(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015 년 2 월 12 일 (12.02.2015)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2015/020409 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 498/04 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2014/007237

(22) 국제출원일: 2014 년 8 월 5 일 (05.08.2014)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2013-0092769 2013 년 8 월 5 일 (05.08.2013) KR

(71) 출원인: **주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)** [KR/KR]; 100-730 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: **조현종 (JO, Hyunjong)**; 153-823 서울시 금천구 시흥대로 150 길 21-58, 705 호 (독산동, 예전이룸아파트), Seoul (KR). **김희문 (KIM, Hoe Moon)**; 442-710 경기도 수원시 팔달구 화양로 50 번길 30, 119 동 1402 호 (화서동, 화서블루밍푸른숲아파트), Gyeonggi-do (KR). **이창준 (LEE, Chang Jun)**; 425-722 경기도 안산시 단원구 당곡 1 로 10, 535 동 404 호 (고잔동, 주공 5 단지아파트), Gyeonggi-do (KR). **신진용 (SHIN, Jinyong)**; 448-515 경기도 용인시 수지구 심곡로 16, 505 동 1007 호 (상현동, 서원마을금호베스트빌 5 단지아파트), Gyeonggi-do (KR). **백영미 (BEAK, Youngmi)**; 448-737 경기도 용인시 수지구 성복 2 로 76 번길 31, 105 동 1104 호 (성복동, 대우푸르지오아파트), Gyeonggi-do (KR). **박호철 (PARK, HoCheol)**; 442-710 경기도 수원시 팔달구 화양로 50 번길 30, 108 동 1104 호 (화서동, 화서블루밍푸른숲아파트), Gyeonggi-do (KR). **김영배 (KIM, Young Bae)**; 445-772 경기도 화성시 효행로 291 번길 26, 107 동 702 호 (기안동, 신일해피트리아파트), Gyeonggi-do (KR). **김태형 (KIM, Tae Hyung)**; 463-786 경기도 성남시분당구 내정로 55 326 동 1201 호 (정자동,상록마을우성아파트), Gyeonggi-do (KR).

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

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

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

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

WO 2015/020409 A1

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

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

(57) **Abstract**: The present invention relates to a novel compound and an organic electroluminescent light emitting diode comprising same, and the compound according to the present invention can be used in an organic layer, and desirably, in a light-emitting layer in the organic electroluminescent light emitting diode, thereby improving light-emitting efficiency, driving voltage, and life of the organic electroluminescent light emitting diode.

(57) **요약서**: 본 발명 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게는 발광층에 사용됨에 따라 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 구동 전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

기술분야

[1] 본 발명은 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 우수한 신규 화합물 및 상기 화합물을 유기물층의 재료로서 포함하여 발광 효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

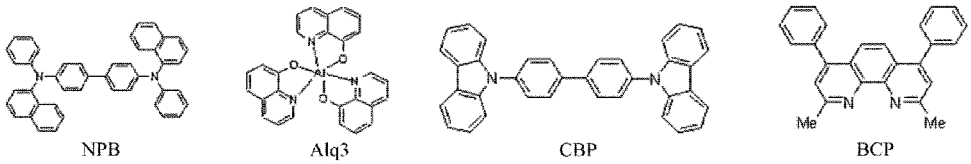
[2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구가 이어져 왔다. 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후, 유기 EL 소자의 효율 및 수명을 향상시키기 위하여, 소자 내 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 또한 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.

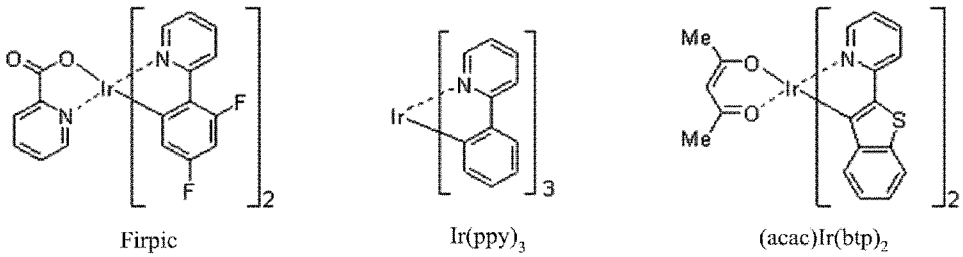
[3] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 각각 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥 상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[4] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질로 구분될 수 있다. 그밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다.

[5] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해서도 관심이 집중되고 있다.

[6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층. 정공 차단층, 전자 수송층으로 사용되는 물질로는, 하기 화학식으로 표시되는 NPB, BCP, Alq_3 등이 널리 알려져 있고, 발광 물질로는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 물질 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로는 Firpic, $Ir(ppy)_3$, $(acac)Ir(btp)_2$ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 있고, 이들은 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[7] 

[8] 

[9] 그러나, 종래 발광 물질들은 발광 특성 측면에서 양호하나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 우수한 성능을 가지는 발광 물질의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

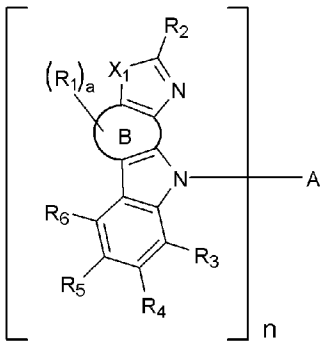
[10] 본 발명은 발광능, 정공 수송능 및 정공 주입능 등이 우수하여 발광층 재료, 정공 수송층 재료 및 정공 주입층 재료로 사용될 수 있는 신규 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[11] 또, 본 발명은 상기 신규 화합물을 포함하여 구동 전압이 낮고, 발광 효율이 높으며, 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것도 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[12] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[13] [화학식 1]

[14] 

[15] n은 1 내지 3의 정수이고;

[16] n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의

아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[17] n이 2인 경우, A는 2가의 작용기로 C_1~C_{40}의 알킬렌기, C_3~C_{40}의 시클로알킬렌기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬렌기, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기, C_1~C_{40}의 알킬렌옥시기, C_6~C_{60}의 아릴렌옥시기, C_3~C_{40}의 알킬렌실릴기, C_6~C_{60}의 아릴렌실릴기, C_2~C_{40}의 알킬렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀옥사이드기, 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

[18] n이 3인 경우, A는 3가의 작용기로 C_1~C_{40}의 알칸트라일기, C_3~C_{40}의 시클로알칸트라일기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알칸트라일기, C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기, C_1~C_{40}의 알칸트라일옥시기, C_6~C_{60}의 아릴트라일옥시기, C_3~C_{40}의 알칸트라일실릴기, C_6~C_{60}의 아릴트라일실릴기, C_2~C_{40}의 알칸트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀옥사이드기, C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기, C_6~C_{60}의 디아릴렌아민기, 및 C_6~C_{60}의 트리아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

[19] B는 6원의 방향족환이며;

[20] a는 0 내지 2의 정수로, a가 1 내지 2의 정수인 경우, R_1은 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, R_1이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[21] R_2 내지 R_6은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[22] X_1 은 O 또는 S이며;

[23] R_1 내지 R_6의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기, A의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기,

아릴포스핀옥사이드기, 아릴아민기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 헤테로시클로알킬렌기, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬렌옥시기, 아릴렌옥시기, 알킬렌실릴기, 아릴렌실릴기, 알킬렌보론기, 아릴렌보론기, 아릴렌포스핀기, 아릴렌포스핀옥사이드기, 아릴렌아민기, 알칸트라일기, 시클로알칸트라일기, 헤테로시클로알칸트라일기, 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 알칸트라일옥시기, 아릴트라일옥시기, 알칸트라일실릴기, 아릴트라일실릴기, 알칸트라일보론기, 아릴트라일보론기, 아릴트라일포스핀기, 아릴트라일포스핀옥사이드기, 아릴트라일아민기, 디아릴렌아민기, 및 트리아릴렌아민기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[24] 또, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[25] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직하게는 정공 수송층 및/또는 발광층이며, 보다 바람직하게는 발광층일 수 있다.

[26] 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공 수송층 재료, 정공 주입층 재료 및/또는 발광층 재료일 수 있으며, 바람직하게는 정공 수송층 재료 및/또는 발광층 재료일 수 있고, 더 바람직하게는 발광층의 인광 호스트 재료일 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[27] 이하, 본 발명에 대해 설명한다.

[28] 1. 신규 화합물

[29] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 인돌 모이어티(indole moiety)에 벤조옥사졸 모이어티(benzo[d]oxazole-based moiety) 또는 벤조싸이아졸 모이어티(benzo[d]thiazole-based moiety)가 축합된 기본 골격을 포함하며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 결합된 구조로서, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다. 이러한 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 EL 소자용 재료 [예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, 'CBP'라 함)] 보다 높은 분자량을 가져 유리전이온도가 높으며, 또한 열적 안정성이 우수하고, 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계

발광 소자가 포함할 경우, 소자의 구동 전압, 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

[30] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질은 호스트의 삼중항 에너지 갭이 도펀트보다 높아야 한다. 즉, 도펀트로부터 효과적으로 인광 발광을 제공하기 위해서는 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높아야 한다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 인돌 모이어티에 벤조옥사졸 모이어티 또는 벤조싸이아졸 모이어티가 축합되어 이루어진 기본 골격은 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 갖고, 이러한 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 효과적으로 조절될 수 있기 때문에, 인광 발광층의 호스트 재료로 사용될 수 있다.

[31] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 인돌 모이어티(indole moiety)에 벤조옥사졸 모이어티(benzo[d]oxazole-based moiety) 또는 벤조싸이아졸 모이어티(benzo[d]thiazole-based moiety)가 축합되어 이루어진 기본 골격에 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)(예컨대, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴나졸린 등과 같은 N-함유 헤테로환)가 결합된 구조를 가짐으로써, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖고, 따라서 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이로 인해, 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있어 유기 전계 발광 소자의 청색, 녹색 혹은 적색의 인광 발광층 재료로 유용하게 적용될 수 있다.

[32] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 인광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있고, 나아가 도입되는 치환체의 종류에 따라 전자 수송 능력 등도 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), 정공 수송층 재료 및 정공 주입층 재료로 사용될 수 있다.

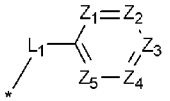
[33] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도가 향상되고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 발광 특성 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있다. 이와 같이, 발광 특성 및 수명 특성이 향상된 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 결과적으로 풀 칼라 유기 발광 패널의 성능을 극대화시킬 수 있다.

[34] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[35] 이때, 상기 A의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[36] 더 바람직하게는 n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로, 하기 화학식 2로 표시되는 치환체일 수 있다.

[37] [화학식 2]

[38] 

[39] 상기 화학식 2에서,

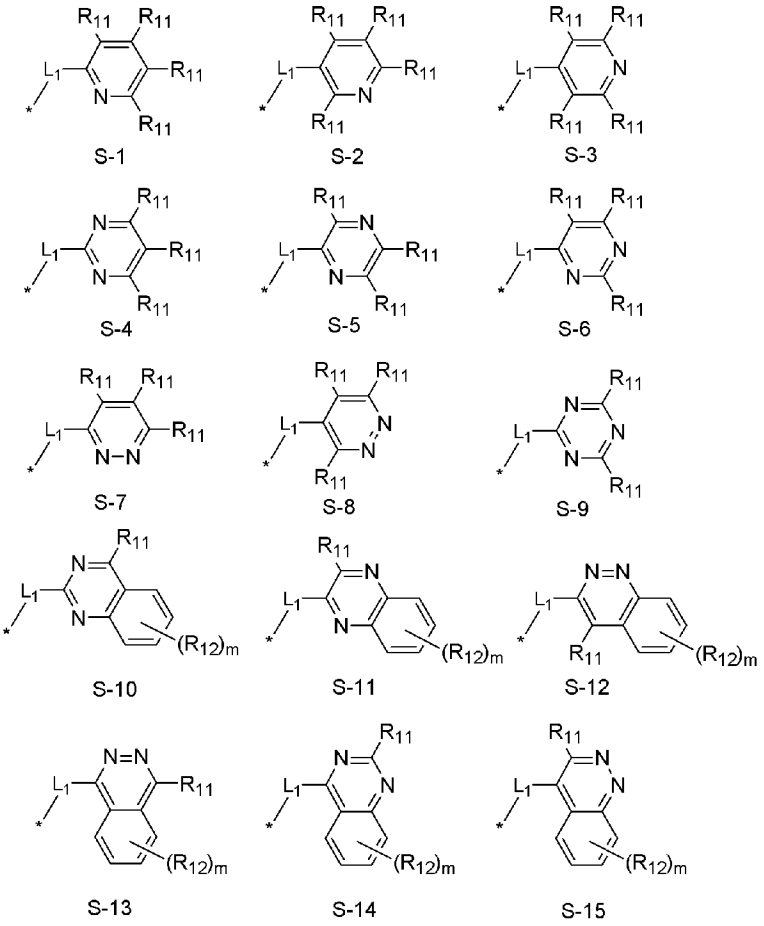
[40] L_1는 단일결합이거나, 또는 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합이거나, 페닐렌기, 또는 비페닐렌기이며;

[41] Z_1 내지 Z_5는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 $C(R_{11})$이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[42] R_{11}은 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 축합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[43] 이때, 상기 R_{11}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[44] 상기 화학식 2로 표시되는 치환체의 예로는 하기 화학식 S-1 내지 S-15로 표시되는 치환체 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[45] 

[46] 상기 화학식 S-1 내지 S-15 에서,

[47] L_1 및 R_{11}은 각각 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같고;

[48] m은 0 내지 4의 정수로, 상기 m이 0이면, 수소가 치환기 R_{12}로 치환되지 않는 것을 의미하며, 상기 m이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{12}는 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 축합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_{12}가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고;

[49] 상기 R_{12}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의

헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[50]

[51] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, n이 2인 경우, A는 2가 작용기로, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다. 여기서, 아릴렌기는 2가의 아릴기(bivalent aryl group)이고, 헤테로아릴렌기는 2가의 헤테로아릴기이다. 예를 들어, 페닐렌기, 비페닐렌기, 2가의 피리딘기, 2가의 피리미딘기, 2가의 트라아진기, 2가의 트리아릴아민기 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[52] 상기 A의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 아릴렌아민기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[53] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, n이 3인 경우, A는 3가의 작용기로, C_6~C_{60}의 아릴트라일기(aryltriyl group), 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기(hetroaryltriyl group), C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기, C_6~C_{60}의 디아릴렌아민기, 및 C_6~C_{60}의 트리아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다. 여기서, 아릴트라일기는 3가의 아릴기(trivalent aryl group)이고, 헤테로아릴트라일기는 3가의 헤테로아릴기이며, 아릴트라일아민기는 3가의 아릴기로 치환된 아민기이고, 디아릴렌아민기는 2개의 아릴렌으로 치환된 아민기이며, 트리아릴렌아민기는 3가의 트리아릴아민기이다. 예를 들어, 3가의 페닐기, 3가의 비페닐기, 3가의 피리딘기, 3가의 피리미딘기, 3가의 트리아진기, 3가의 트리페닐아민기에서 선택된다.

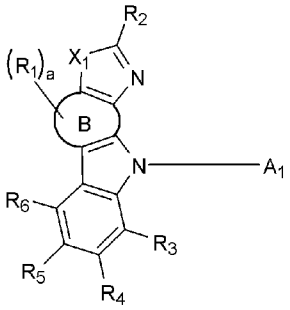
[54] 상기 A의 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 아릴트라일아민기, 디아릴렌아민기, 트리아릴렌아민기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가

복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

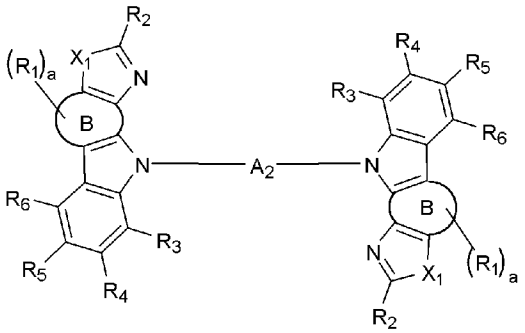
[55]

[56] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 3 내지 5로 표시되는 화합물이 있다.

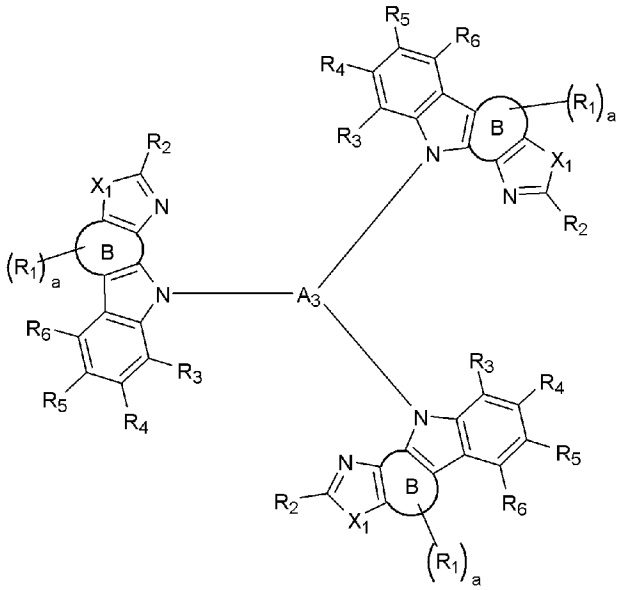
[57] [화학식 3]

[58] 

[59] [화학식 4]

[60] 

[61] [화학식 5]

[62] 

[63] 상기 화학식 3 내지 5에서,

[64] a, R_1 내지 R_6, B 및 X_1는 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고;

[65] A_1은 C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1

~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며, 더 바람직하게는 상기 화학식 2으로 표시되는 치환체이고, 보다 더 바람직하게는 상기 화학식 S-1 내지 S-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되며;

[66] A_2는 C_1~C_{40}의 알킬렌기, C_3~C_{40}의 시클로알킬렌기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬렌기, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기, C_1~C_{40}의 알킬렌옥시기, C_6~C_{60}의 아릴렌옥시기, C_3~C_{40}의 알킬렌실릴기, C_6~C_{60}의 아릴렌실릴기, C_2~C_{40}의 알킬렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기, 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

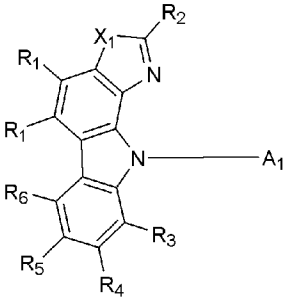
[67] A_3은 C_1~C_{40}의 알칸트라일기, C_3~C_{40}의 시클로알칸트라일기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알칸트라일기, C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기, C_1~C_{40}의 알칸트라일옥시기, C_6~C_{60}의 아릴트라일옥시기, C_3~C_{40}의 알칸트라일실릴기, C_6~C_{60}의 아릴트라일실릴기, C_2~C_{40}의 알칸트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기 및 C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[68] 상기 A_1의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기, A_2의 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 헤테로시클로알킬렌기, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬렌옥시기, 아릴렌옥시기, 알킬렌실릴기, 아릴렌실릴기, 알킬렌보론기, 아릴렌보론기, 아릴렌포스핀기, 아릴렌포스핀옥사이드기, 아릴렌아민기, A_3은 알칸트라일기, 시클로알칸트라일기, 헤테로시클로알칸트라일기, 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 알칸트라일옥시기, 아릴트라일옥시기, 알칸트라일실릴기, 아릴트라일실릴기, 알칸트라일보론기, 아릴트라일보론기, 아릴트라일포스핀기, 아릴트라일포스핀옥사이드기 및 아릴트라일아민기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의

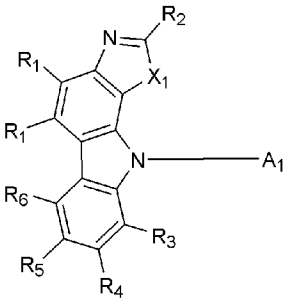
아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[69] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 3a 내지 3f로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

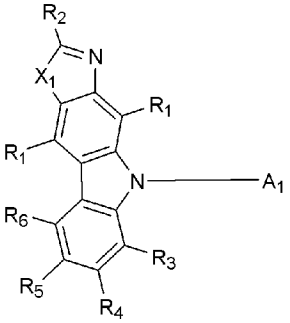
[70] [화학식 3a]

[71] 

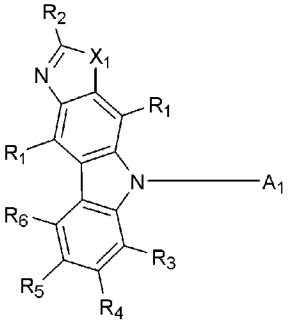
[72] [화학식 3b]

[73] 

[74] [화학식 3c]

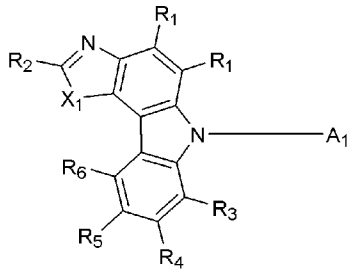
[75] 

[76] [화학식 3d]

[77] 

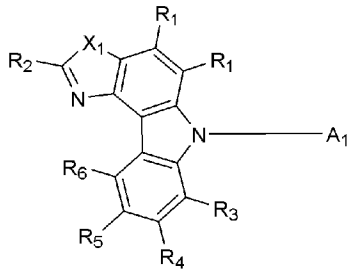
[78] [화학식 3e]

[79]



[80] [화학식 3f]

[81]



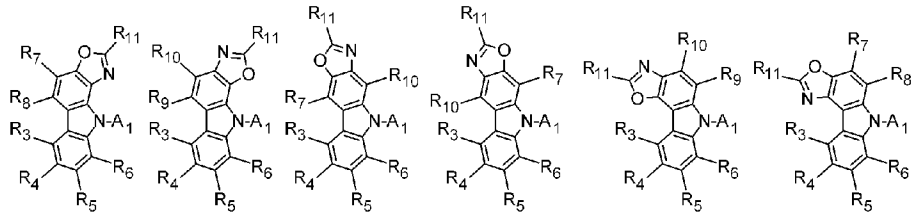
[82] 상기 화학식 3a 내지 화학식 3f에서,

[83] A_1, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 상기 화학식 3에서 정의된 바와 같다.

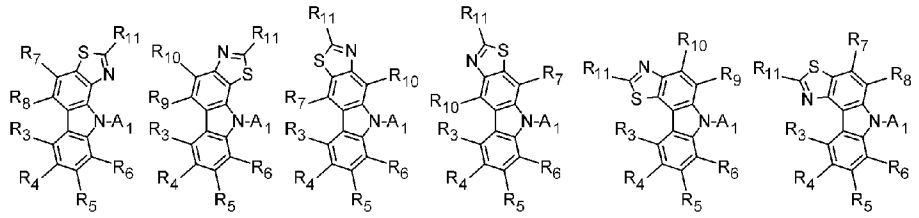
[84]

[85] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물의 구체적인 예로는, 하기 화학식 1-1 내지 1-12로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[86]



1-1 1-2 1-3 1-4 1-5 1-6



1-7 1-8 1-9 1-10 1-11 1-12

[87] 상기 화학식 1-1 내지 1-12에서,

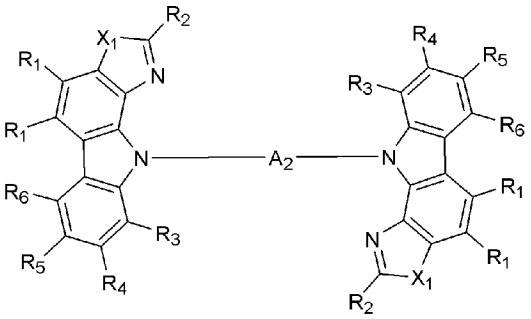
[88] A_1, R_1 내지 R_6, 및 X_1은 각각 상기 화학식 3에서 정의한 바와 같다.

[89]

[90] 상기 화학식 4로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 4a 내지 4f로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

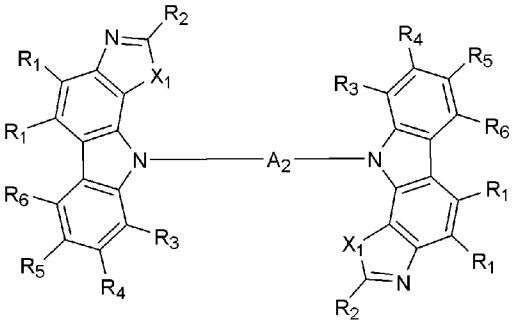
[91] [화학식 4a]

[92]



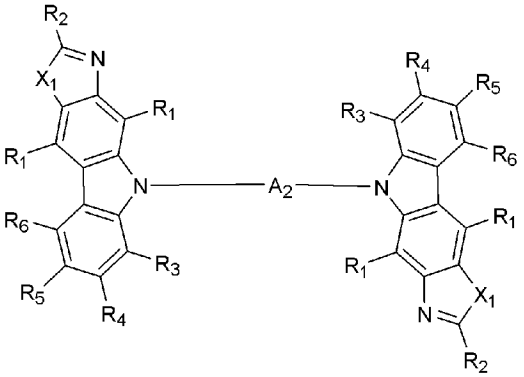
[93] [화학식 4b]

[94]



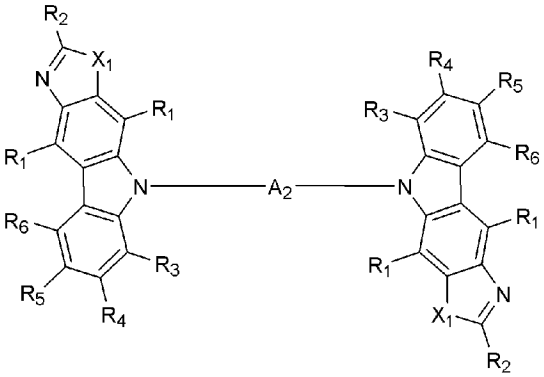
[95] [화학식 4c]

[96]

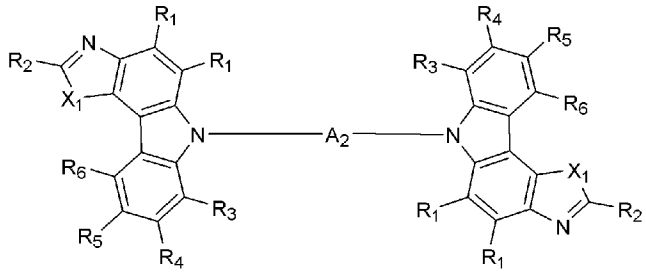


[97] [화학식 4d]

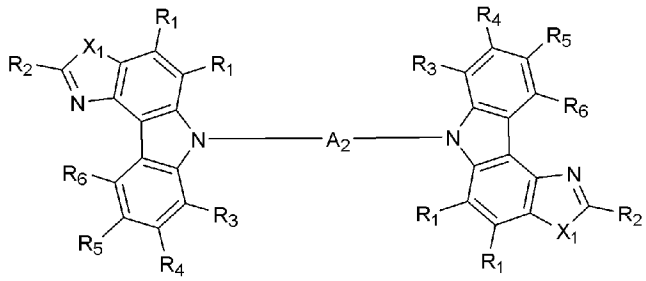
[98]



[99] [화학식 4e]

[100] 

[101] [화학식 4f]

[102] 

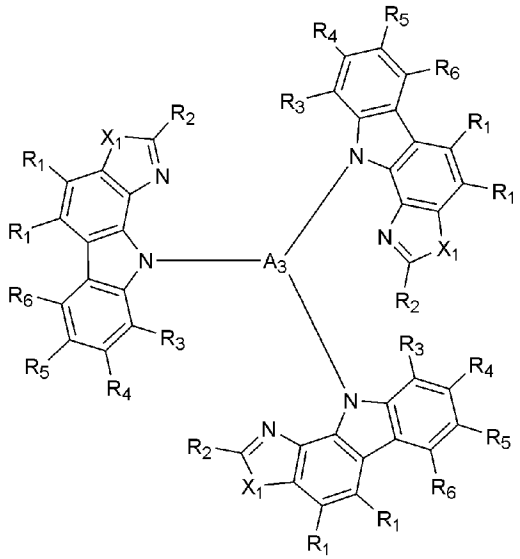
[103] 상기 화학식 4a 내지 4f에서,

[104] A_2, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 상기 화학식 4에서 정의된 바와 같다.

[105]

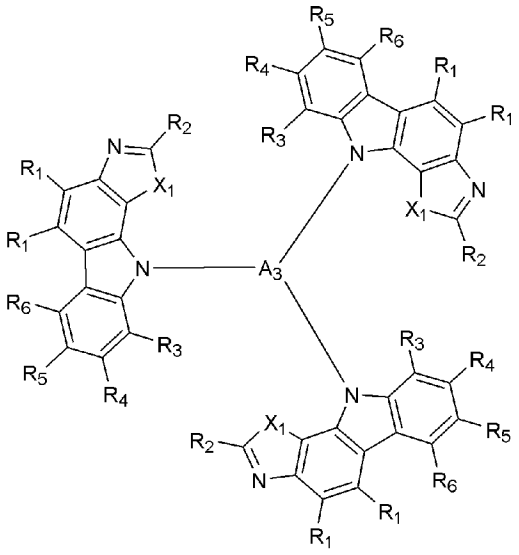
[106] 상기 화학식 5로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 5a 내지 5f로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[107] [화학식 5a]

[108] 

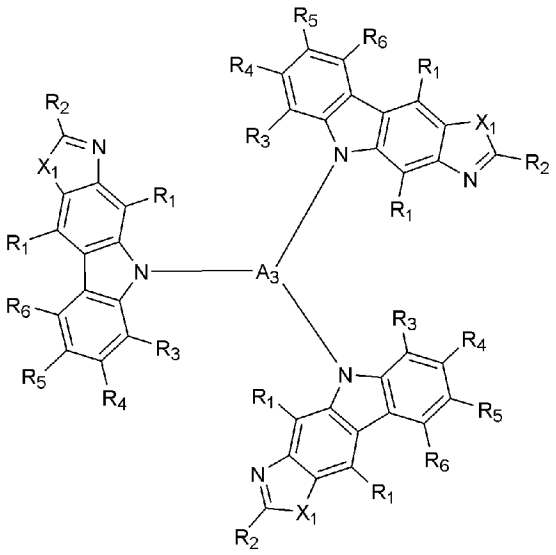
[109] [화학식 5b]

[110]



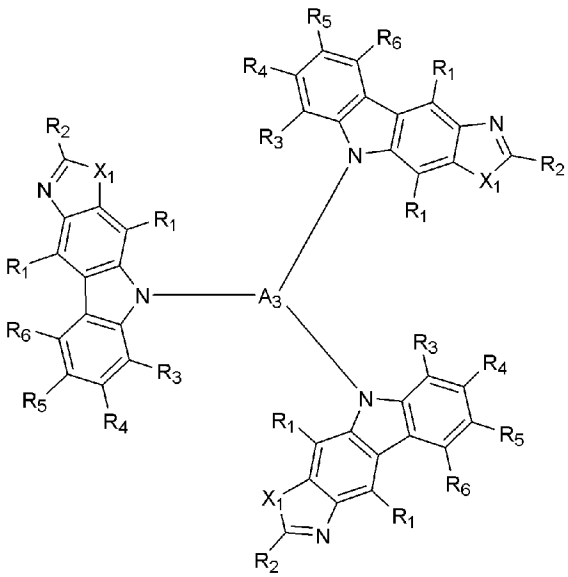
[111] [화학식 5c]

[112]



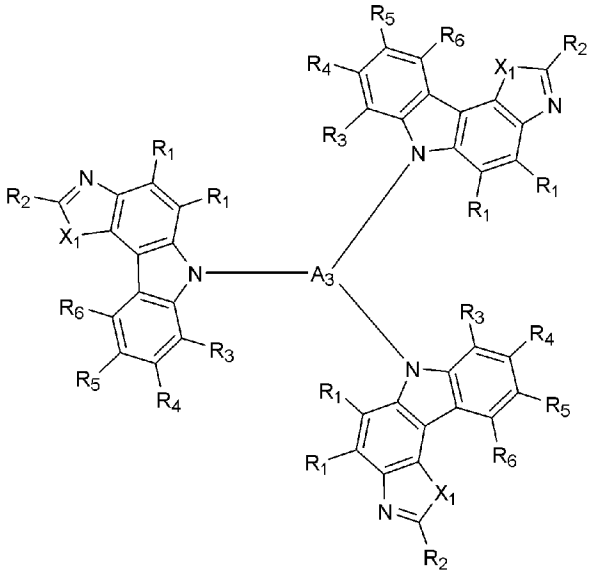
[113] [화학식 5d]

[114]



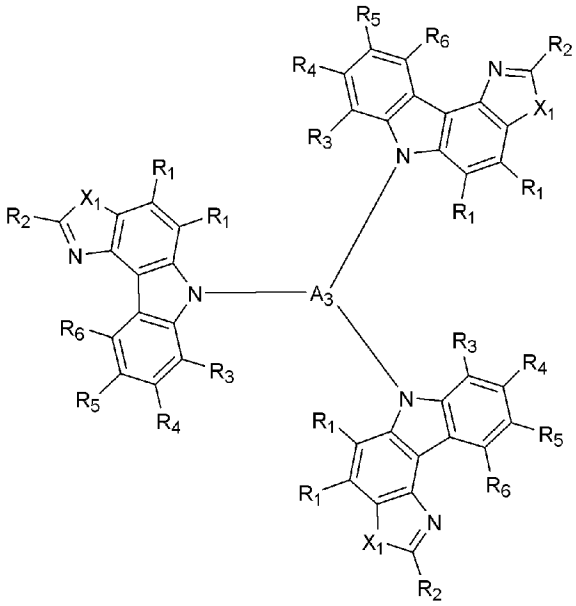
[115] [화학식 5e]

[116]



[117] [화학식 5f]

[118]

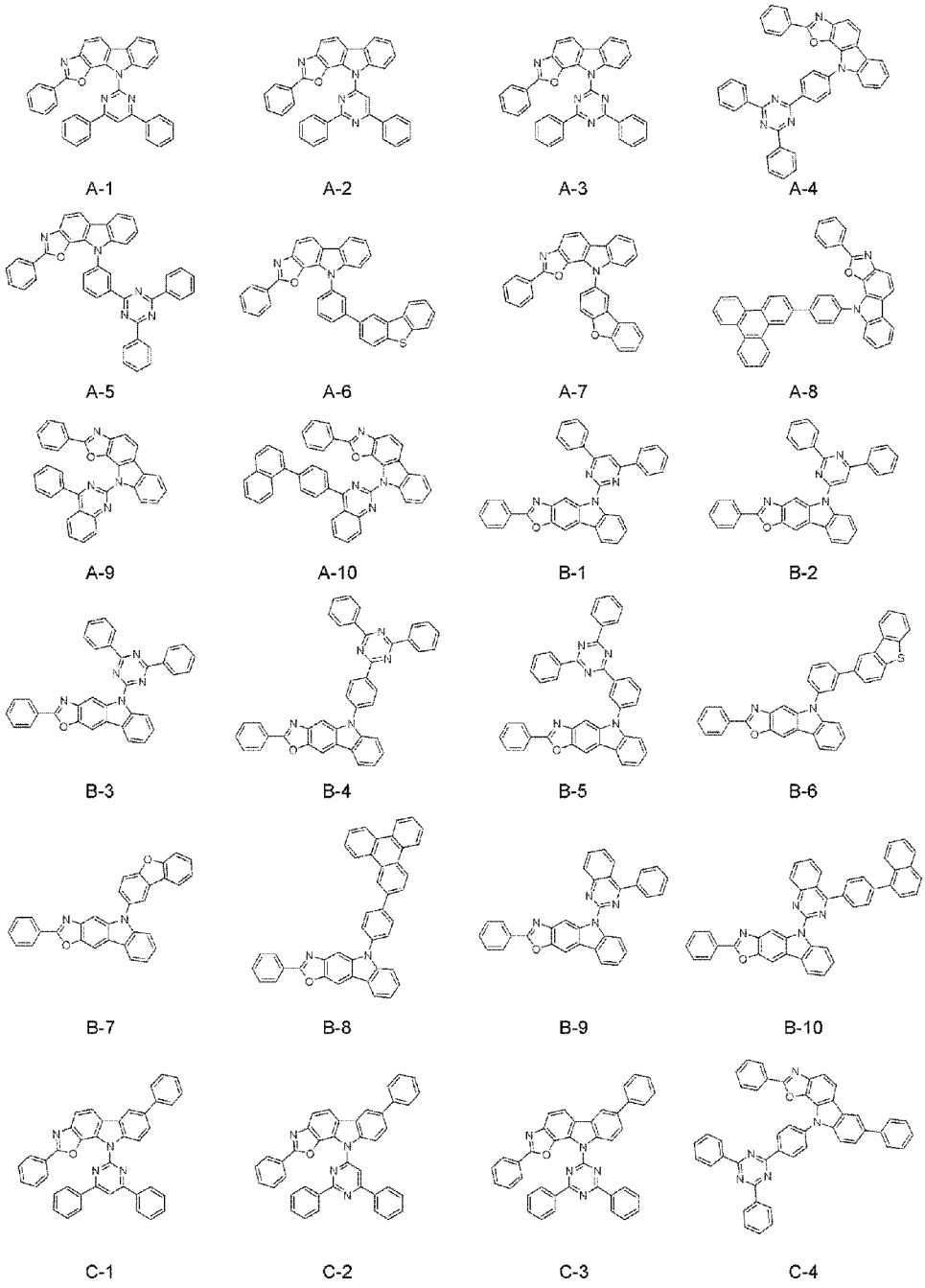


[119] 상기 화학식 5a 내지 5f에서,

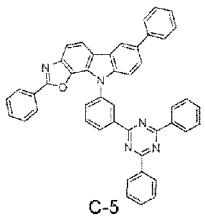
[120] A_3, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 상기 화학식 5에서 정의된 바와 같다.

[121] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물 A-1 내지 R-5 등이 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다. 여기서, 화합물 Q-4 ~ Q-5, R-4 ~ R-5는 상기 화학식 4로 표시되는 화합물의 예이고, 화합물 Q-1 ~ Q-3, R-1 ~ R-3은 화학식 5로 표시되는 화합물의 예이며, 나머지 화합물들은 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물의 예이다.

