

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016년 8월 4일 (04.08.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/122178 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 401/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/000780
- (22) 국제출원일: 2016년 1월 25일 (25.01.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0012223 2015년 1월 26일 (26.01.2015) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 조현종 (JO, Hyunjong); 18401 경기도 화성시 병점로 17-8, 302 호, Gyeonggi-do (KR). 김영배 (KIM, Youngbae); 16316 경기도 수원시 장안구 정자천로 188 번길 64, 101 동 106 호, Gyeonggi-do (KR). 김희문 (KIM, Hoe Moon); 16438 경기도 수원시 팔달구 화양로 50 번길 30, 119 동 1402 호, Gyeonggi-do (KR). 백영미 (BEAK, Youngmi); 16848 경기도 용인시 수지구 성북2로 76 번길 31, 105 동 1104 호, Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 정안 (HONESTY & JR PARTNERS INTELLECTUAL PROPERTY LAW GROUP); 135-833 서울시 강남구 선릉로 615 5층, Seoul (KR).

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

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

공개:

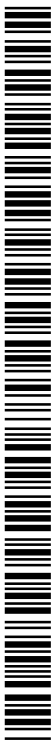
— 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

(54) Title: ORGANIC LIGHT-EMITTING COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT USING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel compound having an excellent light-emitting ability, and to an organic electroluminescent element having characteristics, such as high luminous efficiency, a low driving voltage, and long lifespan, by containing the novel compound in at least one organic material layer.

(57) 요약서: 본 발명은 발광능이 우수한 신규의 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 높은 발광 효율, 낮은 구동 전압 및 장수명 등의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2016/122178 A2

명세서

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

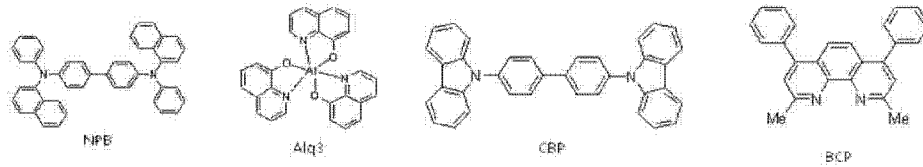
- [1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입 및 수송능, 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 유기 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 높은 발광 효율, 낮은 구동 전압 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

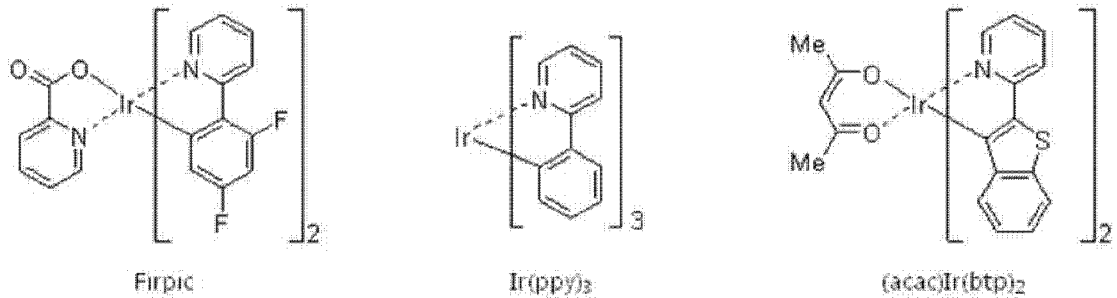
- [2] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'라 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 EL 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 유기 EL 소자의 발광층 형성재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그 밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광재료로 노란색 및 주황색 발광재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.
- [5] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색 도펀트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는

4,4-디카바졸릴비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl, CBP)가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[6]



[7]



[8] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 상세한 설명

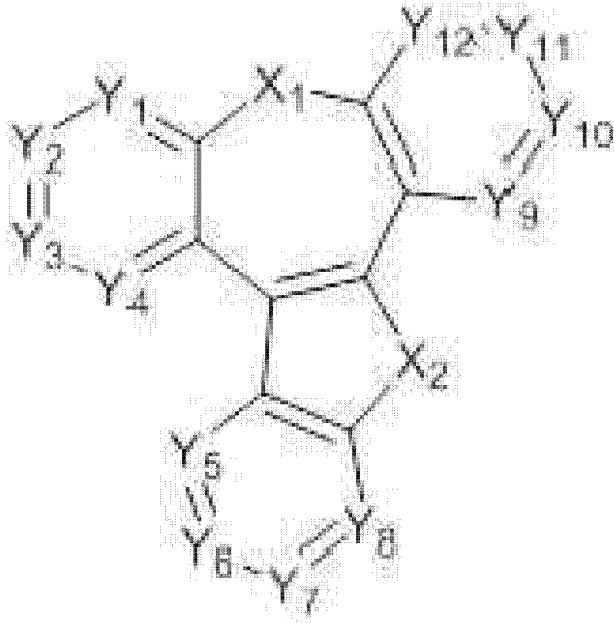
기술적 과제

- [9] 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 정공 주입 및 수송능, 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 모두 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [10] 또한 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 다른 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [11] 상기 목적을 달성하기 위하여 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [12] [화학식 1]

[13]

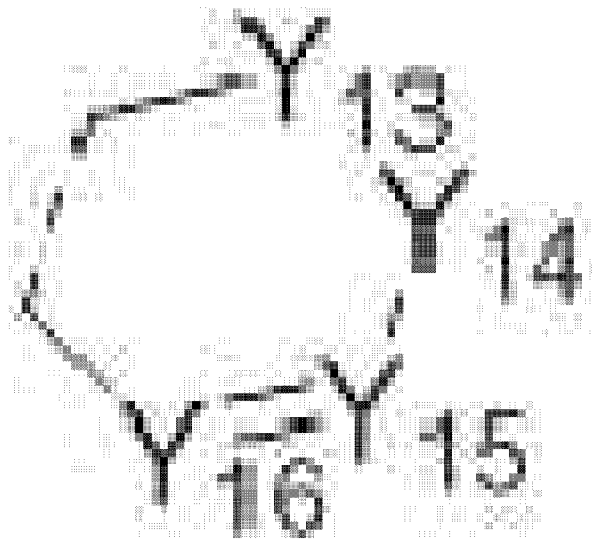


[14] 상기 화학식 1에서,

[15] Y_1 과 Y_2 , Y_2 와 Y_3 , Y_3 와 Y_4 , Y_5 와 Y_6 , Y_6 와 Y_7 , Y_7 과 Y_8 , 및 Y_9 와 Y_{10} , Y_{10} 과 Y_{11} 및 Y_{11} 과 Y_{12} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[16] [화학식 2]

[17]



[18] 상기 화학식 2에서,

[19] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[20] 상기 화학식 1 및 2에서,

[21] X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃), 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar₁)이고;

[22] 상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 Y_1

- 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;
- [23] Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;
- [24] R_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;
- [25] Ar_1 내지 Ar_5 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 은 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;
- [26] R_1 및 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [27] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [28] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 수송층, 정공 주입층, 발광 보조층 및 수명개선층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며,

바람직하게는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 발광층은 인광 호스트로 사용될 수 있다.

- [29] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [30] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [31] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [32] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [33] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [34] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [35] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에

한정되지는 않는다.

- [36] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [37] 본 발명에서 "사이클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [38] 본 발명에서 "헤테로사이클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로사이클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [39] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [40] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

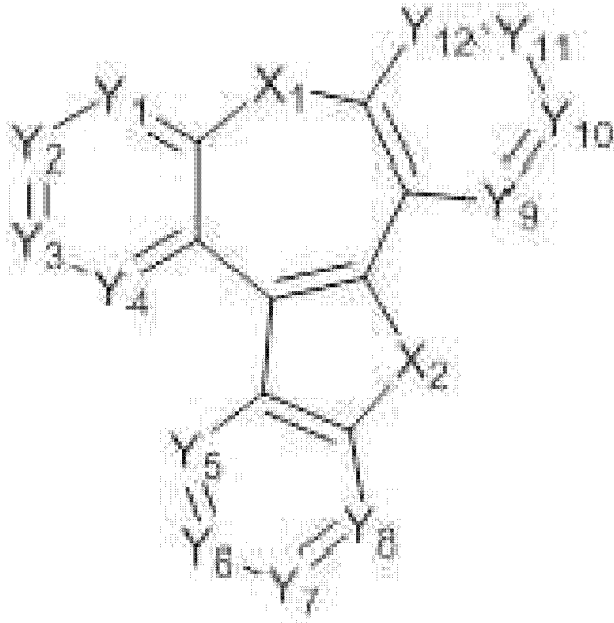
발명의 효과

- [41] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다.
- [42] 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [43] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [44] [화학식 1]

[45]

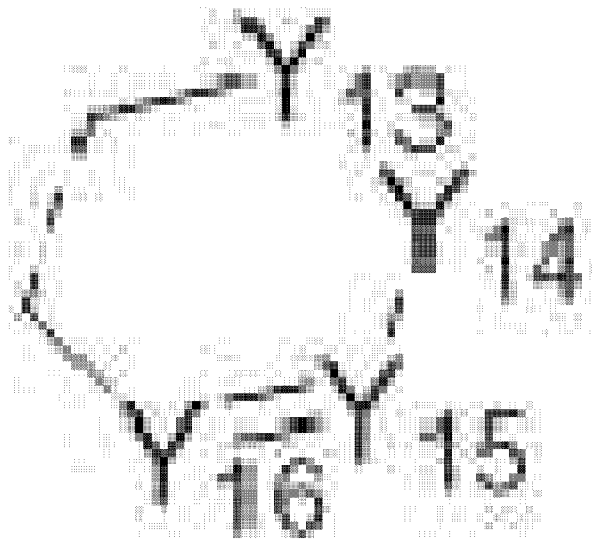


[46] 상기 화학식 1에서,

[47] Y_1 과 Y_2 , Y_2 와 Y_3 , Y_3 와 Y_4 , Y_5 와 Y_6 , Y_6 와 Y_7 , Y_7 과 Y_8 , 및 Y_9 와 Y_{10} , Y_{10} 과 Y_{11} 및 Y_{11} 과 Y_{12} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[48] [화학식 2]

[49]



[50] 상기 화학식 2에서,

[51] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[52] 상기 화학식 1 및 2에서,

[53] X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃), 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar₁)이고;

[54] 상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 Y_1

- 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;
- [55] Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;
- [56] R_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;
- [57] Ar_1 내지 Ar_5 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 은 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;
- [58] R_1 및 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

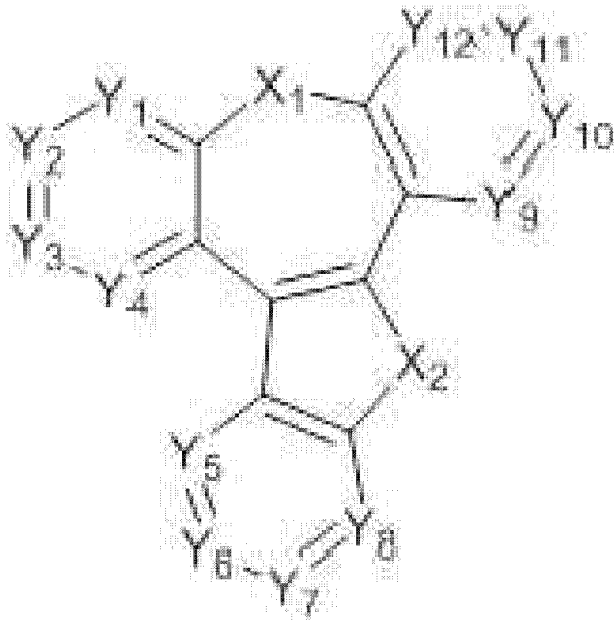
- [59] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.
- [60] 1. 신규 유기 화합물
- [61] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 디벤조아제핀(5H-dibenzo[b,f]azepine), 디벤조옥세핀(dibenzo[b,f]oxepine), 디벤조싸이에핀(dibenzo[b,f]thiepine), 디벤조실레핀(5H-dibenzo[b,f]silepine), 또는

디벤조싸이클로헵텐(5H-dibenzo[a,d]cycloheptene)에 나프틸이 축합된 5원
 헤테로방향족환 모이어티를 이루거나, 인덴 모이어티(indene moiety), 또는 인돌
 모이어티(indole moiety)가 축합되어 기본 골격을 이루며, 혹은
 벤조나프토아제핀(7H-benzo[b]naphtho[1,2-f]azepine),
 벤조나프토옥세핀(benzo[b]naphtho[1,2-f]oxepine),
 벤조나프토싸이에핀(benzo[b]naphtho[1,2-f]thiepine),
 벤조나프토실레핀(7H-benzo[b]naphtho[1,2-f]silepine), 또는
 벤조나프토싸이클로헵텐(7H-benzo[b]naphtho[1,2-f]cycloheptene)에 벤젠이
 축합된 5원 헤테로방향족환 모이어티를 이루거나, 인덴 모이어티(indene moiety),
 또는 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합되어 기본 골격을 이룰 수 있다.

[62] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 하기 화학식 1로
 표시되는 것을 특징으로 한다.

[63] [화학식 1]

[64]

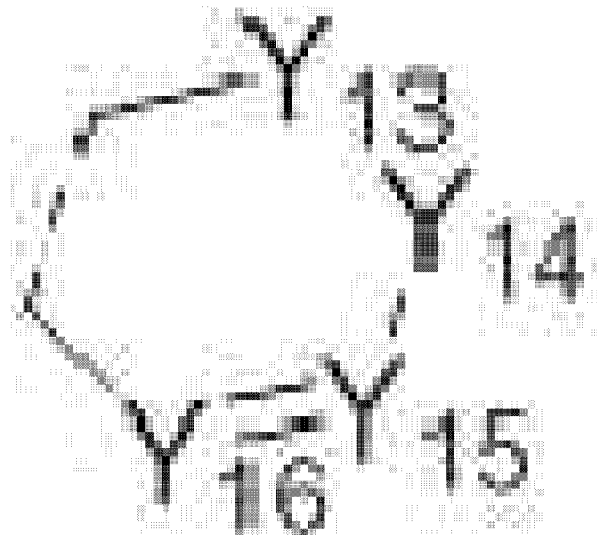


[65] 상기 화학식 1에서,

[66] Y₁과 Y₂, Y₂와 Y₃, Y₃와 Y₄, Y₅와 Y₆, Y₆와 Y₇, Y₇과 Y₈, 및 Y₉와 Y₁₀, Y₁₀과 Y₁₁ 및 Y₁₁과 Y₁₂ 중 적어도 하나, 바람직하게는 Y₁과 Y₂, Y₇과 Y₈ 및 Y₁₁과 Y₁₂ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[67] [화학식 2]

[68]



[69] 상기 화학식 2에서,

[70] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[71] 상기 화학식 1 및 2에서,

[72] X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃), 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar₁)이고, 바람직하게는 X_1 은 O, S 및 N(Ar₁)로 이루어진 군에서 선택되며, X_2 는 N(Ar₁)이고;

[73] 상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 Y_1 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁)이며;

[74] Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁)이고;

[75] R₁이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

[76] Ar₁ 내지 Ar₅이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Ar₁ 내지 Ar₅은 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합

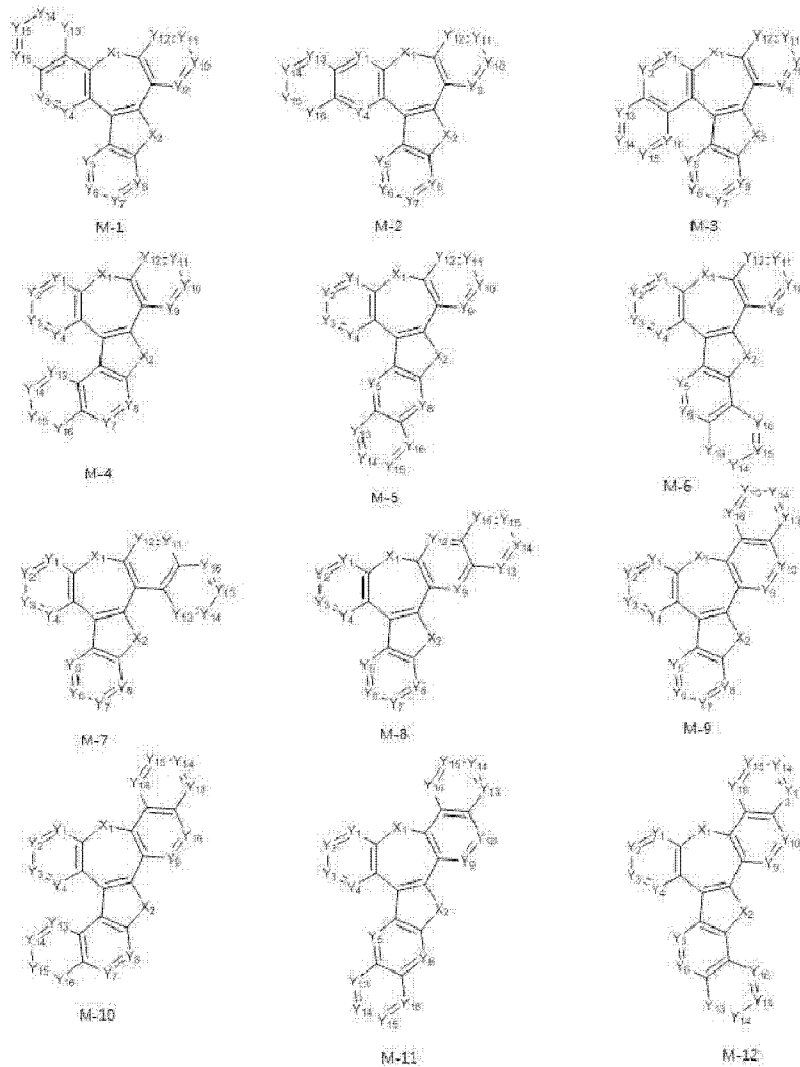
고리를 형성할 수 있으며;

- [77] R_1 및 Ar_1 내지 Ar_5 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [78] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 EL 소자용 재료[예: 4,4-디카바졸릴비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl, 이하 'CBP'라 함)]보다 높은 분자량을 갖기 때문에, 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라, 캐리어 수송능 및, 발광능 등이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자가 포함할 경우, 소자의 구동 전압은 낮아지고, 효율 및 수명 등은 향상될 수 있다.
- [79] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질은 이의 삼중항 에너지 갭이 도펀트의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 향상될 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물은 삼중항 에너지가 2.3 eV 이상으로 높다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 인돌 유도체가 축합되어 있는 상기 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [80] 또한, 본 발명의 화합물은 전술한 바와 같이 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자수송층 또는 정공수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 유기물층(이하, '발광 보조층'이라 함)을 형성할 경우, 상기 화합물에 의해서 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 상기 제1 엑시톤 확산 방지층을 포함하지 않은 종래의 유기 전계 발광 소자와 달리, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 유기물층(이하, '수명 개선층'이라 함)을 형성할 경우에도, 상기 화학식 1의 화합물에 의해 엑시톤의 확산이 방지됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 안정성이 향상될 수

있고, 이로 인해 소자의 반감 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트 이외, 발광 보조층 재료 또는 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.

- [81] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고, 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 화합물은 상기 기본 골격에 질소-함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 양극성(bipolar)의 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외, 전자주입/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다. 한편, 상기 화학식 1의 화합물이 상기 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주게기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에, 발광층 재료 이외, 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다.
- [82] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료 및 정공 수송/주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.
- [83] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환기, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.
- [84] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 M-1 내지 화학식 M-12 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 구체화 될 수 있다.

[85]



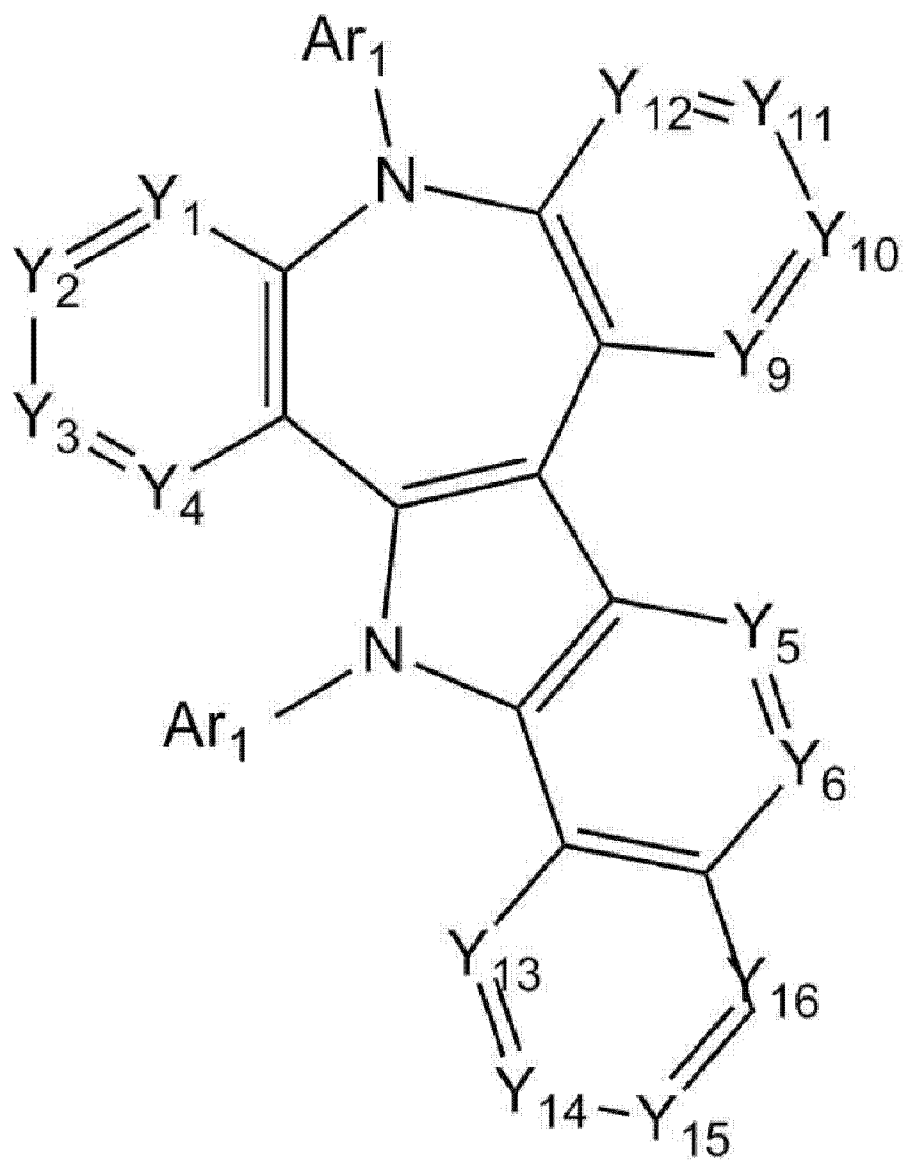
[86] 상기 화학식 M-1 내지 M-12에서, X₁, X₂ 및 Y₁ 내지 Y₁₆은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[87] 다만, 바람직하게는 상기 X₁은 O, S 및 N(Ar₁)로 이루어진 군에서 선택되며, X₂는 N(Ar₁)일 수 있다.

[88] 또한, 바람직하게는 상기 Y₁ 내지 Y₁₆은 서로 동일하거나 상이하고, 모두 C(R₁)이거나 1 내지 3개의 N을 포함할 수 있으며, 이때 복수 개의 R₁은 동일하거나 상이하다.

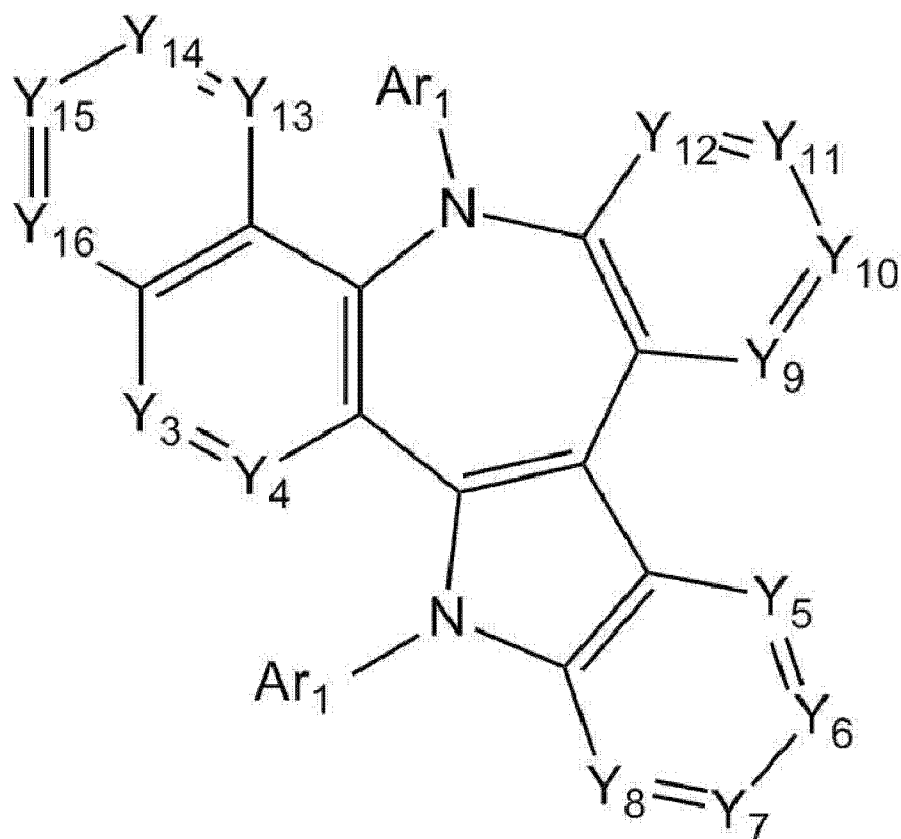
[89] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 N-1 내지 화학식 N-12 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 구체화될 수 있다.

