



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2008년05월07일
(11) 등록번호 10-0827917
(24) 등록일자 2008년04월29일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) C07C 11/00 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2006-0114089

(22) 출원일자 2006년11월17일

심사청구일자 2006년11월17일

(65) 공개번호 10-2007-0053148

(43) 공개일자 2007년05월23일

(30) 우선권주장

1020050111004 2005년11월18일 대한민국(KR)

1020060044097 2006년05월17일 대한민국(KR)

(56) 선행기술조사문헌

KR1020050000520 A

KR1020030014927 A

KR1020020070333 A

US20050089715 A1

전체 청구항 수 : 총 20 항

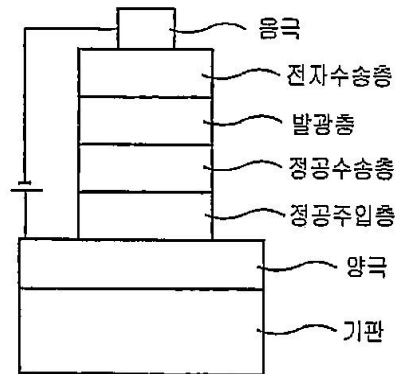
심사관 : 손창호

(54) 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공한다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

홍성길

대전 유성구 도룡동 LG사원아파트 7동 302호

여성진

대전 서구 월평동 218번지 주공아파트 203동 1302호

전상영

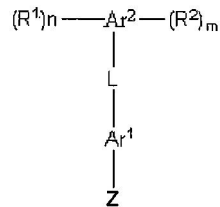
대전 유성구 도룡동 386-1 LG화학사원기숙사 3-215

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]

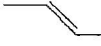
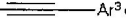


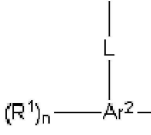
상기 화학식 1에서,

Ar^1 은 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 아릴렌기이며,

Ar^2 는 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기로서, $-(R^1)_n$, $-(R^2)_m$ 및 L과 결합된 위치 이외의 위치는 수소원자를 갖고,

L은 직접 결합; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 아릴렌기; 또는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴렌기이며,

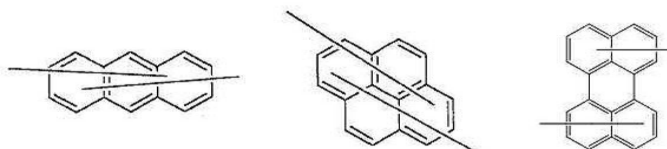
R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로  Ar^3 또는  Ar^3 이고, 이들은 Ar^2 가 C_6 의 아릴기인 경우 L에 대하여 para 위치에 위치하지 않고, 여기서 Ar^3 는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기; 또는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기이고,

Z 은 수소원자,  $(R^1)_n - Ar^2 - (R^2)_m$; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기

C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 또는 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기이며,

n 및 m은 각각 0 내지 3의 정수이며, n+m≥1 이다.

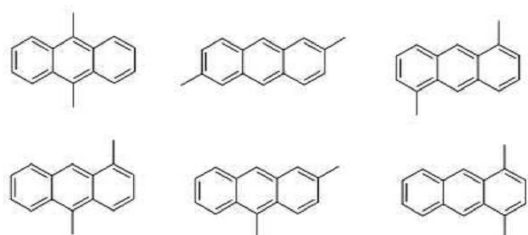
청구항 2



청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 Ar¹은 이루어진 군으로부터 선택된 기로서, 이들 기는 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환될 수 있는 것인 화합물.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 Ar¹은 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 하기 구조식의 안트라세닐렌기로부터 선택되는 것인 화합물:



청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 Ar²은 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기 및 안트라센기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 화합물.

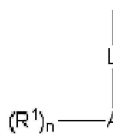
청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 L은 직접 결합이거나, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프탈렌기, 피리딜렌기, 비피리딜렌기, 카바졸렌기, 티오펜렌기, 퀴놀리렌기 및 이소퀴놀리렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 Ar³는 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이렌닐기, 페릴레닐기, 피리딜기, 비피리딜기, 카바졸기, 티오펜닐기, 퀴놀리닐기 및 이소퀴놀리닐기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 7

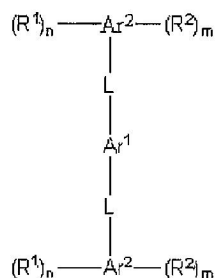


청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1 중 Z는 수소원자, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트라닐기, 파이렌닐기, 페릴레닐기, 피리딜기, 비피리딜기, 카바졸기, 티오펜닐기, 퀴놀리닐기 및 이소퀴놀리닐기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 8

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2의 화합물인 것인 화합물:

[화학식 2]

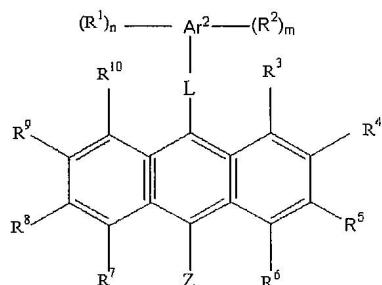


상기 화학식 2에서, Ar^1 , Ar^2 , L, R^1 , R^2 , n 및 m은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

청구항 9

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3의 화합물인 것인 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에 있어서,

Ar^2 , L, R^1 , R^2 , n, m 및 Z는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

R^3 내지 R^{10} 은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.

청구항 10

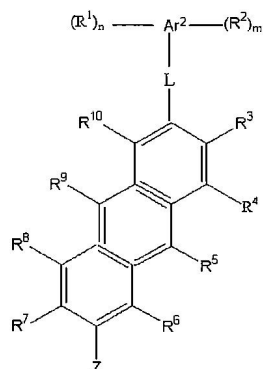
청구항 9에 있어서, R^3 , R^5 내지 R^7 , R^9 및 R^{10} 은 수소원자이고, R^4 및 R^8 은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된

치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5\sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 11

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 4의 화합물인 것인 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에 있어서,

Ar^2 , L, R^1 , R^2 , n, m 및 Z는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

R^3 내지 R^{10} 은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5\sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.

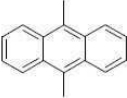
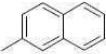
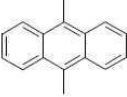
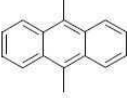
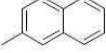
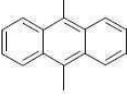
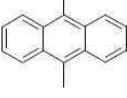
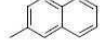
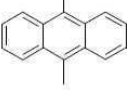
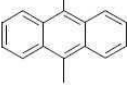
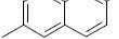
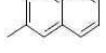
청구항 12

청구항 11에 있어서, R^3 , R^4 , R^6 내지 R^8 및 R^{10} 은 수소원자이고, R^5 및 R^9 는 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5\sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 13

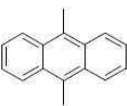
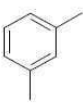
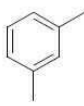
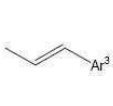
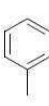
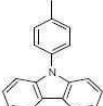
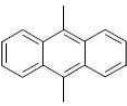
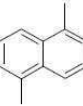
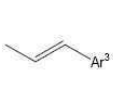
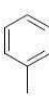
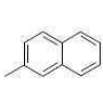
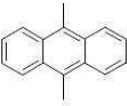
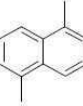
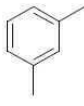
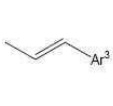
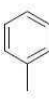
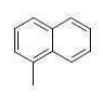
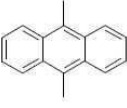
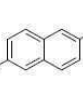
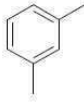
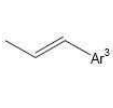
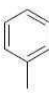
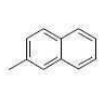
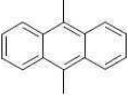
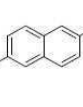
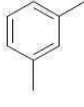
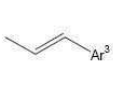
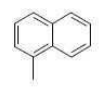
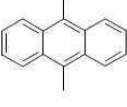
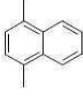
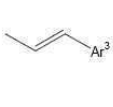
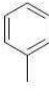
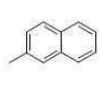
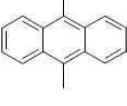
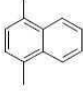
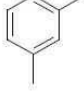
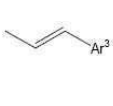
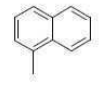
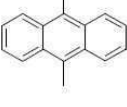
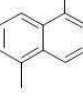
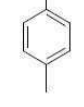
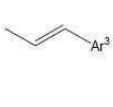
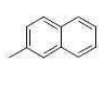
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 화학식 1에서 $m=0$ 이면서 비대칭 구조를 갖는 하기 표 1에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

[표 1]

	Ar^1	L	Ar^2	R^1	Ar^3	Z
1		직접결합				
2		직접결합				
3		직접결합				
4		직접결합				
5		직접결합				
6		직접결합				
7		직접결합				

8		직접결합				
9		직접결합				
10		직접결합				
11		직접결합				
12						
13						
14						
15						

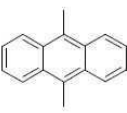
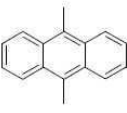
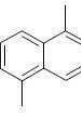
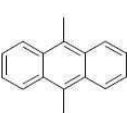
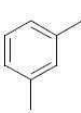
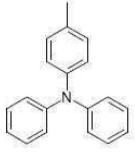
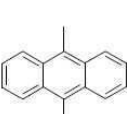
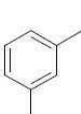
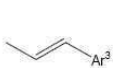
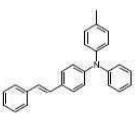
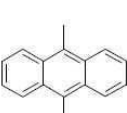
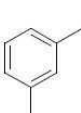
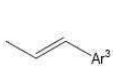
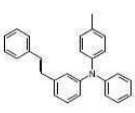
16						
17						
18						
19						
20						
21						
22						
23						

24						
25						
26						
27						
28						
29						
30						
31						

32						
33						
34						
35						
36						
37						
38						
39						

40						
41						
42						
43						
44						
45						
46						
47						

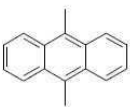
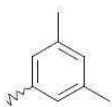
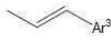
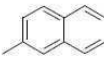
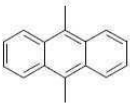
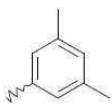
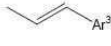
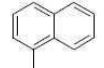
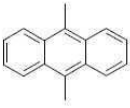
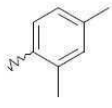
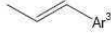
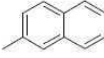
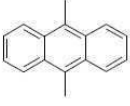
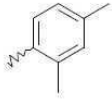
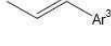
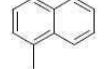
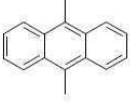
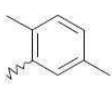
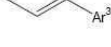
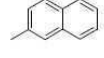
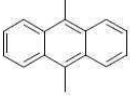
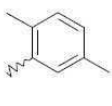
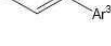
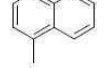
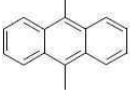
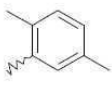
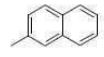
48						
49						
50		직접결합				
51		직접결합				
52		직접결합				
54		직접결합				
55		직접결합				

56						
57						
58		직접결합				
59		직접결합				
60		직접결합				

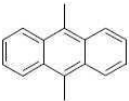
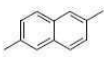
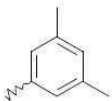
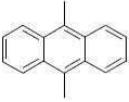
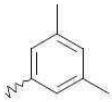
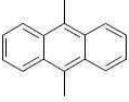
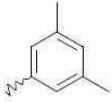
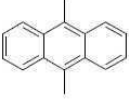
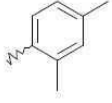
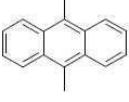
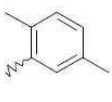
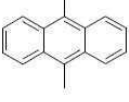
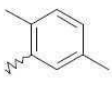
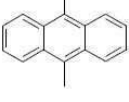
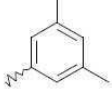
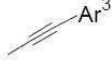
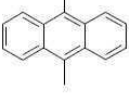
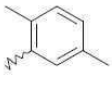
청구항 14

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 화학식 1에서 n 및 m이 0이 아니면서 비대칭 구조를 갖는 하기 표 2에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

[표 2]

	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 및 R ²	Ar ³	Z
61		직접결합				
62		직접결합				
63		직접결합				
64		직접결합				
65		직접결합				
66		직접결합				
67		직접결합				

68						
69						
70						
71						
72						
73						
74						
75						

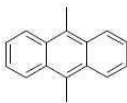
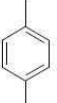
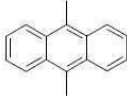
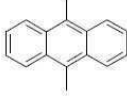
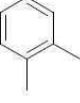
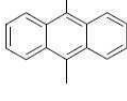
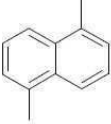
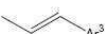
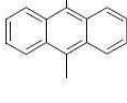
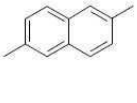
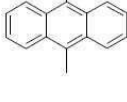
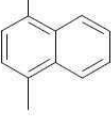
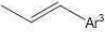
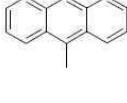
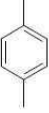
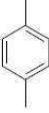
76						
77						
78		직접결합				
79		직접결합				
80		직접결합				
81		직접결합				
82						
83						

84						
85						
86						
87						
88						
표의 Ar ² 중 는 L 이 결합되는 부위의 표시임.						

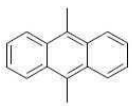
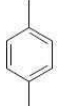
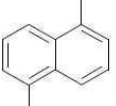
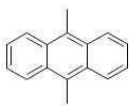
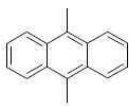
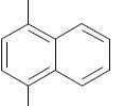
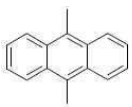
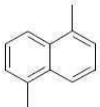
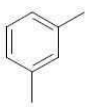
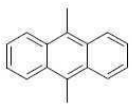
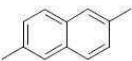
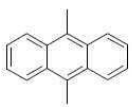
청구항 15

청구항 8에 있어서, 상기 화학식 2의 화합물은 상기 화학식 2에서 $n+m=1$ 이면서 대칭 구조를 갖는 하기 표 3에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

[표 3]

	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 또는 R ²	Ar ³
89		직접결합			
90		직접결합			
91		직접결합			
92		직접결합			
93		직접결합			
94		직접결합			
95					

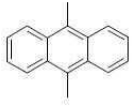
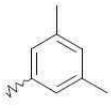
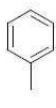
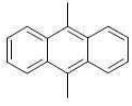
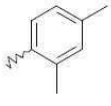
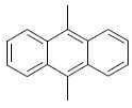
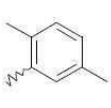
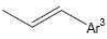
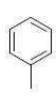
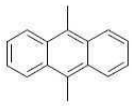
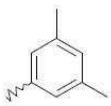
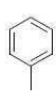
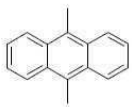
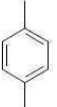
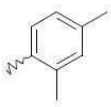
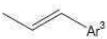
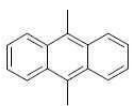
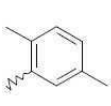
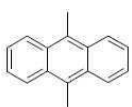
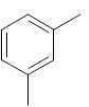
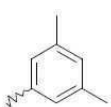
96					
97					
98					
99					
100					
101					
102					
103					

104					
105					
106					
107					
108					
109					

청구항 16

청구항 8에 있어서, 상기 화학식 2의 화합물은 상기 화학식 2에서 $n=1$ 이고 $m=1$ 이면서 대칭 구조를 갖는 하기 표 4에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

[표 4]

	Ar ¹	L	Ar ₂	R ¹ 및 R ²	Ar ³
110		직접결합			
111		직접결합			
112		직접결합			
113					
114					
115					
116					

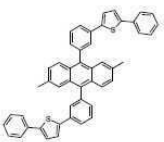
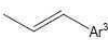
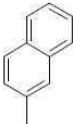
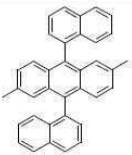
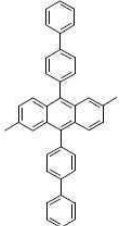
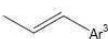
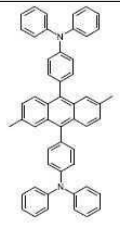
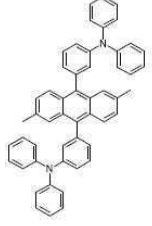
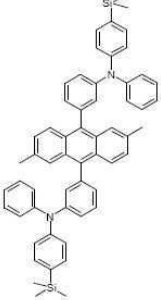
117					
118					
119					
120					
121					
122					
123					
표의 Ar² 중 는 L 이 결합되는 부위의 표시임.					