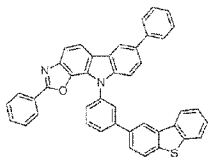
[122]


A-1
A-2
A-3
A-4
A-5
A-6
A-7
A-8
A-9
A-10
B-1
B-2
B-3
B-4
B-5
B-6
B-7
B-8
B-9
B-10
C-1
C-2
C-3
C-4

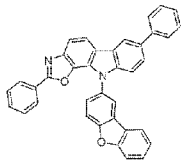
[123]



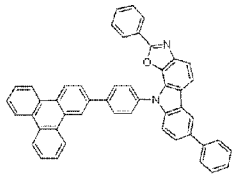
C-5



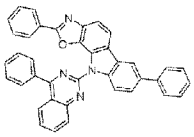
C-6



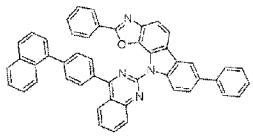
C-7



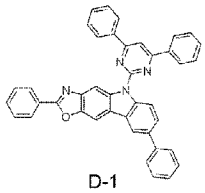
C-8



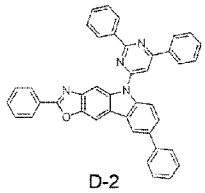
C-9



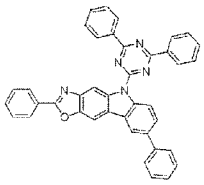
C-10



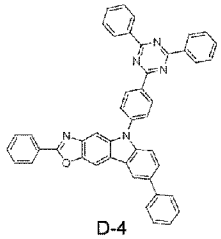
D-1



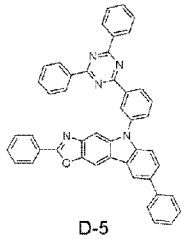
D-2



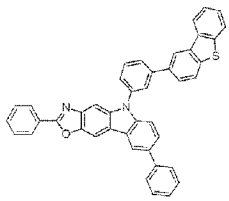
D-3



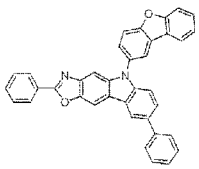
D-4



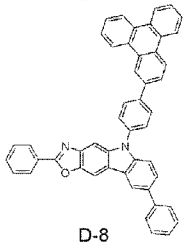
D-5



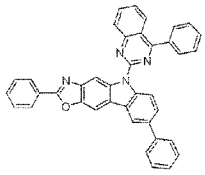
D-6



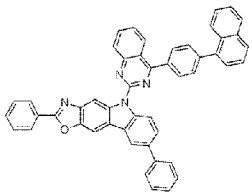
D-7



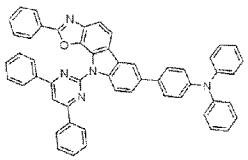
D-8



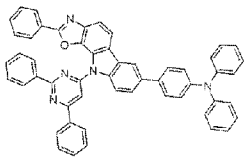
D-9



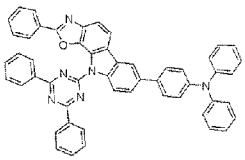
D-10



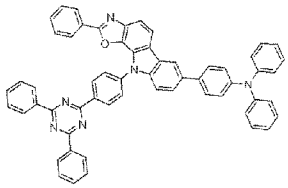
E-1



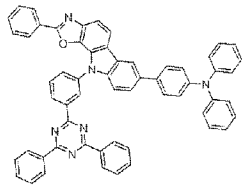
E-2



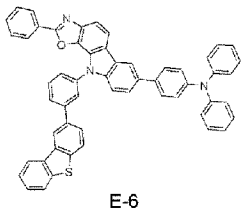
E-3



E-4

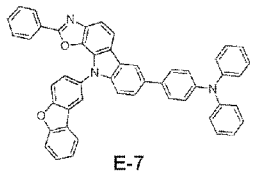


E-5

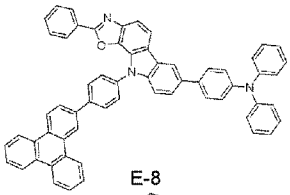


E-6

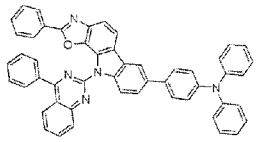
[124]



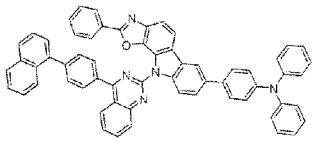
E-7



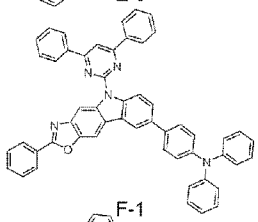
E-8



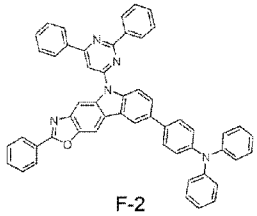
E-9



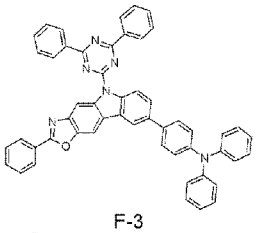
E-10



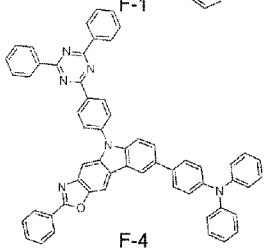
F-1



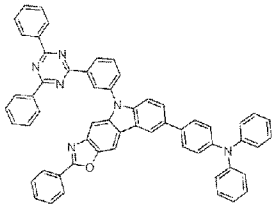
F-2



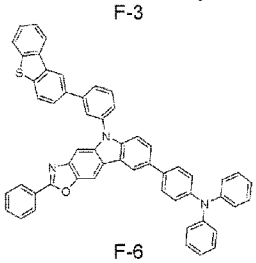
F-3



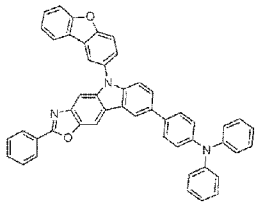
F-4



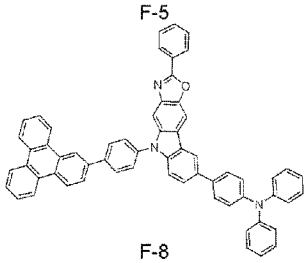
F-5



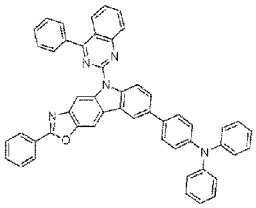
F-6



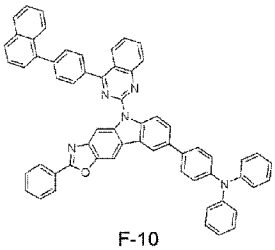
F-7



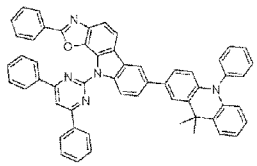
F-8



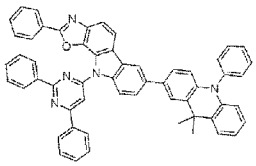
F-9



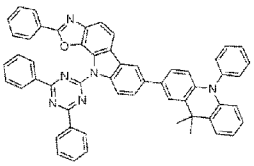
F-10



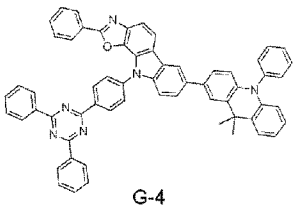
G-1



G-2

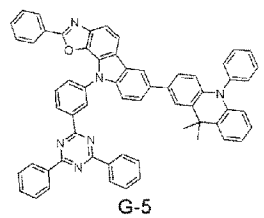


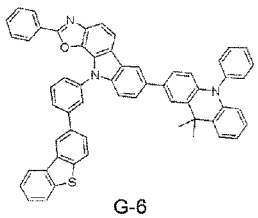
G-3

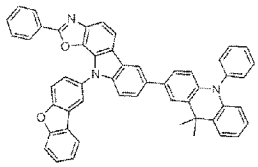


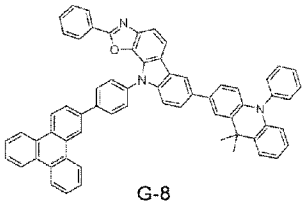
G-4

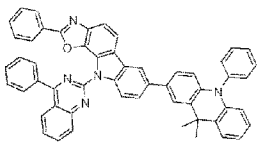
[125]

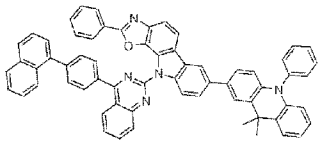

G-5

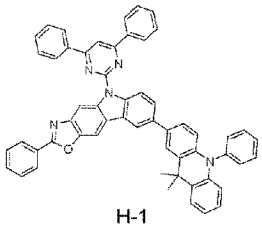

G-6

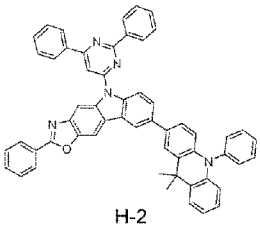

G-7

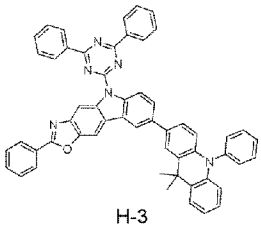

G-8

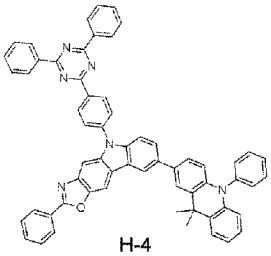

G-9

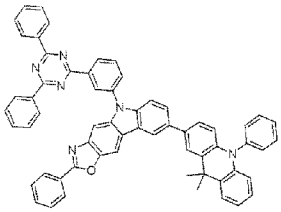

G-10

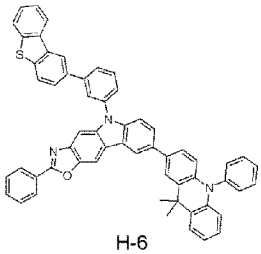

H-1

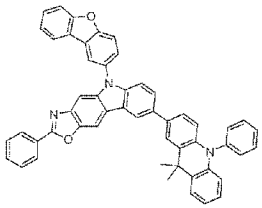

H-2

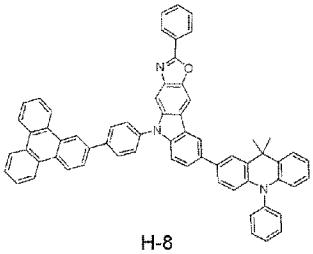

H-3

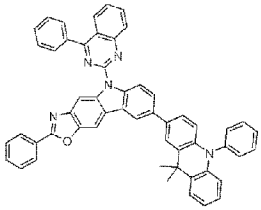

H-4


H-5

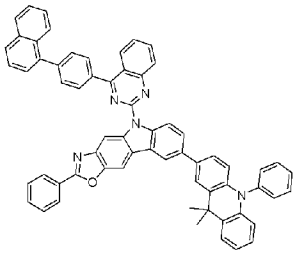

H-6


H-7

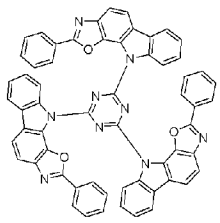

H-8


H-9

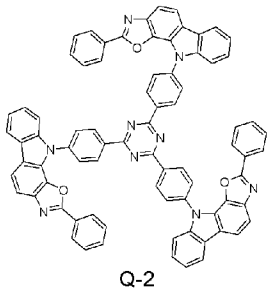
[126]



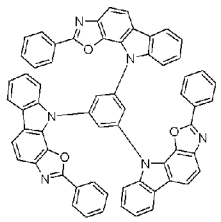
H-10



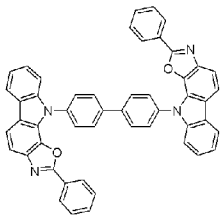
Q-1



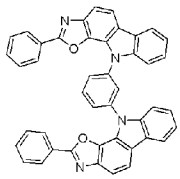
Q-2



Q-3

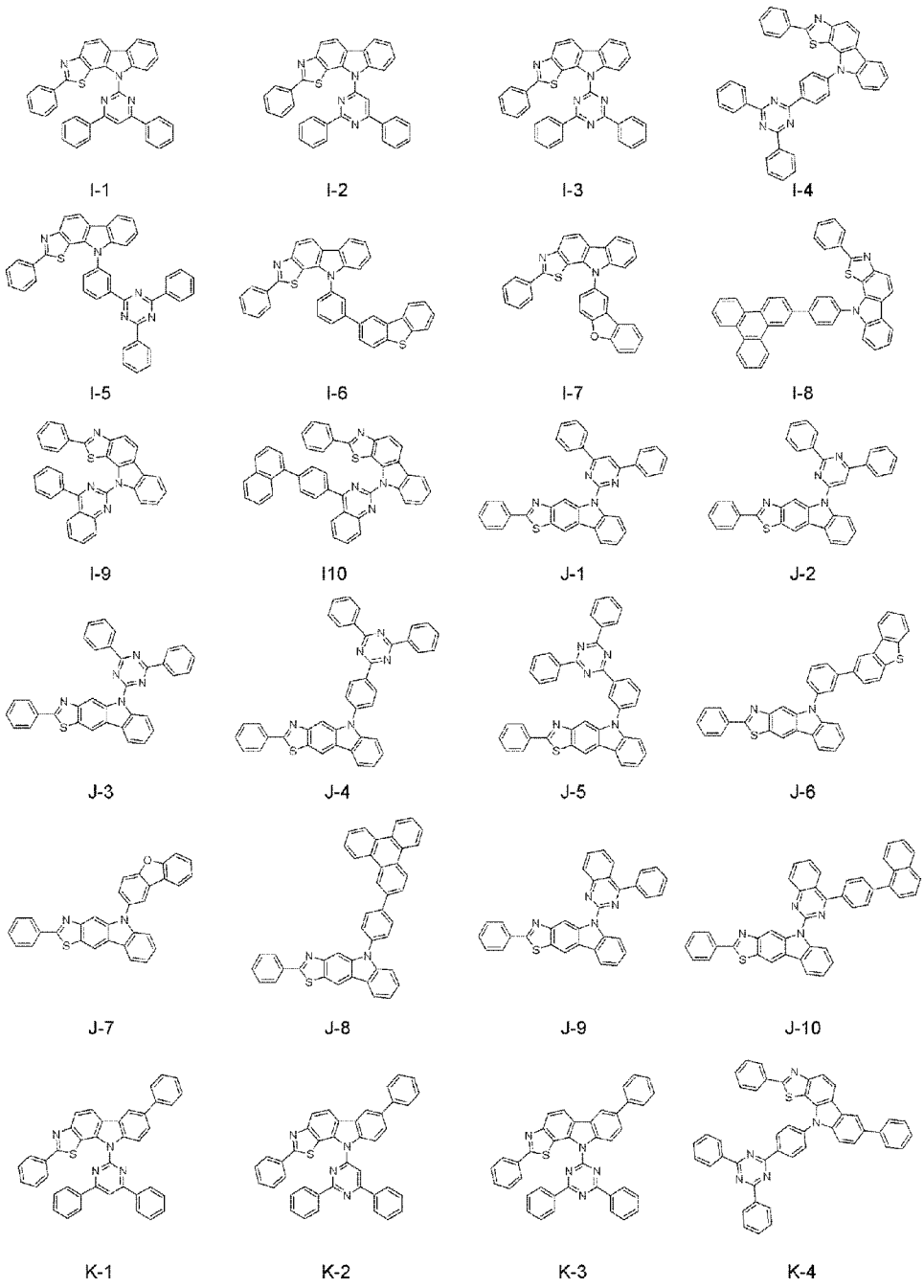


Q-4

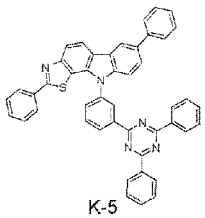


Q-5

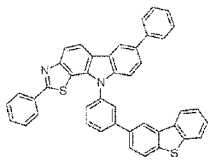
[127]


I-1
I-2
I-3
I-4
I-5
I-6
I-7
I-8
I-9
I10
J-1
J-2
J-3
J-4
J-5
J-6
J-7
J-8
J-9
J-10
K-1
K-2
K-3
K-4

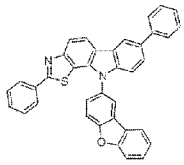
[128]



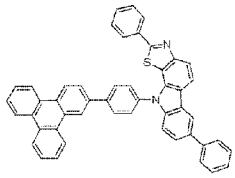
K-5



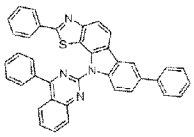
K-6



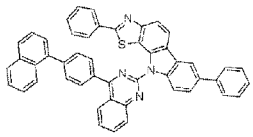
K-7



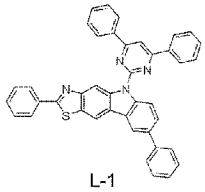
K-8



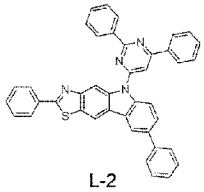
K-9



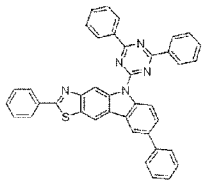
K-10



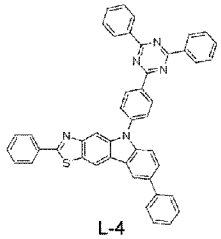
L-1



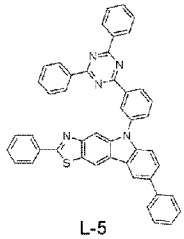
L-2



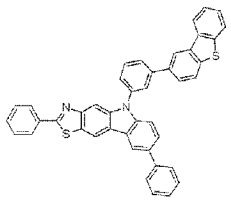
L-3



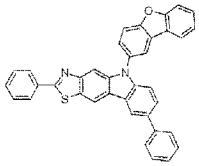
L-4



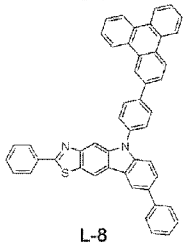
L-5



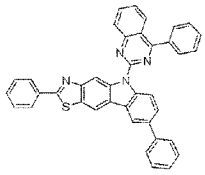
L-6



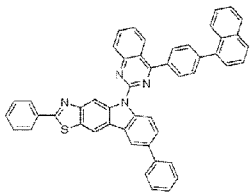
L-7



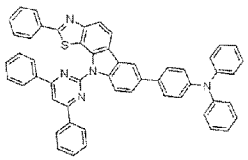
L-8



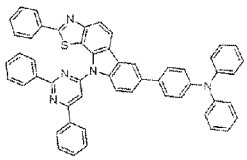
L-9



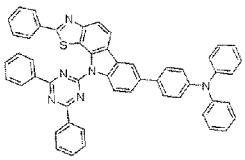
L-10



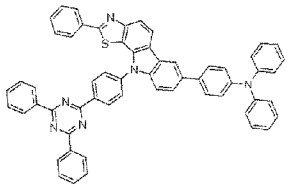
M-1



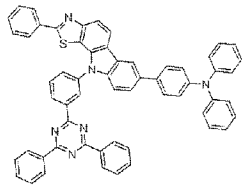
M-2



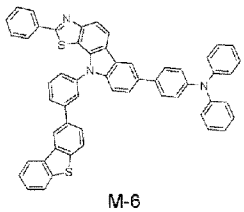
M-3



M-4

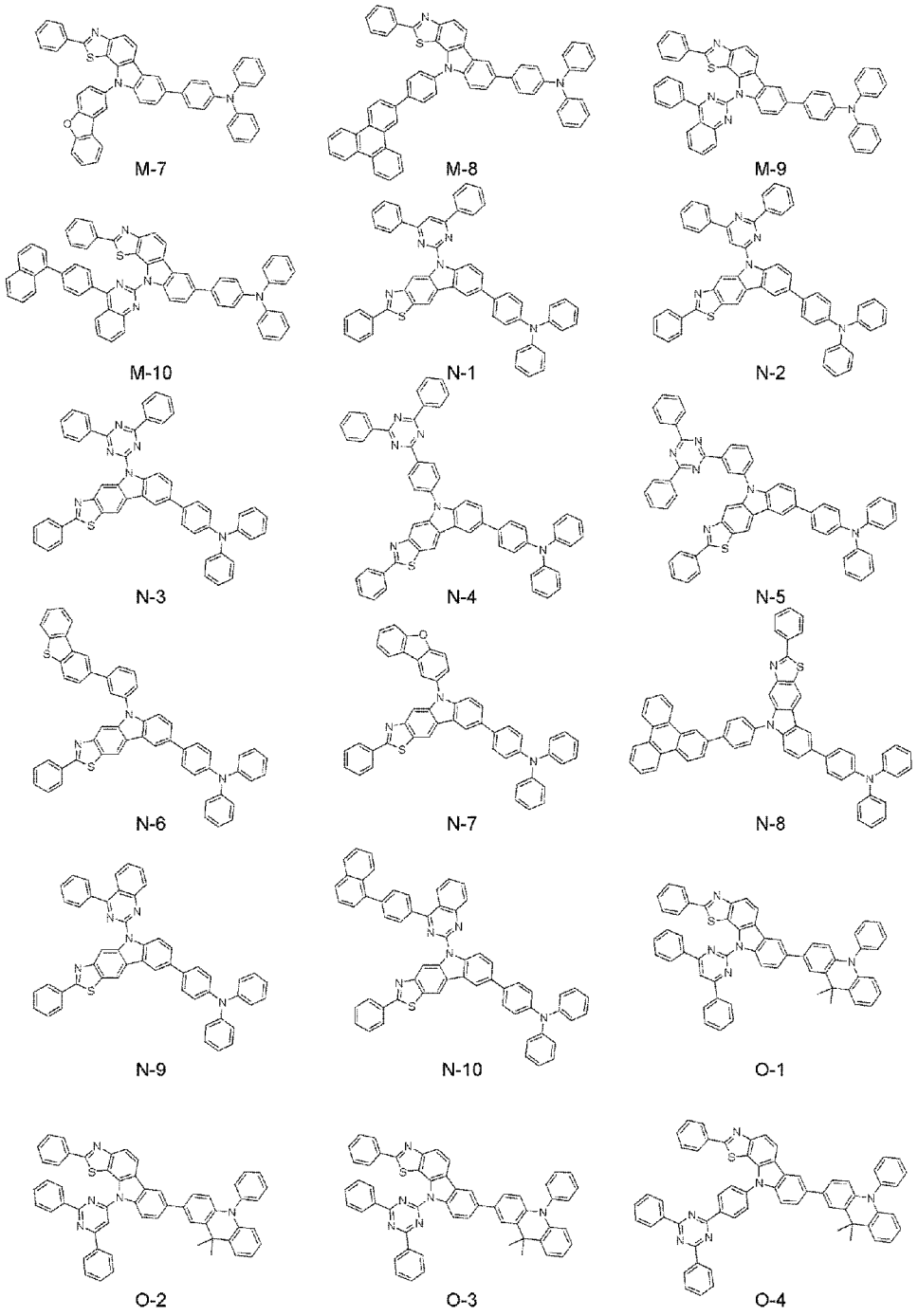


M-5

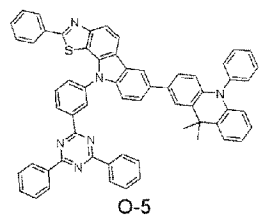


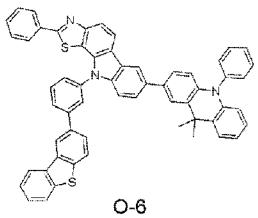
M-6

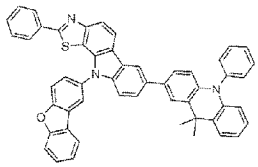
[129]

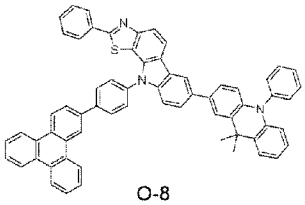


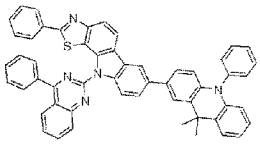
[130]

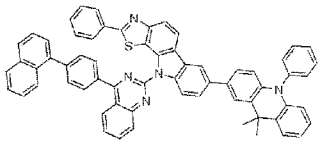

O-5

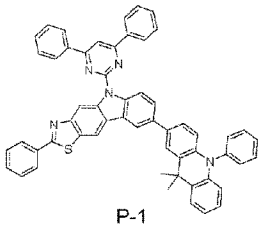

O-6

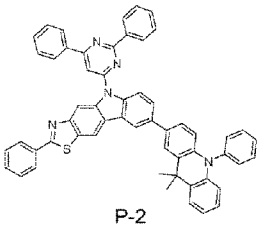

O-7

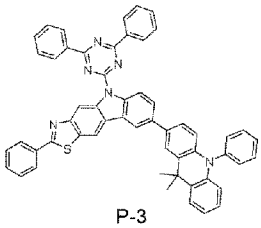

O-8

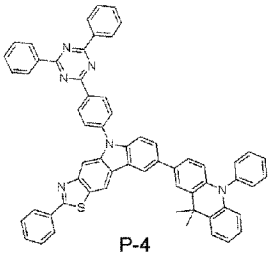

O-9

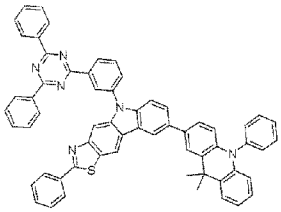

O-10

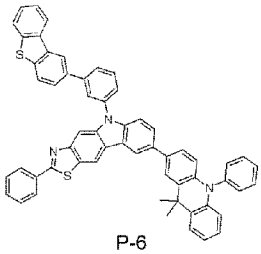

P-1

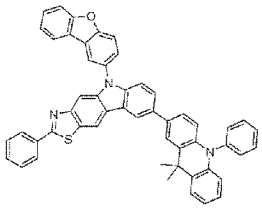

P-2

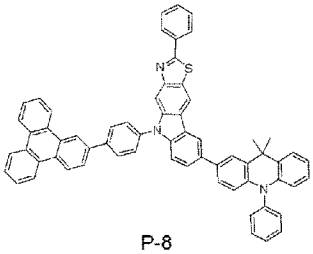

P-3

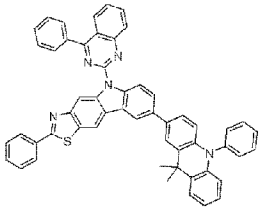

P-4


P-5

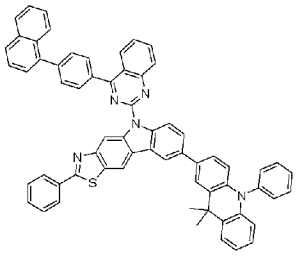

P-6


P-7

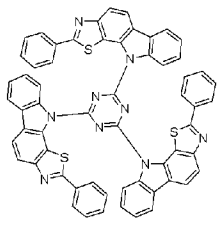

P-8


P-9

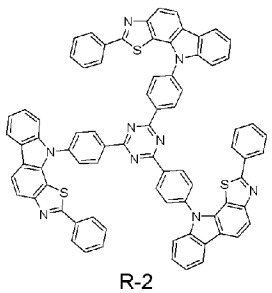
[131]



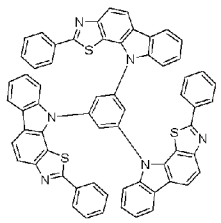
P-10



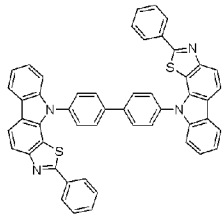
R-1



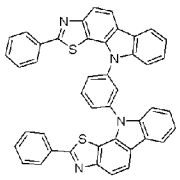
R-2



R-3



R-4



R-5

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

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

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

[135] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있다.

[136] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소(포화 고리형 탄화수소)로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이의 비제한적인 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있다.

[137] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기를 의미한다. 이때, 2 이상의 고리는 서로 단순

부착되거나 축합된 형태로 부착될 수 있다. 이의 비제한적인 예로는 페닐, 비페닐, 터페닐(terphenyl), 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있다.

[138] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 작용기로서, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 질소(N), 산소(O), 황(S) 또는 셀레늄(Se)과 같은 헤테로원자로 치환된다. 이때, 헤테로아릴은 2 이상의 고리가 서로 단순 부착되거나 축합된 형태로 부착될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함할 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 비제한적인 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indolizinyl), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(purinyl), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있다.

[139] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 알킬옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 작용기를 의미하며, 상기 R은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로서, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 이러한 알킬옥시의 비제한적인 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다.

[140] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 아릴옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 작용기를 의미하며, 상기 R'는 탄소수 6 내지 60의 아릴이다. 이러한 아릴옥시의 비제한적인 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있다.

[141] 본 발명에서 사용되는 "비치환된 알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴을 의미하며, 아릴실릴은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미하고, 아릴아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[142] 본 발명에서 사용되는 "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[143] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다(*Chem. Rev.*, *60*:313 (1960); *J. Chem. SOC.* 4482 (1955); Chem. Rev. 95: 2457 (1995) 등 참조). 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[144]

[145] 2. 유기 전계 발광 소자

[146] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[147] 구체적으로, 본 발명은 양극(anode), 음극(cathode), 및 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 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 단독 또는 2 이상 혼합되어 사용될 수 있다.

[148] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및/또는 발광층일 수 있고, 이때 화학식 1의 화합물은 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료 및/또는 발광층 재료로 사용될 수 있다. 더 바람직하게는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 인광 발광층일 수 있으며, 이때 상기 화학식 1의 화합물은 인광 발광층 재료, 특히 인광 호스트 재료일 수 있다.

[149] 본 발명의 일례에 따르면, 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 녹색의 인광 호스트로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광 효율 및 전력 효율), 수명, 휘도 및 구동 전압 등이 향상될 수 있다.

[150] 전술한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상, 바람직하게는 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 하나 이상, 더 바람직하게는 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 이때, 본 발명의 화합물은 발광층의 인광 호스트로 이용될 수 있다. 상기 전자 수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있다.

[151] 또, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[152]

[153] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상(예컨대, 발광층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.

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

[155] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으며, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 사용될 수 있다.

[156] 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 SnO_2: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 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[157] 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 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

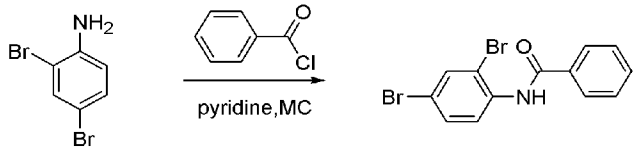
[158]

[159] 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.

[160]

[161] [준비예 1] 화합물 BOC-1 및 BOC-2의 합성

[162] <단계 1> *N*-(2,4-dibromophenyl)benzamide의 합성

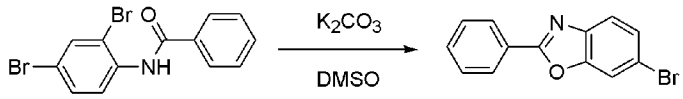
[163] 

[164] 반응기에 2,4-dibromoaniline (250.9 g, 1.0 mol)을 투입하고, methylene chloride (1,000 ml)를 가한 후 교반하였다. 반응기에 benzoyl chloride (116 mL, 1.0 mol), pyridine (161.8 mL, 2.0 mol)을 적가하고 혼합한 다음, 상온에서 2시간 동안 교반하였다.

[165] 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 4:1 (v/v))로 정제하여 N-(2,4-dibromophenyl)benzamide (252.1 g, 수율 71 %)를 얻었다.

[166] ^{1}H-NMR: δ 7.52 (d, 1H), 7.59 (d, 1H), 7.63 (dd, 2H), 7.70 (t, 1H), 7.98 (s, 1H), 8.03 (d, 2H), 9.15 (b, 1H)

[167] <단계 2> 6-bromo-2-phenylbenzo[*d*]oxazole의 합성

[168] 

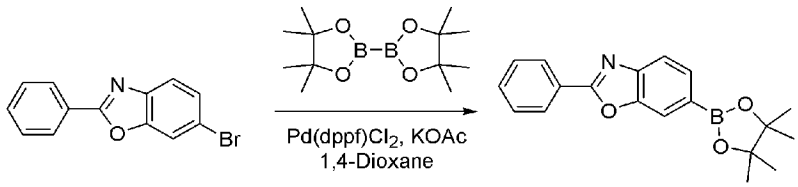
[169] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 1>에서 얻은 N-(2,4-dibromophenyl)benzamide (251.1 g, 710 mmol), K_2CO_3 (196.3 g, 1420 mmol) 및 DMSO (7100 ml)를 혼합하고, 140 ℃에서 1.5시간 동안 교반하였다.

[170] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 9:1 (v/v))로 정제하여 6-bromo-2-phenylbenzo[d]oxazole (147.9 g, 수율 76 %)을 얻었다.

[171] ^{1}H-NMR: δ 7.41 (t, 1H) 7.43 (s, 1H), 7.51 (m, 3H), 7.60 (d, 1H), 8.05 (d, 2H)

[172] <단계 3>

2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]oxazole의 합성

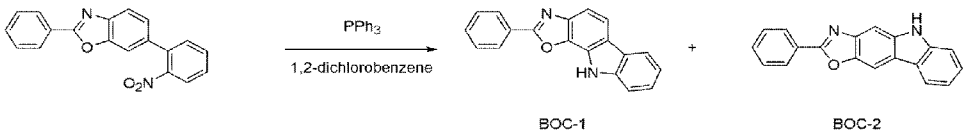
[173] 

[174] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 2>에서 얻은 6-bromo-2-phenylbenzo[d]oxazole (147.9 g, 540.0 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (150.8 g, 594.0 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (62.4 g, 54.0 mmol), KOAc (152.5 g, 1.62 mol) 및 1,4-dioxane (2800 ml)를 혼합하고 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[175] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]oxazole (133.5 g, 수율 77 %)을 얻었다.

[176] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.41 (d, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.62 (d, 1H), 7.75 (s, 1H), 8.05 (d, 2H)

[177] <단계 4> 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole의 합성

[178] 

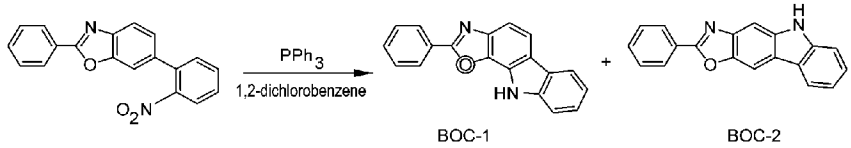
[179] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]oxazole (133.5 g, 415.8 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (92.4 g, 457.4 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (24.0 g, 20.8 mmol), K_2CO_3 (143.7 g, 1.04 mol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4 시간 동안 교반하였다.

[180] 반응이 종결된 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole (110.5 g, 수율 84 %)을 얻었다.

[181] ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.51 (m, 4H), 7.67-7.68 (m, 2H), 7.79 (d, 1H), 7.90 (dd, 1H), 8.00-8.05 (m, 4H)

[182] <단계 5> 화합물 BOC-1과 화합물 BOC-2의 합성

[183]



[184] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 4>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole (110.5 g, 349 mmol)과 triphenylphosphine (274.6 g, 1047 mmol), 1,2-dichlorobenzene (1500 ml)를 혼합한 후, 12시간 교반하였다.

[185] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 4:1 (v/v))로 정제하여 목적 화합물인 BOC-1 (55.6 g, 수율 56 %)과 화합물 BOC-2 (32.7 g, 수율 33 %)를 획득하였다.

[186] 화합물 BOC-1 의 ^{1}H-NMR: δ 7.23-7.29 (m, 2H), 7.41-7.51 (m, 4H), 7.63 (d, 1H), 8.05-8.12 (m, 4H), 10.1 (b, 1H)

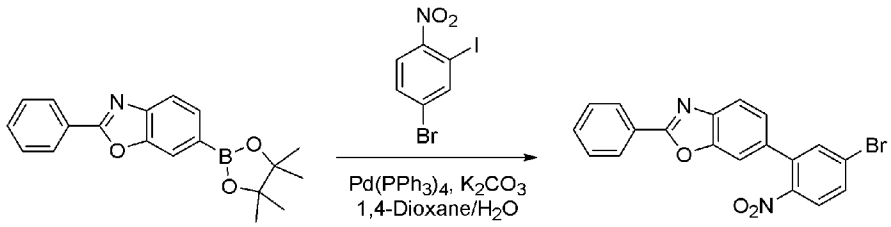
[187] 화합물 BOC-2 의 ^{1}H-NMR: δ 7.29 (dd, 1H), 7.40-7.55 (m, 7H), 8.05-8.12 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[188]

[189] [준비예 2] 화합물 BOC-3 의 합성

[190] <단계 1> 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole의 합성

[191]

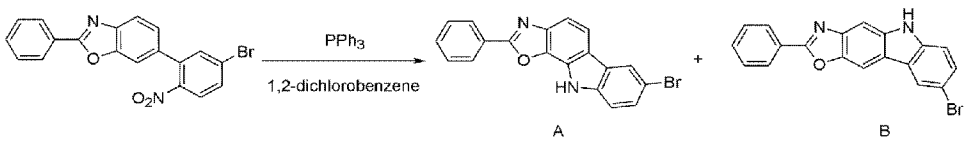


[192] 질소 기류 하에서 준비예 1의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]oxazole (133.5 g, 415.8 mmol), 4-bromo-2-iodo-1-nitrobenzene (150.0 g, 457.4 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (24.0 g, 20.8 mmol), K_2CO_3 (143.7 g, 1.04 mol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시 간 동안 교반하였다.

[193] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole (138 g, 수율 84 %)을 얻었다.

[194] ^{1}H-NMR: δ 7.41 (t, 1H) 7.48 (s, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.68 (d, 1H), 7.72 (s, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.05 (d, 2H), 8.21 (d, 1H)

[195] <단계 2> 7-bromo-2-phenyl-10H-thiazolo[5,4-a]carbazole과 8-bromo-2-phenyl-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole의 합성

[196] 

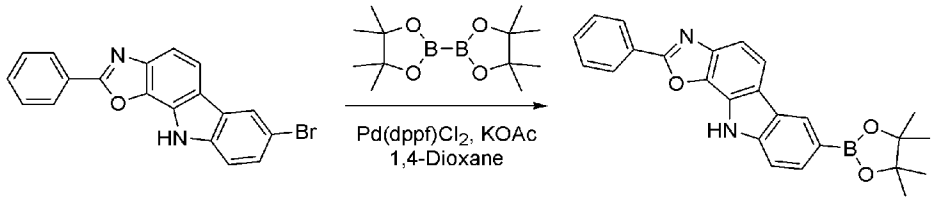
[197] 질소 기류 하에서 준비예 2의 <단계 1>에서 얻은 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]oxazole (138 g, 349 mmol)과 triphenylphosphine (274.6 g, 1047 mmol), 1,2-dichlorobenzene (1500 ml)를 혼합한 후 12시간 교반하였다.

[198] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 4:1 (v/v))로 정제하여 화합물 A (70.1 g, 수율 53 %)와 화합물 B (41.0 g, 수율 31 %)를 획득하였다.

[199] 화합물 A 의 ^{1}H-NMR: δ 7.23 (d, 1H), 7.41 (t, 1H) 7.42 (d, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.52 (d, 1H), 8.05 (m, 3H), 8.12 (d, 1H), 10.1 (b, 1H)

[200] 화합물 B 의 ^{1}H-NMR: δ 7.40 (s, 1H), 7.41 (t, 1H) 7.42 (d, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.52 (d, 1H), 7.55 (s, 1H), 8.05 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[201] <단계 3> 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-oxazolo[5,4-a]carbazole의 합성

[202] 

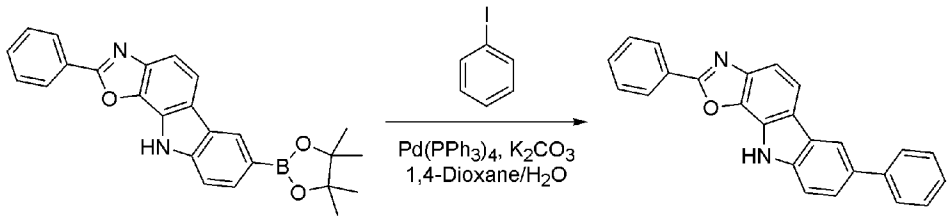
[203] 질소 기류 하에서 준비예 2의 <단계 2>에서 얻은 7-bromo-2-phenyl-10*H*-oxazolo[5,4-a]carbazole (70.1 g, 193.0 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (53.9 g, 212.3 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (22.3 g, 19.3 mmol), KOAc (54.5 g, 579 mmol) 및 1,4-dioxane (1000 ml)를 혼합하고 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[204] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-oxazolo[5,4-a]carbazole (64.1 g, 수율 81 %)을 얻었다.

[205] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.41 (d, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.62 (d, 1H), 7.75 (s, 1H), 8.05 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[206] <단계 4> 화합물 BOC-3의 합성

[207]



BOC-3

[208] 질소 기류 하에서 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-oxazolo[5,4-a]carbazole (64.1 g, 156.2 mmol), iodobenzene (19 mL, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[209] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BOC-3 (48.4 g, 수율 86 %)을 얻었다.

[210] ^{1}H-NMR: δ 7.23 (d, 1H) 7.41-7.52 (m, 8H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.05-8.12 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

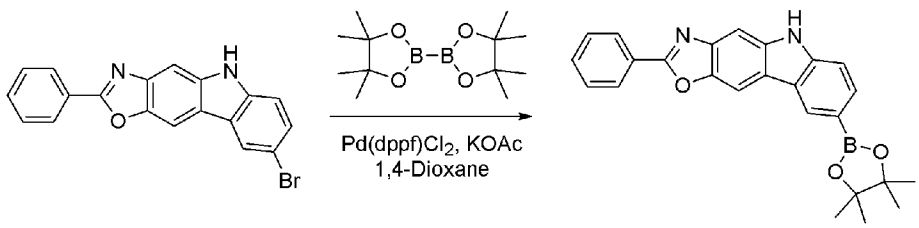
[211]

[212] [준비예 3] 화합물 BOC-4의 합성

[213] <단계 1>

2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole의 합성

[214]



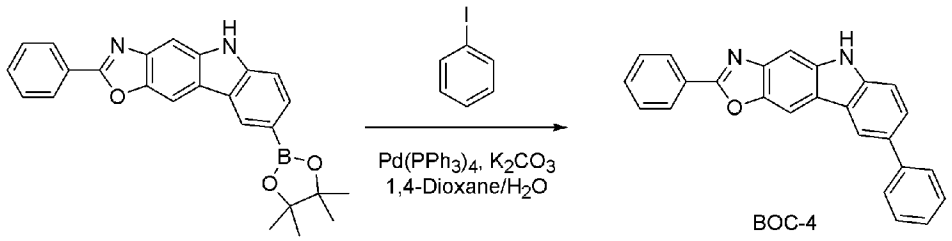
[215] 질소 기류 하에서 준비예 2의 <단계 2>에서 얻은 8-bromo-2-phenyl-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole (41.0 g, 112.9 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (31.5 g, 124.2 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (13.1 g, 11.3 mmol), KOAc (31.9 g, 338.7 mmol) 및 1,4-dioxane (700 ml)를 혼합하고, 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[216] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole (39.4 g, 수율 85 %)을 얻었다.

[217] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.41 (d, 1H), 7.40 (s, 1H), 7.51 (m, 3H), 7.55 (s, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 8.05 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[218] <단계 2> 화합물 BOC-4의 합성

[219]



[220] 질소 기류 하에서 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole (39.4 g, 96.0 mmol), iodobenzene (11.8 mL, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

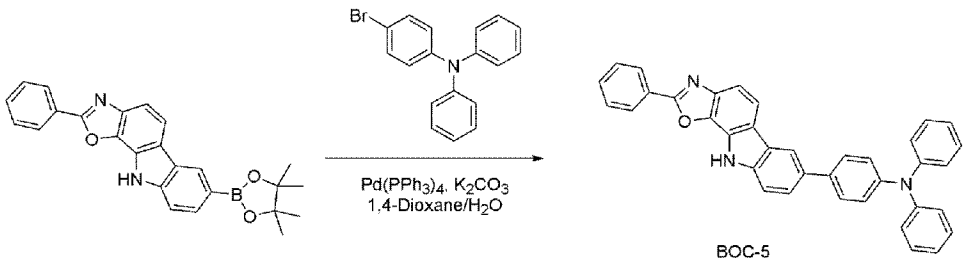
[221] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 BOC-4 (29.8 g, 수율 89 %)를 얻었다.

[222] ^{1}H-NMR: δ 7.40-7.55 (m, 10H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.05 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[223]

[224] [준비예 4] 화합물 BOC-5의 합성

[225]



[226] 질소 기류 하에서 준비예 2의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-oxazolo[5,4-a]carbazole (64.1 g, 156.2 mmol), 4-bromo-*N*,*N*-diphenylaniline (55.7 g, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4 시간 동안 교반하였다.

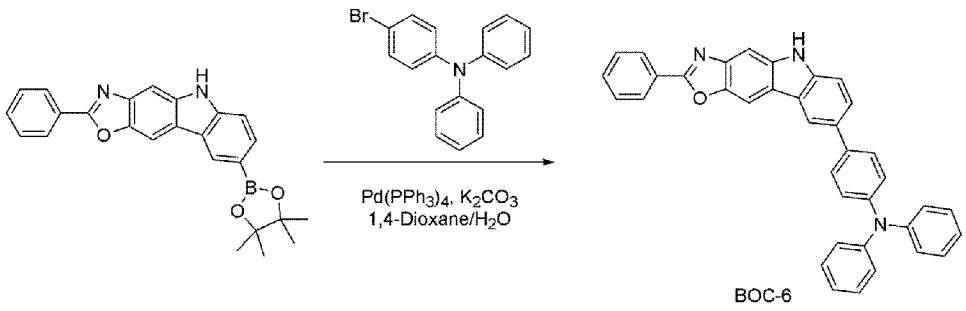
[227] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BOC-5 (77.9 g, 수율 88 %)를 얻었다.

[228] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 6H), 6.81 (t, 2H), 7.20-7.23 (m, 5H), 7.40-7.54 (m, 5H), 7.69-7.87 (m, 3H), 8.05-8.12 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[229]

[230] [준비예 5] 화합물 BOC-6의 합성

[231]



[232] 질소 기류 하에서 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole (39.4 g, 96.0 mmol), 4-bromo-*N,N*-diphenylaniline (34.2 g, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다.

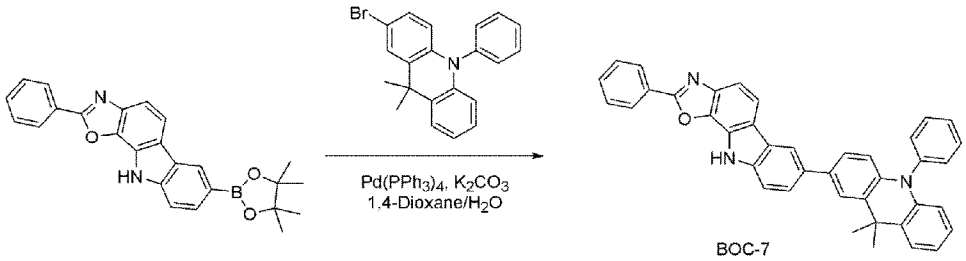
[233] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BOC-6 (48.4 g, 수율 89 %)을 얻었다.

[234] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 6H), 6.81 (t, 2H), 7.20 (dd, 4H), 7.40-7.54 (m, 7H), 7.69-7.87 (m, 3H), 8.05 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[235]

[236] [준비예 6] 화합물 BOC-7의 합성

[237]



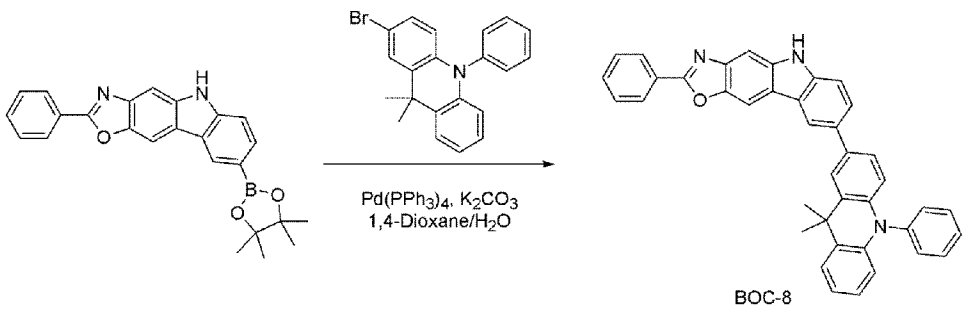
[238] 질소 기류 하에서 준비예 2의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10H-oxazolo[5,4-a]carbazole (64.1 g, 156.2 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-10-phenyl-9,10-dihydroacridine (62.6 g, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[239] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BOC-7 (75.4 g, 수율 85 %)을 얻었다.

[240] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H) 6.55-6.63 (m, 4H), 6.73 (dd, 1H), 6.81 (t, 1H), 7.02-7.05 (m, 2H), 7.20-7.23 (m, 3H), 7.36-7.41 (m, 2H), 7.51-7.69 (m, 4H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.05-8.12 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[241]

[242] [준비예 7] 화합물 BOC-8의 합성

[243] 

[244] 질소 기류 하에서 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-oxazolo[4,5-b]carbazole (39.4 g, 96.0 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-10-phenyl-9,10-dihydroacridine (38.5 g, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

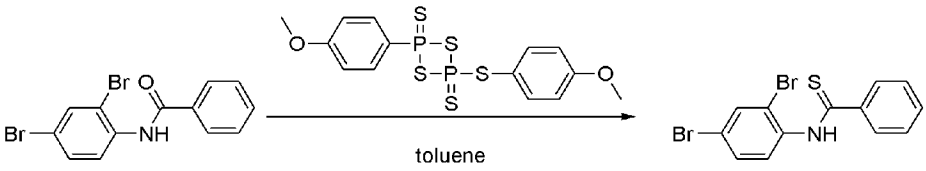
[245] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BOC-8 (45.2 g, 수율 83 %)을 얻었다.

