



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2011년07월29일
(11) 등록번호 10-1052973
(24) 등록일자 2011년07월25일

(51) Int. Cl.
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 403/14 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2009-7023115
(22) 출원일자(국제출원일자) 2009년11월03일
심사청구일자 2009년11월04일
(85) 번역문제출일자 2009년11월04일
(65) 공개번호 10-2010-0062973
(43) 공개일자 2010년06월10일
(86) 국제출원번호 PCT/KR2009/006437
(87) 국제공개번호 WO 2010/062065
국제공개일자 2010년06월03일
(30) 우선권주장
1020080108602 2008년11월03일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
W02007095118 A2
논문1:Bull.Chem.Soc.Jpn
KR100851519 B1
KR100831356 B1
전체 청구항 수 : 총 17 항

(73) 특허권자
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의도동 20
(72) 발명자
이동훈
대전광역시 유성구 하기동 송림마을아파트 507동 601호
박대윤
대전광역시 유성구 관평동 테크노밸리 쌍용아파트 408동 1402호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
정순성

심사관 : 최차희

(54) 새로운 합질소 헤테로환 화합물 및 이를 이용한 유기전자소자

(57) 요약

본 발명은 새로운 합질소 헤테로환 유도체 및 이를 이용한 유기전자소자를 제공한다. 본 발명에 따른 유기전자소자는 효율, 구동전압 및 수명 면에서 우수한 특성을 나타낸다.

(72) 발명자

배재순

대전광역시 유성구 전민동 엑스포아파트 104동
1203호

남현

대전광역시 유성구 도룡동 386-1 LG화학사원아파트
9동 203호

장준기

대전광역시 유성구 전민동 세종아파트 101동 708호

홍성길

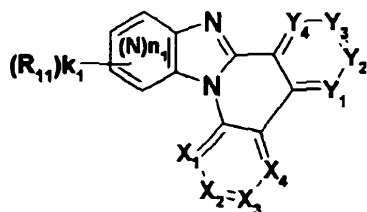
대전광역시 유성구 도룡동 LG 사원아파트 3동 207
호

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 2로 표시되거나 하기 화학식 2의 구조를 2 이상 포함하는 함질소 헤테로환 유도체:

[화학식 2]



상기 화학식 2에 있어서,

X_1 은 N 또는 CR_3 이고, X_2 은 N 또는 CR_4 이고, X_3 은 N 또는 CR_5 이고, X_4 은 N 또는 CR_6 이고, Y_1 은 N 또는 CR_7 이고, Y_2 은 N 또는 CR_8 이고, Y_3 은 N 또는 CR_9 이고, Y_4 은 N 또는 CR_{10} 이고, X_1 내지 X_4 와 Y_1 내지 Y_4 는 동시에 N은 아니며,

R_3 내지 R_{11} 은 각각 독립적으로 $-(L)_p-(Y)_q$ 이고, 여기서 p 는 0 내지 10의 정수이고, q 는 1 내지 10의 정수이고, R_3 내지 R_{11} 중 인접하는 2 이상의 기는 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있고,

단, R_1 내지 R_{11} 중 적어도 하나에서는 p 가 1 내지 10의 정수이며,

L 은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 치환 또는 비치환된 알케닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기; 또는 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

Y 는 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 또는 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고;

L 과 Y 가 각각 2 이상 존재하는 경우 이들은 각각 독립적으로 서로 같거나 상이하고,

$(N)_{n_1}$ 에서 N은 질소원자를 의미하며, 질소원자가 벤젠고리 내의 탄소원자를 대신할 수 있음을 나타내고, n_1 은 0 내지 2의 정수이며,

k_1 은 1 내지 4의 정수이고, k_1 이 2 이상의 정수인 경우 R_{11} 은 각각 서로 상이할 수 있다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 상기 화학식 2의 구조 두 개가 직접 연결되는 구조, 또는 상기 화학식 2의 구조 두 개가 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 2가의 연결기로 연결된 구조를 가지는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체.

청구항 6

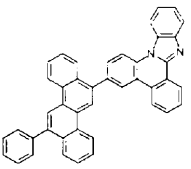
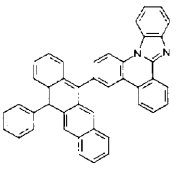
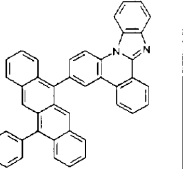
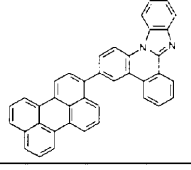
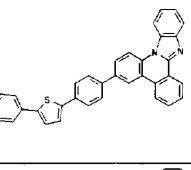
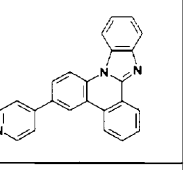
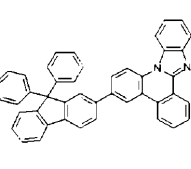
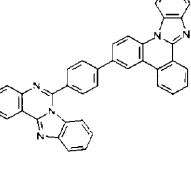
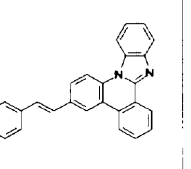
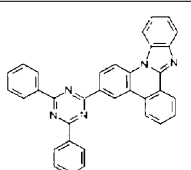
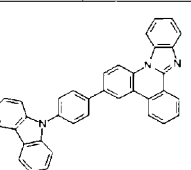
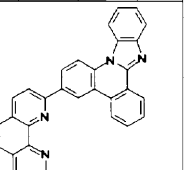
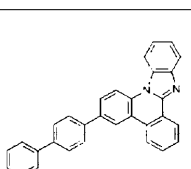
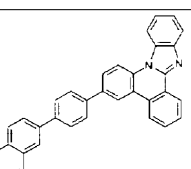
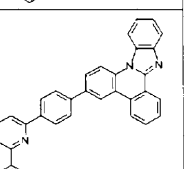
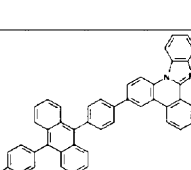
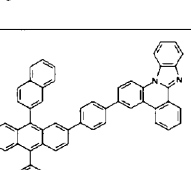
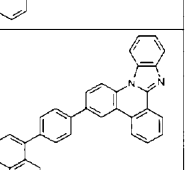
삭제

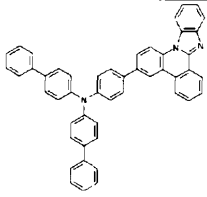
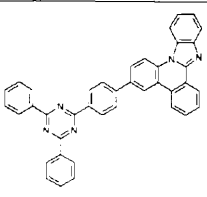
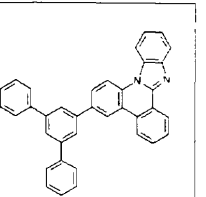
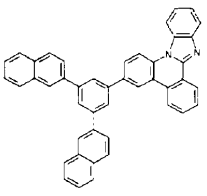
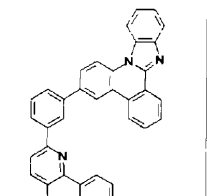
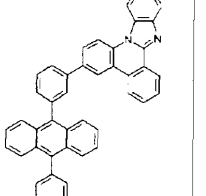
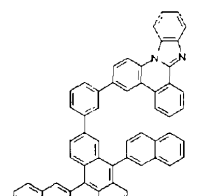
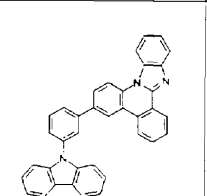
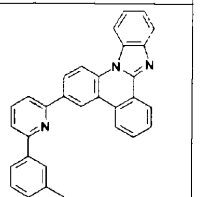
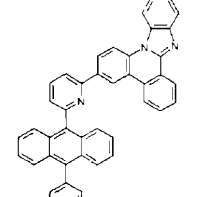
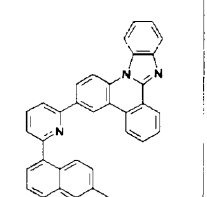
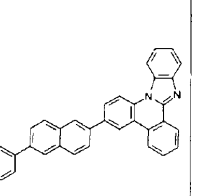
청구항 7

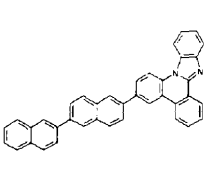
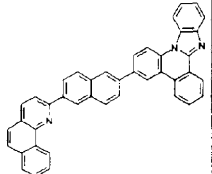
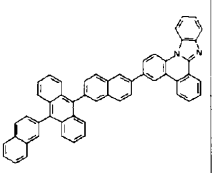
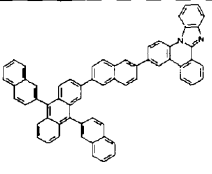
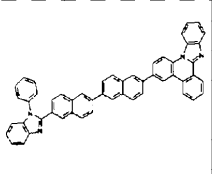
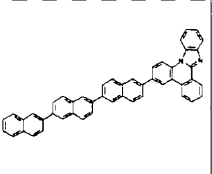
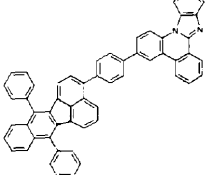
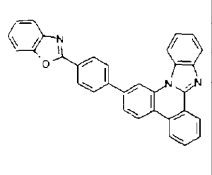
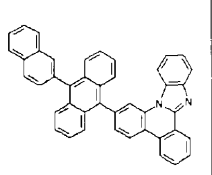
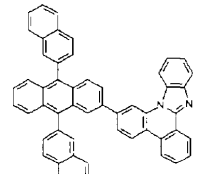
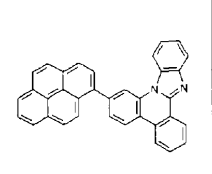
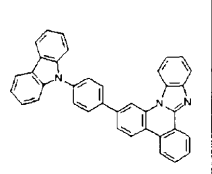
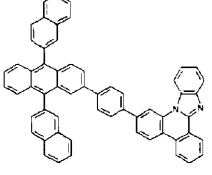
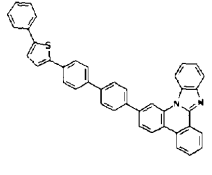
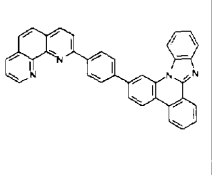
청구항 1에 있어서, 상기 합질소 헤테로환 유도체는 하기 표 1에 기재된 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 합질소 헤테로환 유도체:

[표 1]

1-a-1		1-a-2		1-a-3	
1-a-4		1-a-5		1-a-6	
1-a-7		1-a-8		1-a-9	
1-a-10		1-a-11		1-a-12	
1-a-13		1-a-14		1-a-15	
1-a-16		1-a-17		1-a-18	

1-a-19		1-a-20		1-a-21	
1-a-22		1-a-23		1-a-24	
1-a-25		1-a-26		1-a-27	
1-a-28		1-a-29		1-a-30	
1-a-31		1-a-32		1-a-33	
1-a-34		1-a-35		1-a-36	

1-a-37		1-a-38		1-a-39	
1-a-40		1-a-41		1-a-42	
1-a-43		1-a-44		1-a-45	
1-a-46		1-a-47		1-a-48	

1-a-49		1-a-50		1-a-51	
1-a-52		1-a-53		1-a-54	
1-a-55		1-a-56		1-a-57	
1-a-58		1-a-59		1-a-60	
1-a-61		1-a-62		1-a-63	

1-a-64		1-a-65		1-a-66	
1-a-67		1-a-68		1-a-69	
1-a-70		1-a-71		1-a-72	
1-a-73		1-a-74		1-a-75	
1-a-76		1-a-77		1-a-78	
1-a-79		1-a-80		1-a-81	

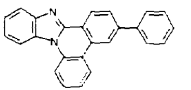
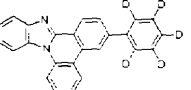
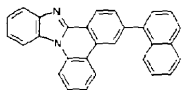
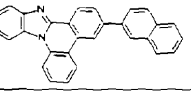
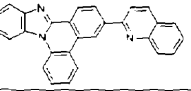
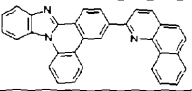
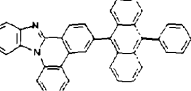
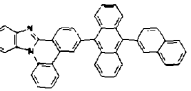
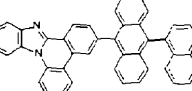
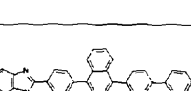
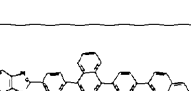
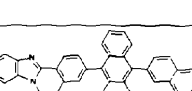


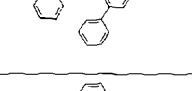
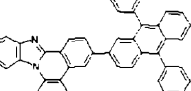
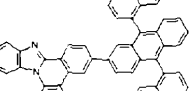
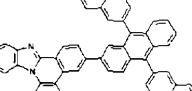
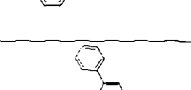
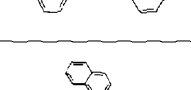
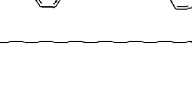
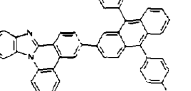
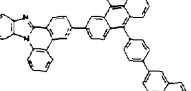
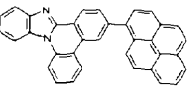
1-a-82		1-a-83		1-a-84	
1-a-85		1-a-86		1-a-87	
1-a-88		1-a-89		1-a-90	
1-a-91		1-a-92		1-a-93	
1-a-94		1-a-95		1-a-96	
1-a-97		1-a-98		1-a-99	

1-a-100		1-a-101		1-a-102	
---------	--	---------	--	---------	--

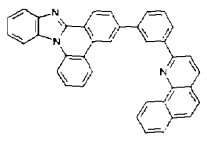
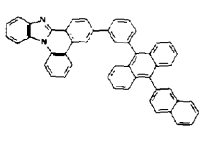
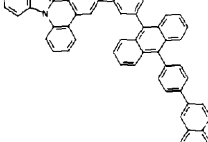
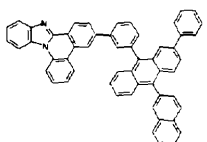
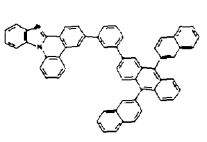
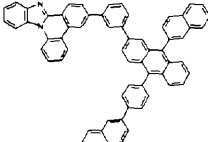
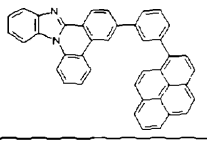
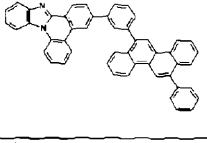
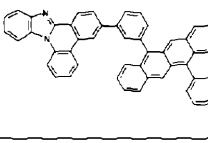
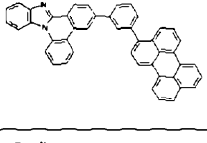
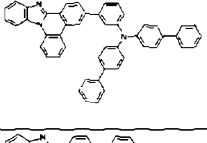
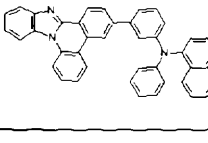
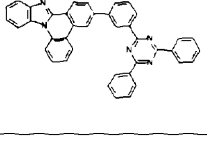
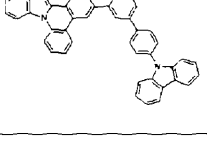
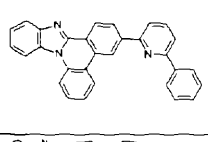
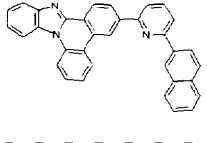
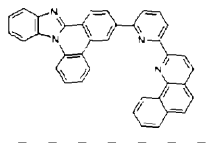
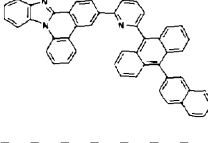
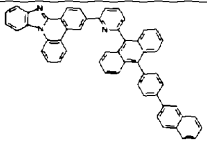
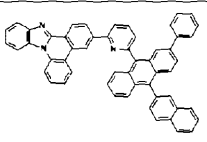
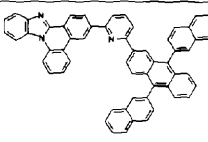
청구항 8

청구항 1에 있어서, 상기 합질소 헤테로환 유도체는 하기 표 2에 기재된 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 합질소 헤테로환 유도체:

[표 2]

1-b-1		1-b-2		1-b-3	
1-b-4		1-b-5		1-b-6	
1-b-7		1-b-8		1-b-9	
1-b-10		1-b-11		1-b-12	
1-b-13		1-b-14		1-b-15	
1-b-16		1-b-17		1-b-18	
1-b-19		1-b-20		1-b-21	
1-b-22		1-b-23		1-b-24	

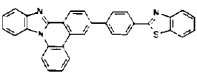
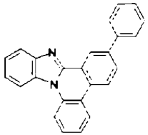
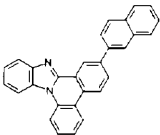
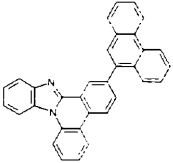
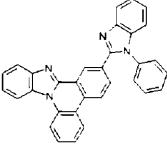
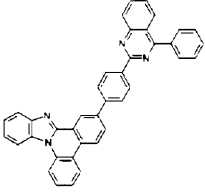
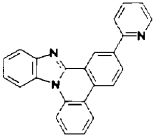
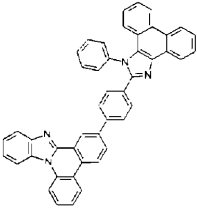
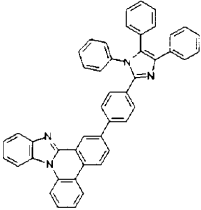
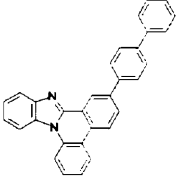
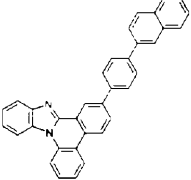
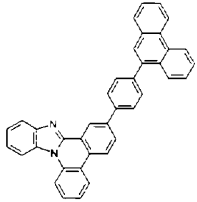
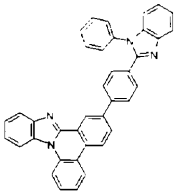
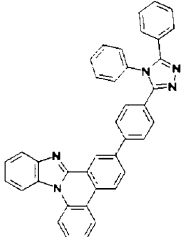
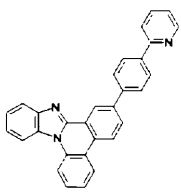
1-b-25		1-b-26		1-b-27	
1-b-28		1-b-29		1-b-30	
1-b-31		1-b-32		1-b-33	
1-b-34		1-b-35		1-b-36	
1-b-37		1-b-38		1-b-39	
1-b-40		1-b-41		1-b-42	
1-b-43		1-b-44		1-b-45	
1-b-46		1-b-47		1-b-48	

1-b-49		1-b-50		1-b-51	
1-b-52		1-b-53		1-b-54	
1-b-55		1-b-56		1-b-57	
1-b-58		1-b-59		1-b-60	
1-b-61		1-b-62		1-b-63	
1-b-64		1-b-65		1-b-66	
1-b-67		1-b-68		1-b-69	

1-b-70		1-b-71		1-b-72	
1-b-73		1-b-74		1-b-75	
1-b-76		1-b-77		1-b-78	
1-b-79		1-b-80		1-b-81	
1-b-82		1-b-83		1-b-84	
1-b-85		1-b-86		1-b-87	
1-b-88		1-b-89		1-b-90	
1-b-91		1-b-92		1-b-93	

1-b-94		1-b-95		1-b-96	
1-b-97		1-b-98		1-b-99	
1-b-100		1-b-101		1-b-102	
1-b-103		1-b-104		1-b-105	
1-b-106		1-b-107		1-b-108	

1-b-109		1-b-110		1-b-111	
1-b-112		1-b-113		1-b-114	
1-b-115		1-b-116		1-b-117	
1-b-118		1-b-119		1-b-120	
1-b-121		1-b-122		1-b-123	
1-b-124		1-b-125		1-b-126	

1-b-127		1-b-128		1-b-129	
1-b-130		1-b-131		1-b-132	
1-b-133		1-b-134		1-b-135	
1-b-136		1-b-137		1-b-138	
1-b-139		1-b-140		1-b-141	

1-b-142		1-b-143		1-b-144	
1-b-145		1-b-146		1-b-147	
1-b-148		1-b-149		1-b-150	
1-b-151		1-b-152		1-b-153	
1-b-154		1-b-155		1-b-156	

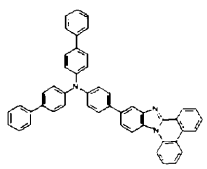
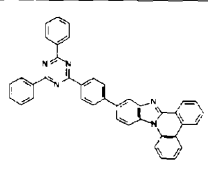
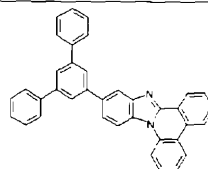
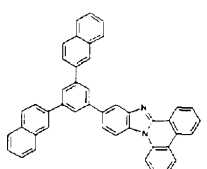
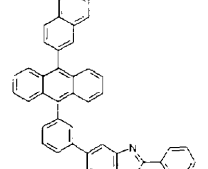
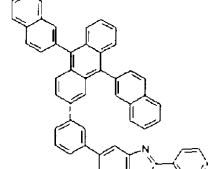
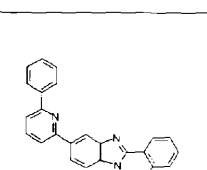
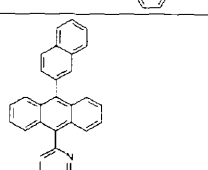
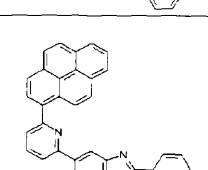
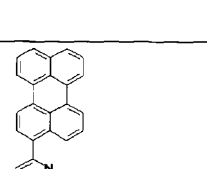
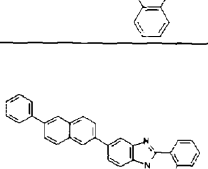
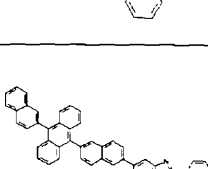
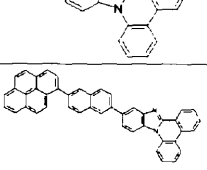
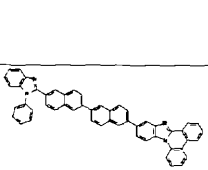
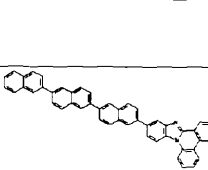
청구항 9

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 표 3에 기재된 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

[표 3]

1-c-1		1-c-2		1-c-3	
1-c-4		1-c-5		1-c-6	
1-c-7		1-c-8		1-c-9	
1-c-10		1-c-11		1-c-12	
1-c-13		1-c-14		1-c-15	
1-c-16		1-c-17		1-c-18	

1-c-19		1-c-20		1-c-21	
1-c-22		1-c-23		1-c-24	
1-c-25		1-c-26		1-c-27	
1-c-28		1-c-29		1-c-30	
1-c-31		1-c-32		1-c-33	
1-c-34		1-c-35		1-c-36	

1-c-37		1-c-38		1-c-39	
1-c-40		1-c-41		1-c-42	
1-c-43		1-c-44		1-c-45	
1-c-46		1-c-47		1-c-48	
1-c-49		1-c-50		1-c-51	

1-c-52		1-c-53		1-c-54	
1-c-55		1-c-56		1-c-57	
1-c-58		1-c-59		1-c-60	
1-c-61		1-c-62		1-c-63	
1-c-64					

청구항 10

삭제

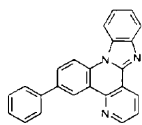
청구항 11

삭제

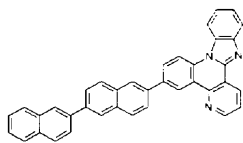
청구항 12

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

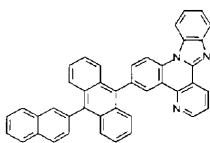
[3-a-1]



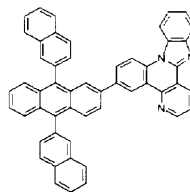
[3-a-2]



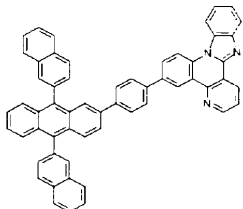
[3-a-3]



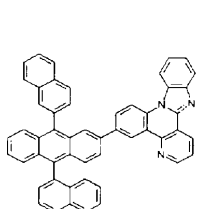
[3-a-4]



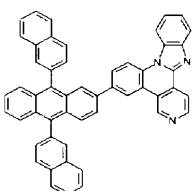
[3-a-5]



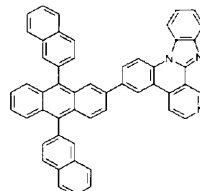
[3-a-6]



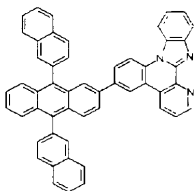
[3-a-7]



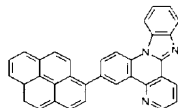
[3-a-8]



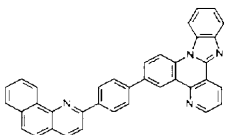
[3-a-9]



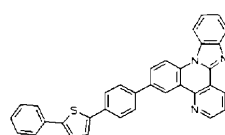
[3-a-10]



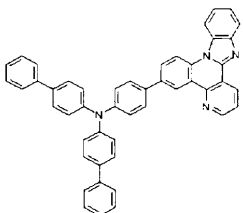
[3-a-11]



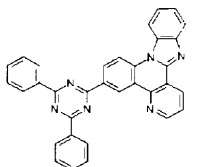
[3-a-12]



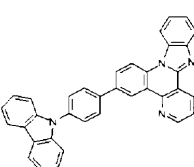
[3-a-13]



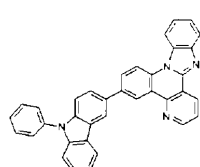
[3-a-14]



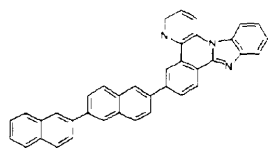
[3-a-15]



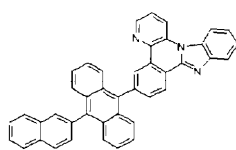
[3-a-16]



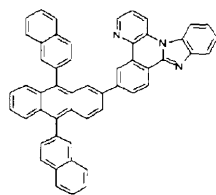
[3-b-1]



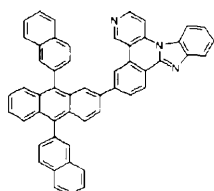
[3-b-2]



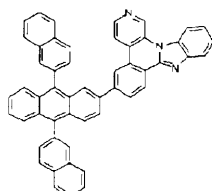
[3-b-3]



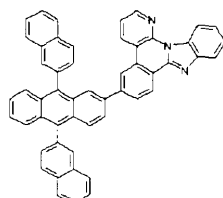
[3-b-4]



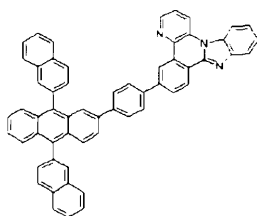
[3-b-5]



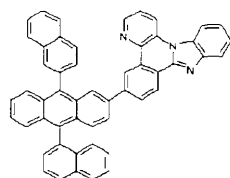
[3-b-6]



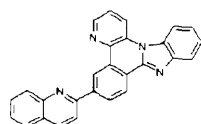
[3-b-7]



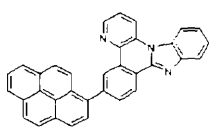
[3-b-8]