[95]



[96] [화학식 4]

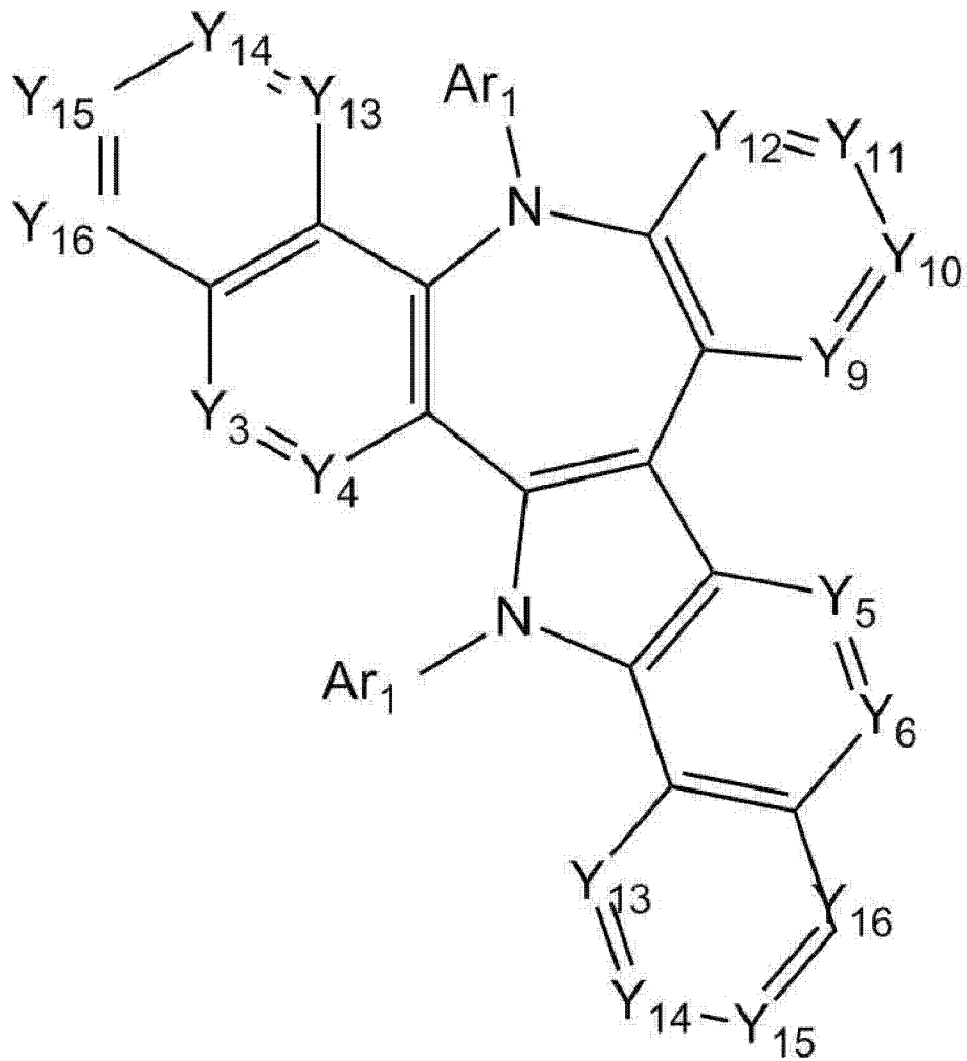
[97]



[98]

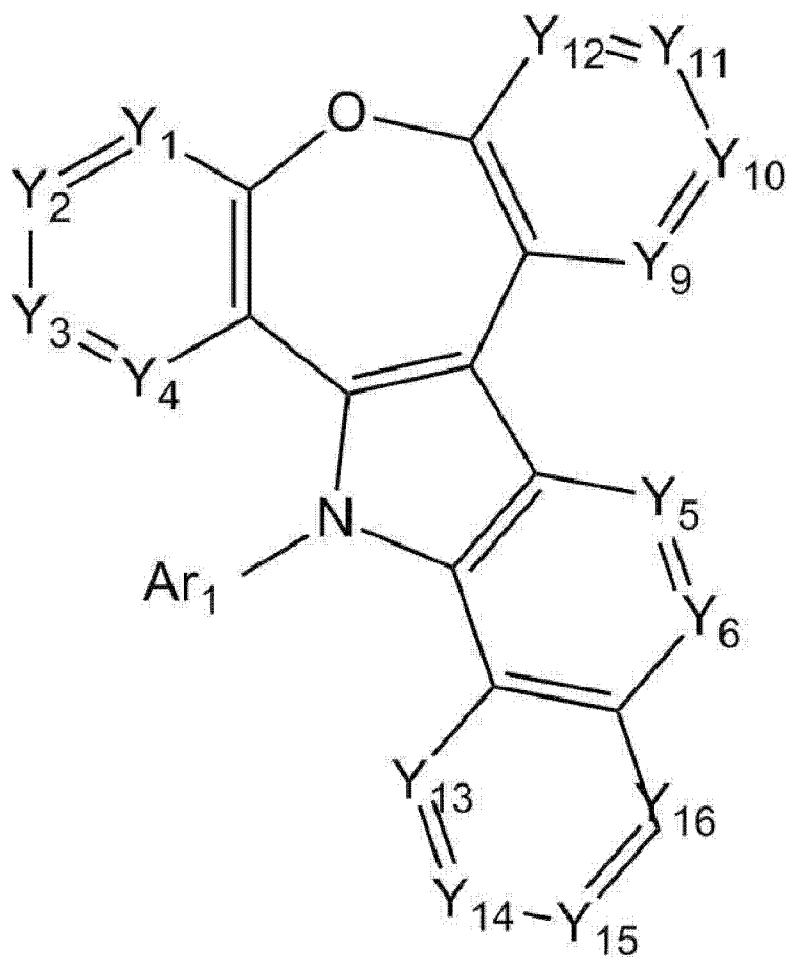
[화학식 5]

[99]



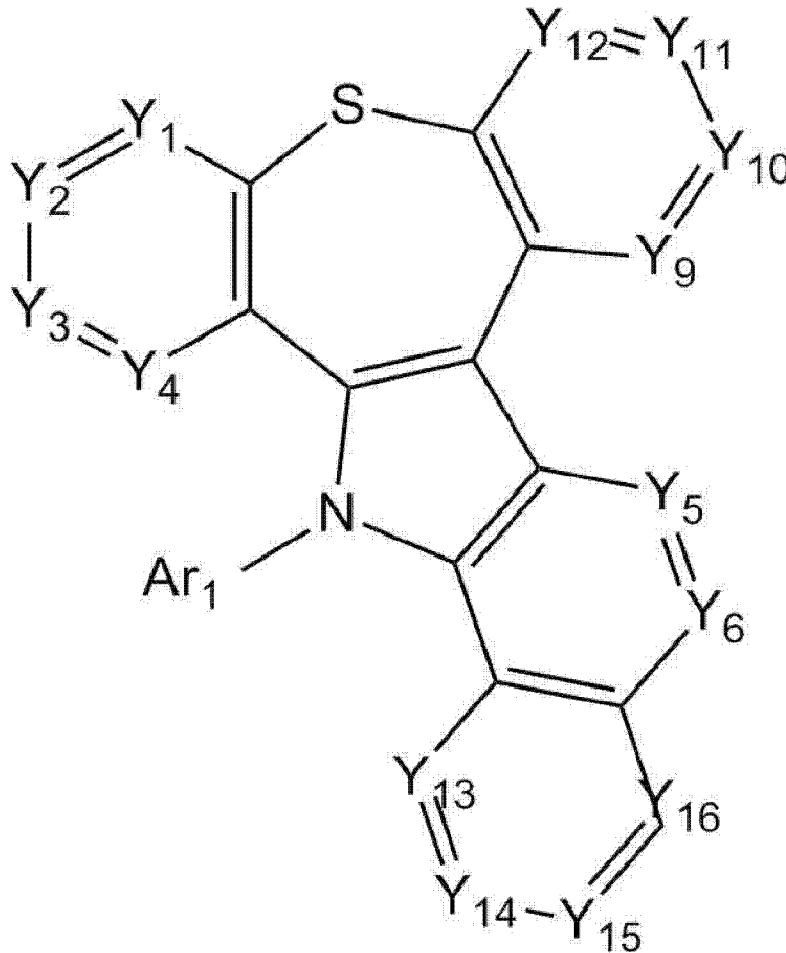
[100] [화학식 6]

[101]



[102] [화학식 7]

[103]



[104] 상기 화학식 3 내지 화학식 7에서,

[105] Ar_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Ar_1 은 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

[106] Y_1 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

[107] Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

[108] R_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

$\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

[109] Ar_1 및 R_1 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[110] 다만, 바람직하게는 상기 화학식 3 내지 7에서 상기 Ar_1 은 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기일 수 있고, 특히 상기 Ar_1 이 복수 개인 경우 적어도 하나는 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기일 수 있으며, 이때 상기 아릴기는 1개 이상의 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

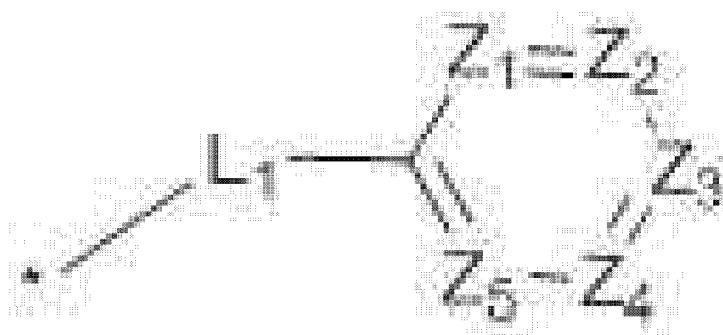
[111] 또한, 바람직하게는 상기 화학식 4에서 Y_8 은 $C(R_1)$ 이고, 상기 R_1 은 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 보다 바람직하게는 페닐기일 수 있다.

[112] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합 고리를 형성하지 않는 Y_1 내지 Y_{12} 중 적어도 하나가 $C(R_1)$ 인 경우, 상기 R_1 중 적어도 하나는 페닐기일 수 있다.

[113] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R_1 및 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 페닐기 또는 하기 화학식 8로 표시되는 치환기일 수 있다.

[114] [화학식 8]

[115]



[116] 상기 화학식 8에서,

[117] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[118] L_1 은 단일결합, $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의

헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 또는 카바졸릴기이며;

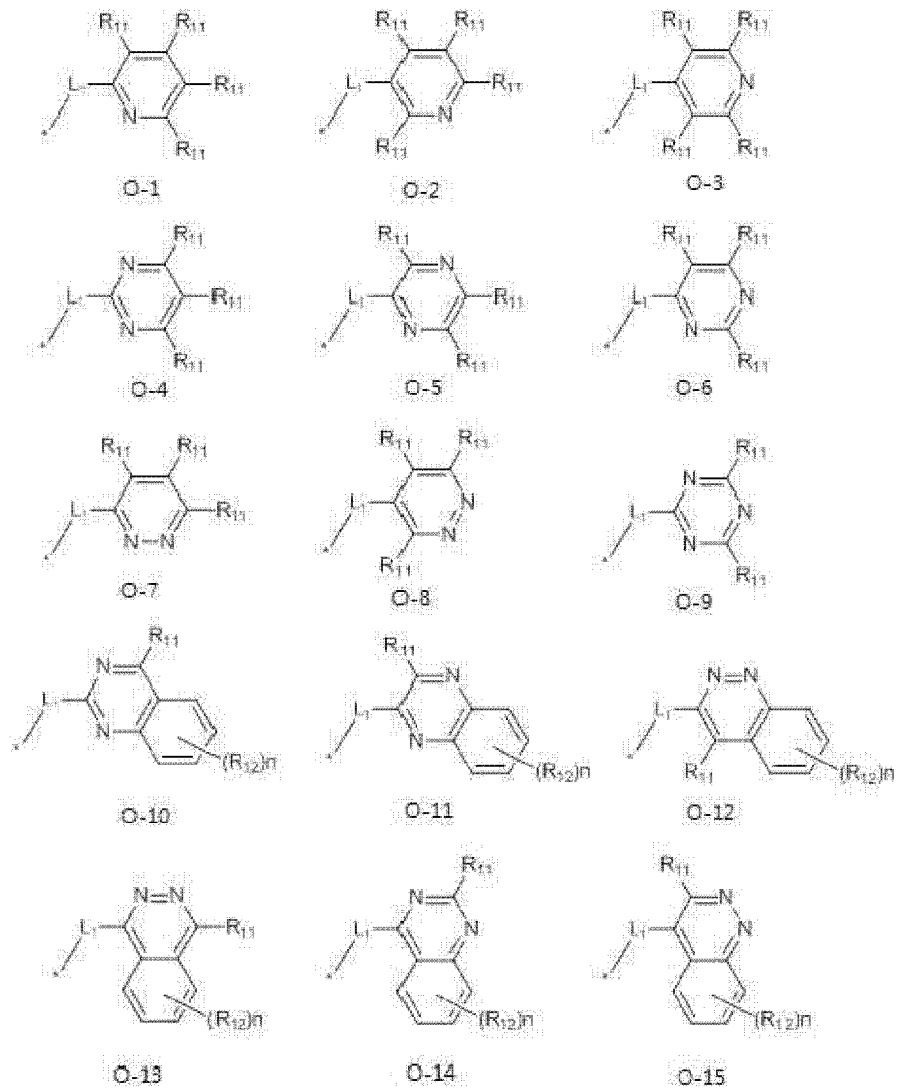
[119] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R_{11})이 되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;

[120] R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, R_{11} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[121] 상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기와, 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[122] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 8로 표시되는 치환기는 하기 O-1 내지 O-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다.

[123]



[124] 상기 화학식 O-1 내지 화학식 O-15에서,

[125] n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{12} 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{12} 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[126] 상기 R_{12} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의

알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

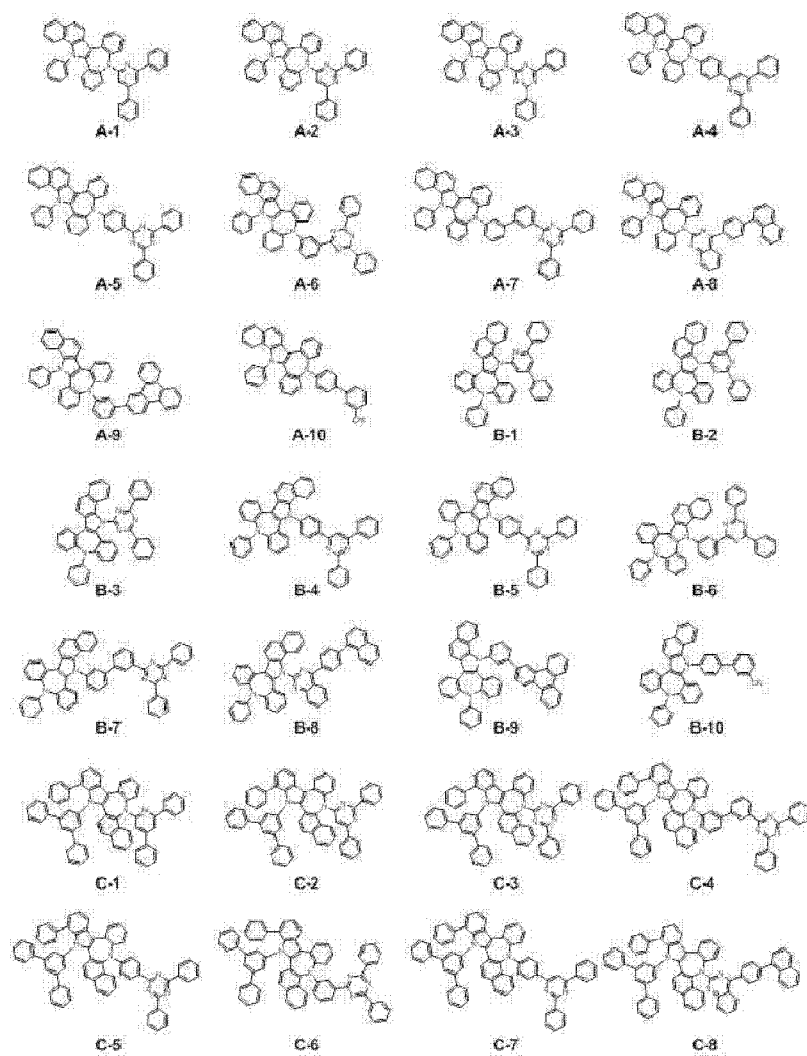
[127] L_1 및 R_{11} 은 각각 상기 화학식 8에서 정의된 바와 같다.

[128] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며,

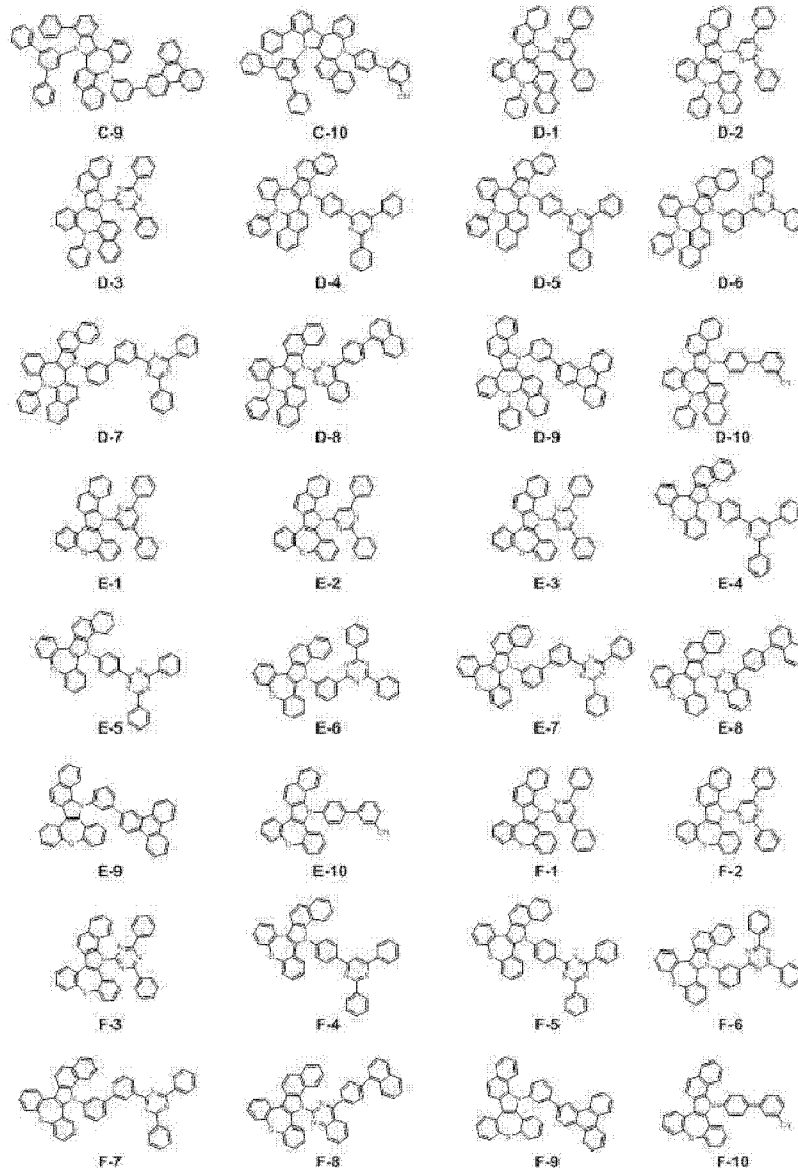
[129] 상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린은 시아노, 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[130] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 보다 구체적으로 하기 구조로 나타낼 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[131]



[132]



[133] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[134]

[135] 2. 유기 전계 발광 소자

[136] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.

[137] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 (i) 양극(anode), (ii) 음극(cathode) 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 2종 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[138] 본 발명의 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층,

정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자수송층 및 정공수송층으로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 발광층일 수 있다.

[139] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[140] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있으며, 상기한 바와 같이 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[141] 또한, 상기 유기 전계 발광 소자는 발광층과 전자 수송층 사이에 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층이 포함될 수 있다. 이때 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층으로도 이용될 수 있다.

[142] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[143] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[144] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[145] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.

[146] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[147] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[148] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

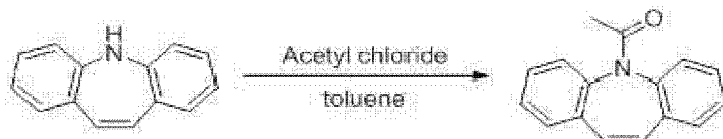
[149] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[150]

[151] **[준비예 1] BIAz-1의 합성**

[152] <단계 1> 1-(5H-디벤조[b,f]아제핀-5-일)에타논의 합성

[153]



[154] 질소 기류 하에서 5H-디벤조[b,f]아제핀 (100.0 g, 517.5 mmol), 아세틸 클로라이드 (44.3 ml, 621.0 mmol) 및 toluene (1000 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

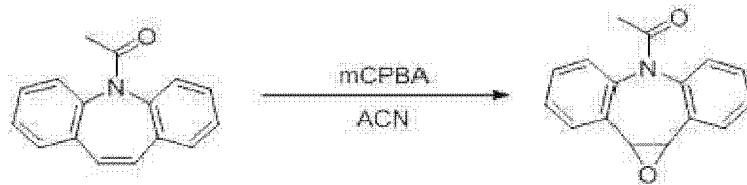
[155] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정 하여 1-(5H-디벤조[b,f]아제핀-5-일)에타논 (113.2 g, 수율 93%)을 얻었다.

[156] ¹H-NMR: δ 1.86 (s, 3H), 6.92 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 7.26-7.45 (m, 8H)

[157]

[158] <단계 2> 1-(1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아제핀-6(10bH)-일)에타논의 합성

[159]



[160] 질소 기류 하에서 1-(5H-디벤조[b,f]아제핀-5-일)에타논 (113.2 g, 481.3 mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (99.7 g, 577.5 mmol), 실리카 (226.5 g), NaOCl (226.5 g), 아세토니트릴 (1100 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

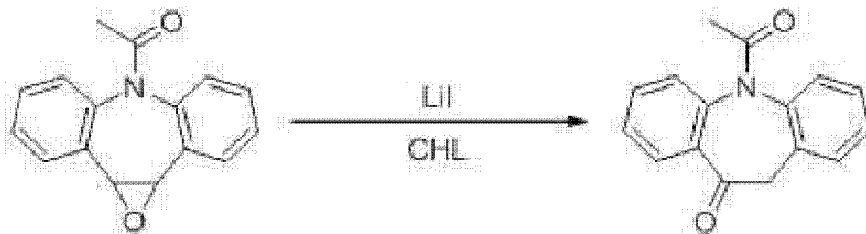
[161] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정 하여 1-(1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아제핀-6(10bH)-일)에타논 (87.1 g, 수율 72%)을 얻었다.

[162] ¹H-NMR: δ 1.95 (s, 3H), 4.28 (s, 2H), 7.26-7.53 (m, 8H)

[163]

[164] <단계 3> 5-아세틸-5H-디벤조[b,f]아제핀-10(11H)-온의 합성

[165]



[166] 질소 기류 하에서 1-(1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아세틸-6(10bH)-일)에탄논 (87.1 g, 346.5 mmol), 리튬 요오드 (55.7 g, 415.8 mmol) 및 클로로폼 (870 ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반하였다.

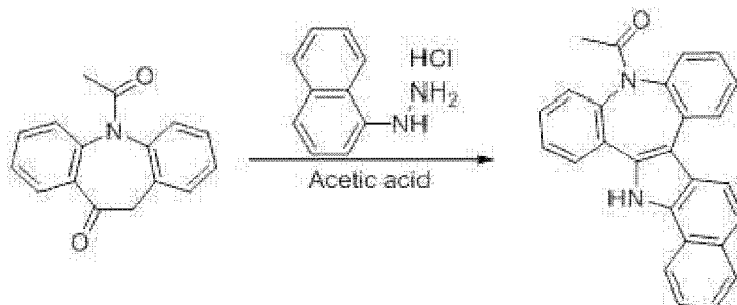
[167] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여 5-아세틸-5H-디벤조[b,f]아세틸-10(11H)-온 (70.5 g, 수율 81%)을 얻었다.

[168] ¹H-NMR: δ 2.10 (s, 3H), 3.85 (d, 1H), 4.33 (d, 1H), 7.30-7.40 (m, 5H), 7.51-7.59 (m, 2H), 8.10 (d, 1H)

[169]

[170] <단계 4> 5-아세틸-10,11-(1H-벤조[g]인돌로)-5H-디벤조[b,f]아세틸의 합성

[171]



[172] 질소 기류 하에서 5-아세틸-5H-디벤조[b,f]아세틸-10(11H)-온 (70.5 g, 280.7 mmol)과 나프탈렌-1-일하이드라진 하이드로클로라이드 (60.1 g, 308.7 mmol), 아세트산 (705 ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반하였다.

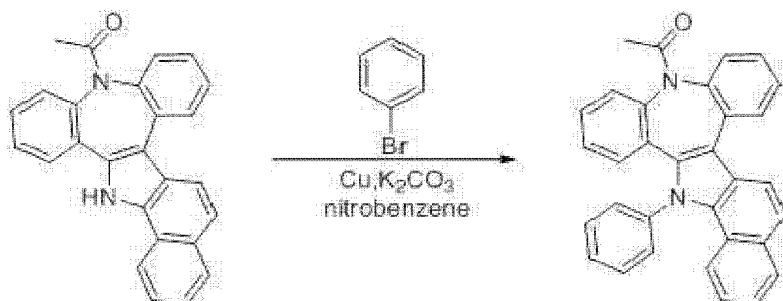
[173] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 4:1 (v/v))로 정제하여 5-아세틸-10,11-(1H-벤조[g]인돌로)-5H-디벤조[b,f]아세틸 (68.3 g, 수율 65%)을 획득하였다.

[174] ¹H-NMR : δ 2.04 (s, 3H), 7.25-7.39 (m, 4H), 7.56-7.87 (m, 7H), 8.16 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 9.06 (d, 1H), 11.36 (b, 1H)

[175]

[176] <단계 5> 5-아세틸-10,11-[1-페닐 벤조[g]인돌로]-디벤조[b,f]아세틸의 합성

[177]



[178] 질소 기류 하에서 5-아세틸-10,11-(1H-벤조[g]인돌로)-5H-디벤조[b,f]아제핀 (68.3 g, 350.9 mmol), 브로모벤젠 (66.1 g, 421.1 mmol), Cu (11.1 g, 175.5 mmol), K₂CO₃ (97.0 g, 701.8 mmol) 및 니트로벤젠 (683 ml)를 혼합하고 210°C에서 12시간 동안 교반하였다.

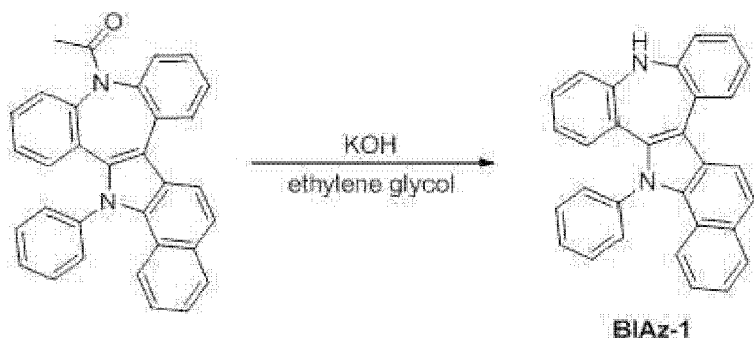
[179] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정하여 5-아세틸-10,11-[1-페닐 벤조[g]인돌로]-디벤조[b,f]아제핀 (123.3 g, 수율 78%)을 얻었다.

[180] ¹H-NMR: δ 2.04 (s, 3H), 7.25-7.26 (m, 2H), 7.39-7.58 (m, 9H), 7.77 (d, 1H), 7.87-7.88 (m, 2H), 8.05-8.06 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 9.06 (d, 1H)

[181]

[182] <단계 6> BIAz-1의 합성

[183]



[184] 질소 기류 하에서 5-아세틸-10,11-[1-페닐 벤조[g]인돌로]-디벤조[b,f]아제핀 (123.3 g, 273.7 mmol), 수산화 칼륨 (16.9 g, 301.0 mmol) 및 에틸렌 글리콜 (1233 ml)을 혼합하고 200°C에서 6시간 동안 교반하였다.

[185] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (헥산:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 BIAz-1 (102.9 g, 수율 92%)을 얻었다.

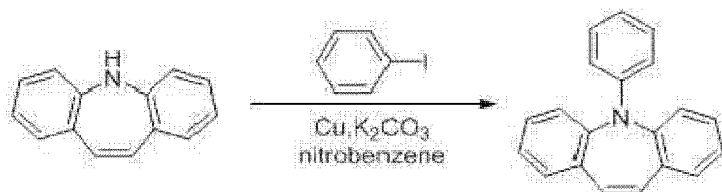
[186] ¹H-NMR: δ 6.69-6.87 (m, 4H), 7.16-7.17 (m, 2H), 7.45-7.67 (m, 9H), 8.05-8.06 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 8.83 (d, 1H)

[187]

[188] [준비예 2] BIAz-2의 합성

[189] <단계 1> 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀의 합성

[190]



[191] 질소 기류 하에서 5H-디벤조[b,f]아제핀 (100 g, 517.5 mmol), 요오드벤젠 (126.7 g, 621.0 mmol), Cu (16.4 g, 258.7 mmol), K₂CO₃ (143.0 g, 1,035.0 mmol) 및 니트로벤젠 (1000 ml)를 혼합하고 210°C에서 12시간 동안 교반하였다.

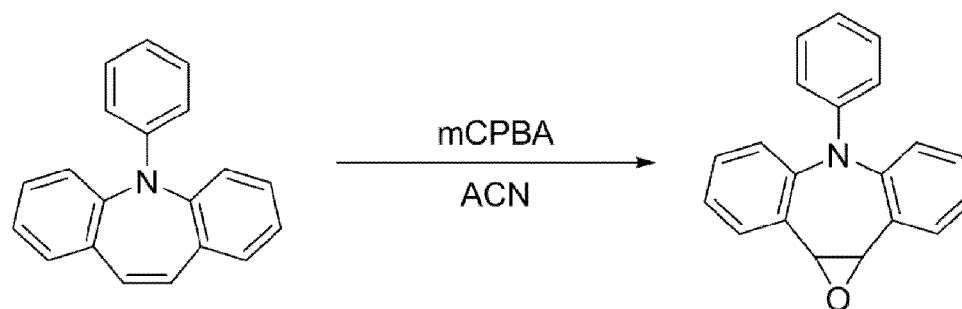
[192] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정하여 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀 (100.4 g, 수율 72%)을 얻었다.