[246] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H) 6.55-6.63 (m, 4H), 6.73-6.81 (m, 2H), 7.02-7.05 (m, 2H), 7.20 (dd, 2H), 7.36-7.41 (m, 3H), 7.51-7.55 (m, 3H), 7.61 (s, 1H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.05 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[247]

[248] [준비예 8] 화합물 BTC-1 및 BTC-2의 합성

[249] <단계 1> *N*-(2,4-dibromophenyl)benzothioamide의 합성

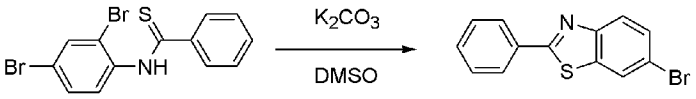
[250] 

[251] 반응기에 준비예 1의 <단계 1>에서 얻은 *N*-(2,4-dibromophenyl)benzamide (266.2 g, 0.75 mol) 을 투입하고, toluene (3,000 ml)를 가한 후 교반하였다. 반응기에 Lawesson's reagent (229.2 g, 0.53 mol)를 적가한 다음 혼합하고, 110 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[252] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 *N*-(2,4-dibromophenyl)benzothioamide (263.5 g, 수율 95 %)를 얻었다.

[253] ^{1}H-NMR: δ 6.41 (d, 1H), 7.29 (d, 1H), 7.44-7.45 (m, 3H), 7.75 (s, 1H), 7.98 (d, 2H), 8.59 (b, 1H)

[254] <단계 2> 6-bromo-2-phenylbenzo[d]thiazole의 합성

[255] 

[256] 질소 기류 하에서 상기 준비예 8의 <단계 1>에서 얻은 *N*-

(2,4-dibromophenyl)benzothioamide (263.5 g, 710 mmol), K_2CO_3 (196.3 g, 1420 mmol) 및 DMSO (7100 ml)를 혼합하고 140 ℃에서 1.5시간 동안 교반하였다.

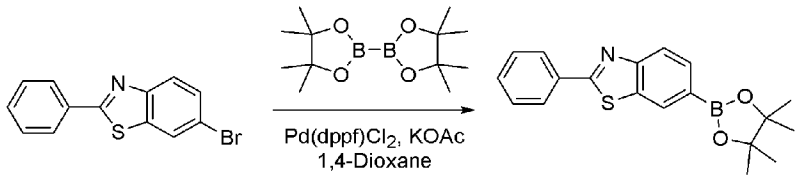
[257] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 6-bromo-2-phenylbenzo[d]thiazole (156.6 g, 수율 76 %)을 얻었다.

[258] ^{1}H-NMR: δ 7.41 (t, 1H) 7.51 (dd, 2H), 7.64 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.83 (s, 1H)

[259] <단계 3>

2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]thiazole의 합성

[260]



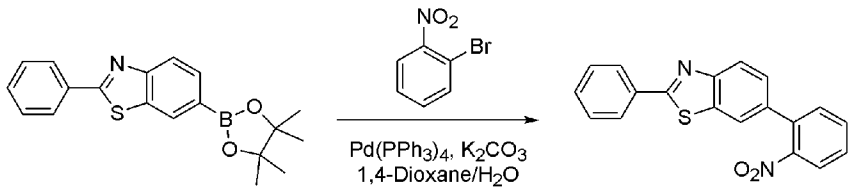
[261] 질소 기류 하에서 준비예 8의 <단계 2>에서 얻은 6-bromo-2-phenylbenzo[d]thiazole (156.6 g, 540.0 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (150.8 g, 594.0 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (62.4 g, 54.0 mmol), KOAc (152.5 g, 1.62 mol) 및 1,4-dioxane (2800 ml)를 혼합하고 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[262] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음, $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]thiazole (140.2 g, 수율 77 %)을 얻었다.

[263] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.38 (d, 1H), 7.41 (t, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.75 (d, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.03 (d, 2H)

[264] <단계 4> 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole의 합성

[265]



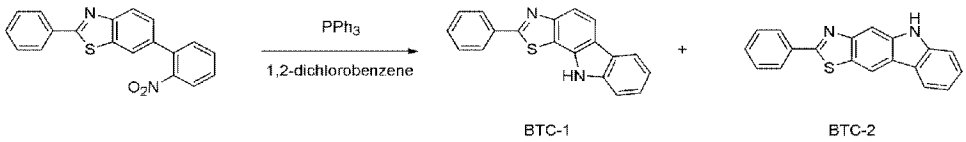
[266] 질소 기류 하에서 준비예 8의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]thiazole (140.2 g, 415.7 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (92.4 g, 457.4 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (24.0 g, 20.8 mmol), K_2CO_3 (143.7 g, 1.04 mol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[267] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 6:1 (v/v))로 정제하여 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole

(116.1 g, 수율 84 %)을 얻었다.

[268] ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.51 (m, 3H), 7.67 (dd, 1H), 7.77-7.90 (m, 3H), 8.00-8.05 (m, 4H), 8.34 (s, 1H)

[269] <단계 5> 화합물 BTC-1과 화합물 BTC-2의 합성

[270] 

[271] 질소 기류 하에서 준비예 8의 <단계 4>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole (116.1 g, 349 mmol)과 triphenylphosphine (274.6 g, 1047 mmol), 1,2-dichlorobenzene (1500 ml)를 혼합한 다음, 12시간 동안 교반하였다.

[272] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고, 디클로로메탄으로 추출한 다음, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 6:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BTC-1 (55.6 g, 수율 53 %)과 화합물 BTC-2 (38.8g, 수율 37 %)를 획득하였다.

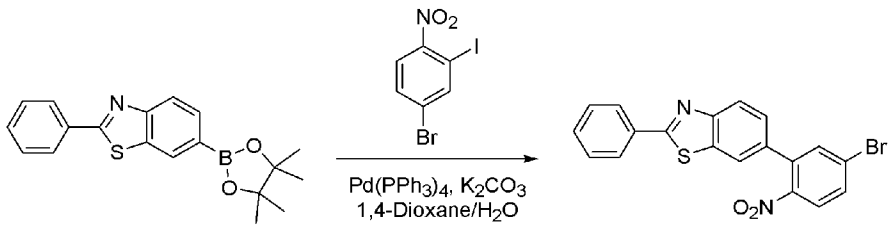
[273] 화합물 BTC-1 의 ^{1}H-NMR: δ 7.29 (dd, 1H), 7.41-7.63 (m, 6H), 7.75 (d, 1H), 8.03-8.12 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[274] 화합물 BTC-2 의 ^{1}H-NMR: δ 7.29 (dd, 1H), 7.41-7.51 (m, 4H), 7.63 (d, 1H), 8.03-8.12 (m, 4H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[275]

[276] [준비예 9] 화합물 BTC-3의 합성

[277] <단계 1> 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole의 합성

[278] 

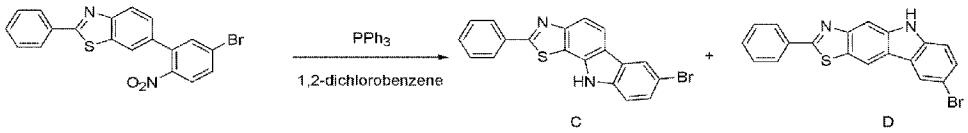
[279] 질소 기류 하에서 준비예 8의 <단계 4>에서 얻은 2-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzo[d]thiazole (140.2 g, 415.7 mmol), 4-bromo-2-iodo-1-nitrobenzene (150.0 g, 457.4 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (24.0 g, 20.8 mmol), K_2CO_3 (143.7 g, 1.04 mol), 1,4-dioxane/H_2O (400 ml/100 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[280] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 7:1 (v/v))로 정제하여 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole (143.5 g, 수율 84 %)을 얻었다.

[281] ^{1}H-NMR: δ 7.41 (t, 1H), 7.51 (dd, 2H), 7.72 (s, 1H), 7.77 (d, 1H), 7.81 (d, 1H), 7.98

(d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.21 (d, 1H), 8.34 (s, 1H)

[282] <단계 2> 7-bromo-2-phenyl-10H-thiazolo[5,4-a]carbazole과 8-bromo-2-phenyl-5H-thiazolo[4,5-b]carbazol의 합성

[283] 

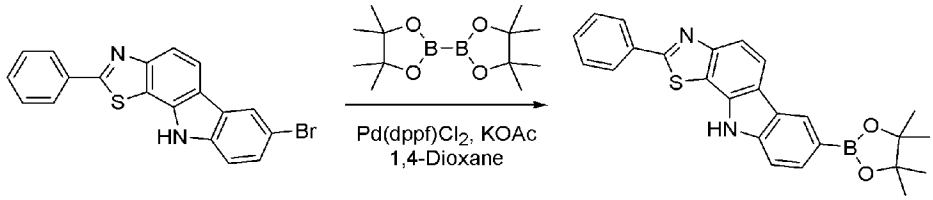
[284] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 1>에서 얻은 6-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenylbenzo[d]thiazole (143.5g, 349 mmol)과 triphenylphosphine (274.6 g, 1047 mmol), 1,2-dichlorobenzene (1500 ml)를 혼합한 다음, 12시간 동안 교반하였다.

[285] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 유기층을 추출한 후, $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 5:1 (v/v))로 정제하여 화합물 C (73.2 g, 수율 55 %)와 화합물 D (42.8g, 수율 32 %)를 획득하였다.

[286] 화합물 C 의 ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.42 (m, 2H), 7.51-7.55 (m, 4H), 7.75 (d, 1H), 8.03-8.05 (m, 3H), 10.1 (b, 1H)

[287] 화합물 D 의 ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.42 (m, 2H), 7.51-7.55 (m, 3H), 8.03 (d, 2H), 8.05 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[288] <단계 3> 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-thiazolo[5,4-a]carbazole의 합성

[289] 

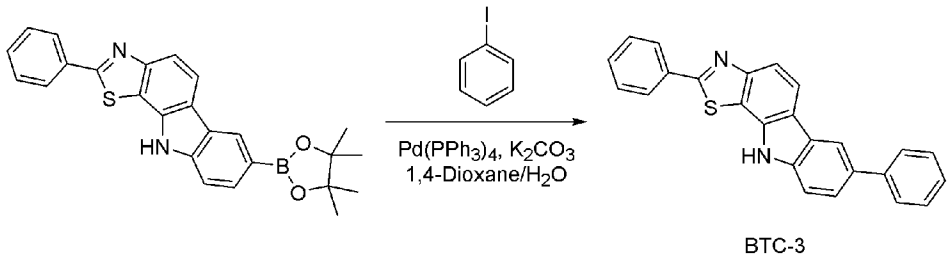
[290] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 2>에서 얻은 7-bromo-2-phenyl-10*H*-thiazolo[5,4-a]carbazole (73.2 g, 193.0 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (53.9 g, 212.3 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (22.3 g, 19.3 mmol), KOAc (54.5 g, 579 mmol) 및 1,4-dioxane (1000 ml)를 혼합하고 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[291] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-thiazolo[5,4-a]carbazole (66.6 g, 수율 81 %)을 얻었다.

[292] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.41 (t, 1H), 7.51-7.55 (m, 4H), 7.63 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 8.03 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[293] <단계 4> 화합물 BTC-3의 합성

[294]



BTC-3

[295] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10*H*-thiazolo[5,4-a]carbazole (66.6 g, 156.2 mmol), iodobenzene (19.1 mL, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 m mol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[296] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BTC-3 (50.0 g, 수율 85 %)을 얻었다.

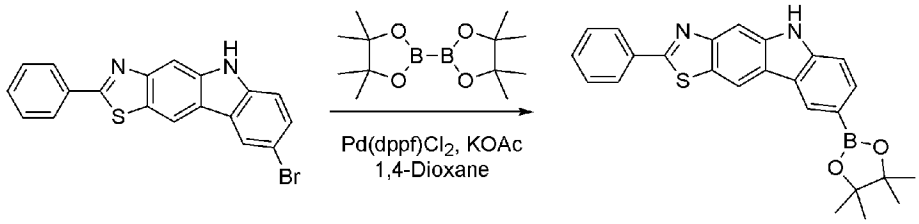
[297] ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.55 (m, 9H), 7.69- 7.77 (m, 3H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[298]

[299] [준비예 10] 화합물 BTC-4의 합성

[300] <단계 1>
2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole의 합성

[301]



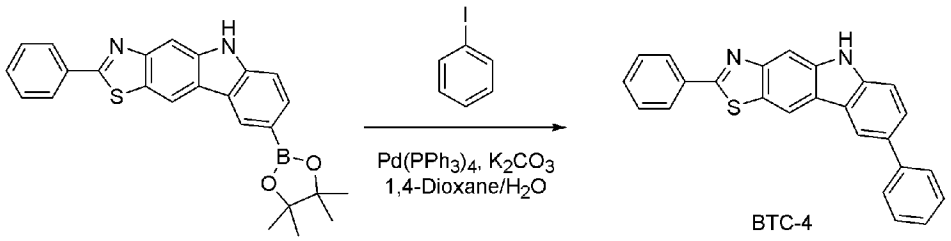
[302] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 2>에서 얻은 8-bromo-2-phenyl-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole (42.8 g, 112.8 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (31.5 g, 124.2 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (13.1 g, 11.3 mmol), KOAc (31.9 g, 338.7 mmol) 및 1,4-dioxane (700 ml)를 혼합하고 130 ℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[303] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음 $MgSO_4$로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole (40.9 g, 수율 85 %)을 얻었다.

[304] ^{1}H-NMR: δ 1.24 (s, 12H) 7.41 (t, 1H), 7.50-7.51 (m, 3H), 7.63 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.12 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[305] <단계 2> 화합물 BTC-4의 합성

[306]



[307] 질소 기류 하에서 준비예 10의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole (40.9 g, 96.0 mmol), iodobenzene (11.8 mL, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

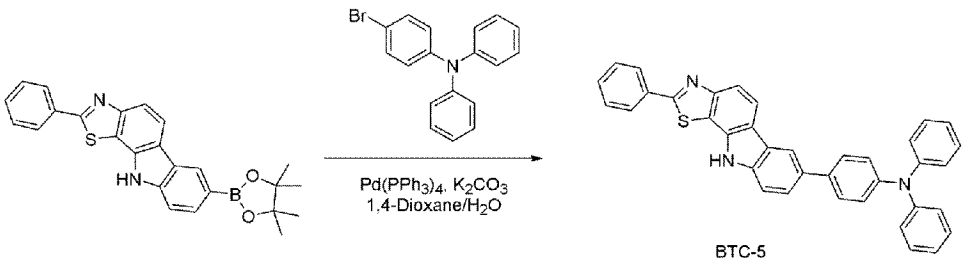
[308] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 BTC-4 (30.4 g, 수율 84 %)를 얻었다.

[309] ^{1}H-NMR: δ 7.41-7.52 (m, 8H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.12 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[310]

[311] [준비예 11] 화합물 BTC-5의 합성

[312]



[313] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10H-thiazolo[5,4-a]carbazole (66.6 g, 156.2 mmol), 4-bromo-*N,N*-diphenylaniline (55.7 g, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

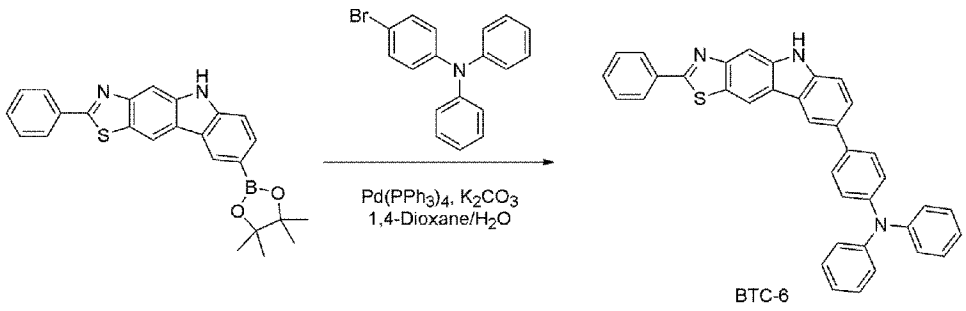
[314] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 BTC-5 (72.2 g, 수율 85 %)를 얻었다.

[315] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 6H), 6.81 (t, 2H), 7.20 (dd, 4H), 7.41 (t, 1H), 7.51-7.55 (m, 5H), 7.69 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[316]

[317] [준비예 12] 화합물 BTC-6의 합성

[318]



[319] 질소 기류 하에서 준빙 10의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole (40.9 g, 96.0 mmol), 4-bromo-*N,N*-diphenylaniline (34.2 g, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

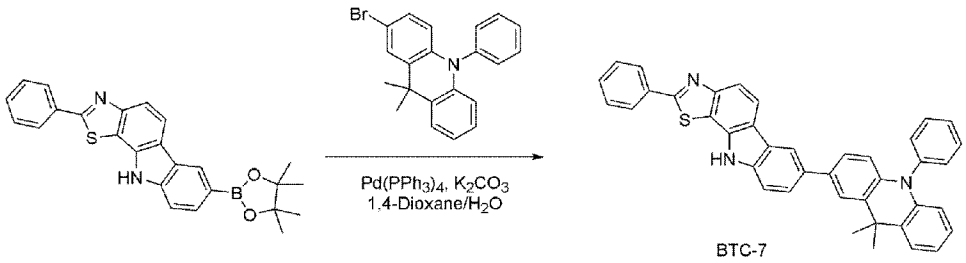
[320] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 8:1 (v/v))로 정제하여 BTC-6 (42.8 g, 수율 81 %)을 얻었다.

[321] ^{1}H-NMR: δ 6.63-6.69 (m, 6H), 6.81 (t, 2H), 7.20 (dd, 4H), 7.41 (t, 1H), 7.51-7.54 (m, 4H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.12 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[322]

[323] [준비예 13] 화합물 BTC-7의 합성

[324]



[325] 질소 기류 하에서 준비예 9의 <단계 3>에서 얻은 2-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-10H-thiazolo[5,4-a]carbazole (66.6 g, 156.2 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-10-phenyl-9,10-dihydroacridine (62.6 g, 171.8 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (9.02 g, 7.81 mmol), K_2CO_3(53.8 g, 390.5 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (160 ml/40 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

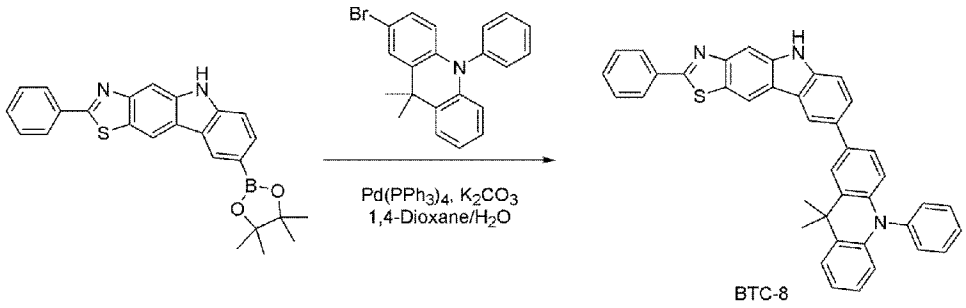
[326] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣은 다음, 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 12:1 (v/v))로 정제하여 화합물 BTC-7 (79.3 g, 수율: 87 %)을 얻었다.

[327] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H) 6.55-6.63 (m, 4H), 6.73 (dd, 1H), 6.81 (t, 1H), 7.02-7.05 (m, 2H), 7.20 (dd, 2H), 7.36 (d, 1H), 7.41 (t, 1H), 7.51-7.61 (m, 4H), 7.69-7.75 (m, 3H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 10.1 (b, 1H)

[328]

[329] [준비예 14] 화합물 BTC-8의 합성

[330]



[331] 질소 기류 하에서 준비예 10의 <단계 1>에서 얻은 2-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-thiazolo[4,5-b]carbazole (40.9 g, 96.0 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-10-phenyl-9,10-dihydroacridine (38.5 g, 105.6 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.55 g, 4.80 mmol), K_2CO_3(39.8 g, 288 mmol), 1,4-dioxane/H_2O (100 ml/25 ml)를 혼합하고 120 ℃에서 4시간 동안 교반하였다.

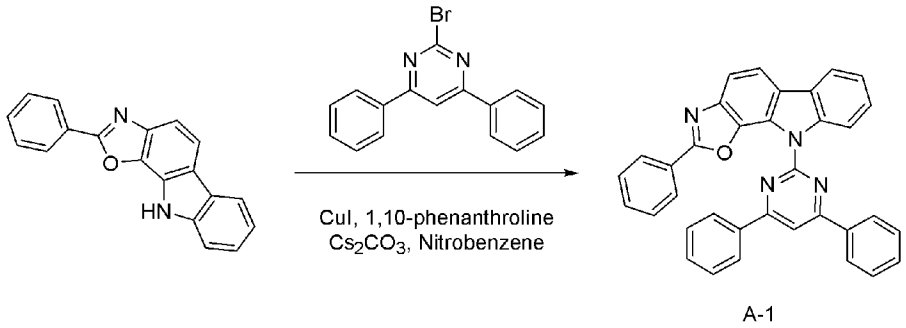
[332] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 BTC-8 (45.4 g, 수율: 81 %)을 얻었다.

[333] ^{1}H-NMR: δ 1.72 (s, 6H) 6.55-6.63 (m, 4H), 6.73-6.81 (m, 2H), 7.02-7.05 (m, 2H), 7.20 (dd, 2H), 7.36-7.61 (m, 5H), 7.69 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.12 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 10.1 (b, 1H)

[334]

[335] [합성예 1] 화합물 A-1의 합성

[336]



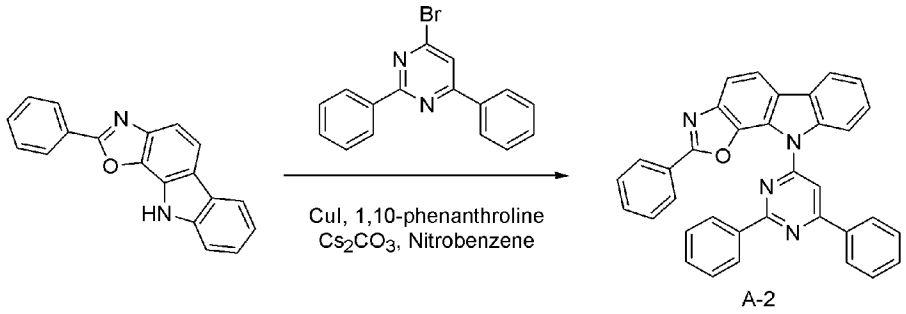
[337] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 BOC-1 (1.9 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 A-1 (2.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[338] Mass (이론치: 514.18, 측정치: 514 g/mol)

[339]

[340] [합성예 2] 화합물 A-2의 합성

[341]



A-2

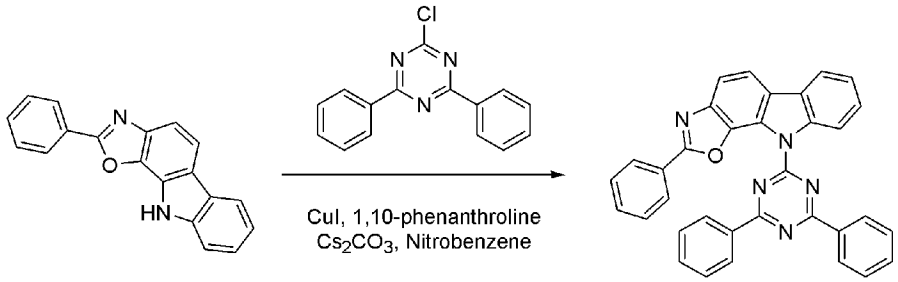
[342] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-2 (2.5 g, 수율: 73 %)를 얻었다.

[343] Mass (이론치: 514.18, 측정치: 514 g/mol)

[344]

[345] [합성예 3] 화합물 A-3의 합성

[346]



A-3

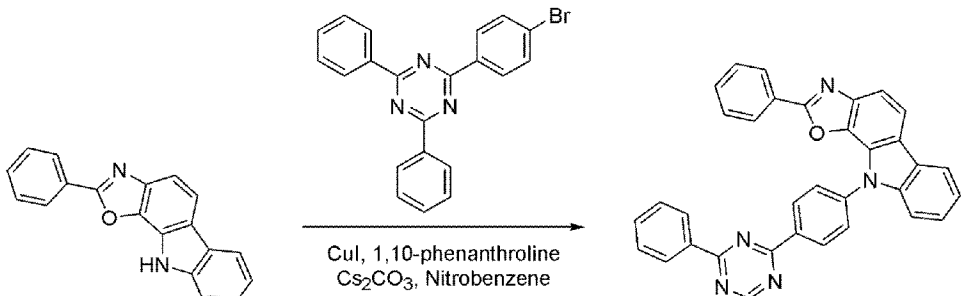
[347] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-3 (2.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[348] Mass (이론치: 515.17, 측정치: 515 g/mol)

[349]

[350] [합성예 4] 화합물 A-4의 합성

[351]



A-4

[352] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

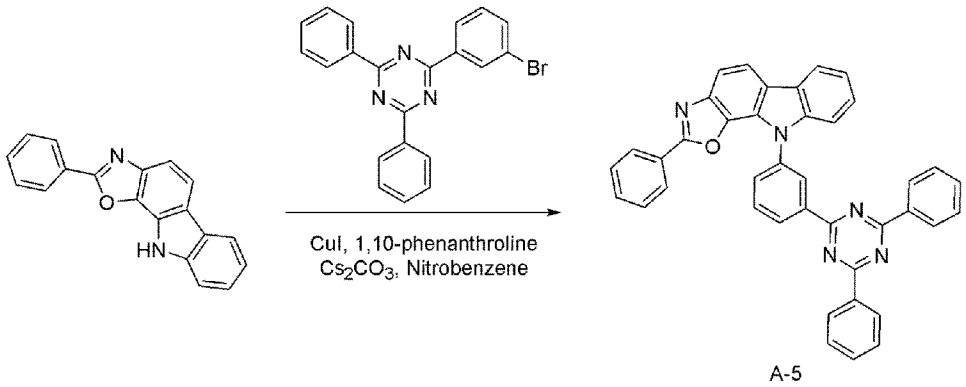
2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-4 (2.6 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[353] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[354]

[355] [합성예 5] 화합물 A-5의 합성

[356]



A-5

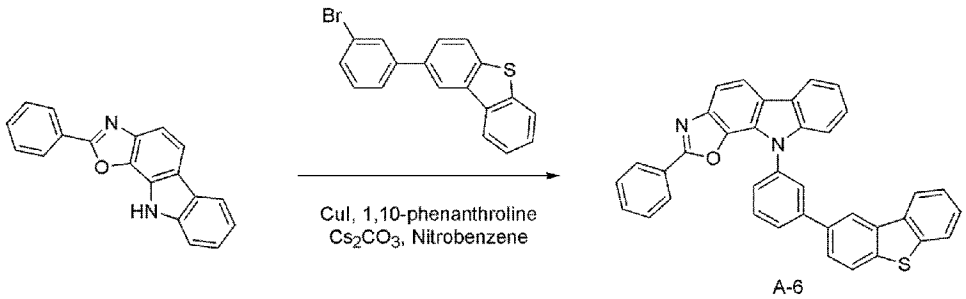
[357] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-5 (2.7 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[358] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[359]

[360] [합성예 6] 화합물 A-6의 합성

[361]



A-6

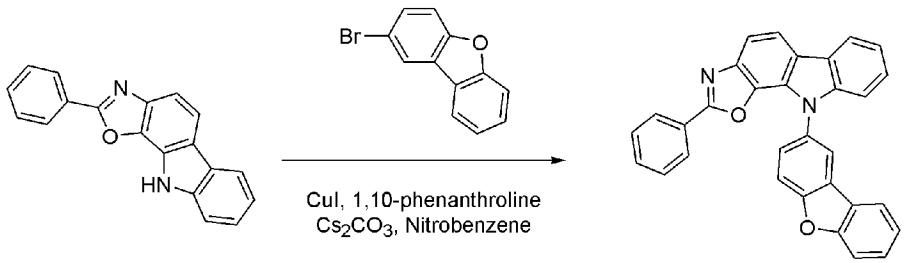
[362] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-6 (2.5 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[363] Mass (이론치: 542.15, 측정치: 542 g/mol)

[364]

[365] [합성예 7] 화합물 A-7의 합성

[366]



A-7

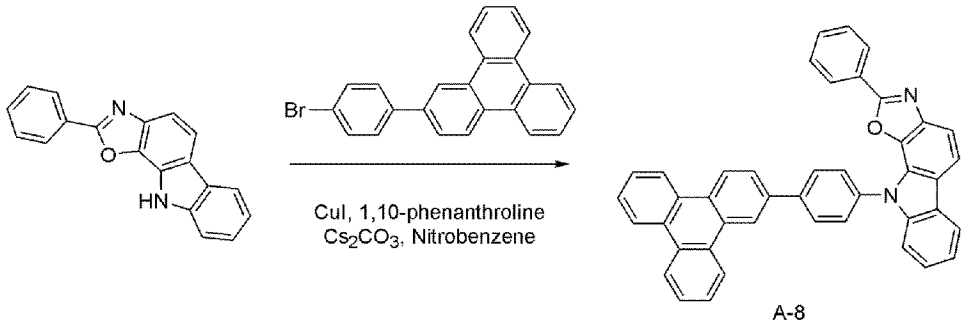
[367] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-7 (2.2 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[368] Mass (이론치: 450.14, 측정치: 450 g/mol)

[369]

[370] [합성예 8] 화합물 A-8의 합성

[371]



A-8

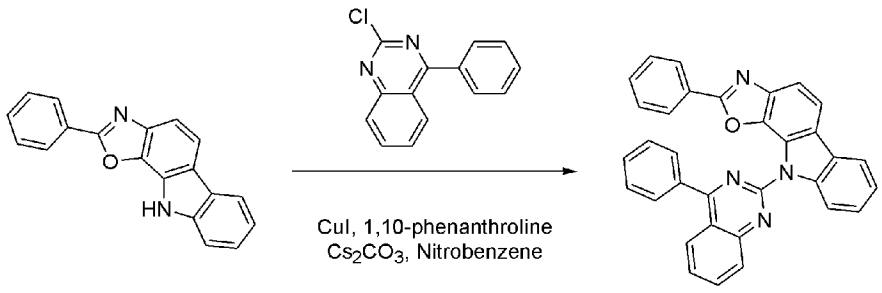
[372] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-8 (3.1 g, 수율: 78 %)을 얻었다.

[373] Mass (이론치: 586.20, 측정치: 586 g/mol)

[374]

[375] [합성예 9] 화합물 A-9의 합성

[376]



A-9

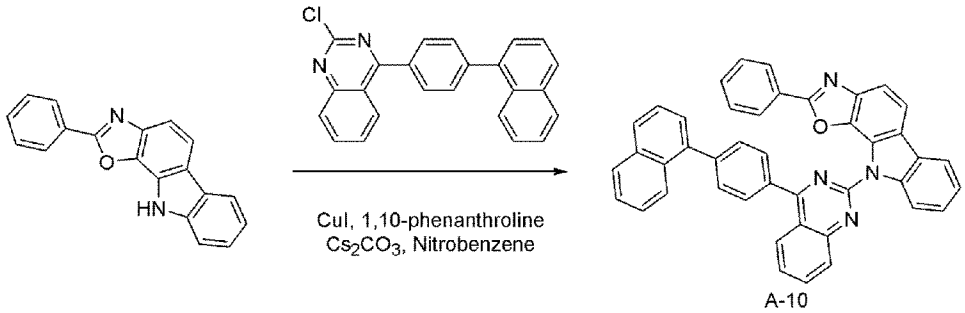
[377] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-9 (2.3 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[378] Mass (이론치: 488.16, 측정치: 488 g/mol)

[379]

[380] [합성예 10] 화합물 A-10의 합성

[381]



A-10

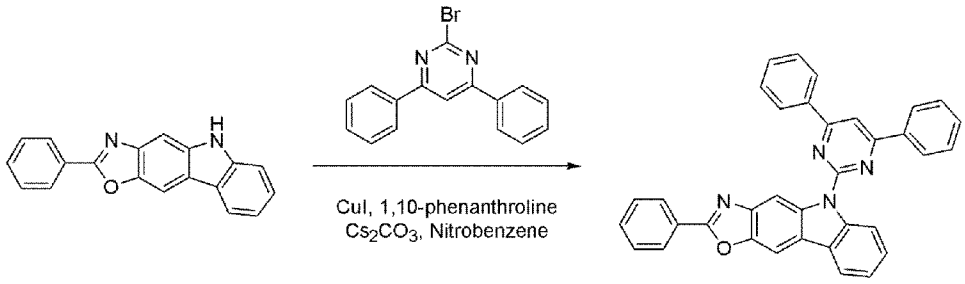
[382] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 A-10 (2.7 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[383] Mass (이론치: 614.21, 측정치: 614 g/mol)

[384]

[385] [합성예 11] 화합물 B-1의 합성

[386]



B-1

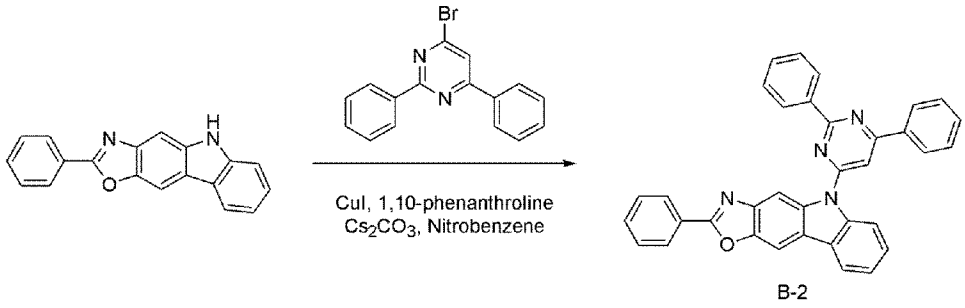
[387] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 BOC-2 (1.9 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 화합물 B-1 (2.5 g, 수율 74 %)을 얻었다.

[388] Mass (이론치: 514.18, 측정치: 514 g/mol)

[389]

[390] [합성예 12] 화합물 B-2의 합성

[391]



B-2

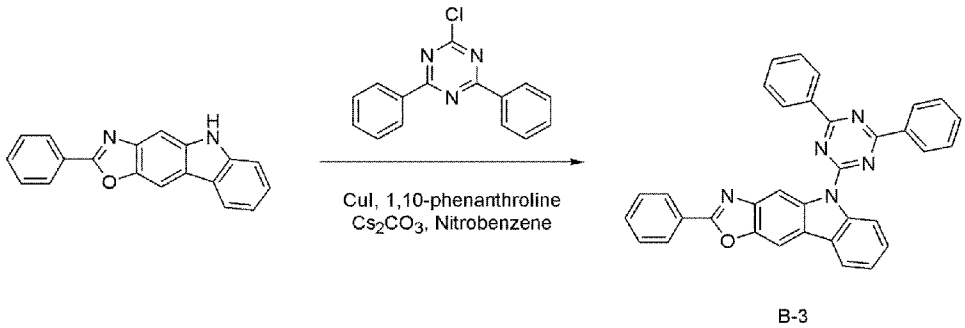
[392] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-2 (2.4 g, 수율: 71%)를 얻었다.

[393] Mass (이론치: 514.18, 측정치: 514 g/mol)

[394]

[395] [합성예 13] 화합물 B-3의 합성

[396]



B-3

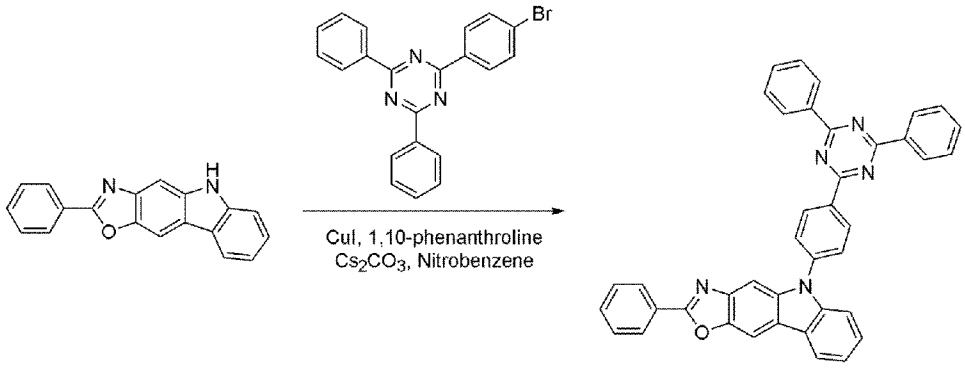
[397] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.2 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-3 (2.6 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[398] Mass (이론치: 515.17, 측정치: 515 g/mol)

[399]

[400] [합성예 14] 화합물 B-4의 합성

[401]



B-4

[402] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

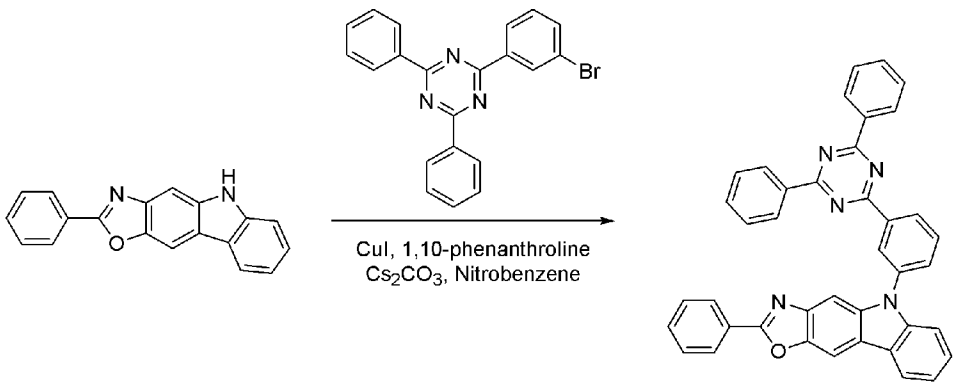
2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-4 (2.5 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

[403] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[404]

[405] [합성예 15] 화합물 B-5의 합성

[406]



B-5

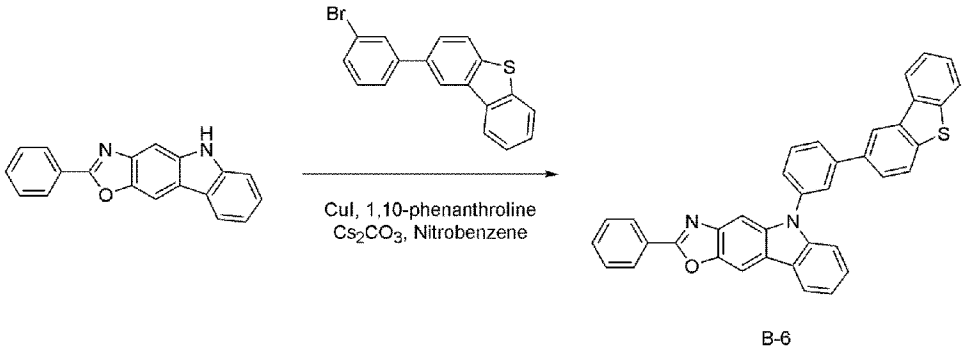
[407] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-5 (2.7 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[408] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[409]

[410] [합성예 16] 화합물 B-6의 합성

[411]



B-6

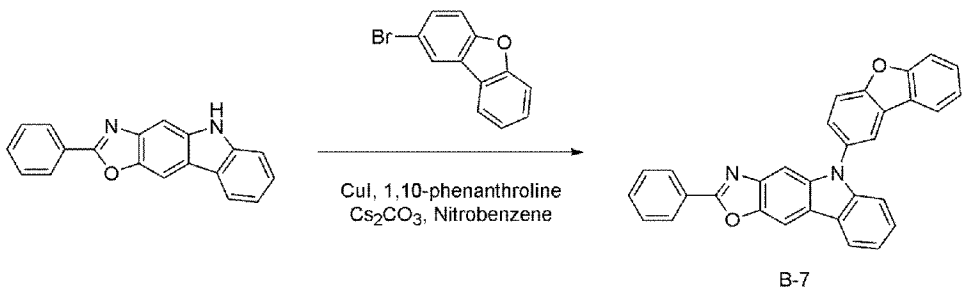
[412] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-6 (2.5 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[413] Mass (이론치: 542.15, 측정치: 542 g/mol)

[414]

[415] [합성예 17] 화합물 B-7의 합성

[416]



B-7

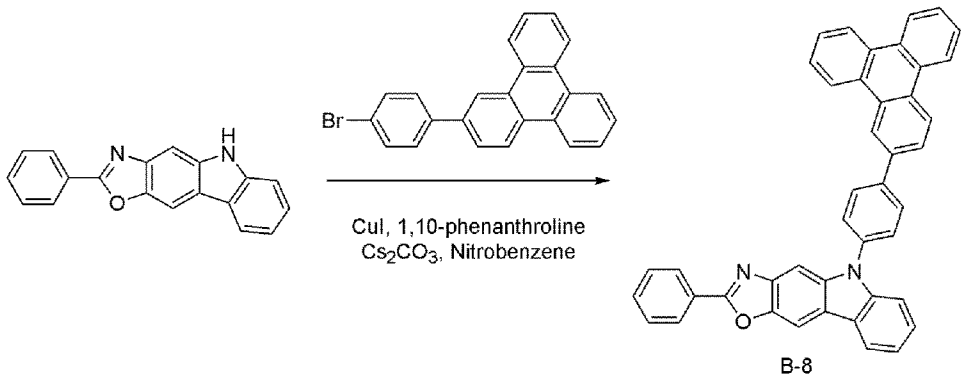
[417] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-7 (2.1 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[418] Mass (이론치: 450.14, 측정치: 450 g/mol)

[419]

[420] [합성예 18] 화합물 B-8의 합성

[421]



B-8

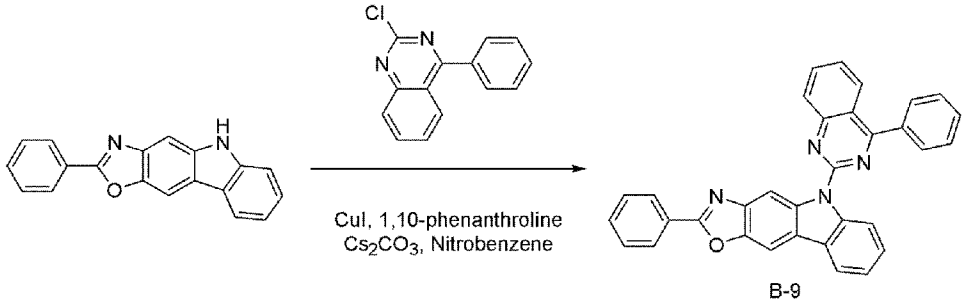
[422] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 B-8 (3.1 g, 수율: 79 %)을 얻었다.