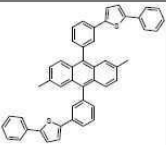
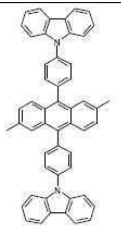
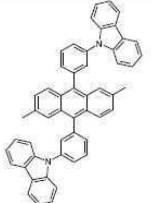
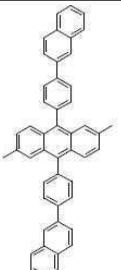
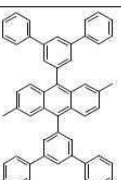
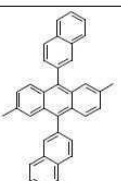
청구항 17

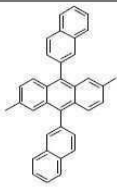
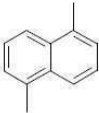
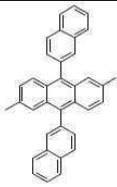
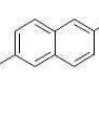
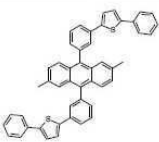
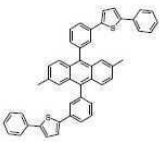
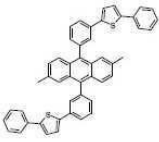
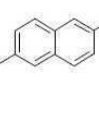
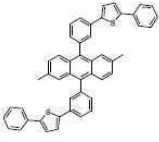
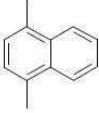
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 화학식 1에서 $m=0$ 이고, Ar^1 이 치환기를 갖으며, 비대칭 구조를 갖는 하기 표 5에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

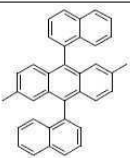
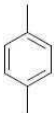
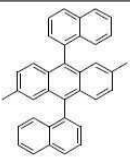
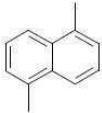
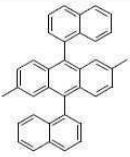
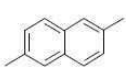
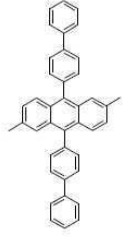
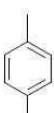
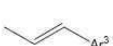
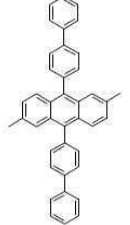
[표 5]

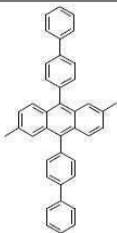
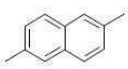
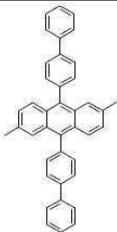
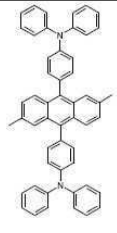
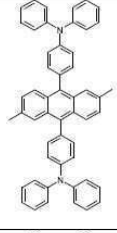
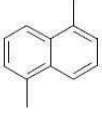
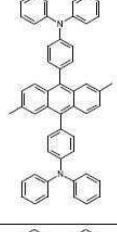
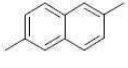
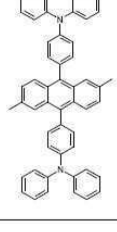
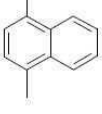
	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹	Ar ³	Z
124		직접결합				H
125		직접결합				H
126		직접결합				H
127		직접결합				H
128		직접결합				H
129		직접결합				H

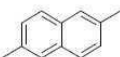
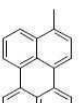
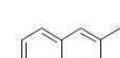
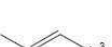
130		직접결합				H
131		직접결합				H
132		직접결합				H
133		직접결합				H
134		직접결합				H
135		직접결합				H

136		직접결합				H
137		직접결합				H
138		직접결합				H
139		직접결합				H
140		직접결합				H
141						H

142						H
143						H
145						H
146						H
147						H
148						H

149						H
150						H
151						H
152						H
153						H
154						H

155						H
156						H
157						H
158						H
159						H
160						H

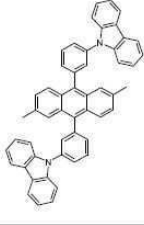
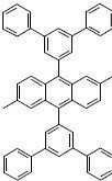
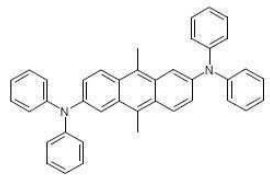
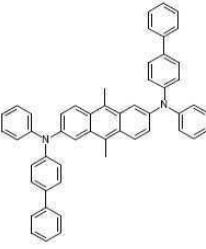
161		직접결합				H
162						H
163		직접결합				H
164						H

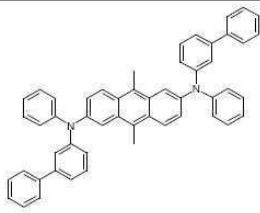
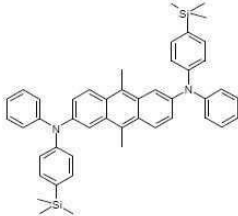
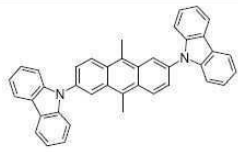
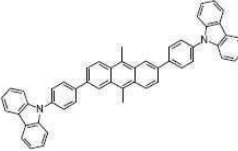
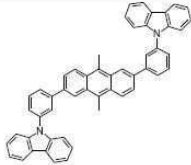
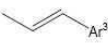
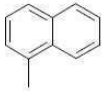
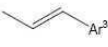
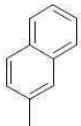
청구항 18

청구항 8에 있어서, 상기 화학식 2의 화합물은 상기 화학식 2에서 $n+m=1$ 이고, Ar^1 이 치환기를 갖으며, 대칭 구조를 갖는 하기 표 6에 기재된 화합물 중에서 선택되는 것인 화합물:

[표 6]

화합물	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 또는 R ²	Ar ³
165		직접결합			
166		직접결합			
167		직접결합			
168		직접결합			
169		직접결합			

170		직접결합			
171		직접결합			
172		직접결합			
173		직접결합			
174		직접결합			
175		직접결합			

176		직접 결합			
177		직접 결합			
178		직접 결합			
179		직접 결합			
180		직접 결합			
181		직접 결합			
182		직접 결합			
183		직접 결합			

184		직접 결합			
185		직접 결합			
186		직접 결합			
187					
188					
189					
190					
191					
191					

192					
193					
194					
195		직접 결합			
196		직접 결합			
197		직접 결합			
198		직접 결합			
199		직접 결합			
200		직접 결합			
201					

202					
203					
204					
205					
206					
207					
208					
209					
210		직접 결합			
211					
212		직접 결합			
213					

청구항 19

제 1 전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 청구항 1 내지 청구항 18 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 20

청구항 19에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 청구항 1 내지 청구항 18 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

명세서

발명의 상세한 설명

발명의 목적

발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술

- <2> 본 발명은 신규한 구조의 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자에 관한 것이다.
- <3> 본 출원은 2005년 11월 18일 및 2006년 5월 17일에 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2005-111004호 및 제10-2006-0044097호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- <4> 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.
- <5> 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광 색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료가 있다.
- <6> 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트 보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- <7> 진술한 유기발광소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

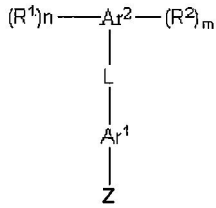
발명이 이루고자 하는 기술적 과제

- <8> 본 발명자들은 신규한 구조의 발광 물질을 밝혀내었으며, 또한 이 발광 물질이 유기발광소자에서 유기물층 재료, 특히 발광 물질로서 효율적으로 역할을 할 수 있다는 사실을 밝혀내었다.
- <9> 이에 본 발명은 신규한 구조의 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

발명의 구성 및 작용

<10> 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

화학식 1



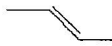
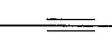
<11>

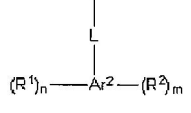
<12> 상기 화학식 1에서,

<13> Ar^1 은 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 아릴렌기이며,

<14> Ar^2 는 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기로서, $-(R^1)_n$, $-(R^2)_m$ 및 L과 결합된 위치 이외의 위치는 수소원자를 갖고,

<15> L은 직접 결합; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 아릴렌기; 또는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴렌기이며,

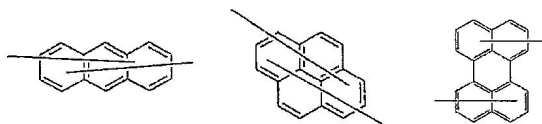
<16> R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 - Ar^3 또는 - Ar^3 , 이고, 이들은 Ar^2 가 C_6 의 아릴기인 경우 L에 대하여 파라 위치에 위치하지 않고, 여기서 Ar^3 는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기; 또는 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기이고,

<17> Z은 수소원자, ; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기; $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기;

또는 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환된 또는 비치환된 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기이며,

<18> n 및 m은 각각 0 내지 3의 정수이며, n+m≥1 이다.

<19> 상기 화학식 1의 화합물에서, Ar¹은

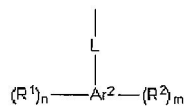


<20> 로 이루어진 군으로부터 선택된 기인 것이 바람직하며, 이들은 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환될 수 있다.

<21> 상기 화학식 1의 화합물에서, Ar²는 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기 또는 안트라센기인 것이 바람직하다.

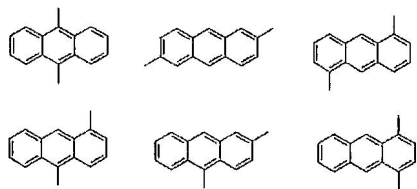
<22> 상기 화학식 1의 화합물에서, L은 직접 결합이거나, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프탈렌기와 같은 아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 피리딜렌기, 비피리딜렌기, 카바졸렌기, 티오펜렌기, 퀴놀리렌기, 이소퀴놀리렌기 등의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

<23> 상기 화학식 1의 화합물에서, Ar³는 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이렌닐기, 페릴레닐기 등의 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 피리딜기, 비피리딜기, 카바졸기, 티오펜닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.



<24> 상기 화학식 1의 화합물에서, Z는 수소원자, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이렌닐기, 페릴레닐기 등의 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 피리딜기, 비피리딜기, 카바졸기, 티오펜닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

<25> 상기 화학식 1의 화합물에서, Ar¹은 하기 구조식으로 표시되는 안트라세닐렌기로부터 선택되는 것이 더욱 바람직하며, 이들 기는 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환될 수 있다.



<26> 본 발명에서 사용되는 치환기들의 정의는 하기와 같다.

<27>

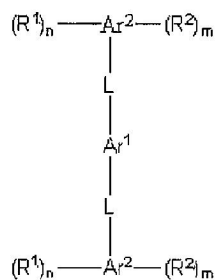
<28> 상기 알킬기는 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기 및 헵틸기로 이루어진 군으로부터 선택되며, 이들에 한정되지 않는다.

<29> 상기 알케닐기는 탄소수 2 내지 20인 것이 바람직하며, 구체적인 예로는 메테닐기, 에테닐기, 프로필레닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

<30> 상기 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 20의 입체적 방해를 주지 않는 것이 바람직하며, 구체적인 예로는 시클로펜틸기 또는 시클로헥실기가 더욱 바람직하나, 이들에 한정되지 않는다.

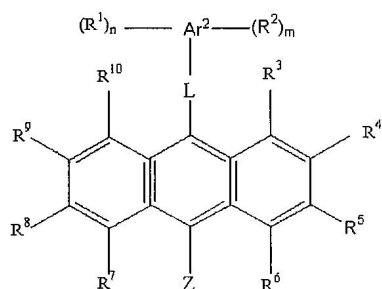
- <31> 상기 아릴기는 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 비페닐기, 파이레닐기 및 페릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 포함하나 이들에 한정되지 않는다.
- <32> 상기 헤테로아릴기는 피리딜기, 비피리딜기, 아크리딜기, 티오펜기, 이미다졸기, 옥사졸기, 티아졸기 및 퀴놀리닐기로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 포함하나 이들에 한정되지 않는다.
- <33> 상기 아릴아민기는 C₆~C₂₀의 아릴기로 치환된 아민기인 것이 바람직하며, 상기 아릴기는 아릴알케닐기로 치환될 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- <34> 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 화합물일 수 있다.

화학식 2



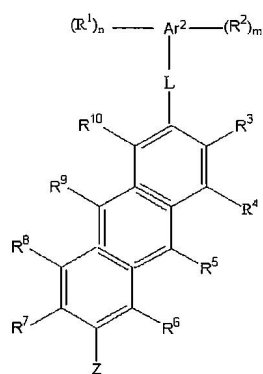
- <35>
- <36> 상기 화학식 2에서, Ar¹, Ar², L, R¹, R², n 및 m은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.
- <37> 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 화합물일 수 있다.

화학식 3



- <38>
- <39> 상기 화학식 3에 있어서,
- <40> Ar², L, R¹, R², n, m 및 Z는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,
- <41> R³ 내지 R¹⁰은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁~C₂₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₂₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₂₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₂₀의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.
- <42> 상기 화학식 3에 있어서, R³, R⁵ 내지 R⁷, R⁹ 및 R¹⁰은 수소원자이고, R⁴ 및 R⁸은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁~C₂₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₂₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₂₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₂₀의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₂₀의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅~C₂₀의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.
- <43> 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 4로 표시되는 화합물일 수 있다.

화학식 4



<44>

<45> 상기 화학식 4에 있어서,

<46> Ar^2 , L, R^1 , R^2 , n, m 및 Z는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

<47> R^3 내지 R^{10} 은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5\sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.

<48> 상기 화학식 4에 있어서, R^3 , R^4 , R^6 내지 R^8 및 R^{10} 은 수소원자이고, R^5 및 R^9 은 서로 같거나 상이하고, 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_5\sim C_{20}$ 의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

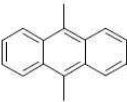
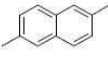
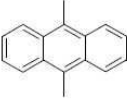
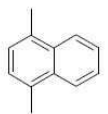
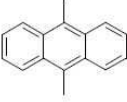
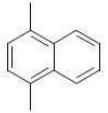
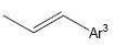
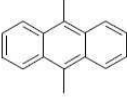
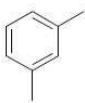
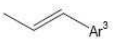
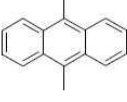
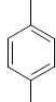
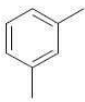
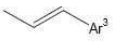
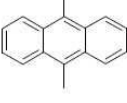
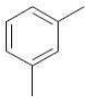
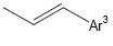
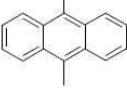
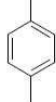
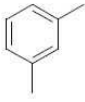
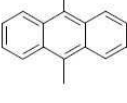
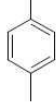
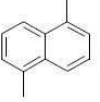
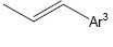
<49> 상기 화학식 1의 화합물의 구체적인 예는 하기 표 1 내지 표 6에 나타내었으며, 이에 한정되지는 않는다.