[193] ¹H-NMR: δ 6.63-6.81 (m, 3H), 6.92 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 7.20 (d, 2H), 7.26-7.45 (m, 8H)

[194]

[195] <단계 2> 6-페닐-6,10b-디하이드로-1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아제핀의 합성

[196]



[197] 질소 기류 하에서 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀 (100.4 g, 372.6 mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (77.2 g, 447.1 mmol), 실리카 (200.7 g), NaOCl (200.7 g), 아세토니트릴 (1000 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

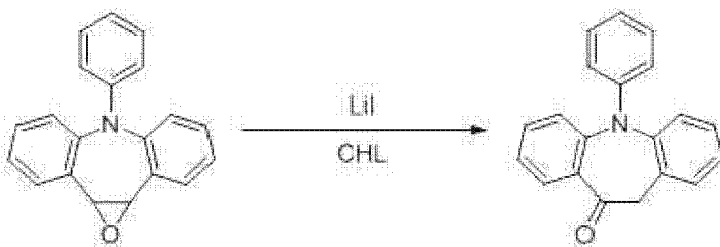
[198] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 6-페닐-6,10b-디하이드로-1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아제핀 (84.0 g, 수율 79%)을 얻었다.

[199] ¹H-NMR: δ 4.31 (s, 2H), 6.63-6.81 (m, 3H), 7.24-7.53 (m, 10H)

[200]

[201] <단계 3> 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀-10(11H)-온의 합성

[202]

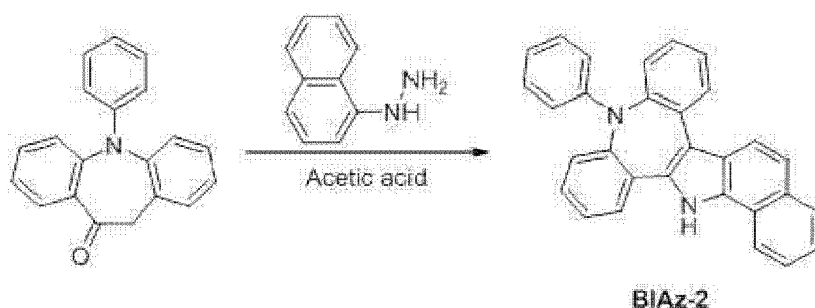


- [203] 질소 기류 하에서 6-페닐-6,10b-디하이드로-1aH-디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]아제핀 (84.0 g, 294.3 mmol), 리튬 요오드 (47.3 g, 353.2 mmol) 및 클로로폼 (840 ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반하였다.
- [204] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$ 로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀-10(11H)-온 (68.0 g, 수율 81%)을 얻었다.
- [205] ^1H -NMR: δ 3.42 (d, 1H), 4.21 (d, 1H), 6.62-6.74 (m, 3H), 7.25-7.40 (m, 7H), 7.51-7.59 (m, 2H), 8.10 (d, 1H)

[206]

[207] <단계 4> BIAz-2 의 합성

[208]



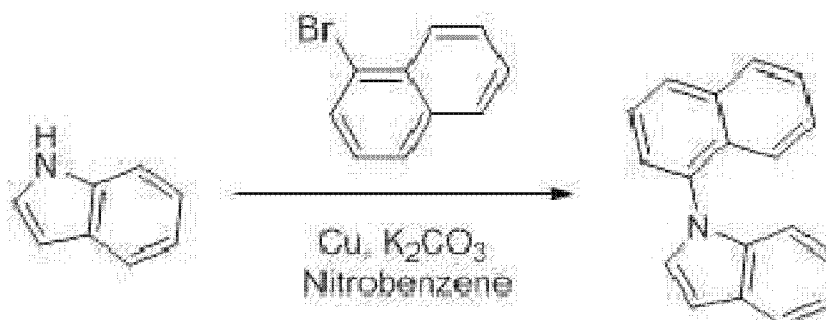
- [209] 질소 기류 하에서 5-페닐-5H-디벤조[b,f]아제핀-10(11H)-온 (68.0 g, 238.4 mmol)과 나프탈렌-1-일하이드라진 하이드로클로라이드 (51.1 g, 262.3 mmol), 아세트산 (700 ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반하였다.
- [210] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$ 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 BIAz-2 (59.4 g, 수율 61 %)을 획득하였다.
- [211] ^1H -NMR: δ 6.63-6.69 (m, 4H), 6.81-6.87 (m, 3H), 7.16-7.20 (m, 4H), 7.54-7.56 (m, 3H), 7.65-7.67 (m, 2H), 8.16 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 8.83 (d, 1H), 11.36 (b, 1H)

[212]

[213] [준비예 3] 13BAz 의 합성

[214] <단계 1> 1-(나프탈렌-1-일)-1H-인돌

[215]



- [216] 질소 기류 하에서 1H-인돌 (100g, 854.0 mmol), 1-브로모나프탈렌 (212.1 g,

1024.8 mmol), Cu (27.2 g, 427.0 mmol), K₂CO₃ (236.1 g, 1.70 mol) 및 니트로벤젠 (3000 ml)를 혼합하고 210°C에서 12시간 동안 교반하였다.

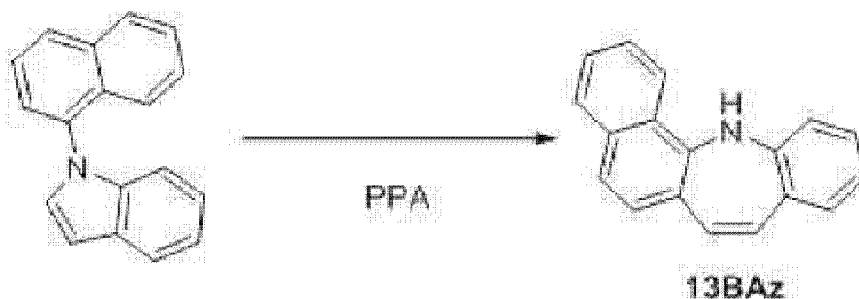
[217] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (헥산:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 1-(나프탈렌-1-일)-1H-인돌 (182.8 g, 수율 88%)을 얻었다.

[218] ¹H-NMR: δ 6.52 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.33 (dd, 1H), 7.55-7.60 (m, 5H), 7.93-7.94 (m, 2H), 8.06-8.07 (m, 3H)

[219]

[220] <단계 2> 13BAz의 합성

[221]



[222] 질소 기류 하에서 1-(나프탈렌-1-일)-1H-인돌 (182.8 g, 751.2 mmol), 폴리인산 (914 g)를 혼합하고 100°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[223] 반응이 종결된 후 물에서 추출한 다음 여과하여 13BAz (58.5 g, 수율 32%)을 얻었다.

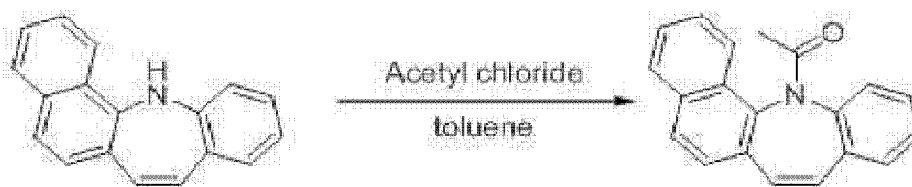
[224] ¹H-NMR: δ 6.81 (dd, 1H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.25-7.29 (m, 2H), 7.53-7.54 (m, 2H), 7.73 (d, 1H), 8.02-8.07 (m, 2H), 8.21 (d, 1H), 8.42 (b, 1H)

[225]

[226] [준비예 4] BIAz-3의 합성

[227] <단계 1> 1-(13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-13-일)에타논의 합성

[228]



[229] 질소 기류 하에서 13BAz (100.0 g, 411.0 mmol), 아세틸 클로라이드 (35.2 ml, 493.2 mmol) 및 톨루엔 (1000 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

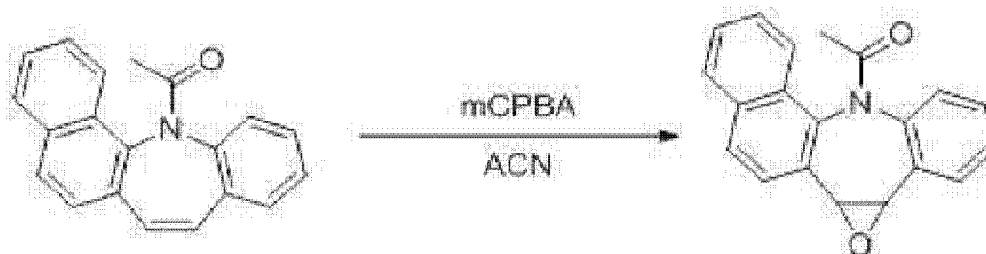
[230] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정하여 1-(13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-13-일)에타논 (102.0 g, 수율 87%)을 얻었다.

[231] ¹H-NMR: δ 2.04 (s, 3H), 6.99-7.00 (m, 2H), 7.19-7.28 (m, 3H), 7.48-7.54 (m, 3H), 7.73 (d, 1H), 7.81 (d, 1H), 8.02-8.07 (m, 2H)

[232]

[233] <단계 2> 1-(1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀-6(12bH)-일)에타논의 합성

[234]



[235] 질소 기류 하에서 1-(13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-13-일)에타논 (102.0 g, 357.6 mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (74.0 g, 429.1 mmol), 실리카 (204.1 g), NaOCl (204.1 g), 아세토니트릴 (1000 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

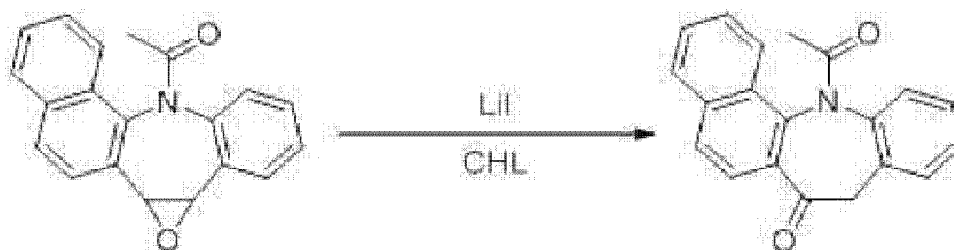
[236] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정 하여 1-(1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀-6(12bH)-일)에타논 (76.5 g, 수율 71%)을 얻었다.

[237] ¹H-NMR: δ 2.04 (s, 3H), 4.19-4.20 (m, 2H), 6.91 (d, 1H), 7.12 (dd, 1H), 7.34-7.36 (m, 2H), 7.49-7.53 (m, 3H), 7.74 (d, 1H), 8.03-8.04 (m, 2H)

[238]

[239] <단계 3> 13-아세틸-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온의 합성

[240]



[241] 질소 기류 하에서 1-(1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀-6(12bH)-일)에타논 (76.5 g, 253.9 mmol), 리튬 요오드 (40.8 g, 304.7 mmol) 및 클로로폼 (750 ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반하였다.

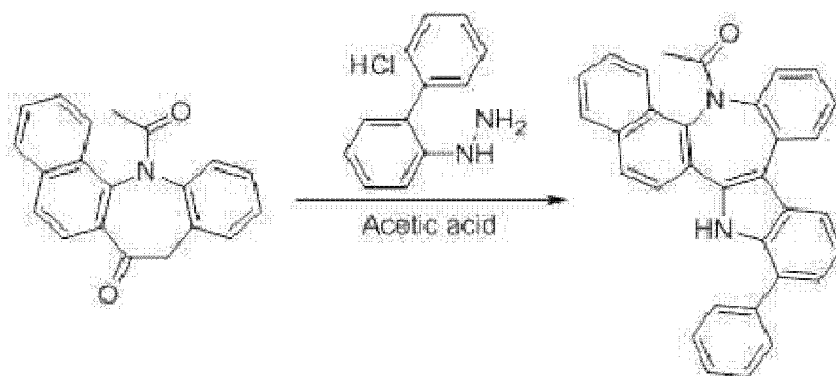
[242] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여 13-아세틸-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온 (57.4 g, 수율 75%)을 얻었다.

[243] ¹H-NMR: δ 2.04 (s, 3H), 3.81 (s, 2H), 7.07 (dd, 1H), 7.21-7.24 (m, 2H), 7.37 (d, 1H), 7.65-7.69 (m, 3H), 8.10-8.23 (m, 3H)

[244]

[245] <단계 4> 13-아세틸-7,8-(7-페닐-1H-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀의 합성

[246]



[247] 질소 기류 하에서

13-아세틸-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온 (57.4 g, 190.4 mmol)과 비페닐-2-일하이드라진 하이드로클로라이드 (46.2 g, 209.5 mmol), 아세트산 (600 ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반하였다.

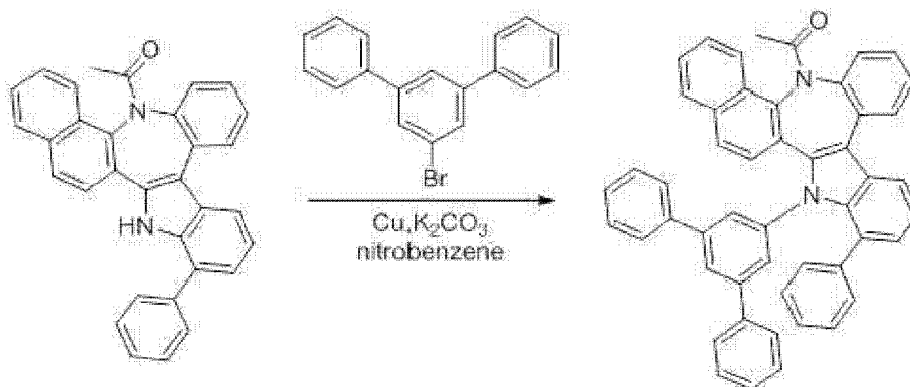
[248] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 4:1 (v/v))로 정제하여 13-아세틸-7,8-(7-페닐-1H-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (52.3 g, 수율 61 %)을 획득하였다.

[249] $^1\text{H-NMR}$: δ 2.04 (s, 3H), 7.14-7.25 (m, 4H), 7.39-7.54 (m, 8H), 7.77-7.87 (m, 4H), 8.02-8.07 (m, 2H), 11.36 (b, 1H)

[250]

[251] <단계 5> 13-아세틸-7,8-(7-페닐-1-(3,5-디페닐벤젠)-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀의 합성

[252]



[253] 질소 기류 하에서

13-아세틸-7,8-(7-페닐-1H-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (52.3 g, 237.1 mmol), 1-브로모-3,5-디페닐벤젠 (88.0 g, 284.5 mmol), Cu (7.5 g, 118.6 mmol), K_2CO_3 (65.5 g, 474.2 mmol) 및 니트로벤젠 (500 ml)를 혼합하고 210°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[254] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정

하여

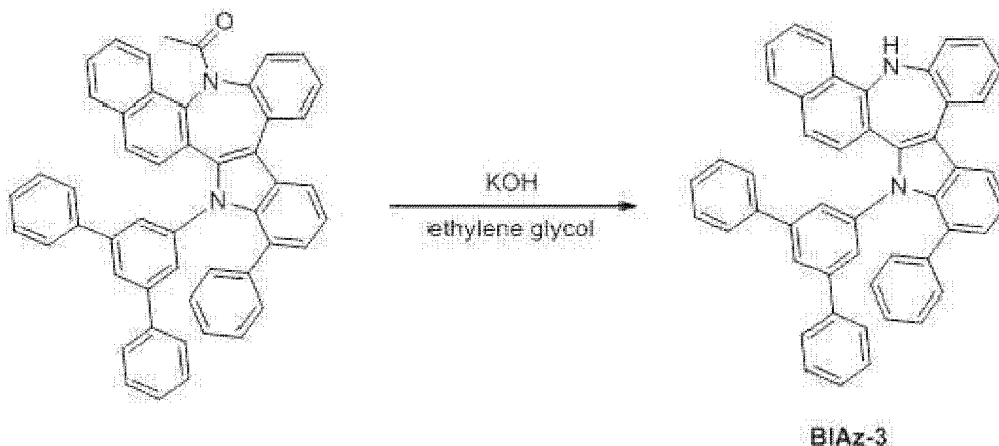
13-아세틸-7,8-(7-페닐-1-(3,5-디페닐벤젠)-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (112.7 g, 수율 70%)을 얻었다.

[255] $^1\text{H-NMR}$: δ 2.04 (s, 3H), 7.19-7.25 (m, 3H), 7.39-7.54 (m, 17H), 7.63 (d, 1H), 7.77-7.78 (m, 2H), 7.87-7.88 (m, 2H), 8.02-8.13 (m, 5H), 8.39 (d, 1H)

[256]

[257] <단계 6> BIAz-3 의 합성

[258]



[259] 질소 기류 하에서

13-아세틸-7,8-(7-페닐-1-(3,5-디페닐벤젠)-인돌로)-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (112.7 g, 166.0 mmol), 수산화 칼륨 (10.2 g, 182.6 mmol) 및 에틸렌 글리콜 (1100 ml)을 혼합하고 200°C에서 6시간 동안 교반하였다.

[260] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO_4 로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (헥산:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 BIAz-3 (93.0 g, 수율 88%)을 얻었다.

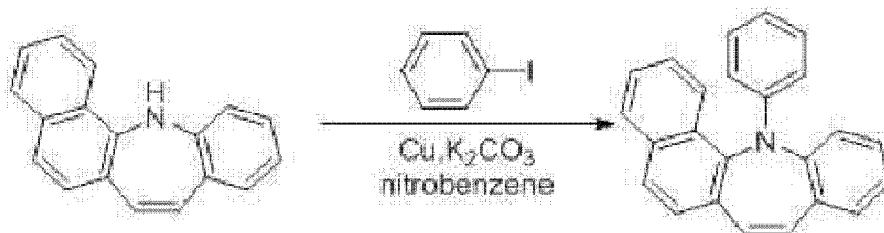
[261] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.69 (d, 1H), 6.87 (dd, 1H), 7.16-7.19 (m, 3H), 7.41-7.54 (m, 18H), 7.63 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 7.88 (s, 1H), 8.02-8.13 (m, 5H), 8.39 (d, 1H)

[262]

[263] [준비예 5] BIAz-4 의 합성

[264] <단계 1> 13-페닐-13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀의 합성

[265]



[266] 질소 기류 하에서 13BAz (100 g, 411.0 mmol), 요오드벤젠 (100.6 g, 493.2 mmol), Cu (13.1 g, 205.5 mmol), K_2CO_3 (113.6 g, 822.0 mmol) 및 니트로벤젠 (1000 ml)를 혼합하고 210°C에서 12시간 동안 교반하였다.

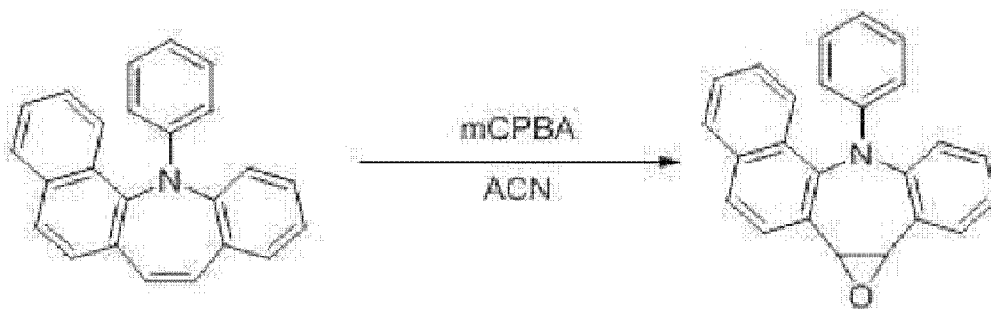
[267] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 농축하고 에탄올로 재결정하여 13-페닐-13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (85.3 g, 수율 68%)을 얻었다.

[268] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.63-6.65 (m, 3H), 6.80-6.81 (m, 2H), 6.99-7.05 (m, 3H), 7.20-7.29 (m, 4H), 7.53-7.54 (m, 2H), 7.73 (d, 1H), 8.02-8.07 (m, 2H)

[269]

[270] <단계 2> 6-페닐-6,12b-디하이드로-1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀의 합성

[271]



[272] 질소 기류 하에서 13-페닐-13H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀 (85.3 g, 267.2 mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (55.3 g, 320.6 mmol), 실리카 (170.7 g), NaOCl (170.7 g), 아세토니트릴 (850 ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

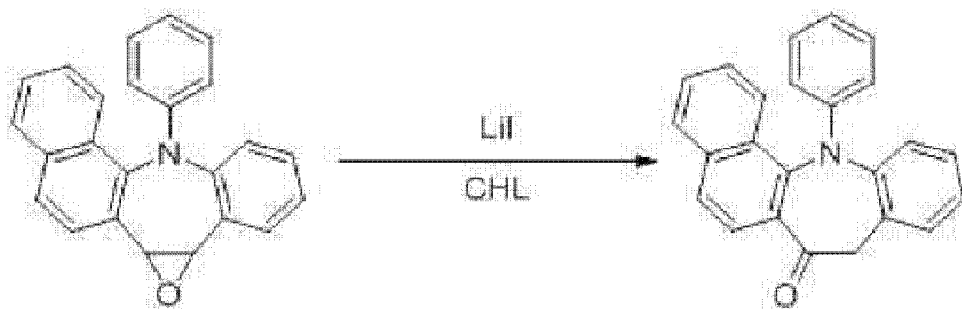
[273] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 6-페닐-6,12b-디하이드로-1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀 (60.9 g, 수율 68%)을 얻었다.

[274] $^1\text{H-NMR}$: δ 4.20 (s, 2H), 6.56-6.63 (m, 3H), 6.74-6.81 (m, 2H), 6.91 (d, 1H), 7.11-7.20 (m, 4H), 7.49-7.53 (m, 3H), 8.03-8.04 (m, 2H)

[275]

[276] <단계 3> 13-페닐-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온의 합성

[277]



[278] 질소 기류 하에서 6-페닐-6,12b-디하이드로-1aH-벤조[f]나프토[1,2-b]옥시레노[2,3-d]아제핀 (60.9g, 181.7 mmol), 리튬 요오드 (29.2g, 218.0 mmol) 및 클로로폼 (600 ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반하였다.

[279] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO_4 로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여

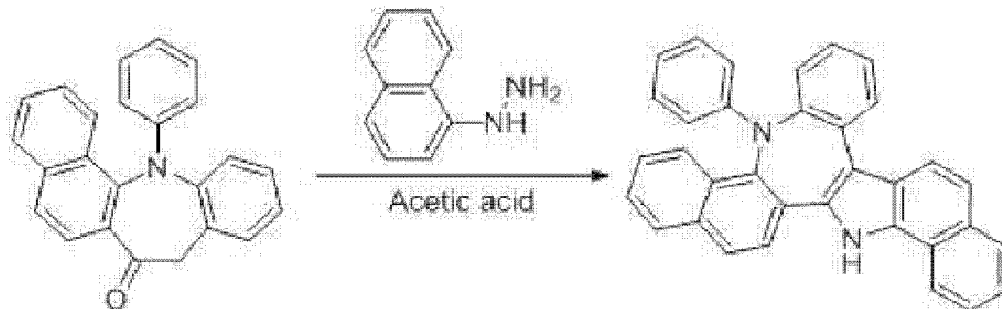
13-페닐-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온 (45.7 g, 수율 75%)을 얻었다.

[280] $^1\text{H-NMR}$: δ 3.81 (s, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.63-6.69 (m, 3H), 6.81 (dd, 1H), 6.98-7.01 (m, 2H), 7.20-7.21 (m, 2H), 7.37 (d, 1H), 7.65-7.69 (m, 2H), 8.10-8.23 (m, 3H)

[281]

[282] <단계 4> BIAz-4 의 합성

[283]



[284] 질소 기류 하에서

13-페닐-8,13-디하이드로-7H-벤조[f]나프토[1,2-b]아제핀-7-온 (45.7g, 136.3mmol)과 나프탈렌-1-일하이드라진 하이드로클로라이드 (29.2g, 149.9mmol), 아세트산 (450ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반하였다.

[285] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 BIAz-4 (42.5g, 수율 68%)을 획득하였다.

[286] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.63-6.69 (m, 3H), 6.81-6.87 (m, 2H), 7.16-7.20 (m, 3H), 7.53-7.67 (m, 8H), 7.78 (d, 1H), 8.02-8.16 (m, 3H), 8.51 (d, 1H), 11.36 (b, 1H)

[287]

[288] [준비예 6] BIAz-5 의 합성

[289] <단계 1> 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]옥세핀의 합성

[290]



[291] 질소 기류 하에서 디벤조[b,f]옥세핀 (100.0g, 514.9mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (106.6g, 617.8mmol), 실리카 (200.0g), NaOCl (200.0g), 아세토니트릴 (1000ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.

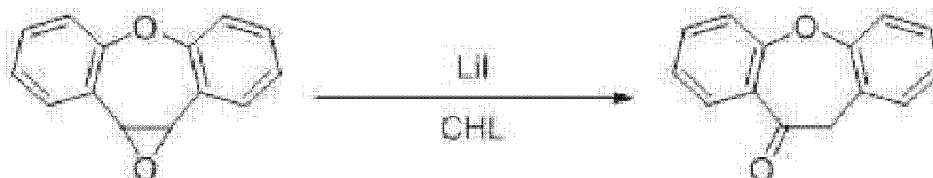
[292] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]옥세핀 (87.7g, 수율 81%)을 얻었다.

[293] $^1\text{H-NMR}$: δ 4.30 (s, 2H), 7.10 (d, 2H), 7.26-7.34 (m, 6H)

[294]

[295] <단계 2> 디벤조[b,f]옥세핀-10(11H)-온의 합성

[296]



[297] 질소 기류 하에서 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]옥세핀 (87.7g, 417.0mmol), 리튬 요오드 (67.0g, 500.4mmol) 및 클로로폼 (900ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반 하였다.

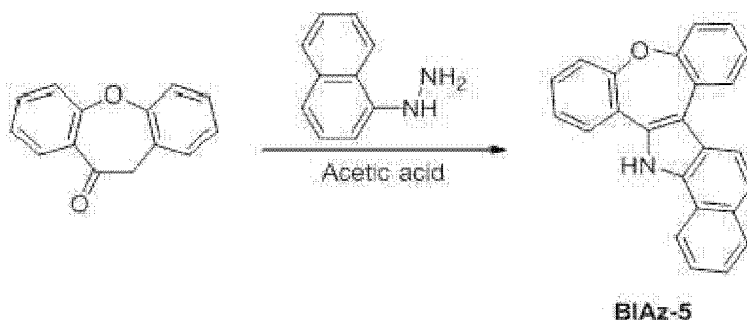
[298] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여 디벤조[b,f]옥세핀-10(11H)-온 (69.3g, 수율 79%)을 얻었다.

[299] ¹H-NMR: δ 3.51 (d, 1H), 4.42 (d, 1H), 7.05 (t, 1H), 7.19-7.28 (m, 4H), 7.43-7.44 (m, 2H), 7.60 (t, 1H)

[300]

[301] <단계 3> BIAz-5 의 합성

[302]



[303] 질소 기류하에서 디벤조[b,f]옥세핀-10(11H)-온 (69.3g, 329.5mmol)과 나프탈렌-1-일하이드라진 하이드로클로라이드 (70.5g, 362.4mmol), 아세트산 (700ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반 하였다.

[304] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 BIAz-5 (56.0g, 수율 51%)을 획득하였다.