[423] Mass (이론치: 586.20, 측정치: 586 g/mol)

[424]

[425] [합성예 19] 화합물 B-9의 합성

[426]



B-9

[427] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-9 (2.4 g, 수율: 72 %)을

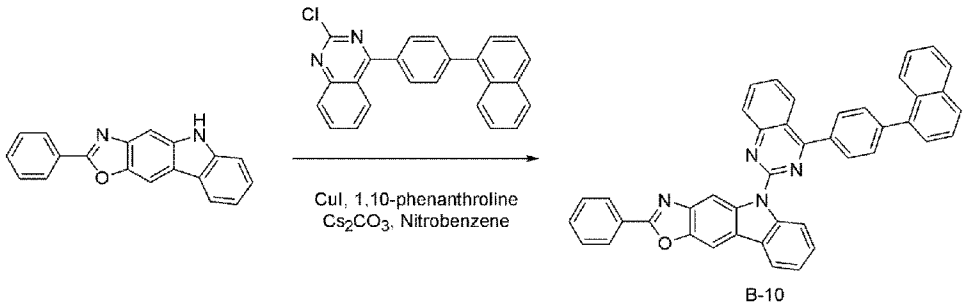
얻었다.

[428] Mass (이론치: 488.16, 측정치: 488 g/mol)

[429]

[430] [합성예 20] 화합물 B-10의 합성

[431]



B-10

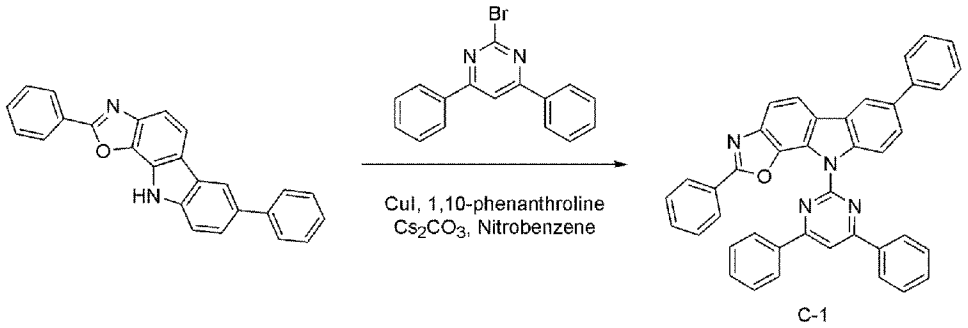
[432] 합성예 11에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 B-10 (2.7 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[433] Mass (이론치: 614.21, 측정치: 614 g/mol)

[434]

[435] [합성예 21] 화합물 C-1의 합성

[436]



C-1

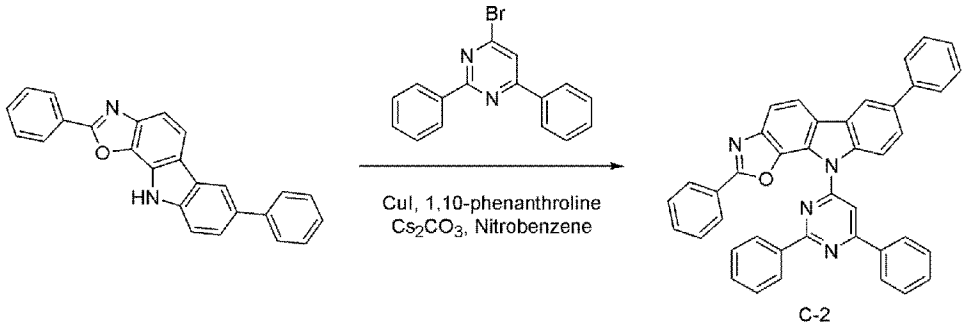
[437] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 화합물 BOC-3 (2.4 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 C-1 (3.0 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[438] Mass (이론치: 590.21, 측정치: 590 g/mol)

[439]

[440] [합성예 22] C-2의 합성

[441]



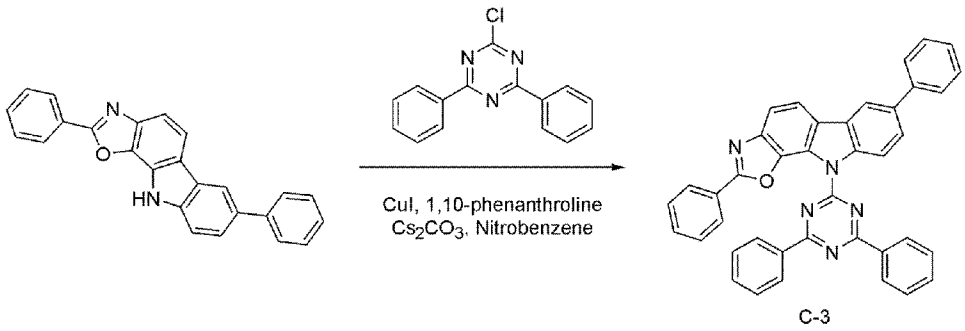
[442] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-2 (2.8 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[443] Mass (이론치: 590.21, 측정치: 590 g/mol)

[444]

[445] [합성예 23] 화합물 C-3의 합성

[446]



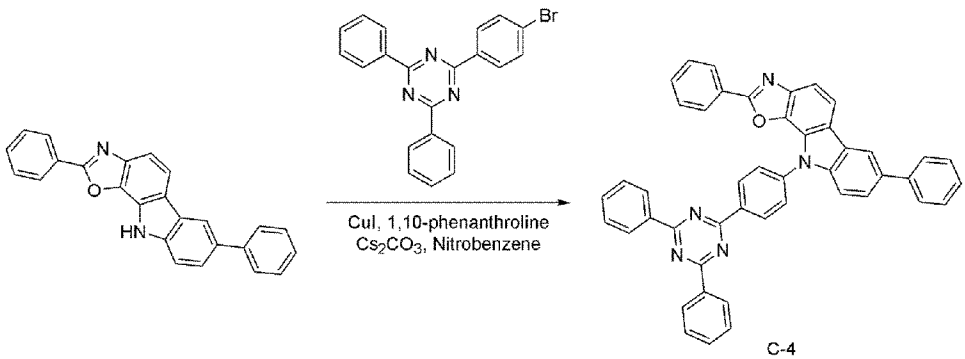
[447] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-3 (2.9 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[448] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[449]

[450] [합성예 24] 화합물 C-4의 합성

[451]



[452] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을

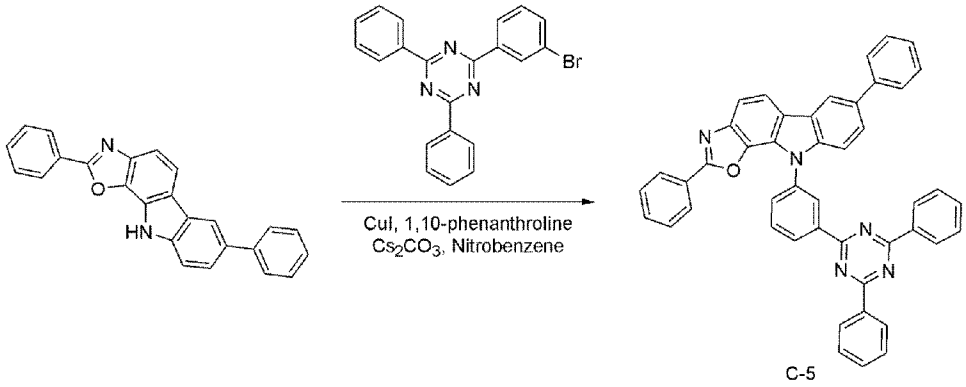
제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-4 (2.8 g, 수율: 63 %)를 얻었다.

[453] Mass (이론치: 667.24, 측정치: 667 g/mol)

[454]

[455] [합성예 25] 화합물 C-5의 합성

[456]



C-5

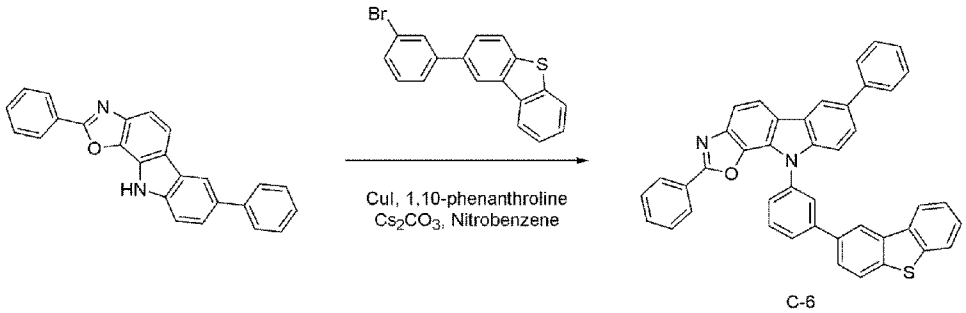
[457] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-5 (3.0 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[458] Mass (이론치: 667.24, 측정치: 667 g/mol)

[459]

[460] [합성예 26] 화합물 C-6의 합성

[461]



C-6

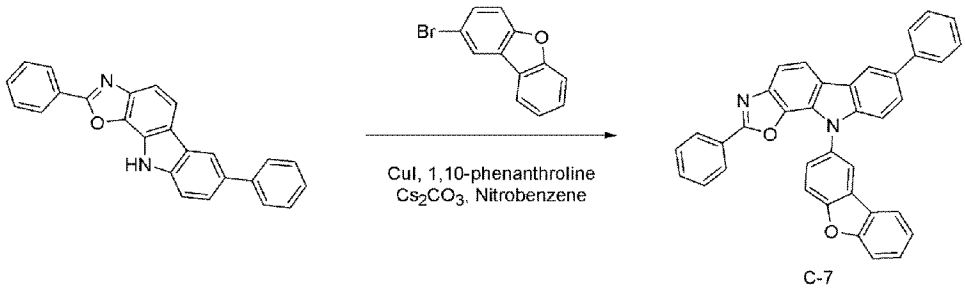
[462] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-6 (2.9 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[463] Mass (이론치: 618.18, 측정치: 618 g/mol)

[464]

[465] [합성예 27] 화합물 C-7의 합성

[466]



C-7

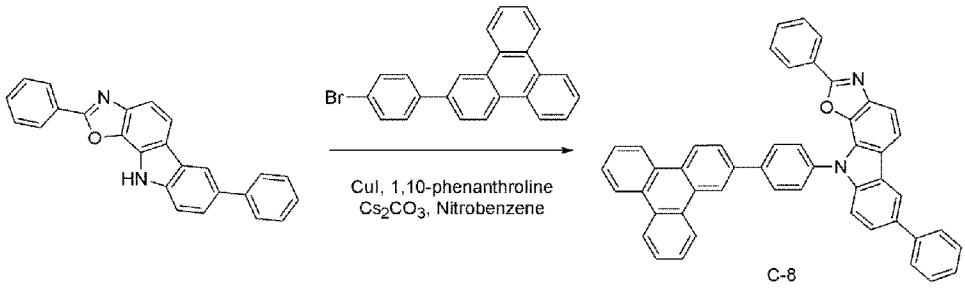
[467] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-7 (2.3 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[468] Mass (이론치: 526.17, 측정치: 526 g/mol)

[469]

[470] [합성예 28] 화합물 C-8의 합성

[471]



C-8

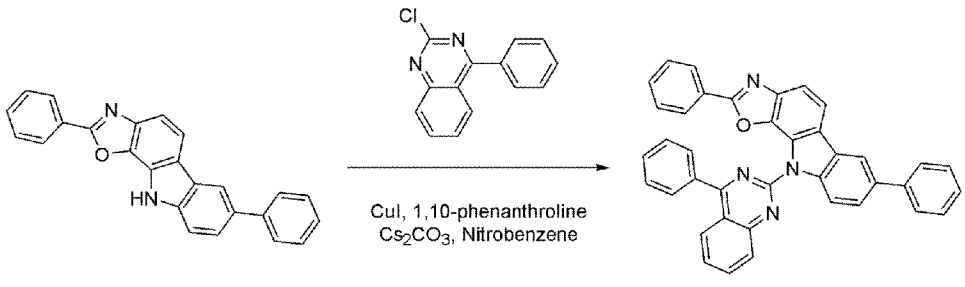
[472] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-8 (3.2 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[473] Mass (이론치: 662.24, 측정치: 662 g/mol)

[474]

[475] [합성예 29] 화합물 C-9의 합성

[476]



C-9

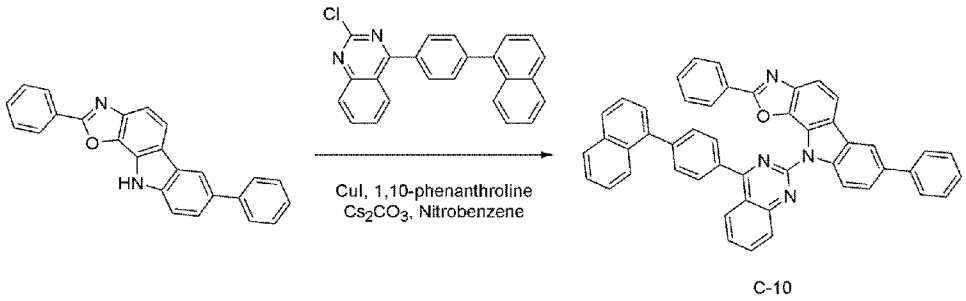
[477] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-9 (2.7 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[478] Mass (이론치: 564.20, 측정치: 564 g/mol)

[479]

[480] [합성예 30] 화합물 C-10의 합성

[481]



C-10

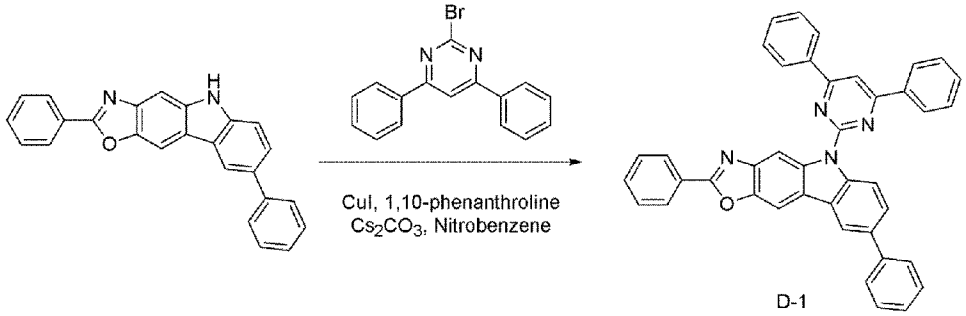
[482] 합성예 21에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C-10 (3.2 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[483] Mass (이론치: 690.24, 측정치: 690 g/mol)

[484]

[485] [합성예 31] 화합물 D-1의 합성

[486]



D-1

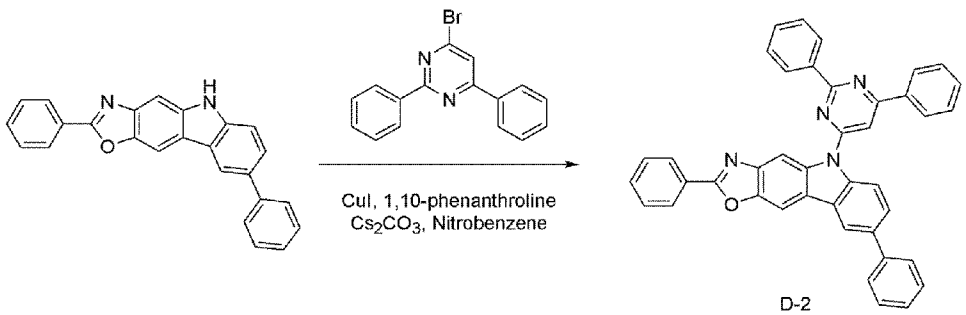
[487] 질소 기류 하에서 준비예 3에서 합성된 화합물 BOC-4 (2.4 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 D-1 (2.6 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[488] Mass (이론치: 590.21, 측정치: 590 g/mol)

[489]

[490] [합성예 32] 화합물 D-2의 합성

[491]



D-2

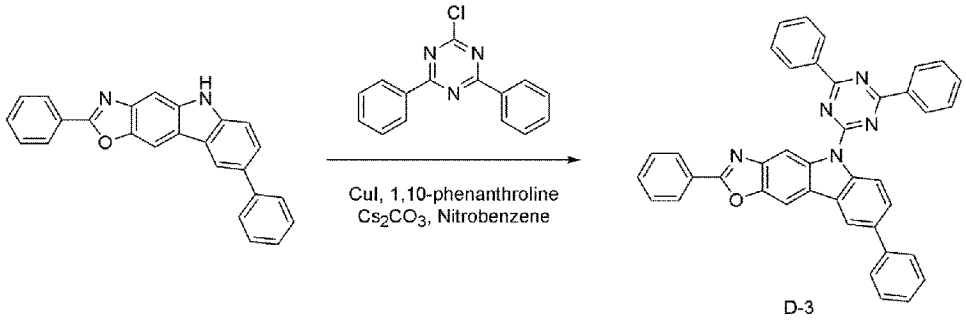
[492] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-2 (2.8 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[493] Mass (이론치: 590.21, 측정치: 590 g/mol)

[494]

[495] [합성예 33] 화합물 D-3의 합성

[496]



D-3

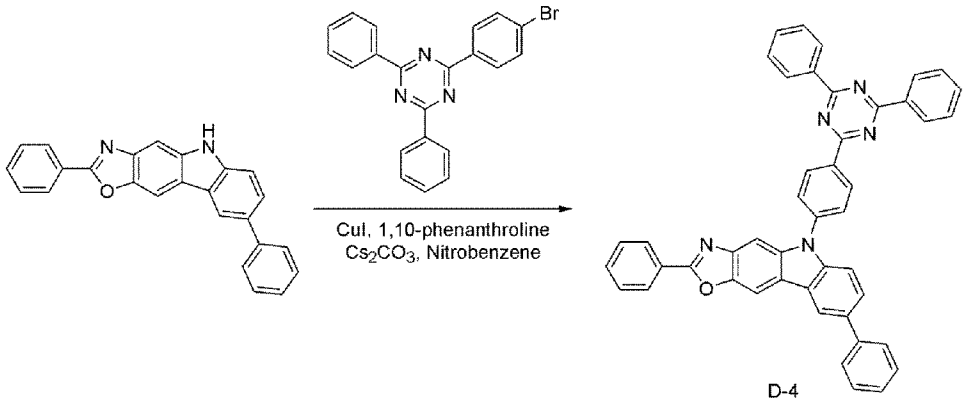
[497] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-3 (2.9 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[498] Mass (이론치: 591.21, 측정치: 591 g/mol)

[499]

[500] [합성예 34] 화합물 D-4의 합성

[501]



D-4

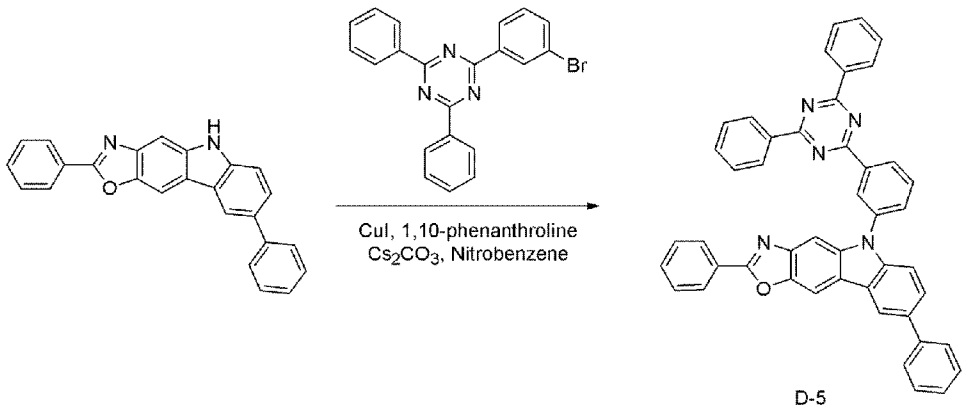
[502] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-4 (3.5 g, 수율: 79 %)를 얻었다.

[503] Mass (이론치: 667.24, 측정치: 667 g/mol)

[504]

[505] [합성예 35] 화합물 D-5의 합성

[506]



D-5

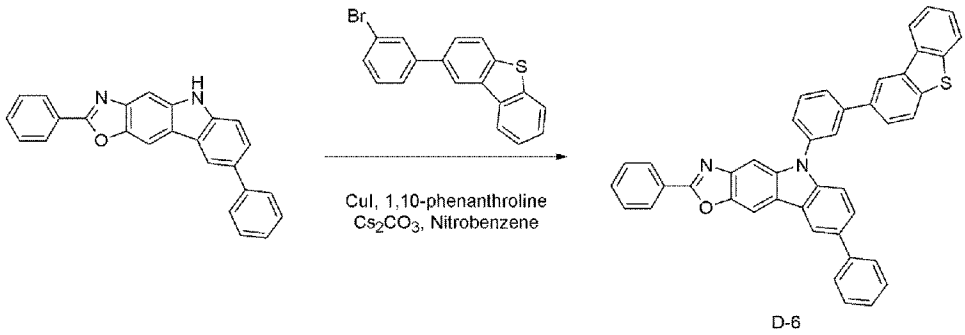
[507] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-5 (3.4 g, 수율 75 %)를 얻었다.

[508] Mass (이론치: 667.24, 측정치: 667 g/mol)

[509]

[510] [합성예 36] 화합물 D-6의 합성

[511]



D-6

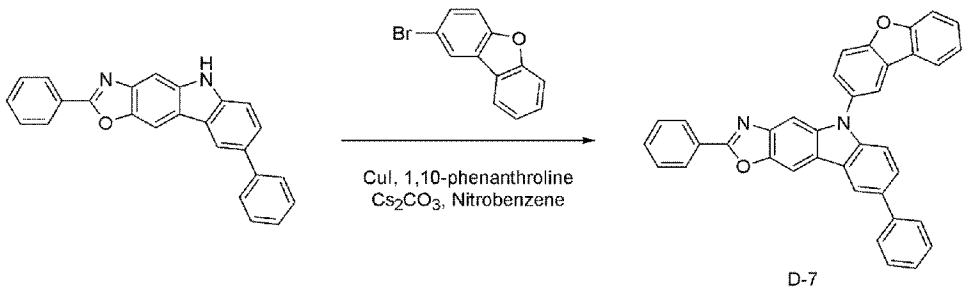
[512] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-6 (2.9 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[513] Mass (이론치: 618.18, 측정치: 618 g/mol)

[514]

[515] [합성예 37] 화합물 D-7의 합성

[516]



D-7

[517] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

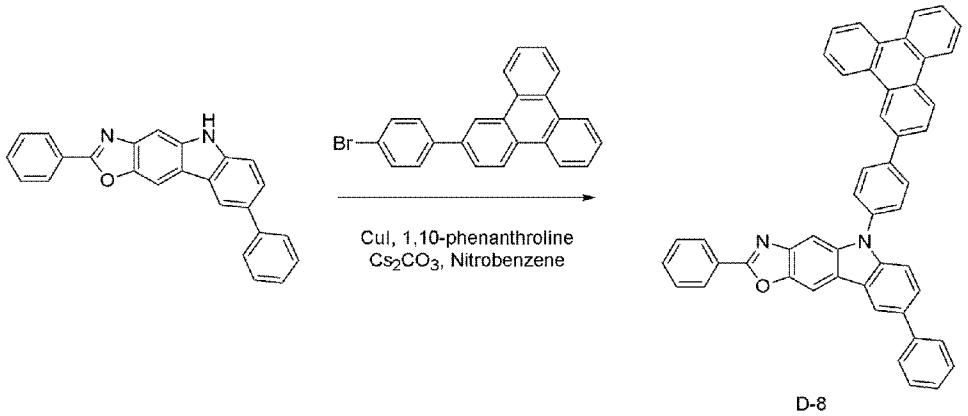
2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-7 (2.5 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[518] Mass (이론치: 526.17, 측정치: 526 g/mol)

[519]

[520] [합성예 38] 화합물 D-8의 합성

[521]



D-8

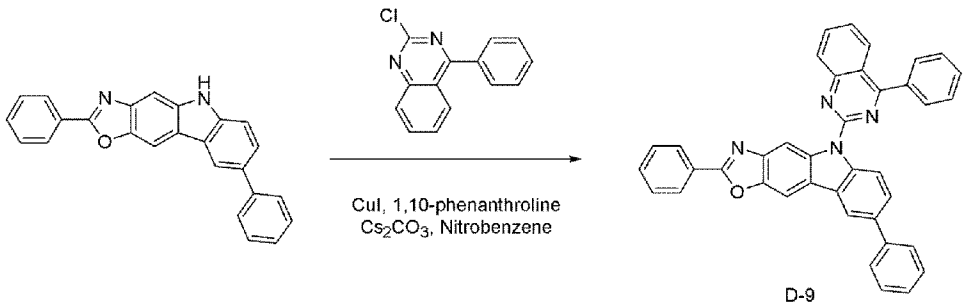
[522] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-8 (3.1 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[523] Mass (이론치: 662.24, 측정치: 662 g/mol)

[524]

[525] [합성예 39] 화합물 D-9의 합성

[526]



D-9

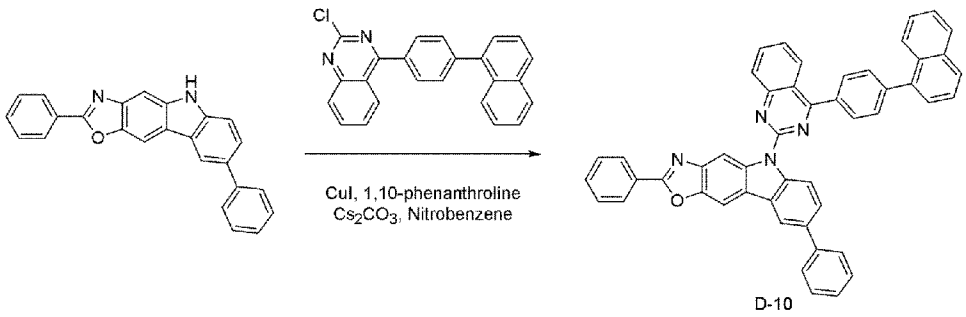
[527] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-9 (2.8 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[528] Mass (이론치: 564.20, 측정치: 564 g/mol)

[529]

[530] [합성예 40] 화합물 D-10의 합성

[531]



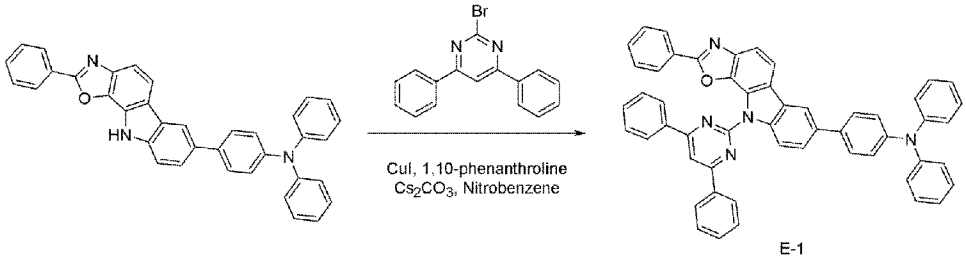
[532] 합성예 31에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 D-10 (3.2 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[533] Mass (이론치: 690.24, 측정치: 690 g/mol)

[534]

[535] [합성예 41] 화합물 E-1의 합성

[536]



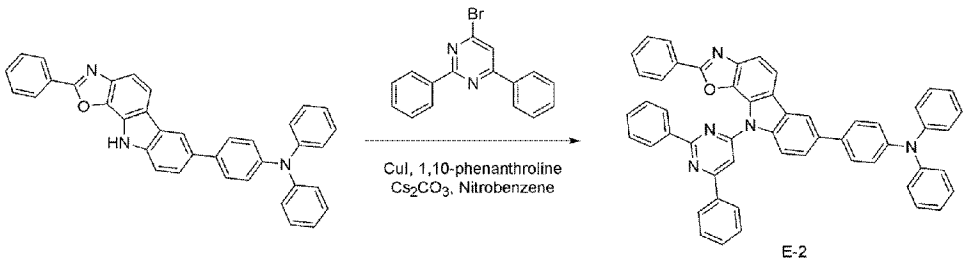
[537] 질소 기류 하에서 준비예 4에서 합성된 화합물 BOC-5 (3.53 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 E-1 (3.6 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[538] Mass (이론치: 757.28 g/mol, 측정치: 757 g/mol)

[539]

[540] [합성예 42] 화합물 E-2의 합성

[541]



[542] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-2 (3.3 g, 수율: 65 %)를

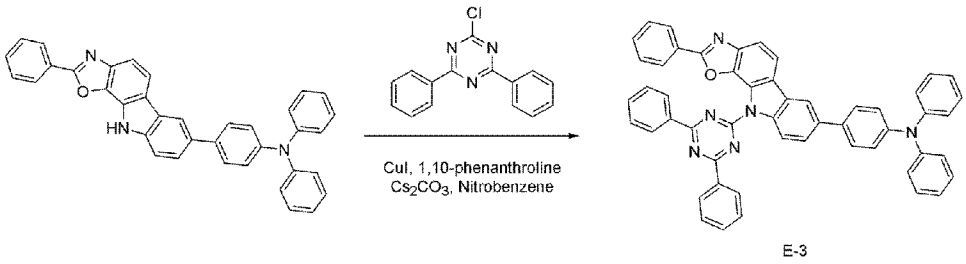
얻었다.

[543] Mass (이론치: 757.28 g/mol, 측정치: 757 g/mol)

[544]

[545] [합성예 43] 화합물 E-3의 합성

[546]



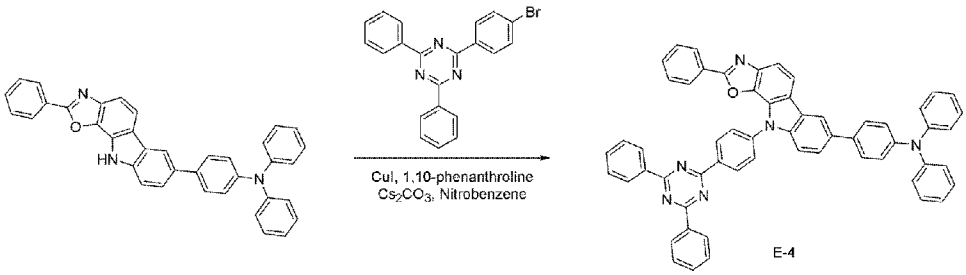
[547] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-3 (3.5 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[548] Mass (이론치: 758.28 g/mol, 측정치: 758 g/mol)

[549]

[550] [합성예 44] 화합물 E-4의 합성

[551]



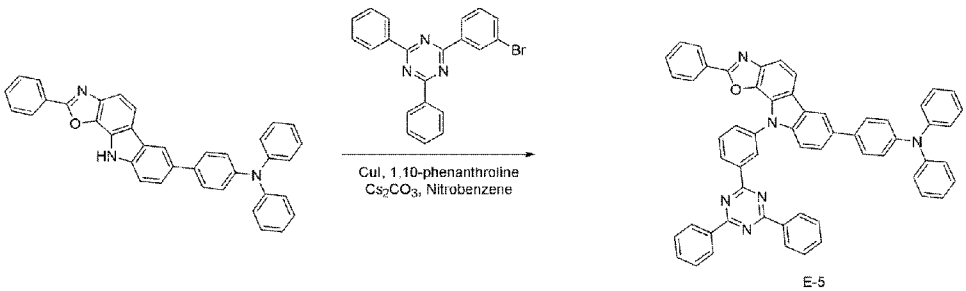
[552] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-4 (4.0 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[553] Mass (이론치: 834.31 g/mol, 측정치: 834 g/mol)

[554]

[555] [합성예 45] 화합물 E-5의 합성

[556]



[557] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을

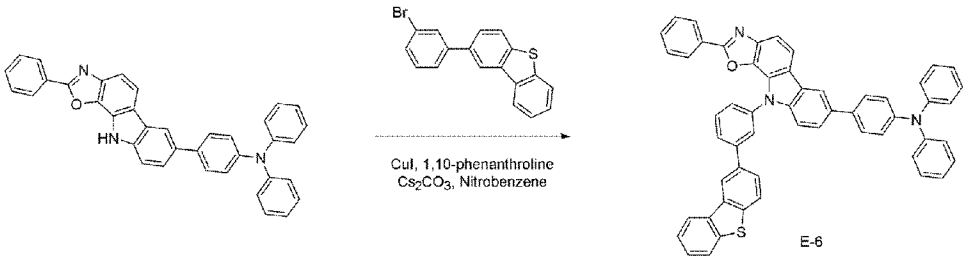
제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-5 (4.4 g, 수율: 78 %)를 얻었다.

[558] Mass (이론치: 834.31 g/mol, 측정치: 834 g/mol)

[559]

[560] [합성예 46] 화합물 E-6의 합성

[561]



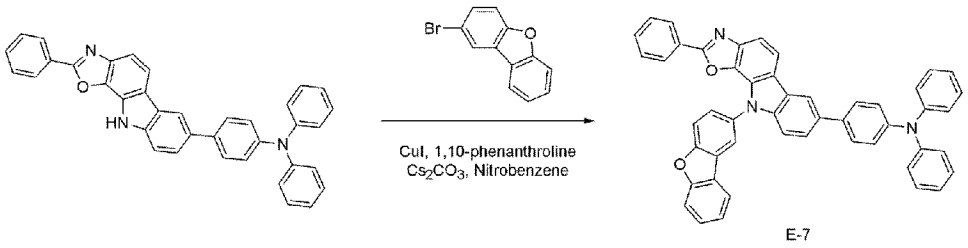
[562] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-6 (3.6 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[563] Mass (이론치: 785.25 g/mol, 측정치: 785 g/mol)

[564]

[565] [합성예 47] 화합물 E-7의 합성

[566]



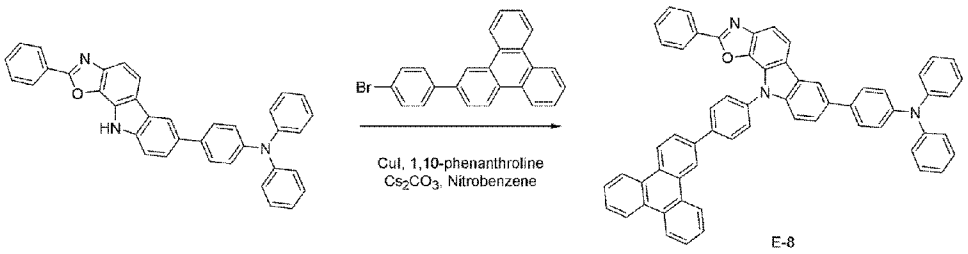
[567] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-7 (3.5 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[568] Mass (이론치: 693.24 g/mol, 측정치: 693 g/mol)

[569]

[570] [합성예 48] 화합물 E-8의 합성

[571]



[572] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-8 (4.4 g, 수율: 80 %)을

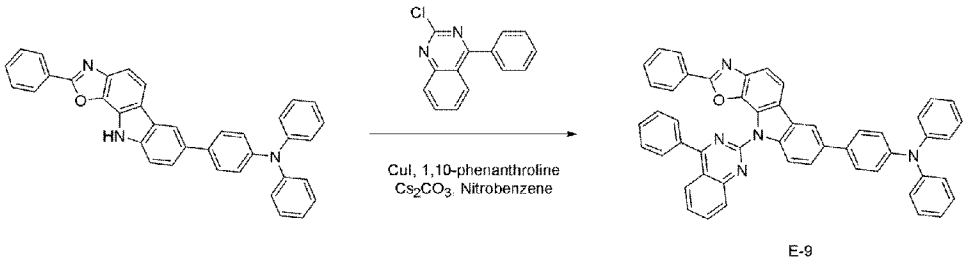
얻었다.

[573] Mass (이론치: 829.31 g/mol, 측정치: 829 g/mol)

[574]

[575] [합성예 49] 화합물 E-9의 합성

[576]



E-9

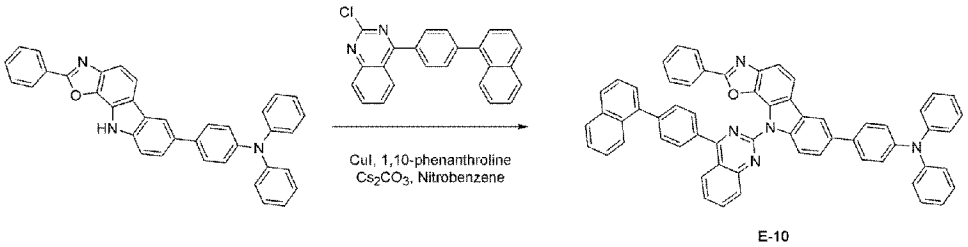
[577] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.93 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-9 (3.8 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[578] Mass (이론치: 731.27 g/mol, 측정치: 731 g/mol)

[579]

[580] [합성예 50] 화합물 E-10의 합성

[581]



E-10

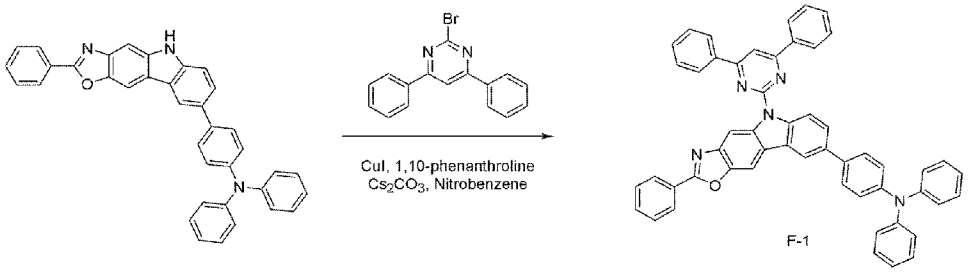
[582] 합성예 41에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 41과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 E-10 (4.0 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[583] Mass (이론치: 857.32 g/mol, 측정치: 857 g/mol)

[584]

[585] [합성예 51] 화합물 F-1의 합성

[586]



F-1

[587] 질소 기류 하에서 준비예 5에서 합성된 화합물 BOC-6 (3.53 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene

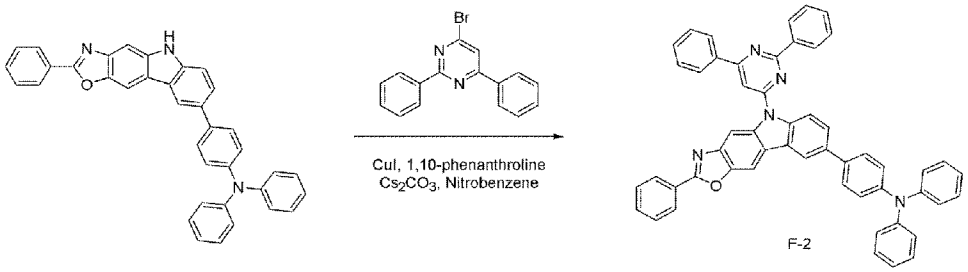
(25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 F-1 (3.6 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[588] Mass (이론치: 757.28 g/mol, 측정치: 757 g/mol)

[589]

[590] [합성예 52] 화합물 F-2의 합성

[591]



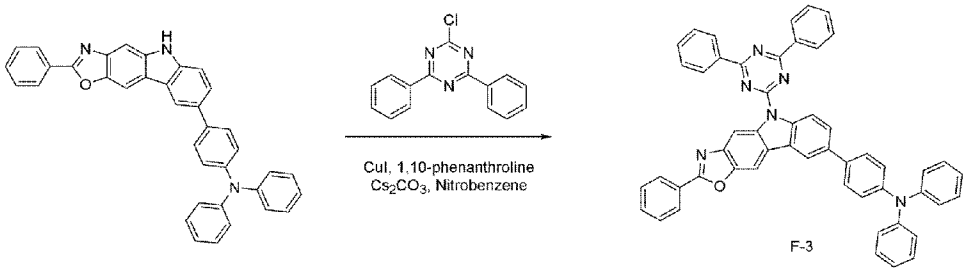
[592] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-2 (3.3 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[593] Mass (이론치: 757.28 g/mol, 측정치: 757 g/mol)

[594]

[595] [합성예 53] 화합물 F-3의 합성

[596]



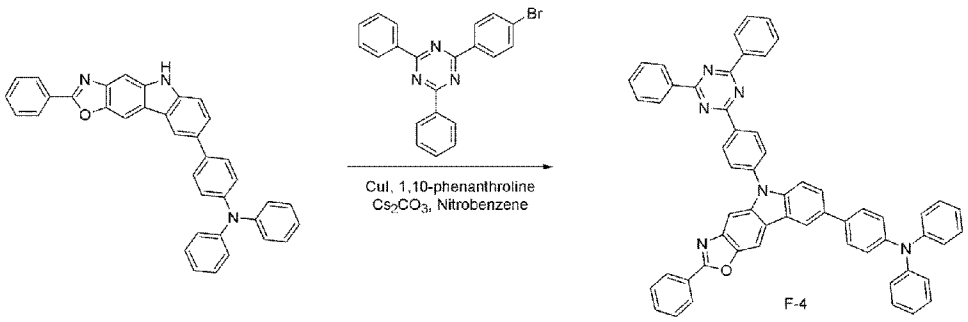
[597] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-3 (3.5 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[598] Mass (이론치: 758.28 g/mol, 측정치: 758 g/mol)

[599]

[600] [합성예 54] 화합물 F-4의 합성

[601]



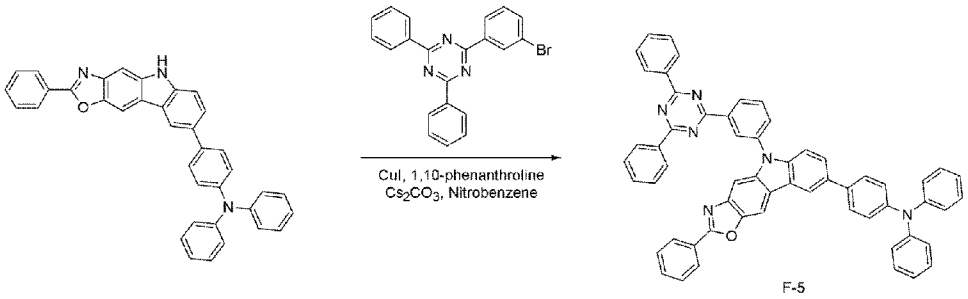
[602] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-4 (4.0 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[603] Mass (이론치: 834.31 g/mol, 측정치: 834 g/mol)

[604]

[605] [합성예 55] 화합물 F-5의 합성

[606]



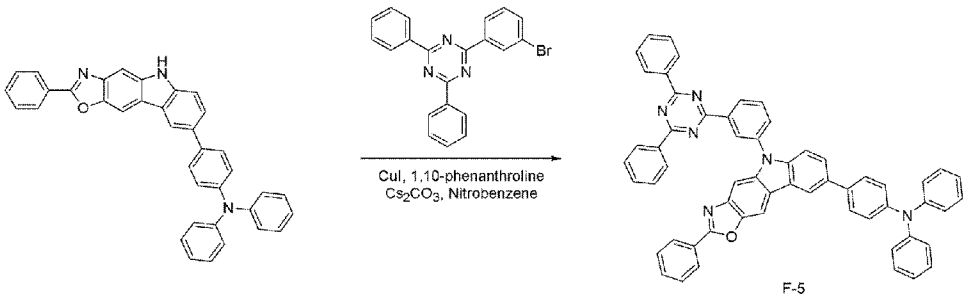
[607] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-5 (4.4 g, 수율: 78 %)를 얻었다.

