각각의 감소 및 소멸시간보다 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 영역(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.

[0736] 또한 비교화합물을 혼합한 인광호스트로 사용한 비교예 8 내지 비교화합물 9보다 본 발명의 조합이 우수한 이유는 electron 뿐만 아니라 hole에 대한 안정성, 높은 T1 등의 특징이 있는 화학식 2로 표시되는 다환고리 화합물에 hole 특성이 강한 화학식 1로 표시되는 화합물을 혼합할 경우, 높은 T1과 높은 LUMO 에너지 값으로 인해 전

자 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 이루어지고, 그로 인해 HTL 계면에 열화 또한 감소하여 소자 전체의 구동 전압, 효율 그리고 수명이 극대화 된다고 판단된다. 또한 화학식 1로 표시되는 화합물에서는 아민에 축합된(fused) 스파이로 플루오렌이 치환된 본 발명 화합물이 구동전압, 효율, 수명 면에서 가장 우수한 결과를 나타냄을 확인할 수 있었고, 그 중에서도 축합된 스파이로 플루오렌과 함께 아민에 다이메틸플루오렌이 치환될 경우는 발광 효율 적인 측면에서 더 개선 되는 것을 확인할 수 있었다. 즉, 결론적으로 화학식 1과 화학식 2의 조합이 전기 화학적으로 시너지 작용을 하여 소자 전체의 성능을 향상된 것으로 사료된다.

[실시예 96] 내지 [실시예 98] 혼합비율 별 적색유기전기발광소자 (발광층 혼합 인광호스트)

표 8에 기재된 대로 물질의 혼합비율을 다르게 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 68과 동일한 방법으로 유기 전기발광소자를 제작하였다.

[실시예 99] 내지 [실시예 101] 혼합비율 별 적색유기전기발광소자 (발광층 혼합 인광호스트)

표 8에 기재된 대로 물질의 혼합비율을 다르게 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일한 방법으로 유기 전기발광소자를 제작하였다.

본 발명의 실시예 9, 실시예 68, 실시예 96 내지 실시예 101에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch) 사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500 cd/m^2 기준휘도에서 맥사이언스사의 수명측정장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 8과 같다.

표 8

	제 1 호스트	제 2 호스트	혼합 비율 (제1호스트: 제2호스트)	구동 전압 (V)	전류 (mA/cm^2)	휘도 (cd/m^2)	효율 (cd/A)	T(95)
실시예 (96)	화합물 1-56	화합물 3-61	2:8	5.7	8.8	2500	28.3	126.5
실시예 (68)	화합물 1-56	화합물 3-61	3:7	5.7	8.8	2500	28.4	127.0
실시예 (97)	화합물 1-56	화합물 3-61	4:6	6.1	9.4	2500	26.7	120.3
실시예 (98)	화합물 1-56	화합물 3-61	5:5	6.2	10.0	2500	24.9	118.8
실시예 (99)	화합물 2-48	화합물 3-6	2:8	5.4	7.5	2500	33.4	132.6
실시예 (9)	화합물 2-48	화합물 3-6	3:7	5.5	7.6	2500	33.0	133.7
실시예 (100)	화합물 2-48	화합물 3-6	4:6	5.8	7.9	2500	31.6	129.9
실시예 (101)	화합물 2-48	화합물 3-6	5:5	6.0	8.5	2500	29.5	127.1

상기 표 8과 같이 본 발명의 화합물의 혼합물을 비율 별(2:8, 3:7, 4:6, 5:5)로 소자를 제작하여 측정하였다. 결과를 자세히 설명하면, 화합물 1-56과 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 2-48과 화합물 3-6의 혼합물 결과에서도 동일한 양상을

떡었다. 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.

[0749] 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. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다

부호의 설명

[0751]	100 : 유기전기소자	110 : 기판
	120 : 제 1전극(양극)	130 : 정공주입층
	140 : 정공수송층	141 : 버퍼층
	150 : 발광층	151 : 발광보조층
	160 : 전자수송층	170 : 전자주입층
	180 : 제 2전극(음극)	

도면

도면1