<50> 하기 표 1은 화학식 1에서 $m=0$ 이면서 비대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

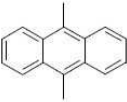
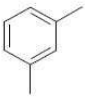
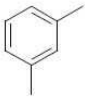
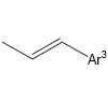
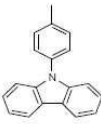
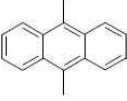
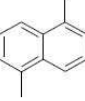
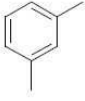
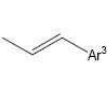
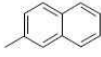
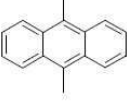
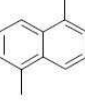
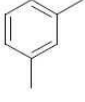
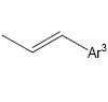
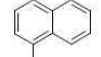
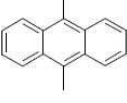
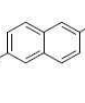
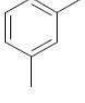
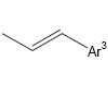
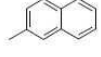
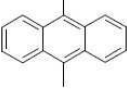
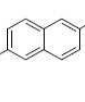
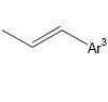
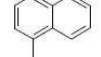
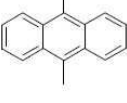
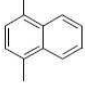
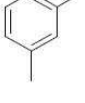
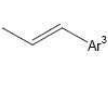
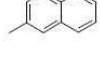
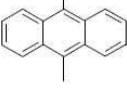
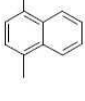
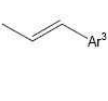
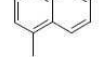
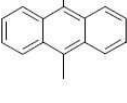
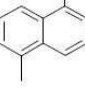
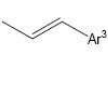
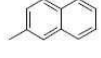
표 1

	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹	Ar ³	Z
1		직접결합				
2		직접결합				
3		직접결합				
4		직접결합				
5		직접결합				
6		직접결합				
7		직접결합				

<51>

8		직접결합				
9		직접결합				
10		직접결합				
11		직접결합				
12						
13						
14						
15						

16						
17						
18						
19						
20						
21						
22						
23						

24						
25						
26						
27						
28						
29						
30						
31						

32						
33						
34						
35						
36						
37						
38						
39						

40						
41						
42						
43						
44						
45						
46						
47						

48						
49						
50		직접결합				
51		직접결합				
52		직접결합				
54		직접결합				
55		직접결합				

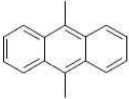
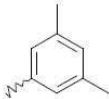
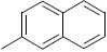
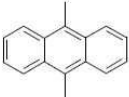
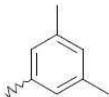
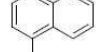
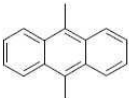
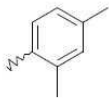
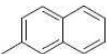
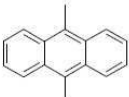
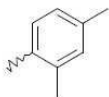
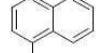
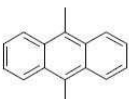
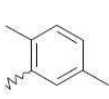
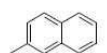
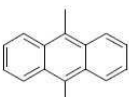
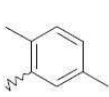
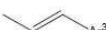
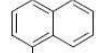
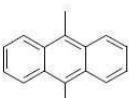
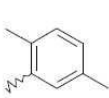
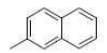
56						
57						
58		직접결합				
59		직접결합				
60		직접결합				

<58>

<59>

하기 표 2는 화학식 1에서 n 및 m이 0이 아니면서 비대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

표 2

	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 및 R ²	Ar ³	Z
61		직접결합				
62		직접결합				
63		직접결합				
64		직접결합				
65		직접결합				
66		직접결합				
67		직접결합				

<60>

<61>

삭제

68						
69						
70						
71						
72						
73						
74						
75						

76						
77						
78		직접결합				
79		직접결합				
80		직접결합				
81		직접결합				
82						
83						

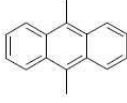
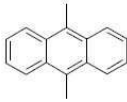
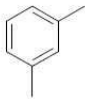
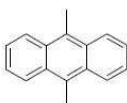
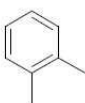
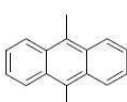
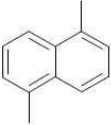
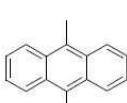
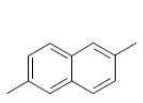
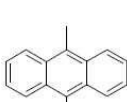
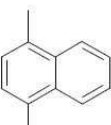
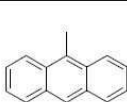
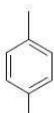
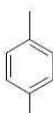
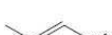
84						
85						
86						
87						
88						
표의 Ar ² 중 는 L 이 결합되는 부위의 표시임.						

<63>

<64>

하기 표 3은 상기 화학식 2에서 n+m=1 이면서 대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

표 3

	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 또는 R ²	Ar ³
89		직접결합			
90		직접결합			
91		직접결합			
92		직접결합			
93		직접결합			
94		직접결합			
95					

96					
97					
98					
99					
100					
101					
102					
103					

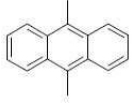
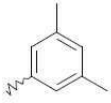
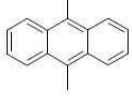
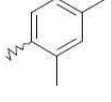
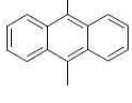
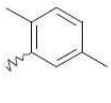
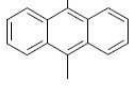
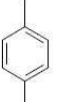
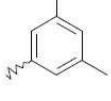
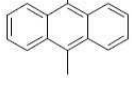
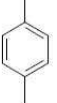
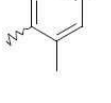
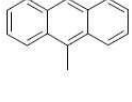
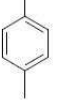
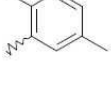
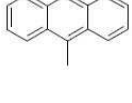
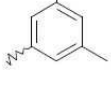
104					
105					
106					
107					
108					
109					

<67>

<68>

하기 표 4는 상기 화학식 2에서 n=1이고 m=1이면서 대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

표 4

	Ar ¹	L	Ar ₂	R ¹ 및 R ²	Ar ³
110		직접결합			
111		직접결합			
112		직접결합			
113					
114					
115					
116					

117					
118					
119					
120					
121					
122					
123					
표의 Ar ² 중 는 L 이 결합되는 부위의 표시임.					

<70>

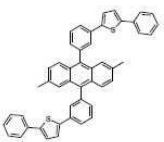
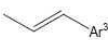
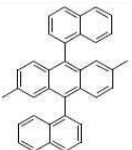
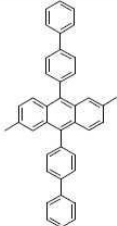
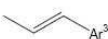
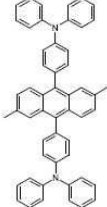
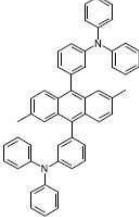
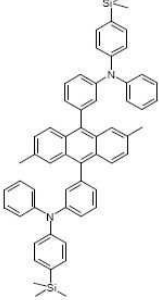
<71>

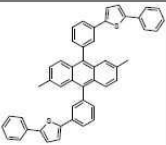
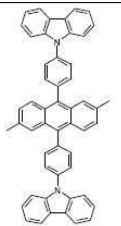
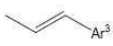
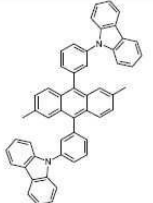
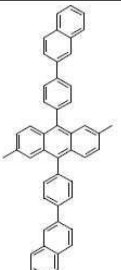
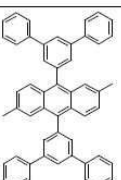
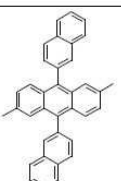
하기 표 5는 상기 화학식 1에서 m=0이고, Ar¹이 치환기를 갖으며, 비대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

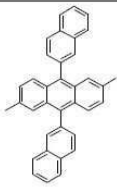
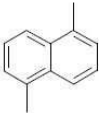
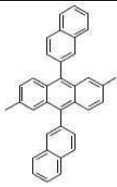
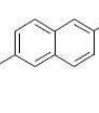
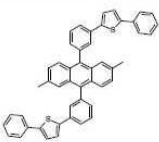
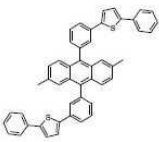
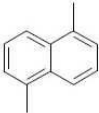
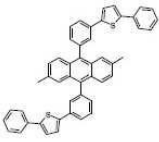
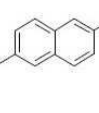
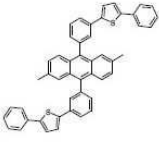
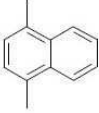
표 5

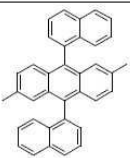
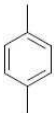
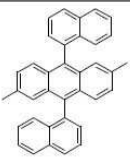
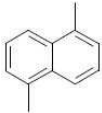
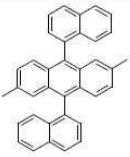
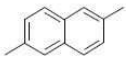
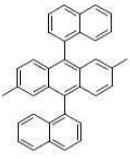
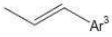
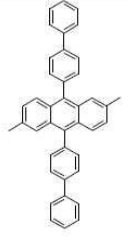
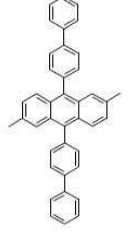
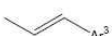
	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹	Ar ³	Z
124		직접결합				H
125		직접결합				H
126		직접결합				H
127		직접결합				H
128		직접결합				H
129		직접결합				H

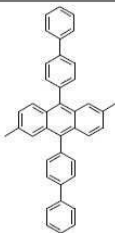
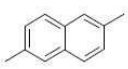
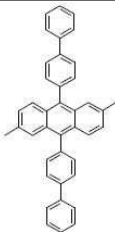
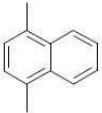
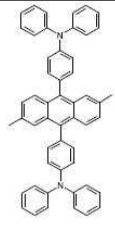
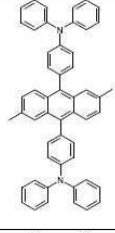
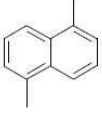
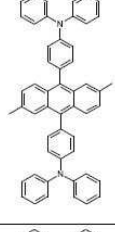
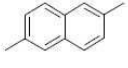
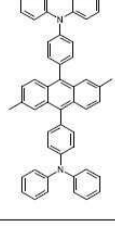
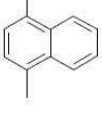
<72>

130		직접결합				H
131		직접결합				H
132		직접결합				H
133		직접결합				H
134		직접결합				H
135		직접결합				H

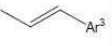
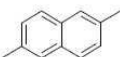
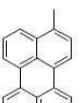
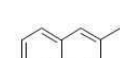
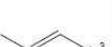
136		직접결합				H
137		직접결합				H
138		직접결합				H
139		직접결합				H
140		직접결합				H
141						H

142						H
143						H
145						H
146						H
147						H
148						H

149						H
150						H
151						H
152						H
153						H
154						H

155						H
156						H
157						H
158						H
159						H
160						H

<77>

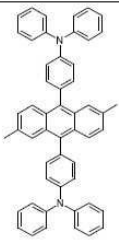
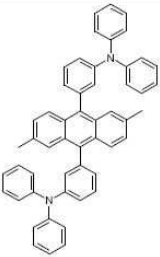
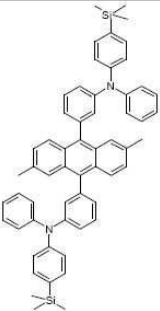
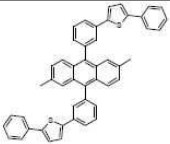
161		직접결합				H
162						H
163		직접결합				H
164						H

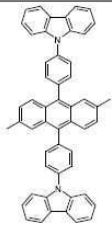
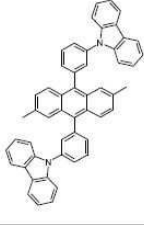
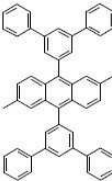
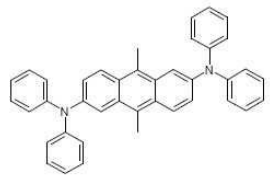
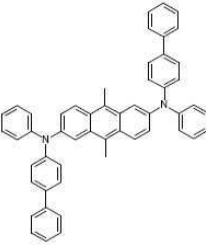
<78>

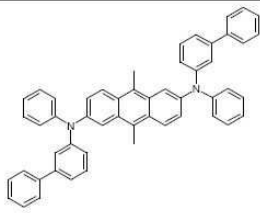
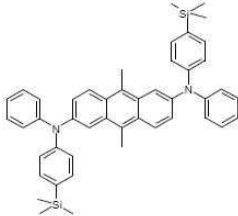
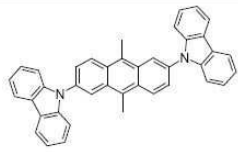
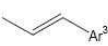
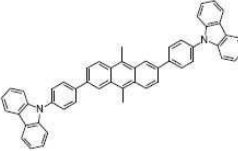
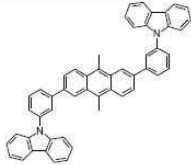
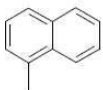
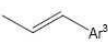
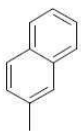
<79>

하기 표 6은 상기 화학식 2에서 $n+m=1$ 이고, Ar^1 이 치환기를 갖으며, 대칭 구조를 갖는 화합물의 구체적인 예를 나타낸 것이다.

표 6

화합물	Ar ¹	L	Ar ²	R ¹ 또는 R ²	Ar ³
165		직접결합			
166		직접결합			
167		직접결합			
168		직접결합			
169		직접결합			

170		직접결합			
171		직접결합			
172		직접결합			
173		직접결합			
174		직접결합			
175		직접결합			

176		직접 결합			
177		직접 결합			
178		직접 결합			
179		직접 결합			
180		직접 결합			
181		직접 결합			
182		직접 결합			
183		직접 결합			

184		직접 결합			
185		직접 결합			
186		직접 결합			
187					
188					
189					
190					
191					
191					

192					
193					
194					
195		직접 결합			
196		직접 결합			
197		직접 결합			
198		직접 결합			
199		직접 결합			
200		직접 결합			
201					

202					
203					
204					
205					
206					
207					
208					
209					
210		직접 결합			
211					

<85>

212		직접 결합			
213					

<86>

<87>

본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물들은 L을 중심으로 2개 이상의 형광 발색단, 즉 치환된 Ar^1 와 치환된 Ar^2 이 서로 큰 각도로 떨어져 있어서 서로 컨จู게이션이 연결되지 않거나 약화되는 특징적인 구조를 갖는다. 그리

고, 발광 파장이 너무 길어지면 호스트 물질에서 도판트 물질로의 에너지 전이(transfer)가 어려운 문제가 있으나, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물에서는 이중결합이나 삼중결합이 발광파장이 길어지지 않는 위치, 즉 파라(para) 위치가 아닌 오르토(ortho) 또는 메타(meta) 위치에 있다. 또한, 특히 이량체화 스티릴(dimerized styryl)기가 아닌 단량체화 스티릴(monomerized styryl)기가 도입되어 있어 스티릴기의 구조적인 유연성이 필름의 안정성을 향상시킬 수 있고, 이러한 특징들에 의하여 정공수송층이나 전자수송층과 접하는 층을 형성하는 경우 계면 특성을 향상시켜 소자의 수명 측면에서도 유리한 역할을 할 수 있는 구조이다. 따라서, 에너지 레벨이 적합한 구조를 갖는 상기 화학식 1의 화합물을 유기발광소자에서 호스트 또는 도펀트와 같은 발광물질로 사용할 경우 호스트로부터 도판트로 에너지 전이가 효율적으로 이루어질 수 있으므로, 소자의 효율을 크게 향상시킬 수 있다.

- <88> 구체적으로 상기 화학식 1의 화합물 1의 구조(표 1 참조)를 예를 들면, (2,5-스티레닐)-1-페닐 부분과 9-(2-나프틸)안트라센 부분이 서로 약 90도로 틀어져 있어서 서로 화학적으로 결합되어 있으면서도, 서로 컨จู게이션에 크게 영향을 미치지 않아, 각각 독립적으로 같거나 유사한 파장대의 발광스펙트럼을 보일 수 있다. 즉 Ar^1 , 예컨대 안트라센에 연결된 치환체가 단순히 열적인 안정성과 필름 형태(morphology)에 영향을 주는 것 뿐만 아니라, 직·간접적으로 안트라센 코어와 함께 도판트로의 에너지 전이에 영향을 주는 것을 특징으로 한다. 따라서 이러한 구조의 화합물을 유기발광소자에 적용하여 소자의 효율과 수명을 향상시키고자 하였다.
- <89> 또한, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은, 출발물질로서 알케닐기 또는 알킬닐기가 치환된 브로모 벤젠, 또는 알케닐기 또는 알킬닐기가 치환된 요오드 벤젠과 안트라센 보론산, 팔라듐[II](palladium) 촉매 및 염기(예를 들면, 칼륨아세테이트 등의 무기염기)의 존재 하에서 아릴-아릴 스즈키 커플링 방법으로 치환기를 도입하여 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물의 구체적인 제조방법은 실시예에 나타낸다.
- <90> 또한, 본 발명은 제 1 전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- <91> 전술한 본 발명의 화합물들은 특히 유기발광소자에서 단독으로 발광 물질의 역할을 할 수 있을 뿐만 아니라, 적절한 발광 도판트와 함께 발광 호스트, 또는 적절한 발광 호스트와 함께 발광 도판트 역할을 할 수 있다.
- <92> 본 발명의 유기발광소자는 전술한 본 발명에 따른 화합물을 이용하여 유기발광소자의 유기물층, 특히 발광층을 형성하는 것을 제외하고는, 후술하는 통상의 유기발광소자의 제조 방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- <93> 본 발명의 하나의 실시 상태에 있어서, 유기발광소자는 제 1 전극과 제 2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 전술한 본 발명에 따른 화합물을 유기발광소자의 유기물층 중 1층 이상에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 유기발광소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다. 본 발명에 따른 유기발광소자의 구조는 도 1에 예시되어 있다.
- <94> 예컨대, 본 발명에 따른 유기발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기발광소자를 만들 수도 있다(국제 특허 출원 공개 제2003/012890호 참조).
- <95> 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- <96> 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; $ZnO:Al$ 또는 $SnO_2:Sb$ 와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <97> 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물

질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

정공수송 물질로는 양극이나 정공주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물 (Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤조자솔, 벤즈티아솔 및 벤즈이미다솔 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

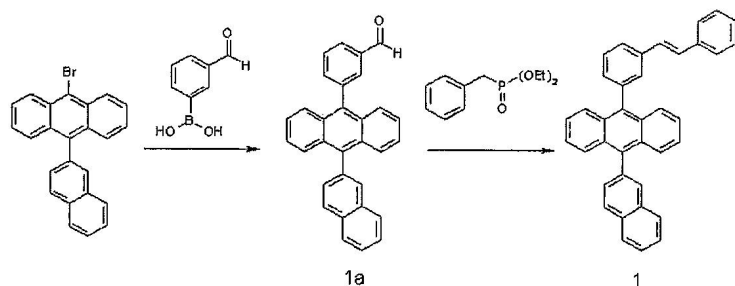
전자수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq_3 를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

본 발명에 따른 유기발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

본 발명에 따른 화합물은 유기태양전지, 유기광광채, 유기트랜지스터 등을 비롯한 유기전기소자에서도 유기발광 소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

이하, 실시예 및 실험예를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명하지만, 본 발명은 하기 실시예 및 실험예에 의하여 범위가 한정되지는 않는다.