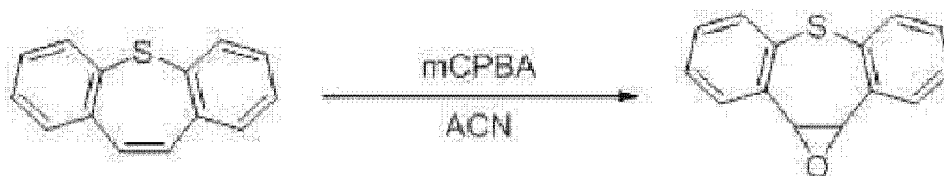
[305] ¹H-NMR : δ 7.20-7.23 (m, 4H), 7.36-7.37 (m, 2H), 7.55-7.56 (m, 2H), 7.67-7.75 (m, 3H), 8.16 (d, 1H), 8.39 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 11.36 (b, 1H)

[306]

[307] [준비예 7] BAz-6 의 합성

[308] <단계 1> 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]티에핀의 합성

[309]

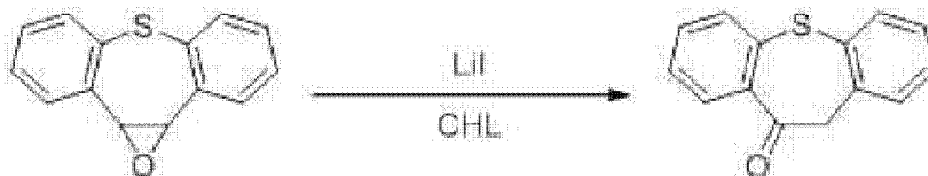


- [310] 질소 기류 하에서 디벤조[b,f]티에핀 (100.0g, 475.5mmol), *meta*-클로로페록시벤조산 (98.5g, 570.6mmol), 실리카 (200.0g), NaOCl (200.0g), 아세토니트릴 (1000ml)를 혼합하고 80°C에서 2시간 동안 교반하였다.
- [311] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]티에핀 (80.7g, 수율 75%)을 얻었다.
- [312] ¹H-NMR: δ 4.40 (s, 2H), 7.12-7.16 (m, 4H), 7.45 (t, 2H), 7.70 (d, 2H)

[313]

[314] <단계 2> 디벤조[b,f]티에핀-10(11H)-온의 합성

[315]

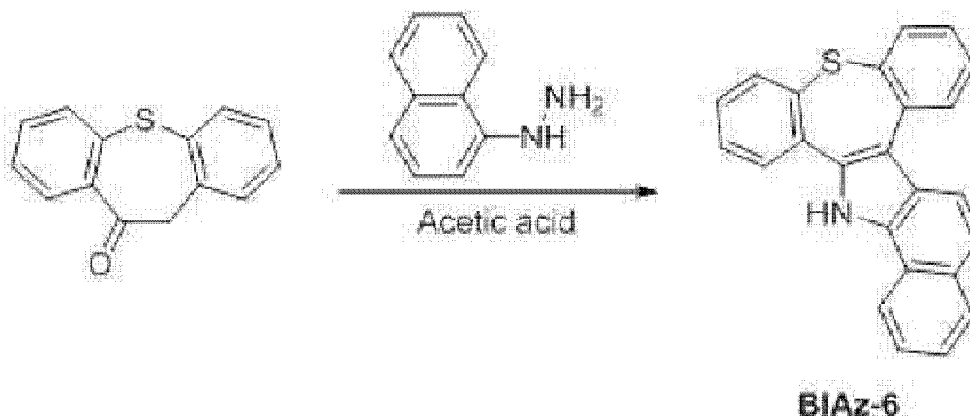


- [316] 질소 기류하에서 1a,10b-디하이드로디벤조[b,f]옥시레노[2,3-d]티에핀 (80.7g, 356.7mmol), 리튬 요오드 (57.3.0g, 428.0mmol) 및 클로로폼 (800ml)를 혼합하고 60°C에서 1시간 동안 교반 하였다.
- [317] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 MgSO₄로 수분을 제거하고, 에탄올에서 재결정하여 디벤조[b,f]티에핀-10(11H)-온 (59.7g, 수율 74%)을 얻었다.
- [318] ¹H-NMR: δ 3.61 (d, 1H), 4.47 (d, 1H), 7.03-7.07 (m, 2H), 7.30-7.33 (m, 2H), 7.44-7.52 (m, 2H), 7.65 (d, 1H), 7.74 (d, 1H)

[319]

[320] <단계 3> BIAz-6 의 합성

[321]



- [322] 질소 기류하에서 디벤조[b,f]티에핀-10(11H)-온 (59.7g, 263.9mmol)과 나프탈렌-1-일하이드라진 하이드로클로라이드 (56.5g, 290.3mmol), 아세트산 (600ml)를 넣은 후 120°C에서 12시간 교반하였다.
- [323] 반응 종료 후 디클로로메탄으로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (헥산:MC = 3:1 (v/v))로

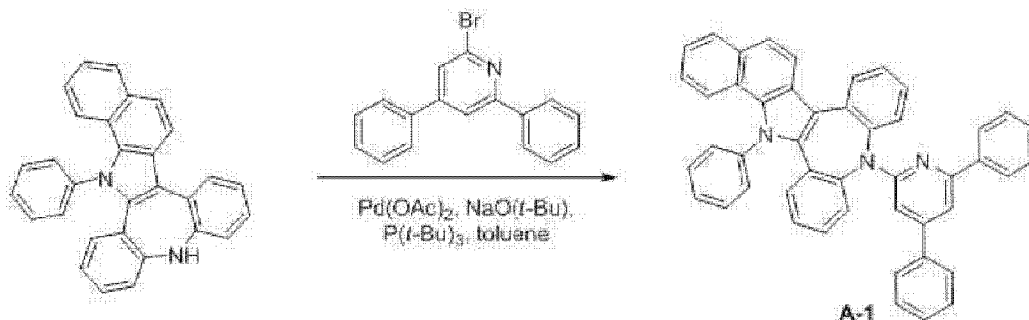
정제하여 BIAz-6 (50.7g, 수율 55%)을 획득하였다.

[324] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.21-7.25 (m, 4H), 7.47-7.67 (m, 8H), 8.16 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 11.36 (b, 1H)

[325]

[326] **[합성예 1] A-1의 합성**

[327]



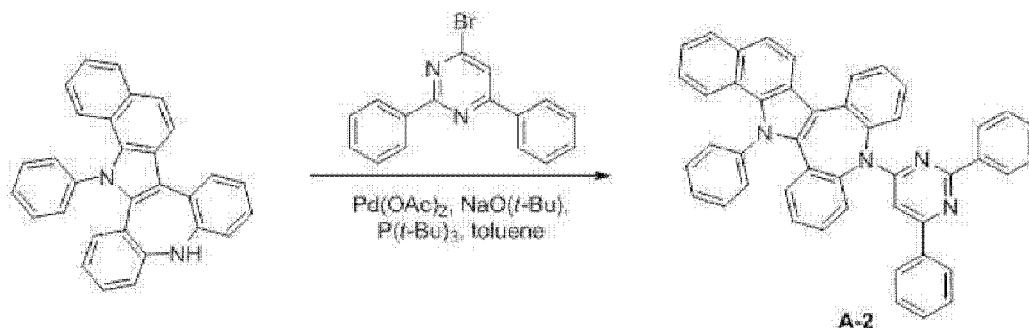
[328] 질소 기류 하에서 BIAz-1 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5g, 8.0mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.08g, 0.34mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.16ml, 0.67mmol), $\text{NaO}(\text{t-Bu})$ (1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C 에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 A-1 (2.7g, 수율 64%)을 얻었다.

[329] Mass (이론치: 637.58, 측정치: 637 g/mol)

[330]

[331] **[합성예 2] A-2의 합성**

[332]



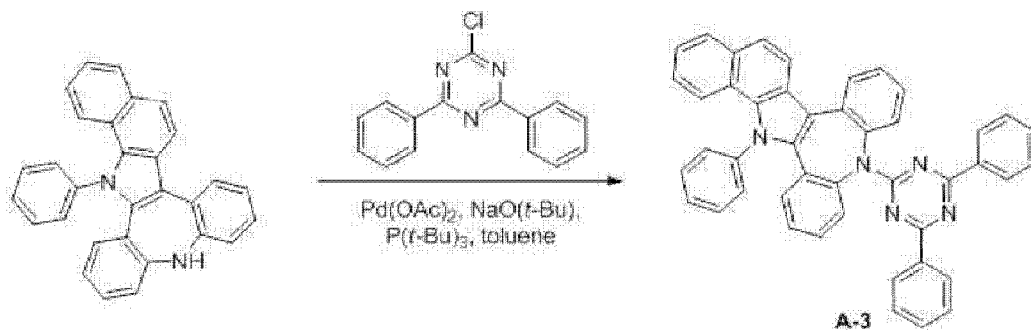
[333] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-2 (2.9g, 수율 68%)를 얻었다.

[334] Mass (이론치: 638.57, 측정치: 638 g/mol)

[335]

[336] **[합성예 3] A-3의 합성**

[337]



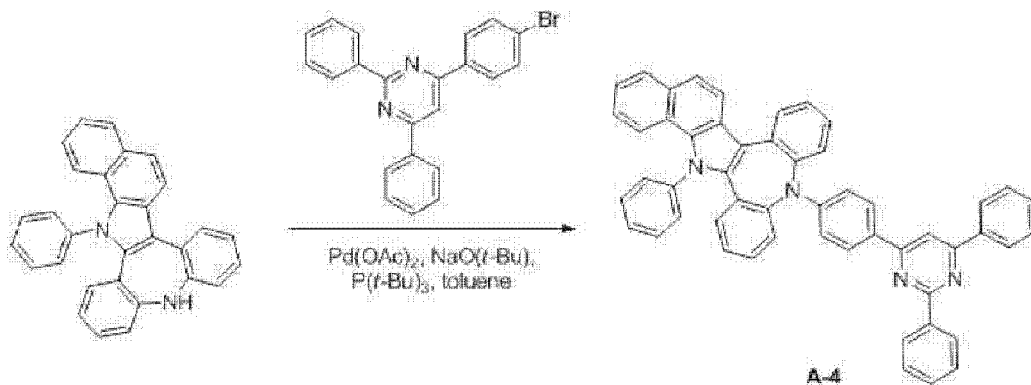
[338] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-3 (2.8g, 수율 65%)를 얻었다.

[339] Mass (이론치: 638.57, 측정치: 638 g/mol)

[340]

[341] **[합성예 4] A-4의 합성**

[342]



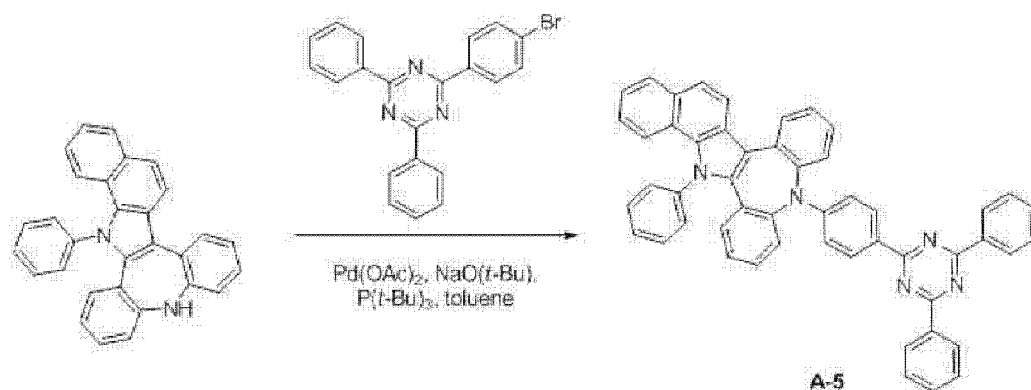
[343] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-4 (3.0g, 수율 63%)을 얻었다.

[344] Mass (이론치: 714.6, 측정치: 714 g/mol)

[345]

[346] **[합성예 5] A-5의 합성**

[347]



[348] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진

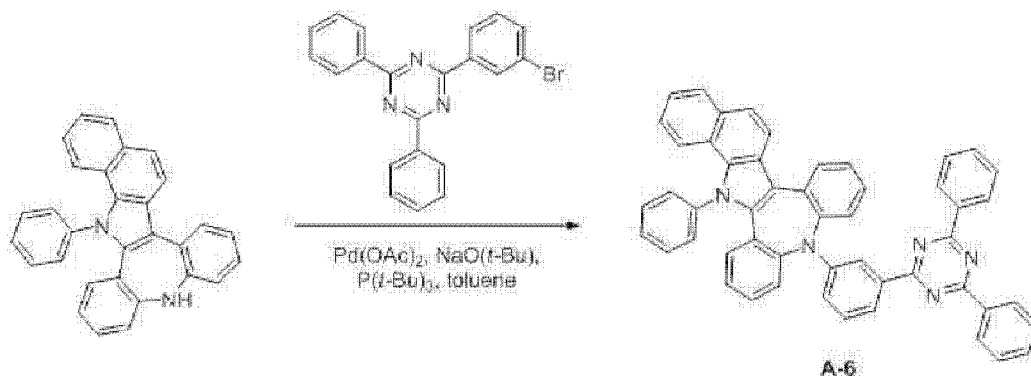
(3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-5 (3.2g, 수율 67%)을 얻었다.

[349] Mass (이론치: 715.6, 측정치: 715 g/mol)

[350]

[351] **[합성예 6] A-6의 합성**

[352]



[353] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신

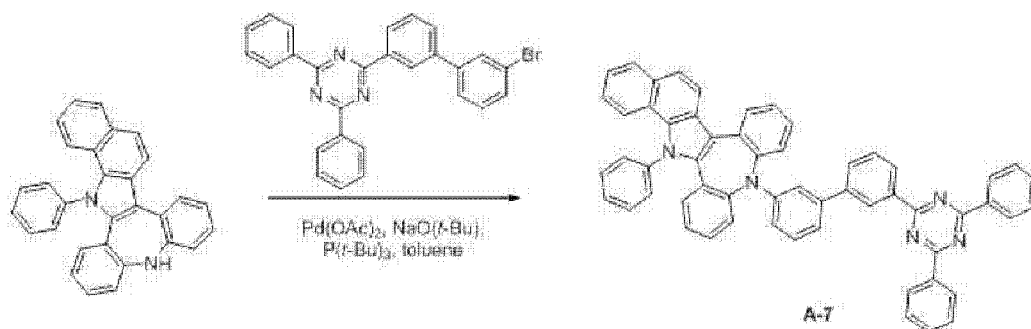
2-(3-브로모페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-6 (2.9g, 수율 61%)를 얻었다.

[354] Mass (이론치: 715.6, 측정치: 715 g/mol)

[355]

[356] **[합성예 7] A-7의 합성**

[357]



[358] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신

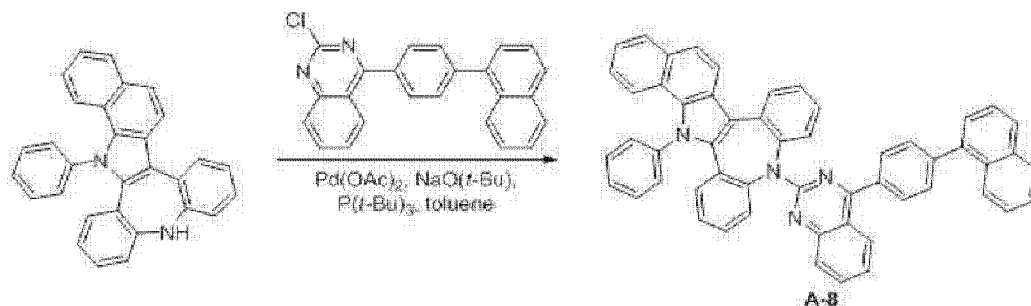
2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-7 (3.5g, 수율 66%)를 얻었다.

[359] Mass (이론치: 792.64, 측정치: 792 g/mol)

[360]

[361] **[합성예 8] A-8의 합성**

[362]



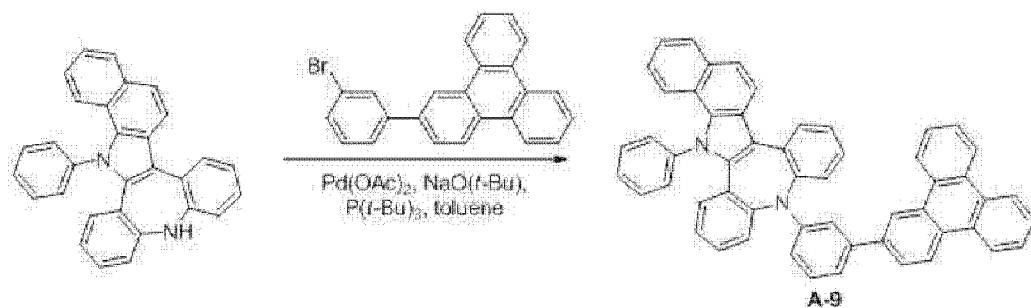
[363] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-8 (3.2g, 수율 64%)을 얻었다.

[364] Mass (이론치: 738.6, 측정치: 738 g/mol)

[365]

[366] [합성예 9] A-9의 합성

[367]



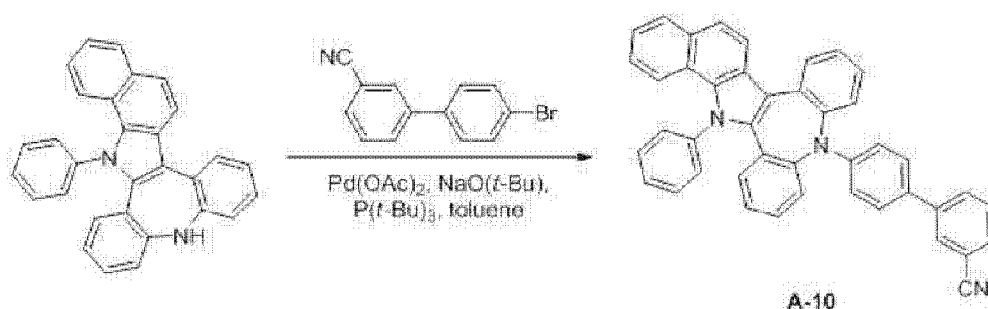
[368] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-9 (3.0g, 수율 63%)을 얻었다.

[369] Mass (이론치: 710.60, 측정치: 710 g/mol)

[370]

[371] [합성예 10] A-10의 합성

[372]



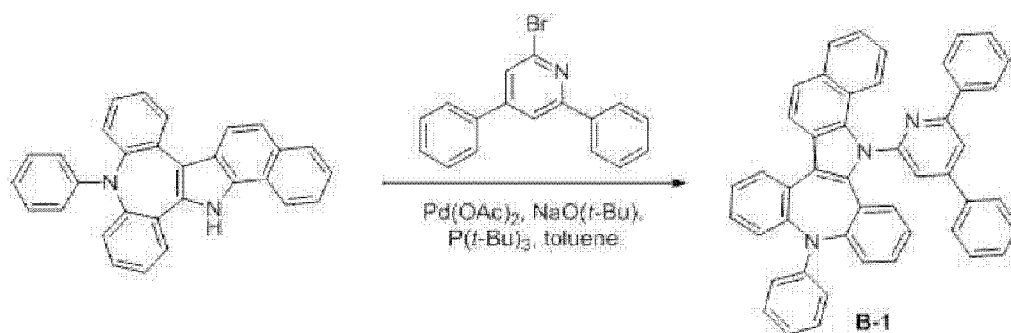
[373] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-10 (2.7g, 수율 70%)을 얻었다.

[374] Mass (이론치: 585.6, 측정치: 585 g/mol)

[375]

[376] **[합성예 11] B-1의 합성**

[377]



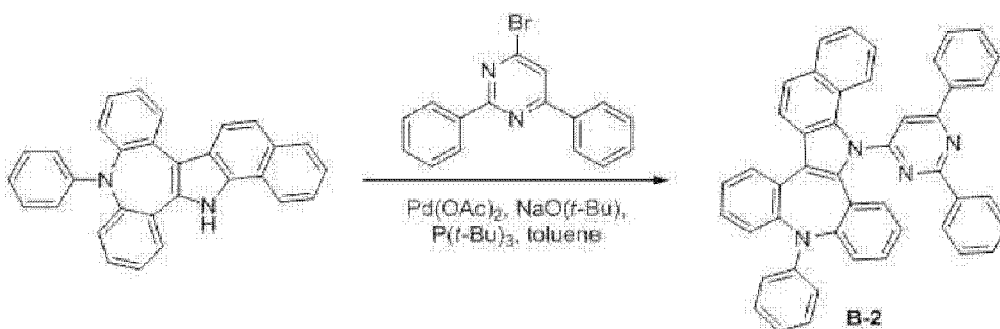
[378] 질소 기류 하에서 BIAz-2 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5g, 8.0mmol), Pd(OAc)₂ (0.08g, 0.34mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.16ml, 0.67mmol), NaO(*t*-Bu) (1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 B-1 (2.9g, 수율 68%)을 얻었다.

[379] Mass (이론치: 637.58, 측정치: 637 g/mol)

[380]

[381] **[합성예 12] B-2의 합성**

[382]



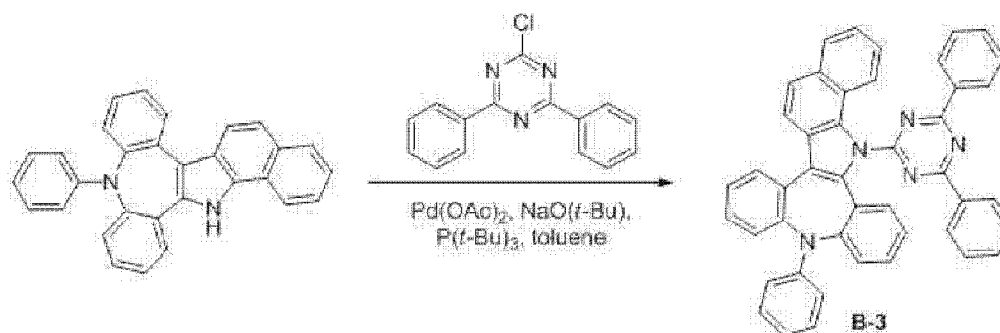
[383] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-2 (3.0g, 수율 71%)를 얻었다.

[384] Mass (이론치: 638.57, 측정치: 638 g/mol)

[385]

[386] **[합성예 13] B-3의 합성**

[387]



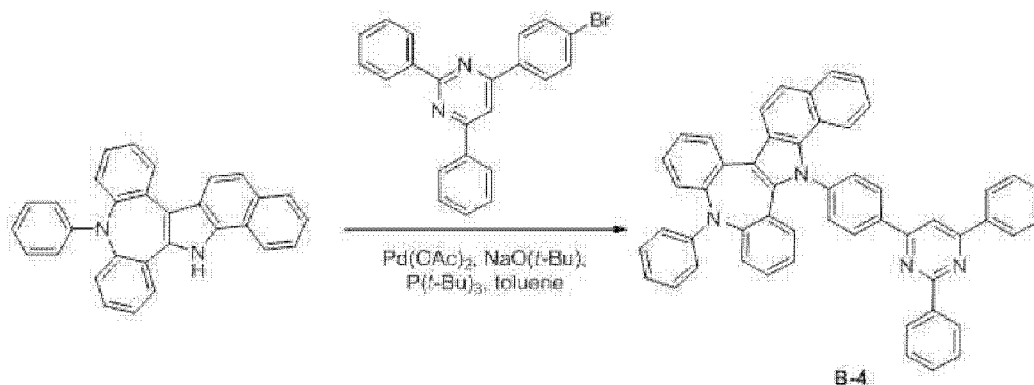
[388] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-3 (2.7g, 수율 63%)를 얻었다.

[389] Mass (이론치: 638.57, 측정치: 638 g/mol)

[390]

[391] **[합성예 14] B-4의 합성**

[392]



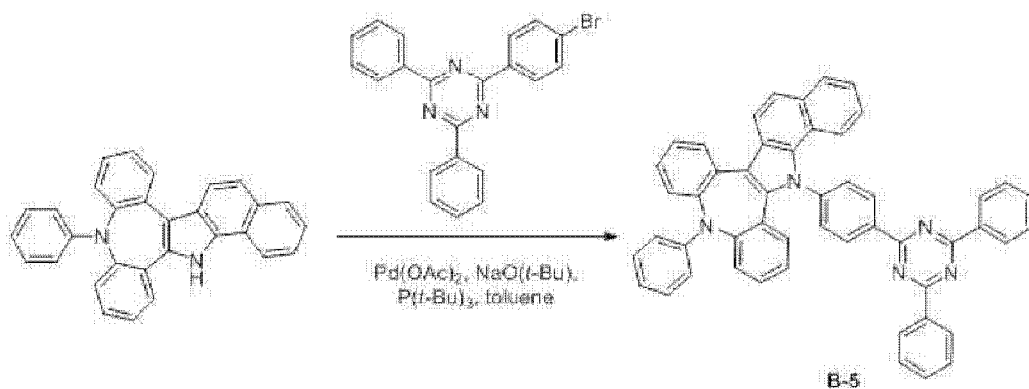
[393] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디피리미딘 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-4 (3.2g, 수율 66%)을 얻었다.

[394] Mass (이론치: 714.6, 측정치: 714 g/mol)

[395]

[396] **[합성예 15] B-5의 합성**

[397]



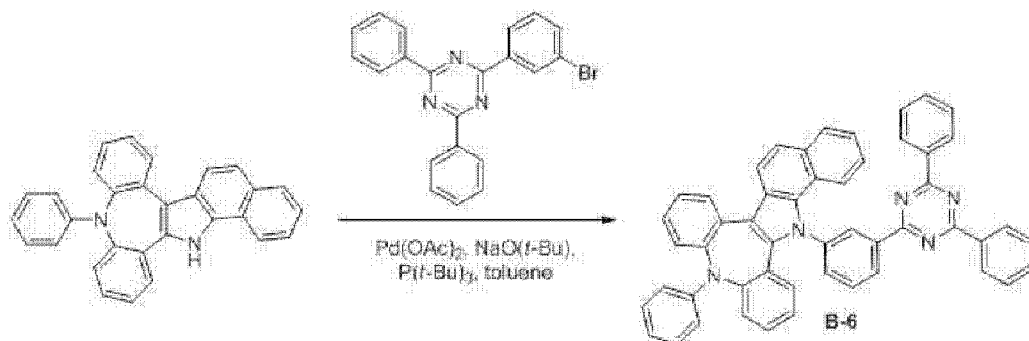
[398] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-5 (3.4g, 수율 70%)을 얻었다.

[399] Mass (이론치: 715.6, 측정치: 715 g/mol)

[400]

[401] **[합성예 16] B-6의 합성**

[402]



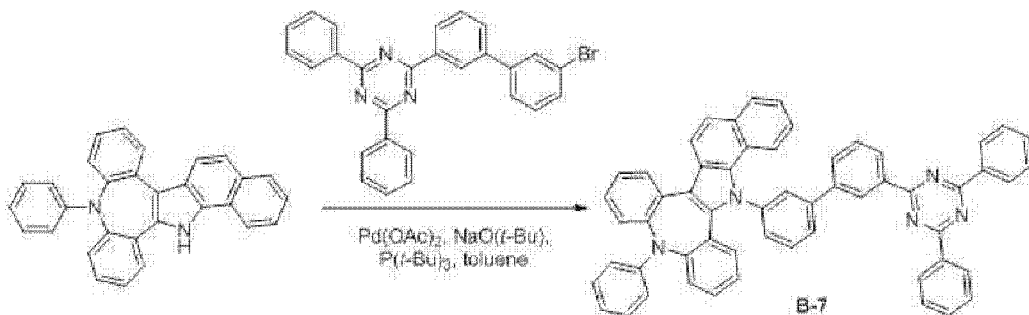
[403] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-6 (3.1g, 수율 65%)를 얻었다.

[404] Mass (이론치: 715.6, 측정치: 715 g/mol)

[405]

[406] **[합성예 17] B-7의 합성**

[407]



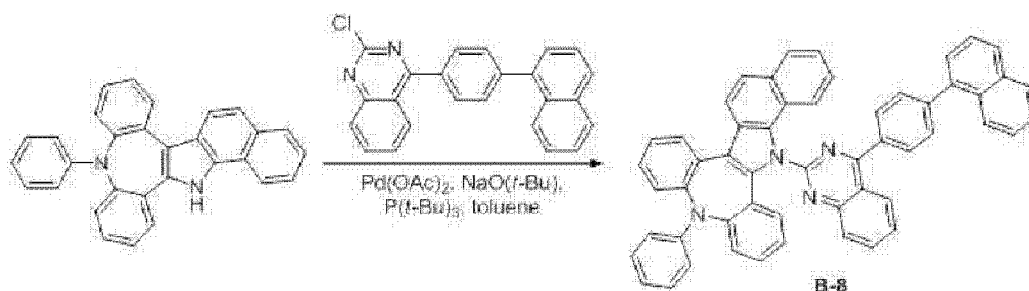
[408] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-7 (3.3g, 수율 62%)를 얻었다.