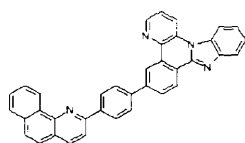
[3-b-9]



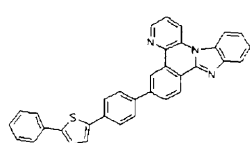
[3-b-10]



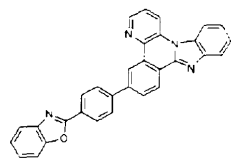
[3-b-11]



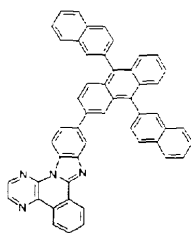
[3-b-12]



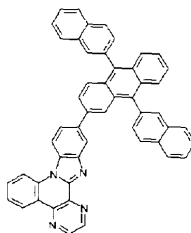
[3-b-13]



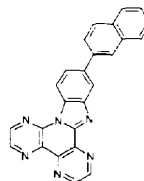
[3-c-1]



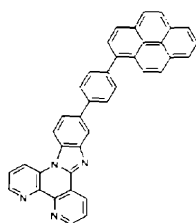
[3-c-2]



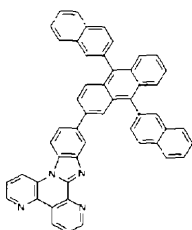
[3-c-3]



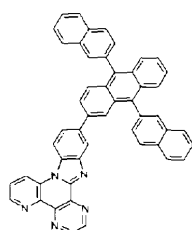
[3-c-4]



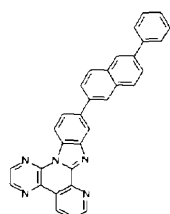
[3-c-5]



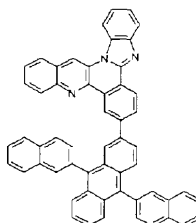
[3-c-6]



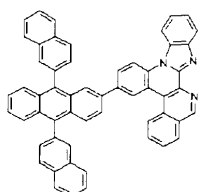
[3-c-7]



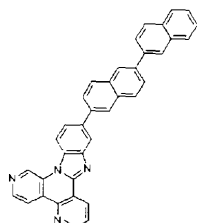
[3-c-8]



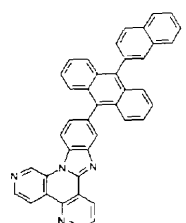
[3-c-9]



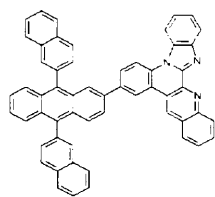
[3-c-10]



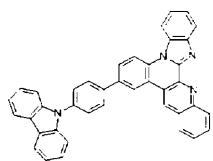
[3-c-11]



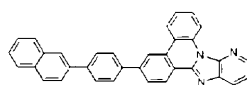
[3-c-12]



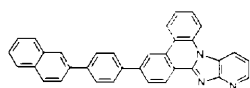
[3-c-13]



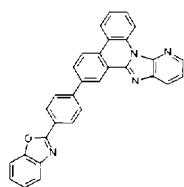
[3-c-14]



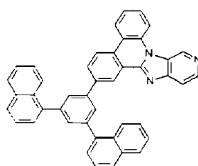
[3-c-15]



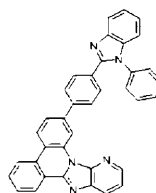
[3-c-16]



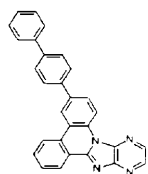
[3-c-17]



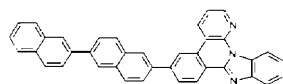
[3-c-18]



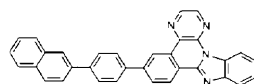
[3-c-19]



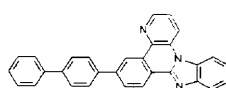
[3-c-20]



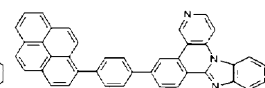
[3-c-21]



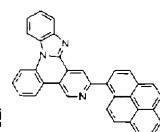
[3-c-22]



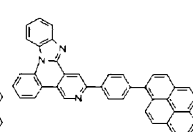
[3-c-23]



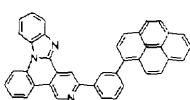
[3-c-24]



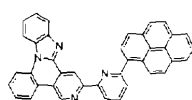
[3-c-25]



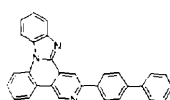
[3-c-26]



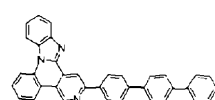
[3-c-27]



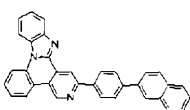
[3-c-28]



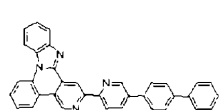
[3-c-29]



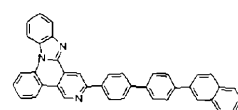
[3-c-30]



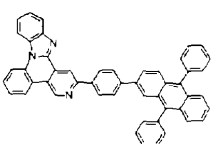
[3-c-31]



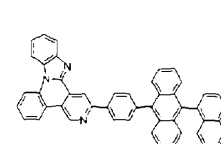
[3-c-32]



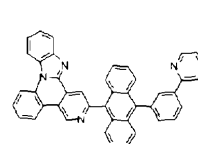
[3-c-33]



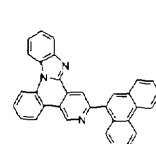
[3-c-34]



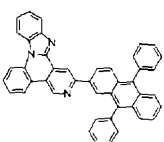
[3-c-35]



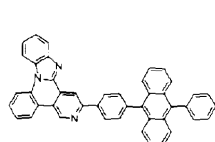
[3-c-36]



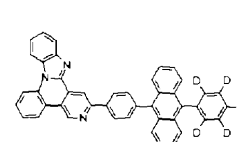
[3-c-37]



[3-c-38]



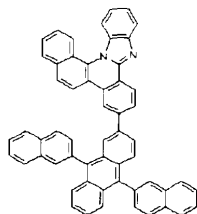
[3-c-39]



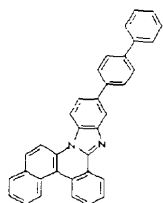
청구항 13

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

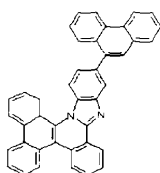
[4-a-1]



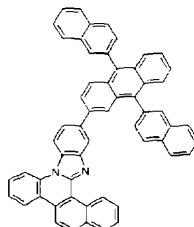
[4-a-2]



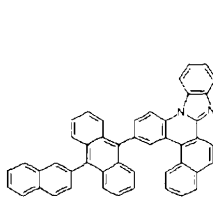
[4-a-3]



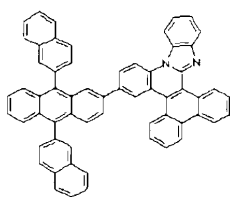
[4-a-4]



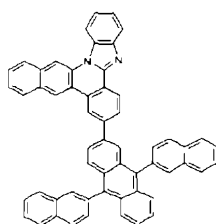
[4-a-5]



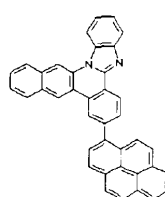
[4-a-6]



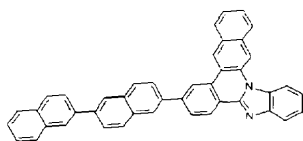
[4-a-7]



[4-a-8]



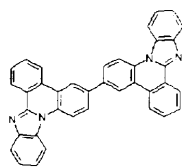
[4-a-9]



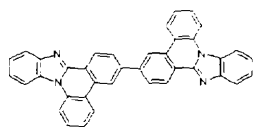
청구항 14

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

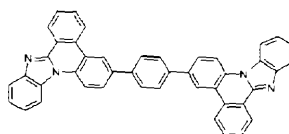
[5-a-1]



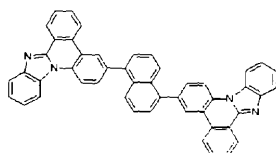
[5-a-2]



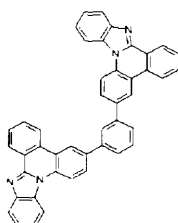
[5-a-3]



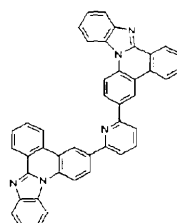
[5-a-4]



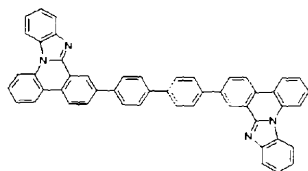
[5-a-5]



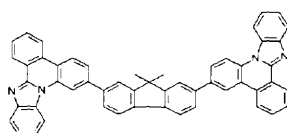
[5-a-6]



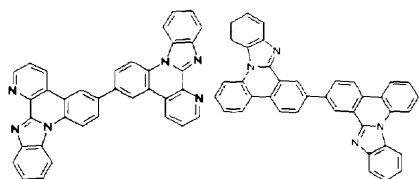
[5-a-7]



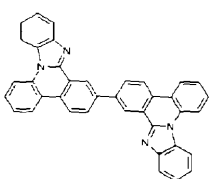
[5-a-8]



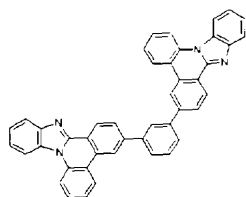
[5-a-12]



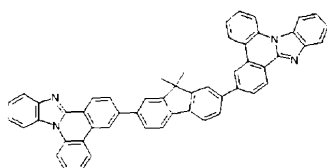
[5-a-13]



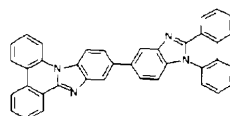
[5-a-14]



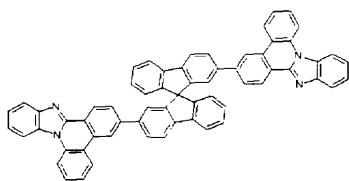
[5-a-15]



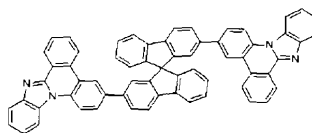
[5-a-16]



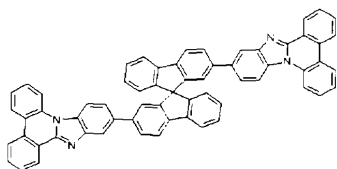
[5-a-23]



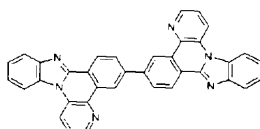
[5-a-24]



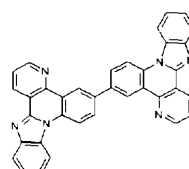
[5-a-25]



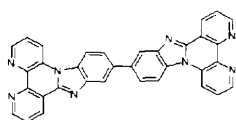
[5-a-26]



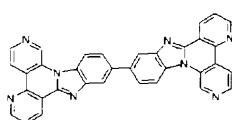
[5-a-27]



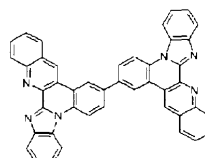
[5-a-28]



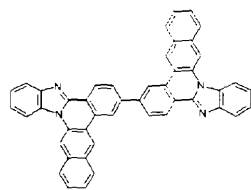
[5-a-29]



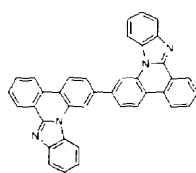
[5-a-30]



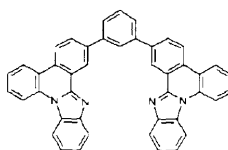
[5-a-31]



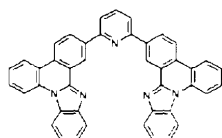
[5-a-32]



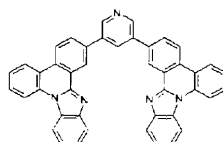
[5-a-33]



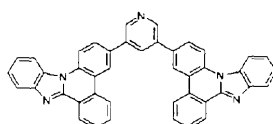
[5-a-34]



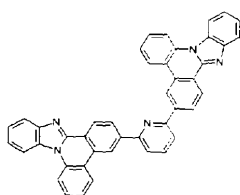
[5-a-35]



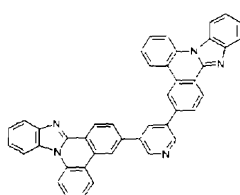
[5-a-36]



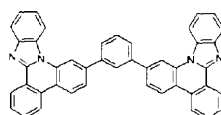
[5-a-37]



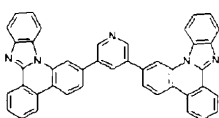
[5-a-38]



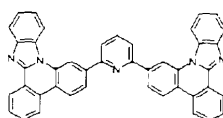
[5-a-39]



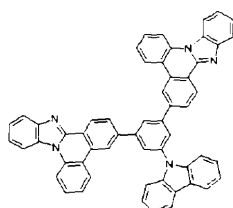
[5-a-40]



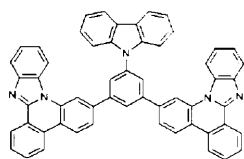
[5-a-41]



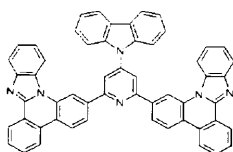
[5-a-42]



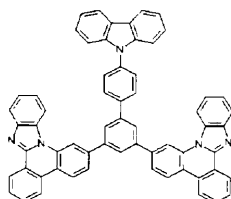
[5-a-43]



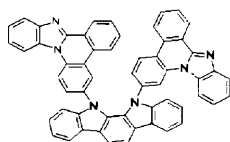
[5-a-44]



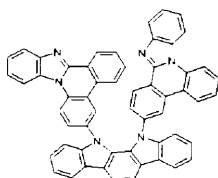
[5-a-45]



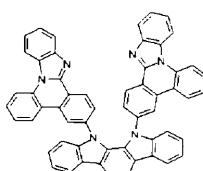
[5-a-46]



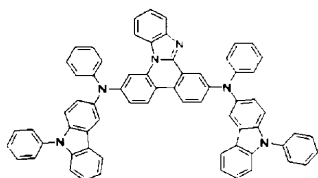
[5-a-47]



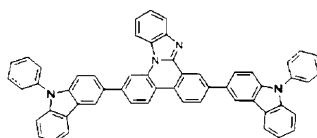
[5-a-48]



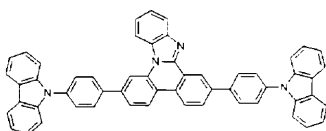
[5-a-49]



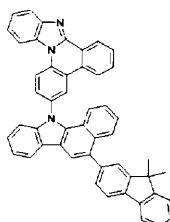
[5-a-50]



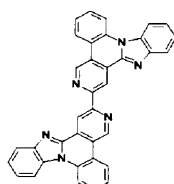
[5-a-51]



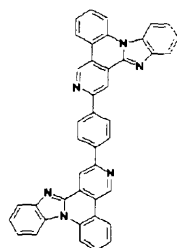
[5-a-52]



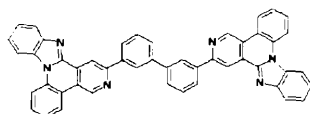
[5-a-53]



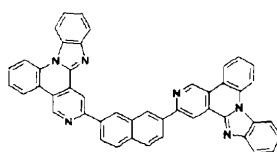
[5-a-54]



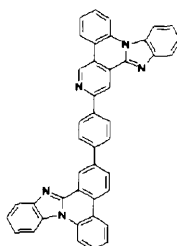
[5-a-55]



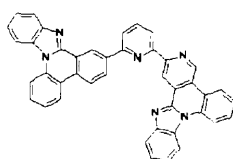
[5-a-56]



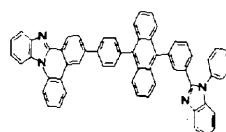
[5-a-57]



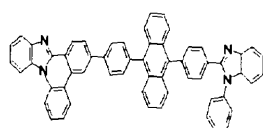
[5-a-58]



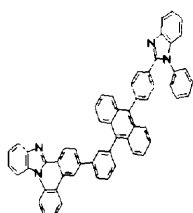
[5-a-59]



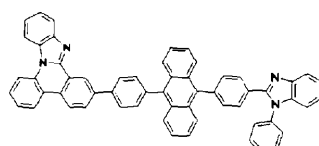
[5-a-60]



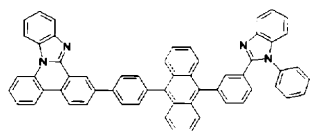
[5-a-61]



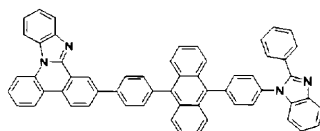
[5-a-62]



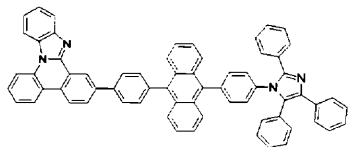
[5-a-63]



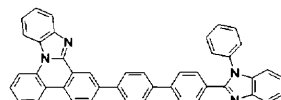
[5-a-62]



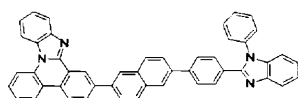
[5-a-63]



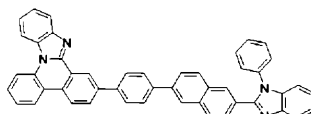
[5-a-64]



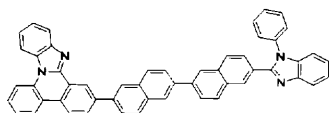
[5-a-65]



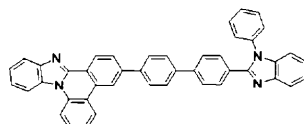
[5-a-66]



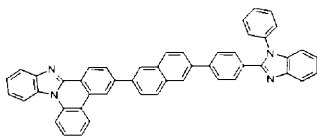
[5-a-67]



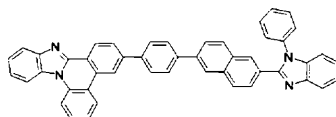
[5-a-68]



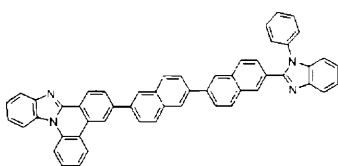
[5-a-69]



[5-a-70]



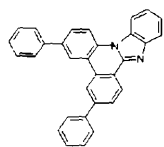
[5-a-71]



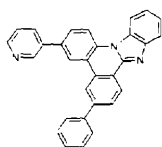
청구항 15

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

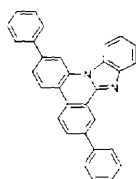
[6-a-1]



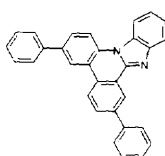
[6-a-2]



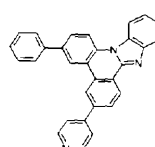
[6-a-3]



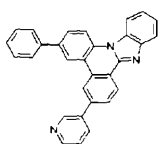
[6-a-4]



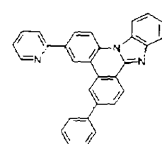
[6-a-5]



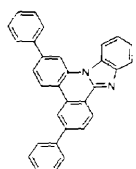
[6-a-6]



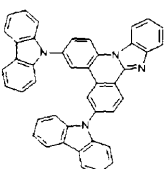
[6-a-7]



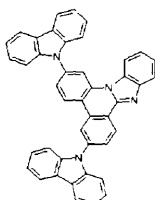
[6-a-8]



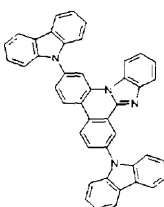
[6-a-9]



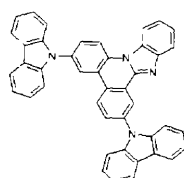
[6-a-10]



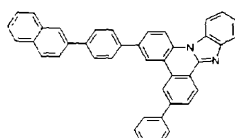
[6-a-11]



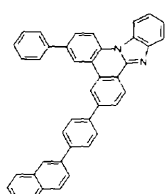
[6-a-12]



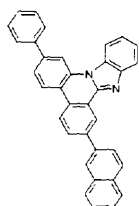
[6-a-13]



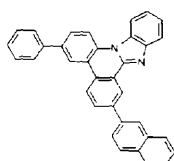
[6-a-14]



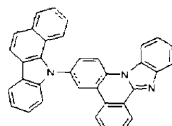
[6-a-15]



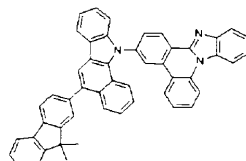
[6-a-16]



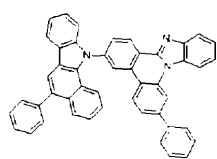
[6-a-17]



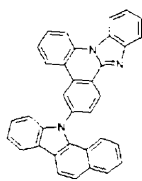
[6-a-18]



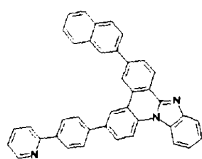
[6-a-19]



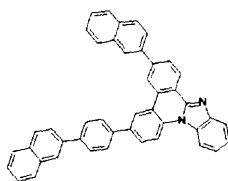
[6-a-20]



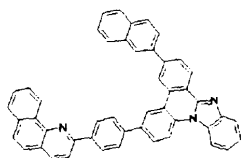
[6-a-21]



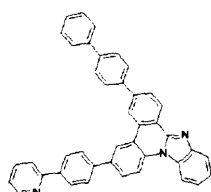
[6-a-22]



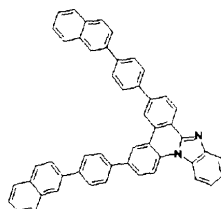
[6-a-23]



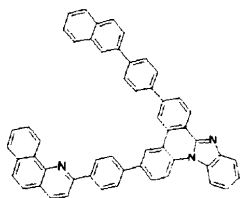
[6-a-24]



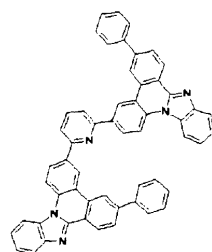
[6-a-25]



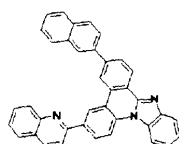
[6-a-26]



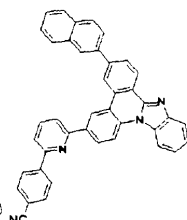
[6-a-27]



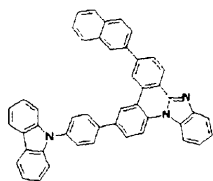
[6-a-28]



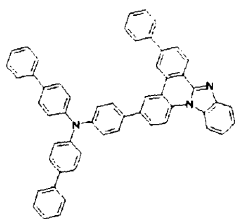
[6-a-29]



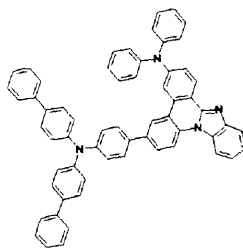
[6-a-30]



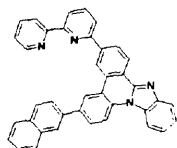
[6-a-31]



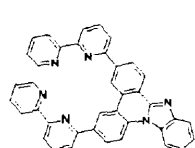
[6-a-32]



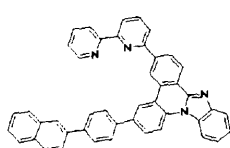
[6-a-33]



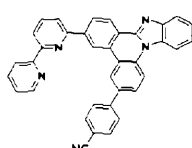
[6-a-34]



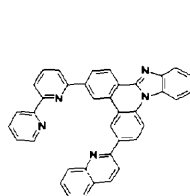
[6-a-35]



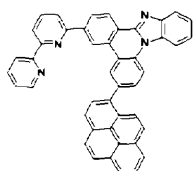
[6-a-36]



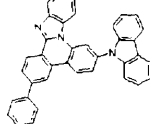
[6-a-37]



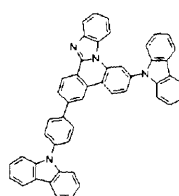
[6-a-38]



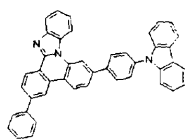
[6-a-39]



[6-a-40]



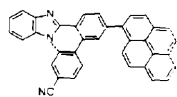
[6-a-41]



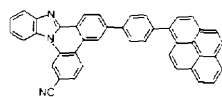
청구항 16

청구항 1에 있어서, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 함질소 헤테로환 유도체:

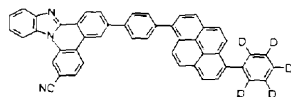
[7-a-1]



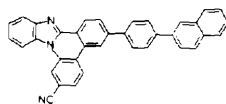
[7-a-2]



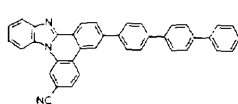
[7-a-3]



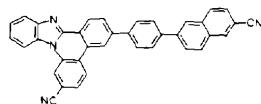
[7-a-4]



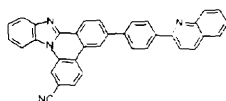
[7-a-5]



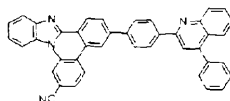
[7-a-6]



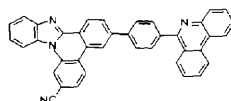
[7-a-7]



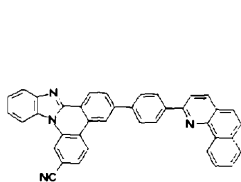
[7-a-8]



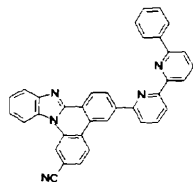
[7-a-9]



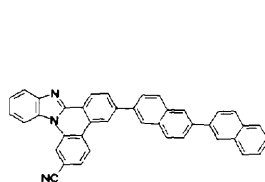
[7-a-10]



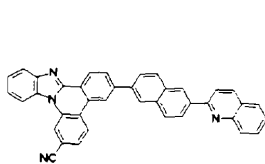
[7-a-11]



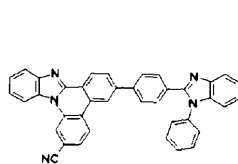
[7-a-12]



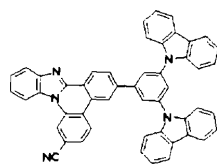
[7-a-13]



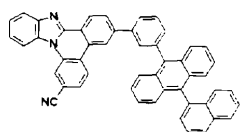
[7-a-14]



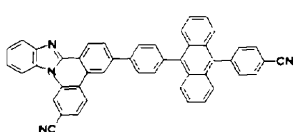
[7-a-15]



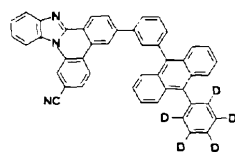
[7-a-16]



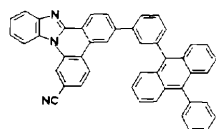
[7-a-17]



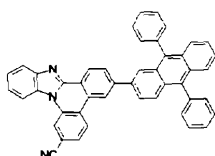
[7-a-18]



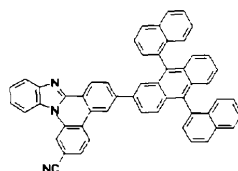
[7-a-19]



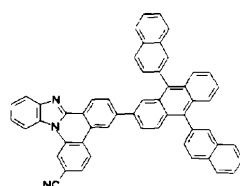
[7-a-20]



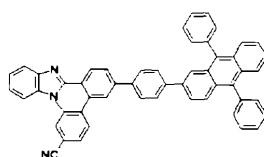
[7-a-21]



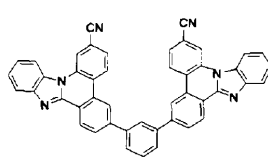
[7-a-21]



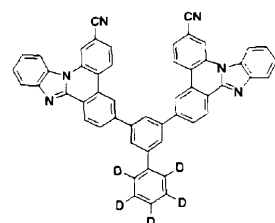
[7-a-22]



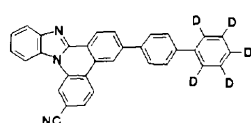
[7-a-23]



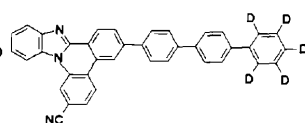
[7-a-24]



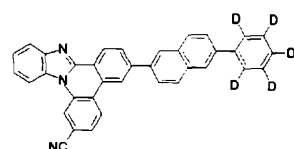
[7-a-25]



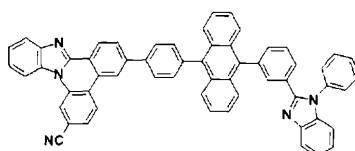
[7-a-26]



[7-a-27]



[7-a-28]



청구항 17

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전자소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 청구항 1, 5, 7 내지 9, 및 12 내지 16 중 어느 한 항의 함질소 헤테로환 유도체를 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 18

청구항 17에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 19

청구항 17에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 발광층의 호스트로서 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 20

청구항 17에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층이 상기 합질소 헤테로환 유도체를 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 21

청구항 17에 있어서, 상기 유기물층은 상기 합질소 헤테로환 유도체를 포함하는 유기물층 이외에, 아릴아미노기, 카바졸기, 또는 벤즈카바졸기를 포함하는 화합물을 포함하는 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 22

청구항 17에 있어서, 상기 합질소 헤테로환 유도체를 포함하는 유기물층은 상기 합질소 헤테로환 유도체를 호스트로서 포함하고, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도판트로 포함하는 것인 유기전자소자.