실시예 1 : 화합물 1의 합성



1-A. 화합물 1a의 합성

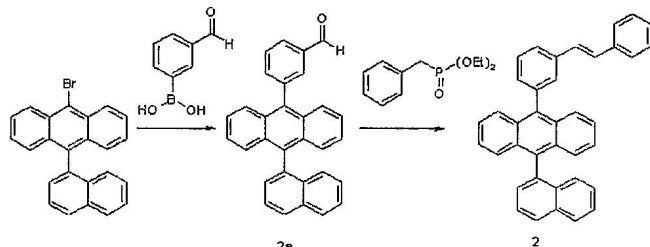
N₂ 하에서 9-브로모-10-(2-나프틸)안트라센 (18 g, 46.1 mmol)을 THF (150 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산 (8.4 g, 56.2 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (26 g, 187.6 mmol)를 H₂O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (1.1 g, 0.9 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 1a (18.6 g, 97%)를 얻었다.: MS [M] = 408

1-B. 화합물 1의 합성

N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하

이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 1-A에서 제조한 화합물 1a (2 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 1 (1.5 g, 65%)을 얻었다. MS [M+H] = 483

<111> 실시예 2 : 화합물 2의 합성



<112>

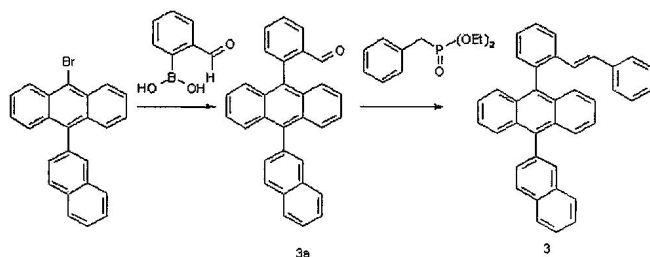
<113> 2-A. 화합물 2a의 합성

<114> N₂ 하에서 9-브로모-10-(1-나프틸)안트라센 (5 g, 13 mmol)을 THF (70 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(2.3 g, 15.6 mmol)을 EtOH (40mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (7 g, 52 mmol)를 H₂O (25 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.23 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 2a (2.9 g, 55%)를 얻었다. :MS [M] = 408

<115> 2-B. 화합물 2의 합성

<116> N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 2-A에서 제조한 화합물 2a (2 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 2 (2.2 g, 96%)를 얻었다. MS [M+H] = 483

<117> 실시예 3 : 화합물 3의 합성



<118>

<119> 3-A. 화합물 3a의 합성

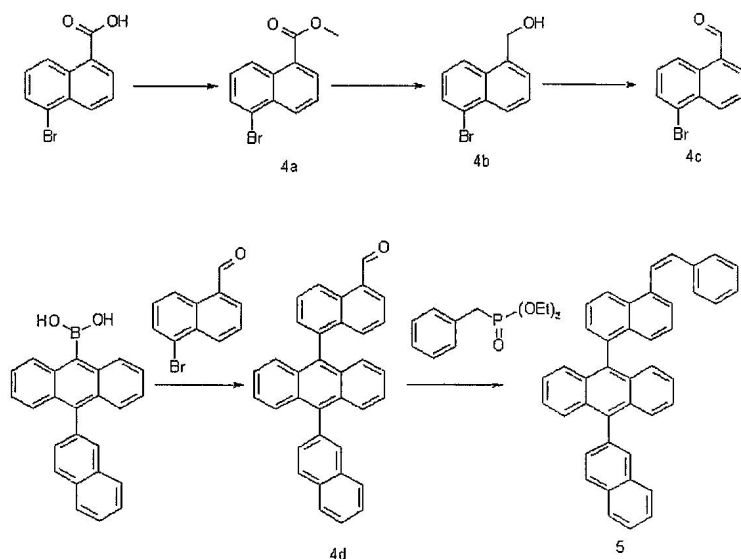
<120> N₂ 하에서 9-브로모-10-(2-나프틸)안트라센 (5 g, 13 mmol)을 THF (70 mL)에 녹이고, 2-포밀벤젠 보론산(2.3 g, 15.6 mmol)을 EtOH (40mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (7 g, 52 mmol)를 H₂O (25 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.23 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 3a (2.9 g, 55%)를 얻었다. :MS [M] = 408

<121> 3-B. 화합물 3의 합성

<122> N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 3-A에서 제조한 화합물 3a (2 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝

난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 3 (2.2 g, 96%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 483

실시예 4 : 화합물 5의 합성



4-A. 화합물 4a의 합성

6-브로모-2-나프토산 (3g, 11.95 mmol), 요오드메탄(MeI, 1.11 mL), 및 K₂CO₃ (6.58g, 47.61 mmol)을 넣고, DMF 30mL를 가하고 상온에서 5시간 교반하였다. TLC로 반응이 완결된 것을 확인하고 반응액을 여과해서 K₂CO₃를 제거하였다. 감압 하에 여과액 중 DMF를 20mL 정도 제거한 후 물을 부어주어 고체를 석출하였다. 얻어진 고체를 여과한 후 에탄올로 씻고 건조하여 화합물 4a (3.06g, 수율 97%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 264

4-B. 화합물 4b의 합성

LAH(Lithium aluminum hydride 0.86g, 22.7mmol)와 무수 THF 10 mL를 넣고 0℃로 온도를 낮추었다. 상기 4-A에서 제조한 화합물 4a (2.3g, 8.67mmol)를 무수 THF 30mL에 녹인 후 반응 플라스크에 서서히 넣어주고 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 물 1mL, 15% NaOH 수용액 1mL, 물 3mL를 순서대로 넣어줘서 반응을 종결시킨 후, 감압 하에 여과액에서 THF를 제거한 후 헥산으로 고체를 석출하여 재여과한 후 화합물 4b (2.45g, 수율 91%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 238

4-C. 화합물 4c의 합성

상기 4-B에서 제조한 화합물 4b (2.45g, 10.3mmol)를 디클로로메탄 50mL로 녹였다. PCC(pyridinium chlorochromate 3.34g, 15.49mmol)와 셀 라이트 1g을 넣고 실온에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 셀 라이트를 통과시켜 여과하고 여액을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 4c (0.87g, 수율 37%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 234

4-D. 화합물 4d의 합성

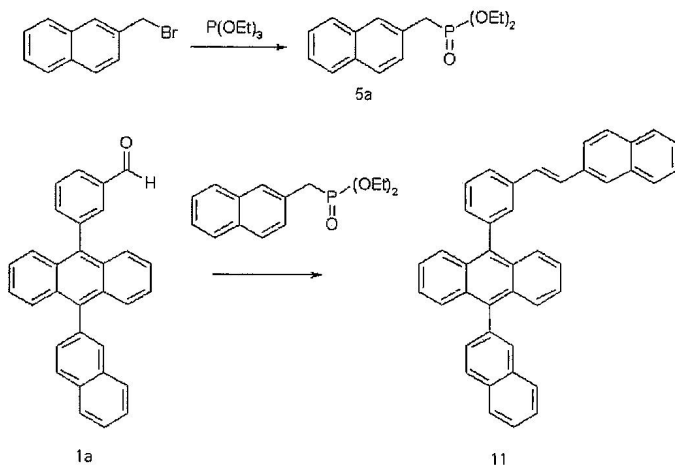
N₂ 하에서 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산 (3.6 g, 10 mmol), 상기 4-C에서 제조한 화합물 4c (2 g, 8.5 mmol)를 THF (80 mL)에 녹였다. 2M K₂CO₃ 용액 (60 mL)를 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.23 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 유기층을 날린 후, THF에 녹여 에탄올로 재결정하여 화합물 4d (2.4 g, 62%)를 얻었다. MS [M] = 458

4-E. 화합물 5의 합성

N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether) (1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.35 g, 14.1 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.47 mmol)를 THF (80 mL)에 넣고, 0

℃에서 상기 4-D에서 제조한 화합물 4d (2.2g, 4.7 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 5 (2.3 g, 90%)를 얻었다. MS [M+H] = 533

<135> 실시예 5 : 화합물 11의 합성



<136>

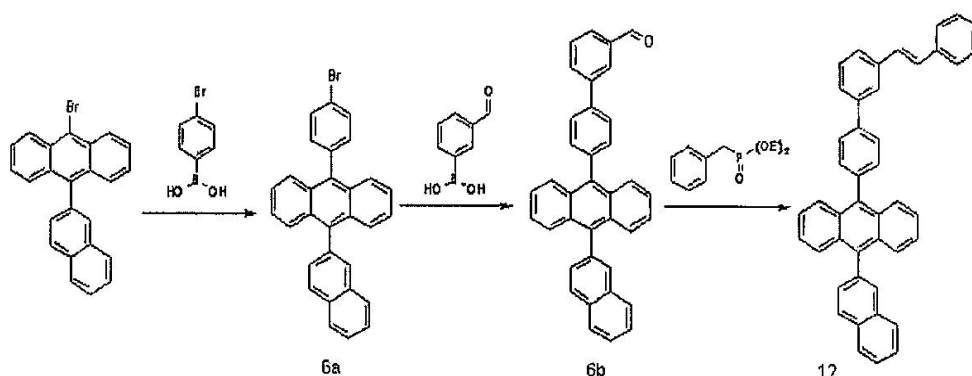
<137> 5-A. 화합물 5a의 합성

<138> 2-(브로모메틸)나프탈렌 (10 g, 45.2 mmol)을 트리에틸 포스파이트(triethyl phosphite)(30 mL, 180 mmol)에 넣고 18시간 동안 환류 교반시켰다. 반응 혼합액을 서서히 냉각 후 남은 트리에틸 포스파이트를 감압 농축시켜 액상의 화합물 5a (12 g, 96%)를 얻었다. : MS [M+H]⁺ = 279

<139> 5-B. 화합물 11의 합성

<140> N₂ 하에서 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 12 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol) 및 상기 5-A에서 합성된 화합물 5a (2g, 7.2 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 1-A에서 제조한 화합물 1a (2 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 4시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 11 (2.5 g, 98%)을 얻었다. MS [M+H] = 533

<141> 실시예 6 : 화합물 12의 합성



<142>

<143> 6-A. 화합물 6a의 합성

<144> N₂ 하에서 9-브로모-10-(2-나프틸)안트라센 (10 g, 26 mmol)을 THF (200 mL)에 녹이고, 4-브로모페닐보론산(6.3 g, 31.2 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (14 g, 104 mmol)를 H₂O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.58 g, 0.5 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시

키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 6a (7 g, 58%)를 얻었다. MS [M] = 459

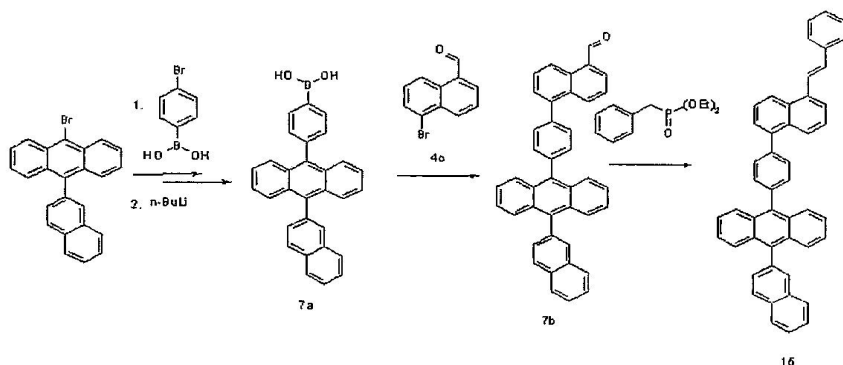
<145> 6-B. 화합물 6b의 합성

<146> N₂ 하에서 상기 6-A에서 제조한 6a (5 g, 11 mmol)를 THF (70 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(1.9 g, 13 mmol)을 EtOH (40mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (6 g, 44 mmol)를 H₂O (25 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.25 g, 0.2 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 6b (3.2 g, 60%)를 얻었다. :MS [M] = 484

<147> 6-C. 화합물 12의 합성

<148> N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 6-B에서 제조한 화합물 6b (2.3 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 12 (1.7 g, 65%)를 얻었다. MS [M+H] = 559

<149> 실시예 7 : 화합물 15의 합성



<150>

<151> 7-A. 화합물 7a의 합성

<152> N₂ 하에서 상기 6-A와 동일한 방법으로 제조한 6a (10 g, 22 mmol)와 탈수처리한 에테르 (100 mL) 및 탈수 처리한 톨루엔 (100 mL)을 가하여, 드라이아이스 욕조에서 -78 ℃로 냉각했다. 여기에 2.5 M 부틸리튬/헥산 용액 (6 mL)을 30분에 걸쳐 적하하고, -78 ℃에서 2시간 반응시켰다. 여기에 보론산트리이소프로필에스터 (10 mL)를 30분간 적가하였다. 적가 후 실온으로 하여, 12시간 교반하였다. 이를 10 ℃ 이하에서 2N 염산 (100 mL)을 첨가하고, 톨루엔(80 mL)을 가하였다. 이를 분액하고 황산 나트륨으로 건조한 후 감압 농축하고 헥산을 가하여 석출한 결정을 여과 분리하였다. 이것을 THF (100 mL)에 용해시키고 진한 염산 (10 mL), 테트라부틸암모늄 브로마이드 (0.1 g)를 첨가하고 12시간 교반하였다. 석출한 결정을 여과 분리하여 건조한 후 화합물 7a (6 g, 66%)를 얻었다.

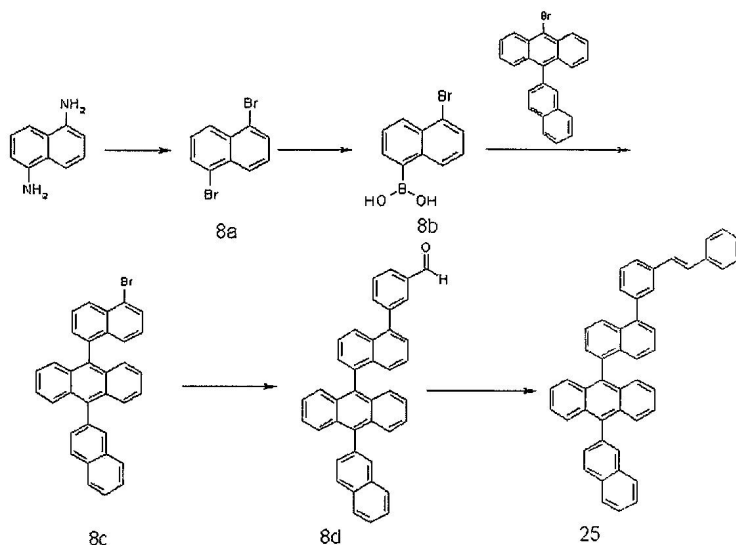
<153> 7-B. 화합물 7b의 합성

<154> 상기 실시예 4의 4-D에서 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산 대신에 상기 7-A에서 제조한 화합물 7a를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 4의 4-D와 동일한 방법으로 하여 화합물 7b (3 g, 60%)를 얻었다. MS [M] = 534

<155> 7-C. 화합물 15의 합성

<156> 상기 실시예 4의 4-E에서 화합물 4d 대신에 상기 7-B에서 제조한 화합물 7b를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 4의 4-E와 동일한 방법으로 하여 화합물 15 (1 g, 65%)를 얻었다. MS [M+H] = 609

<157> 실시예 8 : 화합물 25의 합성



<158>

<159> 8-A. 화합물 8a의 합성

<160> 빙냉 하에서 1,5-다이아미노나프탈렌 (6 g, 75.9 mmol)을 물 (150 mL)과 진한 황산 (10 mL)에 녹였다. 물 (50 mL)에 녹인 NaNO₂ (5.8 g, 167 mmol)를 천천히 첨가한 후 0 °C에서 45분 동안 교반하였다. 그 후 반응물을 여과한 후 여과액에 CuBr₂ (15 g, 52.3 mmol)를 첨가하고, 48% HBr(225 mL)와 물(225 mL)을 넣어주었다. 그 후 0 °C에서 1시간, 실온에서 2시간, 그리고 70 °C에서 30분을 각각 교반하였다. 그리고 반응 혼합액을 벤젠으로 추출하고, 황산 나트륨으로 건조한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 8a (10 g)를 얻었다. MS [M] = 286

<161> 8-B. 화합물 8b의 합성

<162> 상기 8-A에서 제조한 8a (3.0g, 10.5 mmol), 마그네슘 (0.26g, 10.7mmol), 디브로모 에텐 0.1 mL 을 무수 테트라히드로푸란 60mL를 50°C에서 7시간 교반시킨후, 0~5°C로 유지시켰다. 반응 혼합물에 트리메틸보레이트 (2.6mL, 25.2mmol)를 적가한 후, 상온에서 12시간 교반하였다. 반응물을 0~5°C로 유지시킨 후, 묽은 황산을 가하고 1시간 동안 실온에서 교반시키고, 디에틸에테르를 가해 추출하고, 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 증류하였다. 형성된 흰색 고체를 헥산에서 정제하여 화합물 8b (1.47g, 수율 49%)를 제조하였다.