[409] Mass (이론치: 792.64, 측정치: 792 g/mol)

[410]

[411] **[합성예 18] B-8의 합성**

[412]



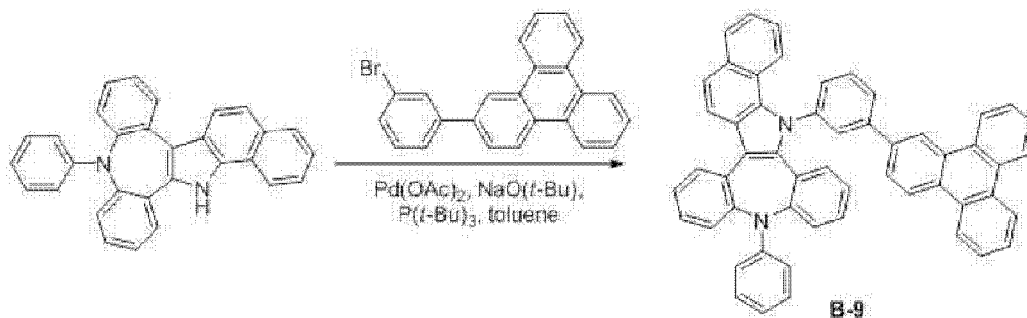
[413] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-8 (3.4g, 수율 70%)을 얻었다.

[414] Mass (이론치: 738.6, 측정치: 738 g/mol)

[415]

[416] **[합성예 19] B-9의 합성**

[417]



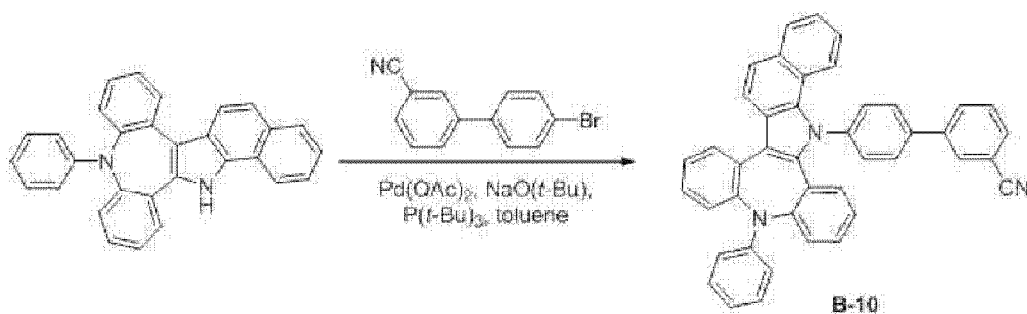
[418] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-9 (3.0g, 수율 64%)을 얻었다.

[419] Mass (이론치: 710.60, 측정치: 710 g/mol)

[420]

[421] **[합성예 20] B-10의 합성**

[422]



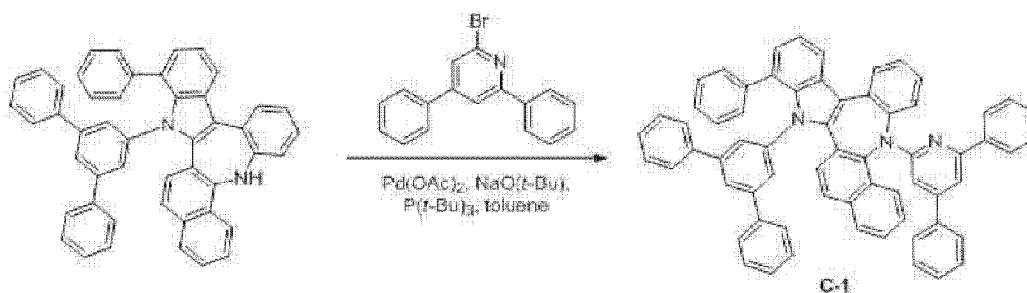
[423] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-10 (2.7g, 수율 68%)을 얻었다.

[424] Mass (이론치: 585.6, 측정치: 585 g/mol)

[425]

[426] **[합성예 21] C-1의 합성**

[427]



[428] 질소 기류 하에서 BIAz-3 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5g, 8.0mmol), Pd(OAc)₂ (0.08g, 0.34mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.16ml, 0.67mmol), NaO(*t*-Bu)

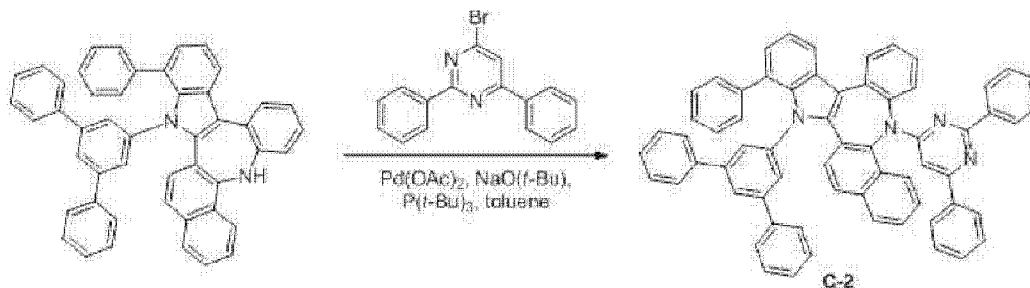
(1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 C-1 (3.8g, 수율 66%)을 얻었다.

[429] Mass (이론치: 865.87, 측정치: 865 g/mol)

[430]

[431] **[합성예 22] C-2의 합성**

[432]



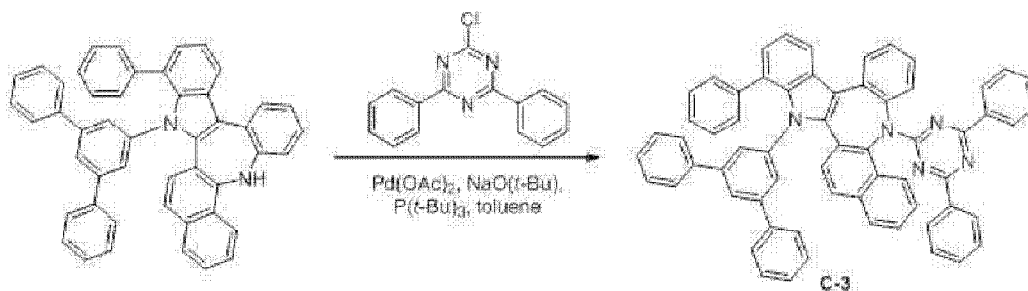
[433] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-2 (3.5g, 수율 61%)를 얻었다.

[434] Mass (이론치: 866.86, 측정치: 866 g/mol)

[435]

[436] **[합성예 23] C-3의 합성**

[437]



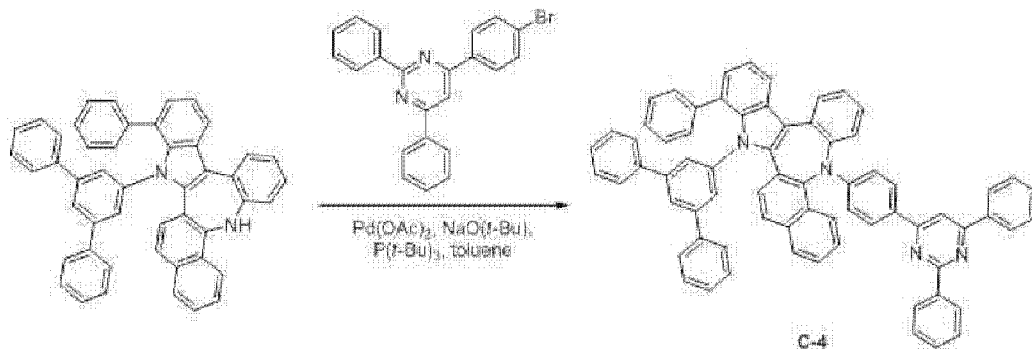
[438] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-3 (3.8g, 수율 65%)를 얻었다.

[439] Mass (이론치: 866.86, 측정치: 866 g/mol)

[440]

[441] **[합성예 24] C-4의 합성**

[442]



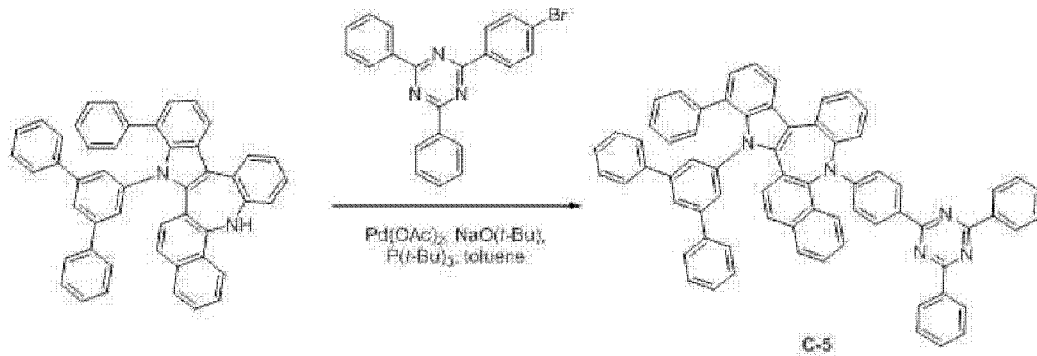
[443] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-4 (4.3g, 수율 68%)을 얻었다.

[444] Mass (이론치: 942.89, 측정치: 942 g/mol)

[445]

[446] **[합성예 25] C-5의 합성**

[447]



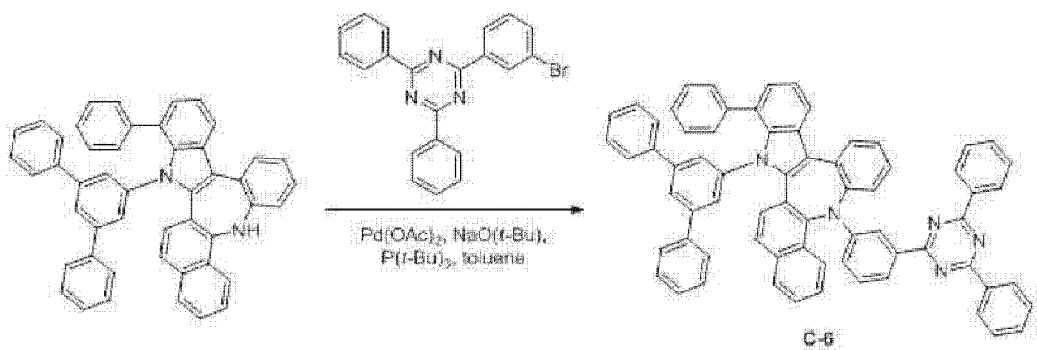
[448] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-5 (3.9g, 수율 61%)을 얻었다.

[449] Mass (이론치: 943.89, 측정치: 943 g/mol)

[450]

[451] **[합성예 26] C-6의 합성**

[452]



[453] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 21과 동일한 과정을

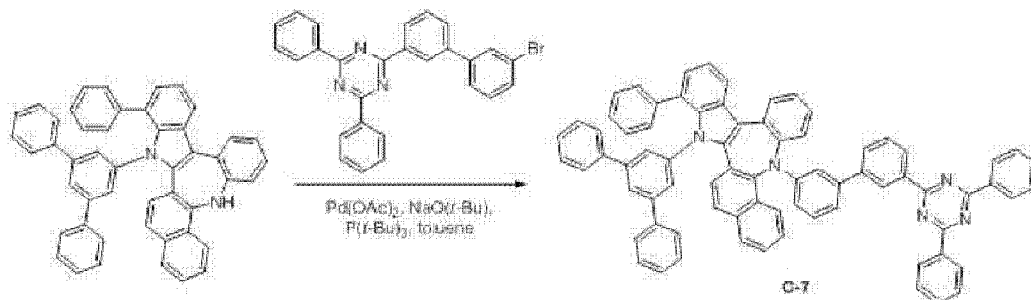
수행하여 목적 화합물인 C-6 (4.5g, 수율 71%)를 얻었다.

[454] Mass (이론치: 943.89, 측정치: 943 g/mol)

[455]

[456] **[합성예 27] C-7의 합성**

[457]



[458] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신

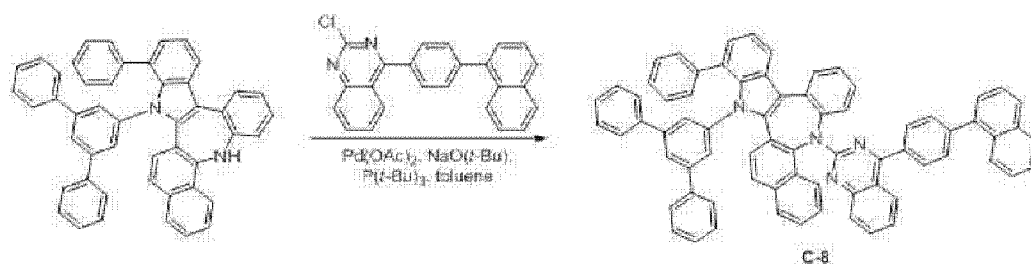
2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-7 (4.9g, 수율 72%)를 얻었다.

[459] Mass (이론치: 1020.93, 측정치: 1020 g/mol)

[460]

[461] **[합성예 28] C-8의 합성**

[462]



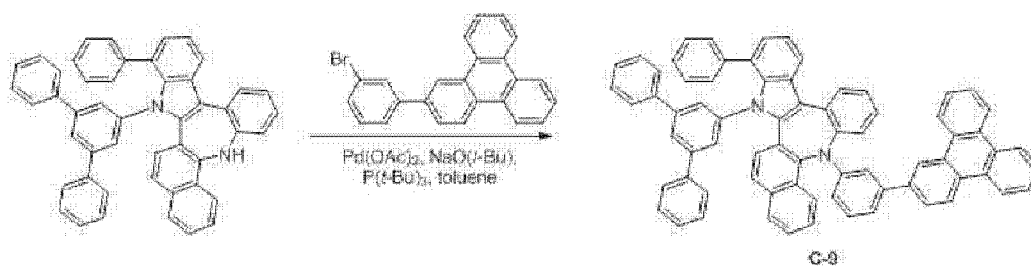
[463] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-8 (4.2g, 수율 65%)을 얻었다.

[464] Mass (이론치: 966.89, 측정치: 966 g/mol)

[465]

[466] **[합성예 29] C-9의 합성**

[467]



[468] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여

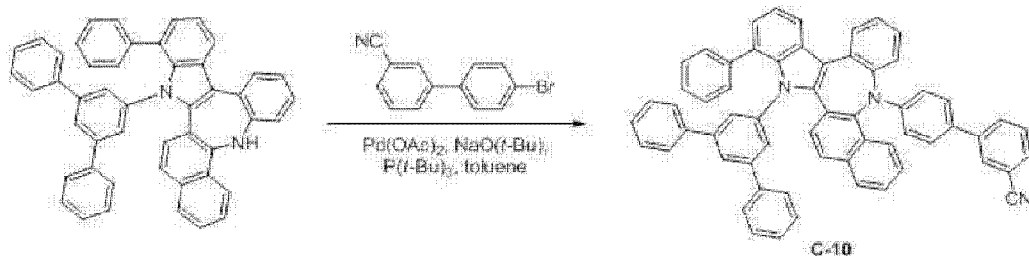
목적 화합물인 C-9 (4.2g, 수율 66%)을 얻었다.

[469] Mass (이론치: 938.89, 측정치: 938 g/mol)

[470]

[471] **[합성예 30] C-10의 합성**

[472]



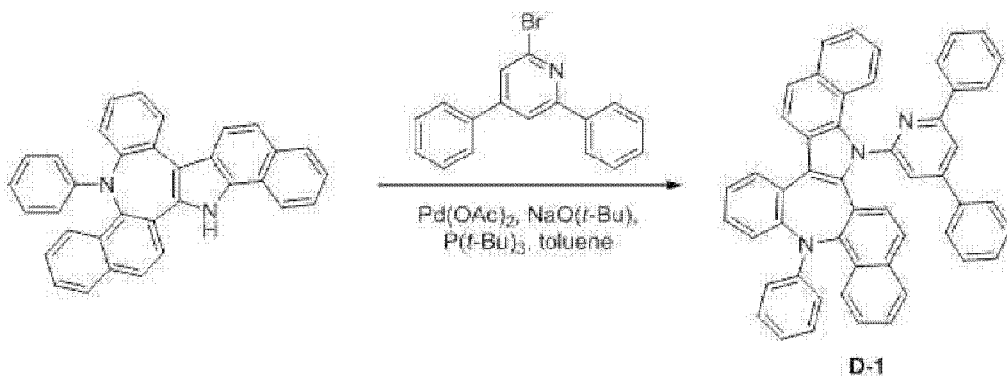
[473] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-10 (3.3g, 수율 61%)을 얻었다.

[474] Mass (이론치: 813.8, 측정치: 813 g/mol)

[475]

[476] **[합성예 31] D-1의 합성**

[477]



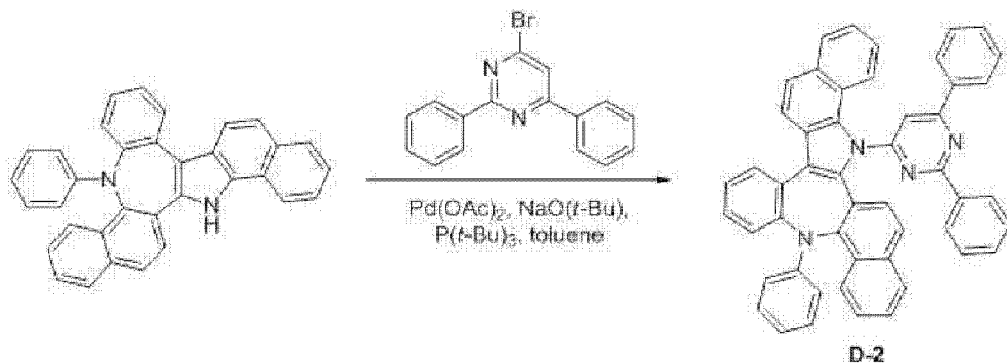
[478] 질소 기류 하에서 BIAz-4 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5 g, 8.0mol), Pd(OAc)₂ (0.08g, 0.34mmol), P(t-Bu)₃ (0.16ml, 0.67mmol), NaO(t-Bu) (1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C에서 5시간 동안 교반 하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 filter 한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 D-1 (3.0g, 수율 65%)을 얻었다.

[479] Mass (이론치: 687.64, 측정치: 687 g/mol)

[480]

[481] **[합성예 32] D-2의 합성**

[482]



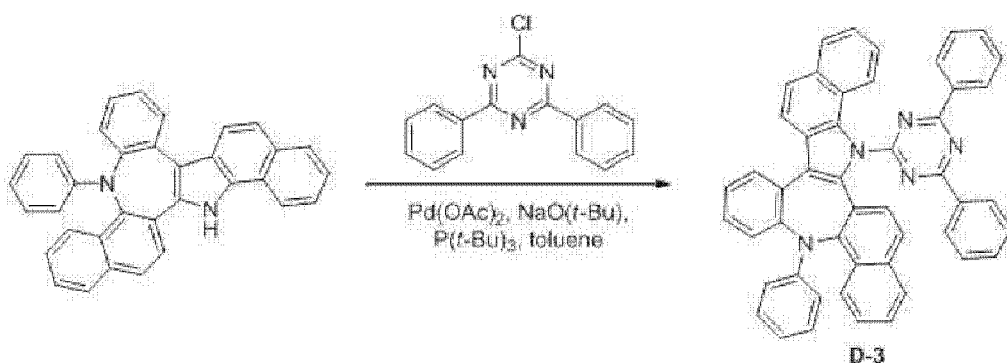
[483] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-2 (3.2g, 수율 69%)를 얻었다.

[484] Mass (이론치: 688.63, 측정치: 688 g/mol)

[485]

[486] **[합성예 33] D-3의 합성**

[487]



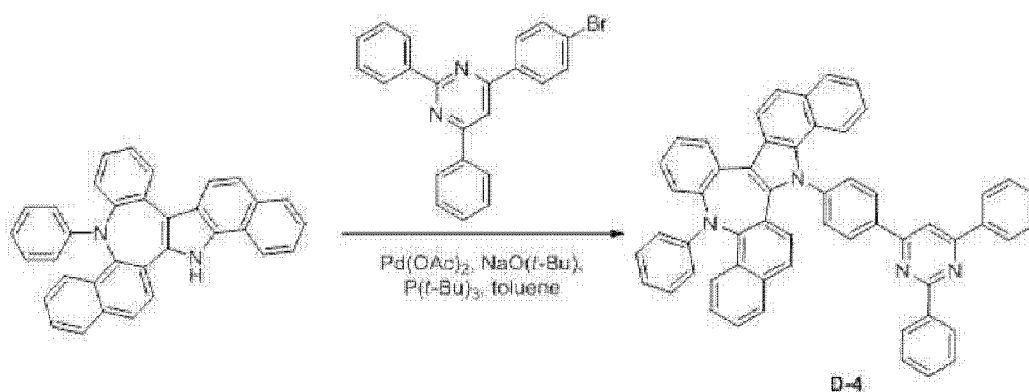
[488] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-3 (3.0g, 수율 66%)을 얻었다.

[489] Mass (이론치: 688.63, 측정치: 688 g/mol)

[490]

[491] **[합성예 34] D-4의 합성**

[492]



[493] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (3.1g,

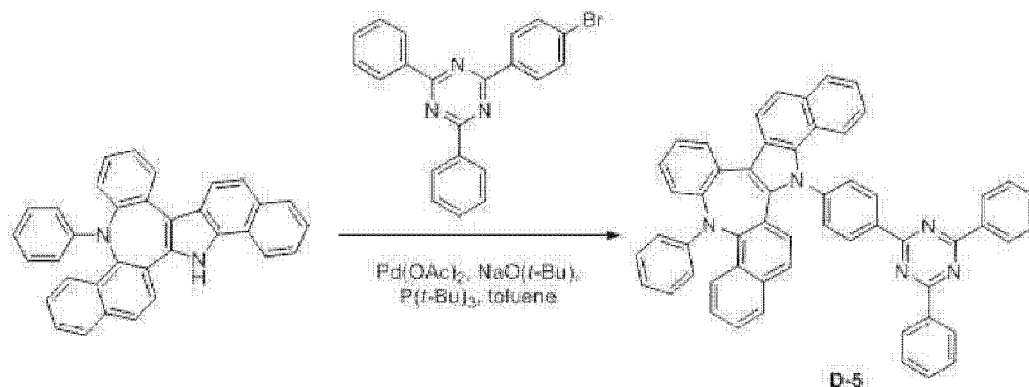
8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-4 (3.4g, 수율 67%)를 얻었다.

[494] Mass (이론치: 764.66, 측정치: 764 g/mol)

[495]

[496] **[합성예 35] D-5의 합성**

[497]



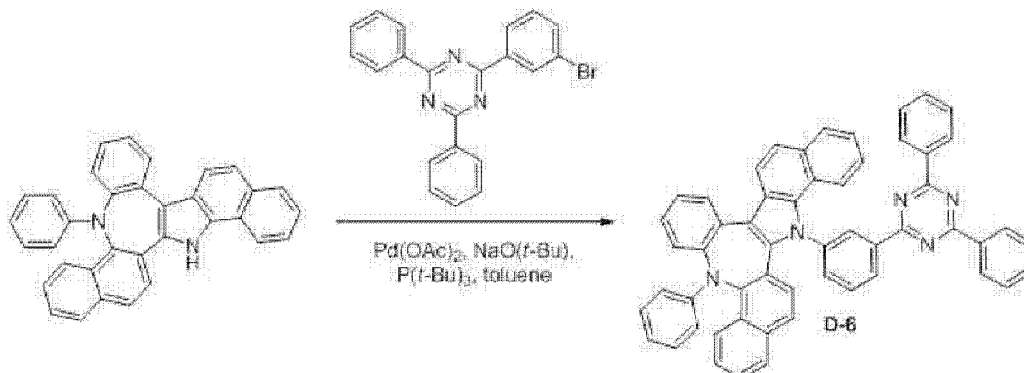
[498] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-5 (3.1g, 수율 61%)를 얻었다.

[499] Mass (이론치: 765.66, 측정치: 765 g/mol)

[500]

[501] **[합성예 36] D-6의 합성**

[502]



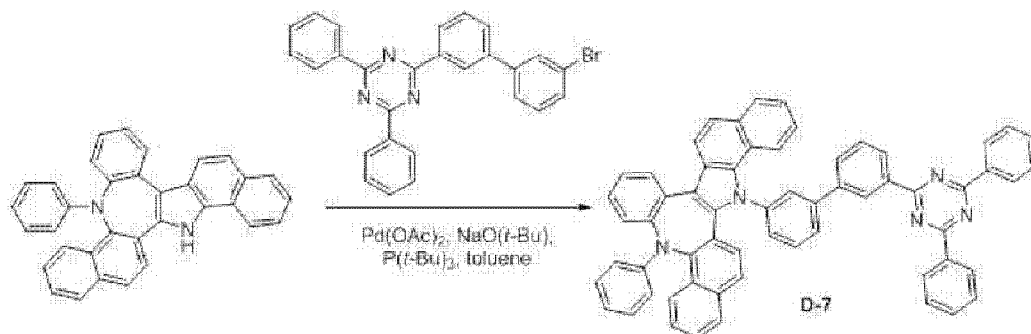
[503] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-6 (3.1g, 수율 61%)를 얻었다.

[504] Mass (이론치: 765.66, 측정치: 765 g/mol)

[505]

[506] **[합성예 37] D-7의 합성**

[507]



[508]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-7 (3.6g, 수율 63%)을 얻었다.

[509]

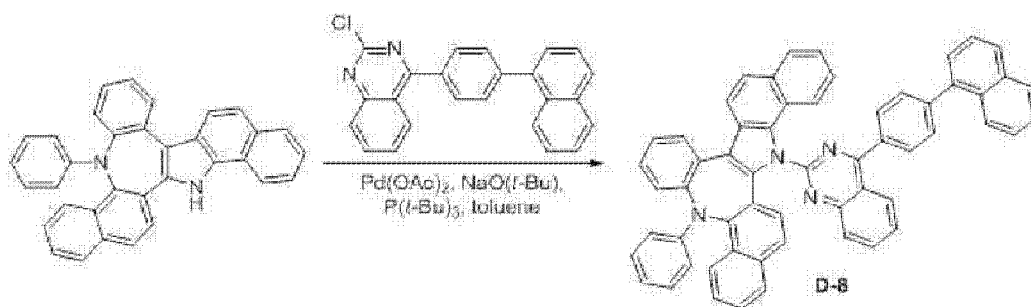
Mass (이론치: 842.7, 측정치: 842 g/mol)

[510]

[511]

[합성예 38] D-8의 합성

[512]



[513]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-8 (3.5g, 수율 66%)을 얻었다.

[514]

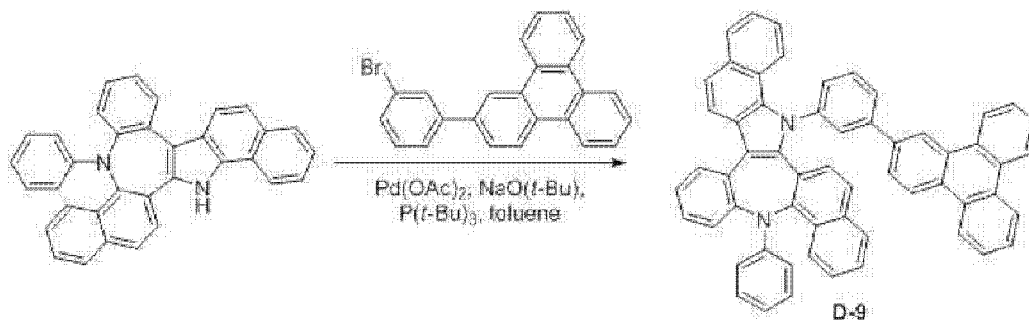
Mass (이론치: 788.66, 측정치: 788 g/mol)

[515]

[516]

[합성예 39] D-9의 합성

[517]



[518]

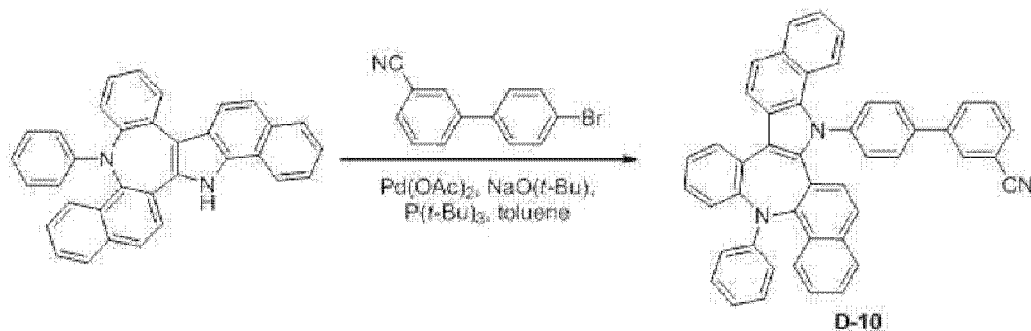
2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-9 (3.5g, 수율 69%)를 얻었다.