청구항 23

청구항 17에 있어서, 상기 유기전자소자는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼 및 유기 트랜지스터로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기전자소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 새로운 합질소 헤테로환 유도체 및 이를 이용한 유기전자소자에 관한 것이다. 본 출원은 2008년 11월 3일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2008-0108602호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

배경기술

[0002] 유기전자소자란 정공 및/또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다. 유기전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전기소자이다. 둘째는 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 및/또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[0003] 유기전자소자의 예로는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다. 이하에서는 주로 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명하지만, 상기 유기전자소자들에서는 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질이 유사한 원리로 작용한다.

[0004] 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.

[0005] 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다. 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.

[0006] 유기발광소자가 전술한 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 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기전자소자에서도 마찬가지이다.

발명의 상세한 설명

[0007] 기술적 과제

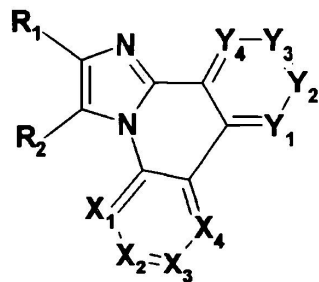
[0008] 본 발명은, 상기 종래 기술의 문제점을 고려하여, 저전압, 발광효율, 안정성 및 소자수명을 크게 향상시킬 수 있는 물질 및 이를 이용한 유기전자소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0009] 또한, 본 발명은 열적안정성을 가지고 있으면서 진공 증착공정에 필요한 승화성을 갖는 물질 및 이를 이용한 유기전자소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0010] 기술적 해결방법

[0011] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되거나 하기 화학식 1의 구조를 2이상 포함하는 신규한 합질소 헤테로환 유도체를 제공한다:

[0012] 화학식 1



[0013]

[0014] 상기 화학식 1 에 있어서,

[0015] X_1 은 N 또는 CR_3 이고, X_2 는 N 또는 CR_4 이고, X_3 은 N 또는 CR_5 이고, X_4 은 N 또는 CR_6 이고, Y_1 은 N 또는 CR_7 이고, Y_2 은 N 또는 CR_8 이고, Y_3 은 N 또는 CR_9 이고, Y_4 은 N 또는 CR_{10} 이고, X_1 내지 X_4 와 Y_1 내지 Y_4 는 동시에 N은 아니며,

[0016] R_3 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 $-(L)_p-(Y)_q$ 이고, 여기서 p 는 0 내지 10의 정수이고, q 는 1 내지 10의 정수이고, R_3 내지 R_{10} 중 인접하는 2 이상의 기는 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있고,

[0017] L은 산소; 황; 치환 또는 비치환된 질소; 치환 또는 비치환된 인; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 치환 또는 비치환된 알케닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 치환 또는 비치환된 카바졸렌기; 또는 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

[0018] Y는 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 또는 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고;

[0019] R_1 및 R_2 는 서로 연결되어 치환 또는 비치환의 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하거나 형성하지 않을 수 있으며, R_1 및 R_2 가 고리를 형성하지 않는 경우, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기; 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기; 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리기이고,

[0020] R_1 , R_2 및 R_1 과 R_2 가 서로 연결되어 형성된 방향족 또는 헤테로 방향족의 단환식 및 다환식 고리는 각각 독립적으로, $-(L)_p-(Y)_q$ 로 치환될 수 있으며,

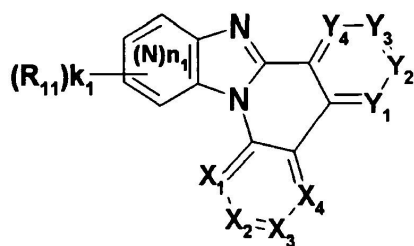
[0021] 화학식 1에 L 과 Y 가 각각 2 이상 존재하는 경우 이들은 각각 독립적으로 서로 같거나 상이하고,

[0022] 단, X_1 내지 X_4 와 Y_1 내지 Y_4 가 동시에 CR_3 내지 CR_{10} 인 경우, R_3 내지 R_{10} 중 적어도 하나는 수소가 아닌 치환기를 가지거나, R_1 과 R_2 가 서로 결합하여 치환된 단환식 또는 다환식 고리를 형성한다.

[0023] 상기 화학식 1의 화합물은 유리 전이 온도(T_g)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.

[0024] 상기 화학식 1에 있어서, R_1 및 R_2 가 연결되어 고리 1개를 형성한 경우는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다:

[0025] [화학식 2]



[0026]

[0027] 상기 화학식 2에 있어서,

[0028] X_1 내지 X_4 및 Y_1 내지 Y_4 는 상기 화학식 1에 정의한 바와 동일하며,

[0029] $(N)n_1$ 에서 N 은 질소원자를 의미하며, 질소원자가 벤젠고리내의 탄소원자를 대신할 수 있음을 나타내고,

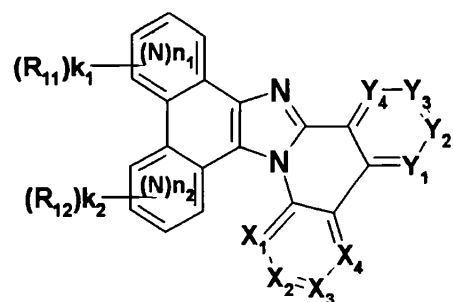
[0030] $(N)n_1$ 에서 n_1 은 0 내지 6의 정수이며,

[0031] R_{11} 은 상기 화학식 1에서 정의한 R_3 내지 R_{10} 의 정의와 동일하고,

[0032] k_1 은 0 내지 4의 정수이며, k_1 이 2 이상의 정수인 경우, R_{11} 은 각각 서로 다를 수 있다.

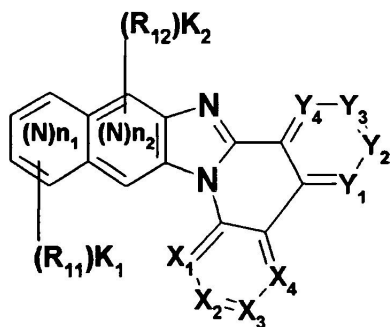
[0033] R_1 및 R_2 가 연결되어 고리 2개 이상의 다환식 고리를 형성하는 경우는 하기 화학식 3-1 및 3-2로 표시될 수 있다.

[0034] [화학식 3-1]



[0035]

[0036] [화학식 3-2]



[0037]

[0038] 상기 화학식 3-1 및 3-2에 있어서,

[0039] X_1 내지 X_4 및 Y_1 내지 Y_4 는 상기 화학식 1에 정의한 바와 동일하며,

[0040] $(N)_{n_1}$ 및 $(N)_{n_2}$ 에서 N은 질소원자를 의미하며, 질소원자가 벤젠고리내의 탄소원자를 대신할 수 있음을 나타내고,

[0041] $(N)_{n_1}$ 에서 n_1 은 0 내지 2의 정수이며,

[0042] $(N)_{n_2}$ 에서 n_2 는 0 내지 2의 정수이고,

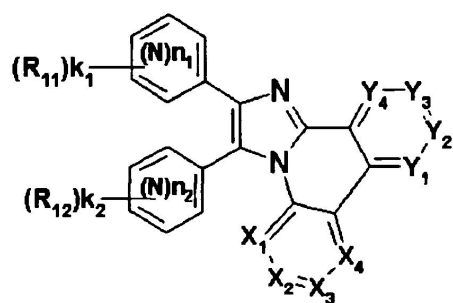
[0043] R_{11} 및 R_{12} 는 상기 화학식 1에서 정의한 R_3 내지 R_{10} 의 정의와 동일하고,

[0044] 상기 화학식 3-1에서, k_1 은 0 내지 4의 정수이고, k_2 는 0 내지 4의 정수이고, 상기 화학식 3-2에서, k_1 은 0 내지 4의 정수이고, k_2 는 0 내지 2의 정수이며,

[0045] k_1 이 2 이상의 정수인 경우, R_{11} 는 각각 서로 다를 수 있고, k_2 가 2 이상의 정수인 경우, R_{12} 는 각각 서로 다를 수 있다.

[0046] 상기 R_1 및 R_2 가 고리를 형성하지 않는 경우, R_1 및 R_2 는 R_{11} 및 R_{12} 로 치환 또는 비치환된 페닐기 또는 치환 또는 비치환된 질소(N) 원자를 포함하는 육각형의 헤테로방향족고리일 수 있다. 예컨대, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4-1로 표시될 수 있다.

[0047] [화학식 4-1]



[0048]

[0049] 상기 화학식 4-1에 있어서,

[0050] X_1 내지 X_4 및 Y_1 내지 Y_4 는 상기 화학식 1에 정의한 바와 동일하며,

[0051] $(N)_{n_1}$ 및 $(N)_{n_2}$ 에서 N은 질소원자를 의미하며, 질소원자가 벤젠고리내의 탄소원자를 대신할 수 있음을 나타내고,

[0052] $(N)_{n_1}$ 에서 n_1 은 0 내지 2의 정수이며,

[0053] $(N)_{n_2}$ 에서 n_2 는 0 내지 2의 정수이고,

[0054] R_{11} 및 R_{12} 는 상기 화학식 1에서 정의한 R_3 내지 R_{10} 의 정의와 동일하고,

- [0055] k_1 은 0 내지 4의 정수이고, k_2 는 0 내지 4의 정수이며,
- [0056] k_1 이 2 이상의 정수인 경우, R_{11} 는 각각 서로 다를 수 있고,
- [0057] k_2 가 2 이상의 정수인 경우, R_{12} 는 각각 서로 다를 수 있다.

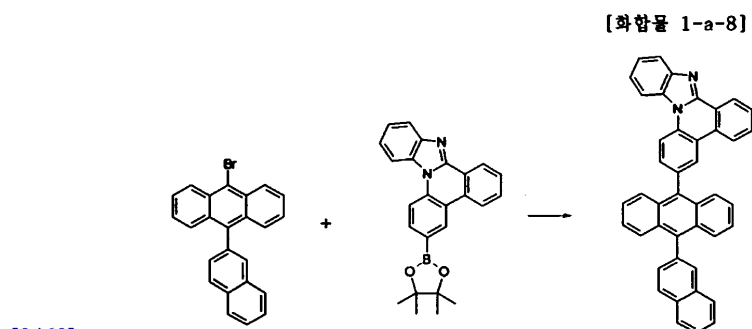
[0058] 본 발명은 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전자소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 신규한 합질소 헤테로환 유도체를 포함하는 것인 유기전자소자를 제공한다.

[0059] 유리한 효과

[0060] 본 발명에 따른 새로운 합질소 헤테로환 유도체는 유기발광소자를 비롯한 유기전자소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 이용한 유기발광소자를 비롯한 유기전자소자는 효율 상승, 구동전압 하강, 수명 연장, 안정성 상승 등에서 우수한 특성을 나타낸다. 특히, 본 발명에 따른 새로운 합질소 헤테로환 유도체는 열적 안정성이 우수하고, 깊은 HOMO 준위, 넓은 밴드갭, 높은 삼중항(triplet) 상태 및 정공 안정성을 가져 우수한 특성을 나타내었다. 유기 발광 소자를 비롯한 유기전자소자에서 순수하게 사용하거나, 불순물을 섞어 사용가능하며, 광 효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

실시예

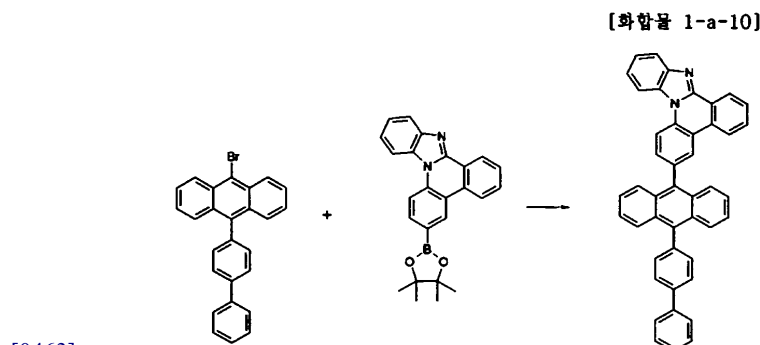
[0459] <실시예 1> 화학식 1-a-8의 화합물의 제조



[0460]

[0461] 화합물 B-1(3.83 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-4 (3.94 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 1-a-8(3.88 g, 68 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+$ =571

[0462] <실시예 2> 화학식 1-a-10의 화합물의 제조

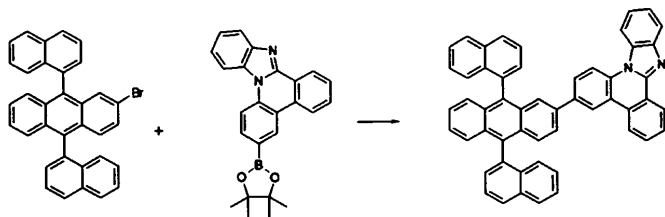


[0463]

[0464] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-6 (4.09 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-10(3.4 g, 57 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+$ = 597

[0465] <실시예 3> 화학식 1-a-14의 화합물의 제조

[화합물 1-a-14]

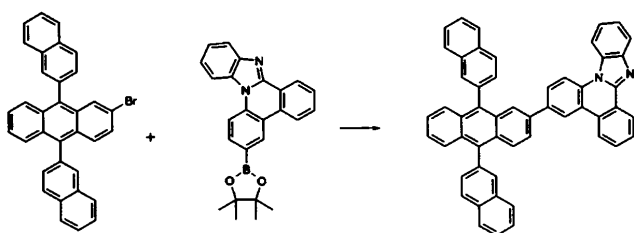


[0466]

[0467] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-10 (5.09 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-14(4.54 g, 65 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0468] <실시예 4> 화학식 1-a-15의 화합물의 제조

[화합물 1-a-15]

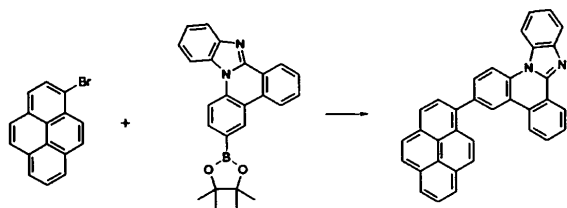


[0469]

[0470] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-15(4.94 g, 71 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0471] <실시예 5> 화학식 1-a-18의 화합물의 제조

[화합물 1-a-18]

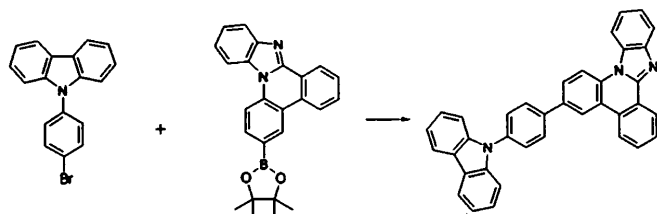


[0472]

[0473] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 1-브로모 파이렌(2.81 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-18(2.57 g, 55 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 469$

[0474] <실시예 6> 화학식 1-a-29의 화합물의 제조

[화합물 1-a-29]

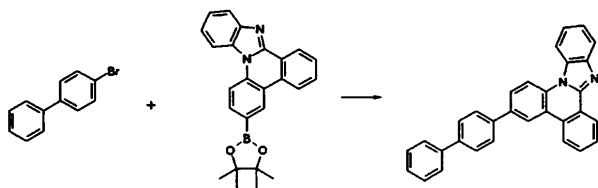


[0475]

[0476] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-15 (3.22 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-29(3.82 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 510$

[0477] <실시예 7> 화학식 1-a-31의 화합물의 제조

[화합물 1-a-31]

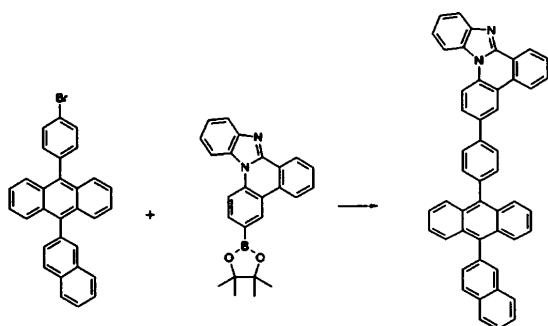


[0478]

[0479] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 4-브로모바이페닐(4-bromobiphenyl) (2.33 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-31(2.95 g, 70 %) 을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

[0480] <실시예 8> 화학식 1-a-34의 화합물의 제조

[화합물 1-a-34]

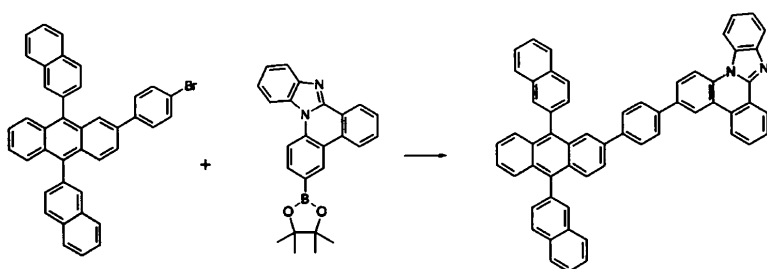


[0481]

[0482] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-3 (4.59 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-34(4.85 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 647$

[0483] <실시예 9> 화학식 1-a-35의 화합물의 제조

[화합물 1-a-35]

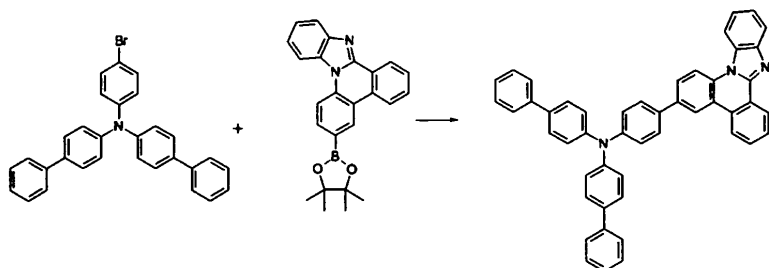


[0484]

[0485] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-14 (5.85 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-35(5.41 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 773$

[0486] <실시예 10> 화학식 1-a-37의 화합물의 제조

[화합물 1-a-37]

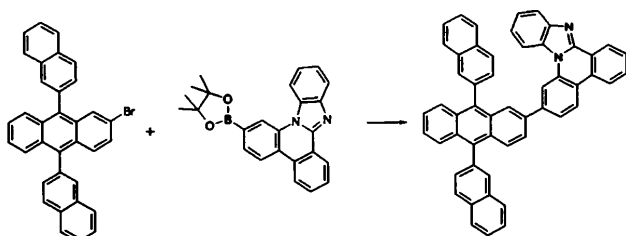


[0487]

[0488] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-23 (4.76 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-37(3.72 g, 56 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 664$

[0489] <실시예 11> 화학식 1-a-58의 화합물의 제조

[화합물 1-a-58]

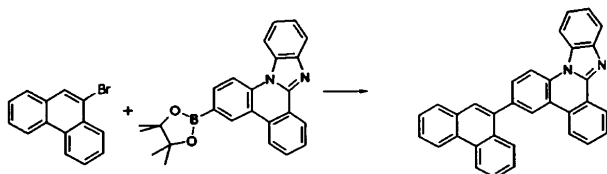


[0490]

[0491] 화합물 B-12(5.09 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-50(3.94 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 1-a-58(4.59 g, 66 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0492] <실시예 12> 화학식 1-a-64의 화합물의 제조

[화합물 1-a-64]

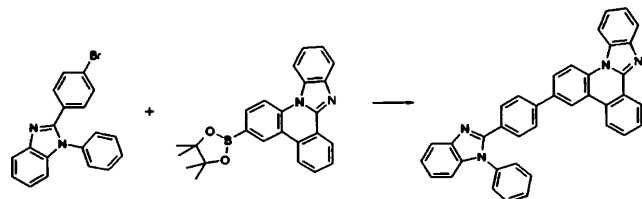


[0493]

[0494] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 9-브로모페난트렌(9-bromophenanthrene) (2.57 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-64(3.12 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 445$

[0495] <실시예 13> 화학식 1-a-68의 화합물의 제조

[화합물 1-a-68]



[0496]

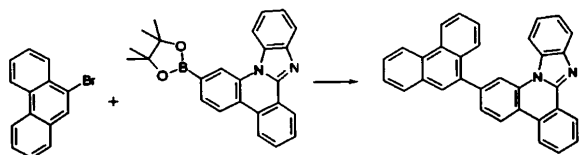
[0497] 상기 실시예 1에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-19 (3.49 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과

동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-68(3.49 g, 65%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 537$

[0498]

<실시예 14> 화학식 1-a-72의 화합물의 제조

[화합물 1-a-72]



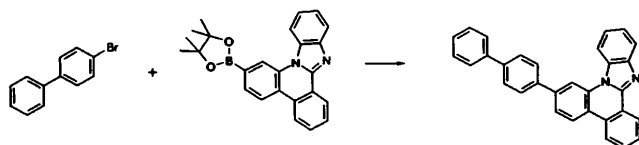
[0499]

상기 실시예 11에서 화합물 B-12 대신 9-브로모페난트렌(9-bromophenanthrene)(2.57 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 11 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-72(3.25 g, 73%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 445$

[0501]

<실시예 15> 화학식 1-a-74의 화합물의 제조

[화합물 1-a-74]



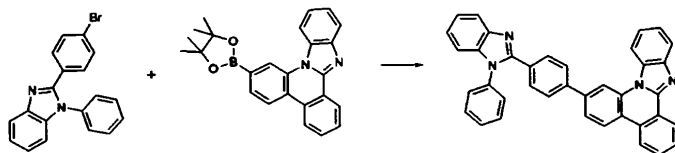
[0502]

상기 실시예 11에서 화합물 B-12 대신 4-브로모바이페닐(4-bromobiphenyl)(2.33 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 11 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-74(2.82 g, 67%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

[0504]

<실시예 16> 화학식 1-a-77의 화합물의 제조

[화합물 1-a-77]



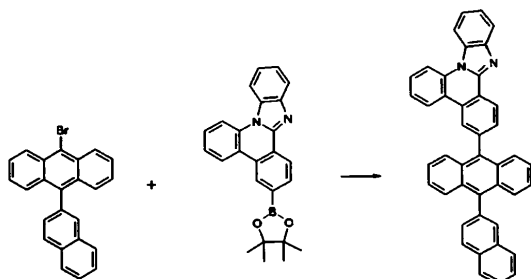
[0505]

상기 실시예 11에서 화합물 B-12 대신 화합물 B-19 (3.49 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 11 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-77(3.76 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 537$

[0507]

<실시예 17> 화학식 1-b-8 의 화합물의 제조

[화합물 1-b-8]



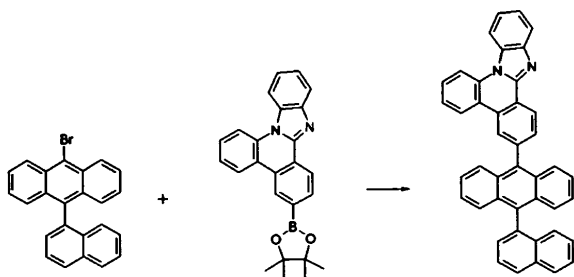
[0508]

화합물 B-1(3.83 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-14 (3.94 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스포노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 1-b-8(3.88 g, 68 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 571$

[0509]

[0510] <실시예 18> 화학식 1-b-9 의 화합물의 제조

[화합물 1-b-9]

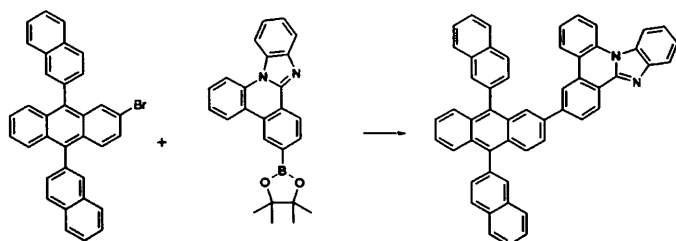


[0511]

[0512] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-4 (3.83 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-9(3.99 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 571$

[0513] <실시예 19> 화학식 1-b-15의 화합물의 제조

[화합물 1-b-15]

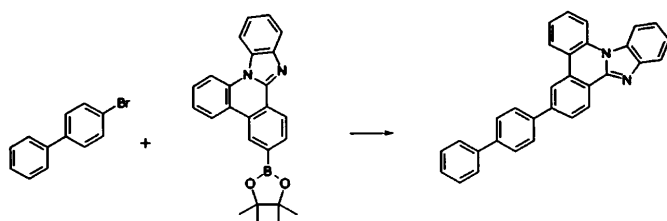


[0514]

[0515] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-15(5.23 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0516] <실시예 20> 화학식 1-b-31의 화합물의 제조

[화합물 1-b-31]

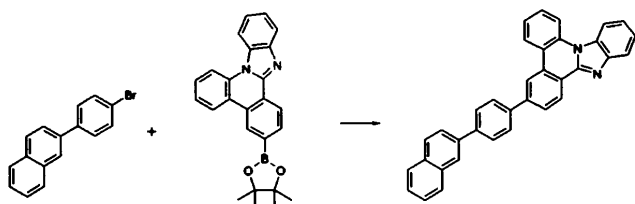


[0517]

[0518] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 4-브로모바이페닐(4-bromobiphenyl) (2.33 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-31(3.15 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

[0519] <실시예 21> 화학식 1-b-32의 화합물의 제조

[화합물 1-b-32]

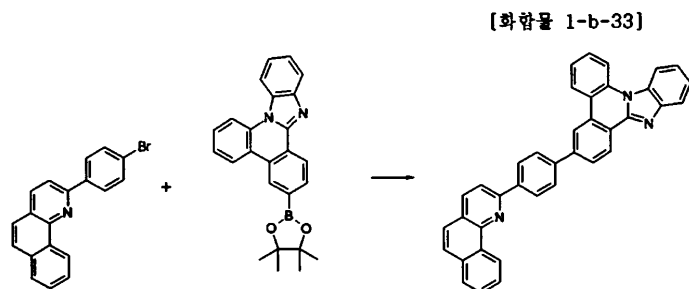


[0520]