<163> 8-C. 화합물 8c의 합성

<164> 상기 실시예 6의 6-A에서 4-브로모페닐보론산 대신에 상기 8-B에서 제조한 화합물 8b를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 6의 6-A에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 8c (3 g, 60%)를 얻었다. MS [M] = 509

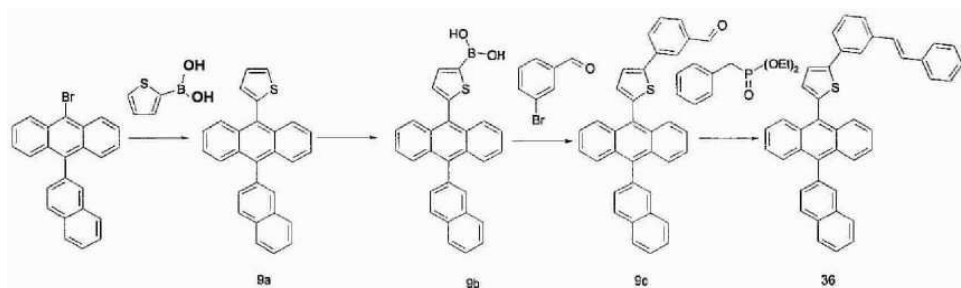
<165> *8-D. 화합물 8d의 합성

<166> 상기 실시예 6의 6-B에서 화합물 6a 대신에 상기 8-C에서 제조한 화합물 8c를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 6의 6-B에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 8d (2.9g, 90%)를 얻었다. MS [M+H] = 535

<167> 8-E. 화합물 25의 합성

<168> 상기 실시예 6의 6-C에서 화합물 6b 대신에 상기 8-D에서 제조한 화합물 8d를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 6의 6-C에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 25 (2 g, 60%)를 얻었다. MS [M+H] = 609

<169> 실시예 9 : 화합물 36의 합성



<170> 삭제

<171> 9-A. 화합물 9a의 합성

<172> N₂ 하에서 9-브로모-10-(2-나프틸)안트라센 (10 g, 26 mmol)을 THF (200 mL)에 녹이고, 2-티오펜보론산(4 g, 31 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (14 g, 104 mmol)를 H₂O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.58 g, 0.5 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 9a (6 g, 60%)를 얻었다. MS [M] = 386

<173> 9-B. 화합물 9b의 합성

<174> N₂ 하에서 상기 9-A에서 제조한 화합물 9a (6 g, 15.5 mmol)를 THF (100 mL)에 녹이고, -78 °C하에서 n-부틸 리튬 (7 mL, 31 mmol, 2.5 M 헥산 용액)을 30분에 걸쳐 적하하고, -78 °C 에서 2시간 반응시켰다. 여기에 트리 메틸보레이트 (3.5 mL, 31 mmol) 를 30분간 천천히 가하였다. 적하 후 상온에서 12시간 반응시켰다. 그 후 10 °C 이하에서 2N 염산 (100 mL)을 첨가하고, 톨루엔(80 mL)을 가하였다. 이를 분액하고 황산 나트륨으로 건조한 후 감압 농축하고 헥산을 가하여 석출한 결정을 여과 분리하였다. 이것을 THF (100 mL)에 용해시키고 진한 황산 (10 mL)을 첨가하고 12시간 교반하였다. 석출한 결정을 여과 분리하여 건조 후 화합물 9b (3.2 g, 50%)를 얻었다. MS [M] = 386

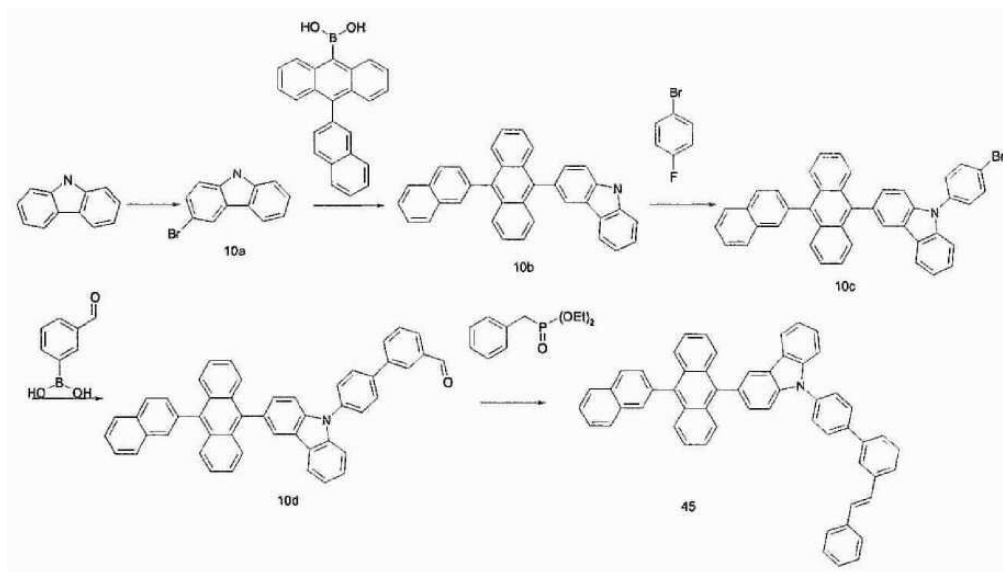
<175> 9-C. 화합물 9c의 합성

<176> 상기 실시예 4의 4-D에서 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산 대신에 상기 9-B에서 제조한 화합물 9b를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 4의 4-D와 동일한 방법으로 하여 화합물 9c (3 g, 60%)를 얻었다. MS [M] = 490

<177> 9-D. 화합물 36의 합성

<178> 상기 실시예 4의 4-E에서 화합물 4d 대신에 상기 9-C에서 제조한 화합물 9c를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 4의 4-E와 동일한 방법으로 하여 화합물 36 (1 g, 65%)을 얻었다. MS [M+H] = 565

<179> 실시예 10 : 화합물 45의 합성



<180>

10-A. 화합물 10a의 합성

<181> 삭제

<182>

카바졸(10 g, 60 mmol), N-브로모모숙신이미드(5.4 g, 30 mmol), 실리카겔 (60 g)을 디클로로메탄(200 mL)에 녹였다. 실온에서 3시간 교반 후 실리카겔을 제거하고 감압 증류하였다. 디클로로메탄/헥산에 재결정하여 화합물 10a(3.6 g, 50%)를 얻었다. MS [M] = 246

<183>

10-B. 화합물 10b의 합성

<184>

N₂ 하에서 상기 10-A에서 제조한 10a (3 g, 12 mmol)를 THF (70 mL)에 녹이고, 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산 (5.0 g, 14.6 mmol)을 EtOH (40mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (6.4 g, 48 mmol)를 H₂O (25 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.5 g, 0.47 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 10b (4.2 g, 75%)를 얻었다. MS [M] = 469

<185>

10-C. 화합물 10c의 합성

<186>

N₂ 하에서 상기 10-A에서 제조한 10b (4.2 g, 8.9 mmol), 1-브로모-4-플루오로벤젠(1.2 mL, 10.7 mmol), KF-알루미나(2.6 g, 17.8 mmol), 18-크라운-6(0.24 g, 0.9 mmol)를 DMSO (75 mL)에 녹이고 150 °C에서 24시간 교반하였다. 실온에서 알루미나를 여과하고 여과액을 층 분리하여 유기층을 물로 씻어준 후 황산 마그네슘으로 건조하였다. 메탄올로 재결정하여 여과한 후 건조하여 화합물 10c(3.3 g, 60%)를 얻었다. MS [M] = 624

<187>

10-D. 화합물 10d의 합성

<188>

N₂ 하에서 상기 10-C에서 제조한 10c (3 g, 4.8 mmol)을 THF (50 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(1.1 g, 5.76 mmol)을 EtOH (20mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (2 g, 14 mmol)를 H₂O (25 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.28 g, 0.24 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 10d(2.2 g, 70%)를 얻었다. MS [M] = 649

<189>

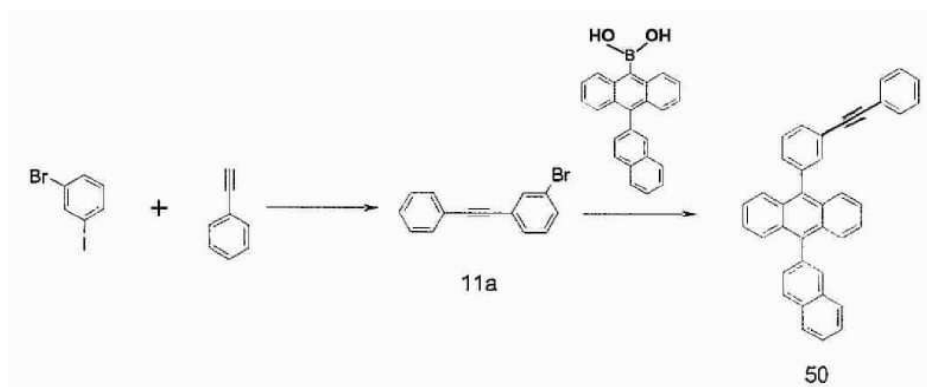
10-E. 화합물 45의 합성

<190>

N₂ 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(0.8 mL, 3.7 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.2 g, 9 mmol), 18-크라운-6 (0.08 g, 0.3 mmol)을 THF (80 mL)에 넣고, 0°C에서

상기 10-D에서 제조한 화합물 10d (2 g, 3 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 45 (1.8 g, 85%)을 얻었다. MS [M+H] = 724

<191> 실시예 11 : 화합물 50의 합성



<192>

11-A. 화합물 11a의 합성

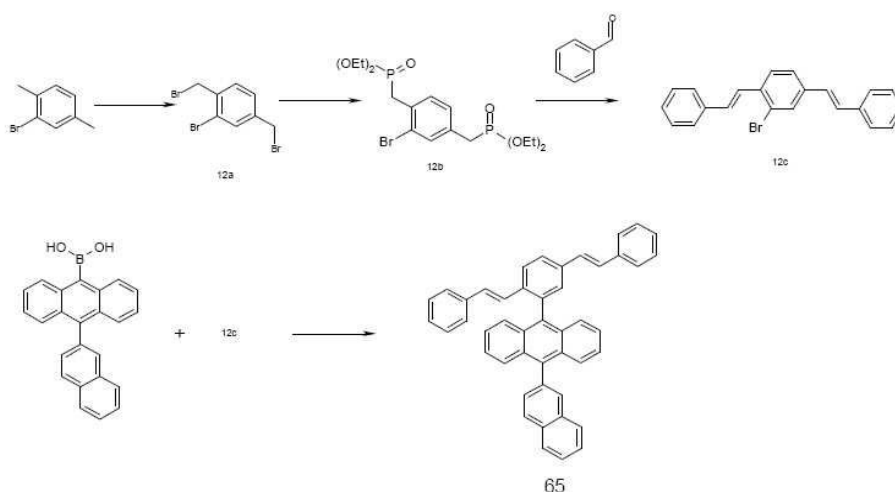
<193> 삭제

<194> 반응 용기에 Pd(PPh₃)₂Cl₂ (372mg, 0.53mmol)과 CuI(67mg, 0.35mmol)을 준비하고, 트리에틸아민에 녹인 1-브로모-3-아이오도벤젠(1-bromo-3-iodobenzene) (5g, 17.7mmol)을 천천히 넣어준 후, TEA에 녹인 페닐아세틸렌 (1.8g, 17.7mmol)을 역시 천천히 넣어주었다. 상온에서 1시간 동안 교반한 후, NH₄Cl 수용액으로 씻어주고, 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 11a(4.5g, 99%)을 얻었다. MS [M+H] = 258

<195> 11-B. 화합물 50의 합성

<196> 상기 11-A에서 제조한 화합물 11a (1.23 g, 4.8 mmol)와 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산(2 g, 5.76 mmol)을 무수 THF (30mL)에 녹인 후, Pd(PPh₃)₄ (0.28 g, 0.24 mmol)과 K₂CO₃ 수용액 (9.6 mL, 19.2 mmol)을 넣고, 3시간 동안 환류시켰다. 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산 마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 50 (0.9 g, 33%)을 얻었다. MS [M+H] = 481

<197> 실시예 12 : 화합물 65의 합성



<198>

12-A. 화합물 12a의 합성

<199>

삭제

<200>

2-브로모-p-크실렌(2.7 g, 14.5 mmol), NBS (6.2 g, 34.8 mmol)을 CCl_4 (70 mL)에 넣고 17시간 동안 환류 교반시켰다. 반응 혼합액을 서서히 냉각 후 숙신이미드(succinimide)를 여과하고 여과액을 농축시켰다. 2-프로판올로 재결정하여 흰색의 고체 화합물 12a (1.5 g, 30%)를 얻었다. : MS $[M]^+ = 340$ (Br $\times$ 3)

<201>

12-B. 화합물 12b의 합성

<202>

상기 12-A에서 제조한 화합물 12a (16.1 g, 46.9 mmol)를 트리에틸 포스파이트(triethyl phosphite)(31.5 mL, 187.6 mmol)에 넣고 17시간 동안 환류 교반시켰다. 반응 혼합액을 서서히 냉각 후 남은 트리에틸 포스파이트를 감압 농축시켜 액상의 화합물 12b (20 g, 95%)를 얻었다. : MS $[M+H]^+ = 457$

<203>

12-C. 화합물 12c의 합성

<204>

N_2 하에서 상기 12-B에서 제조한 화합물 12b (11 g, 24.1 mmol), 나트륨 하이드라이드(5.9 g, 14.8 mmol), 18-크라운-6(1.3 g, 4.9 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0°C에서 벤즈알데히드(5 mL, 49.2 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응 혼합액에 THF와 H_2O 를 넣었다. 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 12c (5.2 g, 60%)를 얻었다. MS $[M+H] = 362$

<205>

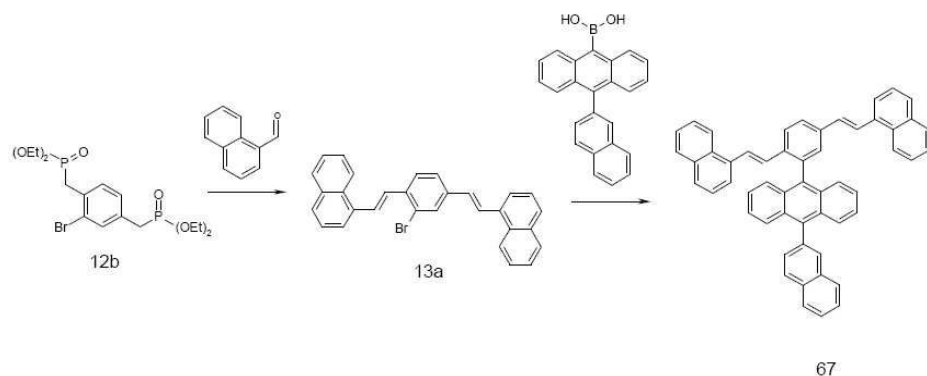
12-D. 화합물 65의 합성

<206>

상기 12-C에서 제조한 화합물 12c(1 g, 2.7 mmol), 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산(2.8 g, 8.1 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.3 g, 0.3 mmol)를 2M K_2CO_3 수용액 (200mL)과 THF (200 mL)에 넣고, 약 24시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 65 (1.1 g, 70%)를 얻었다. MS $[M+H] = 585$

<207>

실시예 13 : 화합물 67의 합성



<208>

13-A. 화합물 13a의 합성

<209>

삭제

<210>

N_2 하에서 상기 실시예 12의 12-B에서 제조한 화합물 12b (11 g, 24.1 mmol), 나트륨 하이드라이드(5.9 g, 14.8 mmol), 18-크라운-6(1.3 g, 4.9 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0°C에서 1-나프틸알데히드(5 mL, 49.2 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응 혼합액에 THF와 H_2O 를 넣었다. 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 13a (5.2 g, 60%)를 얻었다. MS $[M] = 460$