[519] Mass (이론치: 760.66, 측정치: 760 g/mol)

[520]

[521] **[합성예 40] D-10의 합성**

[522]



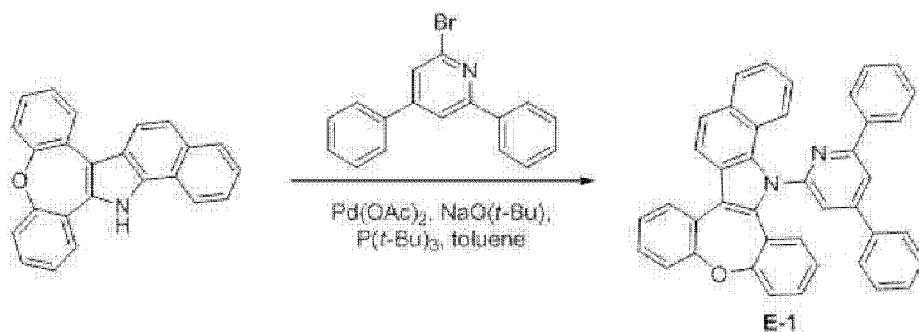
[523] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-10 (3.1g, 수율 72%)을 얻었다.

[524] Mass (이론치: 635.6, 측정치: 635 g/mol)

[525]

[526] **[합성예 41] E-1의 합성**

[527]



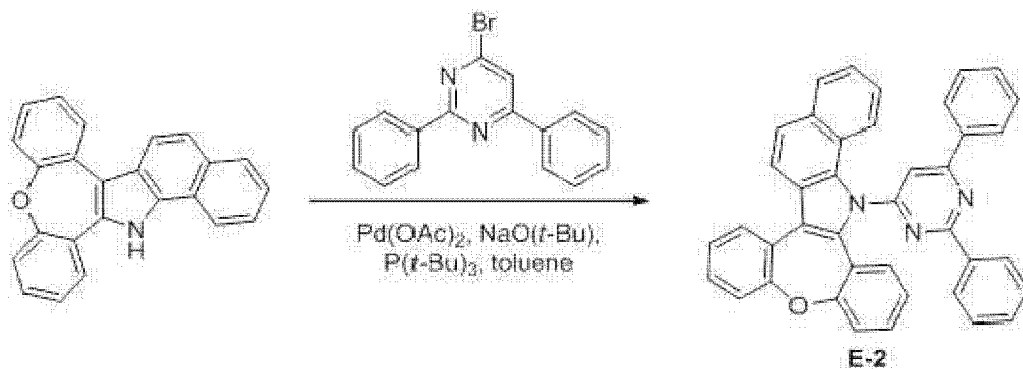
[528] 질소 기류 하에서 BIAz-5 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5g, 8.0mmol), Pd(OAc)₂ (0.08g, 0.34mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.16ml, 0.67mmol), NaO(*t*-Bu) (1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 E-1 (2.4g, 수율 64%)을 얻었다.

[529] Mass (이론치: 562.47, 측정치: 562 g/mol)

[530]

[531] **[합성예 42] E-2의 합성**

[532]



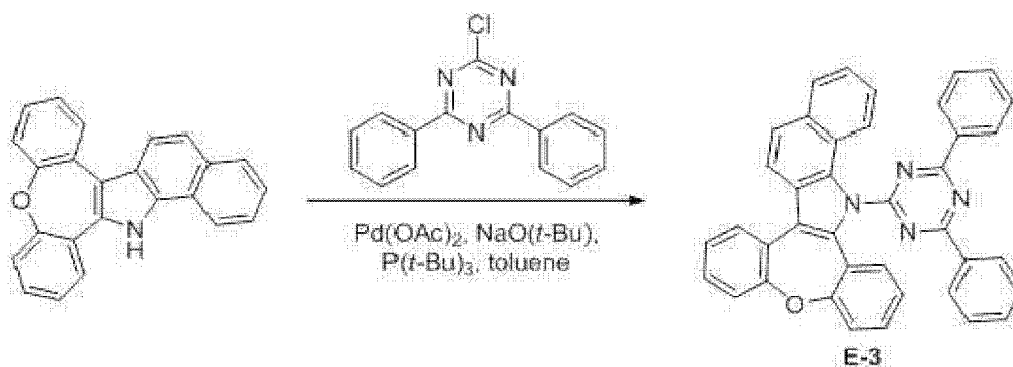
[533] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-2 (2.6g, 수율 69%)를 얻었다.

[534] Mass (이론치: 563.46, 측정치: 563 g/mol)

[535]

[536] **[합성예 43] E-3의 합성**

[537]



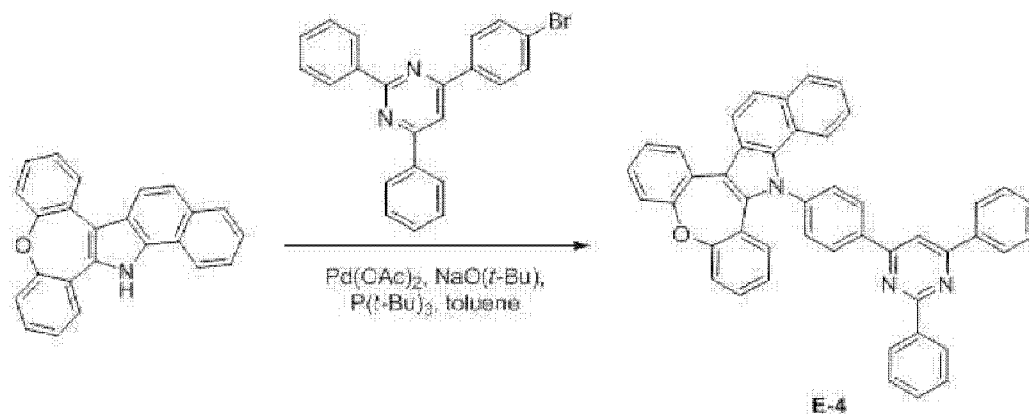
[538] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-3 (2.6g, 수율 70%)을 얻었다.

[539] Mass (이론치: 563.46, 측정치: 563 g/mol)

[540]

[541] **[합성예 44] E-4의 합성**

[542]



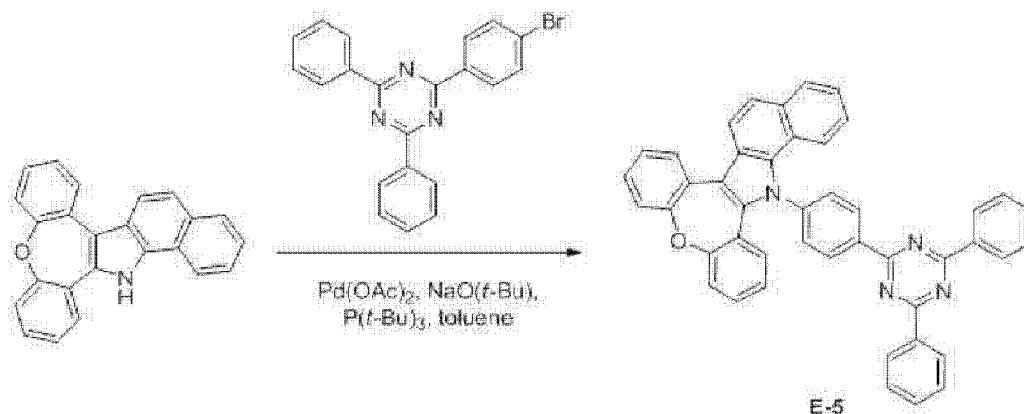
[543] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-4 (3.1g, 수율 73%)를 얻었다.

[544] Mass (이론치: 639.49, 측정치: 639 g/mol)

[545]

[546] **[합성예 45] E-5의 합성**

[547]



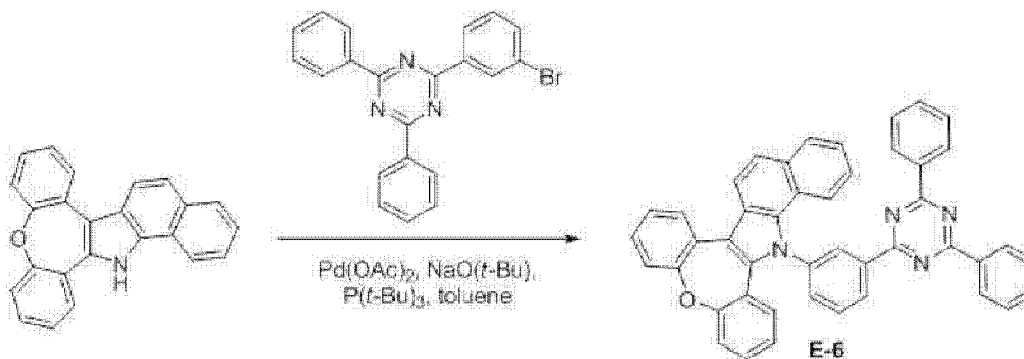
[548] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-5 (2.8g, 수율 65%)를 얻었다.

[549] Mass (이론치: 640.49, 측정치: 640 g/mol)

[550]

[551] **[합성예 46] E-6의 합성**

[552]



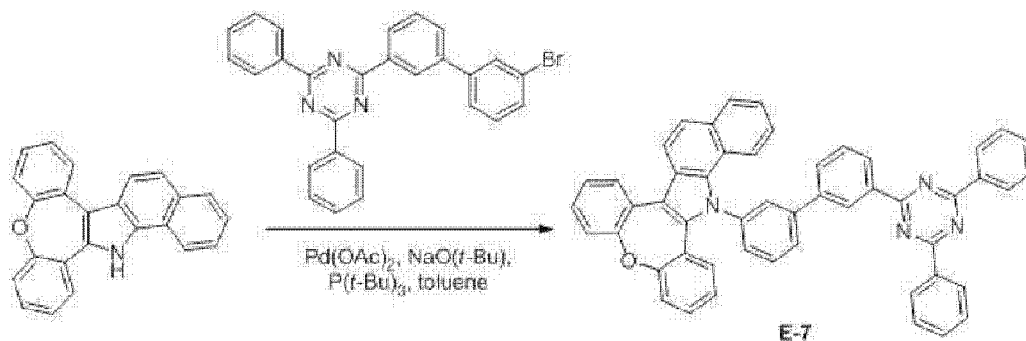
[553] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-6 (2.8g, 수율 65%)를 얻었다.

[554] Mass (이론치: 640.49, 측정치: 640 g/mol)

[555]

[556] **[합성예 47] E-7의 합성**

[557]



[558]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-7 (3.5g, 수율 72%)을 얻었다.

[559]

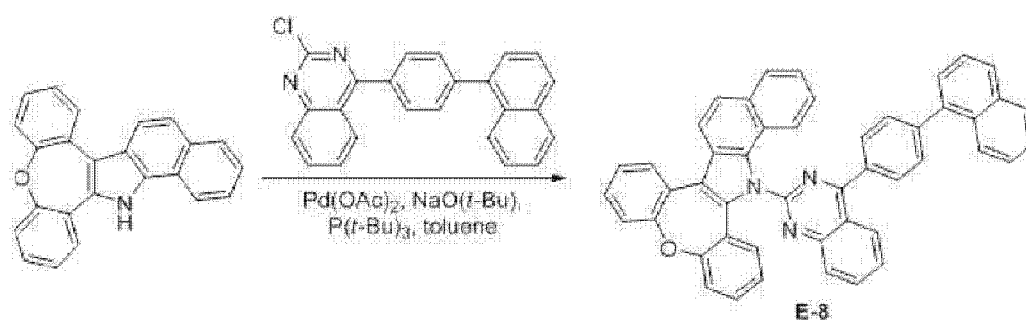
Mass (이론치: 717.53, 측정치: 717 g/mol)

[560]

[561]

[합성예 48] E-8의 합성

[562]



[563]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-8 (3.4g, 수율 77%)을 얻었다.

[564]

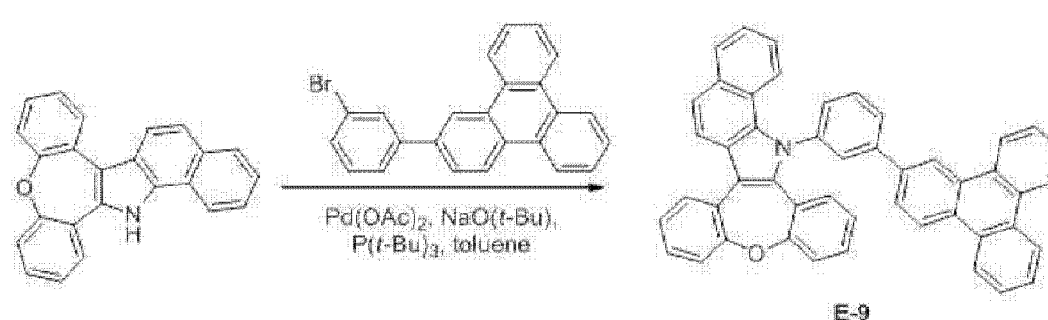
Mass (이론치: 663.49, 측정치: 663 g/mol)

[565]

[566]

[합성예 49] E-9의 합성

[567]



[568]

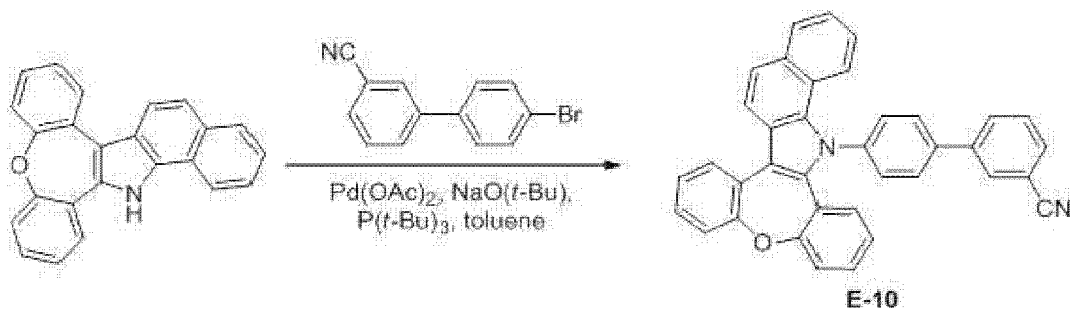
2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-9 (3.1g, 수율 73%)을 얻었다.

[569] Mass (이론치: 635.49, 측정치: 635 g/mol)

[570]

[571] **[합성예 50] E-10의 합성**

[572]



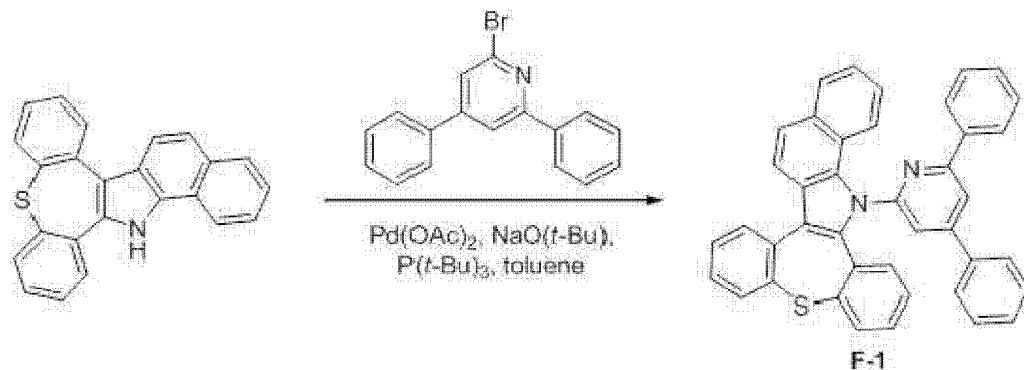
[573] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-10 (2.4g, 수율 73%)을 얻었다.

[574] Mass (이론치: 510.44, 측정치: 510 g/mol)

[575]

[576] **[합성예 51] F-1의 합성**

[577]



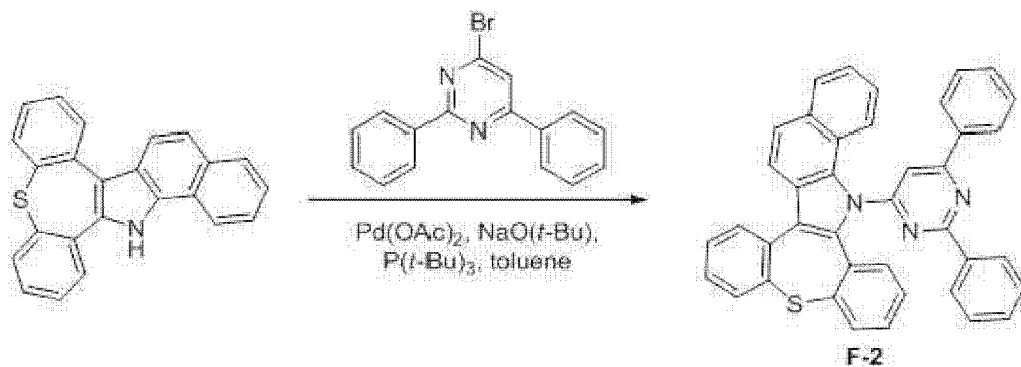
[578] 질소 기류 하에서 BIAz-6 (2.7g, 6.7mmol), 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 (2.5g, 8.0mmol), Pd(OAc)₂ (0.08g, 0.34mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.16ml, 0.67mmol), NaO(*t*-Bu) (1.29g, 13.4mmol) 및 톨루엔 (70ml)를 혼합하고 110°C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 F-1 (2.4g, 수율 63%)을 얻었다.

[579] Mass (이론치: 578.54, 측정치: 578 g/mol)

[580]

[581] **[합성예 52] F-2의 합성**

[582]



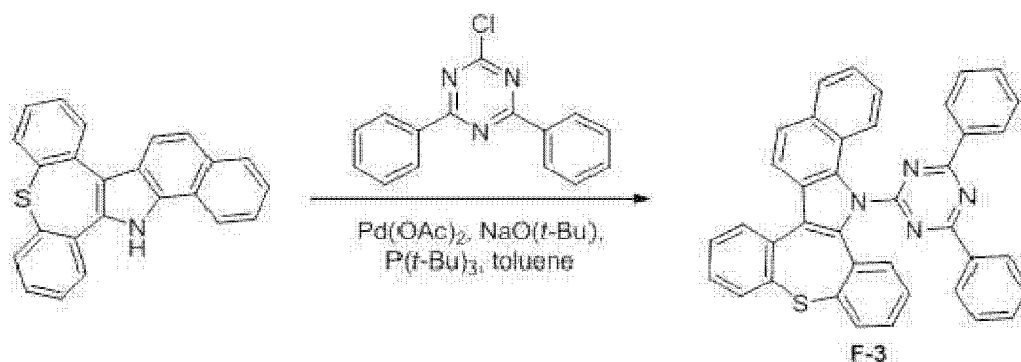
[583] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-브로모-2,6-디페닐피리미딘 (2.5g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-2 (2.7g, 수율 69%)를 얻었다.

[584] Mass (이론치: 579.53, 측정치: 579 g/mol)

[585]

[586] **[합성예 53] F-3의 합성**

[587]



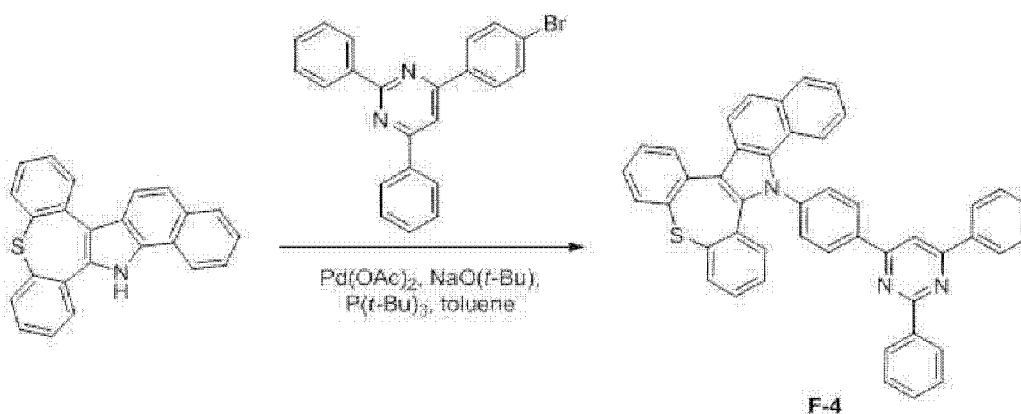
[588] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-3 (2.9g, 수율 74%)을 얻었다.

[589] Mass (이론치: 579.53, 측정치: 579 g/mol)

[590]

[591] **[합성예 54] F-4의 합성**

[592]



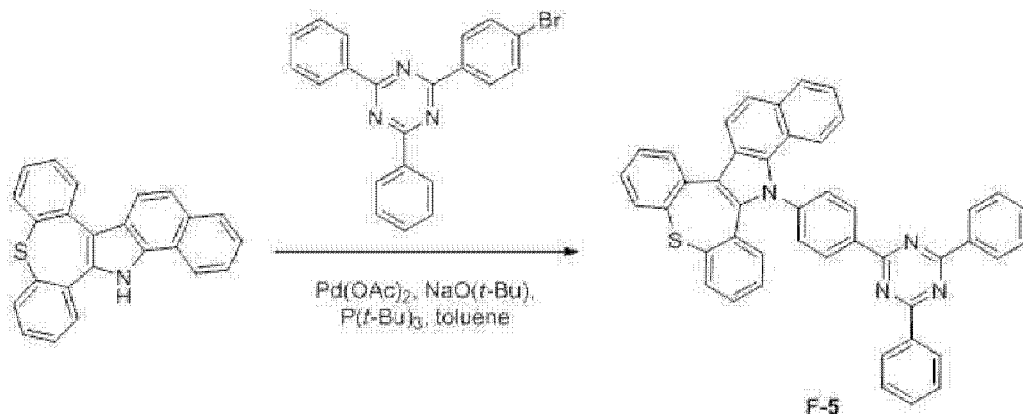
[593] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4-(4-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-4 (3.3g, 수율 76%)를 얻었다.

[594] Mass (이론치: 655.56, 측정치: 655 g/mol)

[595]

[596] **[합성예 55] F-5의 합성**

[597]



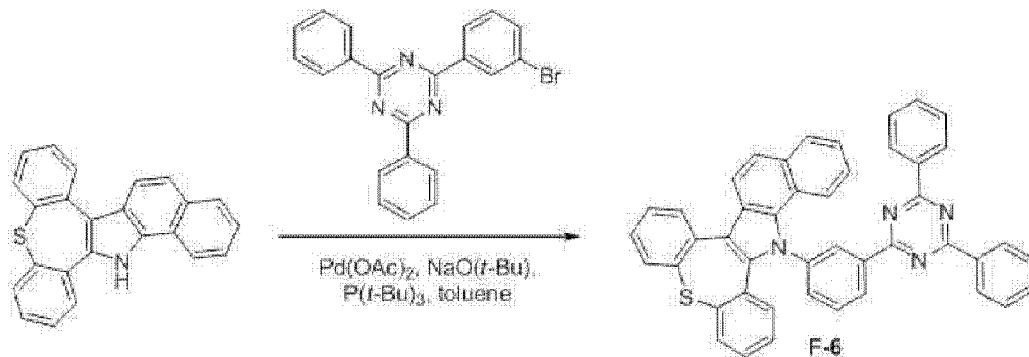
[598] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-5 (3.1g, 수율 70%)를 얻었다.

[599] Mass (이론치: 656.56, 측정치: 656 g/mol)

[600]

[601] **[합성예 56] F-6의 합성**

[602]



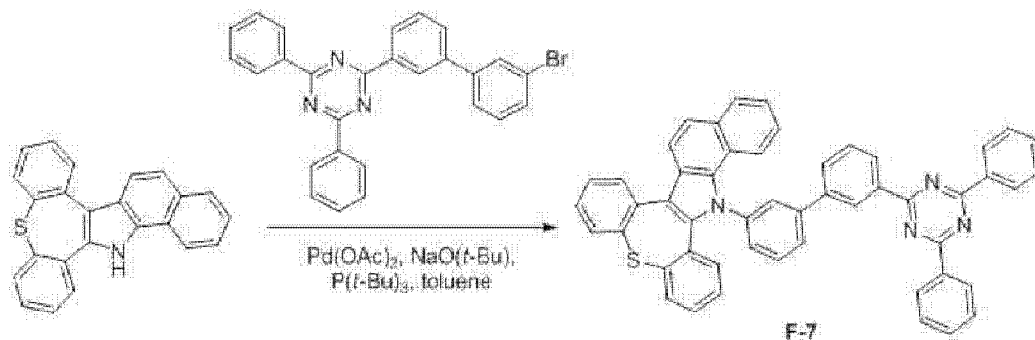
[603] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-6 (3.1g, 수율 71%)을 얻었다.

[604] Mass (이론치: 656.56, 측정치: 656 g/mol)

[605]

[606] **[합성예 57] F-7의 합성**

[607]



[608]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.7g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-7 (3.6g, 수율 73%)을 얻었다.

[609]

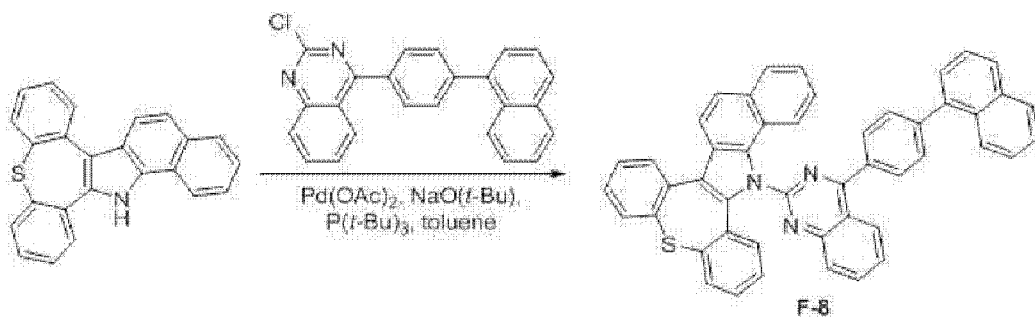
Mass (이론치: 733.60, 측정치: 733 g/mol)

[610]

[611]

[합성예 58] F-8의 합성

[612]



[613]

2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-클로로-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (2.9g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-8 (3.2g, 수율 70%)을 얻었다.