[0521] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (2.83 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17

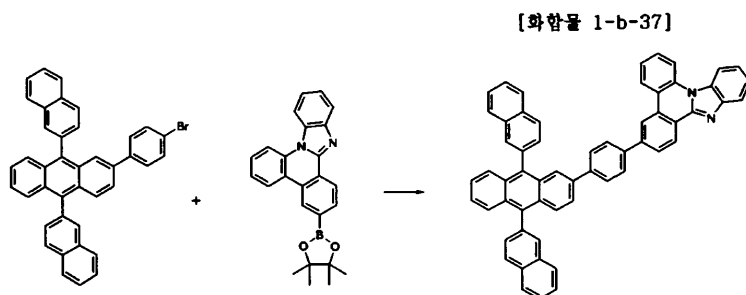
과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-32(3.53 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 471$

[0522] <실시예 22> 화학식 1-b-33의 화합물의 제조



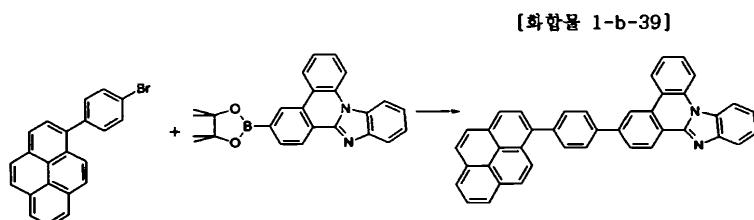
[0524] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-16 (3.34 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-33(3.76 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 522$

[0525] <실시예 23> 화학식 1-b-37의 화합물의 제조



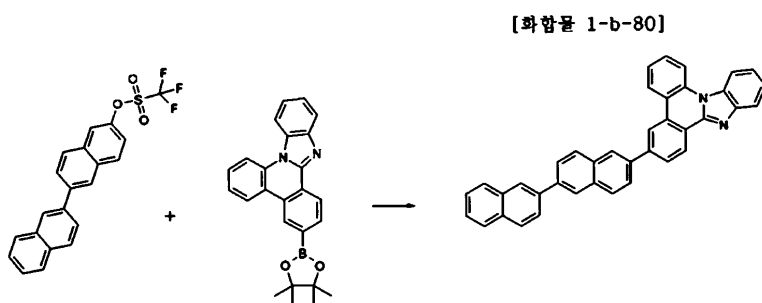
[0527] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-14 (5.85 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-37(5.41 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 773$

[0528] <실시예 24> 화학식 1-b-39의 화합물의 제조



[0530] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-22 (3.57 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-39(3.81 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 545$

[0531] <실시예 25> 화학식 1-b-80의 화합물의 제조

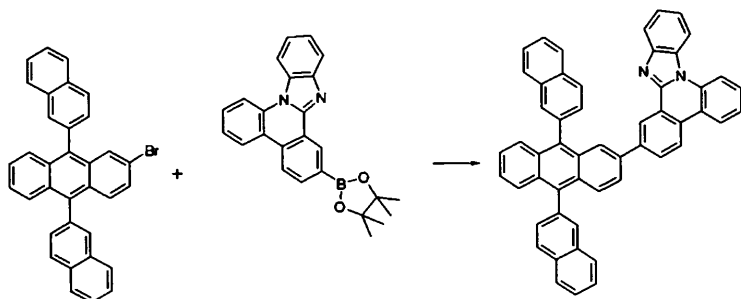


[0533] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-8 (4.02 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17과

동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-80(3.74 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 521$

[0534] <실시예 26> 화학식 1-b-100의 화합물의 제조

[화합물 1-b-100]

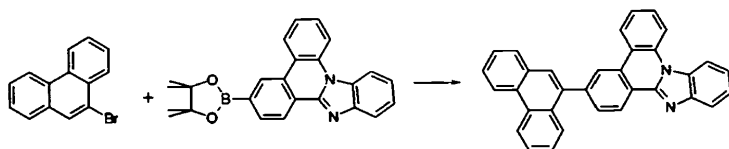


[0535]

[0536] 화합물 B-12(5.09 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-54 (3.94 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스포피노콜라딘(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 1-b-100(4.94 g, 71 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0537] <실시예 27> 화학식 1-b-117의 화합물의 제조

[화합물 1-b-117]

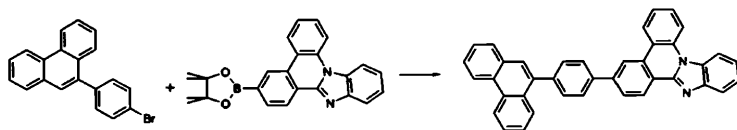


[0538]

[0539] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 9-브로모페난트렌(9-bromophenanthrene)(2.57 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-117(3.20 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 445$

[0540] <실시예 28> 화학식 1-b-122의 화합물의 제조

[화합물 1-b-122]

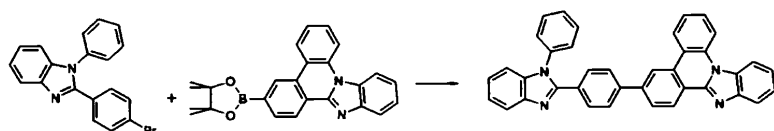


[0541]

[0542] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-21 (3.33 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-122(3.64 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 521$

[0543] <실시예 29> 화학식 1-b-123의 화합물의 제조

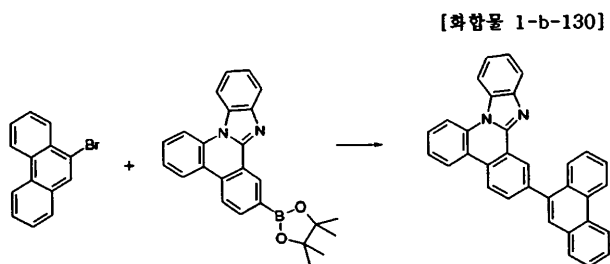
[화합물 1-b-123]



[0544]

[0545] 상기 실시예 17에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-19 (3.49 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 17 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-123(4.29 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 537$

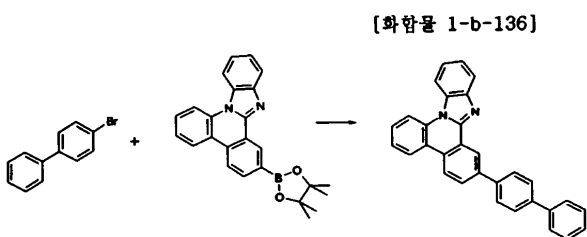
[0546] <실시예 30> 화학식 1-b-130의 화합물의 제조



[0547]

[0548] 상기 실시예 26에서 화합물 B-12 대신 9-브로모페난쓰렌(9-bromophenanthrene)(2.57 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 26 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-130(3.20 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 445$

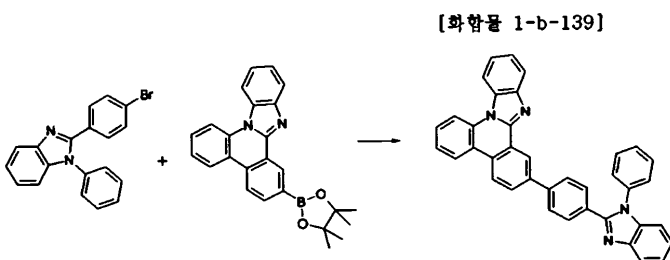
[0549] <실시예 31> 화학식 1-b-136의 화합물의 제조



[0550]

[0551] 상기 실시예 26에서 화합물 B-12 대신 4-브로모바이페닐(4-bromobiphenyl)(2.33 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 26 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-136(3.15 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

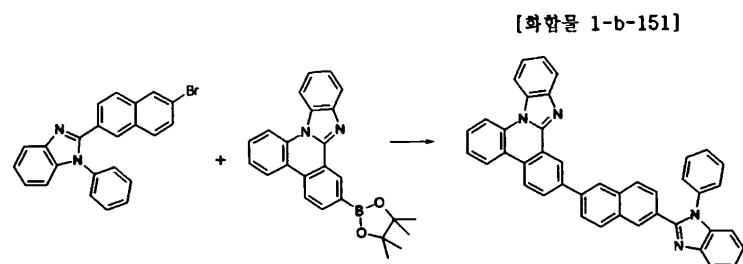
[0552] <실시예 32> 화학식 1-b-139의 화합물의 제조



[0553]

[0554] 상기 실시예 26에서 화합물 B-12 대신 화합물 B-19 (3.49 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 26 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-139(4.03 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 537$

[0555] <실시예 33> 화학식 1-b-151의 화합물의 제조

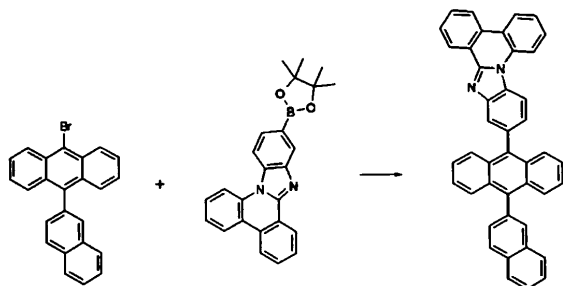


[0556]

[0557] 상기 실시예 26에서 화합물 B-12 대신 화합물 B-18 (3.99 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 26 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-151(4.40 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 587$

[0558] <실시예 34> 화학식 1-c-8 의 화합물의 제조

[화합물 1-c-8]

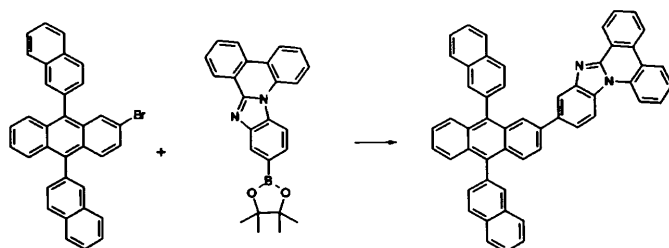


[0559]

[0560] 화합물 B-1(3.83 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-24 (3.94 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 1-c-8(3.71 g, 65 %)을 제조하였다. MS: $[M+1]^+ = 571$

[0561] <실시예 35> 화학식 1-c-15의 화합물의 제조

[화합물 1-c-15]

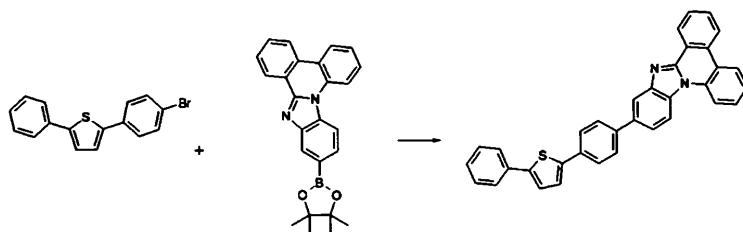


[0562]

[0563] 상기 실시예 34에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 34 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-c-15(4.88 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 697$

[0564] <실시예 36> 화학식 1-c-23의 화합물의 제조

[화합물 1-c-23]

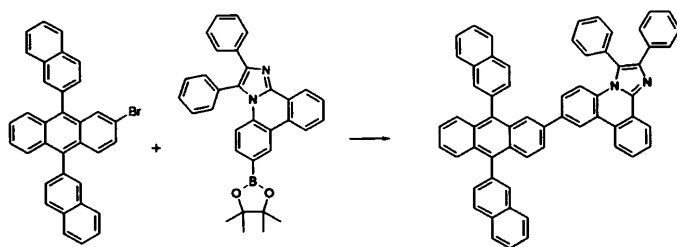


[0565]

[0566] 상기 실시예 34에서 화합물 B-1 대신 화합물 B-17 (3.15 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 34 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-c-23(2.62 g, 52%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 503$

[0567] <실시예 37> 화학식 2-a-6의 화합물의 제조

[화합물 2-a-6]

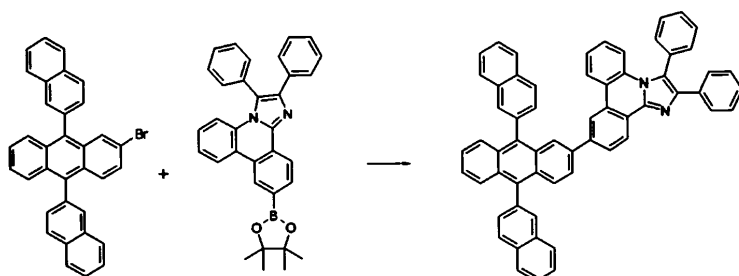


[0568]

[0569] 화합물 B-12(5.09 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-7 (4.96 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 2-a-6(5.19 g, 65 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 799$

[0570] <실시예 38> 화학식 2-a-20의 화합물의 제조

[화합물 2-a-20]

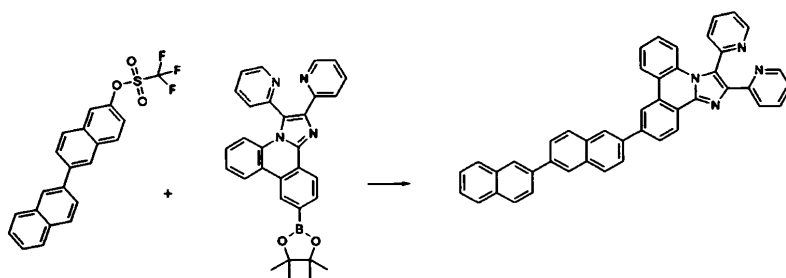


[0571]

[0572] 상기 실시예 37에서 화합물 A-7 대신 화합물 A-17 (4.96 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 37과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-a-20(4.79 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 799$

[0573] <실시예 39> 화학식 2-a-29의 화합물의 제조

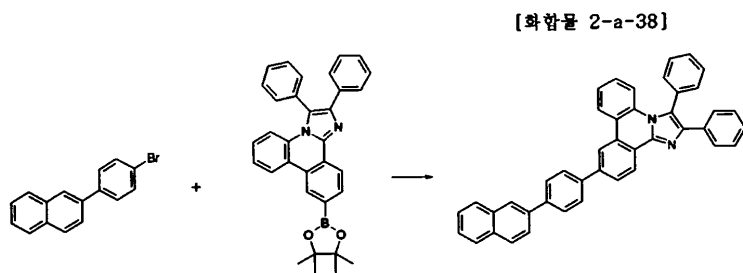
[화합물 2-a-29]



[0574]

[0575] 화합물 B-8(4.02 g, 10.0 mmol)과 화합물 A-26-2 (4.89 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 2-a-29(4.37 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 625$

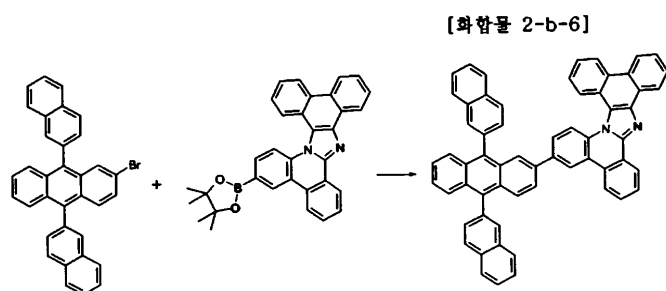
[0576] <실시예 40> 화학식 2-a-38의 화합물의 제조



[0577]

[0578] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 B-20 (2.83 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-17 (4.96 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-a-38(3.43 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 573$

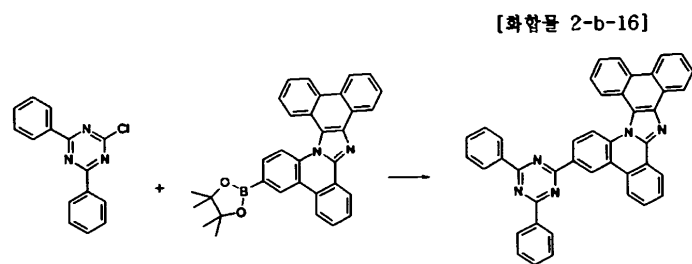
[0579] <실시예 41> 화학식 2-b-6의 화합물의 제조



[0580]

[0581] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-10 (4.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-b-6 (5.57 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 797$

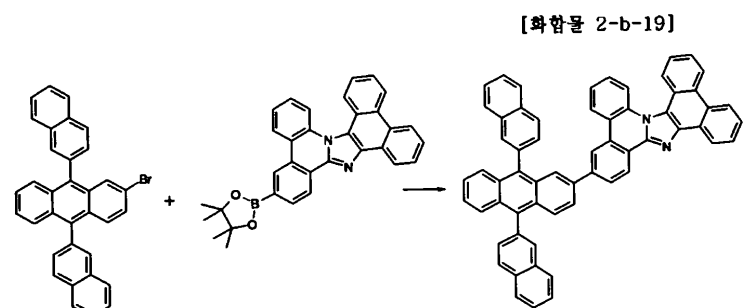
[0582] <실시예 42> 화학식 2-b-16의 화합물의 제조



[0583]

[0584] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2-클로로-4,6-다이페닐트리아진 (2.67 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-10 (4.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-b-16 (3.29 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 600$

[0585] <실시예 43> 화학식 2-b-19의 화합물의 제조

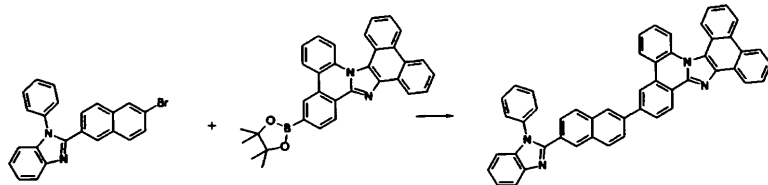


[0586]

[0587] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-20 (4.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-b-19 (5.57 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 797$

[0588] <실시예 44> 화학식 2-b-28의 화합물의 제조

[화합물 2-b-28]

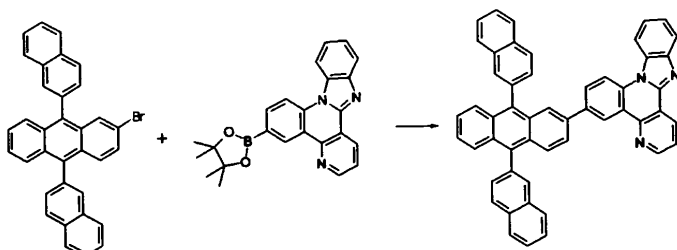


[0589]

[0590] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-18 (3.99 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-20 (4.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 2-b-28 (4.25 g, 62%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 687$

[0591] <실시예 45> 화학식 3-a-4의 화합물의 제조

[화합물 3-a-4]

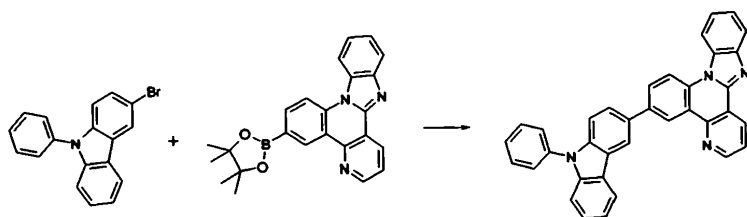


[0592]

[0593] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-34 (3.95 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-a-4 (3.84 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 698$

[0594] <실시예 46> 화학식 3-a-16의 화합물의 제조

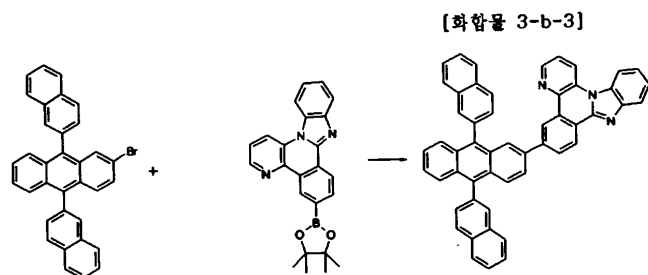
[화합물 3-a-16]



[0595]

[0596] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 3-브로모-N-페닐-카바졸 (3.22 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-34 (3.95 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-a-16 (3.82 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 511$

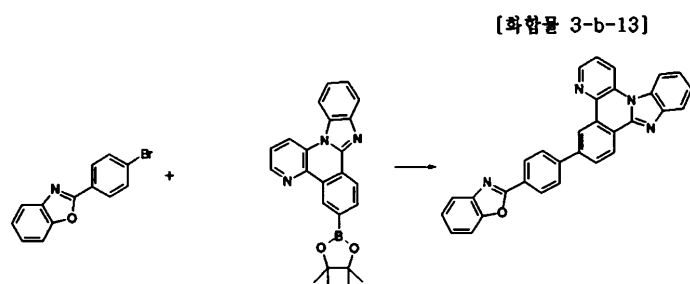
[0597] <실시예 47> 화학식 3-b-3의 화합물의 제조



[0598]

[0599] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-30 (3.95 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-b-3 (4.95 g, 71%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 698$

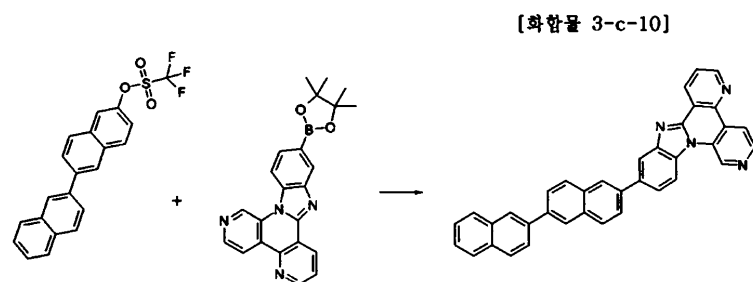
[0600] <실시예 48> 화학식 3-b-13의 화합물의 제조



[0601]

[0602] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2-(4-브로모페닐)벤조[d]옥사졸(2-(4-bromophenyl)benzo[d]oxazole) (2.74 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-30 (3.95 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-b-13 (3.10 g, 67%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 463$

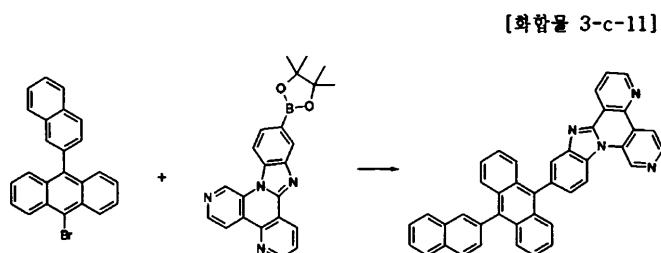
[0603] <실시예 49> 화학식 3-c-10의 화합물의 제조



[0604]

[0605] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-8 (4.02 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-42 (3.96 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-10 (3.50 g, 67%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 523$

[0606] <실시예 50> 화학식 3-c-11의 화합물의 제조



[0607]

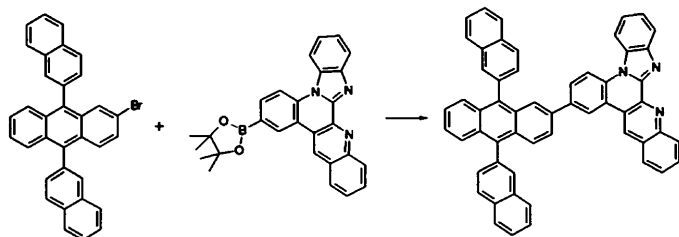
[0608] 상기 실시예 1에서, 화합물 A-4 대신 화합물 A-42 (3.96 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과

동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-11 (3.83 g, 67%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 573$

[0609]

<실시예 51> 화학식 3-c-12의 화합물의 제조

【화합물 3-c-12】



[0610]

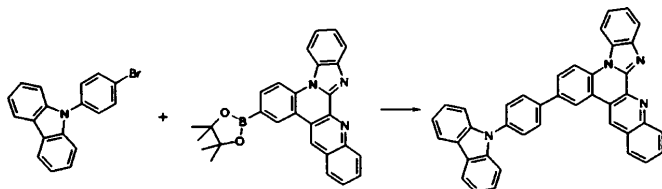
[0611]

상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-38 (4.45 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-12 (5.01 g, 67%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 748$

[0612]

<실시예 52> 화학식 3-c-13의 화합물의 제조

【화합물 3-c-13】



[0613]

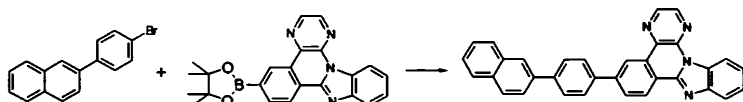
[0614]

상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-15 (3.21 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-38 (4.45 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-13 (3.36 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 561$

[0615]

<실시예 53> 화학식 3-c-21의 화합물의 제조

【화합물 3-c-21】



[0616]

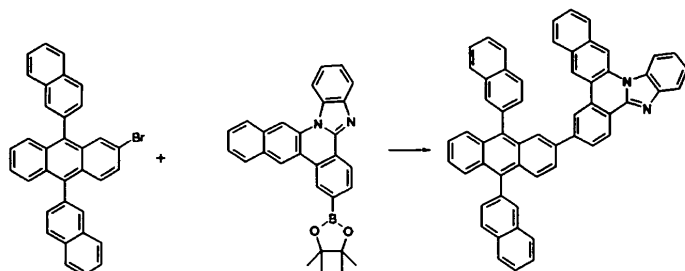
[0617]

상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (2.83 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-38 (4.45 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-21(2.03 g, 43%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 473$

[0618]

<실시예 53> 화학식 4-a-7의 화합물의 제조

【화합물 4-a-7】



[0619]

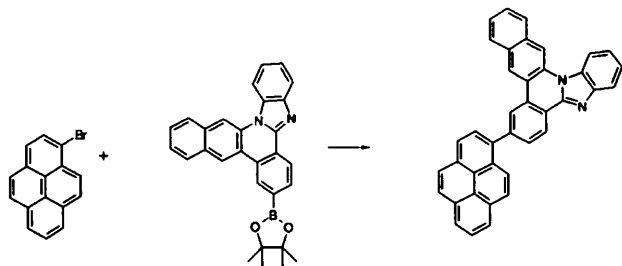
[0620]

상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-12 (5.09 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-46 (4.44 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 4-a-7 (4.11 g,

55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 747$

[0621] <실시예 54> 화학식 4-a-8의 화합물의 제조

[화합물 4-a-8]

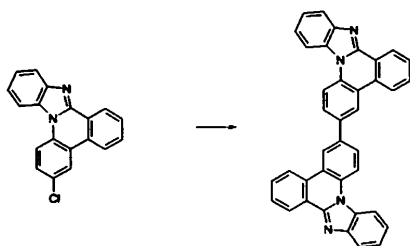


[0622]

[0623] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 1-브로모파이렌(1-bromopyrene) (2.81 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-46 (4.44 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 4-a-8 (2.85 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 519$

[0624] <실시예 55> 화학식 5-a-1의 화합물의 제조

[화합물 5-a-1]

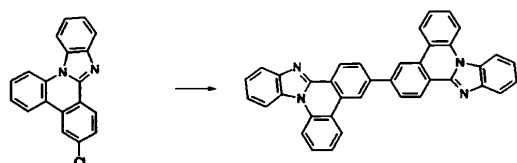


[0625]