<211>

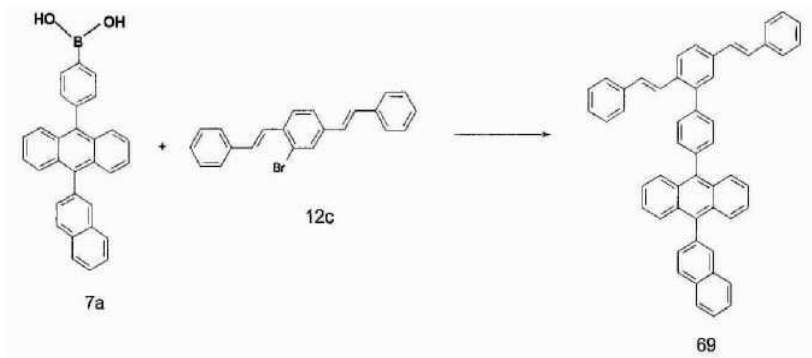
13-B. 화합물 67의 합성

<212>

상기 13-A에서 제조한 화합물 13a(3 g, 19.5 mmol), 10-(2-나프틸)안트라센-9-보론산(6.8 g, 19.5 mmol),

$\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.23 g, 0.2 mmol)를 2M K_2CO_3 수용액 (200mL)과 THF (100 mL)에 넣고, 약 24시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 67 (4.7 g, 80 %)을 얻었다. MS $[\text{M}+\text{H}] = 684$

<213> 실시예 14 : 화합물 69의 합성

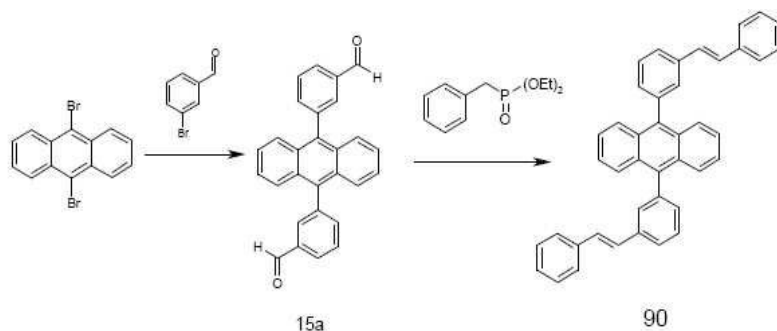


<214>

상기 실시예 7의 7-A에서 제조한 화합물 7a(1 g, 2.7 mmol), 실시예 12의 12-C에서 제조한 화합물 12c (1.4 g, 3.3 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.15 g, 0.14 mmol)를 2M K_2CO_3 수용액 (100mL)과 THF (100 mL)에 넣고, 약 24시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 69 (1.2 g, 70%)을 얻었다. MS $[\text{M}+\text{H}] = 661$

<215> 삭제

<216> 실시예 15 : 화합물 90의 합성



<217>

15-A. 화합물 15a의 합성

<218> 삭제

<219> N_2 하에서 9,10-디브로모 안트라센 (5 g, 14.8 mmol)을 THF (50 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(5.5 g, 37.0 mmol)을 EtOH (20mL)에 녹여 첨가하였다. K_2CO_3 (8.1 g, 59.2 mmol)를 H_2O (50 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.3 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 17시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 15a (5 g, 90%)를 얻었다. MS $[\text{M}] = 386$

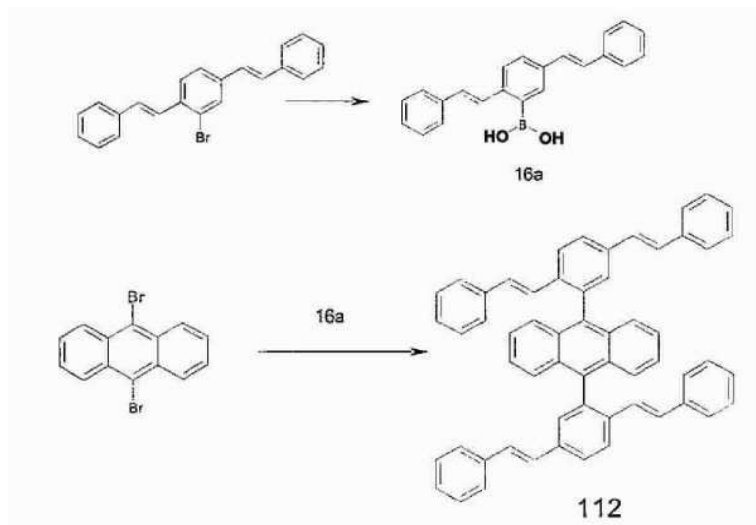
<220> 15-B. 화합물 90의 합성

<221> N_2 하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(3.2 mL, 15.3 mmol), 나트륨 하이드라이드(0.8 g, 20 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.5 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 15-A에서 제조한 화합물 15a (2 g, 5.1 mmol)를

넣었다. 실온에서 24시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 90 (2.6 g, 95%)을 얻었다. MS [M] = 534

<222>

실시예 16 : 화합물 112의 합성



<223>

16-A. 화합물 16a의 합성

<224>

삭제

<225>

N₂ 하에서 마그네슘(0.7 g, 27.6 mmol)을 넣고 진공 건조 시킨 후, 탈수 건조한 에테르(20 mL)를 넣은 반응액에 실시예 12의 12-C에서 제조한 화합물 12c(5 g, 13.8 mmol)를 탈수 건조한 에테르(50 mL)에 녹인 용액 상태로 적 가하였다. 실온에서 2시간 교반 후 트리메틸보레이트 (2.3 mL, 20.7 mmol)를 30분간 가하고 12시간 교반하였다. 이를 10 °C 이하에서 2N 염산 (100 mL)을 첨가하고, 톨루엔(80 mL)을 가하였다. 이를 분액하고 황산 나트륨으로 건조한 후 감압 농축하고 헥산을 가하여 석출한 결정을 여과 분리하여 건조한 후 화합물 16a (2 g, 44%)를 얻었다.

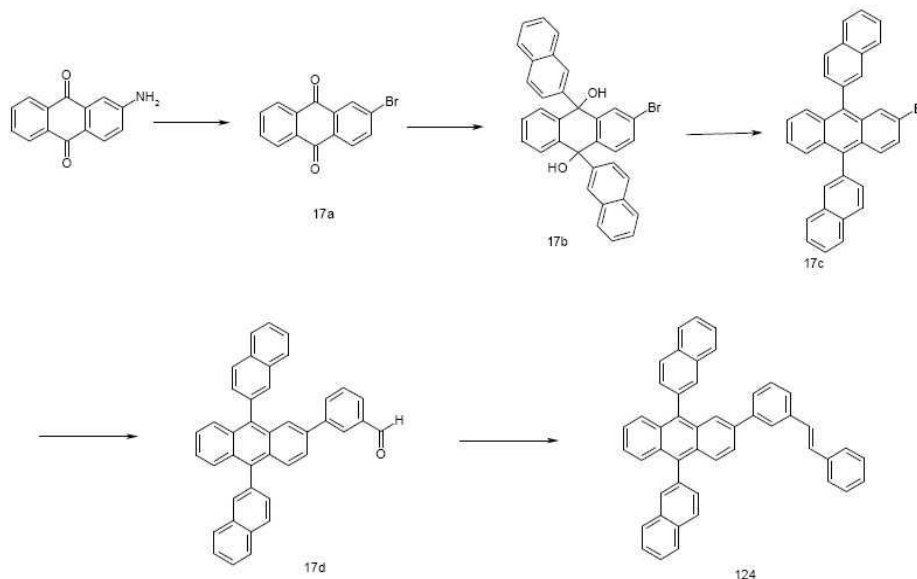
<226>

16-B. 화합물 112의 합성

<227>

N₂ 하에서 9,10-디브로모 안트라센 (1 g, 2.9 mmol), 상기 16-A에서 제조한 화합물 16a(2.1 g, 6.5 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.15 g, 0.14 mmol)를 THF (50 mL)에 녹인 후 2M K₂CO₃ 수용액 (50 mL)를 넣고, 약 24시간 환류 교 반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 112 (1.5 g, 70%)을 얻었다. MS [M+H] = 739

<228> 실시예 17 : 화합물 124의 합성



<229>

17-A. 화합물 17a의 합성

<230>

삭제

<231>

65℃에서 아세트니트릴(250mL)에 브롬화구리(18 g, 80.0 mmol)과 t-부틸 나이트라이트(12mL, 101 mmol)을 분산시키고 교반한 후 2-아미노 안트라퀴논(15 g, 67.2 mmol)을 5분에 걸쳐 천천히 적가하였다. 기체 발생이 끝나면 반응 용액을 상온으로 냉각하고 반응용액을 20%염산 수용액(1L)에 가하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 잔류수분을 제거한 후 감압하여 건조하였다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 연한 노란색의 화합물 17a(14.5 g, 75%)을 얻었다. MS [M] = 287

<232>

17-B. 화합물 17b의 합성

<233>

질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 2-브로모나프탈렌(11.0 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 17-A에서 제조한 화합물 17a (6.36 g, 22.0 mmol)를 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 17b(11.2 g, 93%)을 얻었다.

<234>

17-C. 화합물 17c의 합성

<235>

질소 분위기하에서 상기 17-B에서 제조한 화합물 17b(11.2 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 17c (7.2 g, 64%)를 얻었다. MS [M] = 509

<236>

17-D. 화합물 17d의 합성

<237>

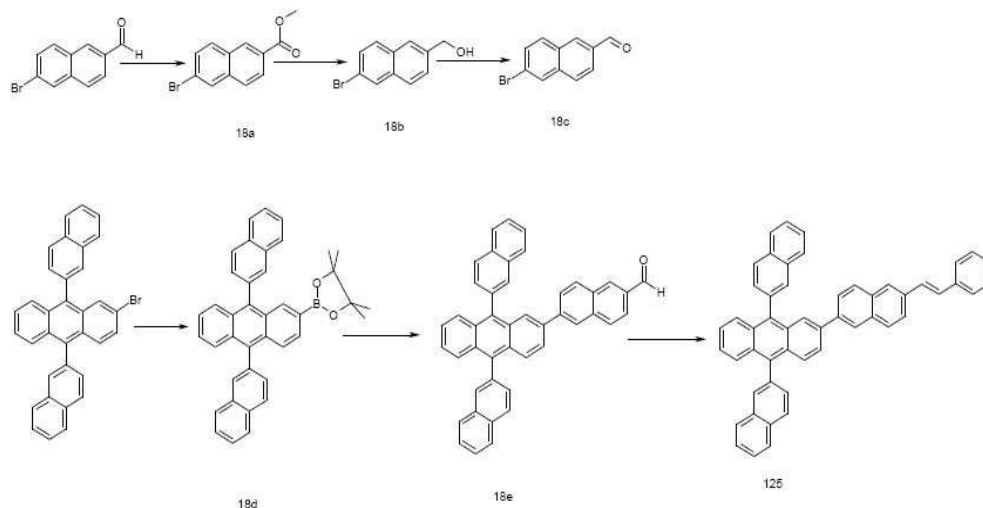
질소 분위기하에서 상기 17-C에서 제조한 화합물 17c (7 g, 13.74 mmol)을 THF (150 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산 (2.47 g, 16.48 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (5.7 g, 41.2 mmol)를 H₂O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.48 g, 0.41 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 17d (6.3 g, 86%)를 얻었다. MS [M] = 534

<238>

17-E. 화합물 124의 합성

<239> 질소분위기하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 17-D에서 제조한 화합물 17d (2.57 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 124 (2.4 g, 82%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 608

<240> 실시예 18 : 화합물 125의 합성



<241>

18-A. 화합물 18a의 합성

<242>

삭제

<243> 6-브로모-2-나프토산 (3g, 11.95 mmol), 요오드메탄(MeI, 1.11 mL), 및 K₂CO₃ (6.58g, 47.61 mmol)을 넣고, DMF 30mL를 가하고 상온에서 5시간 교반하였다. TLC로 반응이 완결된 것을 확인하고 반응액을 여과해서 K₂CO₃를 제거하였다. 감압 하에 여과액 중 DMF를 20mL 정도 제거한 후 물을 부어주어 고체를 석출하였다. 얻어진 고체를 여과한 후 에탄올로 씻고 건조하여 화합물 18a (3.06g, 수율 97%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 264

<244>

18-B. 화합물 18b의 합성

<245>

LAH(Lithium aluminum hydride 0.86g, 22.7mmol)와 무수 THF 10 mL를 넣고 0℃로 온도를 낮추었다. 상기 18-A에서 제조한 화합물 18a (2.3g, 8.67mmol)를 무수 THF 30mL에 녹인 후 반응 플라스크에 서서히 넣어주고 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 물 1mL, 15% NaOH 수용액 1mL, 물 3mL를 순서대로 넣어줘서 반응을 종결시킨 후, 감압하에 여과액에서 THF를 제거한 후 헥산으로 고체를 석출하여 재 여과한 후 화합물 18b (2.45g, 수율 91%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 238

<246>

18-C. 화합물 18c의 합성

<247>

상기 18-B에서 제조한 화합물 18b (2.45g, 10.3mmol)를 디클로로메탄 50mL로 녹였다. PCC(pyridinium chlorochromate 3.34g, 15.49mmol)와 셀 라이트 1g을 넣고 실온에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 셀 라이트를 통과시켜 여과하고 여액을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 18c (0.87g, 수율 37%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 234

<248>

18-D. 화합물 18d의 합성

<249>

질소분위기하에서 상기 17-C에서 제조한 화합물 17c(5 g, 9.81 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(2.75 g, 10.9 mmol), 포타슘아세테이트(2.89g, 29.4 mmol), 팔라듐(디페닐포스포노페로센)클로라이드(0.24 g, 3 mol%)를 250mL 플라스크에 넣고 디옥산(50 mL)를 가한 후 80℃에서 6시간 동안 환류하였다. 반응 용액을 실온으로 냉각시킨 후, 증류수(50 mL)를 가하고 메틸렌 클로라이드(50 mL×3)로 추출하였다. 감압하에서 메틸렌 클로라이드를

제거하여 옅은 노란색의 고체를 얻었다. 이 옅은 노란색의 고체를 에탄올로 씻어주고 건조하여 화합물 18d(5.46 g, 92%)을 얻었다.

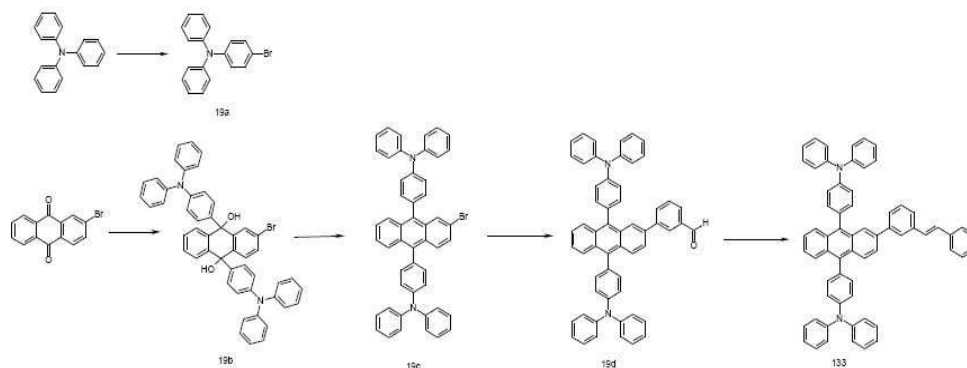
<250> 18-E. 화합물 18e의 합성

<251> 질소분위기하에서 상기 18-D에서 제조한 18d(5.6 g, 10 mmol), 상기 18-C에서 제조한 화합물 18c(2 g, 8.5 mmol)를 THF (120 mL)에 녹였다. 2M K₂CO₃ 용액 (60 mL)를 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.23 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 유기층을 날린 후, THF에 녹여 에탄올로 재결정하여 화합물 18e(4.1 g, 82%)를 얻었다. :MS [M+H]⁺ = 583

<252> 18-F. 화합물 125의 합성

<253> 질소분위기하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.2 mL, 5.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.29 g, 7.2 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 18-E에서 제조한 화합물 18e(2.8 g, 4.8 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 125 (2.7 g, 85%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 659

<254> 실시예 19 : 화합물 133의 합성



<255>

19-A. 화합물 19a의 합성

<256> 삭제

<257> 질소 분위기하에서 트라이페닐 아민 (5.0g, 20.4 mmol)을 클로로포름(25 mL)에 녹이고, 반응혼합액을 0℃로 내리고 N-브로모모숙신이미드(3.6 g, 20.4 mmol)을 나누어 넣었다. 그 후 반응혼합액이 녹색으로 변하면 10℃로 올리고 실온에서 12시간 교반하였다. 반응이 끝난 후 물을 넣고 유기층을 분리하여 무수 황산 나트륨으로 건조시켰다. 그리고 유기 용매를 감압 증류한 후 메탄올로 재결정하여 화합물 19a(4.0g, 60%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 324

<258> 19-B. 화합물 19b의 합성

<259> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 19-A에서 제조한 화합물 19a (17.2 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 17-A에서 제조한 화합물 17a (6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 19b(15.9 g, 93%)을 얻었다.