[608] Mass (이론치: 834.31 g/mol, 측정치: 834 g/mol)

[609]

[610] [합성예 56] 화합물 F-6의 합성

[611]



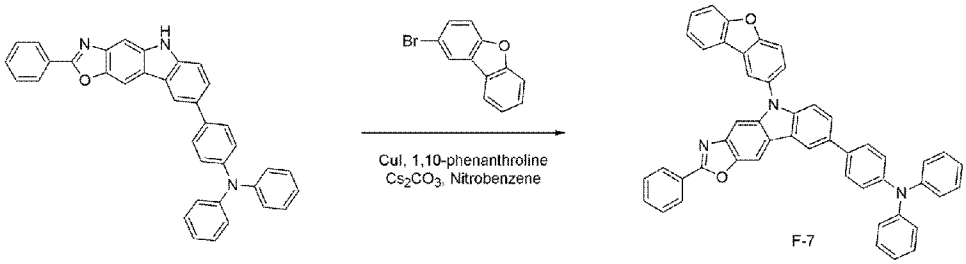
[612] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-6 (3.6 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[613] Mass (이론치: 785.25 g/mol, 측정치: 785 g/mol)

[614]

[615] [합성예 57] 화합물 F-7의 합성

[616]



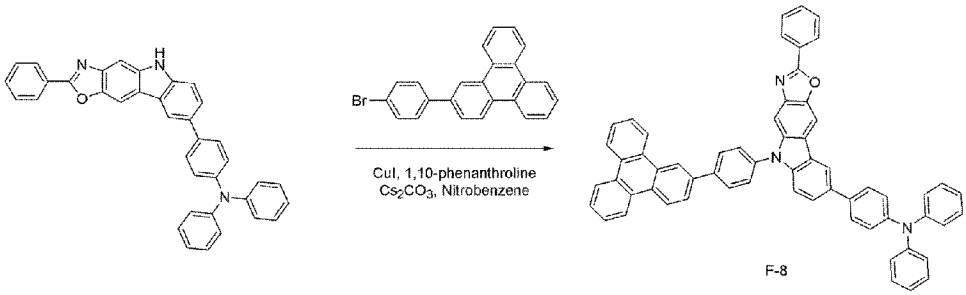
[617] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-7 (3.5 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[618] Mass (이론치: 693.24 g/mol, 측정치: 693 g/mol)

[619]

[620] [합성예 58] 화합물 F-8의 합성

[621]



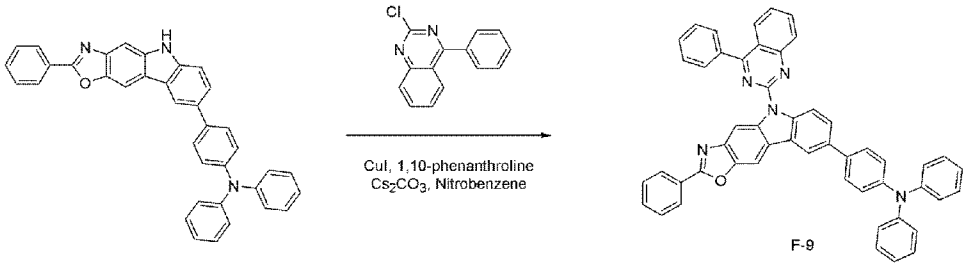
[622] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-8 (4.4 g, 수율: 80 %)을 얻었다.

[623] Mass (이론치: 829.31 g/mol, 측정치: 829 g/mol)

[624]

[625] [합성예 59] 화합물 F-9의 합성

[626]



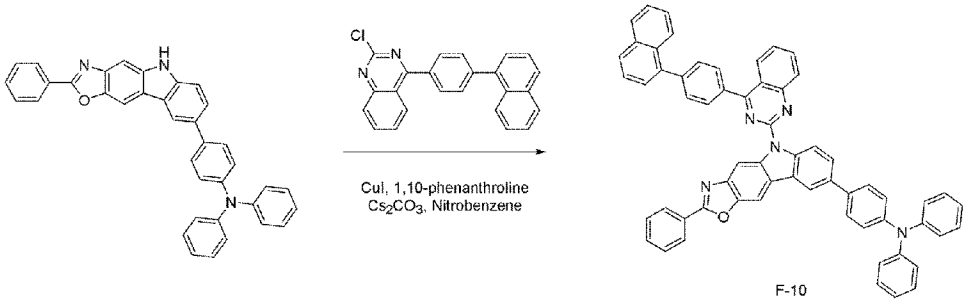
[627] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-9 (3.8 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[628] Mass (이론치: 731.27 g/mol, 측정치: 731 g/mol)

[629]

[630] [합성예 60] 화합물 F-10의 합성

[631]



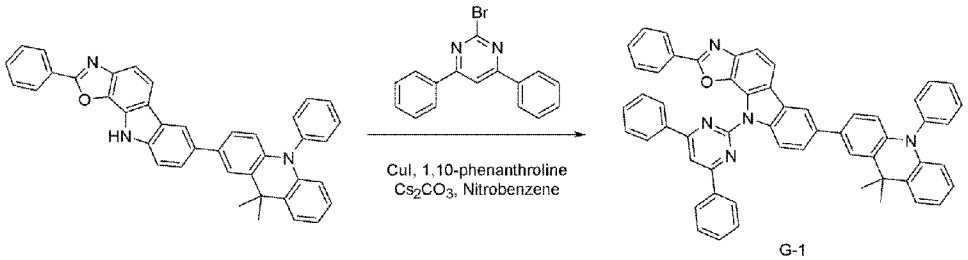
[632] 합성예 51에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 51과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 F-10 (3.9 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[633] Mass (이론치: 857.32 g/mol, 측정치: 857 g/mol)

[634]

[635] [합성예 61] 화합물 G-1의 합성

[636]



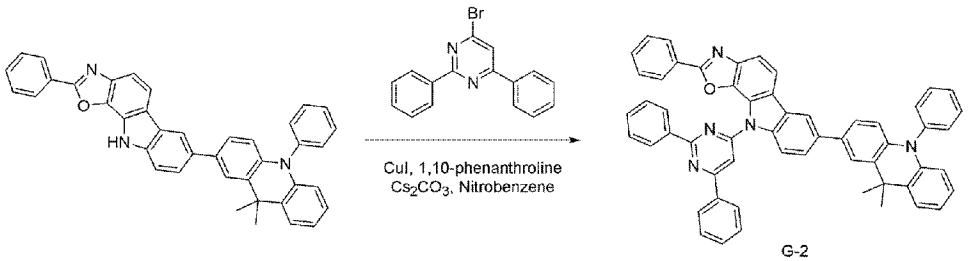
[637] 질소 기류 하에서 준비예 6에서 합성된 화합물 BOC-7 (3.8 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 G-1 (3.8 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[638] Mass (이론치: 797.32 g/mol, 측정치: 797 g/mol)

[639]

[640] [합성예 62] 화합물 G-2의 합성

[641]



[642] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

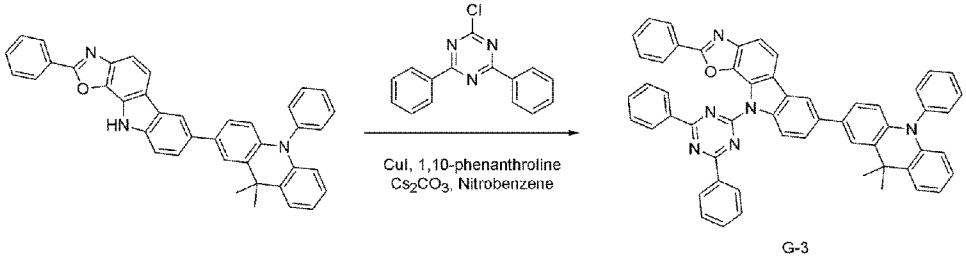
4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-2 (3.6 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[643] Mass (이론치: 797.32 g/mol, 측정치: 797 g/mol)

[644]

[645] [합성예 63] 화합물 G-3의 합성

[646]



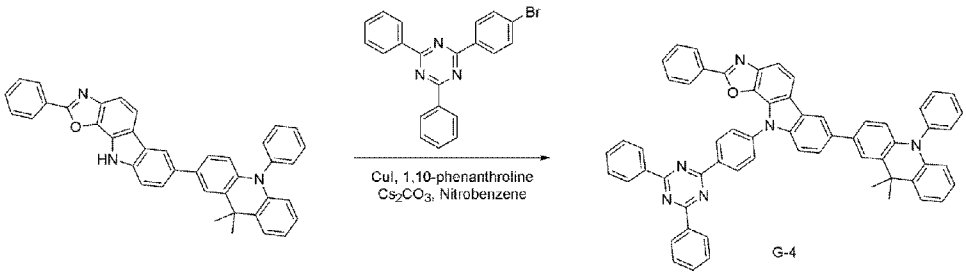
[647] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-3 (4.1 g, 수율: 76 %)을 얻었다.

[648] Mass (이론치: 798.31 g/mol, 측정치: 798 g/mol)

[649]

[650] [합성예 64] 화합물 G-4의 합성

[651]



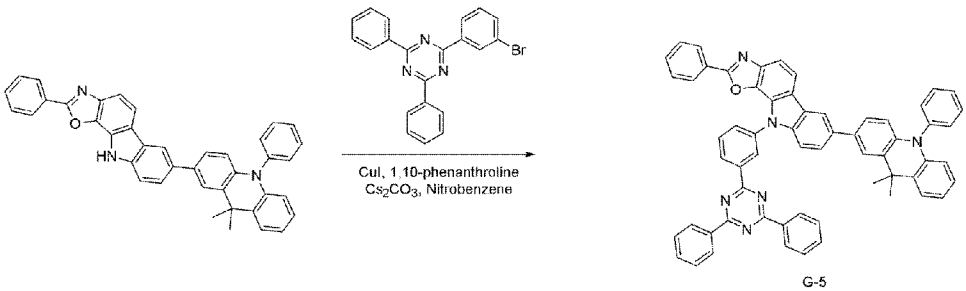
[652] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-4 (4.5 g, 수율: 71 %)를 얻었다.

[653] Mass (이론치: 874.34 g/mol, 측정치: 874 g/mol)

[654]

[655] [합성예 65] 화합물 G-5의 합성

[656]



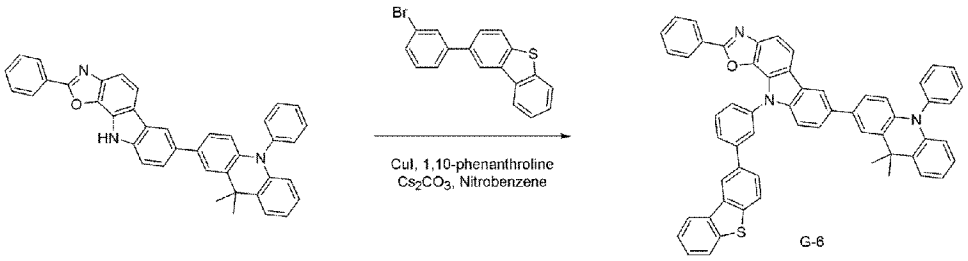
[657] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-5 (4.2 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[658] Mass (이론치: 874.34 g/mol, 측정치: 874 g/mol)

[659]

[660] [합성예 66] 화합물 G-6의 합성

[661]



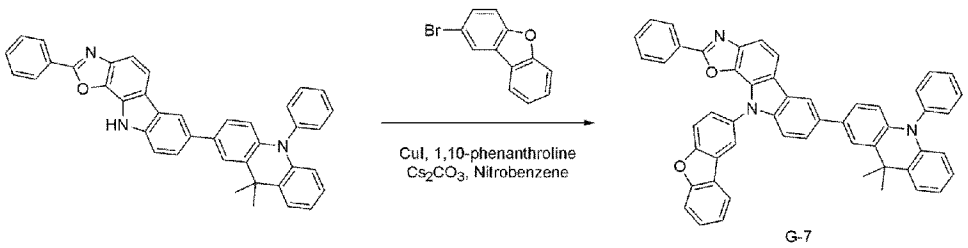
[662] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-6 (3.9 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[663] Mass (이론치: 826.01 g/mol, 측정치: 826 g/mol)

[664]

[665] [합성예 67] 화합물 G-7의 합성

[666]



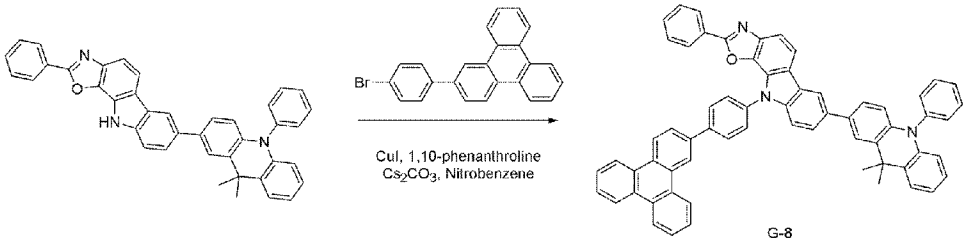
[667] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-7 (3.6 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[668] Mass (이론치: 733.27 g/mol, 측정치: 733 g/mol)

[669]

[670] [합성예 68] 화합물 G-8의 합성

[671]



[672] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

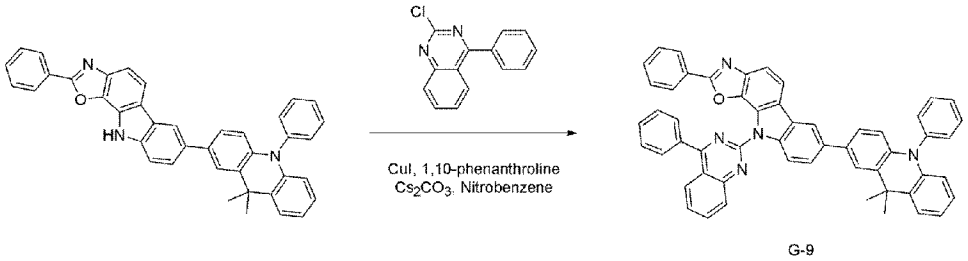
2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-8 (4.4 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[673] Mass (이론치: 869.34 g/mol, 측정치: 869 g/mol)

[674]

[675] [합성예 69] 화합물 G-9의 합성

[676]



G-9

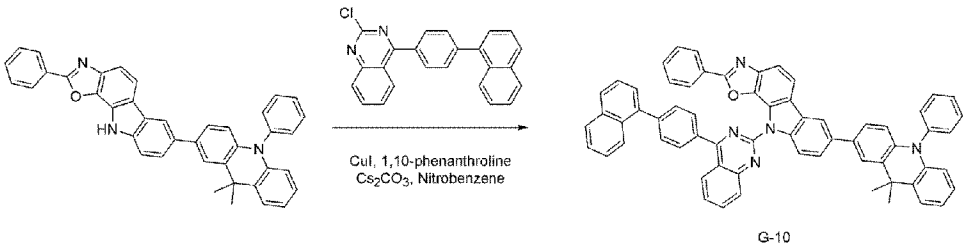
[677] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-9 (4.1 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[678] Mass (이론치: 771.30 g/mol, 측정치: 771 g/mol)

[679]

[680] [합성예 70] 화합물 G-10의 합성

[681]



G-10

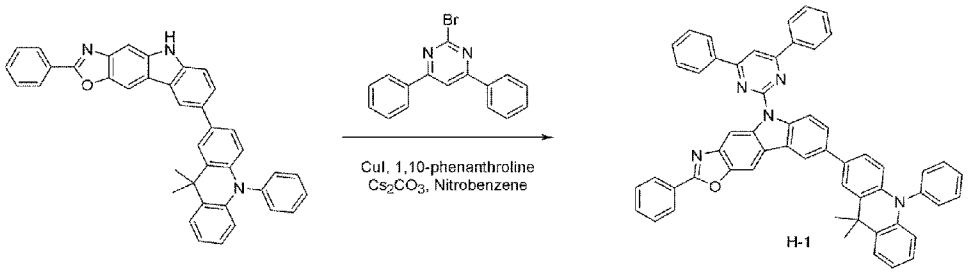
[682] 합성예 61에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 G-10 (4.3 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[683] Mass (이론치: 897.35 g/mol, 측정치: 897 g/mol)

[684]

[685] [합성예 71] 화합물 H-1의 합성

[686]



H-1

[687] 질소 기류 하에서 준비예 7에서 합성된 화합물 BOC-8 (3.8 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol),

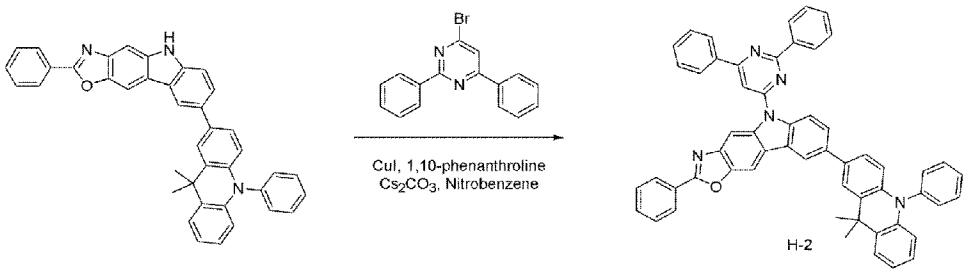
1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 H-1 (3.6 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[688] Mass (이론치: 797.32 g/mol, 측정치: 797 g/mol)

[689]

[690] [합성예 72] 화합물 H-2의 합성

[691]



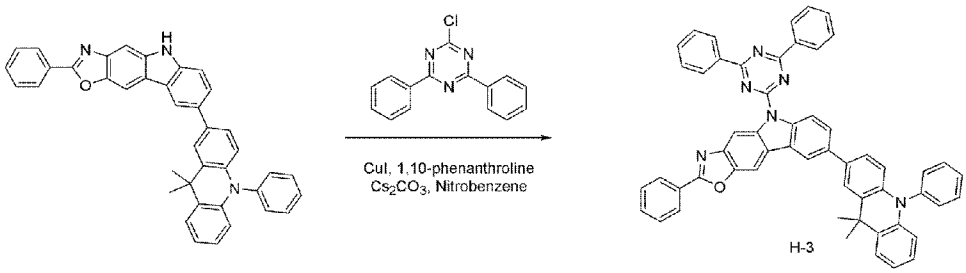
[692] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-2 (3.9 g, 수율: 73 %)를 얻었다.

[693] Mass (이론치: 797.32 g/mol, 측정치: 797 g/mol)

[694]

[695] [합성예 73] 화합물 H-3의 합성

[696]



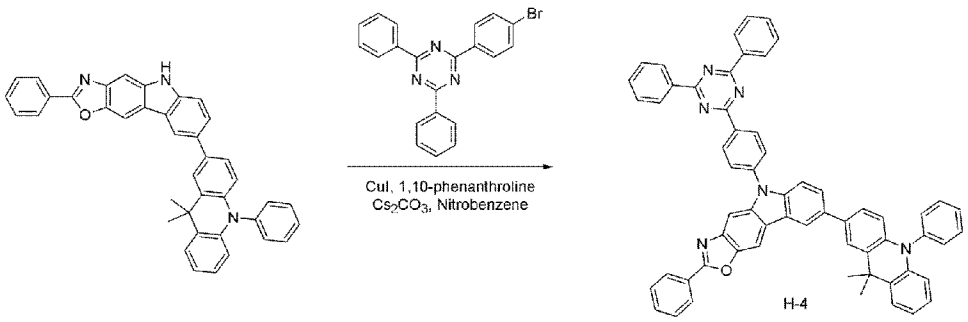
[697] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-3 (3.8 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[698] Mass (이론치: 798.31 g/mol, 측정치: 798 g/mol)

[699]

[700] [합성예 74] 화합물 H-4의 합성

[701]



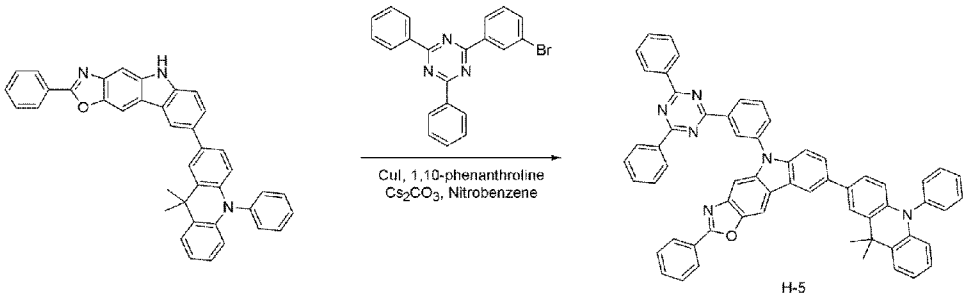
[702] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-4 (3.8 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[703] Mass (이론치: 874.34 g/mol, 측정치: 874 g/mol)

[704]

[705] [합성예 75] 화합물 H-5의 합성

[706]



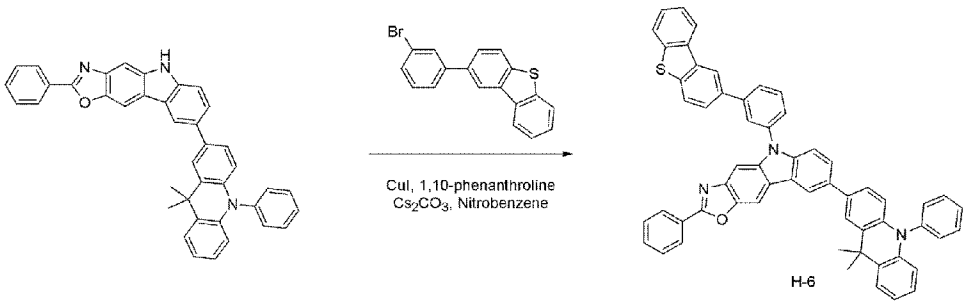
[707] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-5 (4.1 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[708] Mass (이론치: 874.34 g/mol, 측정치: 874 g/mol)

[709]

[710] [합성예 76] 화합물 H-6의 합성

[711]



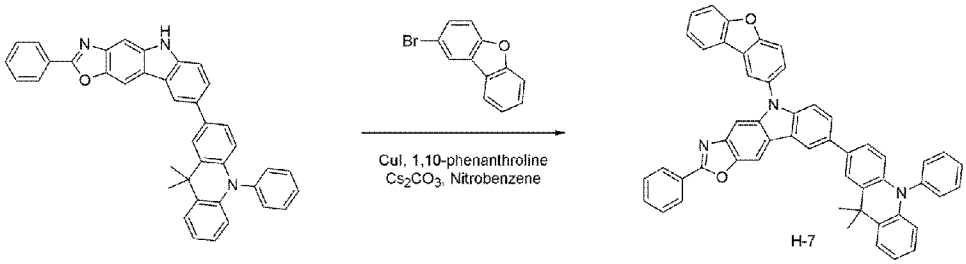
[712] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-6 (3.5 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[713] Mass (이론치: 826.01 g/mol, 측정치: 826 g/mol)

[714]

[715] [합성예 77] 화합물 H-7의 합성

[716]



[717] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 H-7 (3.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

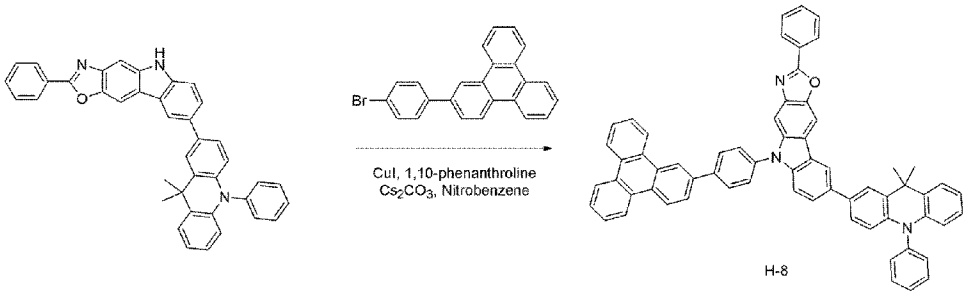
[718]

[719] Mass (이론치: 733.27 g/mol, 측정치: 733 g/mol)

[720]

[721] [합성예 78] 화합물 H-8의 합성

[722]



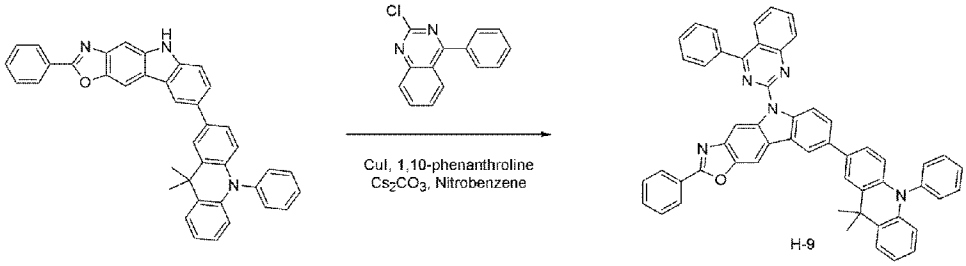
[723] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-8 (4.0 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[724] Mass (이론치: 869.34 g/mol, 측정치: 869 g/mol)

[725]

[726] [합성예 79] 화합물 H-9의 합성

[727]



[728] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예

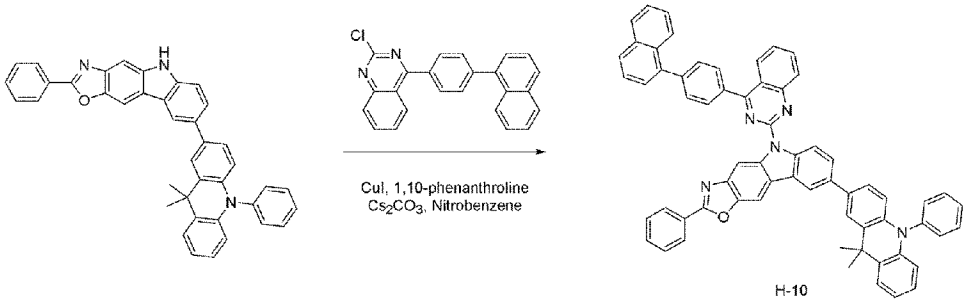
71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-9 (3.8 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[729] Mass (이론치: 771.30 g/mol, 측정치: 771 g/mol)

[730]

[731] [합성예 80] 화합물 H-10의 합성

[732]



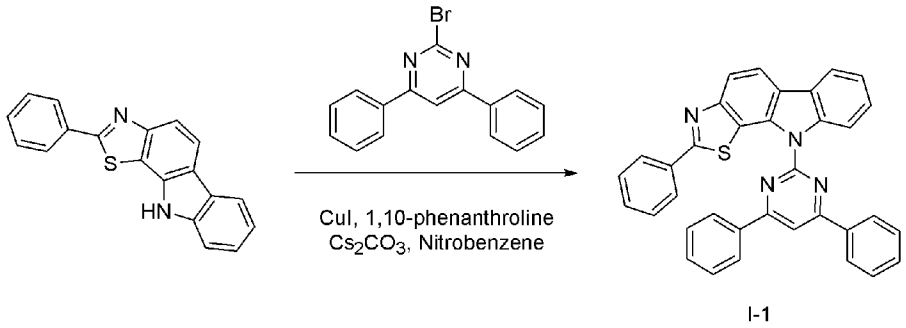
[733] 합성예 71에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 71과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 H-10 (4.9 g, 수율: 81 %)을 얻었다.

[734] Mass (이론치: 897.35 g/mol, 측정치: 897 g/mol)

[735]

[736] [합성예 81] 화합물 I-1의 합성

[737]



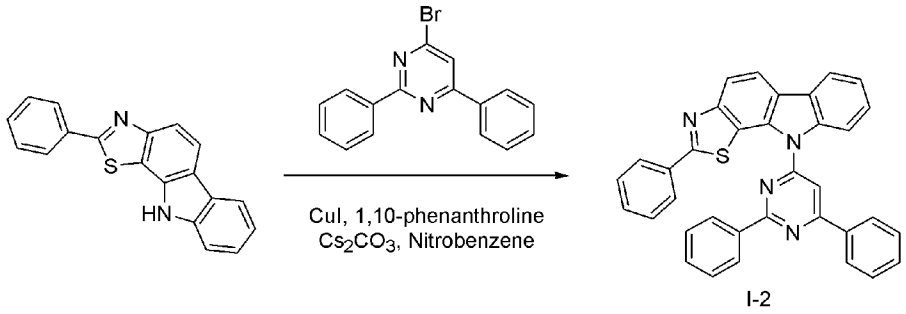
[738] 질소 기류 하에서 준비예 8에서 합성된 화합물 BTC-1 (2.0 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 I-1 (2.5 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[739] Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[740]

[741] [합성예 82] 화합물 I-2의 합성

[742]



[743] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-2 (2.3 g, 수율: 64 %)를 얻었다.

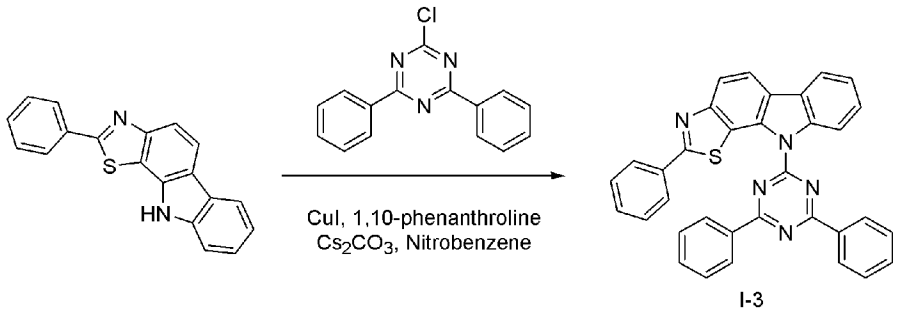
[744] Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[745]

[746]

[747] [합성예 83] 화합물 I-3의 합성

[748]



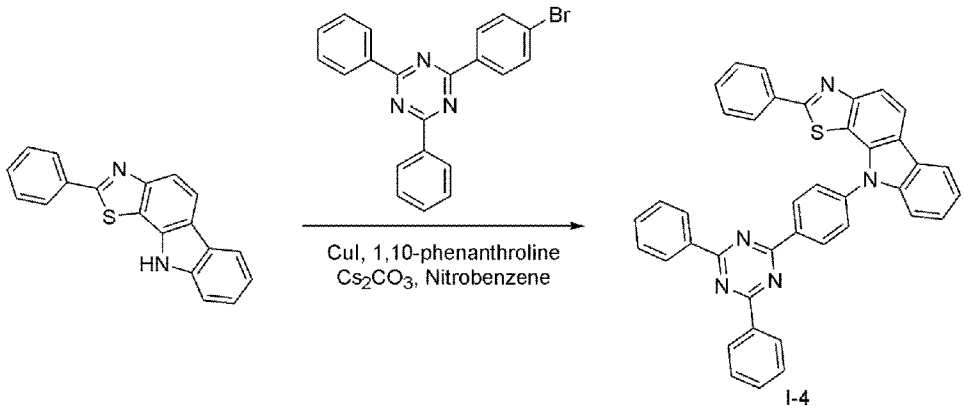
[749] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-3 (2.6 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[750] Mass (이론치: 531.15 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[751]

[752] [합성예 84] 화합물 I-4의 합성

[753]



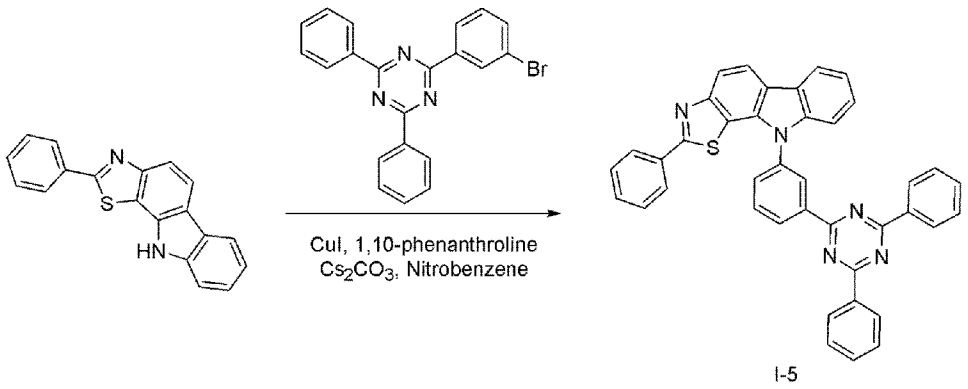
[754] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-4 (2.7 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[755] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[756]

[757] [합성예 85] 화합물 I-5의 합성

[758]



I-5

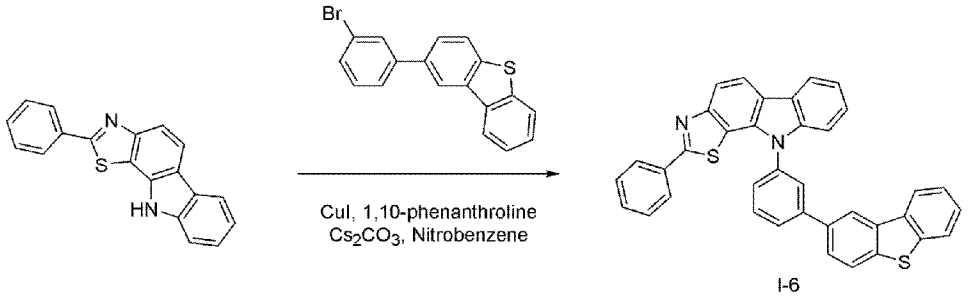
[759] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-5 (2.8 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[760] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[761]

[762] [합성예 86] 화합물 I-6의 합성

[763]



I-6

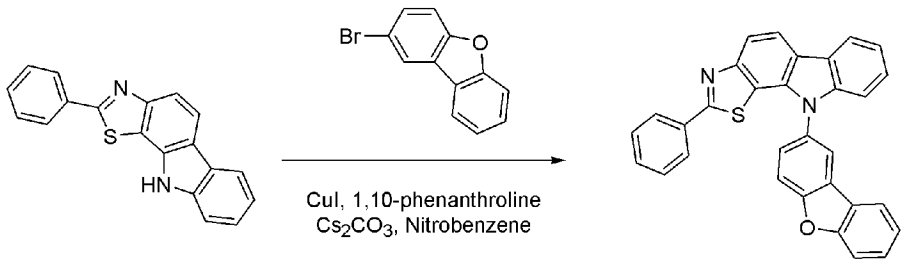
[764] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-6 (2.7 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[765] Mass (이론치: 558.12 g/mol, 측정치: 558 g/mol)

[766]

[767] [합성예 87] 화합물 I-7의 합성

[768]



I-7

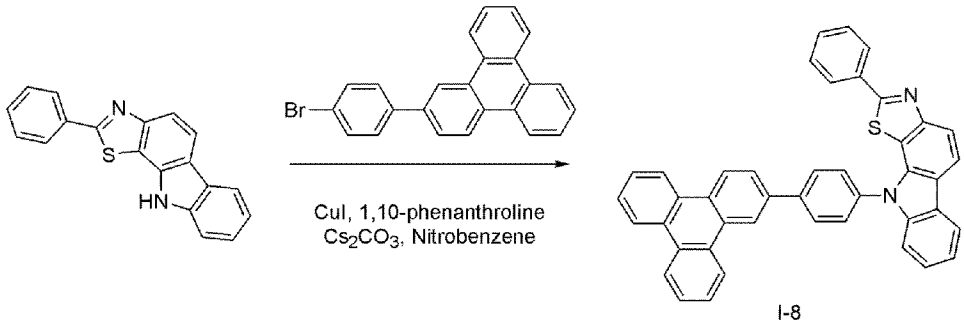
[769] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-7 (2.2 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[770] Mass (이론치: 466.11 g/mol, 측정치: 466 g/mol)

[771]

[772] [합성예 88] 화합물 I-8의 합성

[773]



I-8

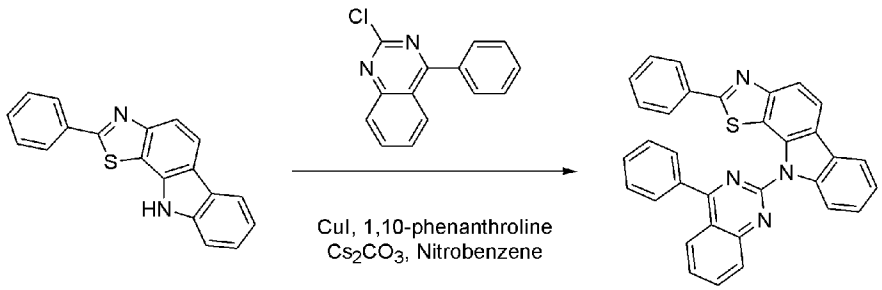
[774] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-8 (3.1 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[775] Mass (이론치: 602.18 g/mol, 측정치: 602 g/mol)

[776]

[777] [합성예 89] 화합물 I-9의 합성

[778]



I-9

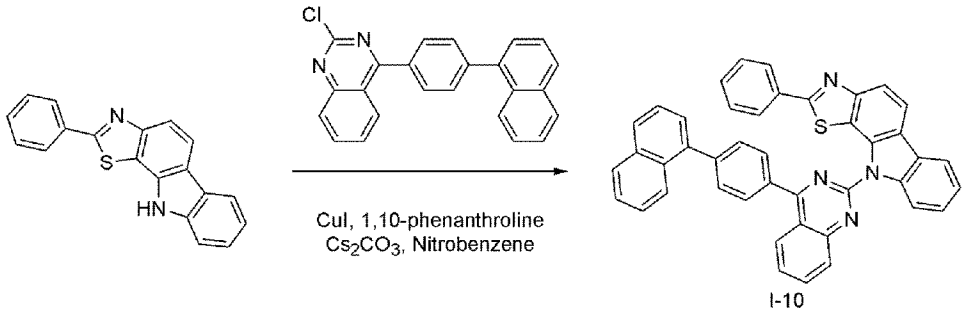
[779] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-9 (2.4 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[780] Mass (이론치: 504.14 g/mol, 측정치: 504 g/mol)

[781]

[782] [합성예 90] 화합물 I-10의 합성

[783]



I-10

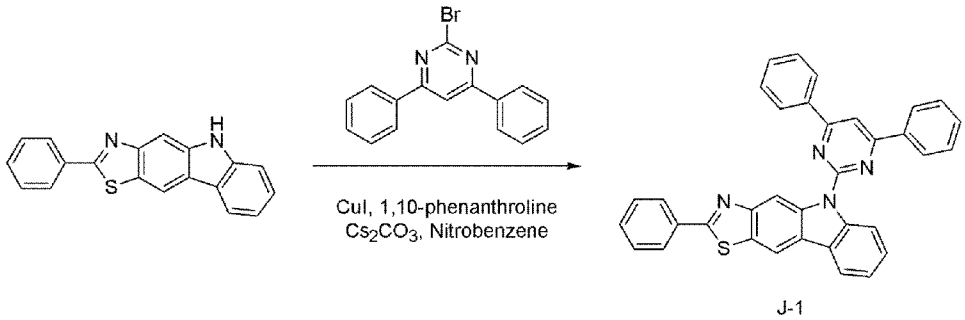
[784] 합성예 81에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 81과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 I-10 (3.1 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[785] Mass (이론치: 630.19 g/mol, 측정치: 630 g/mol)

[786]

[787] [합성예 91] 화합물 J-1의 합성

[788]



J-1

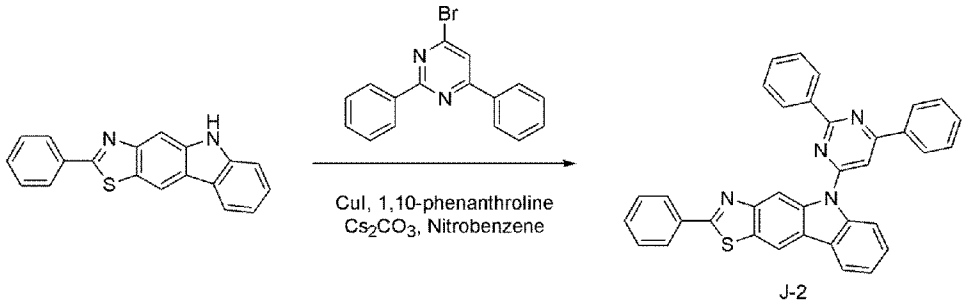
[789] 질소 기류 하에서 준비예 8에서 합성된 화합물 BTC-2 (2.0 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 J-1 (2.7 g, 수율: 76 %)을 얻었다.

[790] Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[791]

[792] [합성예 92] 화합물 J-2의 합성

[793]



J-2

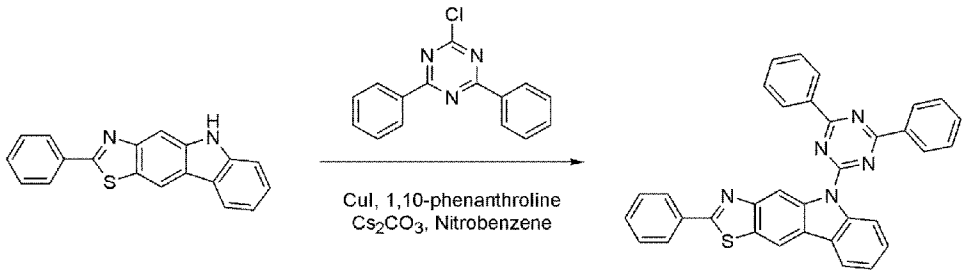
[794] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-2 (2.3 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[795] Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[796]

[797] [합성예 93] 화합물 J-3의 합성

[798]



J-3

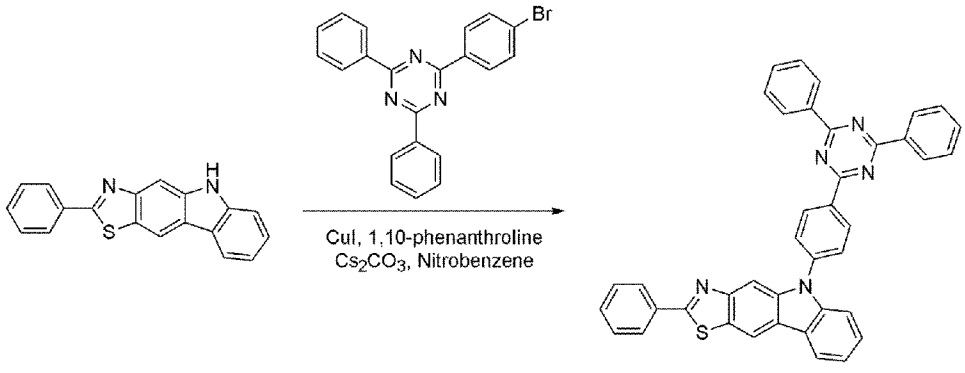
[799] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-3 (2.5 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[800] Mass (이론치: 531.15 g/mol, 측정치: 531 g/mol)

[801]

[802] [합성예 94] 화합물 J-4의 합성

[803]



J-4

[804] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

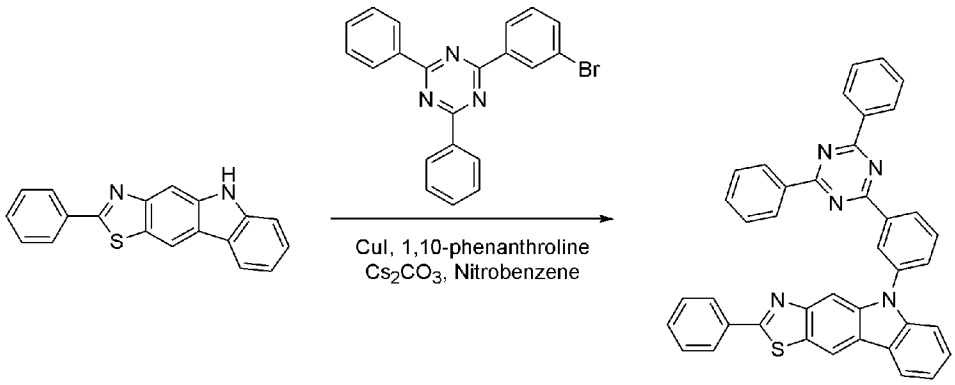
2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-4 (2.6 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[805] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[806]

[807] [합성예 95] 화합물 J-5의 합성

[808]



J-5

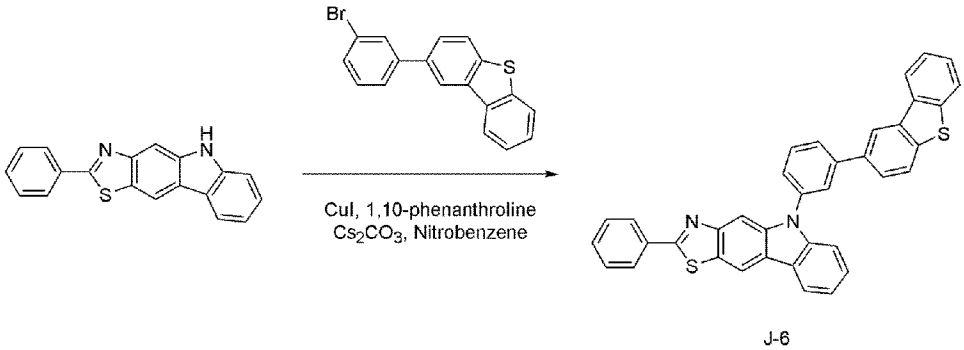
[809] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-5 (2.8 g, 수율: 68 %)를 얻었다.