[0626] 화합물 A-3 (3.02 g, 10.0 mmol)을 1,4-다이옥산(1,4-dioxane) (50 mL)에 분산시킨 후, 비스(피나콜라토)디보론(1.27 g, 5.0 mmol), $K_3PO_4 \cdot H_2O$ (6.36 g, 30 mmol), $Pd[P(t-Bu)_3]_2$ (102 mg, 2 mol%) 을 첨가하고, 7시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고, 과량의 물을 부어, 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름으로 녹이고 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 농축시키고, 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 5-a-1(3.63 g, 68%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 535$

[0627] <실시예 56> 화학식 5-a-2의 화합물의 제조

[화합물 5-a-2]

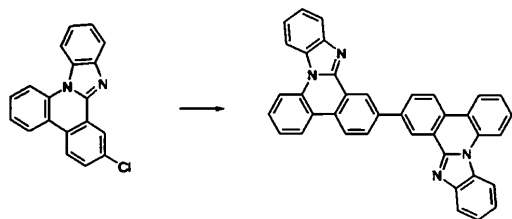


[0628]

[0629] 상기 실시예 55에서, 화합물 A-3 대신 화합물 A-13 (3.02 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 55 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-2 (2.94 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 535$

[0630] <실시예 57> 화학식 5-a-13의 화합물의 제조

[화합물 5-a-13]

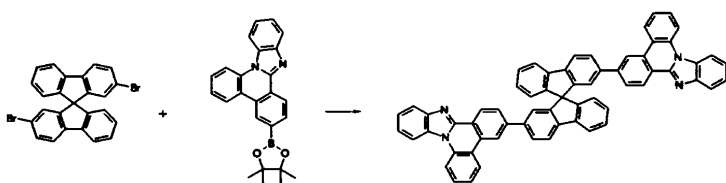


[0631]

[0632] 상기 실시예 55에서, 화합물 A-3 대신 화합물 A-53 (3.02 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 55 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-13 (3.21g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 535$

[0633] <실시예 58> 화학식 5-a-23의 화합물의 제조

[화합물 5-a-23]

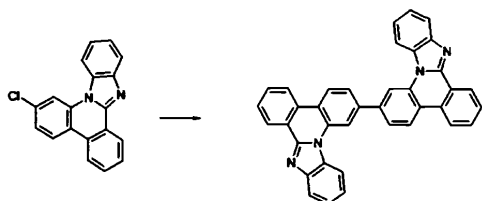


[0634]

[0635] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 상기 2,2'-다이브로모-9,9'-스피로플루오렌(2,2'-Dibromo-9,9'-spirofluorene) (2.37 g, 5.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-14 (3.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-23 (2.76 g, 65%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 849$

[0636] <실시예 59> 화학식 5-a-32의 화합물의 제조

[화합물 5-a-32]

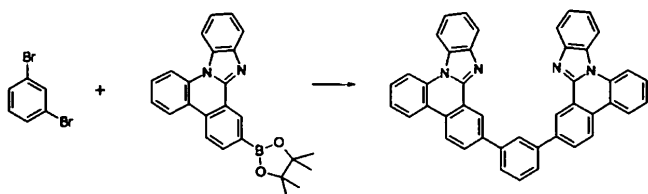


[0637]

[0638] 상기 실시예 55에서, 화합물 A-3 대신 화합물 A-49 (3.02 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 55 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-32 (3.21g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 535$

[0639] <실시예 60> 화학식 5-a-33 의 화합물의 제조

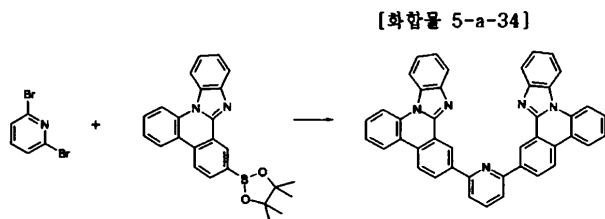
[화합물 5-a-33]



[0640]

[0641] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 1,3-디브로모벤젠(1,3-dibromobenzene)(1.18 g, 5.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54 (3.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-33 (1.83 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 611$

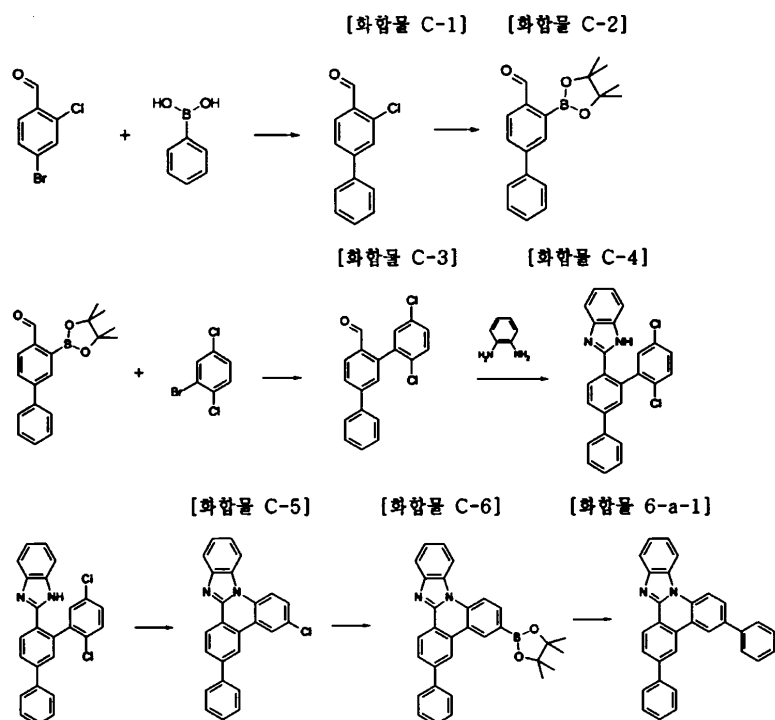
[0642] <실시예 61> 화학식 5-a-34의 화합물의 제조



[0643]

[0644] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2,6-디브로모피리딘(2,6-dibromopyridine)(1.19 g, 5.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54 (3.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-34 (1.68 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 612$

[0645] <실시예 62> 화학식 6-a-1의 화합물의 제조



[0646]

[0647] (1) 화합물 C-1의 제조

[0648] 4-브로모-2-클로로벤즈알데하이드(2.19 g, 10.0 mmol)과 페닐보론산(1.22 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란 (50 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스포늄(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름으로 녹이고 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 농축시키고, 클로로포름과 헥산으로 재결정하여 화합물 C-1 (1.94 g, 90%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 216$

[0649] (2) 화합물 C-2의 제조

[0650] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-1 (3.63 g, 16.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-2(4.14 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 308$

[0651] (3) 화합물 C-3의 제조

[0652] 상기 제조예 1에서 화합물 2-포밀페닐보로닉산 대신 화합물 C-2 (23.4 g, 76 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 1와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-3(18.0 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 326$

[0653] (4) 화합물 C-4의 제조

[0654] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 C-3 (22.5 g, 69.1 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-4(14.3 g, 50%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 414$

[0655] (5) 화합물 C-5의 제조

[0656] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 C-4 (2.1 g, 5.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-5 (0.964 g, 50%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 378$

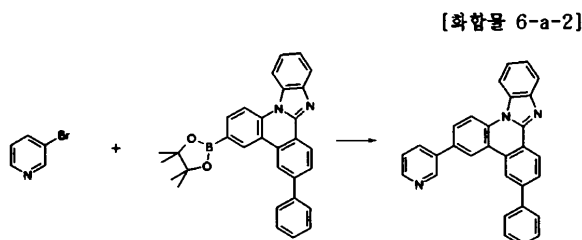
[0657] (6) 화합물 C-6의 제조

[0658] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-5 (6.35 g, 16.8 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 C-6(6.32 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 470$

[0659] (7) 화학식 6-a-1의 화합물의 제조

[0660] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 브로모벤젠(Bromobenzene)(1.57 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-6 (4.70 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-1 (3.36 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

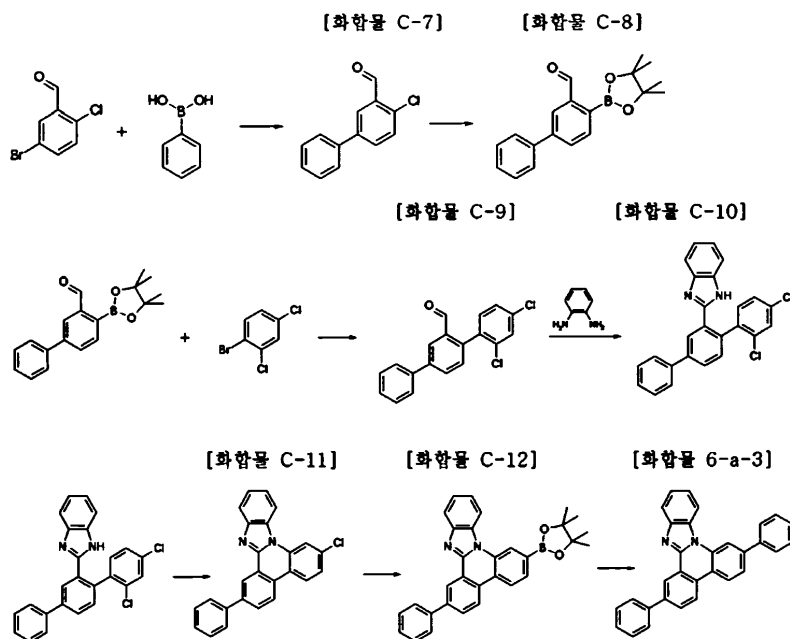
[0661] <실시예 63> 화학식 6-a-2의 화합물의 제조



[0662]

[0663] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 3-브로모피리딘(3-bromopyridine) (1.58 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-6 (4.70 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-2 (2.95 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 422$

[0664] <실시예 64> 화학식 6-a-3의 화합물의 제조



[0665]

[0666] (1) 화합물 C-7의 제조

[0667] 5-브로모-2-클로로벤즈알데하이드(2.19 g, 10.0 mmol)과 페닐보론산(1.22 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란

(50 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름으로 녹이고 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 농축시키고, 클로로포름과 헥산으로 재결정하여 화합물 C-7 (1.73 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 216$

(2) 화합물 C-8의 제조

상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-7 (3.63 g, 16.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-8(4.39 g, 85%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 308$

(3) 화합물 C-9의 제조

화합물 C-8 (3.08 g, 10.0 mmol)과 1-브로모-2,4-다이클로로벤젠(2.25 g, 10.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(50 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(231 mg, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름으로 녹이고 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 농축시키고, 클로로포름과 헥산으로 재결정하여 화합물 C-9 (2.45 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 326$

(4) 화합물 C-10의 제조

상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 C-9 (22.5 g, 69.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-10(17.2 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 414$

(5) 화합물 C-11의 제조

상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 C-10 (2.11 g, 5.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-11(0.868 g, 45%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 378$

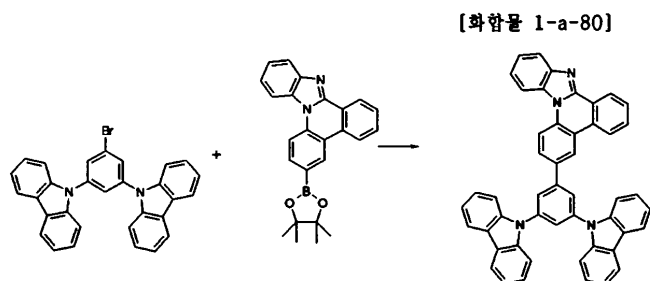
(6) 화합물 C-12의 제조

상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-11 (6.35 g, 16.8 mmol)의 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 C-12(6.32 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 470$

(7) 화학식 6-a-3의 화합물의 제조

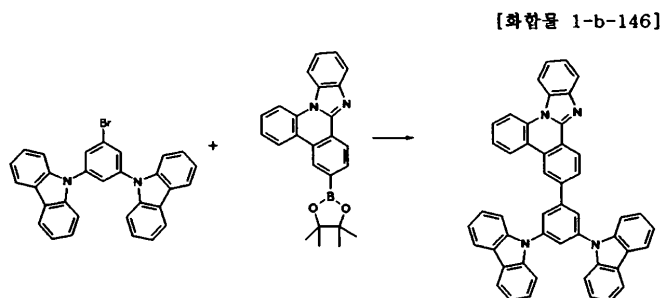
상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 브로모벤젠(Bromobenzene)(1.57 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-12 (4.70 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-3 (3.57 g, 85%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 421$

<실시예 65> 화학식 1-a-80의 화합물의 제조



상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-24 (4.87 g, 10.0 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-a-80(5.05 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 675$

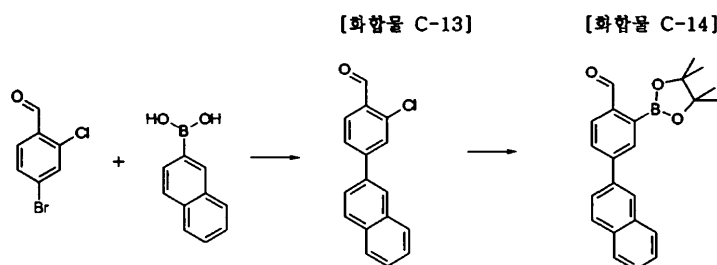
[0683] <실시예 66> 화학식 1-b-146의 화합물의 제조



[0684]

[0685] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-24 (4.87 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-14 (3.94 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 1-b-146 (5.53 g, 82%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 675$

[0686] <실시예 67> 화학식 6-a-21의 화합물의 제조



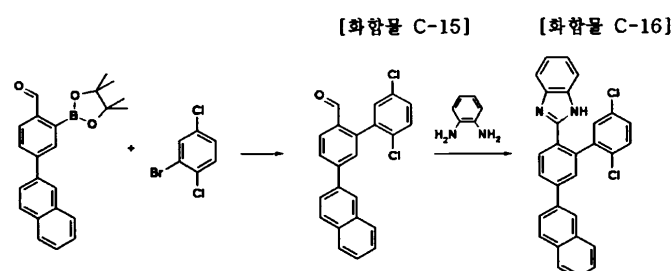
[0687]

[0688] (1) 화합물 C-13의 제조

[0689] 상기 실시예 62의 화합물 C-1의 제조에 있어서, 페닐보론산 대신 나프틸보론산(3.09 g, 18 mmol)을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-13(2.93 g, 61.1%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 266$

[0690] (2) 화합물 C-14의 제조

[0691] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-13 (2.93 g, 11.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-14(3.23 g, 82%)를 제조하였다. MS: $[M]^+ = 358$



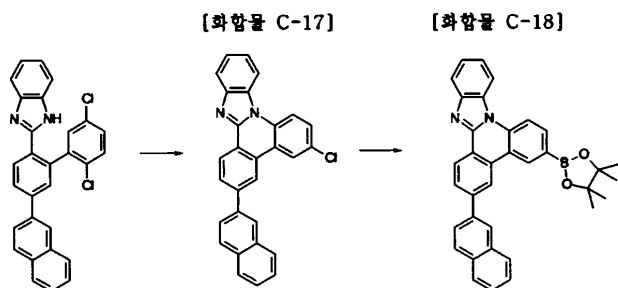
[0692]

[0693] (3) 화합물 C-15의 제조

[0694] 상기 제조예 1에서 화합물 2-포밀페닐보로닉산 대신 화합물 C-14 (7.7 g, 21.5 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 1와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-15(7.4 g, 91%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 376$

[0695] (4) 화합물 C-16의 제조

[0696] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 C-15 (7.4 g, 19.6 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-16(4.2 g, 46%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 464$

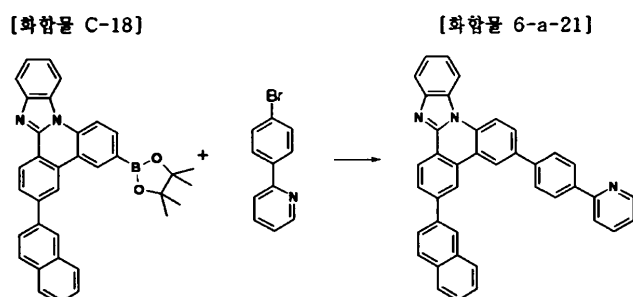


(5) 화합물 C-17의 제조

상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 C-16 (4.2 g, 9.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-17 (2.86 g, 61%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 428$

(6) 화합물 C-18의 제조

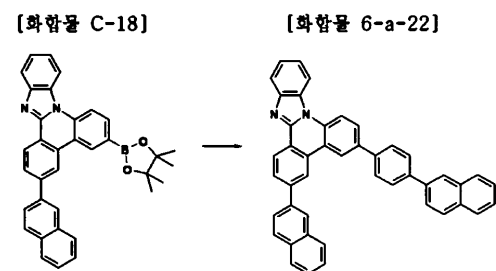
상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-17 (2.86 g, 6.7 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 C-18(3.24 g, 93%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 470$



(7) 화학식 6-a-21의 화합물의 제조

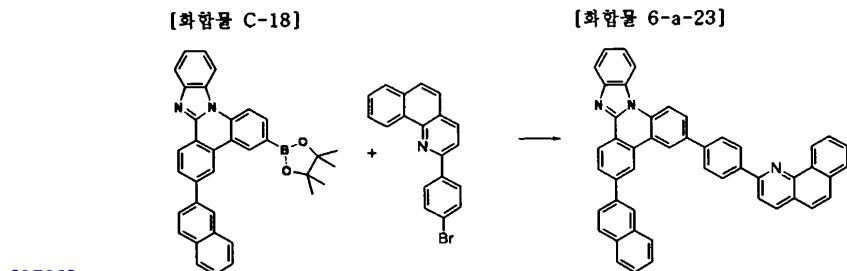
상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2-(4-bromophenyl)pyridine (2.34 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-18 (4.16 g, 8.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-21 (3.4 g, 78%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 548$

<실시예 68> 화학식 6-a-22의 화합물의 제조



상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (2.83 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-18 (4.58 g, 8.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-22(3.07g, 88%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 597$

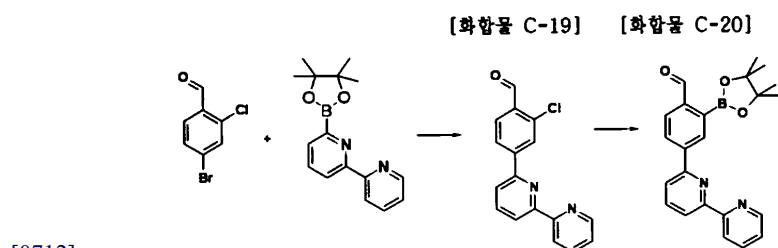
[0708] <실시예 69> 화학식 6-a-23의 화합물의 제조



[0709]

[0710] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-16 (2.9 g, 8.7 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-18 (4.58 g, 8.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-23 (4.6 g, 82%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 648$

[0711] <실시예 70> 화학식 6-a-33의 화합물의 제조



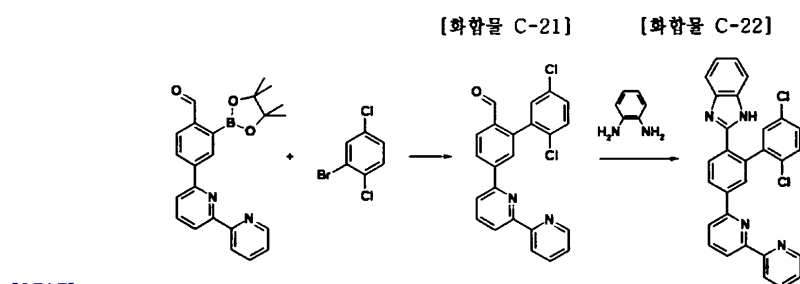
[0712]

[0713] (1) 화합물 C-19의 제조

[0714] 상기 실시예 62의 화합물 C-1의 제조에 있어서, 페닐보론산 대신 2-(6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-yl)pyridine (5.6 g, 20 mmol)을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-19(5.54 g, 94 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 294$

[0715] (2) 화합물 C-20의 제조

[0716] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-19 (5.54 g, 18.8.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-20 (6.47 g, 89%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 386$



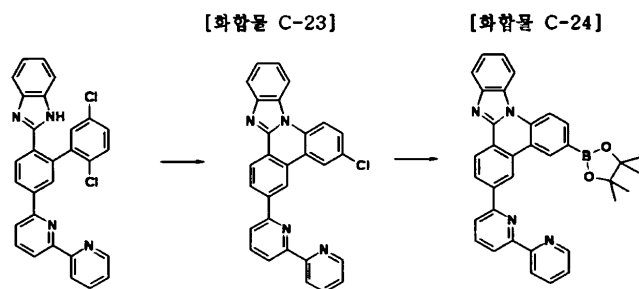
[0717]

[0718] (3) 화합물 C-21의 제조

[0719] 상기 제조예 1에서 화합물 2-포밀페닐보로닉산 대신 화합물 C-20 (6.47 g, 16.8 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 1와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-21(5.7 g, 84 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 404$

[0720] (4) 화합물 C-22의 제조

[0721] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 C-21(5.7 g, 14.1 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-22(5.1 g, 73 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 492$



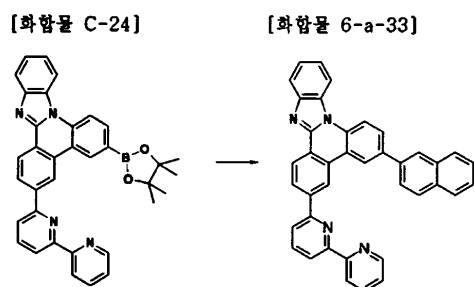
(5) 화합물 C-23의 제조

상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 C-22 (5.1 g, 10.3 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 C-23 (3.4 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 456$

(6) 화합물 C-24의 제조

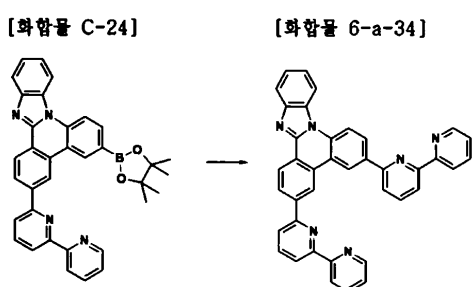
상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 C-23 (3.4 g, 7.4 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 C-24(3.4 g, 84 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 548$

(7) 화학식 6-a-33의 화합물의 제조



상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2-bromonaphthalene(1.3 g, 6.2 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-24 (3.4 g, 6.2 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-33 (3.02 g, 89 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 549$

<실시예 71> 화학식 6-a-34의 화합물의 제조

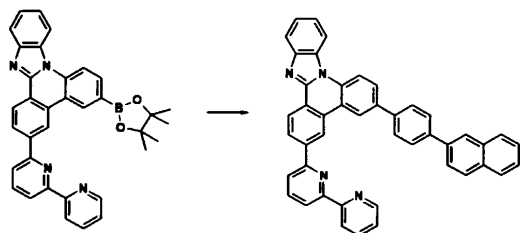


상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 2-(6-bromopyridin-2-yl)pyridine (2.3 g, 9.8 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-24 (5.4 g, 9.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-34 (4.1 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 577$

[0733] <실시예 72> 화학식 6-a-35의 화합물의 제조

【화합물 C-24】

【화합물 6-a-35】



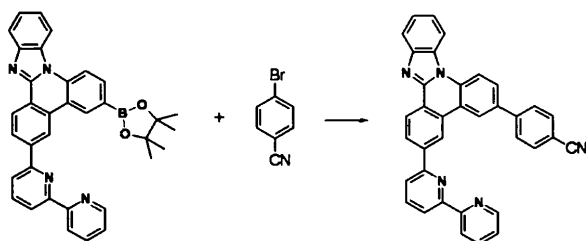
[0734]

[0735] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (2.8 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-24(5.5 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-35 (4.8 g, 77 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 625$

[0736] <실시예 73> 화학식 6-a-36의 화합물의 제조

【화합물 C-24】

【화합물 6-a-36】



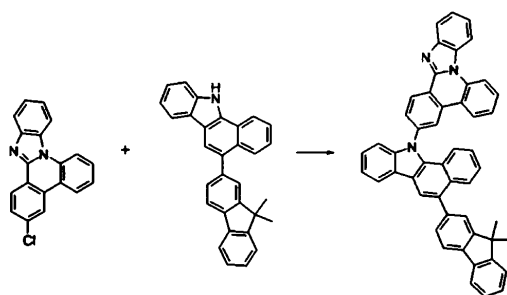
[0737]

[0738] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 4-bromobenzonitrile(1.8 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 C-24(5.5 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-36 (4.7 g, 90 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 524$

[0739] <실시예 74> 화학식 6-a-18의 화합물의 제조

【화합물 D-1】

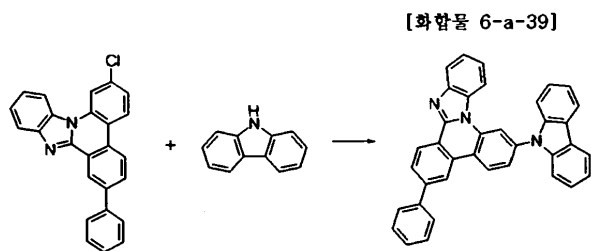
【화합물 6-a-18】



[0740]

[0741] 화합물 A-13(6.1 g, 20.2mmol), 브로모벤젠(8.3 g, 20.2mmol)을 자일렌 100ml에 용해시키고, 나트륨-터셔리-부톡사이드 2.9g(30.3mmol), $Pd[P(t-Bu)_3]_2$ (0.10g, 0.20mmol)을 첨가한 후, 5시간 동안 질소 기류 하에서 환류하였다. 반응 용액에 증류수를 넣고 반응을 종료시키고 유기 층을 추출하였다. 에틸아세테이트/에탄올에서 재결정하여 화합물 6-a-18(5.4g, 40%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 676$

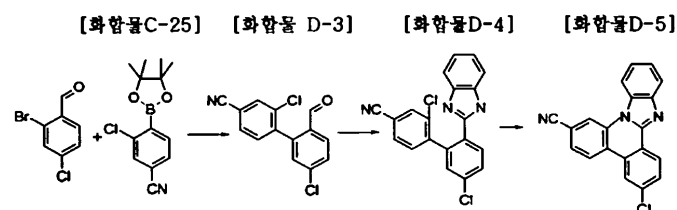
[0742] <실시예 75> 화학식 6-a-39의 화합물의 제조



[0743]

[0744] 상기 실시예 74에 있어서, 화합물 A-13 대신 화합물 C-11(3.8 g, 10.1mmol), 화합물 D-1 대신 카바졸 (1.8 g, 11.0mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 74와 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 6-a-39(3.2g, 62%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 510$

[0745] <실시예 76> 화학식 7-a-1 의 화합물의 제조



[0746]

[0747] (1) 화합물 D-3의 제조

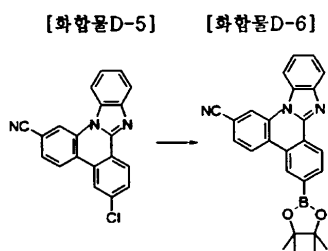
[0748] 상기 실시예 62의 화합물 C-1의 제조에 있어서, 페닐보론산 대신 화합물 C-25(4.48 g, 17 mmol)을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 제조하여 화합물 D-3 (3.8 g, 81 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 275$

[0749] (2) 화합물 D-4의 제조

[0750] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 D-3(3.8 g, 18.8.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 D-4(5.27 g, 77 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 364$

[0751] (3) 화합물 D-5의 제조

[0752] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 D-4 (5.27 g, 15.3 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 D-5 (4.84 g, 92 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 343$