<260> 19-C. 화합물 19c의 합성

<261> 질소 분위기하에서 상기 19-B에서 제조한 화합물 19b(15.9 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓

이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 19c (9.9 g, 65%)를 얻었다. MS $[M+H]^+ = 743$

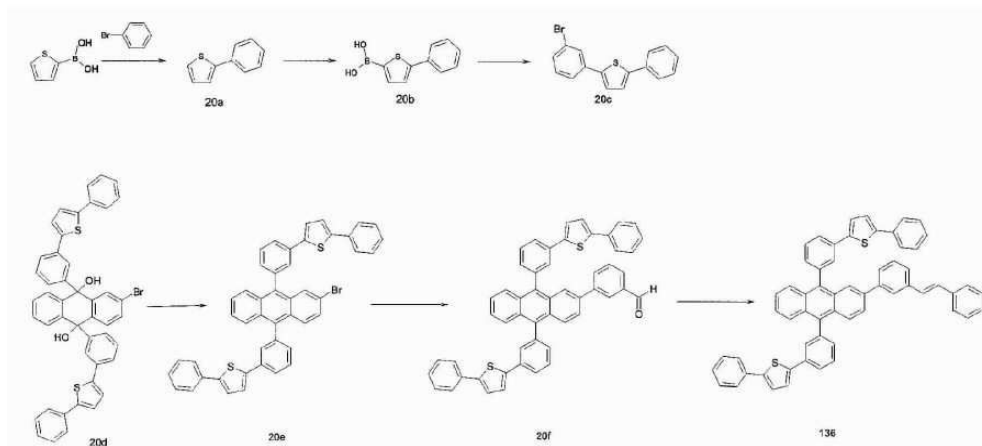
<262> 19-D. 화합물 19d의 합성

<263> 상기 실시예 17의 17-D에서 화합물 17c 대신에 상기 19-C에서 제조한 화합물 19c를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17의 17-D에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 19d (11 g, 82%)를 얻었다. MS $[M+H]^+ = 768$

<264> 19-E. 화합물 133의 합성

<265> 상기 실시예 17의 17-E에서 화합물 17d 대신에 상기 19-D에서 제조한 화합물 19d를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17의 17-E에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 133(3.4 g, 85%)를 얻었다. MS $[M+H]^+ = 842$

<266> 실시예 20 : 화합물 136의 합성



<267>

20-A. 화합물 20a의 합성

<268> 삭제

<269> 화합물 2-싸이오펜 보론산 (10 g, 78.1 mmol)와 브로모 벤젠(7.48 mL, 70.3 mmol)을 무수 THF (300 mL)에 녹인 후, $Pd(PPh_3)_4$ (4.51 g, 3.91 mmol)과 K_2CO_3 수용액 (156 mL, 312.4 mmol)을 넣고, 3시간 동안 환류시켰다. 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘으로 수분을 제거하였다. 유기층을 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 흰색 고체 화합물 20a (10g, 80%)을 얻었다. :MS $[M+H]$ 161

<270> 20-B. 화합물 20b의 합성

<271> 상기 20-A에서 제조한 화합물 20a(5g, 31.3 mmol)을 무수 THF (200 mL)에 녹인 후, $-10^\circ C$ 까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(15 mL, 37.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반하고 다시 $-78^\circ C$ 까지 온도를 내린후, 보론 산트라이메틸에스터(10.5 mL, 93.75 mmol)을 천천히 넣어주고, 12시간 교반하였다. $0^\circ C$ 까지 온도를 내린 후 10wt%의 황산 수용액 (16 mL)을 넣고 교반하여 흰색 침전을 얻었다. 유기층을 THF로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 여과하였다. 이 여과액을 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹인 후, 과량의 수용액을 넣고 디메틸클로로메탄으로 유기층을 분리하였다. 분리된 수용액 층에 염산 수용액을 가하여 침전물을 생성시킨 후 여과하여 화합물 20b (2.7 g, 42%)을 얻었다.

<272> 20-C. 화합물 20c의 합성

<273> 3-브로모요오드벤젠(3.5 g, 12.3 mmol)과 상기 20-B에서 제조한 화합물 20b(2.5 g, 12.3 mmol)을 무수 THF (100 mL)에 녹이고, $Pd(PPh_3)_4$ (0.71 g, 0.61mmol)을 넣고, K_2CO_3 (3.4 g, 24.6 mmol)을 H_2O (50 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 20c (2.9 g, 75%)을 얻었다. MS $[M+H]^+=315$

<274>

21-D. 화합물 20d의 합성

<275>

질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 20-C에서 제조한 화합물 20c (16.7 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 17-A에서 제조한 화합물 17a (6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 20d(15 g, 90%)을 얻었다.

<276>

20-E. 화합물 20e의 합성

<277>

질소 분위기하에서 상기 20-D에서 제조한 화합물 20d(15.9 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 20e (9.5 g, 64%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 725

<278>

20-F. 화합물 20f의 합성

<279>

상기 실시예 17의 17-D에서 화합물 17c 대신에 상기 20-E에서 제조한 화합물 20e를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17의 17-D에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 20f (8 g, 81%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 750

<280>

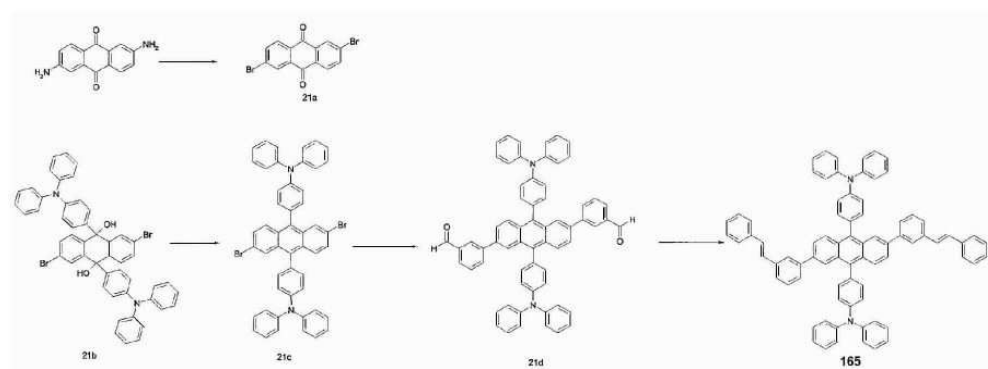
20-G. 화합물 136의 합성

<281>

상기 실시예 17의 17-E에서 화합물 17d 대신에 상기 20-f에서 제조한 화합물 20f를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17의 17-E에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 136(3.0 g, 82%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 824

<282>

실시예 21 : 화합물 165의 합성



<283>

21-A. 화합물 21a의 합성

<284>

삭제

<285>

2,6-디아미노안트라퀴논(23.8g, 100mmol)을 48% 하이드로젠 브로마이드수용액에 분산시킨 후, -20℃에서 나트륨 나이트라이트(14.1 g, 204 mmol)을 천천히 가하였다. 기체 발생이 끝난 후 48% 하이드로젠 브로마이드 수용액 (63mL)에 브롬화 구리 (29.5 g, 206 mmol)를 녹인 용액을 소량의 에탄올(50mL)과 함께 천천히 가하고 반응물의 온도를 상온까지 서서히 올린 후 한시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각 후 물을 가해 생성된 침전물을 여과하고 물로 씻은 후 진공 건조하였다. 얻어진 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 후 클로로포름으로 재결정하여 연한 노란색의 화합물 21a(10g, 27%)를 얻었다. MS[M+H]⁺ = 366

<286>

21-B. 화합물 21b의 합성

<287>

질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 실시예 19의 19-A에서 제조한 화합물 19a (17.2 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 21-A에서 제조한 화합물 21a (8.05 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황

산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 21b(17.7 g, 94%)을 얻었다. MS[M+H]⁺ = 856

<288> 21-C. 화합물 21c의 합성

<289> 질소 분위기하에서 상기 21-B에서 제조한 화합물 21b(17.5 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 21c (10.8 g, 64%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 822

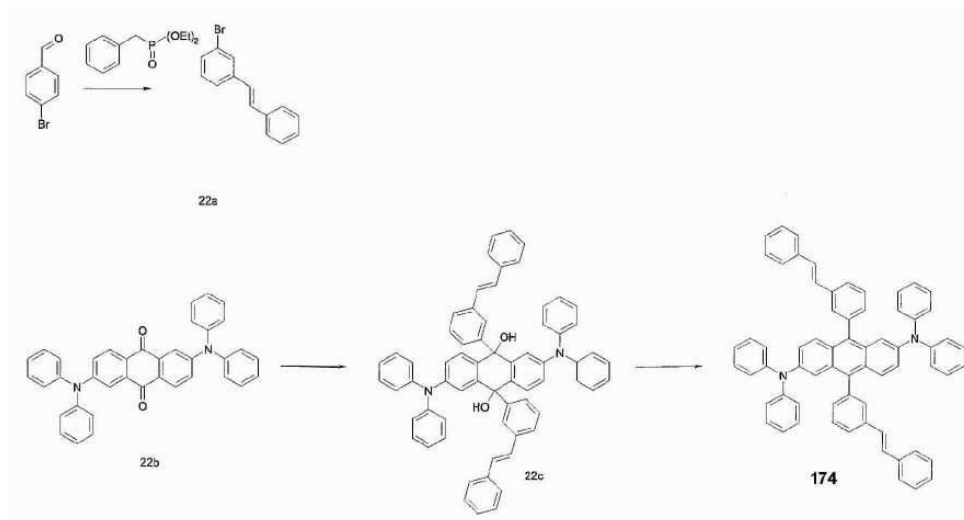
<290> 21-D. 화합물 21d의 합성

<291> 질소 분위기하에서 상기 21-C에서 제조한 화합물 21c (4 g, 4.86 mmol)을 THF (120 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(1.6 g, 10.69 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K₂CO₃ (3.3 g, 24.3 mmol)를 H₂O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.28 g, 0.24 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 21d (3.7 g, 88%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 872

<292> 21-E. 화합물 165의 합성

<293> 질소분위기하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.8 mL, 8.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.38 g, 16 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 21-D에서 제조한 화합물 21d(3.5 g, 4.0 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 165 (3.3 g, 81%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 1021

<294> 실시예 22 : 화합물 174의 합성



<295> 22-A. 화합물 22a의 합성

<296> 삭제

<297> 질소 분위기하에서, NaH (3 g, 75 mmol)와 18-크라운-6 (1.43 g, 5.4 mmol)을 THF(100 mL)에 녹이고 벤질 포스 토릭산 디에틸 에스테르(13.5 mL, 65 mmol)를 넣었다. 냉각상태(0℃)에서 4-브로모벤젠알데하이드(10 g, 54 mmol)를 천천히 넣었다. 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 반응액에 물을 넣고 에테르로 추출한 후 황산 마그네슘으로 건조하고 감압 증류하였다. 에탄올로 재결정하여 화합물 22a(10 g, 75%)를 얻었다. MS [M] = 295

<298> 22-B. 화합물 22b의 합성

<299> 상기 21-A에서 제조한 화합물 21a (3.1 g, 8.5 mmol), 디페닐아민(6.02 g, 20.4 mmol), $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.097 g, 0.17 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.05 g, 0.255 mmol) 및 소듐 t-부톡사이드 (2.45 g, 25.5 mmol)를 톨루엔 (100 mL)에 넣고, 2시간 가량 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액을 THF와 H_2O 의 혼합액에 넣었다. 유기층을 증분리하고 MgSO_4 로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼크로마토그래피로 정제한 후 화합물 22b (3.0 g, 65%)을 얻었다. MS $[\text{M}+\text{H}]^+ = 542$

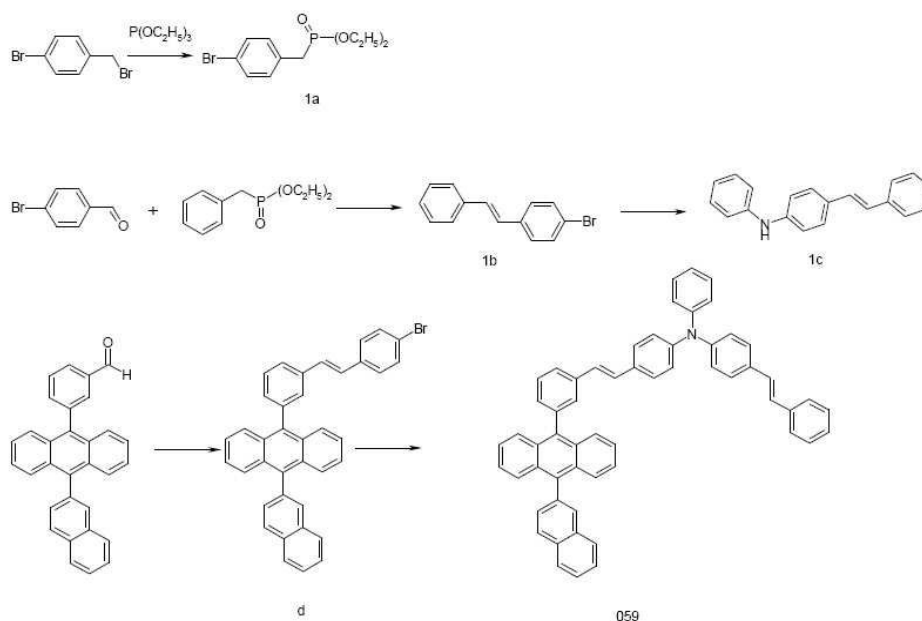
<300> 22-C. 화합물 22c의 합성

<301> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 22-A에서 제조한 화합물 22a (3.9 g, 13.2 mmol)을 녹이고, -78°C 에서 t-부틸리튬(11.7 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 22-B에서 제조한 화합물 22b(3 g, 5.5 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 22c(4.2 g, 85%)을 얻었다.

<302> 22-D. 화합물 174의 합성

<303> 질소 분위기하에서 상기 22-c에서 제조한 화합물 22c(4.2 g, 5.6mmol)을 아세트산 (50 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(9.4g, 57.4 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(10 g, 115 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 174(3.2 g, 65%)를 얻었다. MS $[\text{M}+\text{H}]^+ = 868$

<304> 실시예 23: 화합물 59의 합성



<305>

23-A. 화합물 23a의 합성

<306> 삭제

<307> N_2 하에서 4-브로모벤질 브로마이드(20 g, 76 mmol)와 트라이에틸 포스파이트(50 mL, 0.29 mol)에 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응물을 상온으로 내리고 감압 증류를 하여 액상 상태의 화합물 23a(22 g, 98%)를 얻었다.