[810] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[811]

[812] [합성예 96] 화합물 J-6의 합성

[813]



J-6

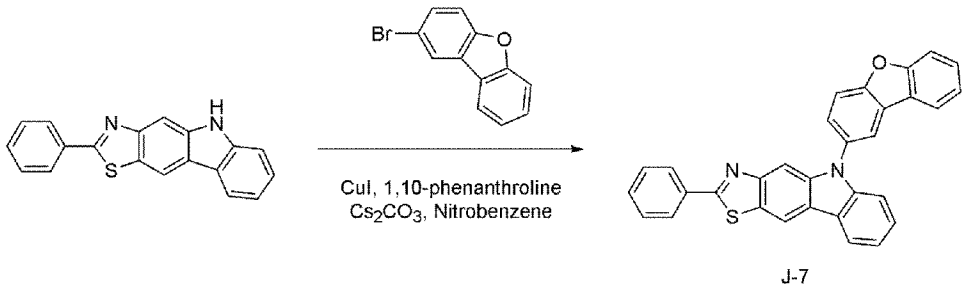
[814] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-6 (2.8 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[815] Mass (이론치: 558.12 g/mol, 측정치: 558 g/mol)

[816]

[817] [합성예 97] 화합물 J-7의 합성

[818]



J-7

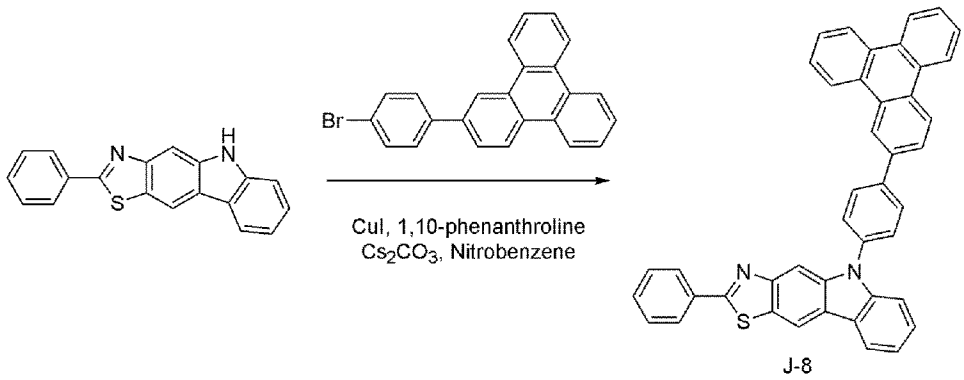
[819] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-7 (2.2 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[820] Mass (이론치: 466.11 g/mol, 측정치: 466 g/mol)

[821]

[822] [합성예 98] 화합물 J-8의 합성

[823]



J-8

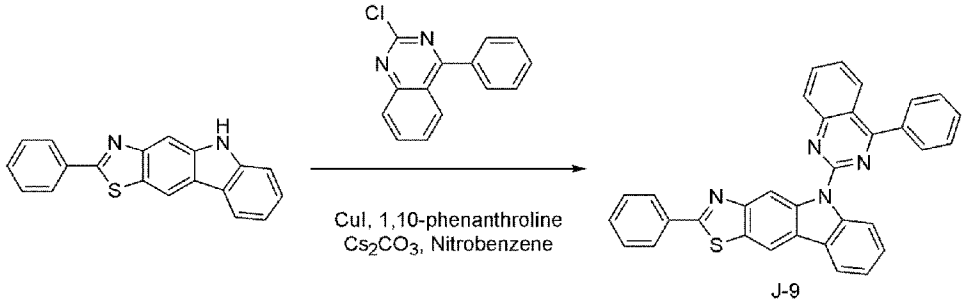
[824] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-8 (2.7 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[825] Mass (이론치: 602.18 g/mol, 측정치: 602 g/mol)

[826]

[827] [합성예 99] 화합물 J-9의 합성

[828]



J-9

[829] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-9 (2.4 g, 수율: 70 %)을

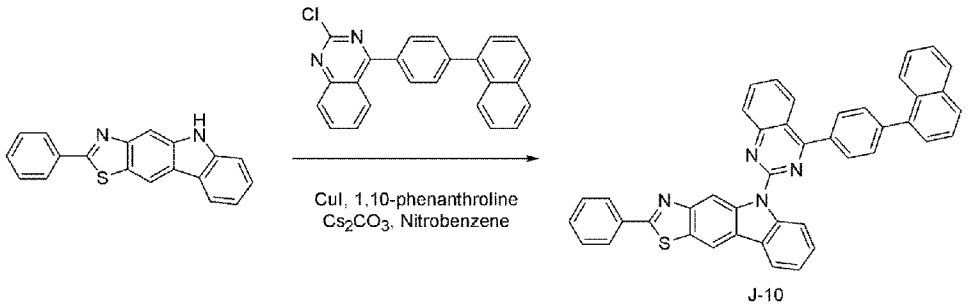
얻었다.

[830] Mass (이론치: 504.14 g/mol, 측정치: 504 g/mol)

[831]

[832] [합성예 100] 화합물 J-10의 합성

[833]



J-10

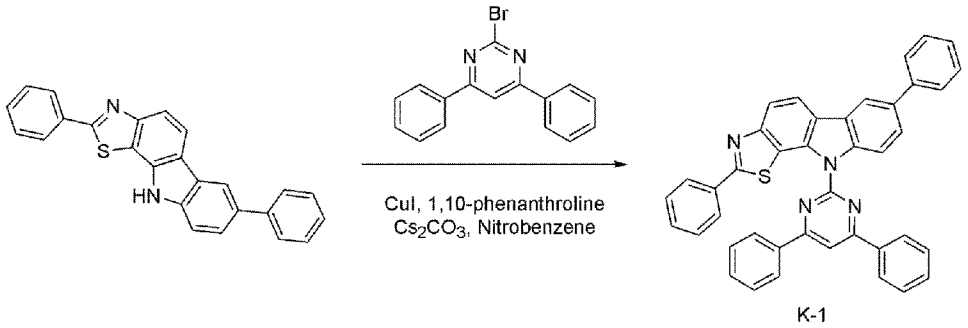
[834] 합성예 91에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 91과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 J-10 (2.7 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[835] Mass (이론치: 630.19 g/mol, 측정치: 630 g/mol)

[836]

[837] [합성예 101] 화합물 K-1의 합성

[838]



K-1

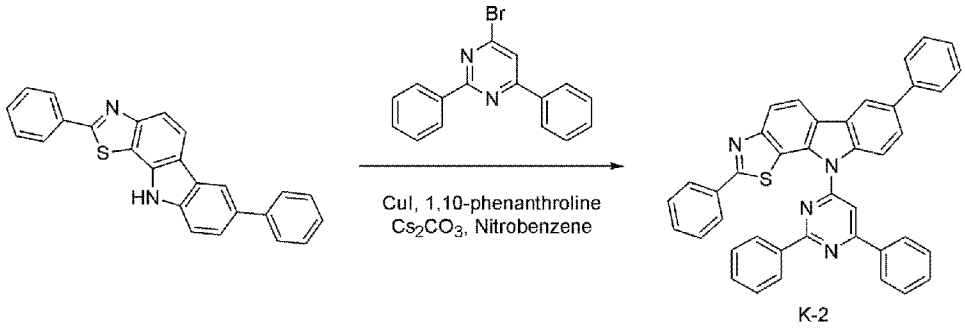
[839] 질소 기류 하에서 준비예 9에서 합성된 화합물 BTC-3 (2.5 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 K-1 (2.8 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[840] Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[841]

[842] [합성예 102] 화합물 K-2의 합성

[843]



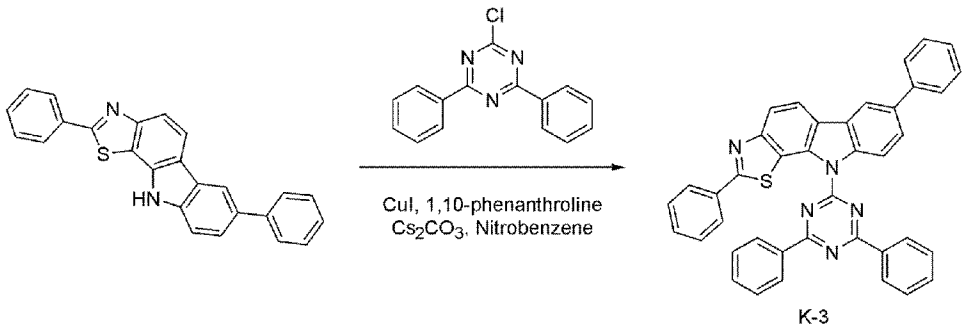
[844] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-2 (2.9 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[845] Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[846]

[847] [합성예 103] 화합물 K-3의 합성

[848]



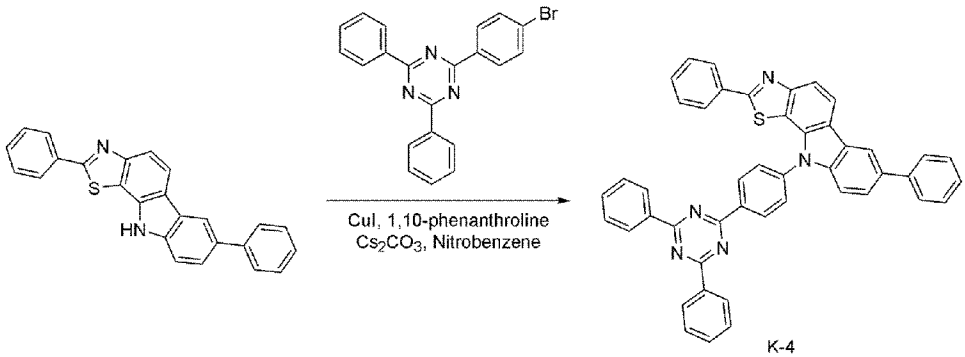
[849] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-3 (3.1 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[850] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[851]

[852] [합성예 104] 화합물 K-4의 합성

[853]



[854] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을

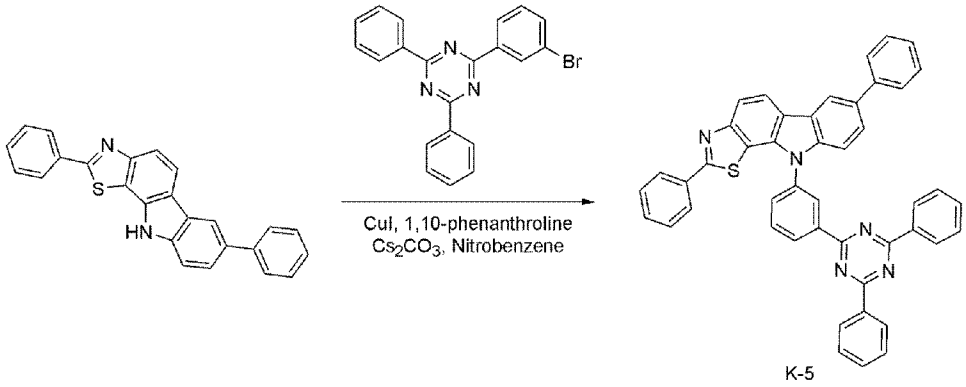
제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-4 (3.1 g, 수율: 67 %)를 얻었다.

[855] Mass (이론치: 683.21 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[856]

[857] [합성예 105] 화합물 K-5의 합성

[858]



K-5

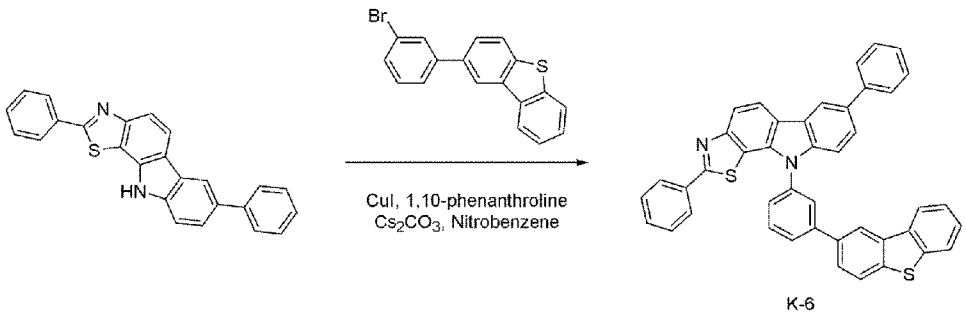
[859] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-5 (3.2 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[860] Mass (이론치: 683.21 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[861]

[862] [합성예 106] 화합물 K-6의 합성

[863]



K-6

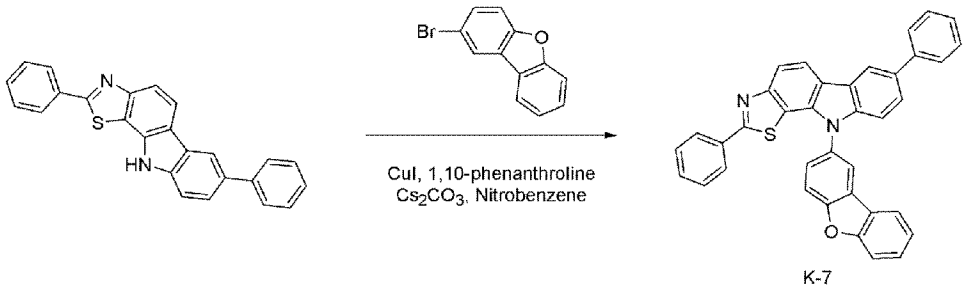
[864] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-6 (3.1 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[865] Mass (이론치: 634.15 g/mol, 측정치: 634 g/mol)

[866]

[867] [합성예 107] 화합물 K-7의 합성

[868]



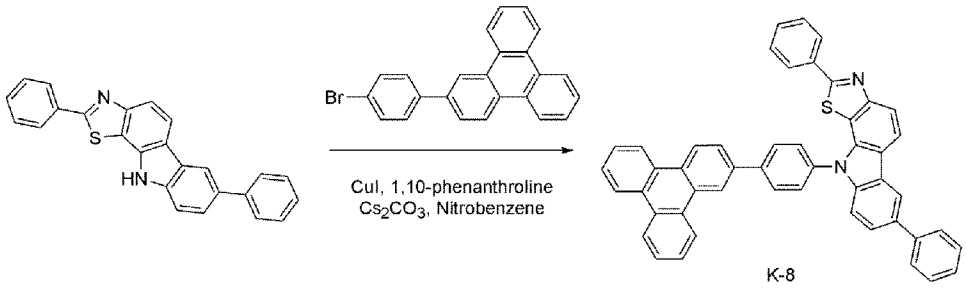
[869] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-7 (2.5 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[870] Mass (이론치: 542.15 g/mol, 측정치: 542 g/mol)

[871]

[872] [합성예 108] 화합물 K-8의 합성

[873]



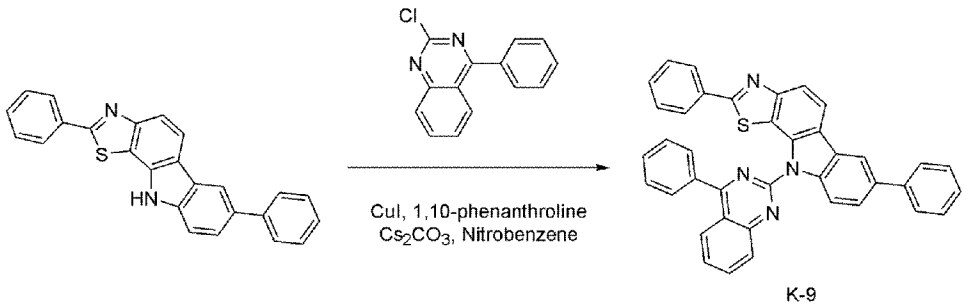
[874] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-8 (3.2 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[875] Mass (이론치: 678.21 g/mol, 측정치: 678 g/mol)

[876]

[877] [합성예 109] 화합물 K-9의 합성

[878]



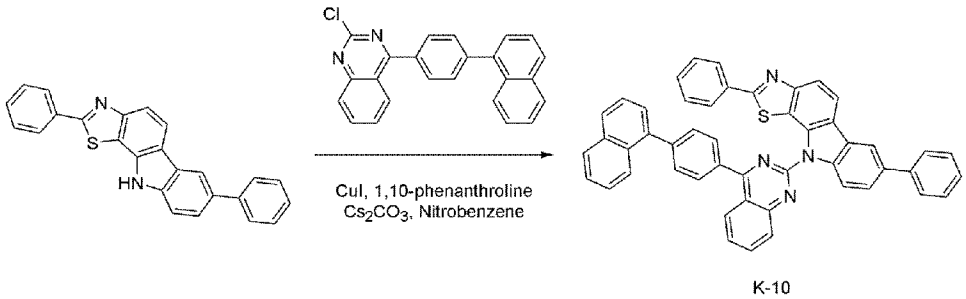
[879] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-9 (2.5 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[880] Mass (이론치: 580.17 g/mol, 측정치: 580 g/mol)

[881]

[882] [합성예 110] 화합물 K-10의 합성

[883]



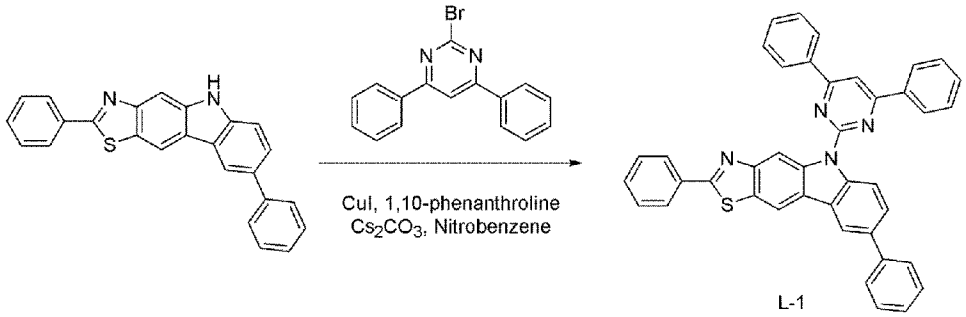
[884] 합성예 101에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 101과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 K-10 (3.7 g, 수율: 78 %)을 얻었다.

[885] Mass (이론치: 706.22 g/mol, 측정치: 706 g/mol)

[886]

[887] [합성예 111] 화합물 L-1의 합성

[888]



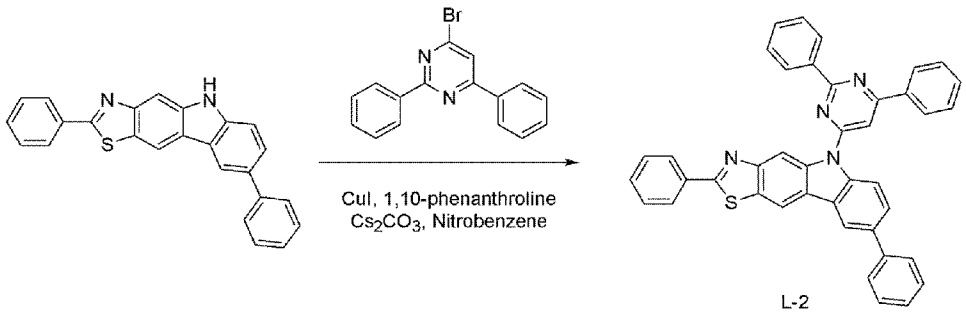
[889] 질소 기류 하에서 준비예 10에서 합성된 화합물 BTC-4 (2.5 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 L-1 (3.1 g, 수율: 77 %)을 얻었다.

[890] Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[891]

[892] [합성예 112] 화합물 L-2의 합성

[893]



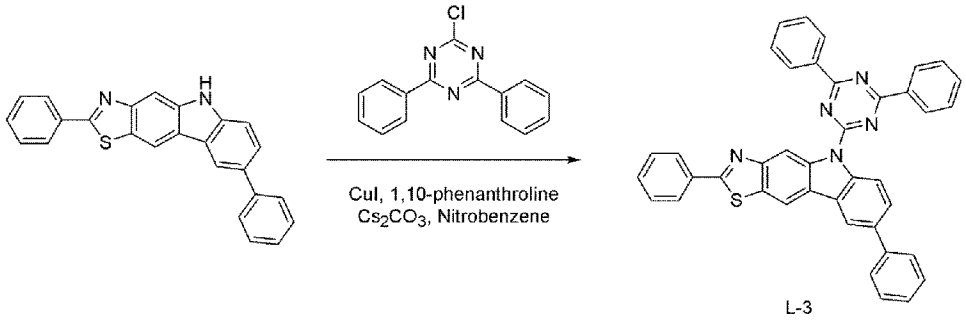
[894] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-2 (3.0 g, 수율: 75 %)를 얻었다.

[895] Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[896]

[897] [합성예 113] 화합물 L-3의 합성

[898]



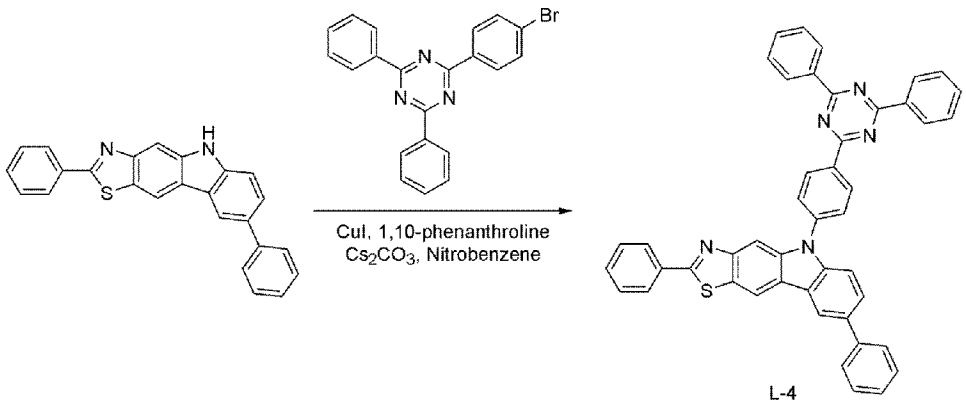
[899] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-3 (2.9 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[900] Mass (이론치: 607.18 g/mol, 측정치: 607 g/mol)

[901]

[902] [합성예 114] 화합물 L-4의 합성

[903]



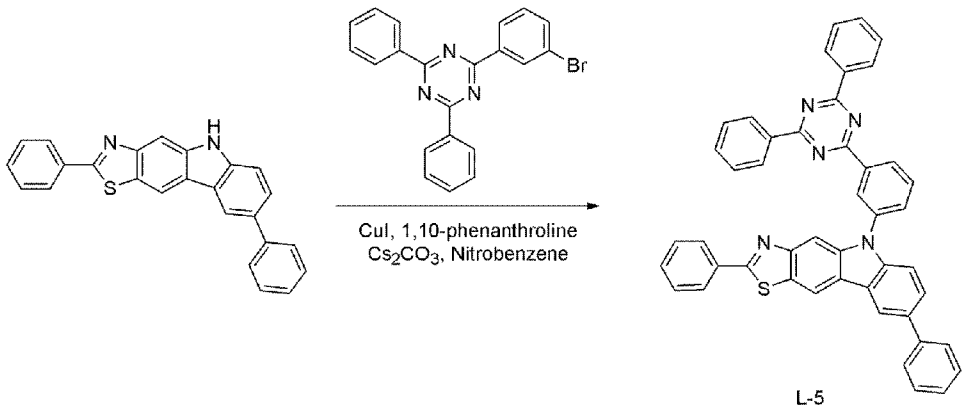
[904] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-4 (3.2 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[905] Mass (이론치: 683.21 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[906]

[907] [합성예 115] 화합물 L-5의 합성

[908]



L-5

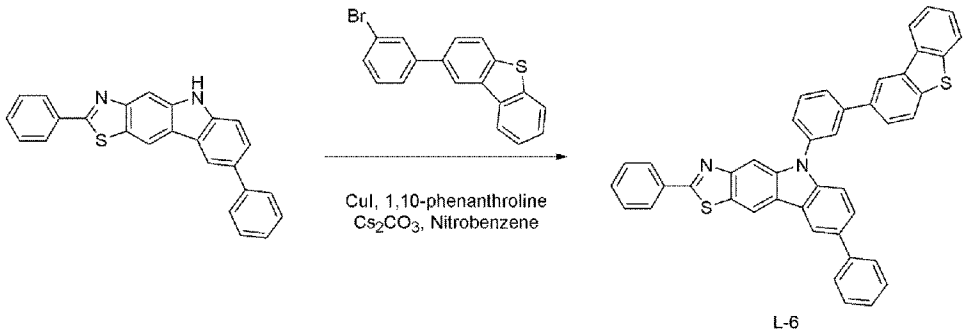
[909] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-5 (3.0 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[910] Mass (이론치: 683.21 g/mol, 측정치: 683 g/mol)

[911]

[912] [합성예 116] 화합물 L-6의 합성

[913]



L-6

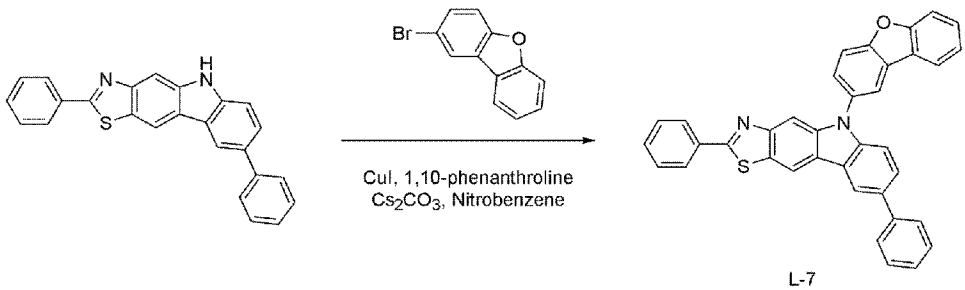
[914] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.7 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-6 (3.1 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[915] Mass (이론치: 634.15 g/mol, 측정치: 634 g/mol)

[916]

[917] [합성예 117] 화합물 L-7의 합성

[918]



L-7

[919] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

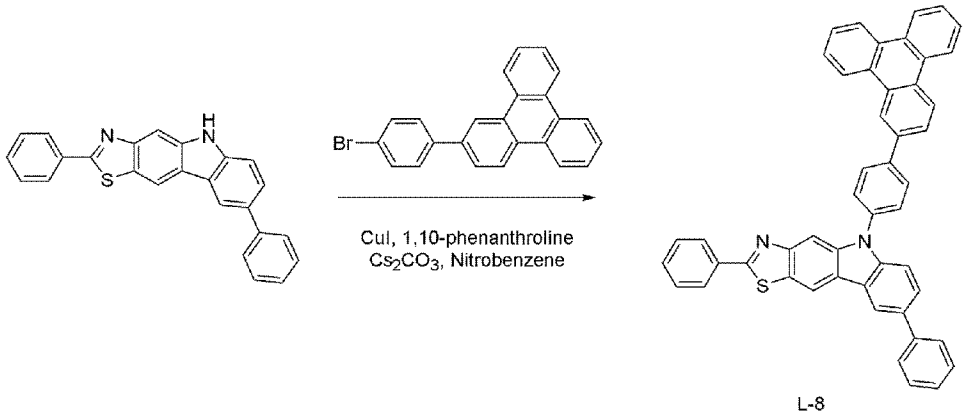
2-bromodibenzo[b,d]furan (2.0 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-7 (2.3 g, 수율: 63 %)을 얻었다.

[920] Mass (이론치: 542.15 g/mol, 측정치: 542 g/mol)

[921]

[922] [합성예 118] 화합물 L-8의 합성

[923]



L-8

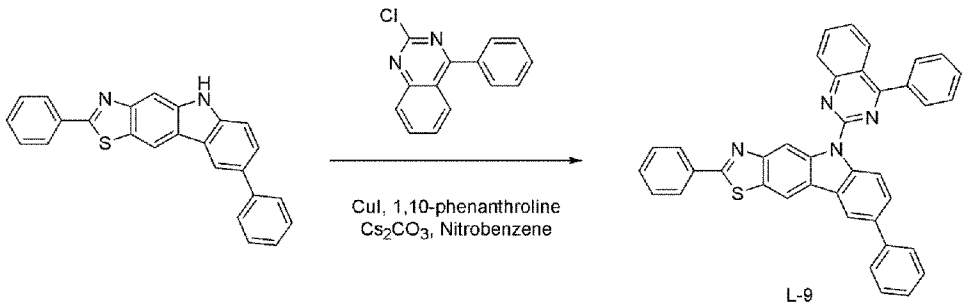
[924] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.1 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-8 (3.6 g, 수율: 79 %)을 얻었다.

[925] Mass (이론치: 이론치: 678.21 g/mol, 측정치: 678 g/mol)

[926]

[927] [합성예 119] 화합물 L-9의 합성

[928]



L-9

[929] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline (1.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-9 (2.8 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[930] Mass (이론치: 580.17 g/mol, 측정치: 580 g/mol)

[931]

[932] [합성예 120] 화합물 L-10의 합성

[933]

[934] 합성예 111에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.9 g, 8.0 mmol)을 사용하는

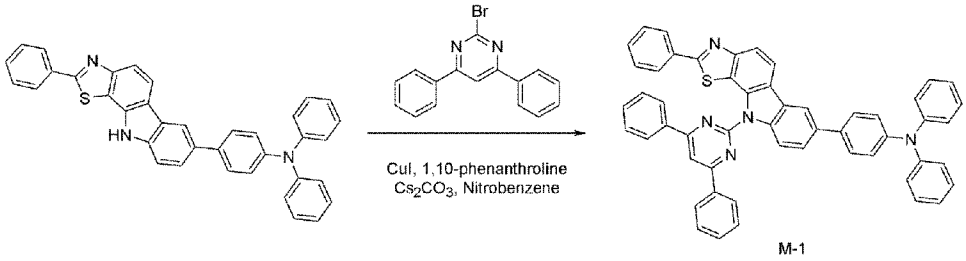
것을 제외하고는, 합성예 111과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 L-10 (3.1 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[935] Mass (이론치: 706.22 g/mol, 측정치: 706 g/mol)

[936]

[937] [합성예 121] 화합물 M-1의 합성

[938]



M-1

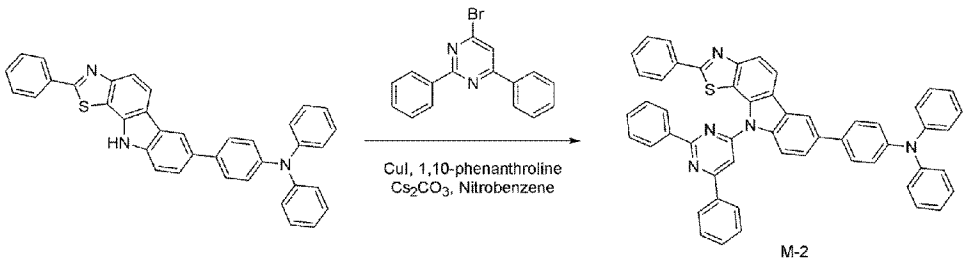
[939] 질소 기류 하에서 준비예 11에서 합성된 화합물 BTC-5 (3.64 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 M-1 (3.5 g, 수율 68 %)을 얻었다.

[940] Mass (이론치: 773.28 g/mol, 측정치: 773 g/mol)

[941]

[942] [합성예 122] 화합물 M-2의 합성

[943]



M-2

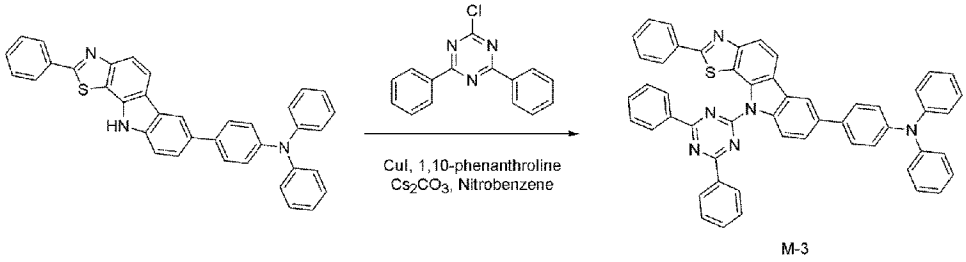
[944] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-2 (3.6 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[945] Mass (이론치: 773.28 g/mol, 측정치: 773 g/mol)

[946]

[947] [합성예 123] 화합물 M-3의 합성

[948]



M-3

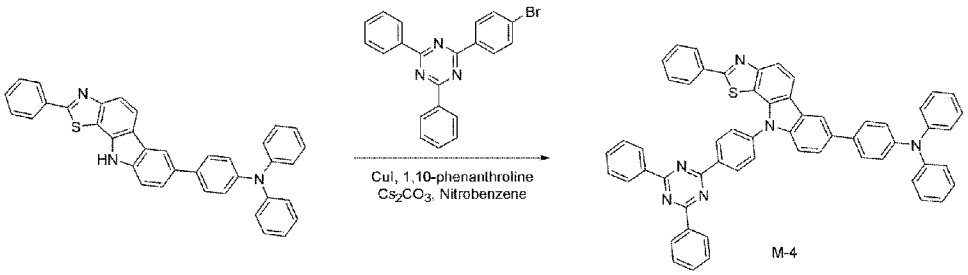
[949] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-3 (3.4 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[950] Mass (이론치: 774.28 g/mol, 측정치: 774 g/mol)

[951]

[952] [합성예 124] 화합물 M-4의 합성

[953]



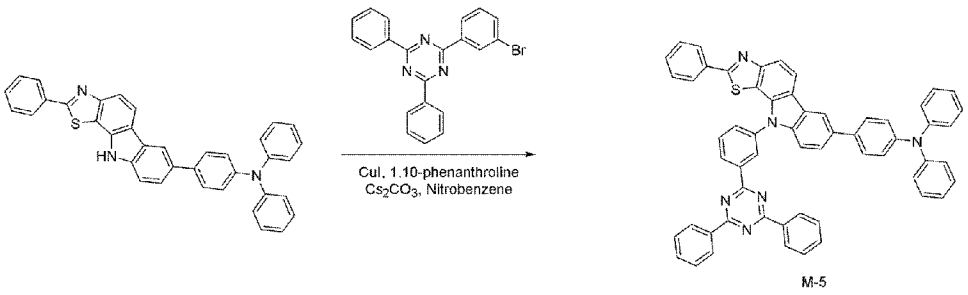
[954] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-4 (4.4 g, 수율: 78 %)를 얻었다.

[955] Mass (이론치: 850.31 g/mol, 측정치: 850 g/mol)

[956]

[957] [합성예 125] 화합물 M-5의 합성

[958]



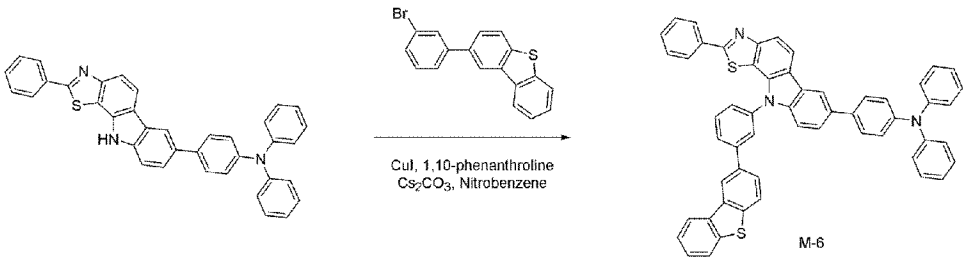
[959] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-5 (4.2 g, 수율: 73 %)를 얻었다.

[960] Mass (이론치: 850.31 g/mol, 측정치: 850 g/mol)

[961]

[962] [합성예 126] 화합물 M-6의 합성

[963]



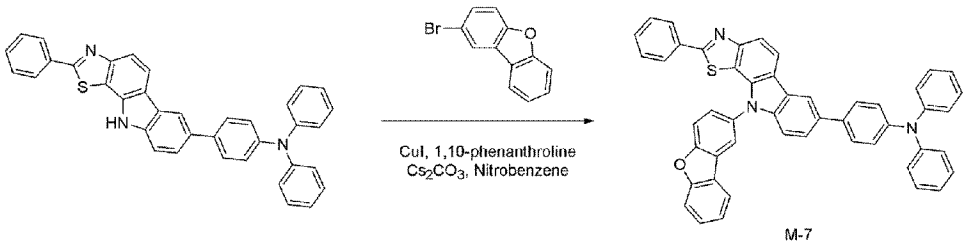
[964] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (5.43 g, 16.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-6 (3.5 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[965] Mass (이론치: 801.25 g/mol, 측정치: 801 g/mol)

[966]

[967] [합성예 127] 화합물 M-7의 합성

[968]



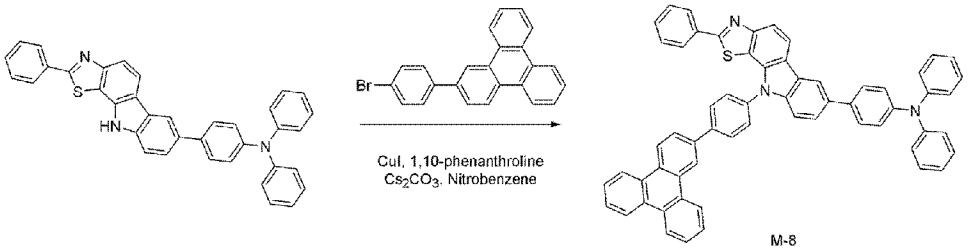
[969] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-7 (3.3 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[970] Mass (이론치: 709.24 g/mol, 측정치: 709 g/mol)

[971]

[972] [합성예 128] 화합물 M-8의 합성

[973]



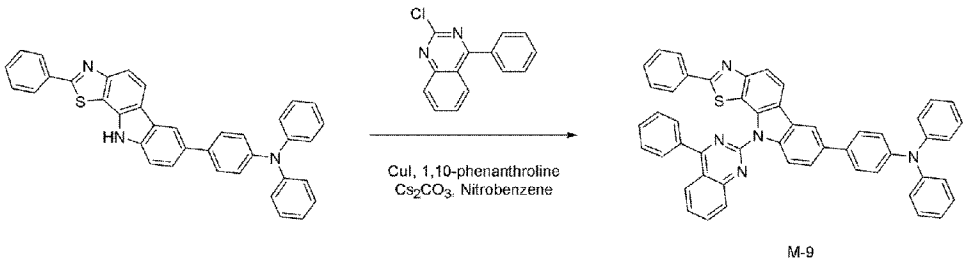
[974] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-8 (4.2 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[975] Mass (이론치: 845.31 g/mol, 측정치: 845 g/mol)

[976]

[977] [합성예 129] 화합물 M-9의 합성

[978]



M-9

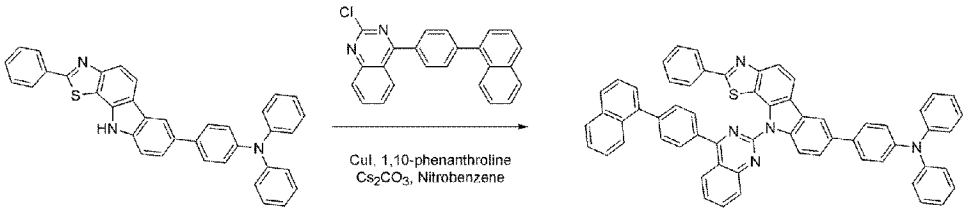
[979] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-9 (3.9 g, 수율: 78 %)을 얻었다.

[980] Mass (이론치: 747.27 g/mol, 측정치: 747 g/mol)

[981]

[982] [합성예 130] 화합물 M-10의 합성

[983]



M-10

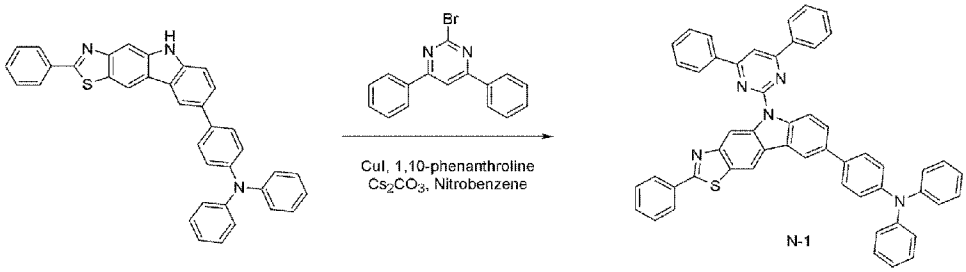
[984] 합성예 121에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 121과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 M-10 (4.2 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[985] Mass (이론치: 873.32 g/mol, 측정치: 873 g/mol)

[986]

[987] [합성예 131] 화합물 N-1의 합성

[988]



N-1

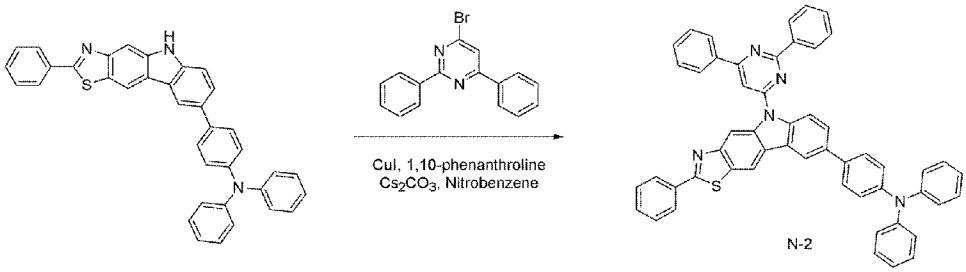
[989] 질소 기류 하에서 준비예 12에서 합성된 화합물 BTC-6 (3.64 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 N-1 (4.0 g, 수율: 78 %)을 얻었다.

[990] Mass (이론치: 773.28 g/mol, 측정치: 773 g/mol)

[991]

[992] [합성예 132] 화합물 N-2의 합성

[993]



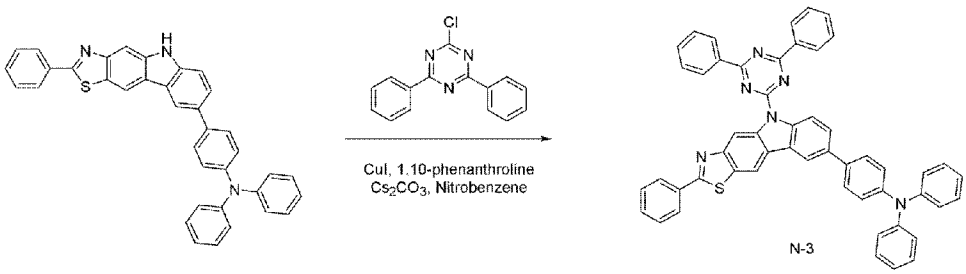
[994] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-2 (3.6 g, 수율: 69 %)를 얻었다.