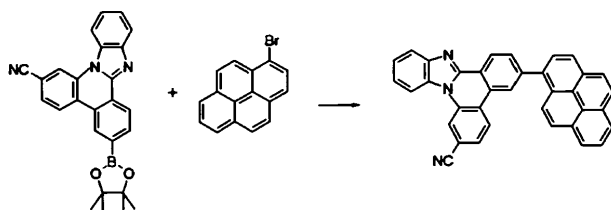
[0753]

[0754] (4) 화합물 D-6의 제조

[0755] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 D-5 (4.84 g, 14.1 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 D-6 (5.28 g, 86 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 435$

[0756] (5) 화학식 7-a-1 의 화합물의 제조

[화합물 7-a-1]

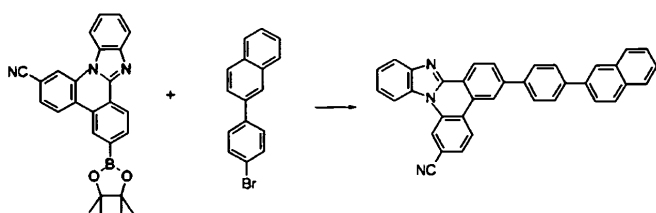


[0757]

[0758] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 1-bromopyrene(2.8 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.4 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 7-a-1 (4.7 g, 93 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 510$

[0759] <실시예 77> 화학식 7-a-4 의 화합물의 제조

[화합물 7-a-4]

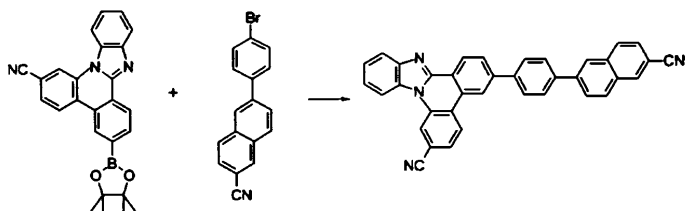


[0760]

[0761] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (2.8 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.4 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 7-a-4 (4.7 g, 61%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 512$

[0762] <실시예 78> 화학식 7-a-6 의 화합물의 제조

[화합물 7-a-6]

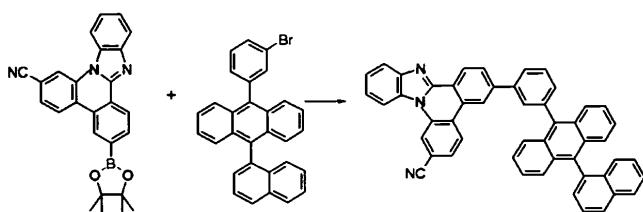


[0763]

[0764] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 6-(4-bromophenyl)naphthalene-2-carbonitrile(3.1 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.83 g, 11.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 7-a-6 (4.7 g, 87 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 537$

[0765] <실시예 79> 화학식 7-a-16 의 화합물의 제조

[화합물 7-a-16]



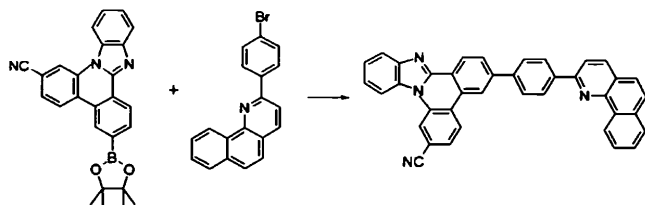
[0766]

[0767] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 10-(3-bromophenyl)-9-(naphthalen-1-yl)anthracene (7.0 g, 15.2 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(7.0 g, 16.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제

조하여 상기 화합물 7-a-16 (8.57 g, 82 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 688$

[0768] <실시예 80> 화학식 7-a-10의 화합물의 제조

[화합물 7-a-10]

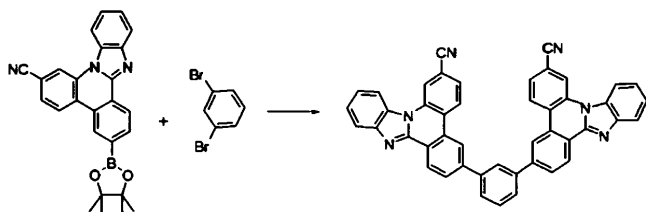


[0769]

[0770] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-16 (3.7 g, 11.1 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.83 g, 11.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 7-a-10 (5.5 g, 93 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 563$

[0771] <실시예 81> 화학식 7-a-24 의 화합물의 제조

[화합물 7-a-24]

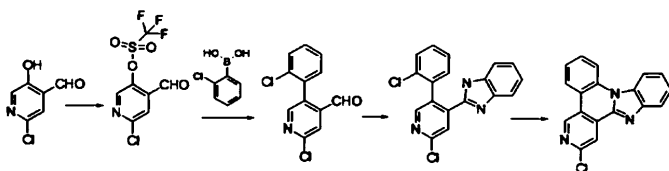


[0772]

[0773] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 1,3-dibromobenzene(2.0 g, 4.2 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.4 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 7-a-24 (1.9 g, 67 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 677$

[0774] <실시예 82> 화학식 3-c-25 의 화합물의 제조

[화합물 C-26] [화합물 D-7] [화합물D-8] [화합물D-9]



[0775]

[0776] (1) 화합물 C-26의 제조

[0777] 화합물 2-Chloro-5-hydroxy-pyridine-4-carbaldehyde (13.7 g, 87 mmol)에 CH_2Cl_2 100 mL를 넣어 교반시키면서, 트리에틸아민 (13.3 g, 130.5 mmol), 트리플루오로아세트산 무수물 (25.8 g, 130.5 mmol)을 서서히 적가하였다. 혼합물을 상온에서 2시간 동안 교반하고, 물과 CH_2Cl_2 을 가해 유기층을 분리하고, 유기 추출물을 황산 마그네슘 상에서 건조하고 진공 농축하였다. CH_2Cl_2 /EtOH로 정제하여 화합물 C-26를 제조하였다 (22.7 g, 수율 90%): MS $[M+H]^+ = 289$

[0778] (2) 화합물 D-7의 제조

[0779] 상기 제조예 31의 화합물 A-31의 제조에 있어서, 2-브로모-3-포름-피리딘 대신 화합물 C-26(22.6g, 78.0 mmol)을, 2,5-다이클로로-벤젠보론산 대신 2-클로로-페닐-1-보론산(12.2g, 78.3 mmol)을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 제조하여 화합물 D-7 (12.6 g, 64 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 251$

[0780] (3) 화합물 D-8의 제조

[0781] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 화합물 D-7(12.6 g, 37.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2와 동

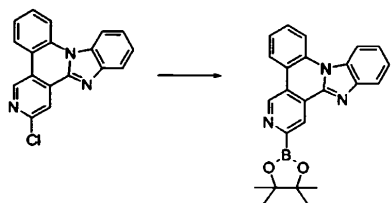
일한 방법으로 제조하여 화합물 D-8(8.6 g, 68%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 339$

[0782] (4) 화합물 D-9의 제조

[0783] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 화합물 D-8 (8.6 g, 37.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3와 동일한 방법으로 제조하여 화합물 D-9 (9.7 g, 86%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 303$

【화합물D-9】

【화합물D-10】

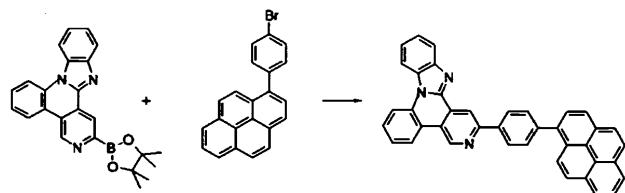


[0784] (5) 화합물 D-10의 제조

[0786] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 화합물 D-9 (9.7 g, 31.8 mmol) 을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 하여 화합물 D-10(10.8 g, 86 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 395$

[0787] (6) 화학식 3-c-25 의 화합물의 제조

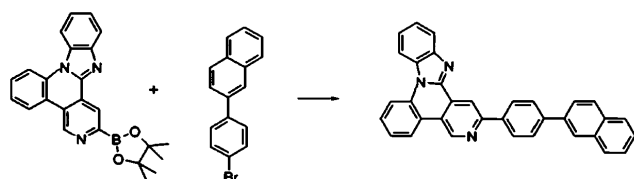
【화합물3-c-25】



[0789] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-22(3.6 g, 10.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-10(4.1 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-25 (4.5 g, 81 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 562$

[0790] <실시예 83> 화학식 3-c-30 의 화합물의 제조

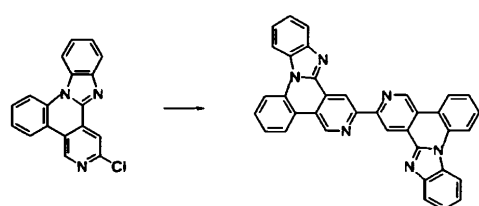
【화합물3-c-30】



[0792] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 B-20 (3.4 g, 12.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-10(4.5 g, 11.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-30 (4.2 g, 79 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 488$

[0793] <실시예 84> 화학식 5-a-53 의 화합물의 제조

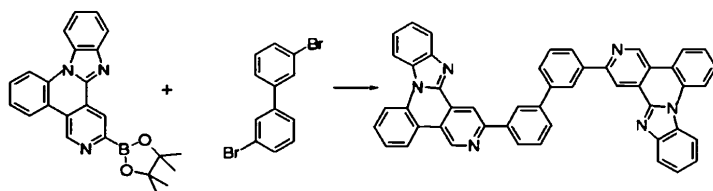
【화합물 5-a-53】



[0795] 상기 실시예 55에서, 화합물 A-3 대신 화합물 D-9 (3.2 g, 10.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 55 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-53(3.1 g, 54 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 569$

[0796] <실시예 85> 화학식 5-a-55 의 화합물의 제조

【화합물 5-a-55】



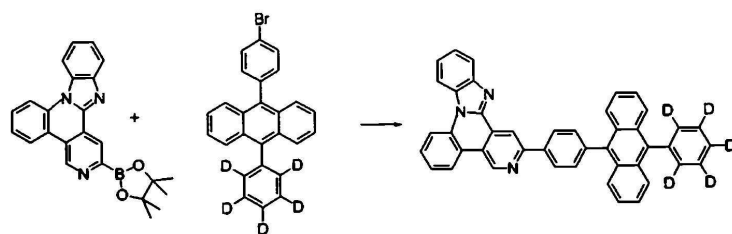
[0797]

[0798] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 3,3'-dibromobiphenyl(1.6 g, 5.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.6g, 11.2 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-55 (2.1 g, 58 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 721$

[0799] <실시예 85> 화학식 3-c-39의 화합물의 제조

【화합물 C-27】

【화합물 3-c-39】



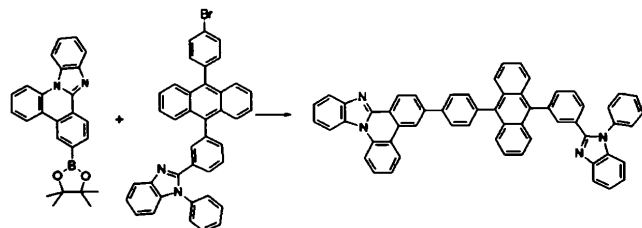
[0800]

[0801] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-27(5.2 g, 12.6 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 D-6(4.6g, 11.2 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 3-c-39 (5.0 g, 72 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 619$

[0802] <실시예 86> 화학식 5-a-59의 화합물의 제조

【화합물 C-28】

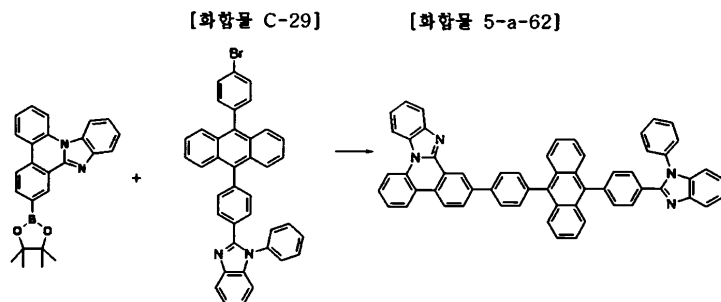
【화합물 5-a-59】



[0803]

[0804] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-28(3.0 g, 5.0 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-14(2.0 g, 5.1 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-59 (2.56g, 65%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 789$

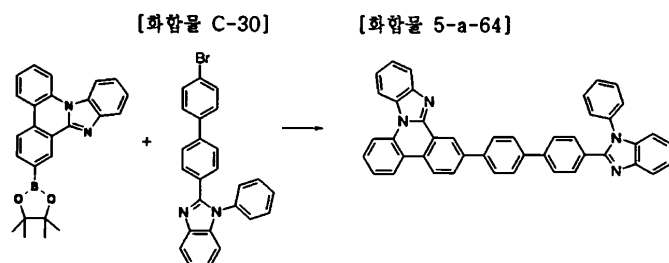
[0805] <실시예 87> 화학식 5-a-62의 화합물의 제조



[0806]

[0807] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-29(3.2 g, 6.2 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54(2.68 g, 6.8 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-62 (3.47 g, 71 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 789$

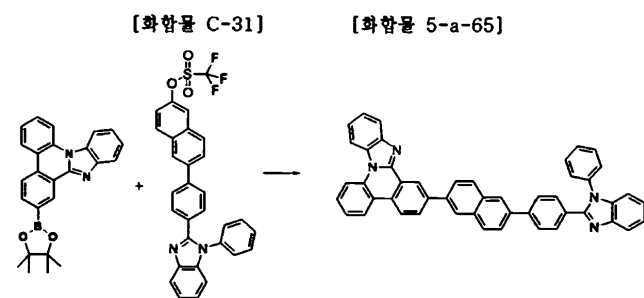
[0808] <실시예 88> 화학식 5-a-64의 화합물의 제조



[0809]

[0810] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-30(2.34 g, 5.5 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54 (2.17 g, 5.5 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-64 (2.25 g, 67 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 613$

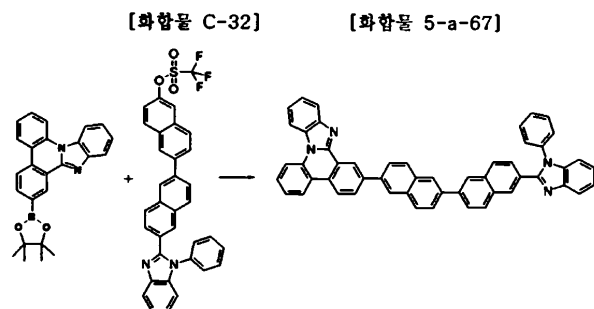
[0811] <실시예 89> 화학식 5-a-65의 화합물의 제조



[0812]

[0813] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-31(5.5 g, 10.1 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54 (3.94 g, 10.0mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-65 (5.04 g, 76 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 663$

[0814] <실시예 90> 화학식 5-a-67의 화합물의 제조



[0815]

[0816] 상기 실시예 1에서, 화합물 B-1 대신 화합물 C-32(2.73 g, 4.6 mmol)와 화합물 A-4 대신 화합물 A-54 (1.81 g, 4.6 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 방법으로 제조하여 상기 화합물 5-a-67 (2.72 g, 83 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 713$

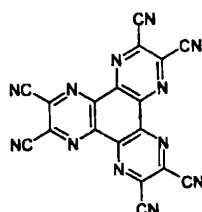
[0817] 실험예

[0818] <실험예 1-1-1>

[0819] ITO(indium tin oxide)가 1000 Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[0820] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitride hexaazatriphenylene; HAT)를 500 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다.

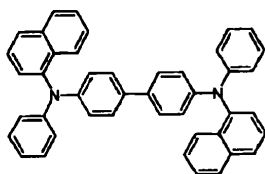
[HAT]



[0821]

[0822] 상기 정공주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400 Å)를 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다.

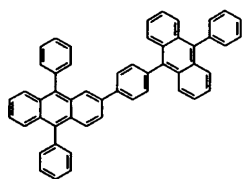
[NPB]



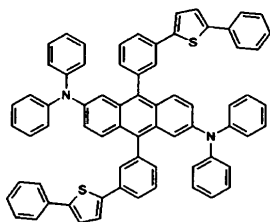
[0823]

[0824] 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 300 Å으로 아래와 같은 GH와 GD를 20:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[GH]



[GD]



[0825]

[0826]

상기 발광층 위에 실시예 1에서 제조된 화학식 1-a-8의 화합물을 200 Å의 두께로 진공 증착하여 전자주입 및 수송층을 형성하였다.

[0827]

상기 전자주입 및 수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께로 리튬플루라이드(LiF)와 2000 Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[0828]

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

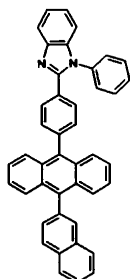
[0829]

<비교예 1>

[0830]

상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 하기 화학식 ET-A1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[ET-A1]



[0831]

[0832]

<실험예 1-1-2 내지 1-1-8>

[0833]

상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 표 4-1에 나타난 각각의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0834]

실험예 1-1-1 내지 1-1-8 및 비교예 1에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-1의 결과를 얻었다.

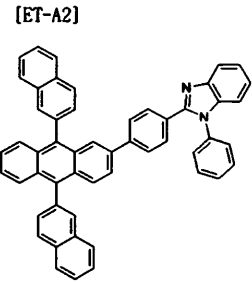
[0835] [표 4-1]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 1-1-1	1-a-8	4.03	28.02	(0.323,0.645)
실험예 1-1-2	1-a-10	4.52	26.47	(0.326,0.644)
실험예 1-1-3	1-a-34	5.25	26.34	(0.326,0.645)
실험예 1-1-4	1-b-8	4.33	26.06	(0.323,0.645)
실험예 1-1-5	1-b-9	4.71	20.75	(0.326,0.644)
실험예 1-1-6	1-c-8	5.43	21.62	(0.326,0.644)
실험예 1-1-7	7-a-16	3.81	27.16	(0.326,0.643)
실험예 1-1-8	3-c-39	3.94	25.34	(0.327, 0.645)
비교예 1	ET-A1	4.98	23.21	(0.326,0.644)

[0836]

[0837] <비교예 2>

[0838] 상기 실시예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 하기 화학식 ET-A2 (한국 공개 특허 2003-0067773호)의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.



[0839]

[0840] <실험예 1-2-1 내지 1-2-17>

[0841] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 표 4-2에 나타난 각각의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0842] 실험예 1-2-1 내지 1-2-17 및 비교예 2에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-2의 결과를 얻었다.

[0843] [표 4-2]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x, y)
실험예 1-2-1	1-a-14	3.92	29.24	(0.327, 0.647)
실험예 1-2-2	1-a-15	4.42	27.05	(0.324, 0.651)
실험예 1-2-3	1-a-35	4.87	22.73	(0.323, 0.641)
실험예 1-2-4	1-a-58	4.07	30.05	(0.325, 0.649)
실험예 1-2-5	1-b-15	4.12	28.01	(0.325, 0.650)
실험예 1-2-6	1-b-37	4.98	23.69	(0.323, 0.644)
실험예 1-2-7	1-b-100	5.12	19.24	(0.322, 0.642)
실험예 1-2-8	1-c-15	4.52	21.4	(0.325, 0.645)
실험예 1-2-9	2-a-6	5.57	19.29	(0.325, 0.643)
실험예 1-2-10	2-a-20	4.32	28.23	(0.322, 0.642)
실험예 1-2-11	2-b-6	4.37	26.02	(0.323, 0.644)
실험예 1-2-12	2-b-19	4.45	26.08	(0.326, 0.648)
실험예 1-2-13	3-a-4	4.53	25.37	(0.324, 0.641)
실험예 1-2-14	3-b-3	4.34	27.37	(0.324, 0.641)
실험예 1-2-15	3-c-12	4.21	25.09	(0.327, 0.649)
실험예 1-2-16	4-a-7	4.73	24.84	(0.325, 0.648)
실험예 1-2-17	4-a-8	4.21	25.35	(0.324, 0.643)
비교예 2	ET-A2	5.31	23.07	(0.326, 0.644)

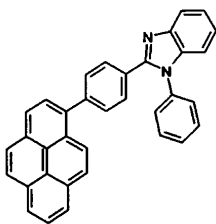
[0844]

[0845] 본 발명에 따른 새로운 헤테로환 유도체는 유기전기소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 본 발명에 따른 유기전기소자는 효율 상승, 구동전압하강, 수명 연장, 안정성 상승등에서 우수한 특성을 나타낸다.

[0846] <비교예 3>

[0847] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 하기 화학식 ET-A3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[ET-A3]



[0848]

[0849] <실험예 1-3-1 내지 1-3-3>

[0850] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 표 4-3에 나타난 각각의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0851] 실험예 1-3-1 내지 1-3-3 및 비교예 3에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-3의 결과를 얻었다.

[0852] [표 4-3]

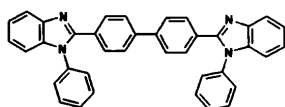
	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 1-3-1	1-a-18	5.21	27.14	(0.324,0.644)
실험예 1-3-2	1-b-39	4.97	21.53	(0.325,0.646)
실험예 1-3-3	3-c-25	5.12	22.25	(0.325,0.646)
비교예 3	ET-A3	5.91	24.76	(0.323,0.642)

[0853]

[0854] <비교예 4>

[0855] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 하기 화학식 ET-A4의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[ET-A4]



[0856]

[0857] <실험예 1-4-1 내지 1-4-16>

[0858] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 표 4-4에 나타난 각각의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0859] 실험예 1-4-1 내지 1-4-16 및 비교예 4에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-4의 결과를 얻었다.

[0860] [표 4-4]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 1-4-1	1-a-68	5.24	26.52	(0.324,0.644)
실험예 1-4-2	1-a-77	5.51	22.53	(0.325,0.646)
실험예 1-4-3	1-b-139	5.07	24.15	(0.327,0.647)
실험예 1-4-4	1-b-151	5.82	22.50	(0.323,0.643)
실험예 1-4-5	2-b-28	5.91	24.64	(0.324,0.644)
실험예 1-4-6	3-b-13	5.13	27.37	(0.325,0.648)
실험예 1-4-7	5-a-1	4.32	26.15	(0.323,0.649)
실험예 1-4-8	5-a-2	4.76	23.5	(0.324,0.651)
실험예 1-4-9	5-a-13	6.78	22.24	(0.327,0.648)
실험예 1-4-10	5-a-23	5.36	18.13	(0.329,0.650)
실험예 1-4-11	5-a-32	5.52	22.45	(0.327,0.649)
실험예 1-4-12	5-a-33	5.03	23.87	(0.330,0.652)
실험예 1-4-13	5-a-34	6.15	20.69	(0.327,0.647)
실험예 1-4-14	7-a-23	4.82	23.64	(0.327,0.644)
실험예 1-4-15	5-a-53	4.95	20.83	(0.326,0.649)
실험예 1-4-16	5-a-55	5.24	22.57	(0.328,0.651)
비교예 4	ET-A4	7.23	19.25	(0.324,0.638)

[0861]

[0862] 상기 표 4-1, 표 4-2, 표 4-3, 표 4-4에서 화학식 1의 구조를 포함하는 화합물들은 비교예 화합물보다 저전압 및 고효율의 특징을 나타내었다.

[0863] <실험예 2-1-1 내지 2-1-38>

[0864] 상기 실험예 1-1-1에서, 화학식 1-a-8의 화합물 대신 하기 표 4-5에 나타난 화합물들을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0865] 실험예 2-1-1 내지 2-1-38 및 비교예 2에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-5의 결과를 얻었다.

[0866] [표 4-5]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 2-1-1	1-a-29	4.23	27.12	(0.324,0.644)
실험예 2-1-2	1-a-31	4.52	21.57	(0.325,0.646)
실험예 2-1-3	1-a-37	5.06	17.93	(0.327,0.647)
실험예 2-1-4	1-a-64	4.85	21.57	(0.323,0.643)
실험예 2-1-5	1-a-72	4.92	23.64	(0.324,0.644)
실험예 2-1-6	1-b-31	4.18	29.39	(0.325,0.648)
실험예 2-1-7	1-b-32	4.36	27.75	(0.323,0.649)
실험예 2-1-8	1-b-33	3.72	21.15	(0.324,0.651)
실험예 2-1-9	1-b-80	3.91	29.07	(0.327,0.648)
실험예 2-1-10	1-b-117	4.37	25.02	(0.329,0.650)
실험예 2-1-11	1-b-122	4.56	25.04	(0.327,0.649)
실험예 2-1-12	1-b-130	4.07	25.02	(0.330,0.652)
실험예 2-1-13	1-b-136	5.13	23.01	(0.327,0.647)
실험예 2-1-14	1-c-23	4.82	21.09	(0.324,0.644)
실험예 2-1-15	2-a-29	4.53	24.28	(0.325,0.646)
실험예 2-1-16	2-a-38	4.35	25.47	(0.326,0.643)
실험예 2-1-17	2-b-16	4.73	24.48	(0.324,0.645)
실험예 2-1-18	3-c-10	5.16	20.72	(0.323,0.645)
실험예 2-1-19	3-c-21	4.75	24.8	(0.323,0.647)
실험예 2-1-20	6-a-1	5.31	19.38	(0.321,0.642)
실험예 2-1-21	6-a-2	4.51	25.35	(0.322,0.645)
실험예 2-1-22	6-a-3	4.89	23.57	(0.325,0.644)
실험예 2-1-23	6-a-21	4.83	21.92	(0.325,0.644)
실험예 2-1-24	6-a-22	4.71	22.76	(0.322,0.645)
실험예 2-1-25	6-a-23	4.23	23.15	(0.322,0.645)
실험예 2-1-26	6-a-33	3.93	22.3	(0.322,0.642)
실험예 2-1-27	6-a-34	3.74	20.45	(0.322,0.645)
실험예 2-1-28	6-a-35	4.56	25.3	(0.322,0.644)

[0867]

실험예 2-1-29	7-a-1	3.89	23.13	(0.322,0.644)
실험예 2-1-30	7-a-4	3.95	22.72	(0.322,0.647)
실험예 2-1-31	7-a-6	4.37	27.38	(0.322,0.644)
실험예 2-1-32	7-a-10	4.26	22.82	(0.322,0.645)
실험예 2-1-33	3-c-30	4.56	25.24	(0.322,0.642)
실험예 2-1-34	5-a-59	4.59	22.71	(0.323,0.644)
실험예 2-1-35	5-a-62	4.64	25.20	(0.322,0.644)
실험예 2-1-36	5-a-64	4.52	24.71	(0.321,0.643)
실험예 2-1-37	5-a-65	3.94	25.09	(0.323,0.645)
실험예 2-1-38	5-a-67	3.8	23.6	(0.322,0.644)
비교예 2	ET-A2	5.31	23.07	(0.326,0.644)

[0868]

[0869]

상기 표 4-5에서 화학식 1의 구조를 갖는 화합물들은 전자 수송 및 주입능력이 우수하여 유기발광소자에 적용가능함을 확인할 수 있었다.

[0870]

<실험예 3-1-1>

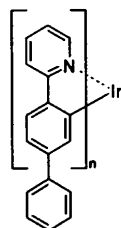
[0871]

ITO(인듐 주석 산화물)가 1,000Å 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 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

[0872]

이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 상기 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitride hexaazatriphenylene)를 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 상기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400 Å)를 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 위에 실시예 6에서 제조한 화학식 1-a-29로 표시되는 화합물과 하기 화학식 D3 도펀트 화합물을 100: 14의 중량비로 진공증착하여 발광층(300 Å)을 형성하였다. 그 다음에 ET-A2 화합물(300 Å)을 전자 주입 및 수송층으로 진공증착하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2,000Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[D3]



[0873]

[0874]

상기 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~0.7 Å/sec를 유지하였고, 리튬플루라이드는 0.2 Å/sec, 알루미늄은 3 ~ 7 Å/sec의 증착속도를 유지하였다.