<308> 23-B. 화합물 23b의 합성

<309> N_2 하에서 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(3 g, 75 mmol), 18-크라운-6(1.43 g, 5.4 mmol)를 THF (100

mL)에 넣은 후, 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(13.5 mL, 64.8 mmol)를 넣었다. 0℃에서 4-브로모벤즈알데하이드 (10 g, 54 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 23b (10.5 g, 75%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 259

<310> 23-C. 화합물 23c의 합성

<311> 질소 분위기 하에서 상기 23-B에서 제조한 화합물 23b (3.68 g, 14 mmol), 아닐린 (1.5 ml, 16.8 mmol), Pd(dba)₂ (0.125 g, 0.13 mmol), P(t-Bu)₃ (0.04 g, 0.2 mmol) 및 소듐 t-부톡사이드 (1.80 g, 18.7 mmol)를 톨루엔 (50 mL)에 넣고, 3시간 가량 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액을 THF와 H₂O의 혼합액에 넣었다. 유기층을 층분리하고 황산 마그네슘으로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼크로마토그래피로 정제한 후 화합물 23c(2.2 g, 58%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 271

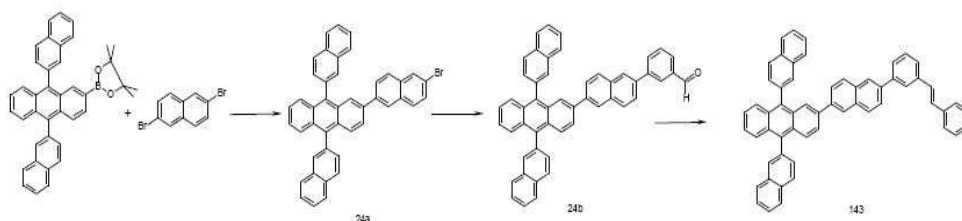
<312> 23-D. 화합물 23d의 합성

<313> N₂ 하에서 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.78 g, 19.4 mmol), 18-크라운-6 (0.26 g, 0.97 mmol)를 THF (100 mL)에 넣은 후, 상기 23-A에서 제조한 화합물 23a (6 g, 19.4 mmol)를 넣었다. 0℃에서 상기 실시예 1의 제조예 1-A에서 제조한 화합물 1a (4 g, 9.7 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H₂O를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 23d (5.2 g, 96%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 561

<314> 23-E. 화합물 59의 합성

<315> 질소 분위기 하에서 상기 23-D에서 제조한 화합물 23d (2 g, 3.5 mmol), 상기 실시예 23-C에서 제조된 화합물 23c(1.22 g, 4.5 mmol), Pd(dba)₂ (40.6 mg, 0.033 mmol), P(t-Bu)₃ (28.8 mg, 0.033 mmol) 및 소듐 t-부톡사이드 (0.84 g, 8.75 mmol)를 톨루엔 (120 mL)에 넣고, 12시간 가량 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액을 THF와 H₂O의 혼합액에 넣었다. 유기층을 층분리하고 황산 마그네슘으로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼크로마토그래피로 정제한 후 화합물 59 (2 g, 76%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 751

<316> 실시예 24: 화합물 143의 합성



<317>

24-A. 화합물 24a의 합성

<318> 삭제

<319> 질소분위기하에서 상기 실시예 18의 18-D에서 제조한 18d(4.7 g, 8.5 mmol), 2,6-디브로모 나프탈렌(2.4 g, 8.5 mmol)를 THF (120 mL)에 녹였다. 2M K₂CO₃ 용액 (60 mL)를 첨가하고, 마지막으로 Pd(PPh₃)₄ (0.23 g, 0.3 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 유기층을 날린 후, 컬럼크로마토그래프로 화합물24a (3.9 g, 45%)를 얻었다. :MS [M+H]⁺ = 556

<320> 24-B. 화합물 24b의 합성

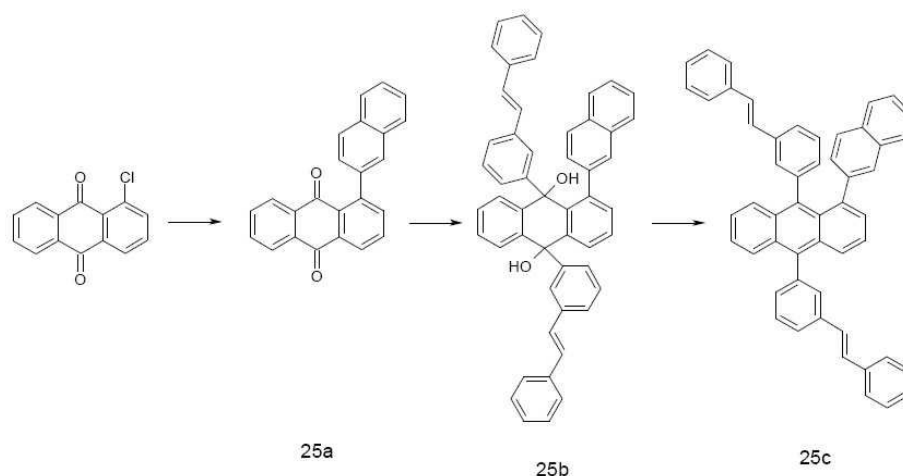
<321> 상기 실시예 17의 17-D에서 화합물 17c 대신에 상기 24-A에서 제조한 화합물 24a를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17의 17-D에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 24b (8 g, 81%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 635

<322> 24-C. 화합물 143의 합성

<323> 상기 실시예 17의 17-E에서 화합물 17d 대신에 상기 24-B에서 제조한 화합물 24b를 사용한 것을 제외하고는, 실

시예 17의 17-E에서와 동일한 방법으로 하여 화합물 143 (3.0 g, 82%)를 얻었다. MS $[M+H]^+ = 660$

실시예 25: 화합물 195의 합성



25-A. 화합물 25a의 합성

삭제

1-클로로안트라퀴논(41.2 mmol, 10.0 g)을 THF 200 mL에 완전히 녹이고, 여기에 2-나프탈렌보론산(45.3 mmol, 7.80 g, 칼륨 카보네이트(potassium carbonate) 2 M 용액 50mL, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (0) [tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)] (1.24 mmol, 1.43 g)을 넣고 19시간 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고, 여과한 후 물과 에탄올로 여러 번 세척하여 화합물 25a (13.2 g, 96 %)을 얻었다. MS [M]⁺ = 334

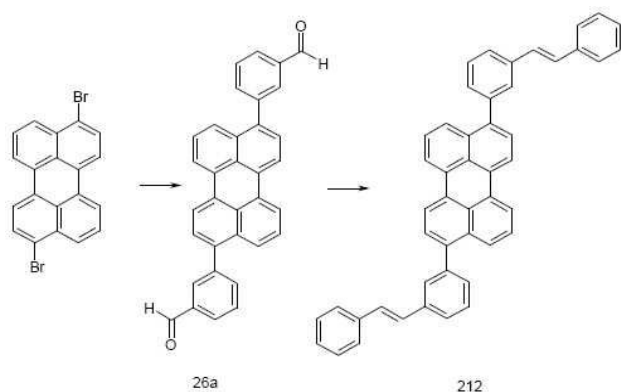
25-B. 화합물 25b의 합성

상기 실시예 22의 22-A에서 제조한 화합물 22a (20.4 mmol, 4.23 g)을 건조된 THF 100 mL에 넣어서 완전히 녹이고, 여기에 -78 °C 하에서 *n*-부틸리튬(8.2 mL, 헥산 중 2.5 M 용액)을 아주 천천히 넣었다. 1 시간 후에 상기 반응물에 상기 25-A에서 제조한 화합물 25a(8.17 mmol, 2.73 g)을 넣었다. 30분 후에 냉각 용기를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 NH₄Cl 수용액을 넣은 후 에틸에테르로 추출하였다. 추출한 반응물을 무수 마그네슘 설페이트로 건조하고 농축시켰다. 여기에 소량의 에틸에테르를 넣고 교반하다가 에탄올을 넣고 교반하였다. 이어서, 반응물을 여과하고 건조시킨 후 디알콜 화합물 25b (4.58g, 95%)를 얻었다. MS [M] = 676(- H₂O form)

25-C. 화합물 195의 합성

상기 화합물 25b (4.7 g, 6.77 mmol), 요오드화칼륨(1.12 g, 6.77 mmol) 및 차아인산나트륨(sodium hypophosphite)(7.18 g, 67.7mmol)을 100 mL의 아세트산에서 3시간 동안 환류시켰다. 상기 반응물을 상온으로 냉각시킨 후 여과하고, 물과 에탄올로 여러 번 씻어준 후 건조하여 상기 화합물 195(2.77 g, 62%)을 얻었다. MS [M] = 660

<332> 실시예 26: 화합물 212의 합성



<333>

26-A. 화합물 26a의 합성

<334>

삭제

<335>

질소 분위기하에서 3,9-브로모페닐렌 (2 g, 4.86 mmol)을 THF (120 mL)에 녹이고, 3-포밀벤젠 보론산(1.6 g, 10.69 mmol)을 EtOH (50mL)에 녹여 첨가하였다. K_2CO_3 (3.3 g, 24.3 mmol)를 H_2O (100 mL)에 녹여 첨가하고, 마지막으로 $Pd(PPh_3)_4$ (0.28 g, 0.24 mmol)을 넣어, 약 12시간 환류 교반시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 여과하여 고체를 얻었다. 이 고체를 THF에 다시 녹인 후 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 화합물 26a (1.9 g, 85%)를 얻었다. MS $[M+H]^+ = 460$

<336>

26-B. 화합물 212의 합성

<337>

질소분위기하에서 벤질포스포린산 디에틸에테르(benzilphosphoric acid diethyl ether)(1.8 mL, 8.8 mmol), 나트륨 하이드라이드(sodium hydride)(0.38 g, 16 mmol), 18-크라운-6(0.1 g, 0.48 mmol)를 THF (100 mL)에 넣고, 0℃에서 상기 26-A에서 제조한 화합물 26a (1.8 g, 4.0 mmol)를 넣었다. 실온에서 12시간 가량 교반시켰다. 반응이 끝난 후 반응 혼합액에 THF와 H_2O 를 넣었다. 유기층을 층 분리하고 $MgSO_4$ 로 건조한 후 농축시켰다. THF/EtOH로 재결정하여 화합물 212 (1.97g, 81%)을 얻었다. MS $[M+H]^+ = 608$

<338>

실험예 1

<339>

ITO(인듐주석산화물)가 1000 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판 (corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2 차 걸리진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

<340>

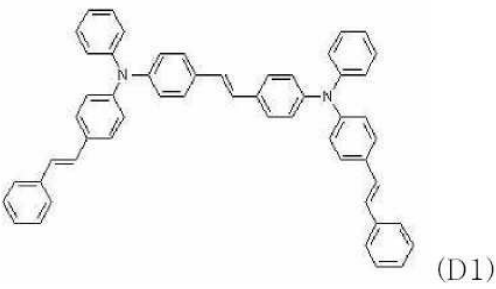
상기 ITO 전극 위에 3,6-비스-2-나프틸페닐아미노-N-[4-(2-나프틸페닐)아미노 페닐]카바졸 (800 Å), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB) (300 Å), 하기 표 7 및 표 8의 호스트 물질(300 Å) 및 9,10-비스-2-나프틸-2-[4-(N-페닐벤조 이미다조일)페닐]안트라센 (300 Å)을 순차적으로 열 진공 증착하여 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 차례로 형성시켰다. 상기 발광층에서 도판트 물질로는 스티릴아민 화합물(D1)과 표 1 중 화합물 59를 사용하였다.

<341>

상기 전자 수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2000 Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기발광소자를 제조하였다.

<342>

상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4~0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$ torr를 유지하였다.



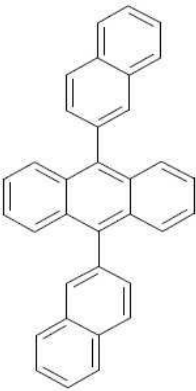
상기와 같이 제작된 소자에 전류를 인가하였을 때, 하기 표 7 및 표 8에 나타난 결과들을 얻었다.

삭제

표 7

실험예 번호	호스트 물질	도판트 물질	도핑농도 (중량%)	전압 (V)	전류효율 (cd/A)	시감효율 (lm/W)	색좌표(x,y)
1-1	화합물 1	D1	8	8.5	5.4	2.0	(0.140, 0.156)
1-2	화합물 1	화합물 59	8	8.9	3.4	1.2	(0.148, 0.118)
1-3	화합물 1	화합물 59	10	8.8	3.7	1.3	(0.148, 0.122)
1-4	화합물 1	화합물 50	4	7.9	18.1	7.2	(0.309, 0.638)
1-5	화합물 2	D1	8	8.9	5.6	2.0	(0.139, 0.149)
1-6	화합물 2	화합물 59	10	8.8	3.9	1.4	(0.147, 0.118)
1-7	화합물 5	화합물 59	8	7.8	2.8	1.1	(0.149, 0.120)
1-8	화합물 11	화합물 59	8	7.9	3.1	1.3	(0.148, 0.124)
1-9	화합물 12	화합물 59	8	7.8	3.5	1.5	(0.148, 0.120)
1-10	화합물 65	D1	8	8.9	5.3	1.9	(0.149, 0.226)
1-11	화합물 90	화합물 59	10	8.5	3.8	1.4	(0.147, 0.119)
1-12	화합물 50	화합물 59	8	7.8	3.2	1.3	(0.150, 0.132)
1-13	비교화합물1	화합물 59	8	8.8	2.5	0.9	(0.150, 0.126)

[비교화합물 1]



상기 표 7에 나타난 값들은 100mA/cm²의 전류밀도에서 측정된 값이다.

삭제

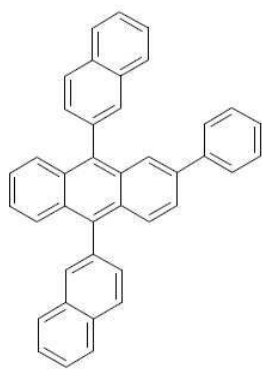
표 8

실험예 번호	호스트 물질	도판트 물질	도핑농도 (중량%)	전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	시감 효율 (lm/W)	색좌표 (x,y)	수명(T ₈₀) @50mA/ cm ²
1-14	화합물 124	화합물 174	4%	7.45	19.6	8.25	(0.316,0.639)	210h
1-15	화합물 125	화합물 174	4%	7.55	20.5	8.52	(0.322,0.636)	200h
1-16	화합물 136	화합물 174	4%	7.62	18.5	7.63	(0.311,0.643)	245h
1-17	비교 화합물 2	화합물 174	4%	7.66	18.3	7.51	(0.321,0.636)	95h

<349>

<350>

[비교화합물 2]



<352>

실험예 2

<353>

정공주입층 물질로서 3,6-비스-2-나프틸페닐아미노-N-[4-(2-나프틸페닐)아미노 페닐]카바졸 대신에 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌을 사용하고, 발광 호스트 및 도판트 물질로서 하기 표 9의 물질을 사용한 것을 제외하고는, 실험예 1과 동일하게 실시하였다. 그 결과를 하기 표 9에 나타내었다.

표 9

실험예 번호	호스트 물질	도판트 물질	도핑 농도 (중량%)	전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	시감 효율 (lm/W)	색좌표 (x,y)	수명(T ₈₀) @50mA/ cm ²
1-18	화합물 124	화합물 174	4%	6.76	18.2	8.45	(0.319,0.639)	520h
1-19	화합물 125	화합물 174	4%	6.77	18.3	8.48	(0.320,0.637)	550h
1-20	화합물 136	화합물 174	4%	6.84	17.0	7.79	(0.308,0.642)	450h
1-21	비교 화합물 2	화합물 174	4%	6.91	17.4	7.92	(0.323,0.633)	190h

<354>

발명의 효과

<355>

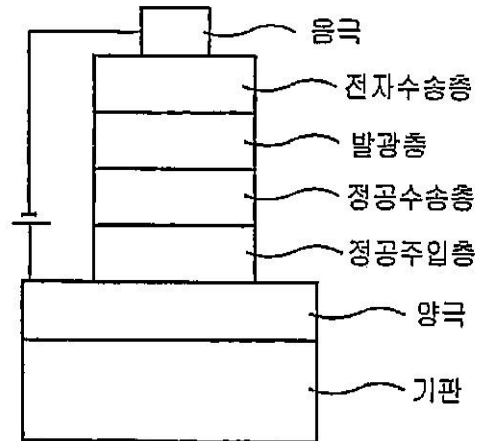
본 발명의 화합물은 신규한 구조의 발광물질로서, 유기발광소자에서 유기물층 재료로서 사용될 수 있으며, 특히 단독으로 발광 물질 역할을 할 수 있을 뿐만 아니라, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서 역할을 하거나, 적절한 호스트와 함께 발광 도판트로서 역할을 할 수도 있다.

도면의 간단한 설명

<1> 도 1은 본 발명의 하나의 실시 상태에 따른 유기발광소자의 구조를 예시한 도이다.

도면

도면1



专利名称(译)	发光材料和使用其的有机发光元件		
公开(公告)号	KR100827917B1	公开(公告)日	2008-05-07
申请号	KR1020060114089	申请日	2006-11-17
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
[标]发明人	KIM KYEOM KONG 김공겸 JANG HYE YOUNG 장혜영 HONG SUNG KIL 홍성길 YEO SUNG JIN 여성진 JEON SANG YOUNG 전상영		
发明人	김공겸 장혜영 홍성길 여성진 전상영		
IPC分类号	C09K11/06 C07C11/00		
CPC分类号	C09K11/06 C07C13/62 C07C15/60 C07C211/54 C07C2603/24 C07D209/86 C07D333/08 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0055 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/5012 H05B33/14 Y10S428/917		
代理人(译)	的专利法.		
优先权	1020060044097 2006-05-17 KR 1020050111004 2005-11-18 KR		
其他公开文献	KR1020070053148A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

目的：提供一种化合物，其可用作有机发光器件中的有机层材料，特别是单独用作发光材料，发光主体与适当的掺杂剂一起使用，或发光掺杂剂与适当的主体一起使用。构成：该化合物具有由下式(1)表示的结构，其中Ar¹是取代或未取代的C₅-20亚芳基，Ar²是C₆-20芳基，除位置之外的位置具有氢原子键合至 - (R¹)_n - , (R²)_m , L, L为直接键，取代或未取代的C₅-20亚芳基或取代或未取代的C₅-20杂芳基，每个R式(1-b)中，R¹和R²独立地为式(1-a)，当Ar²为C₆芳基且Z为氢原子时，式(1-b)，a取代或未取代的C₁-20烷基，取代或未取代的C₂-20烯基，取代或未取代的C₂-20炔基p，取代或未取代的C₆-20芳基或取代或未取代的C₅-20杂芳基，n和m为0-3的整数，其中n + m >= 1。