[995] Mass (이론치: 773.28 g/mol, 측정치: 773 g/mol)

[996]

[997] [합성예 133] 화합물 N-3의 합성

[998]



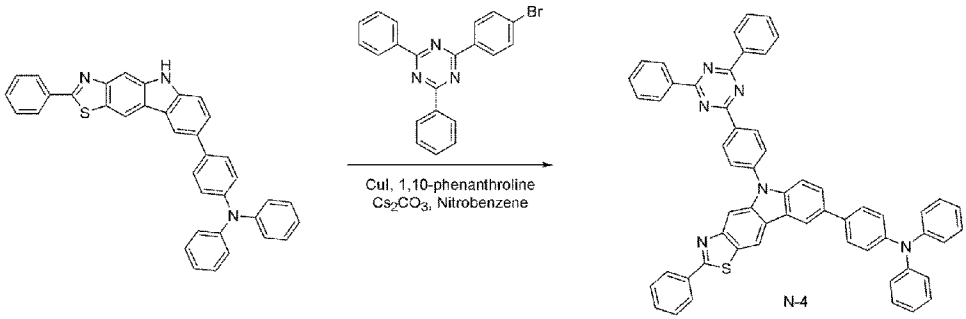
[999] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-3 (3.6 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[1000] Mass (이론치: 774.28 g/mol, 측정치: 774 g/mol)

[1001]

[1002] [합성예 134] 화합물 N-4의 합성

[1003]



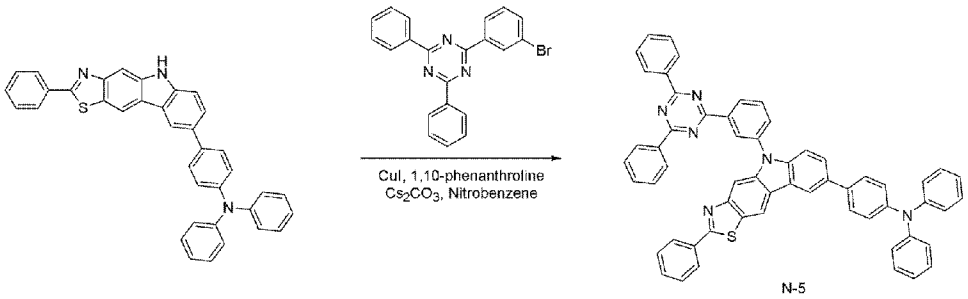
[1004] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-4 (4.3 g, 수율: 75 %)를 얻었다.

[1005] Mass (이론치: 850.31 g/mol, 측정치: 850 g/mol)

[1006]

[1007] [합성예 135] 화합물 N-5의 합성

[1008]



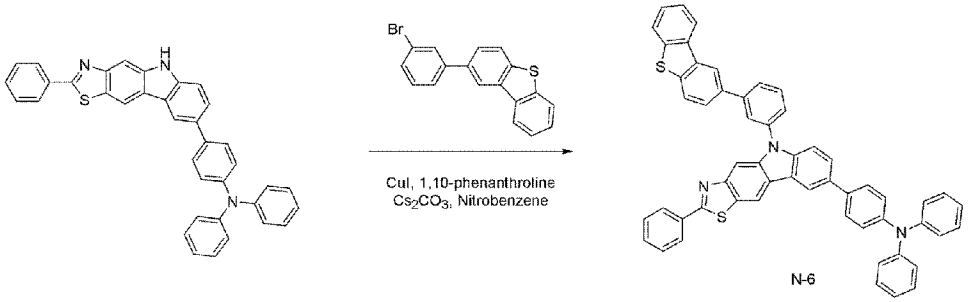
[1009] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-5 (4.2 g, 수율: 74 %)를 얻었다.

[1010] Mass (이론치: 850.31 g/mol, 측정치: 850 g/mol)

[1011]

[1012] [합성예 136] 화합물 N-6의 합성

[1013]



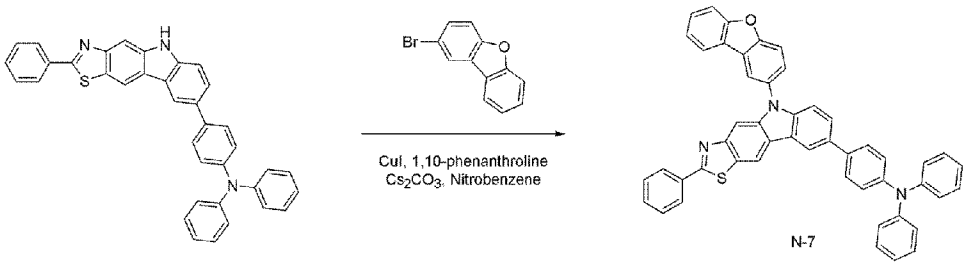
[1014] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-6 (3.8 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[1015] Mass (이론치: 801.25 g/mol, 측정치: 801 g/mol)

[1016]

[1017] [합성예 137] 화합물 N-7의 합성

[1018]



[1019] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예

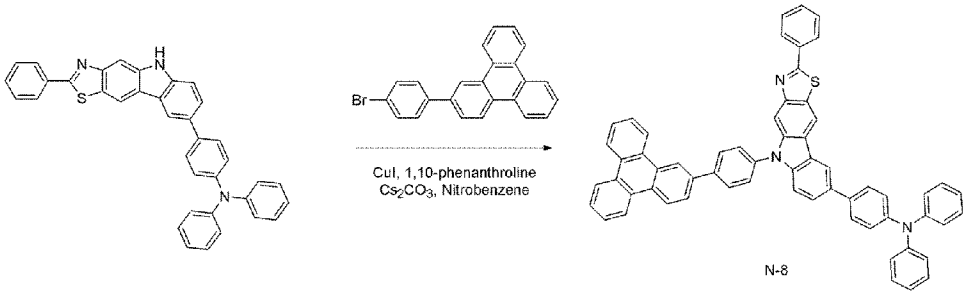
131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-7 (3.3 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[1020] Mass (이론치: 709.24 g/mol, 측정치: 709 g/mol)

[1021]

[1022] [합성예 138] 화합물 N-8의 합성

[1023]



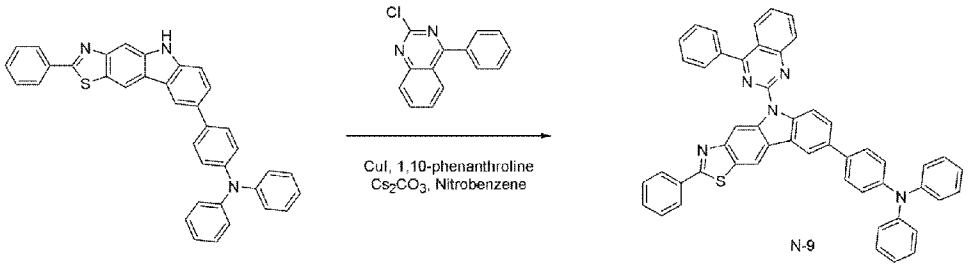
[1024] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-8 (4.2 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[1025] Mass (이론치: 845.31 g/mol, 측정치: 845 g/mol)

[1026]

[1027] [합성예 139] 화합물 N-9의 합성

[1028]



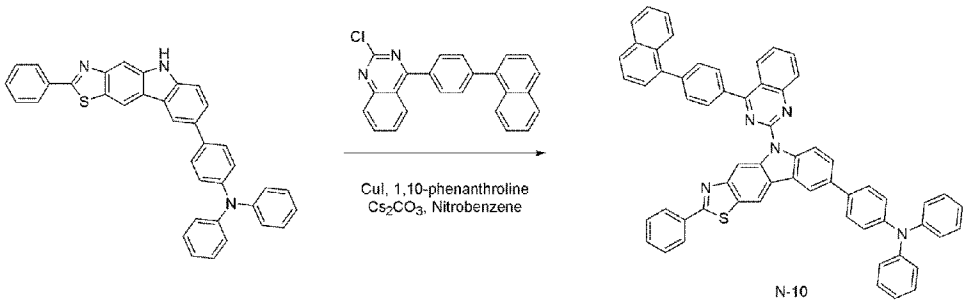
[1029] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-9 (3.7 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[1030] Mass (이론치: 747.27 g/mol, 측정치: 747 g/mol)

[1031]

[1032] [합성예 140] 화합물 N-10의 합성

[1033]



[1034] 합성예 131에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는

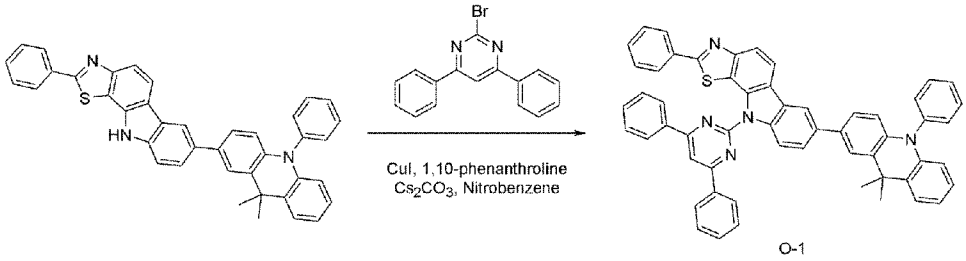
것을 제외하고는, 합성예 131과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 N-10 (3.9 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[1035] Mass (이론치: 873.32 g/mol, 측정치: 873 g/mol)

[1036]

[1037] [합성예 141] 화합물 O-1의 합성

[1038]



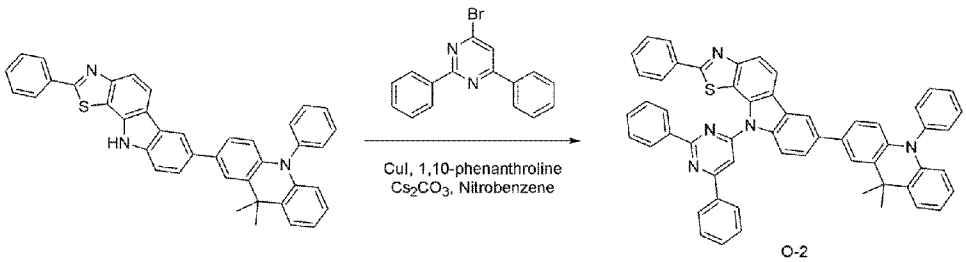
[1039] 질소 기류 하에서 준비예 13에서 합성된 화합물 BTC-7 (3.9 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 O-1 (3.8 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[1040] Mass (이론치: 813.32 g/mol, 측정치: 813 g/mol)

[1041]

[1042] [합성예 142] 화합물 O-2의 합성

[1043]



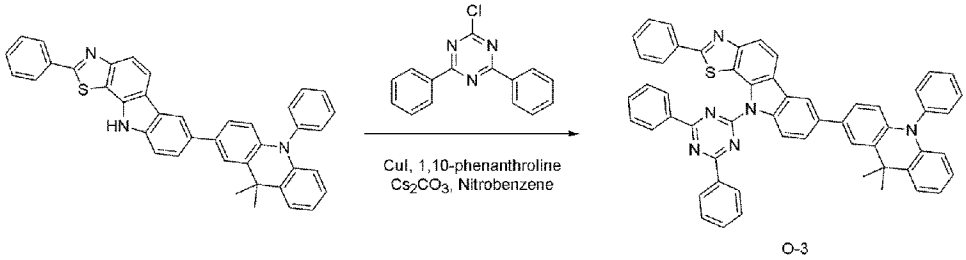
[1044] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-2 (3.5 g, 수율: 65 %)를 얻었다.

[1045] Mass (이론치: 813.32 g/mol, 측정치: 813 g/mol)

[1046]

[1047] [합성예 143] 화합물 O-3의 합성

[1048]



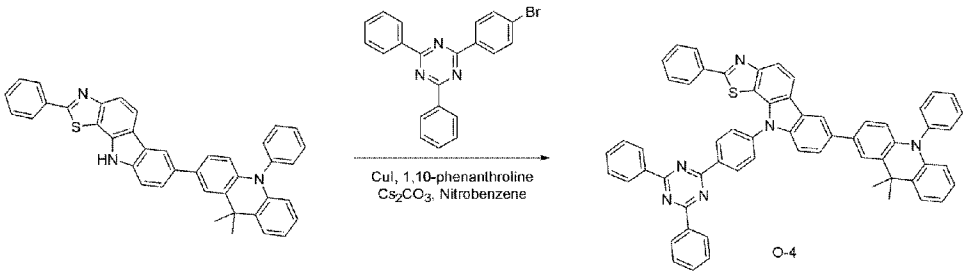
[1049] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-3 (4.0 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[1050] Mass (이론치: 814.31 g/mol, 측정치: 814 g/mol)

[1051]

[1052] [합성예 144] 화합물 O-4의 합성

[1053]



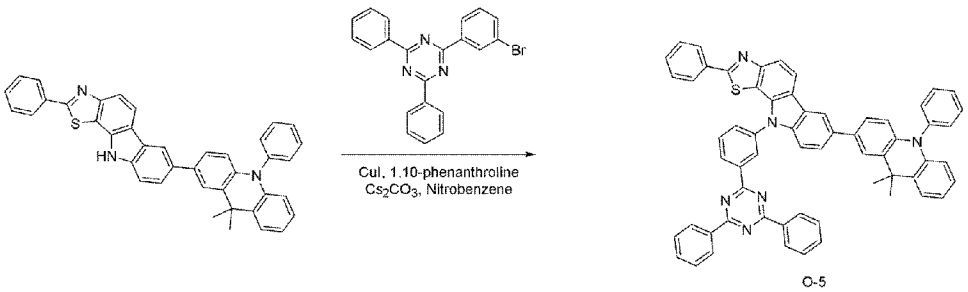
[1054] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-4 (4.4 g, 수율: 74 %)를 얻었다.

[1055] Mass (이론치: 890.34 g/mol, 측정치: 890 g/mol)

[1056]

[1057] [합성예 145] 화합물 O-5의 합성

[1058]



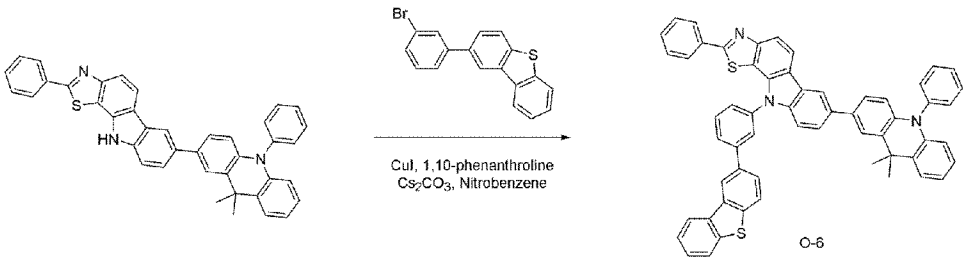
[1059] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-5 (4.2 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[1060] Mass (이론치: 890.34 g/mol, 측정치: 890 g/mol)

[1061]

[1062] [합성예 146] 화합물 O-6의 합성

[1063]



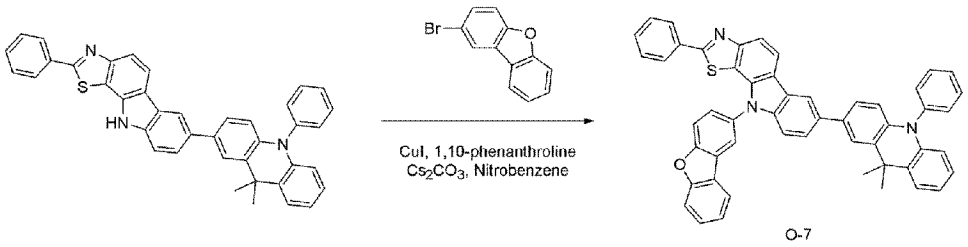
[1064] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-6 (3.6 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[1065] Mass (이론치: 842.01 g/mol, 측정치: 842 g/mol)

[1066]

[1067] [합성예 147] 화합물 O-7의 합성

[1068]



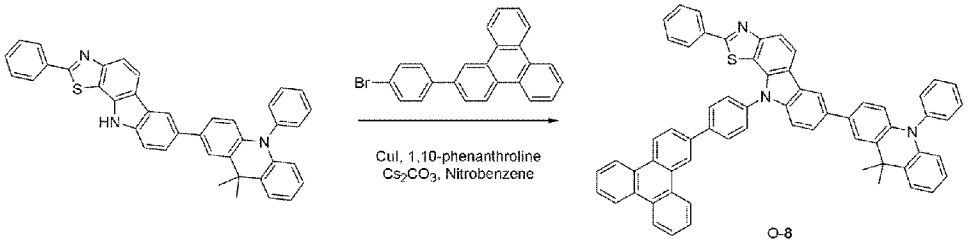
[1069] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-7 (3.6 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[1070] Mass (이론치: 749.27 g/mol, 측정치: 749 g/mol)

[1071]

[1072] [합성예 148] 화합물 O-8의 합성

[1073]



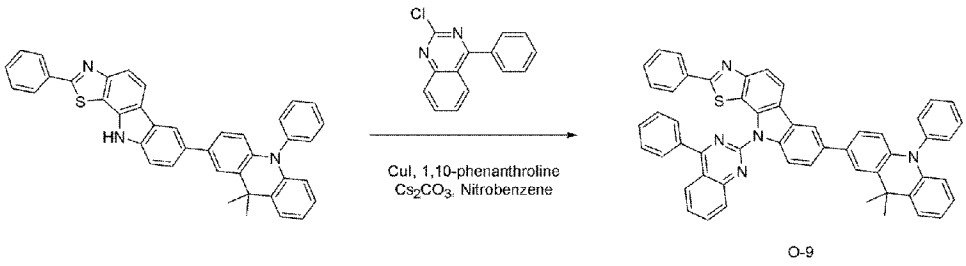
[1074] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-8 (4.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[1075] Mass (이론치: 885.34 g/mol, 측정치: 885 g/mol)

[1076]

[1077] [합성예 149] 화합물 O-9의 합성

[1078]



O-9

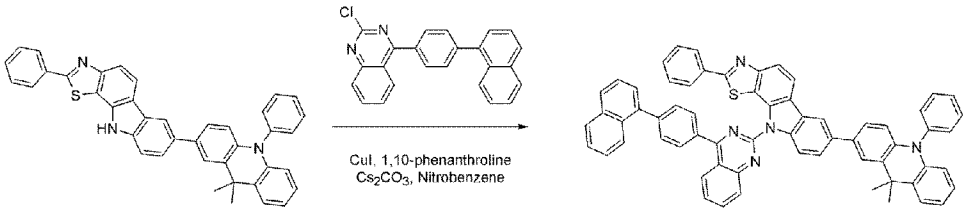
[1079] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-9 (4.0 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[1080] Mass (이론치: 787.30 g/mol, 측정치: 787 g/mol)

[1081]

[1082] [합성예 150] 화합물 O-10의 합성

[1083]



O-10

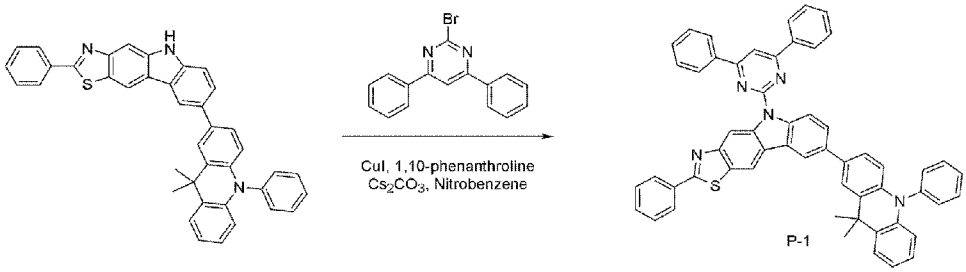
[1084] 합성예 141에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 141과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 O-10 (4.4 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[1085] Mass (이론치: 913.35 g/mol, 측정치: 913 g/mol)

[1086]

[1087] [합성예 151] 화합물 P-1의 합성

[1088]



P-1

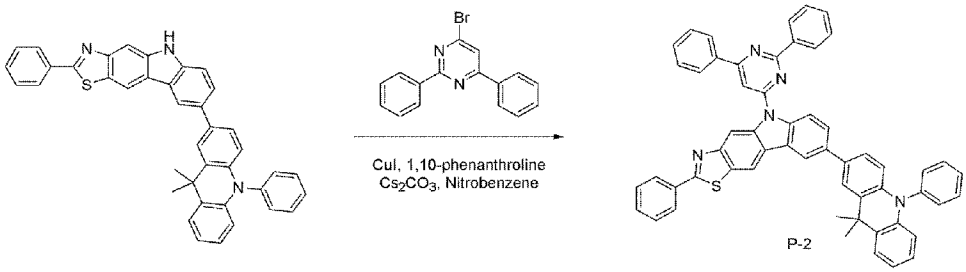
[1089] 질소 기류 하에서 준비예 14에서 합성된 화합물 BTC-8 (3.9 g, 6.7 mmol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.13 g, 0.67 mmol), 1,10-phenanthroline (0.24 g, 1.34 mmol), Cs_2CO_3 (4.37 g, 13.4 mmol) 및 nitrobenzene (25 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 P-1 (3.5 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[1090] Mass (이론치: 813.32 g/mol, 측정치: 813 g/mol)

[1091]

[1092] [합성예 152] 화합물 P-2의 합성

[1093]



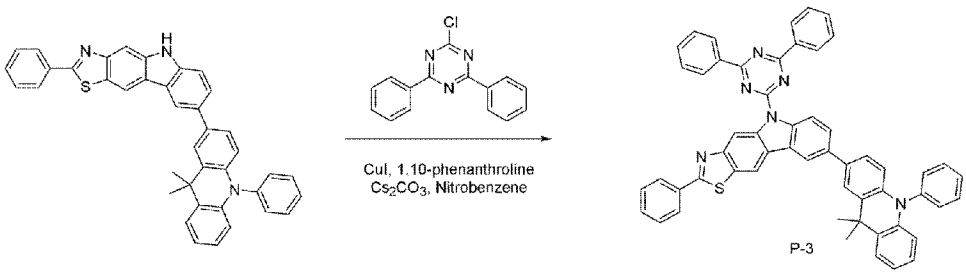
[1094] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (2.5 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-2 (3.8 g, 수율: 70 %)를 얻었다.

[1095] Mass (이론치: 813.32 g/mol, 측정치: 813 g/mol)

[1096]

[1097] [합성예 153] 화합물 P-3의 합성

[1098]



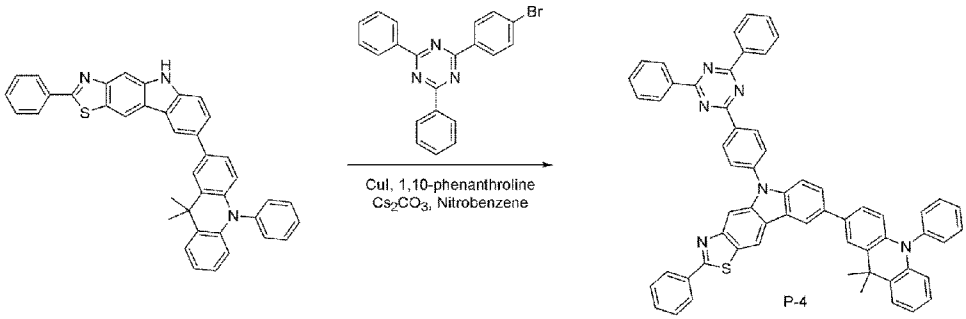
[1099] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.14 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-3 (4.0 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[1100] Mass (이론치: 814.33 g/mol, 측정치: 814 g/mol)

[1101]

[1102] [합성예 154] 화합물 P-4의 합성

[1103]



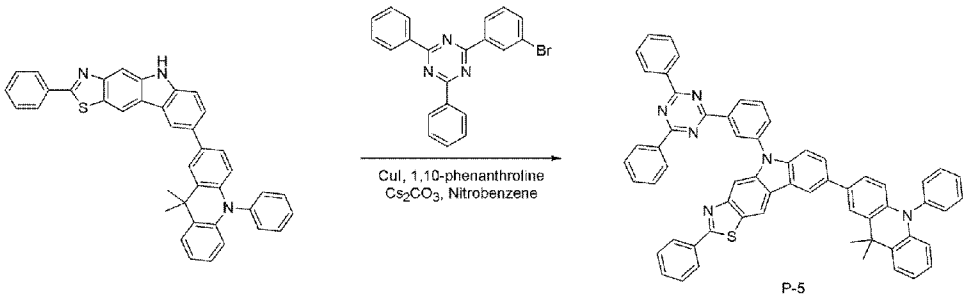
[1104] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-4 (3.9 g, 수율: 66 %)를 얻었다.

[1105] Mass (이론치: 874.34 g/mol, 측정치: 874 g/mol)

[1106]

[1107] [합성예 155] 화합물 P-5의 합성

[1108]



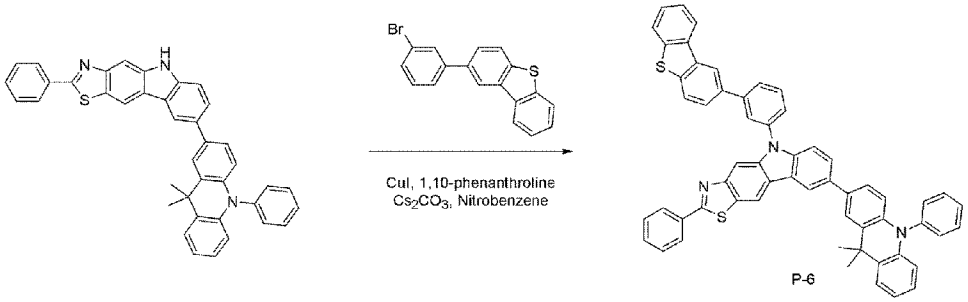
[1109] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.15 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-5 (4.3 g, 수율: 72 %)를 얻었다.

[1110] Mass (이론치: 890.35 g/mol, 측정치: 890 g/mol)

[1111]

[1112] [합성예 156] 화합물 P-6의 합성

[1113]



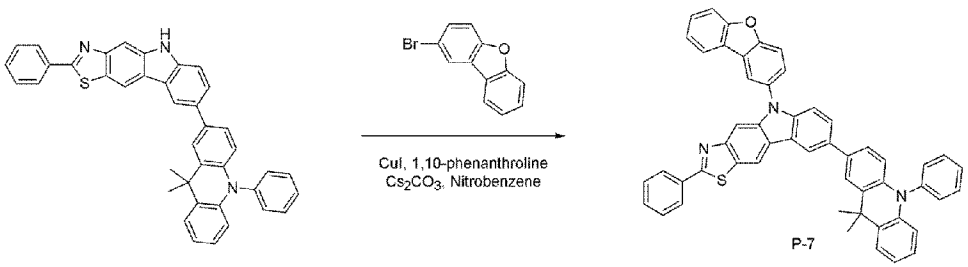
[1114] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo [b,d]thiophene (2.71 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-6 (3.9 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[1115] Mass (이론치: 842.03 g/mol, 측정치: 842 g/mol)

[1116]

[1117] [합성예 157] 화합물 P-7의 합성

[1118]



[1119] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (1.98 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예

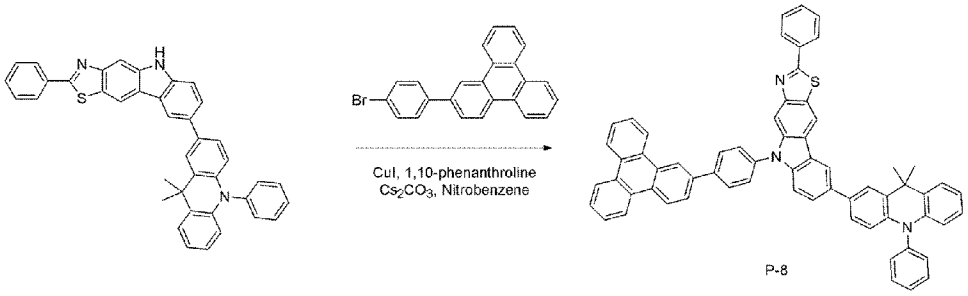
151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-7 (3.5 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[1120] Mass (이론치: 749.27 g/mol, 측정치: 749 g/mol)

[1121]

[1122] [합성예 158] 화합물 P-8의 합성

[1123]



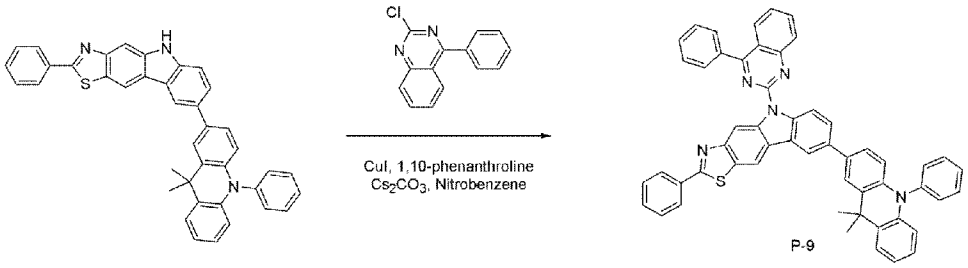
[1124] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(4-bromophenyl)triphenylene (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-8 (4.0 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[1125] Mass (이론치: 869.34 g/mol, 측정치: 869 g/mol)

[1126]

[1127] [합성예 159] 화합물 P-9의 합성

[1128]



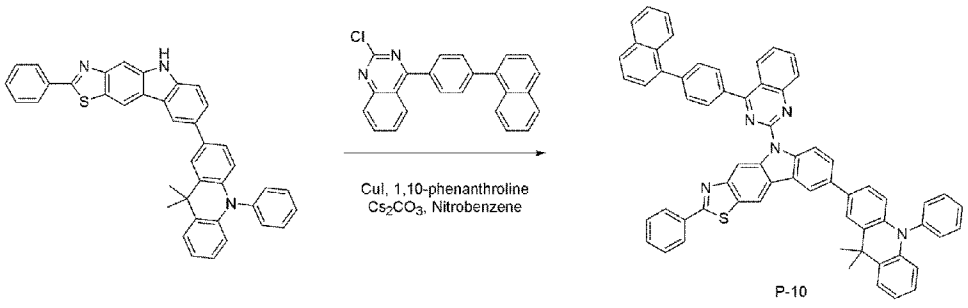
[1129] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromodibenzo[b,d]furan (3.07 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-9 (3.7 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[1130] Mass (이론치: 787.30 g/mol, 측정치: 787 g/mol)

[1131]

[1132] [합성예 160] 화합물 P-10의 합성

[1133]



[1134] 합성예 151에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)quinazoline (2.94 g, 8.0 mmol)을 사용하는

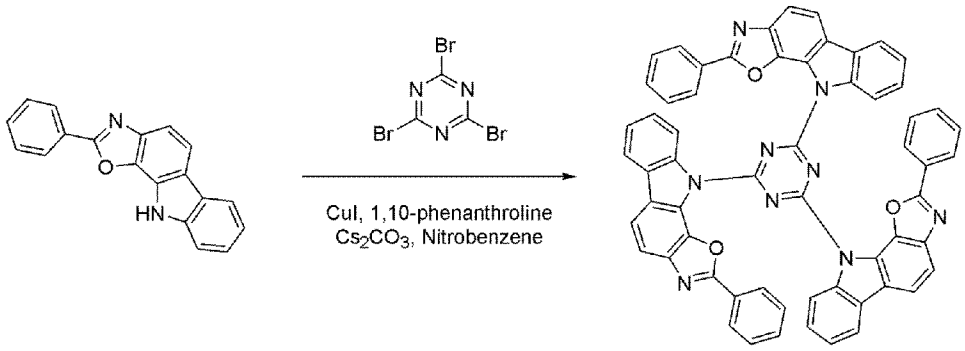
것을 제외하고는, 합성예 151과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 P-10 (5.0 g, 수율: 82 %)을 얻었다.

[1135] Mass (이론치: 913.35 g/mol, 측정치: 913 g/mol)

[1136]

[1137] [합성예 161] 화합물 Q-1의 합성

[1138]



Q-1

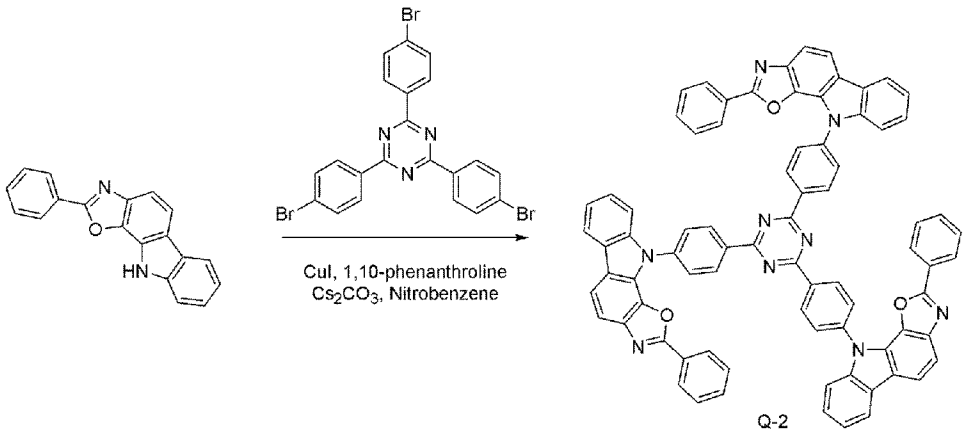
[1139] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 BOC-1 (5.0 g, 17.6 mmol), 2,4,6-tribromo-1,3,5-triazine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.78 g, 1.76 mmol), 1,10-phenanthroline (0.62 g, 3.50 mmol), Cs_2CO_3 (11.37 g, 34.8 mmol) 및 nitrobenzene (70 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 Q-1 (8.0 g, 수율: 49 %)을 얻었다.

[1140] Mass (이론치: 927.27 g/mol, 측정치: 927 g/mol)

[1141]

[1142] [합성예 162] 화합물 Q-2의 합성

[1143]



Q-2

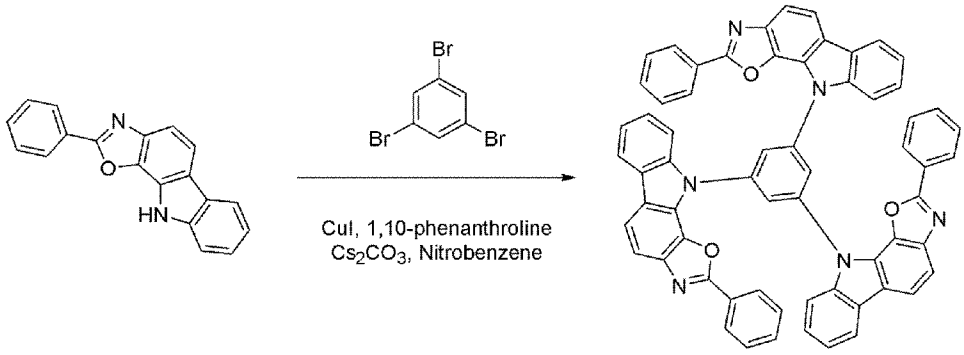
[1144] 합성예 161에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2,4,6-tris(4-bromophenyl)-1,3,5-triazine (4.36 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 161과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 Q-2 (9.4 g, 수율: 46 %)를 얻었다.

[1145] Mass (이론치: 1155.36 g/mol, 측정치: 1155 g/mol)

[1146]

[1147] [합성예 163] 화합물 Q-3의 합성

[1148]



Q-3

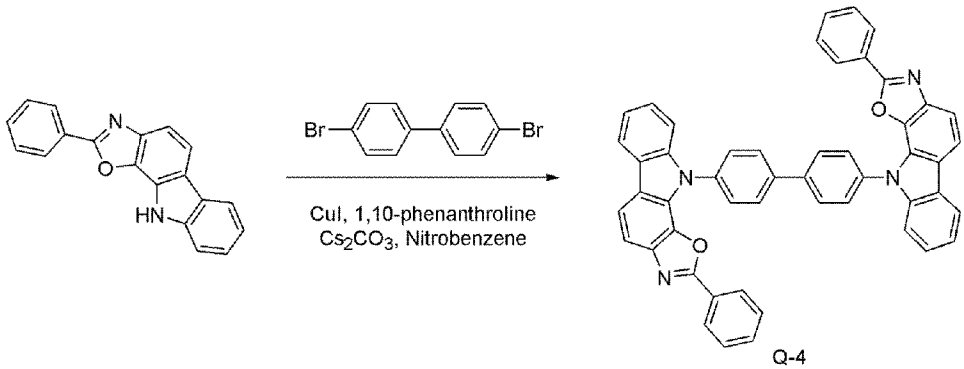
[1149] 합성예 161에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1,3,5-tribromobenzene (2.52 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 161과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 Q-3 (7.8 g, 수율: 48 %)을 얻었다.

[1150] Mass (이론치: 924.28 g/mol, 측정치: 924 g/mol)

[1151]

[1152] [합성예 164] 화합물 Q-4의 합성

[1153]



Q-4

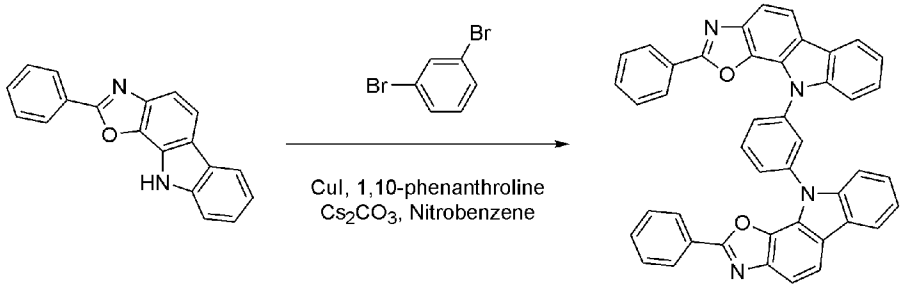
[1154] 합성예 161에서 사용된 화합물 BOC-1 (5.0 g, 17.6 mmol) 대신 화합물 BOC-1 (3.3g, 11.7 mmol)를 사용하고, 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4,4'-dibromobiphenyl (2.49 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 161과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 Q-4 (3.7 g, 수율: 44 %)를 얻었다.

[1155] Mass (이론치: 718.24 g/mol, 측정치: 718 g/mol)

[1156]

[1157] [합성예 165] 화합물 Q-5의 합성

[1158]



Q-5

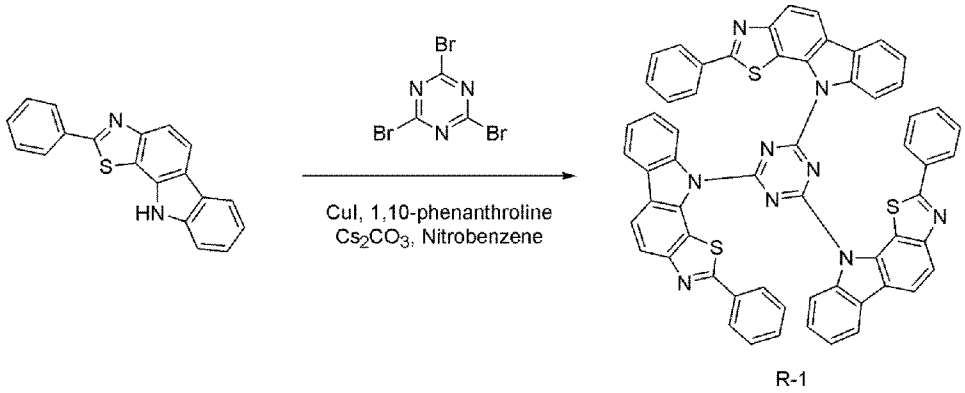
[1159] 합성예 161에서 사용된 화합물 BOC-1 (5.0 g, 17.6 mmol) 대신 화합물 BOC-1 (3.3g, 11.7 mmol)를 사용하고, 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1,3-dibromobenzene (1.88 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 161과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 Q-5 (3.5 g, 수율: 46 %)를 얻었다.

[1160] Mass (이론치: 642.21 g/mol, 측정치: 642 g/mol)

[1161]

[1162] [합성예 166] 화합물 R-1의 합성

[1163]



R-1

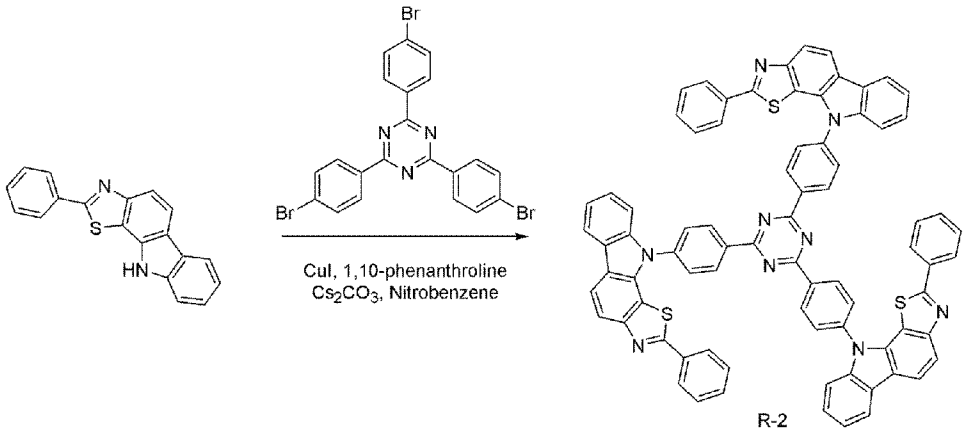
[1164] 질소 기류 하에서 준비예 8에서 합성된 화합물 BTC-1 (5.3 g, 17.6 mmol), 2,4,6-tribromo-1,3,5-triazine (2.5 g, 8.0 mmol), CuI (0.78 g, 1.76 mmol), 1,10-phenanthroline (0.62 g, 3.50 mmol), Cs_2CO_3 (11.37 g, 34.8 mmol) 및 nitrobenzene (70 ml)를 혼합하고 210 ℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 고체염을 필터링한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 R-1 (7.3 g, 수율: 44 %)을 얻었다.

[1165] Mass (이론치: 975.20 g/mol, 측정치: 975 g/mol)

[1166]

[1167] [합성예 167] 화합물 R-2의 합성

[1168]



R-2

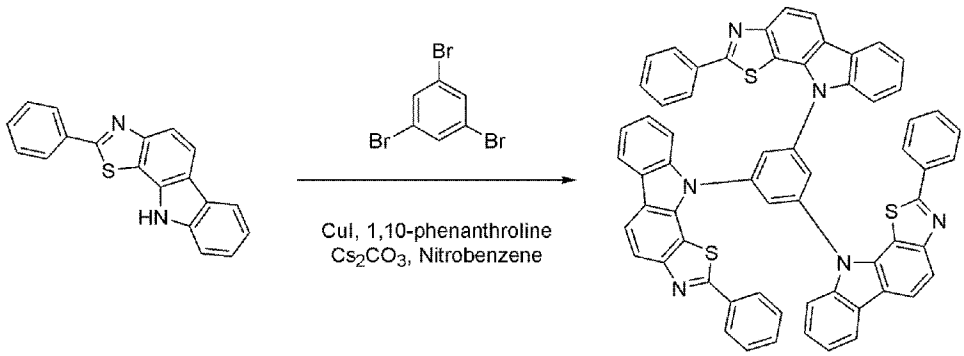
[1169] 합성예 166에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2,4,6-tris(4-bromophenyl)-1,3,5-triazine (4.36 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 166과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 R-2 (9.3 g, 수율: 45 %)를 얻었다.

[1170] Mass (이론치: 1203.30 g/mol, 측정치: 1203 g/mol)

[1171]

[1172] [합성예 168] 화합물 R-3의 합성

[1173]



R-3

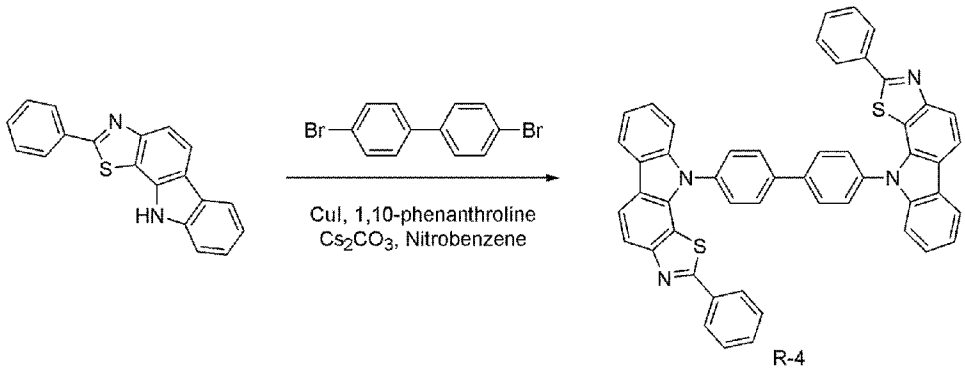
[1174] 합성예 166에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1,3,5-tribromobenzene (2.52 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 166과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 R-3 (7.6 g, 수율: 46 %)을 얻었다.