[0875]

<실험예 3-1-2 내지 3-1-7>

[0876]

상기 실험예 3-1-1에서, 사용한 화합물 1-a-29 대신에 하기 표 4-6에 나타난 화합물들을 사용한 것을 제외하고는 실험예 3-1-1 과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

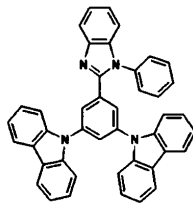
[0877]

<비교예 3-1>

[0878]

상기 실험예 3-1-1에서, 화합물 1-a-29 대신에 하기 화학식의 PH의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 3-1-1 과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[PH]



[0879]

[0880] 실험예 3-1-1 내지 3-1-7 및 비교예 3-1 에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-6의 결과를 얻었다.

[0881] [표 4-6]

	EML(Host:D3)	전압 (V@20 mA/cm ²)	전류효율 (cd/A@20 mA/cm ²)	색 좌표(x, y)
비교예 3-1	PH	6.23	15.25	(0.369, 0.600)
실험예 3-1-1	1-a-29	4.57	36.96	(0.380, 0.589)
실험예 3-1-2	3-a-16	4.57	22.57	(0.354, 0.611)
실험예 3-1-3	3-c-13	5.34	28.48	(0.360, 0.607)
실험예 3-1-4	1-a-80	4.61	40.22	(0.354, 0.609)
실험예 3-1-5	1-b-146	4.31	39.07	(0.362, 0.607)
실험예 3-1-6	6-a-18	4.38	29.34	(0.361, 0.607)
실험예 3-1-7	6-a-39	4.90	36.52	(0.360, 0.608)

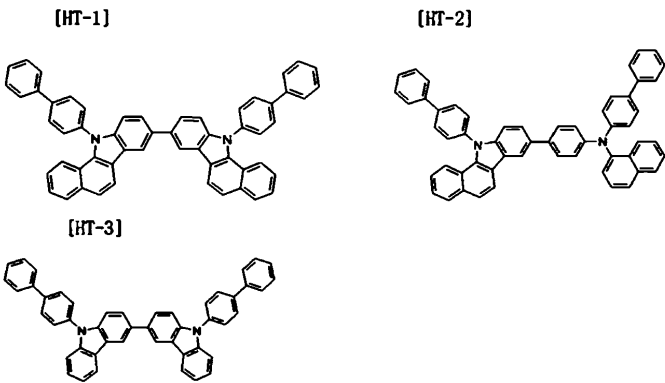
[0882]

[0883] 표 4-6에서 보듯이, 본 발명에 따른 화학식의 화합물 유도체는 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자에서 발광 물질 역할을 할 수 있으며, 본 발명에 따른 소자는 효율, 구동 전압, 안정성 면에서 우수한 특성을 나타낸다. 특히 효율면에서 높은 발광 특성을 나타내었다.

[0884] <실험예 4-1-1 내지 실험예 4-1-20>

[0885] 상기 실험예 1-1-1과 동일하게 준비된 ITO 투명 전극 위에, 상기 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitriple hexaazatriphenylene; HAT)를 500 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다.

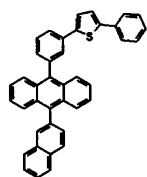
[0886] 상기 정공주입층 위에 하기 화합물 HT-1, HT-2, 또는 HT-3 를 진공증착하여 정공수송층((400 Å)을 형성하였다.



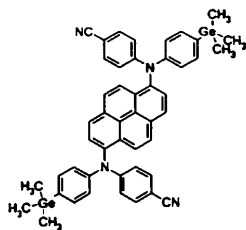
[0887]

[0888] 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 300 Å으로 아래와 같은 BH-1와 BD를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[BH-1]



[BD]



[0889]

[0890]

이어서, 상기 발광층 위에 막 두께 300 Å으로, 표 4-7에 나타낸 각각의 화합물(ETL)을 진공증착하여 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자주입 및 수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께로 리튬 플루라이드(LiF)와 2000 Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[0891]

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 유지하여, 유기 발광소자를 제작하였다.

[0892]

상기 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-7의 결과를 얻었다.

[0893]

[표 4-7]

	화합물 (HTL)	화합물 (ETL)	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 4-1-1	HT-1	1-a-8	4.27	4.62	(0.139, 0.158)
실험예 4-1-2	HT-3	1-a-8	5.01	4.51	(0.138, 0.153)
실험예 4-1-3	HT-1	1-a-15	3.97	4.01	(0.139, 0.154)
실험예 4-1-4	HT-2	1-a-15	4.04	4.10	(0.139, 0.154)
실험예 4-1-5	HT-1	1-a-58	4.10	4.67	(0.139, 0.158)
실험예 4-1-6	HT-3	1-a-58	5.47	4.21	(0.139, 0.158)
실험예 4-1-7	HT-1	1-b-9	4.26	4.26	(0.139, 0.156)
실험예 4-1-8	HT-2	1-b-9	4.21	4.07	(0.139, 0.157)
실험예 4-1-9	HT-1	1-b-32	4.17	4.89	(0.139, 0.147)
실험예 4-1-10	HT-2	1-b-32	3.86	4.80	(0.139, 0.149)
실험예 4-1-11	HT-1	1-b-33	4.04	4.69	(0.139, 0.147)
실험예 4-1-12	HT-2	1-b-33	4.13	4.87	(0.139, 0.150)
실험예 4-1-13	HT-1	1-b-80	4.02	5.01	(0.138, 0.147)
실험예 4-1-14	HT-2	1-b-80	3.85	4.96	(0.138, 0.157)
실험예 4-1-15	HT-2	7-a-1	4.13	4.87	(0.139, 0.140)
실험예 4-1-16	HT-1	7-a-4	4.02	5.01	(0.138, 0.157)
실험예 4-1-17	HT-2	7-a-6	3.85	4.96	(0.138, 0.147)
실험예 4-1-18	HT-1	7-a-10	4.13	4.87	(0.139, 0.150)
실험예 4-1-19	HT-2	7-a-16	4.16	5.23	(0.139, 0.151)
실험예 4-1-20	HT-1	7-a-23	5.12	4.38	(0.139, 0.147)

[0894]

[0895]

표 4-7에서 보듯이, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자에서 정공주입 및 전달 물질 또는 발광 물질을 다양하게 사용할 수 있으며, 본 발명에 따른 소자는 효율, 구동 전압, 안정성 면에서 우수한 특성을 나타내었다.

[0896]

<실험예 5-1-1>

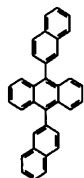
[0897]

상기 실험예 1-1-1에서와 같이 ITO 투명 전극 위에 상기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitriple hexaazatriphenylene; HAT)를 500 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다.

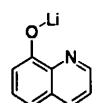
[0898] 상기 정공주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 상기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400 Å)를 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다.

[0899] 상기 정공수송층 위에 막 두께 300 Å으로, 하기 화학식 BH-2를 호스트로, 상기 화학식 BD를 도판트로 사용하여, 25:1의 중량비로 발광층을 형성한 후, 실시예 1에서 제조한 화학식 1-a-8 화합물과 하기 화학식 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공증착하여 300 Å의 두께로 전자주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2,000Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[BH-2]



[LiQ]



[0900]

[0901] <실험예 5-1-2 내지 실험예 5-1-8>

[0902] 상기 실험예 5-1-1에서, 화합물 1-a-8 대신 하기 표 4-8에 나타난 화합물들을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실험예 5-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0903] <비교예 5>

[0904] 상기 실험예 5-1-1에서, 화합물 1-a-8 대신 상기 화학식 ET-A1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실험예 5-1-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0905] 실험예 5-1-1 내지 5-1-8 및 비교예 5에 의해 제작된 유기발광소자에 전류를 인가하였을 때, 표 4-8의 결과를 얻었다.

[0906] [표 4-8]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A @10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)
실험예 5-1-1	1-a-8	4.09	4.73	(0.139, 0.147)
실험예 5-1-2	1-a-14	4.13	4.86	(0.138, 0.148)
실험예 5-1-3	1-a-15	3.96	4.97	(0.139, 0.148)
실험예 5-1-4	1-b-32	4.04	5.26	(0.139, 0.147)
실험예 5-1-5	1-b-33	4.28	4.67	(0.138, 0.146)
실험예 5-1-6	1-b-80	3.85	5.32	(0.137, 0.145)
실험예 5-1-7	5-a-59	4.26	4.26	(0.139, 0.146)
실험예 5-1-8	5-a-67	4.21	5.21	(0.140, 0.148)
비교예 5	ET-A1	4.73	4.12	(0.138, 0.147)

[0907]

[0908] 표 4-8에서 보듯이, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 LiQ와 같은 금속화합물과 혼합하여 전자수송층을 형성할 수 있으며, 본 발명에 따른 소자는 효율, 구동 전압, 안정성 면에서 우수한 특성을 나타내었다.

도면의 간단한 설명

[0061] 도 1은 본 발명에 따른 유기발광소자의 한 예를 도시한 것이다.

[0062] [도면의 주요 부분에 대한부호의 설명]

- [0063] 1 기관
- [0064] 2 양극
- [0065] 3 정공 주입층
- [0066] 4 정공 수송층
- [0067] 5 유기 발광층
- [0068] 6 전자 수송층
- [0069] 7 음극
- [0070] 도 2는 화합물 A-13 의 질량스펙트럼이다.
- [0071] 도 3은 화합물 A-14 의 질량스펙트럼이다.
- [0072] 도 4는 화합물 1-a-15 의 질량스펙트럼이다.
- [0073] 도 5는 화합물 1-a-34의 질량스펙트럼이다.
- [0074] 도 6은 화합물 1-a-58의 질량스펙트럼이다.
- [0075] 도 7은 화합물 1-b-15의 질량스펙트럼이다.
- [0076] 도 8은 화합물 1-b-100 의 질량스펙트럼이다.
- [0077] 도 9는 화합물 1-b-117 의 질량스펙트럼이다.
- [0078] 도 10은 화합물 5-a-34 의 질량스펙트럼이다.
- [0079] 도 11은 화합물 5-a-33 의 질량스펙트럼이다.
- [0080] 도 12는 화합물 1-a-74 의 질량스펙트럼이다.
- [0081] 도 13은 화합물 1-a-31 의 질량스펙트럼이다.
- [0082] 도 14는 화합물 1-b-136 의 질량스펙트럼이다.
- [0083] 도 15는 화합물 1-b-31 의 질량스펙트럼이다.
- [0084] 도 16은 화합물 1-b-32 의 질량스펙트럼이다.
- [0085] 도 17은 화합물 1-b-122 의 질량스펙트럼이다.
- [0086] 도 18은 화합물 6-a-1의 질량스펙트럼이다.
- [0087] 도 19는 화합물 6-a-3의 질량스펙트럼이다.
- [0088] 도 20은 화합물 5-a-13 의 질량스펙트럼이다.
- [0089] 도 21은 화합물 1-b-139 의 질량스펙트럼이다.
- [0090] 도 22는 화합물 1-b-80 의 질량스펙트럼이다.
- [0091] 도 23은 화합물 6-a-2 의 질량스펙트럼이다.
- [0092] 도 24는 화합물 1-b-123 의 질량스펙트럼이다.
- [0093] 도 25는 화합물 1-a-68 의 질량스펙트럼이다.
- [0094] 도 26은 화합물 1-a-77 의 질량스펙트럼이다.
- [0095] 도 27은 화합물 1-b-39 의 질량스펙트럼이다.
- [0096] 도 28은 화합물 1-b-146 의 질량스펙트럼이다.
- [0097] 도 29는 화합물 5-a-2 의 질량스펙트럼이다.
- [0098] 도 30은 화합물 6-a-18을 이용한 경우 77K 에서 Methyl THF에서 측정된 인광 PL이다.

[0099] **발명의 실시를 위한 최선의 형태**

[0100] 이하에서 본 발명에 대하여 상세히 설명한다.

[0101] 본 발명에 따른 합질소 헤테로환 유도체는 상기 화학식 1로 표시되거나 상기 화학식 1의 구조를 2 이상 포함한다.

[0102] 본 발명의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1의 구조를 2이상 포함한다 함은, 상기 화학식 1의 구조를 갖는 화합물들이 연결기 없이 직접 연결된 구조로 존재함을 의미한다. 이와 같은 경우에 있어서, 화학식 1, 화학식 2, 화학식 3-1, 화학식 3-2, 화학식 4-1 중에서 각각 동일한 화학식이나 서로 다른 화학식이 직접 결합하여 상기 화학식 구조를 2 이상 포함할 수 있음을 의미한다.

[0103] 본 발명의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1의 구조를 2이상 포함한다 함은, 2가 이상의 연결기를 갖는 알칸, 2가 이상의 연결기를 갖는 시클로알칸; 2가 이상의 연결기를 갖는 아릴화합물; 질소, 황, 산소원자를 적어도 1개 이상 포함하며 2가 이상의 연결기를 갖는 오각형 또는 육각형의 헤테로아릴화합물; 산소원자, 황원자, 치환 또는 비치환된 질소원자, 또는 치환 또는 비치환된 인원자에 상기 화학식 1의 구조가 2개 이상 연결될 수 있음을 의미한다. 이와 같은 경우에 있어서도 상기 화학식 1, 화학식 2, 화학식 3-1 및 화학식 3-2, 화학식 4-1 중에서 각각 동일한 화학식이나 서로 다른 화학식이 결합하여 상기 화학식 구조를 2이상 포함할 수 있음을 의미한다.

[0104] 상기 화학식 1에 있어서, 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 입체적 방해를 주지 않는 범위인 1-40개인 것이 바람직하다. 예컨대, 상기 화학식 1에 있어서, $-(L)p-(Y)q$ 의 Y가 알콕시기인 경우, 이 알콕시기의 탄소수의 개수는 화합물의 공액 길이에는 영향을 미치지 않고, 다만 화합물의 유기전자소자에의 적용 방법, 예컨대 진공증착법 또는 용액도포법의 적용에 영향을 미칠 뿐이므로, 알콕시기의 탄소수의 개수는 특별히 한정되지 않는다.

[0105] 본 발명에 있어서, 알케닐기로는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수 2 내지 40의 알케닐기가 바람직하며, 구체적으로 스틸베닐기(stylybenyl), 스티레닐기(styenyly) 등의 아릴기가 치환된 알케닐기가 바람직하나 이들에 한정되지 않는다.

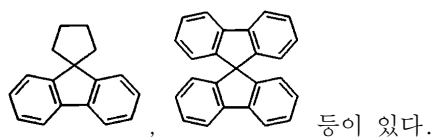
[0106] 상기 화학식 1에 있어서, 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 60인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤기 등이 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 아세나프타세닐기, 트리페닐렌기, 플루오안트렌(fluoranthrene)기 등이 있으나, 본 발명의 범위가 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.

[0107] 상기 화학식 1에 있어서, 헤테로 고리기는 이중원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로고리기로써, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2-60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 트리아진기, 아크리딜기, 피리다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 벤즈티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤즈푸라닐기, 디벤조푸라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

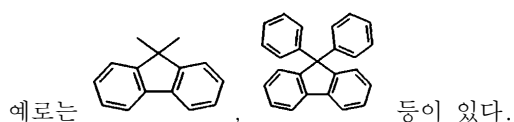
[0108] 상기 화학식 1에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3-60인 것이 바람직하며, 특히 시클로펜틸기, 시클로헥실기가 바람직하다.

[0109] 본 발명에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0110] 본 발명에 있어서, 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조로서, 예로는



[0111] 본 발명에 있어서, 플루오레닐기는 열린 플루오레닐기의 구조를 포함하며, 여기서 열린 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조에서 한쪽 고리 화합물의 연결이 끊어진 상태의 구조로서,



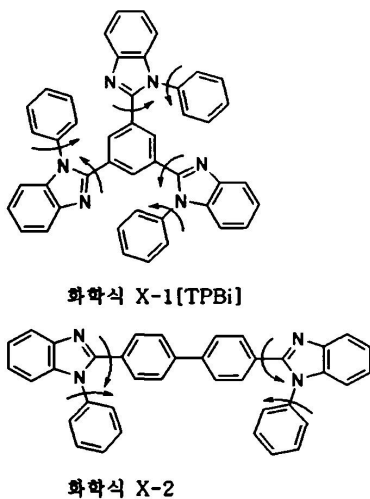
- [0112] 본 발명에 있어서, 아릴 아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 단환식의 디아릴아민기, 치환 또는 비치환된 다환식의 디아릴아민기 또는 치환 또는 비치환된 단환식 및 다환식의 디아릴아민기를 의미한다.
- [0113] 본 발명에 있어서, "치환 또는 비치환"이란, 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 시클로알킬기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 알케닐기; 실릴기; 붕소기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 아릴아민기; 아릴기; 플루오레닐기; 카바졸기; 및 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기 중 적어도 하나의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.
- [0114] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, R_1 및 R_2 이 치환 또는 비치환의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 헤테로고리기인 경우, 이들은 서로 동일한 것이 바람직하다.
- [0115] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, $-(L)_p-(Y)_q$ 중 p 가 0인 경우, Y 는 적어도 하나는 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기 등이 바람직하다.
- [0116] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, $-(L)_p-(Y)_q$ 중 p 가 1이상인 경우, L 은 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 등이 바람직하며, Y 는 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 또는 N, O, S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기가 바람직하다.
- [0117] 상기 화학식 1에 있어서, L 이 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기이고, Y 가 아릴기 또는 헤테로아릴기인 경우, $p+q$ 는 2 이상이 바람직하다.
- [0118] $-(L)_p-(Y)_q$ 에서 p 가 2이상의 경우, L 은 서로 같거나 다르며, $-(L)_p-(Y)_q$ 에서 q 가 2이상의 경우, Y 는 서로 같거나 다르다.
- [0119] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, R_3 내지 R_{12} 중 적어도 하나는 중수소, 니트릴기, 할로젠기, 아릴기, 치환된 아릴렌기, 헤테로고리기, 치환된 헤테로고리기, 플루오레닐기, 카바졸기 등이 바람직하다.
- [0120] 본 발명에 있어서, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 콰이레닐기, 페난트레닐기, 페틸렌기, 테트라세닐기, 안트라센닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0121] 본 발명에 있어서, 치환된 헤테로아릴렌기라 함은, 피리딜기, 티오펜기, 트리아진기, 퀴놀린기, 페난트롤린기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 카바졸기 및 이들의 축합헤테로고리기, 예컨대 벤즈퀴놀린기, 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 디벤조티오펜기 등이 치환된 기인 것이 바람직하다.
- [0122] 상기 화학식 2, 화학식 3-1, 화학식 3-2, 화학식 4-1의 식에서 $(N)n_1$ 및 $(N)n_2$ 는 고리내의 탄소원자에 질소원자로 치환가능함을 나타낸다. 여기서 n_1 과 n_2 는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수가 바람직하다.
- [0123] 본 발명의 실시상태에 있어서, R_1 과 R_2 가 치환 또는 비치환의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 헤테로아릴기인 경우, 이들은 서로 동일한 것이 바람직하다.
- [0124] 또한, R_1 내지 R_2 는 각각 독립적으로 동일하거나 다를 수 있으며, 페닐, 비페닐, 나프틸기, 피리디닐, 또는 니트릴로 치환된 페닐로 치환된 것이 바람직하다.
- [0125] 유기발광소자의 제작 방법 중 진공증착(Vacuum deposition) 과정은 고진공, 예컨대 약 $10^{-6} \sim 10^{-7}$ torr 및 고온에서 물질을 승화시켜 증착한다. 따라서, 화합물이 고온에서 장시간 동안 변성없이 특성을 유지하며 쉽게 승화될 수 있는 성질이 중요하다.
- [0126] 한편, 이미다졸기는 오각형 고리내에 질소원자를 2개 포함한 헤테로고리 화합물로 전자 주입 및 전자 전달의 특성이 우수하여 유기발광소자에 있어서, 전자 주입 및 전달 층으로 사용되거나 발광층으로 사용된 예가 있다. 하

기 화학식 X-1 인 화합물 TPBi 및 화학식 X-2 는 기능적으로 전자를 전달하는 능력뿐 아니라, 발광층까지 넘어 오는 정공을 차단하는 기능도 있어서 정공저지층으로도 사용가능하다. 그러나, 실제 소자에 적용하기에는 안정성이 매우 낮은 문제점을 갖고 있다. 따라서, 본 발명에서는 성능적으로 우수한 특성을 갖고 있음에도 불구하고, 물리적 또는 전기적으로 안정성이 낮은 문제점을 극복하고자 하였다.

[0127] 화합물이 유기발광소자에서 변성없이 그 특성을 유지하기 위해서는 전기적으로 안정하며, 물리적으로 높은 유리전이온도(Tg)와 높은 녹는점(Tm)을 갖는 화합물이어야 한다. 그러나, 화학식 X-1과 화학식 X-2는 매우 낮은 Tg와 Tm을 갖고 있다.

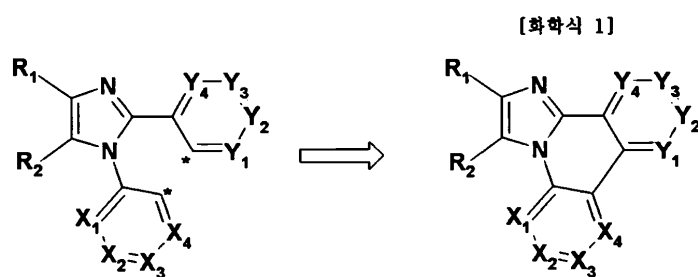
[0128] 또한, 유기발광소자 제작과정에서, 화합물들을 장시간, 고온에서 진공증착하게 되므로 열적안정성이 낮은 화합물들은 쉽게 변성이 발생하여, 장시간 진공증착과정을 할 수 없게 된다. 이를 극복하기 위해서는 낮은 온도에서 승화가 가능한 승화성 높은 물질이 요구된다. 낮은 온도에서 높은 승화성을 갖기 위해서는 화합물의 분자량을 감소시키거나, 분자간 상호작용(interaction)을 감소시켜야 한다. 또한 화합물의 구조를 변형해서 결정성을 키워 승화과정에서 Tg나 Tm 이하에서 승화성을 높이는 것이 가능한데, 승화성 높은 화합물의 구조는 판상구조, 대칭구조, 또는 구형구조 등이 바람직하다.

[0129] 본 발명에서는 N-페닐벤즈이미다졸기의 안정성 저하가 하기 구조에서와 같이 N과 페닐기의 자유 회전(free rotation)에 의해 발생할 수 있다고 판단하였으며, 2-번 위치 및 N-페닐기에서 자유 회전(free rotation)이 열에너지를 얻으면 활성화되어 화합물의 안정성 저하가 일어날 수 있다고 판단하였다.



[0130]

[0131] 이와 같은 문제점을 극복하기 위해 본 발명은 화학식 1에서와 같이, 이미다졸기의 N과 결합된 X_1 내지 X_4 로 이루어진 아릴기 또는 헤테로아릴기의 오르토(ortho-) 위치와, 이미다졸기의 2번 위치로 결합된 Y_1 내지 Y_4 로 이루어진 아릴기 또는 헤테로아릴기의 오르토(ortho-) 위치를 서로 연결시켜 화합물의 안정성과 승화성을 높이려고 하였다.



[0132]

[0133] 이와 같이 개발된 화학식 1의 화합물 구조는 판상 구조에 근접하게 되며, 특히, 이미다졸기의 치환기인 R_1 과 R_2 가 서로 연결된 단환식 또는 다환식의 축합환을 형성하는 경우에는 판상구조를 이루게 되어 열안정성과 승화성이 더욱 증가한다. 화학식 1과 같은 구조는 자유 회전(free-rotation)이 용이하지 않게 되고, 열안정성과 승화성이 증가하여 진공증착과정에서도 그 안정성을 유지할 수 있다.

[0134] 상기 화학식 1의 치환기가 아릴기 및 헤테로아릴기인 경우 안정성면에서 가장 바람직하며, 알킬기와 같은 회전

(rotation)이 큰 치환체는 덜 바람직하다.

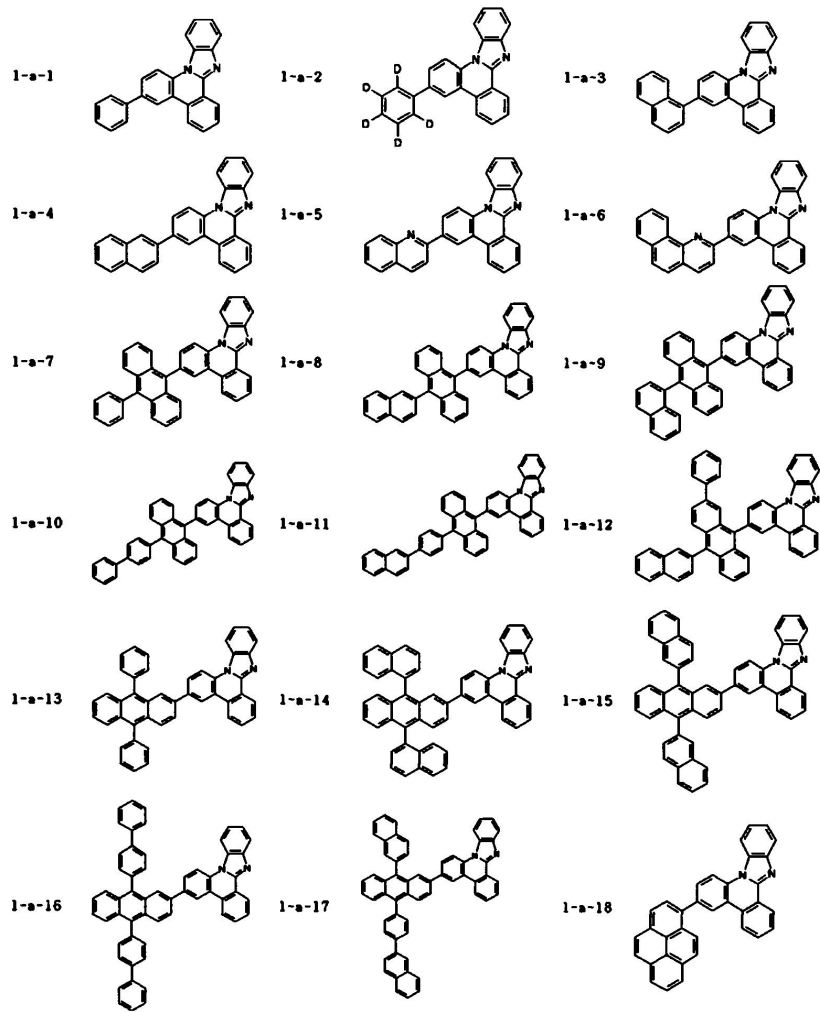
[0135] 이뿐만 아니라, 상기 화학식에 할로젠, 니트릴기, 니트로기, 또는 헤테로고리기가 도입된 화합물의 경우 화합물의 HOMO 값을 깊게 하여, 발광층으로부터 넘어오는 holes을 저지할 수 있고 결국 발광층에 머물 수 있는 holes의 양을 증가시켜 효율 및 안정성을 증가시킨다.