[614]

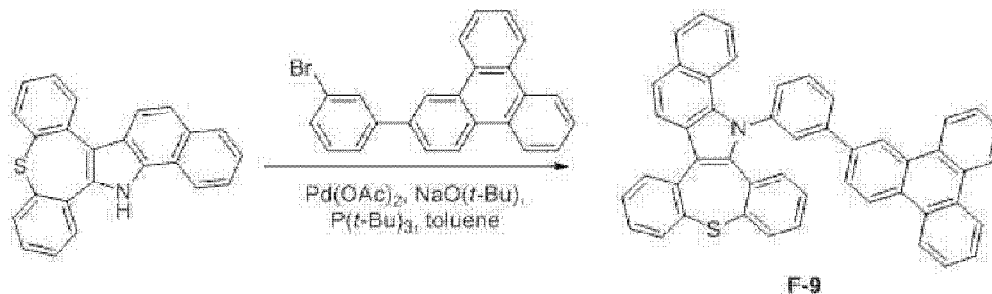
Mass (이론치: 679.56, 측정치: 679 g/mol)

[615]

[616]

[합성예 59] F-9의 합성

[617]



[618]

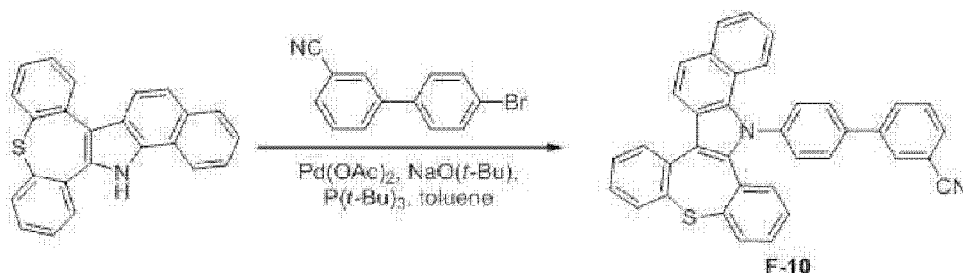
2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (3.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-9 (3.1g, 수율 72%)를 얻었다.

[619] Mass (이론치: 651.56, 측정치: 651 g/mol)

[620]

[621] **[합성예 60] F-10의 합성**

[622]



[623] 2-브로모-4,6-디페닐피리딘 대신 4'-브로모비페닐-3-카보니트릴 (2.1g, 8.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-10 (2.3 g, 수율 65%)을 얻었다.

[624] Mass (이론치: 526.51, 측정치: 526 g/mol)

[625]

[626] **[실시예 1 내지 54] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

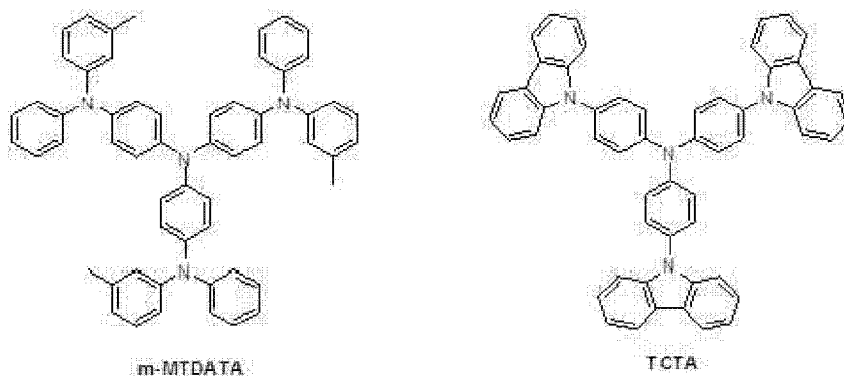
[627] 상기 합성예에서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

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

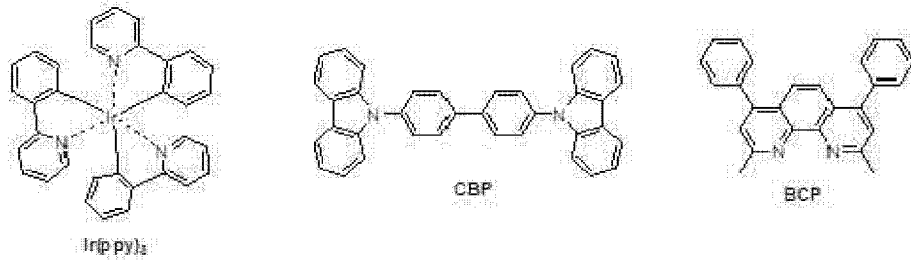
[629] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90% 하기 표 1의 호스트 화합물 + 10 % Ir(ppy)₃ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[630] m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[631]



[632]



[633]

[634] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[635] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 A-1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[636]

[637] **[평가예 1]**

[638] 실시예 1 내지 54 및 비교예 1에서 제작한 각각의 녹색 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 (10) mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[639]

[640] [표1]

샘플	호스트	구동 전압	EL 피크	전류 효율
		(V)	(nm)	(cd/A)
실시예 1	A-1	6.77	517	41.3
실시예 2	A-2	6.46	515	41.3
실시예 3	A-3	6.81	518	39.7
실시예 4	A-4	6.68	518	38.9
실시예 5	A-5	6.66	517	41.5
실시예 6	A-6	6.48	518	39.2
실시예 7	A-7	6.48	517	41.3
실시예 8	A-9	6.86	515	39.7
실시예 9	A-10	6.48	518	38.9
실시예 10	B-1	6.48	518	41.3
실시예 11	B-2	6.86	517	41.3
실시예 12	B-3	6.77	515	41.3
실시예 13	B-4	6.66	518	41.2
실시예 14	B-5	6.65	518	38.9
실시예 15	B-6	6.65	517	41.3
실시예 16	B-7	6.64	515	41.3
실시예 17	B-9	6.64	518	41.3
실시예 18	B-10	6.64	518	41.2
실시예 19	C-1	6.81	517	42.2
실시예 20	C-2	6.66	515	42
실시예 21	C-3	6.81	518	39.7
실시예 22	C-4	6.68	518	38.9
실시예 23	C-5	6.66	518	41.3
실시예 24	C-6	6.7	517	41.3
실시예 25	C-7	6.7	515	43.1
실시예 26	C-9	6.51	518	43.5
실시예 27	C-10	6.77	518	41.4
실시예 28	D-1	6.7	515	43.1

실시예 29	D-2	6.51	518	43.5
실시예 30	D-3	6.77	518	41.4
실시예 31	D-4	6.46	518	42.2
실시예 32	D-5	6.81	517	42
실시예 33	D-6	6.68	515	41.8
실시예 34	D-7	6.66	515	41.3
실시예 35	D-9	6.48	518	41.2
실시예 36	D-10	6.66	518	41.3
실시예 37	E-1	6.86	517	41.2
실시예 38	E-2	6.77	515	42
실시예 39	E-3	6.66	518	39.7
실시예 40	E-4	6.77	518	38.9
실시예 41	E-5	6.46	515	41.3
실시예 42	E-6	6.81	518	41.3
실시예 43	E-7	6.73	518	43.1
실시예 44	E-9	6.73	517	43.5
실시예 45	E-10	6.73	515	41.4
실시예 46	F-1	6.48	515	43.1
실시예 47	F-2	6.86	518	43.5
실시예 48	F-3	6.73	518	41.4
실시예 49	F-4	6.48	517	41.5
실시예 50	F-5	6.86	515	39.2
실시예 51	F-6	6.77	518	41.3
실시예 52	F-7	6.66	517	39.7
실시예 53	F-9	6.65	518	38.9
실시예 54	F-10	6.65	517	41.3
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[641] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 녹색 유기 EL 소자의 발광층에 사용하였을 경우 (실시예 1 내지 54)가 종래 CBP를 녹색 유기 EL 소자(비교예 1)에 사용한 경우보다 효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

[642]

[643] **[실시예 55 내지 60] 적색 유기 EL 소자의 제조**

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

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

[646] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm) / 90% 하기 표 2의 호스트 화합물 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

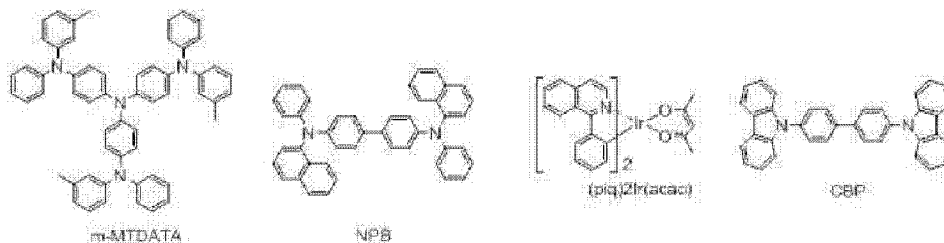
[647]

[648] **[비교예 2] 적색 유기 EL 소자의 제조**

[649] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 상기 합성예 8의 화합물 A-8 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 55와 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[650] 상기 실시예 55 내지 60 및 비교예 2에서 사용된 m-MTDATA, (piq)₂Ir(acac), CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[651]



[652]

[653] **[평가예 2]**[654] 실시예 55 내지 60 및 비교예 2에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[655]

[656] [표2]

샘플	호스트	구동 전압	전류 효율
		(V)	(cd/A)
실시예 55	A-8	4.65	11.8
실시예 56	B-8	4.74	11.5
실시예 57	C-8	4.87	11.8
실시예 58	D-8	4.74	11.5
실시예 59	E-8	4.87	11.8
실시예 60	F-8	4.56	9.6
비교예 2	CBP	5.25	8.2

[657] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층에 사용한 경우(실시예 55 내지 60) 종래 CBP를 적색 유기 전계 발광 소자(비교예 2)에 사용한 경우보다 효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

[658]

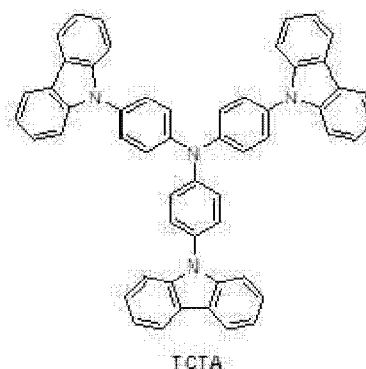
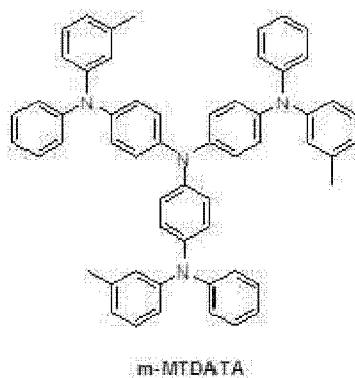
[659] [실시예 61] 유기 EL 소자의 제조

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

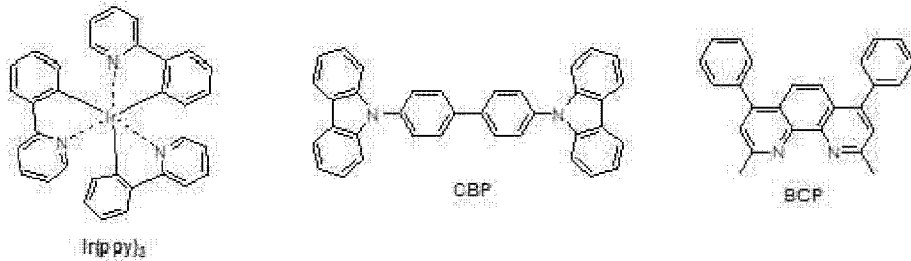
[661] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA(60nm)/ 합성예 9에서 합성한 화합물 A-9 (80nm)/DS-H522 + 5% DS-501(30nm)/BCP(10nm)/Alq3(30 nm)/LiF(1nm)/Al(200nm) 순서로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[662] 소자 제작에 사용된 DS-H522 및 DS-501은 (주)두산 전자 BG의 제품이며, m-MTDATA, TCTA, CBP, Ir(ppy)₃, 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[663]



[664]



[665]

[666] **[실시예 62 ~ 66] 유기 EL 소자의 제조**

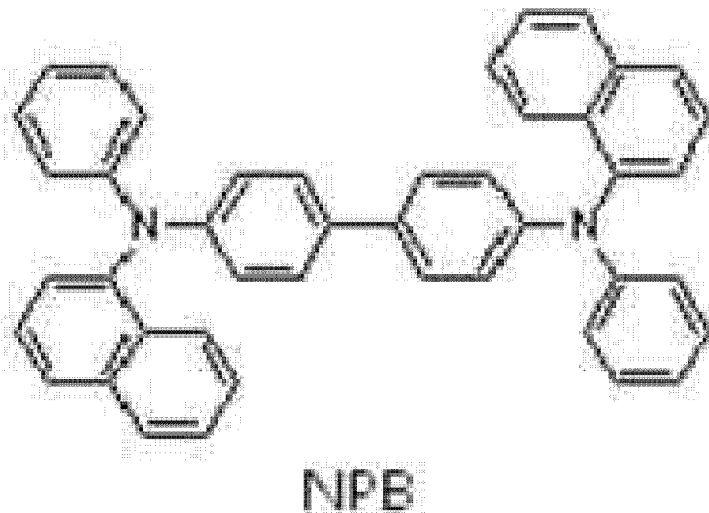
[667] 실시예 61에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 A-9 대신 각각 합성된 화합물 B-9, C-9, D-9, E-9, F-9 를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 61과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[668]

[669] **[비교예 3] 유기 EL 소자의 제조**

[670] 실시예 61에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 A-9 대신 NPB를 정공수송층 물질로 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 61과 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다. 사용된 NPB의 구조는 하기와 같다.

[671]



[672]

[673] **[평가예 3]**

[674] 실시예 61 ~ 66, 및 비교예 3에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[675] [표3]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 61	A-9	4.4	19.8
실시예 62	B-9	4.2	19.2
실시예 63	C-9	4.3	18.9
실시예 64	D-9	4.4	19.2
실시예 65	E-9	4.2	18.9
실시예 66	F-9	4.9	20.1
비교예 3	NPB	5.2	18.1

[676] 상기 표 3에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-9 ~ F-9)을 정공수송층으로 사용한 유기 EL 소자(실시예 61 내지 66에서 각각 제조된 유기 EL 소자)는, 종래 NPB를 사용한 유기 EL 소자(비교예 3의 유기 EL 소자)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[677]

[678] **[실시예 67] 청색 유기 EL 소자의 제조**

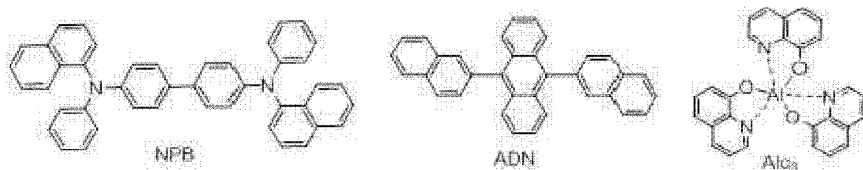
[679] 합성에 1에서 합성된 화합물 A-1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

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

[681] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (80 nm)/NPB (15 nm)/AND + 5 % DS-405 (30nm)/화합물 A-1 (5 nm)/Alq₃ (25 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[682] 이때 사용된 NPB, AND 및 Alq₃의 구조는 다음과 같다.

[683]



[684]

[685] **[실시예 68] ~ [실시예 108] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[686] 실시예 67에서 수명 개선층 물질로 사용된 화합물 A-1 대신 표 4에 기재된 각 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 67과 동일하게 수행하여 청색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[687]

[688] **[비교예 4] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[689] 수명 개선층을 포함하지 않고, 전자 수송층 물질인 Alq₃을 25 nm 대신 30nm로 증착하는 것을 제외하고는, 실시예 67과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

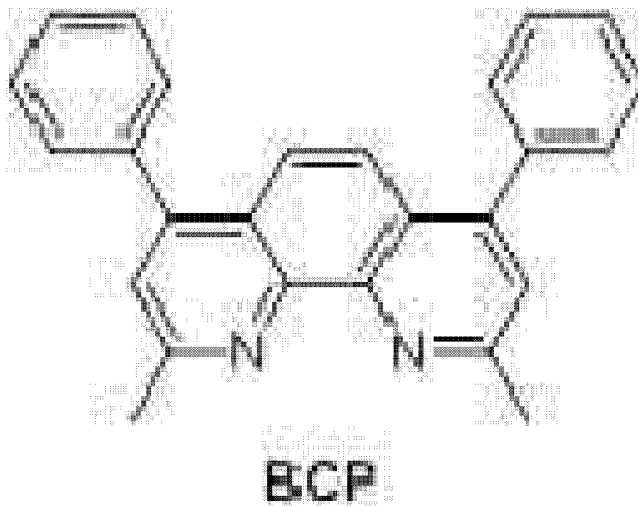
[690]

[691] **[비교예 5] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[692] 실시예 67에서 수명 개선층 물질로 사용된 화합물 A-1를 사용하지 않는 대신 BCP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[693] 이때 사용된 BCP의 구조는 다음과 같다.

[694]



[695]

[696] **[평가예 4]**

[697] 실시예 67 내지 109 및 비교예 4, 5에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율, 발광파장 및 수명(T97)을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

[698]

[699] [표4]

샘플	수명개선층	구동 전압	전류효율	EL 피크	수명
		(V)	(cd/A)	(nm)	(hr, T ₉₇)
실시예 67	A-1	4.8	5.9	463	41
실시예 68	A-2	4.2	5.9	465	42
실시예 69	A-3	5.0	6.0	469	43
실시예 70	A-4	5.1	6.2	461	45
실시예 71	A-5	5.2	6.3	462	48
실시예 72	A-6	4.5	6.4	458	38
실시예 73	A-7	5.3	6.0	458	37
실시예 74	B-1	5.1	6.1	459	32
실시예 75	B-2	5.2	6.1	460	39
실시예 76	B-3	4.3	5.9	461	43
실시예 77	B-4	4.2	5.9	463	45
실시예 78	B-5	4.3	6.4	465	48
실시예 79	B-6	4.2	6.3	469	38
실시예 80	B-7	4.8	6.1	461	37
실시예 81	C-1	4.9	6.1	462	32
실시예 82	C-2	5.2	5.9	451	45
실시예 83	C-3	5.3	5.9	457	48
실시예 84	C-4	5.3	6.3	459	38
실시예 85	C-5	5.2	5.9	459	37
실시예 86	C-6	5.0	6.4	459	32
실시예 87	C-7	5.0	6.3	451	39
실시예 88	D-1	4.9	6.1	459	43
실시예 89	D-2	4.9	6.1	460	45
실시예 90	D-3	4.9	5.9	461	44
실시예 91	D-4	5.0	5.9	463	40
실시예 92	D-5	4.9	6.3	465	42
실시예 93	D-6	4.9	5.9	469	40
실시예 94	D-7	4.9	6.2	461	40

실시예 95	E-1	4.8	6.1	462	41
실시예 96	E-2	4.2	6.1	451	44
실시예 97	E-3	4.2	6.0	458	38
실시예 98	E-4	4.1	5.9	458	40
실시예 99	E-5	4.1	5.9	461	33
실시예 100	E-6	4.1	6.0	462	32
실시예 101	E-7	4.1	6.2	465	38
실시예 102	F-1	4.0	6.3	469	40
실시예 103	F-2	5.1	6.4	461	42
실시예 104	F-3	5.1	6.0	462	40
실시예 105	F-4	5.3	6.1	465	40
실시예 106	F-5	4.8	6.1	469	41
실시예 107	F-6	4.9	6.0	458	39
실시예 108	F-7	5.0	6.1	458	42
비교예 4	-	4.7	5.6	458	32
비교예 5	BCP	5.3	5.9	458	28

[700] 상기 표 4에서 알 수 있는 바와 같이, 화합물 A-1 내지 F-7 을 수명 개선층 물질로 사용한 실시예 67 내지 108의 청색 유기 EL 소자의 경우, 수명 개선층을 사용하지 않는 비교예 4의 청색 유기 EL 소자와 구동 전압이 유사하거나 약간 우수하나, 전류 효율 및 수명이 크게 향상되었다.

[701] 또한, 실시예 67 내지 108의 청색 유기 EL 소자는 수명 개선층 대신 종래 CBP를 정공 차단층 물질로 사용한 비교예 5의 청색 유기 EL 소자에 비해 구동 전압 및 전류 효율이 우수할 뿐만 아니라, 수명은 현저하게 향상되었다.

[702]

[703] **[실시예 109] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[704] 합성예 5 에서 합성된 화합물 A-5을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

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

[706] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (80 nm)/NPB (15 nm)/AND + 5 % DS-405 (30nm)/화합물 A-5 (30nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여

유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[707]

[708] **[실시예 110] ~ [실시예 114] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[709] 실시예 109에서 전자 수송층 물질로 사용된 화합물 A-5 대신 표 5에 기재된 각 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 109와 동일하게 수행하여 청색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[710]

[711] **[비교예 6] 청색 유기 EL 소자의 제조**

[712] 수명 개선층을 포함하지 않고, 전자 수송층 물질인 Alq₃을 25 nm 대신 30nm로 증착하는 것을 제외하고는, 실시예 108과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[713]

[714] **[평가예 5]**

[715] 실시예 109 내지 114 및 비교예 6에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율, 발광파장 및 수명(T97)을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 5에 나타내었다.

[716]

[717] **[표5]**

샘플	전자수송층	구동전압 (V)	전류효율 (cd/A)	발광피크(nm)
실시예 109	A-5	4.5	5.8	463
실시예 110	B-5	4.2	6.1	462
실시예 111	C-5	4.0	6.3	460
실시예 112	D-5	4.2	5.8	462
실시예 113	E-5	4.0	6.1	460
실시예 114	F-5	4.7	6.0	459
비교예 6	—	4.7	5.6	458

[718] 상기 표 5에서 보는 바와 같이, 화합물 A-5 내지 F-5 를 전자 수송층 물질로 사용한 실시예 109 내지 114의 청색 유기 EL 소자의 경우, 전자 수송층으로 Alq₃를 사용한 비교예 6의 청색 유기 EL 소자에 비해 구동 전압 및 전류 효율이 더 향상되었다.

[719] 이와 같이, 본 발명에 따른 화학식 1 의 화합물을 수명 개선층 물질이나 전자 수송층 물질로 사용한 경우, 구동전압 및 전류 효율이 향상되고, 나아가 수명 특성이 크게 향상될 수 있다는 것을 확인할 수 있었다.

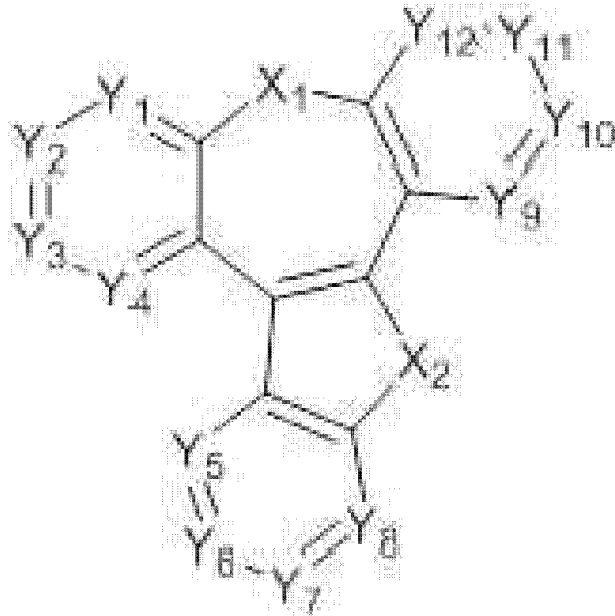
산업상 이용가능성

- [720] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입 및 수송능, 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 유기 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 높은 발광 효율, 낮은 구동 전압 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

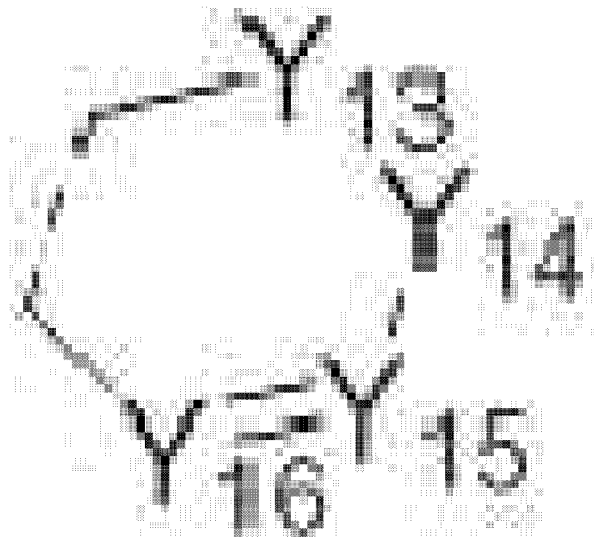
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Y₁과 Y₂, Y₂와 Y₃, Y₃와 Y₄, Y₅와 Y₆, Y₆와 Y₇, Y₇과 Y₈, 및 Y₉와 Y₁₀, Y₁₀과 Y₁₁ 및 Y₁₁과 Y₁₂ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

상기 화학식 1 및 2에서,

X₁ 및 X₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 O, S, N(Ar₁), C(Ar

$_2)(Ar_3)$, 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 $N(Ar_1)$ 이고;

상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 Y_1 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

R_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

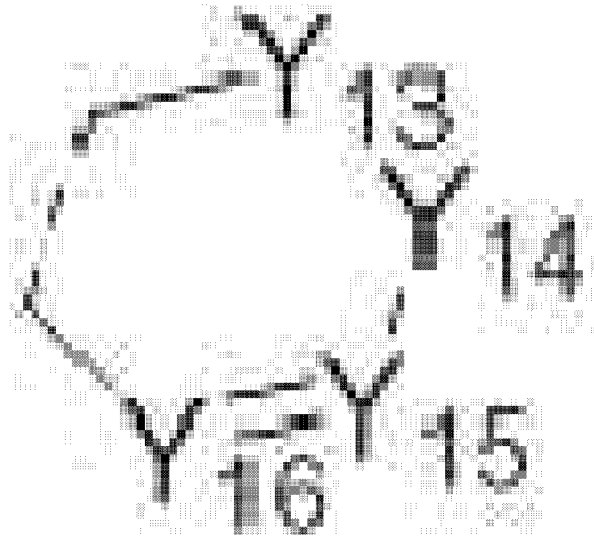
Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

상기 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 2] 제1항에 있어서,

상기 Y_1 과 Y_2 , Y_7 과 Y_8 및 Y_{11} 과 Y_{12} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 3]

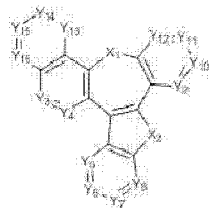
제1항에 있어서,

상기 X_1 은 O, S 및 N(Ar₁)로 이루어진 군에서 선택되고, X_2 는 N(Ar₁)인 것을 특징으로 하는 화합물.