[1175] Mass (이론치: 972.22 g/mol, 측정치: 972 g/mol)

[1176]

[1177] [합성예 169] 화합물 R-4의 합성

[1178]



R-4

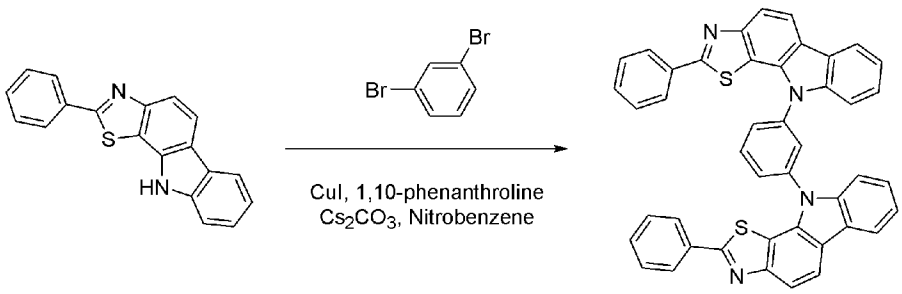
[1179] 합성예 166에서 사용된 화합물 BTC-1 (5.3 g, 17.6 mmol) 대신 화합물 BTC-1 (3.5g, 11.7 mmol)를 사용하고, 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 4,4'-dibromobiphenyl (2.49 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 166과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 R-4 (3.7 g, 수율: 43 %)를 얻었다.

[1180] Mass (이론치: 750.19 g/mol, 측정치: 750 g/mol)

[1181]

[1182] [합성예 170] 화합물 R-5의 합성

[1183]



R-5

[1184] 합성예 166에서 사용된 화합물 BTC-1 (5.3 g, 17.6 mmol) 대신 화합물 BTC-1 (3.5g, 11.7 mmol)를 사용하고, 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1,3-dibromobenzene (1.88 g, 8.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 166과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 R-5 (3.6 g, 수율: 47 %)를 얻었다.

[1185] Mass (이론치: 674.16 g/mol, 측정치: 674 g/mol)

[1186]

[1187] [실시예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제조

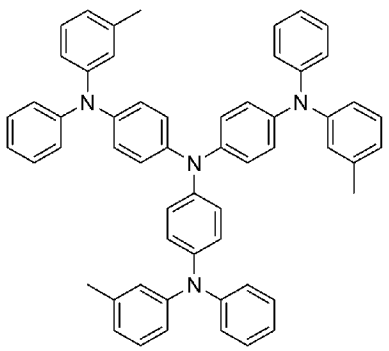
[1188] 합성예 1에서 합성된 화합물 A-1를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[1189] 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.

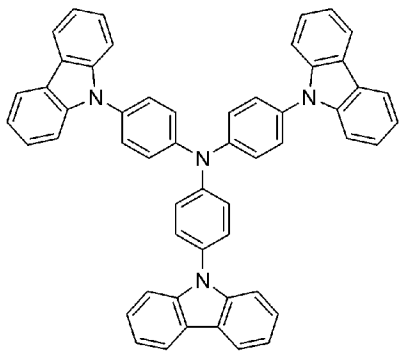
[1190] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 화합물 A-1 + 10 % $Ir(ppy)_3$ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[1191] m-MTDATA, TCTA, $Ir(ppy)_3$, 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[1192]

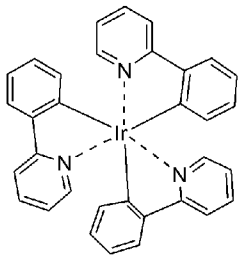


m-MTDATA

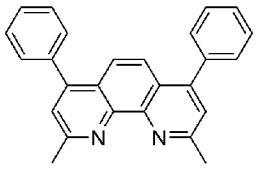


TCTA

[1193]



Ir(ppy)3



BCP

[1194] [실시예 2] 내지 [실시예 138] 녹색 유기 EL 소자의 제조

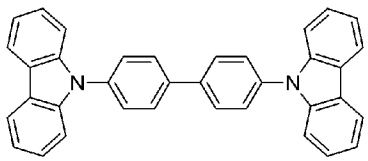
[1195] 실시예 1에서 발광층 형성시 발공 호스트 물질로서 사용된 화합물 A-1 대신 합성예 2 ~ 8, 11 ~ 18, 21 ~ 28, 31 ~ 38, 41 ~ 48, 51 ~ 58, 61 ~ 68, 71 ~ 78, 81 ~ 88, 91 ~ 98, 101 ~ 108, 111 ~ 118, 121 ~ 128, 131 ~ 138, 141 ~ 148, 151 ~ 158, 161 ~ 170에서 각각 합성된 화합물 A-2 ~ A-8, B-1 ~ B-8, C-1 ~ C-8, D-1 ~ D-8, E-1 ~ E-8, F-1 ~ F-8, G-1 ~ G-8, H-1 ~ H-8, I-1 ~ I-8, J-1 ~ J-8, K-1 ~ K-8, L-1 ~ L-8, M-1 ~ M-8, N-1 ~ N-8, O-1 ~ O-8, P-1 ~ P-8, Q-1 ~ Q-5, R-1 ~ R-5를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[1196]

[1197] [비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제조

[1198] 실시예 1에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 A-1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다. 사용된 CBP의 구조는 다음과 같다.

[1199]



CBP

[1200] [평가예 1]

[1201] 실시예 1 ~ 138, 및 비교예 1에서 각각 제조된 녹색 유기 EL 소자에 대하여 전류 밀도 10 mA/㎠에서의 구동 전압, 전류 효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[1202] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트 물질	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예-1	A-1	6.75	518	41.1
실시예-2	A-2	6.73	515	42
실시예-3	A-3	6.73	518	42.5
실시예-4	A-4	6.48	517	41.3
실시예-5	A-5	6.86	515	41.9
실시예-6	A-6	6.61	518	41.6
실시예-7	A-7	6.51	518	43
실시예-8	A-8	6.77	517	43.3
실시예-9	B-1	6.34	515	44.1
실시예-10	B-2	6.7	518	41.4
실시예-11	B-3	6.66	517	42.2
실시예-12	B-4	6.65	518	43.1
실시예-13	B-5	6.65	515	41.1
실시예-14	B-6	6.71	518	42
실시예-15	B-7	6.72	515	42.5
실시예-16	B-8	6.72	518	41.3
실시예-17	C-1	6.75	518	41.9
실시예-18	C-2	6.73	517	41.6
실시예-19	C-3	6.73	517	41.5
실시예-20	C-4	6.48	517	41.4
실시예-21	C-5	6.86	517	41.2
실시예-22	C-6	6.61	518	41.1
실시예-23	C-7	6.51	517	42.5
실시예-24	C-8	6.77	515	43.1
실시예-25	D-1	6.66	518	39.2
실시예-26	D-2	6.65	518	41.3
실시예-27	D-3	6.65	517	39.7
실시예-28	D-4	6.64	515	38.9

실시예-29	D-5	6.64	518	41.3
실시예-30	D-6	6.63	518	41.3
실시예-31	D-7	6.63	518	41.3
실시예-32	D-8	6.62	518	41.2
실시예-33	E-1	6.62	518	41.2
실시예-34	E-2	6.62	517	42.9
실시예-35	E-3	6.48	515	39.6
실시예-36	E-4	6.86	518	40.4
실시예-37	E-5	6.61	518	40.1
실시예-38	E-6	6.7	517	40.8
실시예-39	E-7	6.73	518	40.7
실시예-40	E-8	6.75	518	40.5
실시예-41	F-1	6.77	517	40.4
실시예-42	F-2	6.76	515	41.7
실시예-43	F-3	6.72	518	41.5
실시예-44	F-4	6.7	518	42.7
실시예-45	F-5	6.66	517	42.7
실시예-46	F-6	6.81	515	38.2
실시예-47	F-7	6.66	518	43.5
실시예-48	F-8	6.81	518	41.4
실시예-49	G-1	6.68	517	42.2
실시예-50	G-2	6.66	515	42
실시예-51	G-3	6.7	518	41.8
실시예-52	G-4	6.7	518	42
실시예-53	G-5	6.51	517	42.5
실시예-54	G-6	6.77	515	41.3
실시예-55	G-7	6.46	518	41.3
실시예-56	G-8	6.71	517	41.6
실시예-57	H-1	6.72	518	41.5
실시예-58	H-2	6.7	515	42.7
실시예-59	H-3	6.51	518	42.5

실시예-60	H-4	6.7	515	42
실시예-61	H-5	6.66	518	41.3
실시예-62	H-6	6.7	518	41.9
실시예-63	H-7	6.7	517	41.6
실시예-64	H-8	6.51	517	43
실시예-65	I-1	6.77	515	43.3
실시예-66	I-2	6.46	518	44.1
실시예-67	I-3	6.71	518	41.4
실시예-68	I-4	6.72	517	42.2
실시예-69	I-5	6.7	515	43.1
실시예-70	I-6	6.51	518	41.1
실시예-71	I-7	6.62	518	42
실시예-72	I-8	6.62	518	42.5
실시예-73	J-1	6.62	518	41.3
실시예-74	J-2	6.48	518	41.9
실시예-75	J-3	6.86	517	41.6
실시예-76	J-4	6.61	515	41.5
실시예-77	J-5	6.7	518	41.4

[1203] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-1 ~ A-8, B-1 ~ B-8, C-1 ~ C-8, D-1 ~ D-8, E-1 ~ E-8, F-1 ~ F-8, G-1 ~ G-8, H-1 ~ H-8, I-1 ~ I-8, J-1 ~ J-8, K-1 ~ K-8, L-1 ~ L-8, M-1 ~ M-8, N-1 ~ N-8, O-1 ~ O-8, P-1 ~ P-8, Q-1 ~ Q-5, R-1 ~ R-5)를 녹색 유기 EL 소자의 발광층 재료로 사용한 경우(실시예 1 ~ 138), 종래 CBP를 사용한 녹색 유기 EL 소자(비교예 1)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

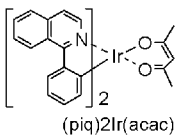
[1204]

[1205] [실시예 139] 적색 유기 EL 소자의 제조

[1206] 합성예 9에서 합성된 화합물 A-9를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[1207] 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.

[1208] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 화합물 A-9 + 10 % $(piq)_2Ir(acac)$ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 사용된 m-MTDATA, TCTA 및 BCP의 구조는 실시예 1에 기재된 바와 같고, $(piq)_2$ Ir(acac)의 구조는 다음과 같다.

[1209] 

(piq)2Ir(acac)

[1210] [실시예 140] 내지 [실시예 170] 적색 유기 EL 소자의 제조

[1211] 실시예 139에서 발광층의 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 A-9 대신 합성예 10, 19~20, 29~30, 39~40, 49~50, 59~60, 69~70, 79~80, 89~90, 99~100, 109~110, 119~120, 129~130, 139~140, 149~150, 159~160에서 각각 합성된 화합물 A-10, B-9 ~ B-10, C-9 ~ C-10, D-9 ~ D-10, E-9 ~ E-10, F-9 ~ F-10, G-9 ~ G-10, H-9 ~ H-10, I-9 ~ I-10, J-9 ~ J-10, K-9 ~ K-10, L-9 ~ L-10, M-9 ~ M-10, N-9 ~ N-10, O-9 ~ O-10, P-9 ~ P-10를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 139와 동일하게 수행하여 적색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[1212]

[1213] [비교예 2]

[1214] 실시예 139에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 상기 합성예 9의 화합물 A-9 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 139와 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 사용된 CBP의 구조는 비교예 1에 기재된 바와 같다.

[1215]

[1216] [평가예 2]

[1217] 실시예 139 ~ 170 및 비교예 2 에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류 밀도 10 mA/㎠에서의 구동 전압 및 전류 효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[1218] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트 물질	구동 전압(A)	전류 효율(cd/A)
실시예 139	A-9	4.51	12.8
실시예 140	A-10	4.66	11.9
실시예 141	B-9	4.75	9.6
실시예 142	B-10	4.52	7.8
실시예 143	C-9	4.87	13.6
실시예 144	C-10	4.56	12.4
실시예 145	D-9	4.65	8.6
실시예 146	D-10	4.78	8.9
실시예 147	E-9	4.91	13.7
실시예 148	E-10	4.55	12.1
실시예 149	F-9	4.67	9.1
실시예 150	F-10	4.87	9.2
실시예 151	G-9	4.35	11.5
실시예 152	G-10	4.55	11.8
실시예 153	H-9	4.65	9.6
실시예 154	H-10	4.85	9.7
실시예 155	I-9	4.76	11.3
실시예 156	I-10	4.55	11.9
실시예 157	J-9	4.33	8.9
실시예 158	J-10	4.52	8.7
실시예 159	K-9	4.51	13.2
실시예 160	K-10	4.82	12.7
실시예 161	L-9	4.53	9.6
실시예 162	L-10	4.55	8.9
실시예 163	M-9	4.32	11.9
실시예 164	M-10	4.74	13.2
실시예 165	N-9	4.76	9.9
실시예 166	N-10	4.64	10.1
실시예 167	O-9	4.55	12.7

실시예 168	O-10	4.68	13.1
실시예 169	P-9	4.35	10.1
실시예 170	P-10	4.65	9.2
비교예 2	CBP	5.25	8.2

[1219] 상기 표2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-9 ~ A-10, B-9 ~ B-10, C-9 ~ C-10, D-9 ~ D-10, E-9 ~ E-10, F-9 ~ F-10, G-9 ~ G-10, H-9 ~ H-10, I-9 ~ I-10, J-9 ~ J-10, K-9 ~ K-10, L-9 ~ L-10, M-9 ~ M-10, N-9 ~ N-10, O-9 ~ O-10, P-9 ~ P-10)을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료로 사용한 경우(실시예 139 ~ 170), 종래 CBP를 발광층 재료로 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(비교예2)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

산업상 이용가능성

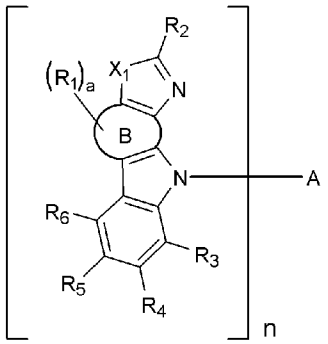
[1220] 본 발명에 따른 화합물은 내열성, 정공 주입능, 정공 수송능, 발광능 등이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료 또는 발광층 재료로 사용될 수 있다.

[1221] 또한, 본 발명에 따른 화합물을 정공 주입층, 정공 수송층 및/또는 발광층에 포함하는 유기 전계 발광 소자는 발광 성능, 구동 전압, 수명, 효율 등의 측면이 크게 향상될 수 있고, 따라서 풀 칼라 디스플레이 패널 등에 효과적으로 적용될 수 있다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



n은 1 내지 3의 정수이고;

n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

n이 2인 경우, A는 2가의 작용기로 C_1~C_{40}의 알킬렌기, C_3~C_{40}의 시클로알킬렌기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬렌기, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기, C_1~C_{40}의 알킬렌옥시기, C_6~C_{60}의 아릴렌옥시기, C_3~C_{40}의 알킬렌실릴기, C_6~C_{60}의 아릴렌실릴기, C_2~C_{40}의 알킬렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀옥사이드기, 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

n이 3인 경우, A는 3가의 작용기로 C_1~C_{40}의 알칸트라일기, C_3~C_{40}의 시클로알칸트라일기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알칸트라일기, C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기, C_1~C_{40}의 알칸트라일옥시기, C_6~C_{60}의 아릴트라일옥시기, C_3~C_{40}의 알칸트라일실릴기, C_6~C_{60}의 아릴트라일실릴기, C_2~C_{40}의 알칸트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀옥사이드기, C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기, C_6~C_{60}의 디아릴렌아민기, 및 C_6~C_{60}의 트리아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

B는 6원의 방향족환이며;

a는 0 내지 2의 정수로, a가 1 내지 2의 정수인 경우, R_1은 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, R_1이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

R_2 내지 R_6은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

X_1은 O 또는 S이며;

R_1 내지 R_6의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기, A의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기, 아릴아민기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 헤테로시클로알킬렌기, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬렌옥시기, 아릴렌옥시기, 알킬렌실릴기, 아릴렌실릴기, 알킬렌보론기, 아릴렌보론기, 아릴렌포스핀기, 아릴렌포스핀옥사이드기, 아릴렌아민기, 알칸트라일기, 시클로알칸트라일기, 헤테로시클로알칸트라일기, 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 알칸트라일옥시기, 아릴트라일옥시기, 알칸트라일실릴기, 아릴트라일실릴기, 알칸트라일보론기, 아릴트라일보론기, 아릴트라일포스핀기, 아릴트라일포스핀옥사이드기, 아릴트라일아민기, 디아릴렌아민기, 및 트리아릴렌아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의

아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

[청구항 2] 제1항에 있어서,

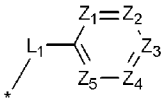
n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

이때 상기 A의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있는 것이 특징인 화합물.

[청구항 3] 제1항에 있어서,

n이 1인 경우, A는 1가의 작용기로, 하기 화학식 2로 표시되는 치환체인 것이 특징인 화합물:

[화학식 2]



(상기 화학식 2에서,

L_1은 단일결합이거나, 또는 C_6~C_{18}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

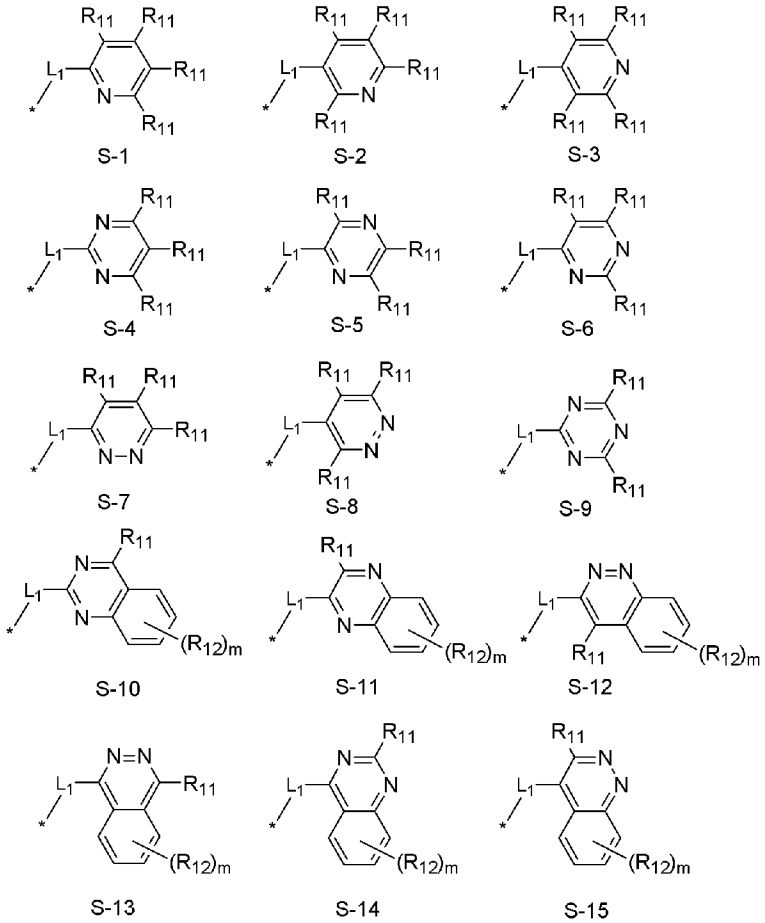
Z_1 내지 Z_5는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고,

상기 $C(R_{11})$이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며,

R_{11}은 수소, 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와

축합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
이때, 상기 R_{11}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음)

[청구항 4] 제3항에 있어서,
상기 화학식 2로 표시되는 치환체는 하기 화학식 S-1 내지 S-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:



(상기 화학식 S-1 내지 S-15에서,
L_1 및 R_{11}은 각각 제3항에서 정의한 바와 같고,
m은 0 내지 4의 정수로, m이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{12}는 중수소(D), 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 축합하여 축합고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{12}가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고;
이때, 상기 R_{12}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{40}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C_6~C_{40}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{40}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{40}의 아릴보론기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀기, C_6~C_{40}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{40}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

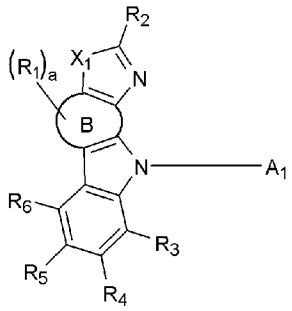
[청구항 5] 제1항에 있어서,
n이 2 인 경우, A는 2가의 작용기로, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되고,
n이 3인 경우, A는 3가의 작용기로, C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기, C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기, C_6~C_{60}의 디아릴렌아민기, 및 C_6~C_{60}의 트리아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되고,
상기 A의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 아릴렌아민기, 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 아릴트라일트리아민기, 디아릴렌아민기, 트리아릴렌아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}

의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있는 것이 특징인 화합물.

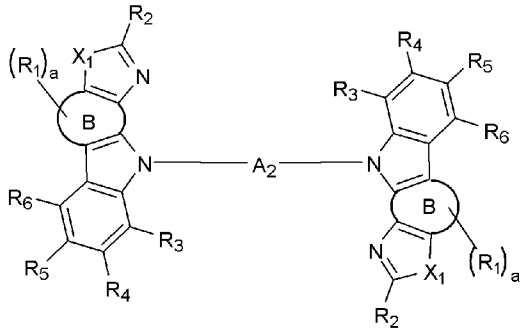
[청구항 6] 제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3 내지 5로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:

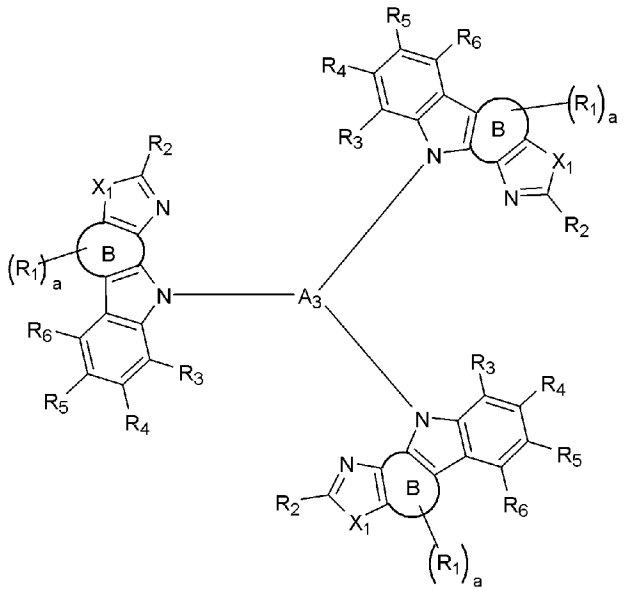
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



(상기 화학식 3 내지 5에서,

a, R_1 내지 R_6, B 및 X_1는 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,

A_1은 C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_3~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

A_2는 C_1~C_{40}의 알킬렌기, C_3~C_{40}의 시클로알킬렌기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬렌기, C_6~C_{60}의 아릴렌기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기, C_1~C_{40}의 알킬렌옥시기, C_6~C_{60}의 아릴렌옥시기, C_3~C_{40}의 알킬렌실릴기, C_6~C_{60}의 아릴렌실릴기, C_2~C_{40}의 알킬렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌보론기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴렌포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴렌아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

A_3은 C_1~C_{40}의 알칸트라일기, C_3~C_{40}의 시클로알칸트라일기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알칸트라일기, C_6~C_{60}의 아릴트라일기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴트라일기, C_1~C_{40}의 알칸트라일옥시기, C_6~C_{60}의 아릴트라일옥시기, C_3~C_{40}의 알칸트라일실릴기, C_6~C_{60}의 아릴트라일실릴기, C_2~C_{40}의 알칸트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일보론기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴트라일포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴트라일아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

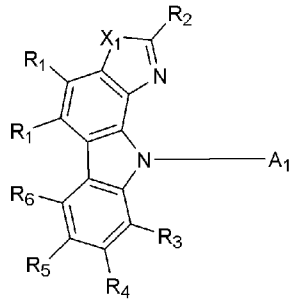
상기 A_1의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기,

헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기, A_2의 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 헤테로시클로알킬렌기, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬렌옥시기, 아릴렌옥시기, 알킬렌실릴기, 아릴렌실릴기, 알킬렌보론기, 아릴렌보론기, 아릴렌포스핀기, 아릴렌포스핀옥사이드기, 아릴렌아민기, A_3은 알칸트라일기, 시클로알칸트라일기, 헤테로시클로알칸트라일기, 아릴트라일기, 헤테로아릴트라일기, 알칸트라일옥시기, 아릴트라일옥시기, 알칸트라일실릴기, 아릴트라일실릴기, 알칸트라일보론기, 아릴트라일보론기, 아릴트라일포스핀기, 아릴트라일포스핀옥사이드기 및 아릴트라일아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, C_1~C_{40}의 알킬기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_2~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

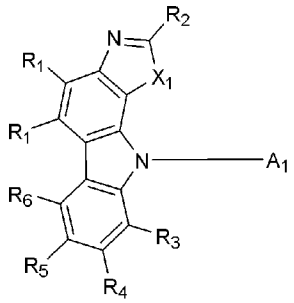
[청구항 7] 제6항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3a 내지 3f 로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:

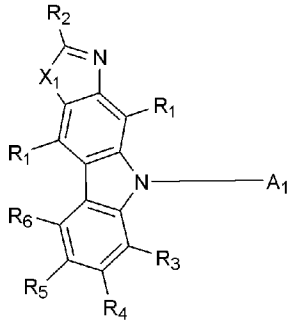
[화학식 3a]



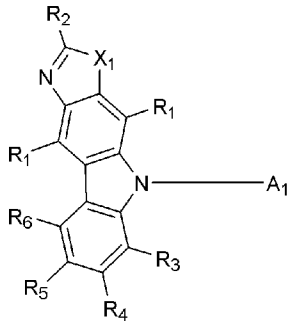
[화학식 3b]



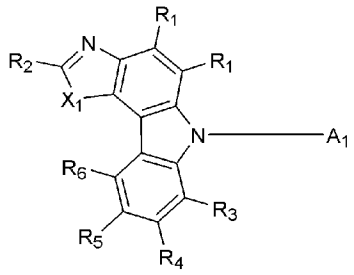
[화학식 3c]



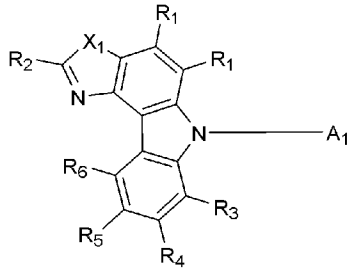
[화학식 3d]



[화학식 3e]



[화학식 3f]

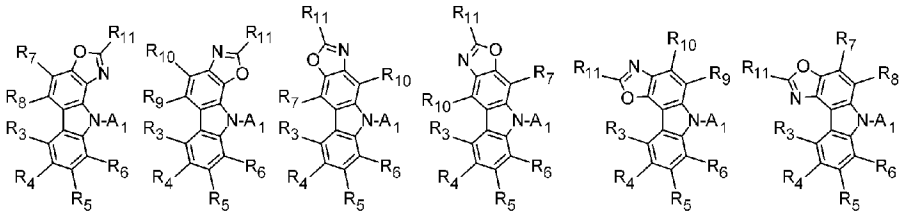


(상기 화학식 3a 내지 화학식 3f에서,

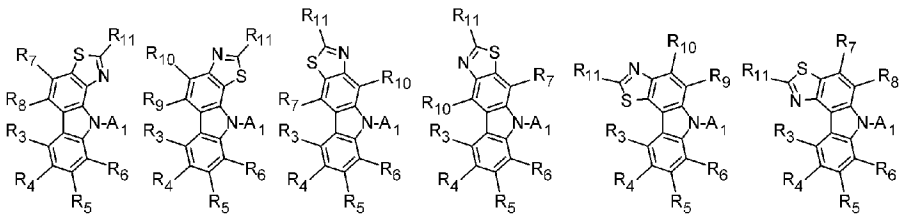
A_1, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 제6항에서 정의된 바와 같음).

[청구항 8] 제6항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-12로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:



1-1 1-2 1-3 1-4 1-5 1-6



1-7 1-8 1-9 1-10 1-11 1-12

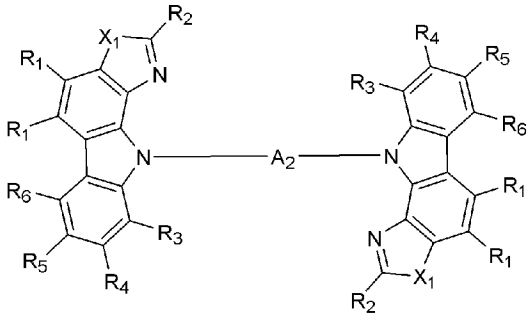
(상기 화학식 1-1 내지 1-12에서,

A_1, R_1 내지 R_6 및 X_1은 제6항에서 정의된 바와 같음).

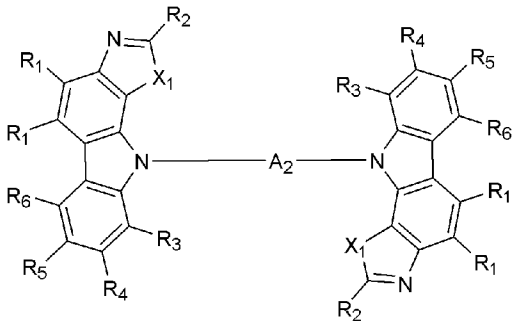
[청구항 9] 제6항에 있어서,

상기 화학식 4로 표시되는 화합물은 하기 화학식 4a 내지 4f로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:

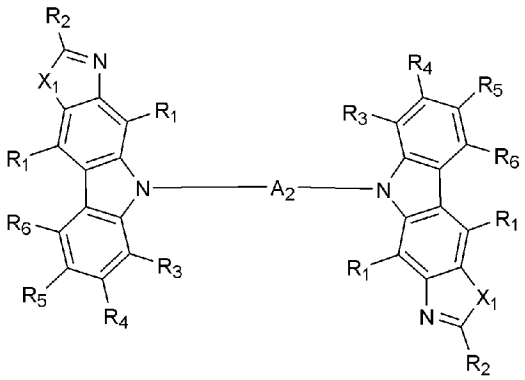
[화학식 4a]



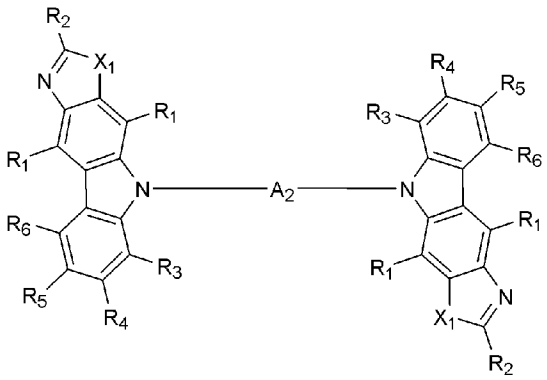
[화학식 4b]



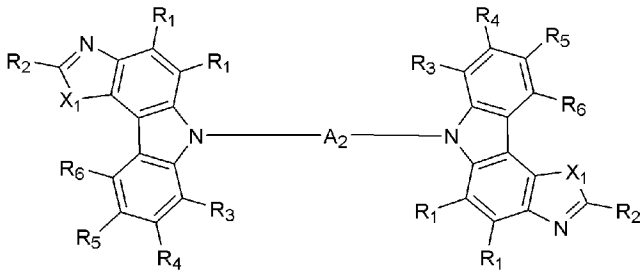
[화학식 4c]



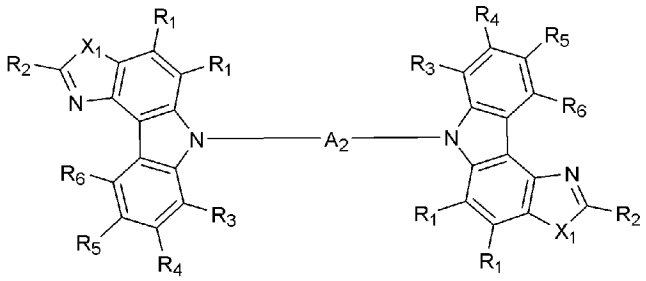
[화학식 4d]



[화학식 4e]



[화학식 4f]



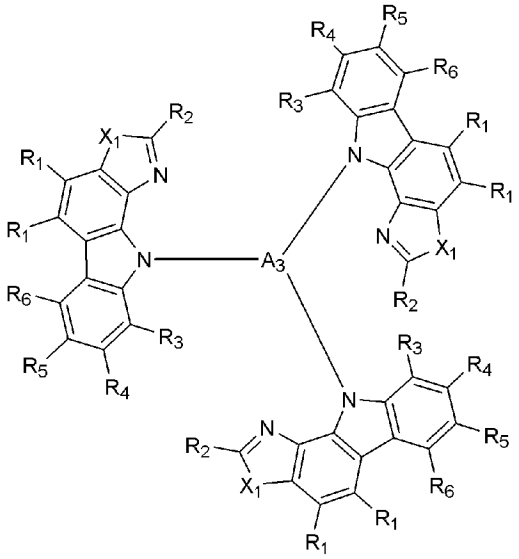
(상기 화학식 4a 내지 4f에서,

A_2, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 제6항에서 정의된 바와 같음).

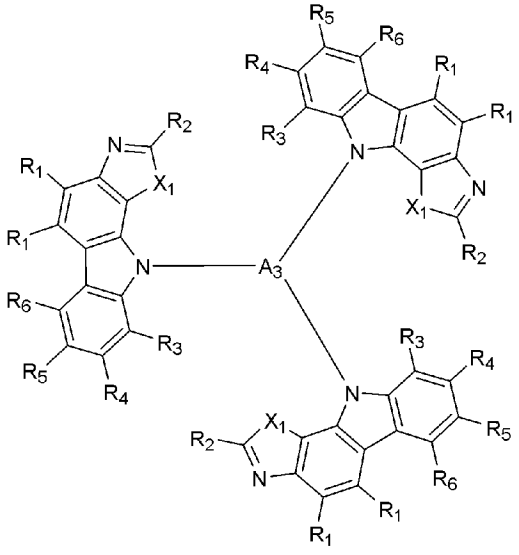
[청구항 10] 제6항에 있어서,

상기 화학식 5로 표시되는 화합물은 하기 화학식 5a 내지 5f로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:

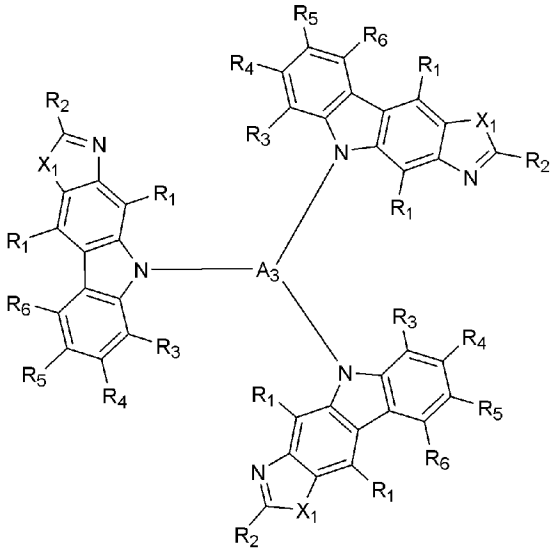
[화학식 5a]



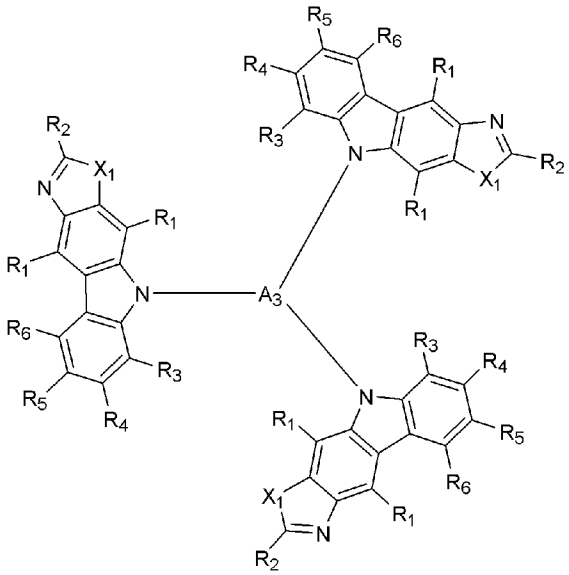
[화학식 5b]



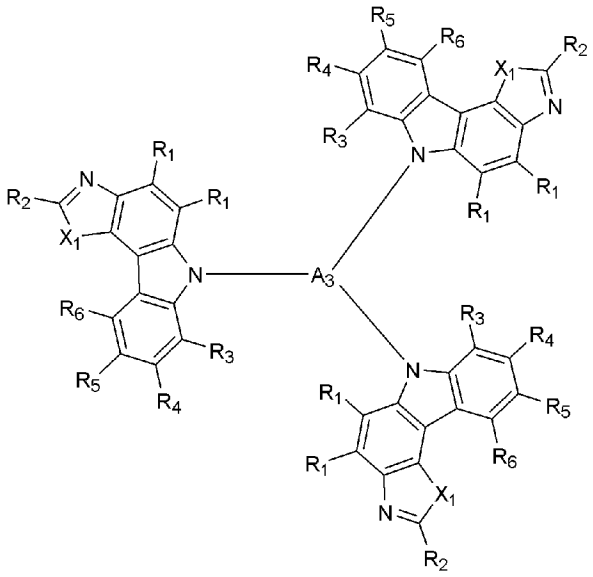
[화학식 5c]



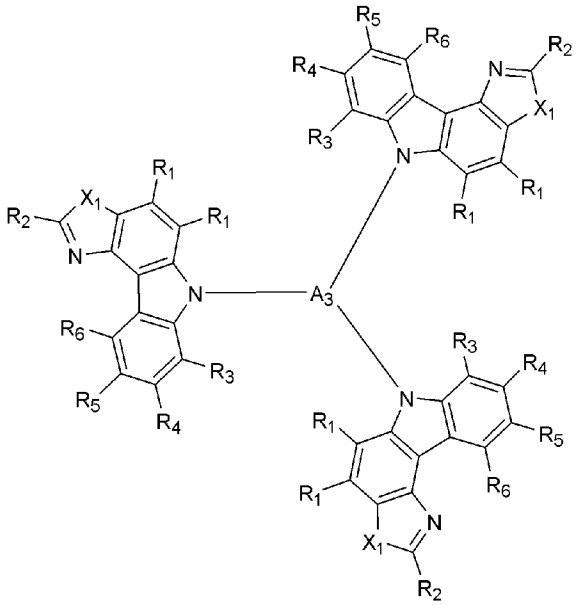
[화학식 5d]



[화학식 5e]



[화학식 5f]



(상기 화학식 5a 내지 5f에서,

A_3, R_1 내지 R_6 및 X_1은 각각 제6항에서 정의된 바와 같음).

[청구항 11] 양극, 음극 및 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 제10항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 12] 제11항에 있어서,

상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 13] 제11항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 인광 발광층인 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2014/007237

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 498/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 498/04; C08B 37/16; C07D 513/04; C09B 23/00; C07D 487/04; B41M 5/26; B41M 5/00; C09B 29/09; C07D 209/82; C07D 417/04; G01N 33/531; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: organic electroluminescence device, Perchem and STN structure search

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2000-273331 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 03 October 2000 See 1a and 1b of compound 15 of paragraphs [46] and [48]	1,2,6,7,8,11-13
A		3-5,9-10
A	JP 7051673 B2 (MITSUBISHI KASEI CORPORATION) 05 June 1995 See background technology of page 2 and first compound of page 5	1-13
A	JP 2000-321276 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 24 November 2000 See coloring matter compounds A, B and D of paragraph [23]	1-13
A	KR 10-2013-0064001 A (DOOSAN CORPORATION) 17 June 2013 See claims 1 to 14	1-13
PX	KR 10-2014-0007610 A (DOOSAN CORPORATION) 20 January 2014 See claims 1 to 9	1-4,6-8,11-13
PX	KR 10-2014-0006201 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 16 January 2014 See claims 1 to 8	1-4,6-8,11-13

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
19 SEPTEMBER 2014 (19.09.2014)	**22 SEPTEMBER 2014 (22.09.2014)**

Name and mailing address of the ISA/**KR**
Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea
Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

International application No.
PCT/KR2014/007237

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 2000-273331 A	03/10/2000	JP 4059585 B2	12/03/2008
JP 7051673 B2	05/06/1995	EP 0483382 A1	06/05/1992
		EP 0483382 B1	09/08/1995
		KR 10-0159908 B1	18/02/1999
		US 05298608 A	29/03/1994
		WO 91-18057 A1	28/11/1991
JP 2000-321276 A	24/11/2000	NONE	
KR 10-2013-0064001 A	17/06/2013	KR 10-2014-0107164 A	04/09/2014
		WO 2013-085339 A2	13/06/2013
		WO 2013-085339 A3	13/06/2013
KR 10-2014-0007610 A	20/01/2014	WO 2014-010810 A1	16/01/2014
KR 10-2014-0006201 A	16/01/2014	WO 2014-003336 A1	03/01/2014

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2014/007237

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 498/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 498/04; C08B 37/16; C07D 513/04; C09B 23/00; C07D 487/04; B41M 5/26; B41M 5/00; C09B 29/09; C07D 209/82; C07D 417/04; G01N 33/531; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

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

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 유기전계발광소자, Perchem 및 STN 구조검색

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	JP 2000-273331 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 2000.10.03 단락 [46] 및 [48]의 화합물 15의 1a와 1b 참조	1,2,6,7,8,11-13
A		3-5,9-10
A	JP 7051673 B2 (MITSUBISHI KASEI CORPORATION) 1995.06.05 2쪽의 배경기술 및 5쪽의 첫번째 화합물 참조	1-13
A	JP 2000-321276 A (FUJI PHOTO FILM CO LTD) 2000.11.24 단락 [23]의 색소 A, B 및 D 화합물 참조	1-13
A	KR 10-2013-0064001 A (주식회사 두산) 2013.06.17 청구항 1 내지 14 참조	1-13
PX	KR 10-2014-0007610 A (주식회사 두산) 2014.01.20 청구항 1 내지 9 참조	1-4,6-8,11-13
PX	KR 10-2014-0006201 A (덕산하이메탈(주)) 2014.01.16 청구항 1 내지 8 참조	1-4,6-8,11-13

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

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

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

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

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

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

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

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

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일
2014년 09월 19일 (19.09.2014)	2014년 09월 22일 (22.09.2014)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관
김현숙
전화번호 +82-42-481-5436

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2014/007237

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2000-273331 A	2000/10/03	JP 4059585 B2	2008/03/12
JP 7051673 B2	1995/06/05	EP 0483382 A1	1992/05/06
		EP 0483382 B1	1995/08/09
		KR 10-0159908 B1	1999/02/18
		US 05298608 A	1994/03/29
		WO 91-18057 A1	1991/11/28
JP 2000-321276 A	2000/11/24	없음	
KR 10-2013-0064001 A	2013/06/17	KR 10-2014-0107164 A	2014/09/04
		WO 2013-085339 A2	2013/06/13
		WO 2013-085339 A3	2013/06/13
KR 10-2014-0007610 A	2014/01/20	WO 2014-010810 A1	2014/01/16
KR 10-2014-0006201 A	2014/01/16	WO 2014-003336 A1	2014/01/03