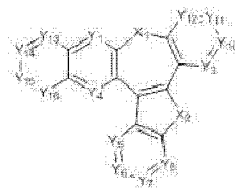
[청구항 4]

제1항에 있어서,

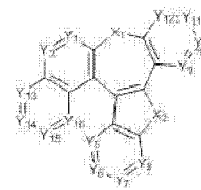
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 M-1 내지 화학식 M-12 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:



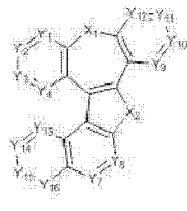
M-1



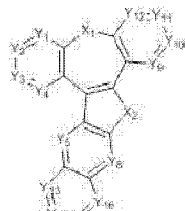
M-2



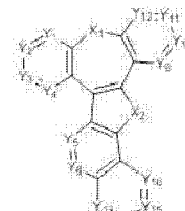
M-3



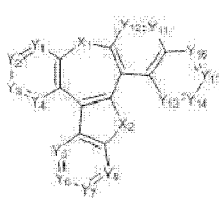
M-4



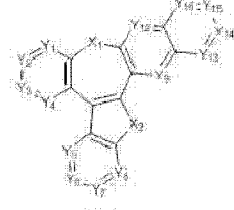
M-5



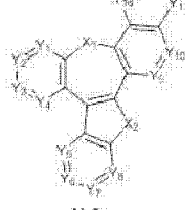
M-6



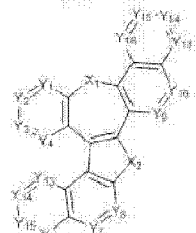
M-7



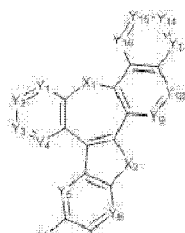
M-8



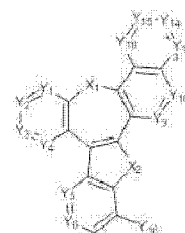
M-9



M-10



M-11



M-12

상기 화학식 M-1 내지 화학식 M-12에서, X_1 , X_2 및 Y_1 내지 Y_{16} 은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 5]

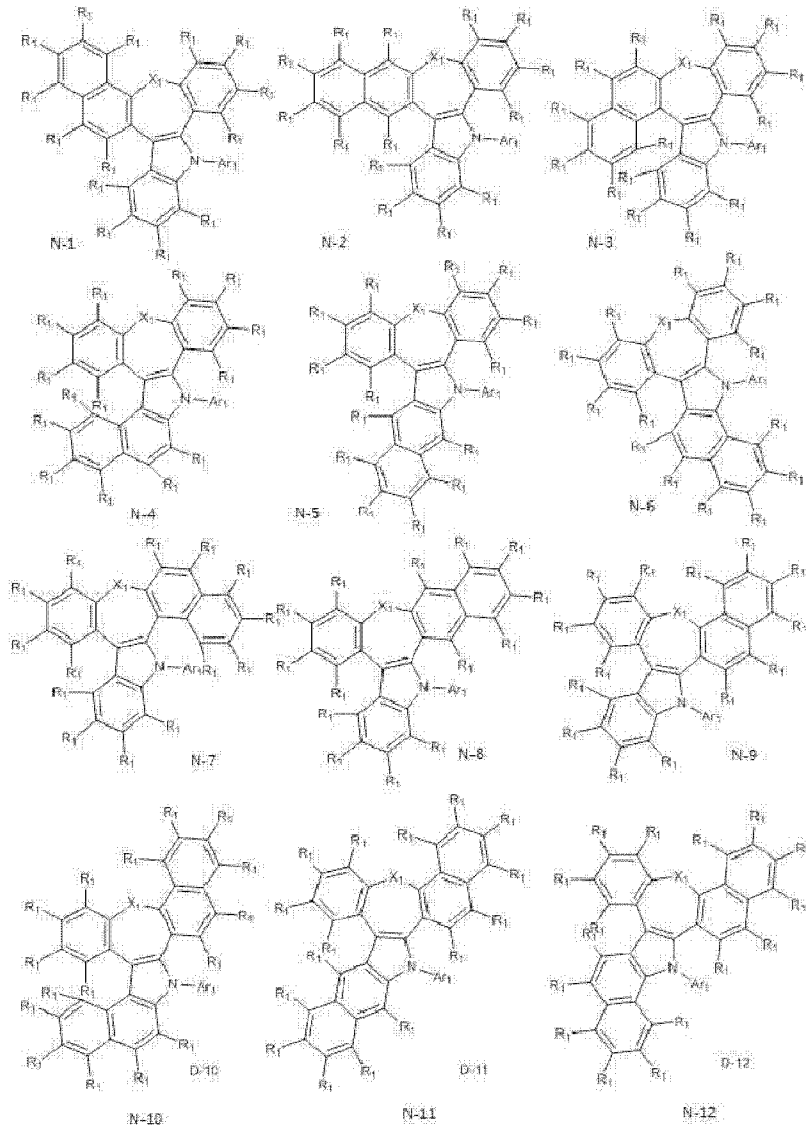
제4항에 있어서,

상기 Y_1 내지 Y_{16} 은 모두 $C(R_1)$ 이거나, 1 내지 3개의 N을 포함할 수 있으며, 복수 개의 R_1 은 동일하거나 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 N-1 내지 화학식 N-12 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:



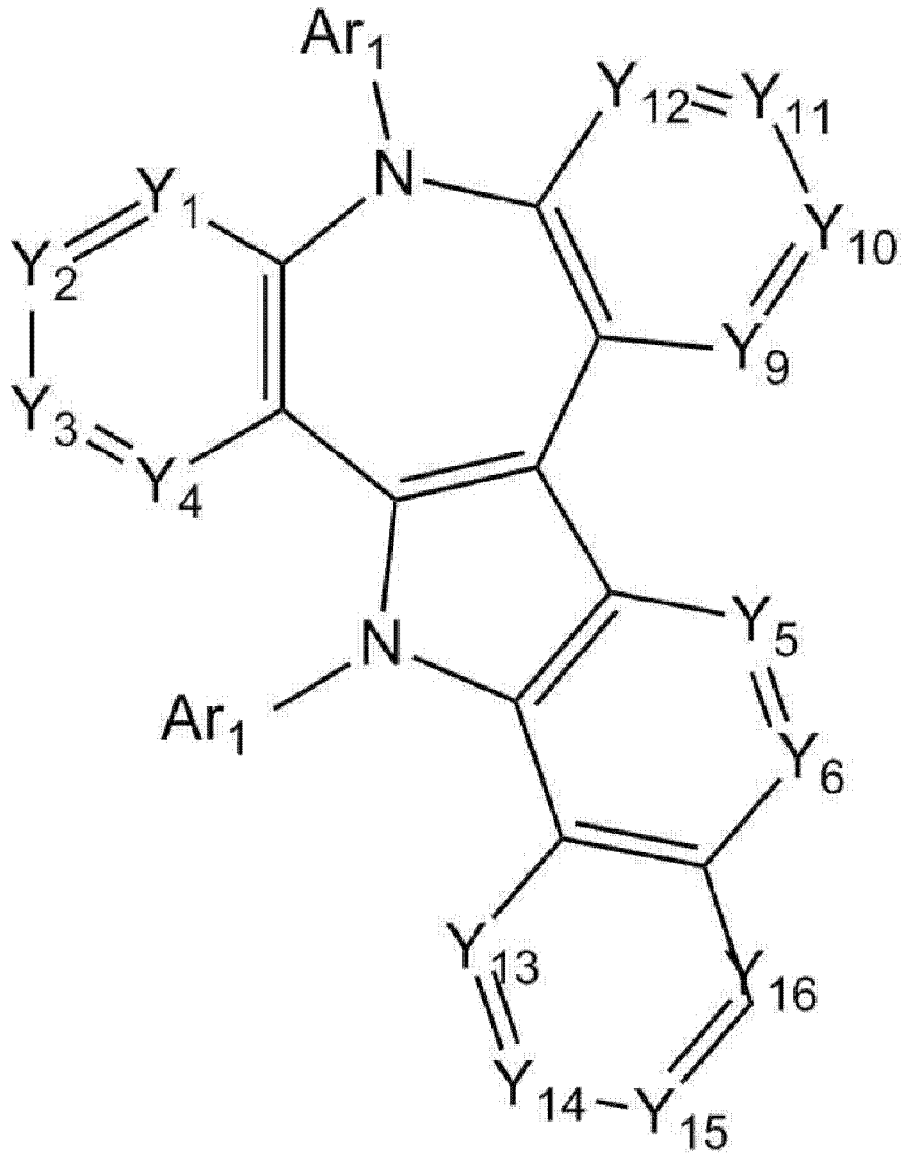
상기 화학식 N-1 내지 화학식 N-12에서, X_1 , Ar_1 및 R_1 은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 7]

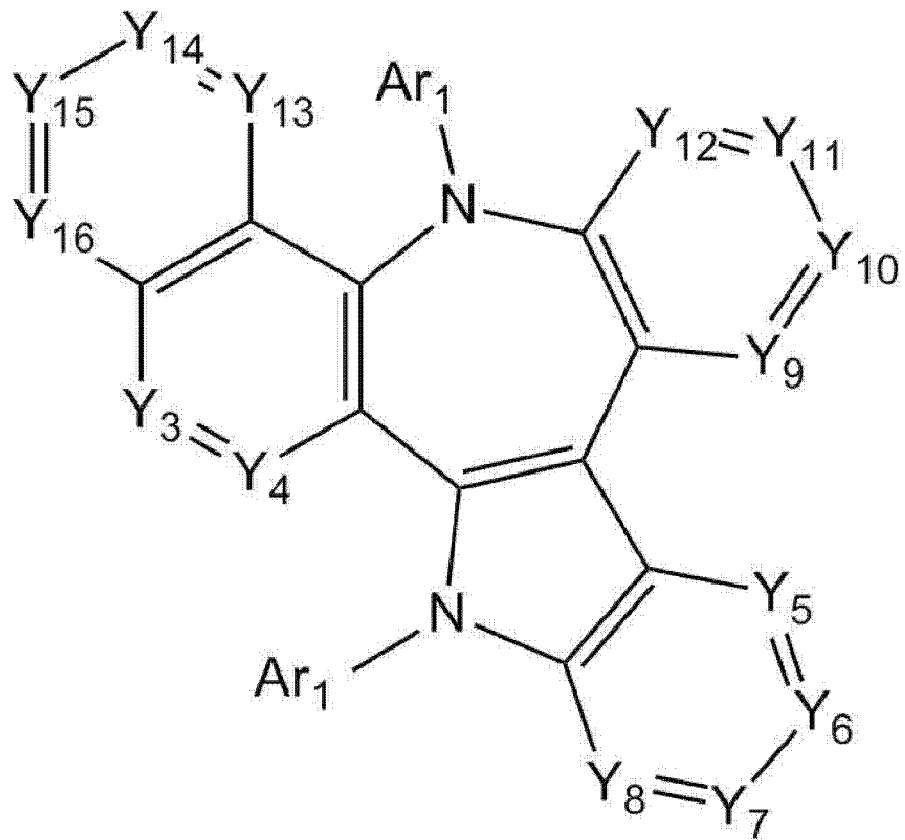
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3 내지 화학식 7 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:

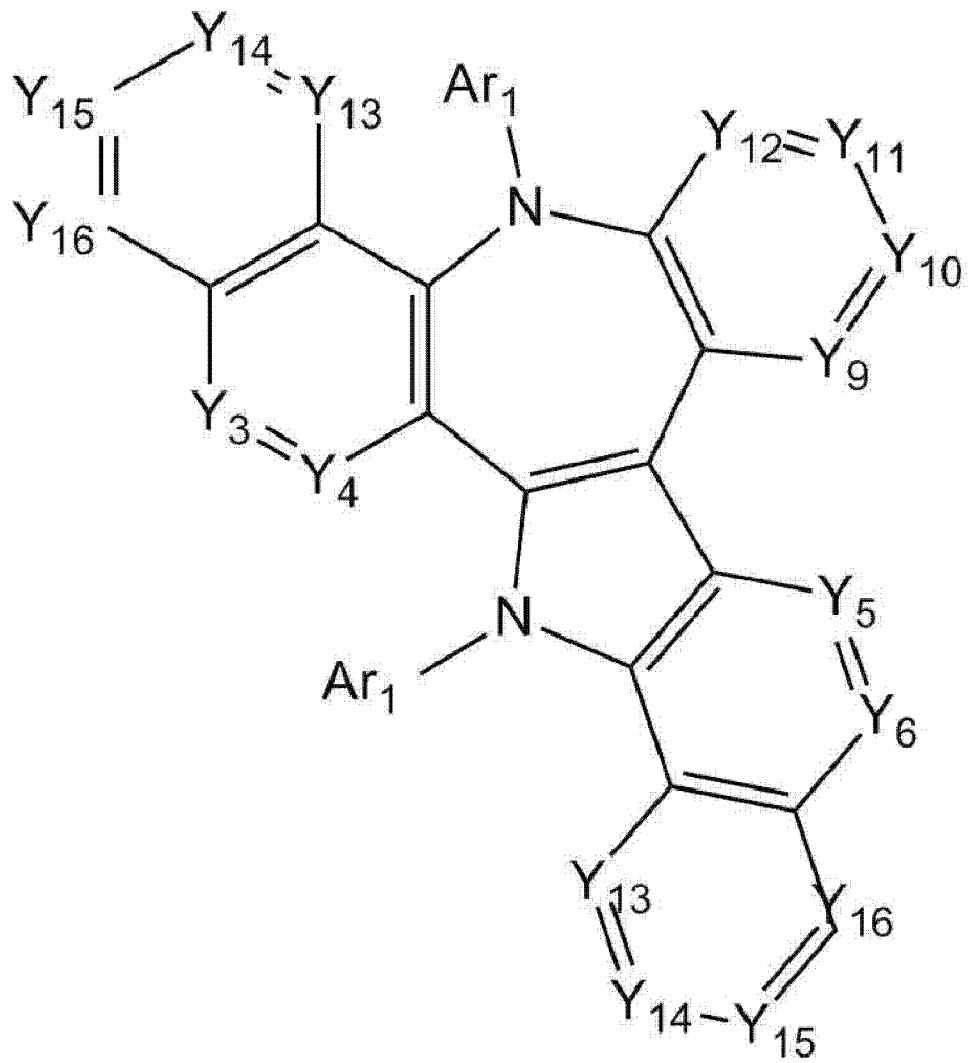
[화학식 3]



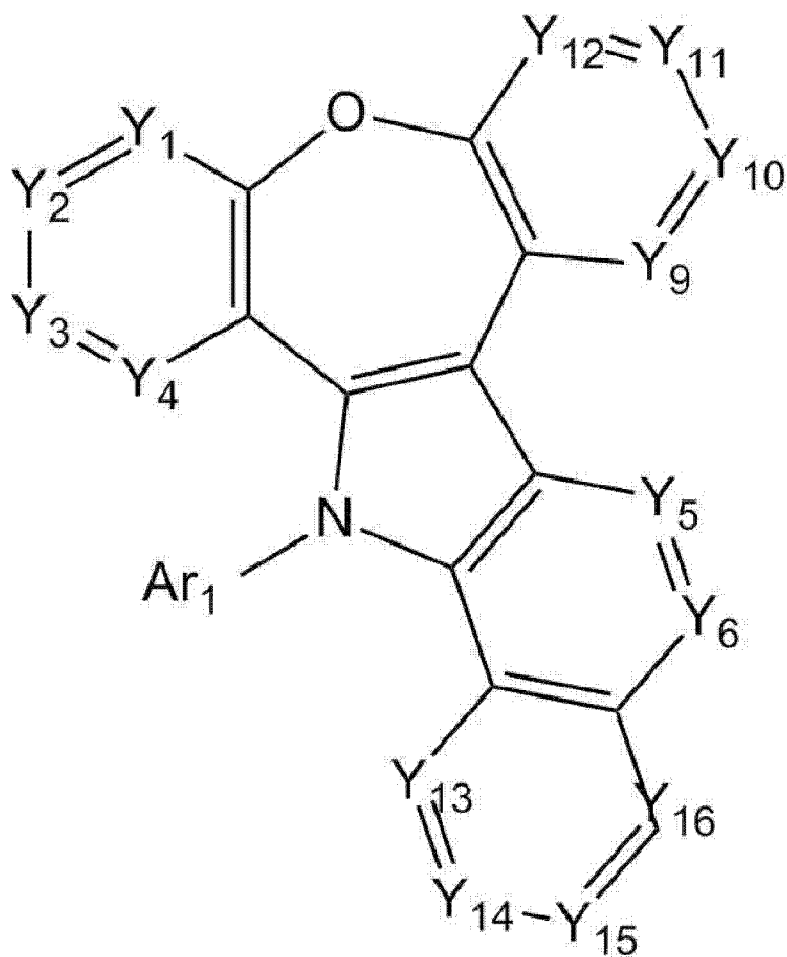
[화학식 4]



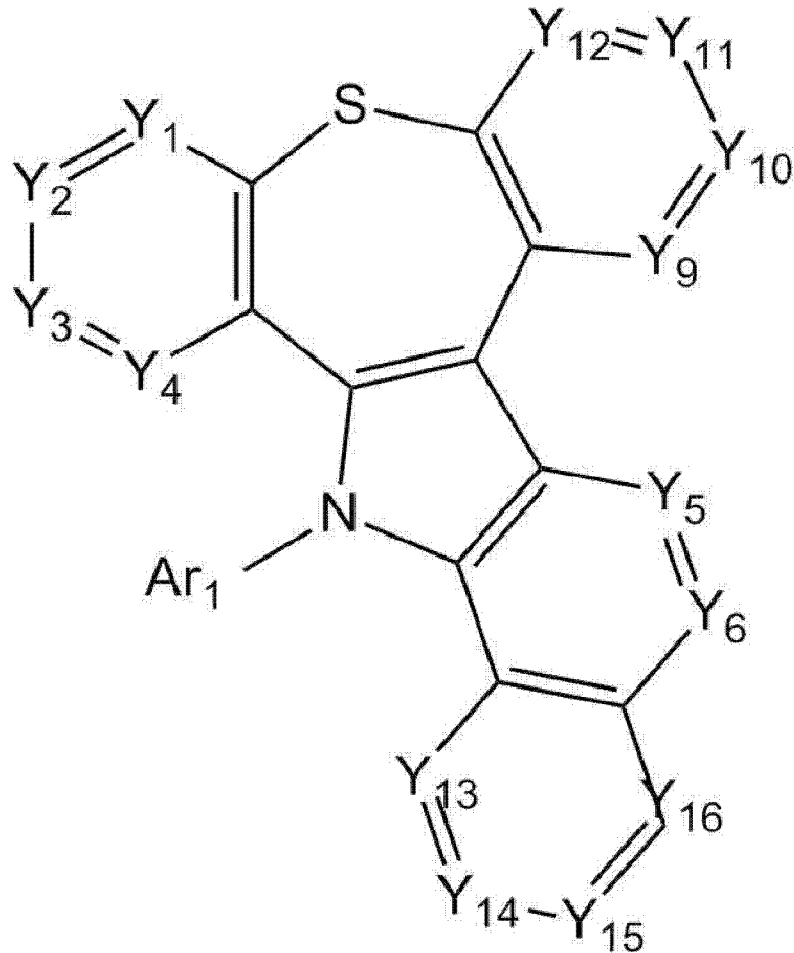
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



상기 화학식 3 내지 화학식 7에서,

Ar_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Ar_1 은 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;
 Y_1 내지 Y_{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

Y_{13} 내지 Y_{16} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_1)$ 이며;

R_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_1 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의

알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

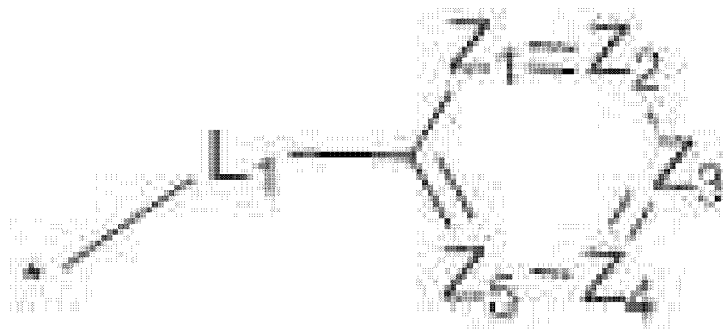
Ar_1 및 R_1 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기 치환기로 치환되는 경우, 상기 치환기는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 8] 제7항에 있어서,
상기 Ar_1 , 또는 상기 Ar_1 이 복수 개인 경우 적어도 하나는 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기일 수 있고, 상기 아릴기는 1개 이상의 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기로 치환되거나 비치환되며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 9] 제7항에 있어서,
상기 화학식 4에서 Y_8 은 $C(R_1)$ 이고, 상기 R_1 은 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 10] 제1항에 있어서,
상기 R_1 및 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 페닐기 또는 하기 화학식 8로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 8]



상기 화학식 8에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L_1 은 단일결합, $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

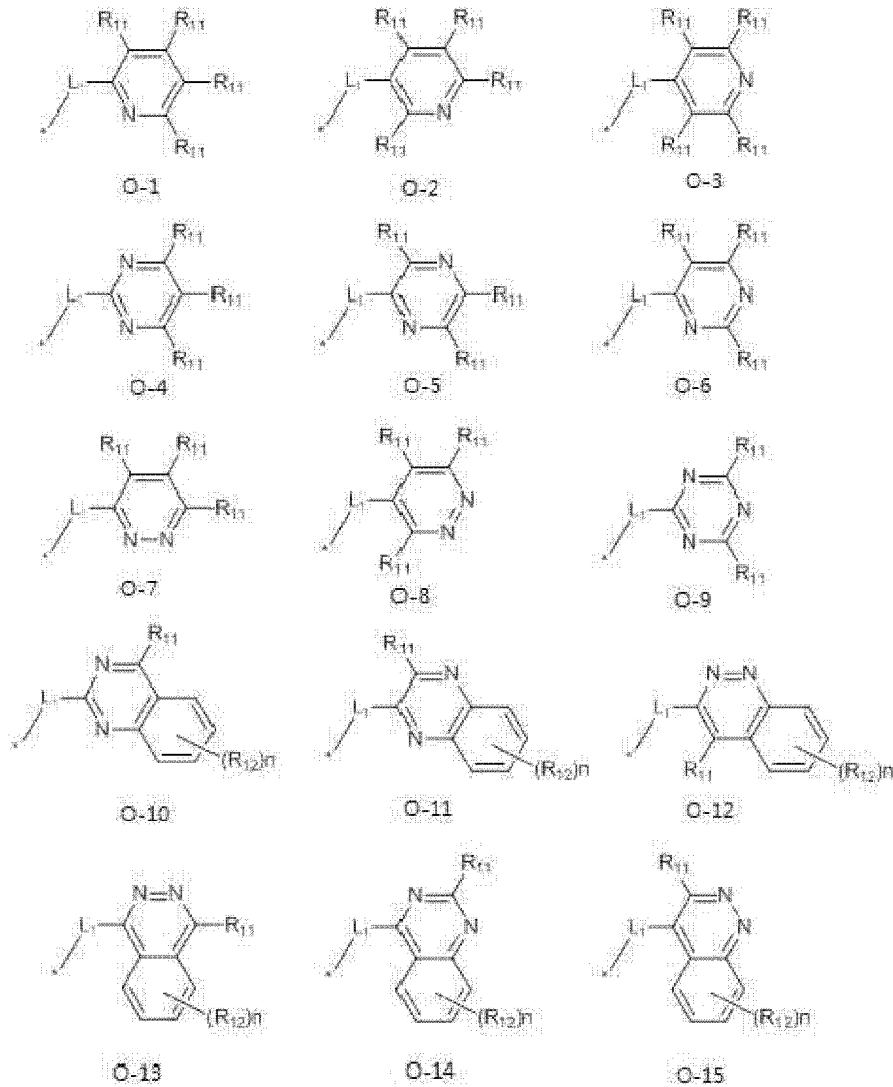
Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$ 이 되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;

R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_{11} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며; 상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기와, 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 11]

제10항에 있어서,

상기 화학식 8로 표시되는 치환기는 하기 화학식 O-1 내지 화학식 O-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:



상기 화학식 O-1 내지 화학식 O-15에서,
 n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{12} 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{12} 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며; 상기 R_{12} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노

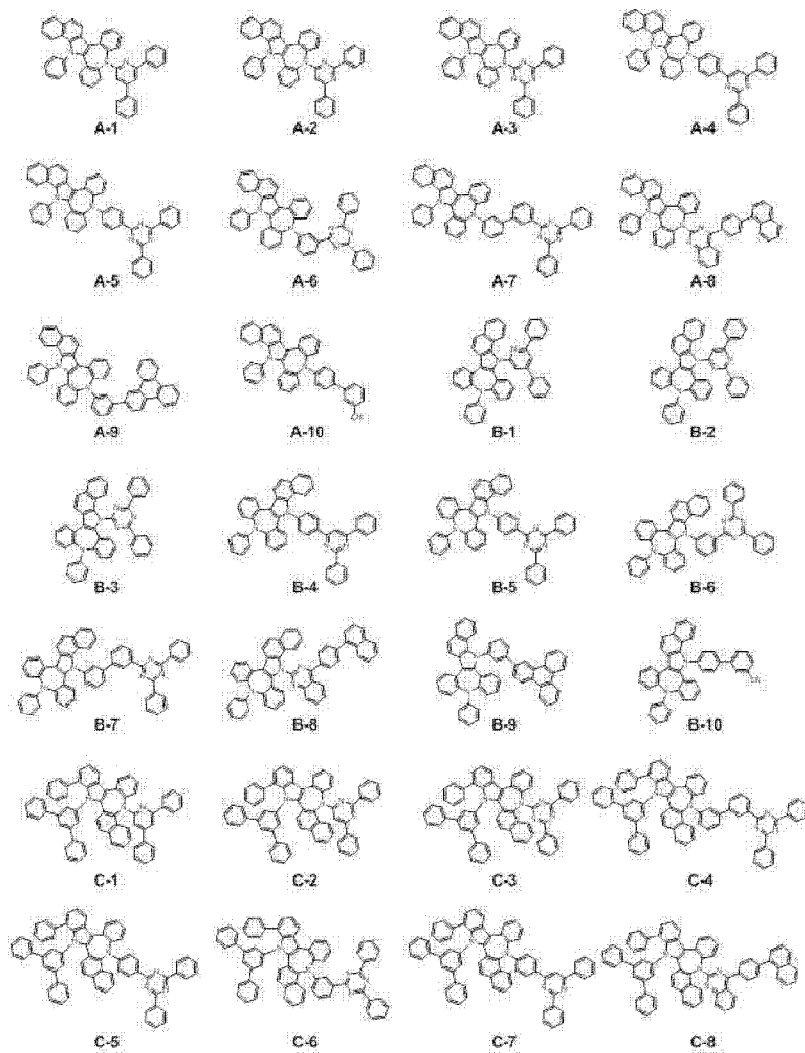
또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

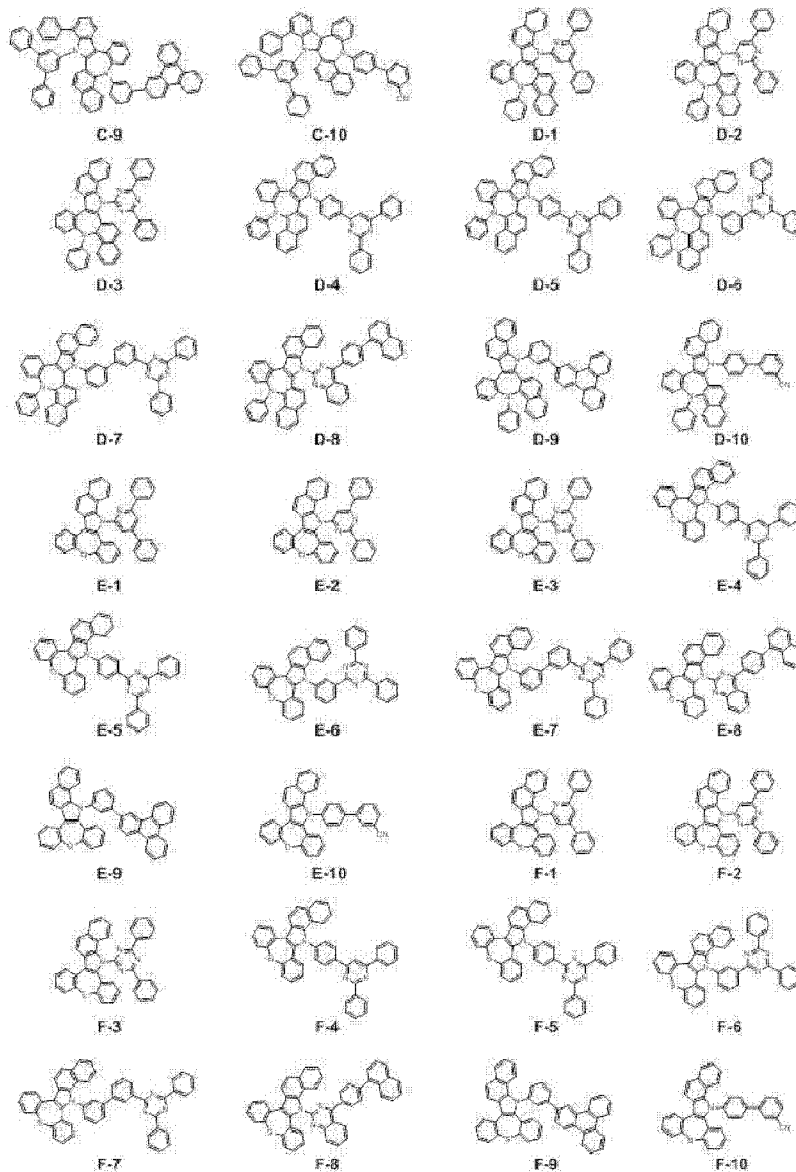
L_1 및 R_{11} 은 각각 제10항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 12] 제10항에 있어서,
상기 L_1 은 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 또는 카바졸릴기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 13] 제1항에 있어서,
상기 Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린으로 이루어진 군에서 선택되며,
상기 Ar_1 내지 Ar_5 의 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린은 페닐, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 비페닐 및 퀴나졸린으로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 14] 제1항에 있어서,
상기 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:





- [청구항 15] (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제14항 중 어느 한 항에 기재된 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 16] 제15항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자수송층, 전자주입층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 17] 제16항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 발광층은 인광 호스트로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.