[0136] 본 발명에 있어서, 전술한 것과 같은 작용원리는, R_1 과 R_2 가 서로 연결된 단환식 또는 다환식의 축합환 이미다졸기를 구성하는 경우뿐만 아니라, 열린 아릴이미다졸기 및 열린 헤테로아릴이미다졸기를 구성하는 경우, 즉 이미다졸기의 치환기인 R_1 과 R_2 가 고리로 연결되지 않고 R_1 및 R_2 가 아릴기 또는 헤테로아릴기인 구조인 경우까지 적용된다. 따라서, 본 발명의 범위에는 이들 구조들이 모두 포함된다.

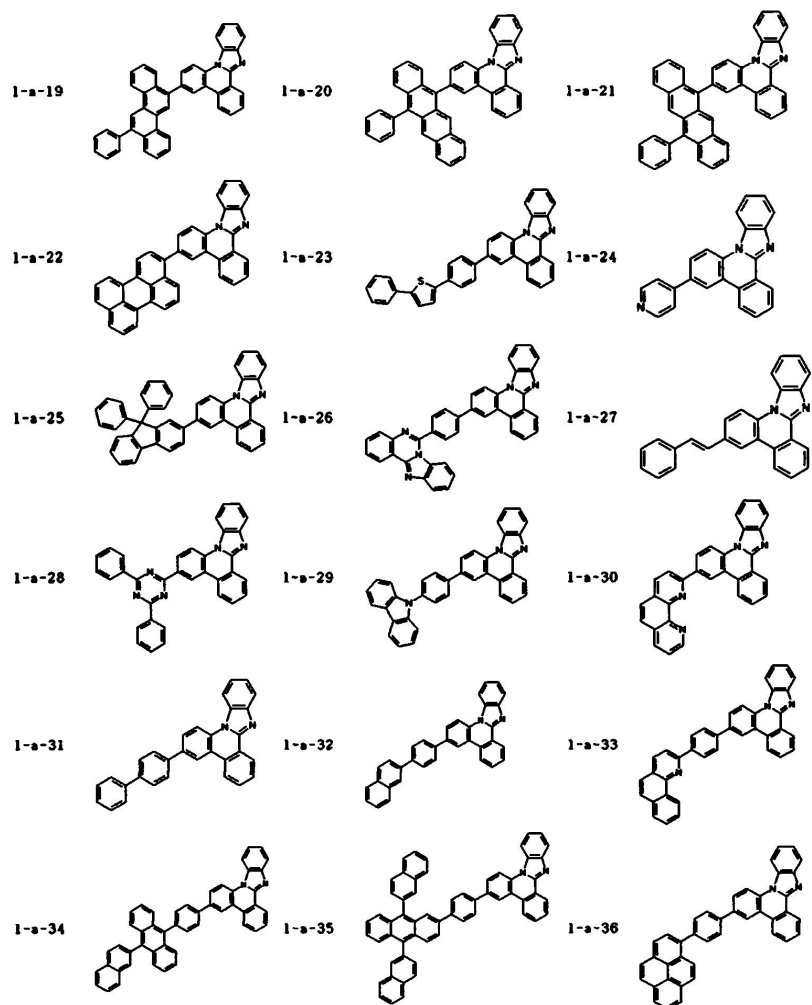
[0137] 또한, 본 발명에 따른 화합물은 치환기의 종류 및 성질에 따라 유기발광전자소자에서 다양한 용도로 사용될 수 있다. 예를 들면, 치환 또는 비치환된 아릴기나 헤테로아릴기가 치환되거나, 또는 화학식 1의 구조가 2개 이상 연결될 경우, 이들의 특성은 화학식 1이 주는 전자친화성 및 전기음성도의 증가 등으로 깊은 HOMO값과 전자주입을 잘 할 수 있는 적당한 LUMO를 갖게 되어 전자 주입, 전자 전달 또는 hole저지층 등으로 사용함이 유리하다. 반면 치환 또는 비치환된 아릴아미노기, 알킬아미노기, 헤테로아릴아미노기, 아릴킬아미노기 및 이들로 치환된 아릴기나 헤테로아릴기는 상대적으로 holes을 잘 형성시키므로 hole주입 및 전달 층에 적합하다. 기본적으로 본 화학식 1의 구조는 밴드갭이 매우 크므로, 본 화학식 1의 구조에 적당한 치환체를 도입하면, 예를 들면 카바졸기와 같은 치환체를 도입하면, 삼중항(triplet state)에서의 에너지 밴드갭 및 안정성을 확보할 수 있다. 이와 같은 결과로부터, 적색에서부터 청색까지의 다양한 인광 도판트를 사용해서 형광뿐 아니라 인광소자의 발광층까지 적용할 수 있다. 특히, 본 발명에 따른 화합물은 발광층의 호스트로 사용될 수 있다. 본 발명에 따른 화합물이 유기발광소자의 어느 한 유기물층, 예컨대 발광층 또는 전자수송층의 호스트로 사용되는 경우, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도판트로 이용할 수 있다.

[0138] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

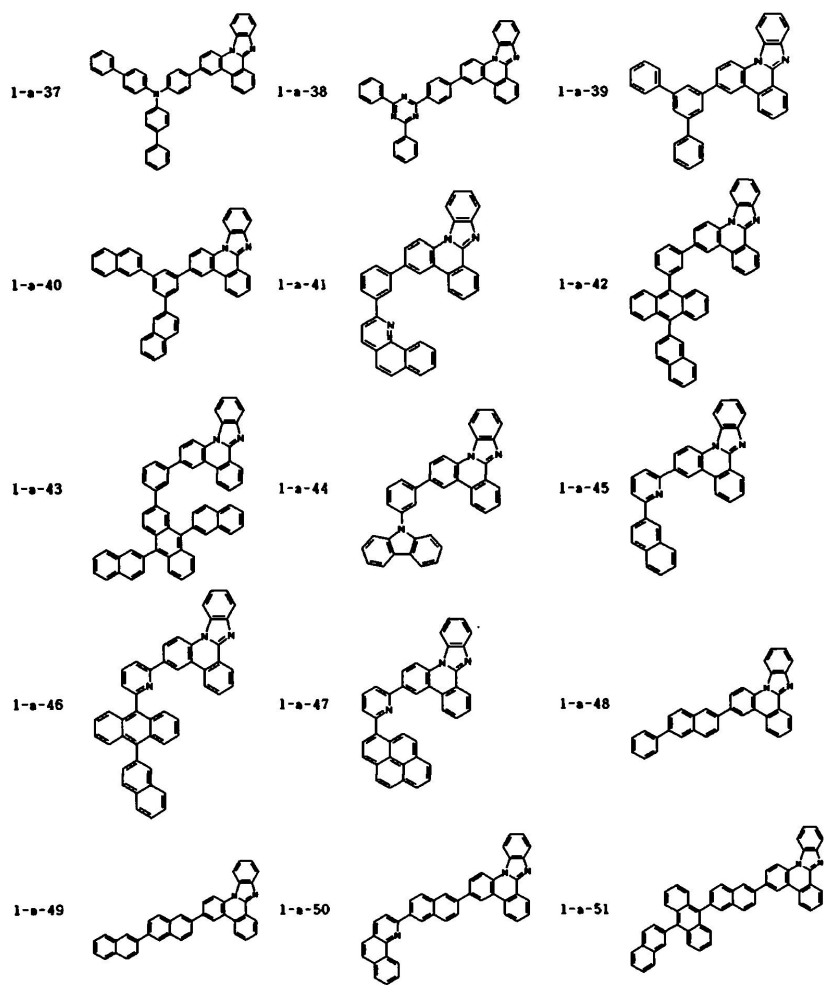
[0139] 표 1



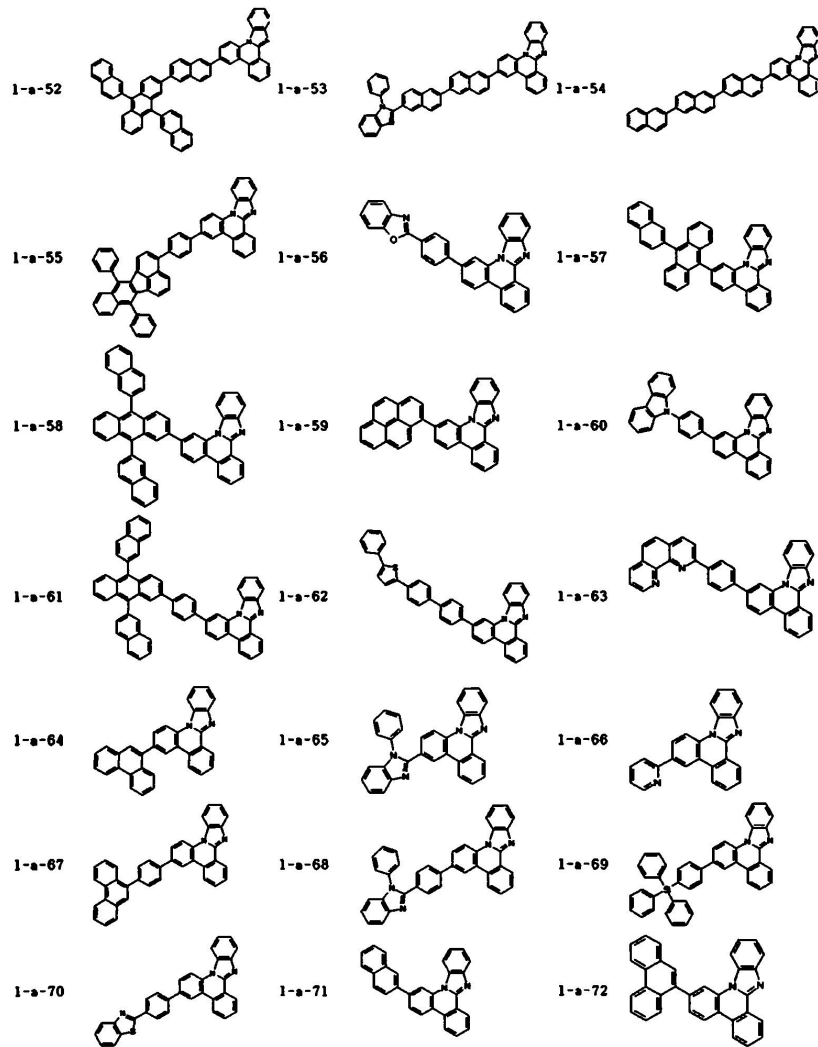
[0140]



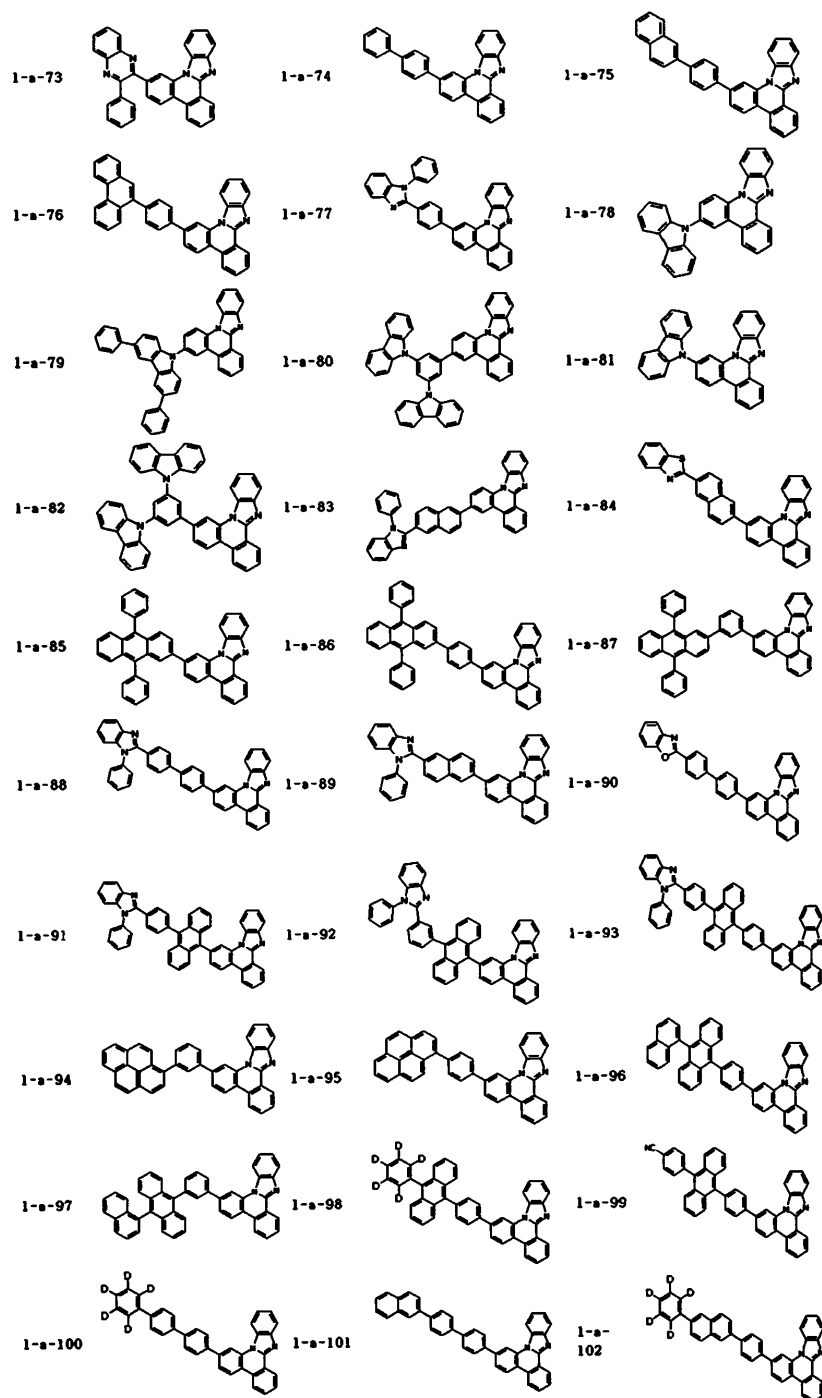
[0141]



[0142]



[0143]



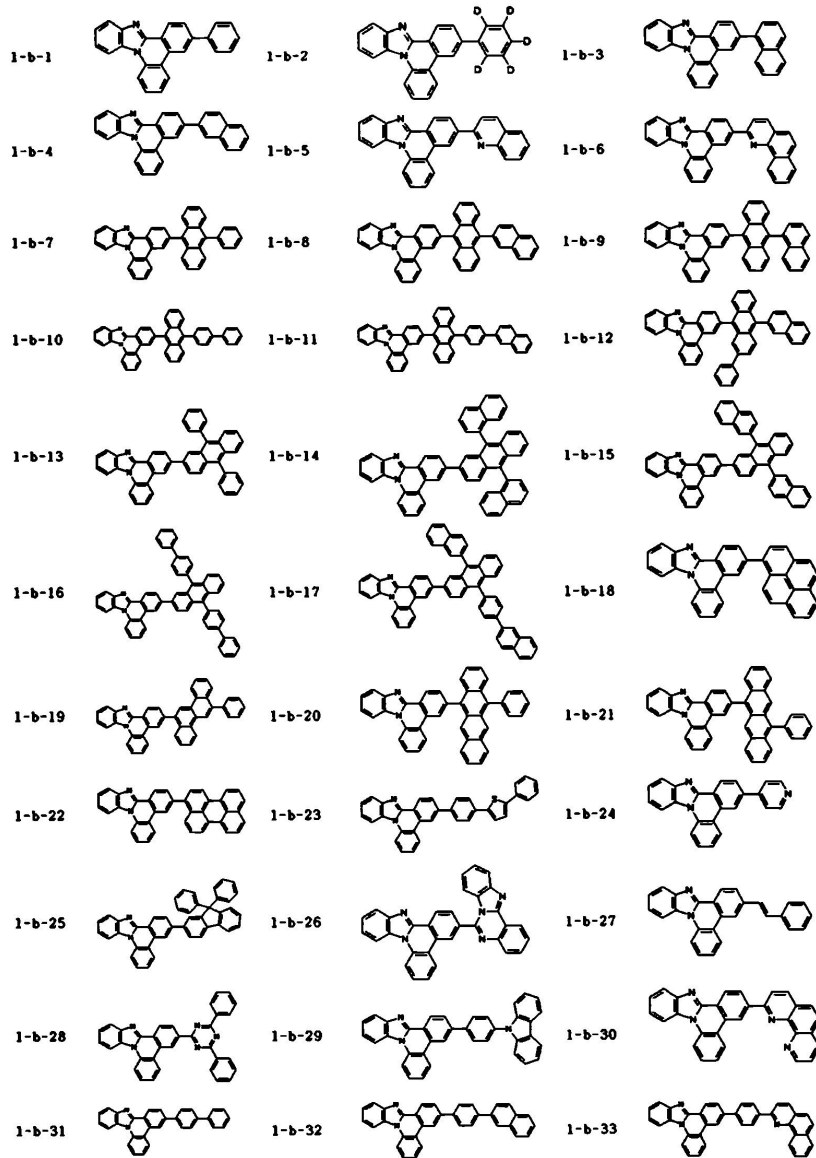
[0144]

[0145]

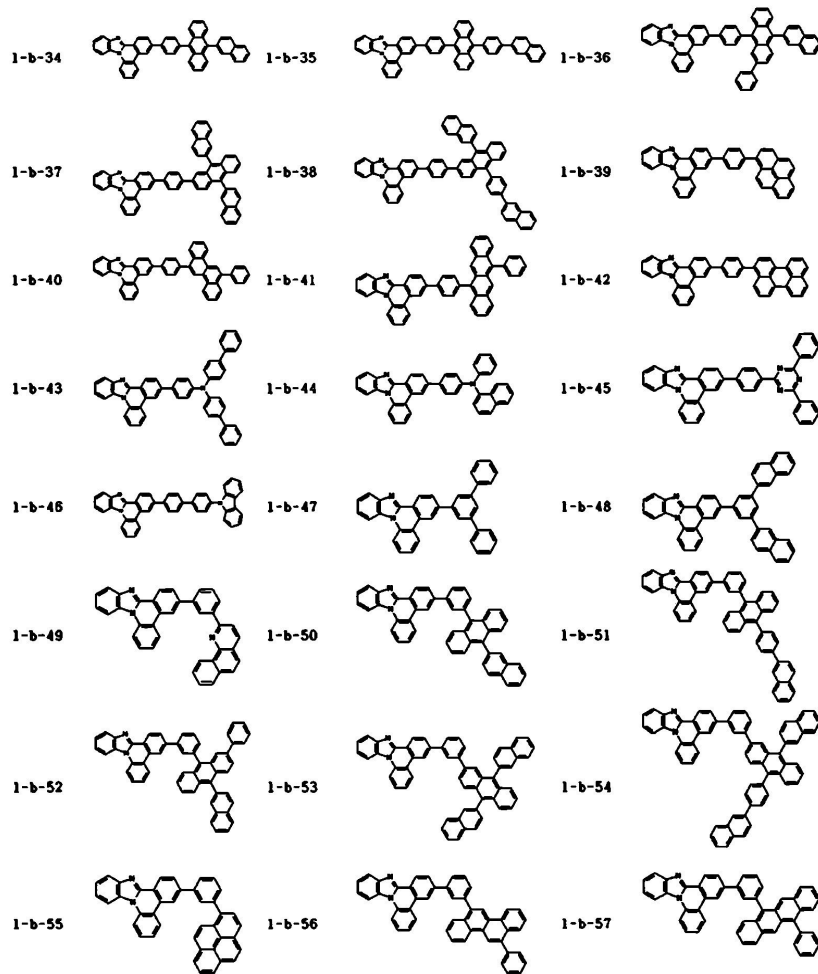
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0146]

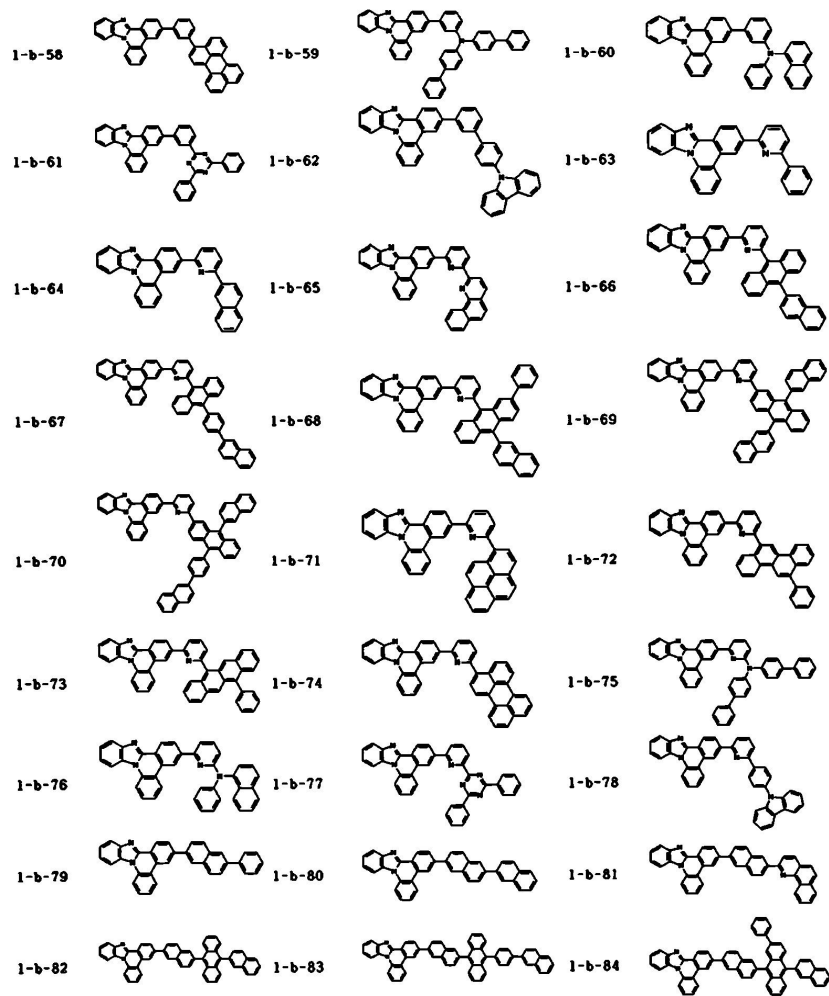
표 2



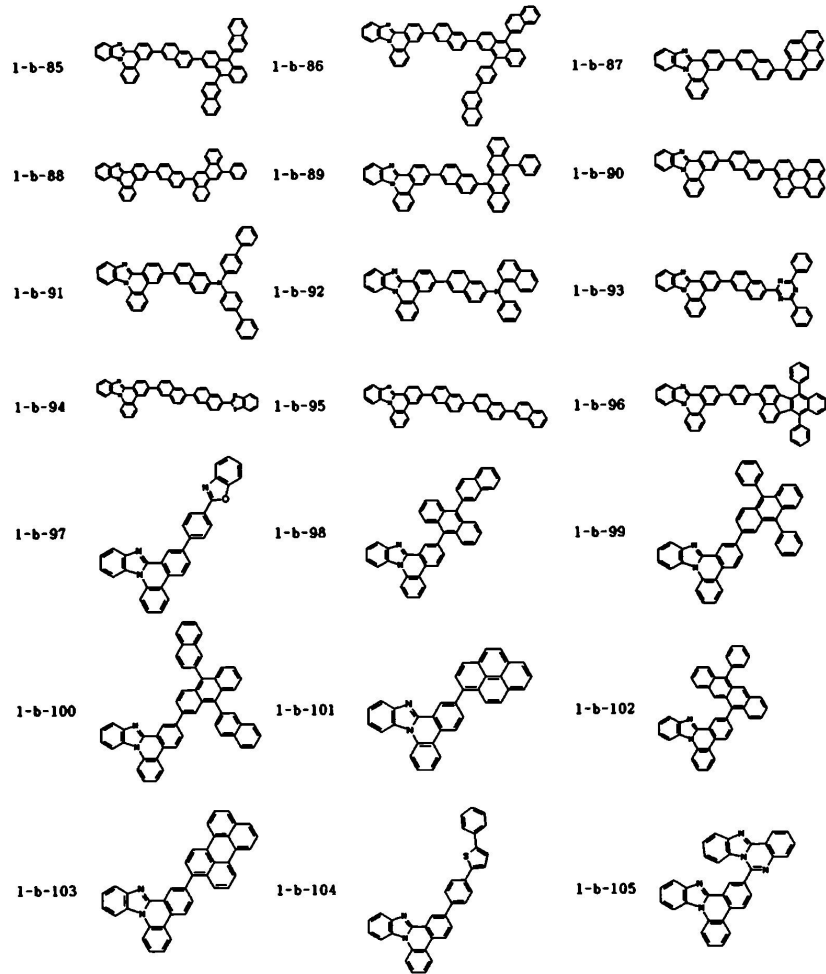
[0147]



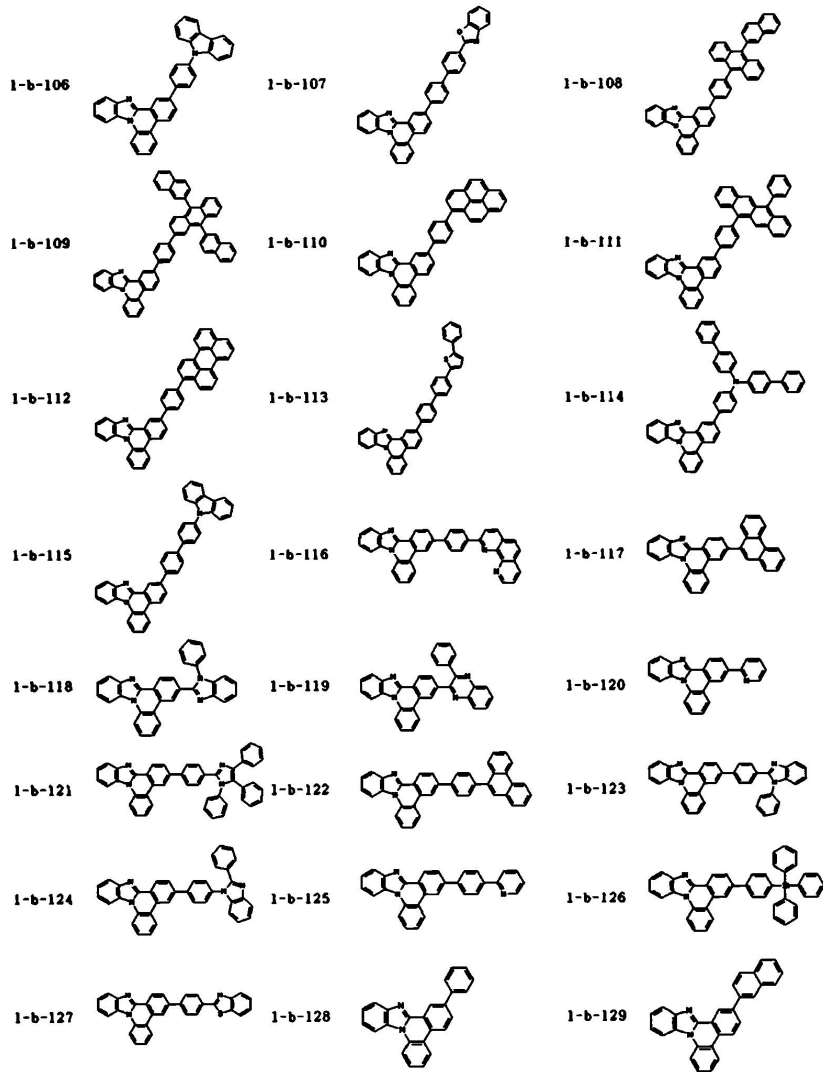
[0148]



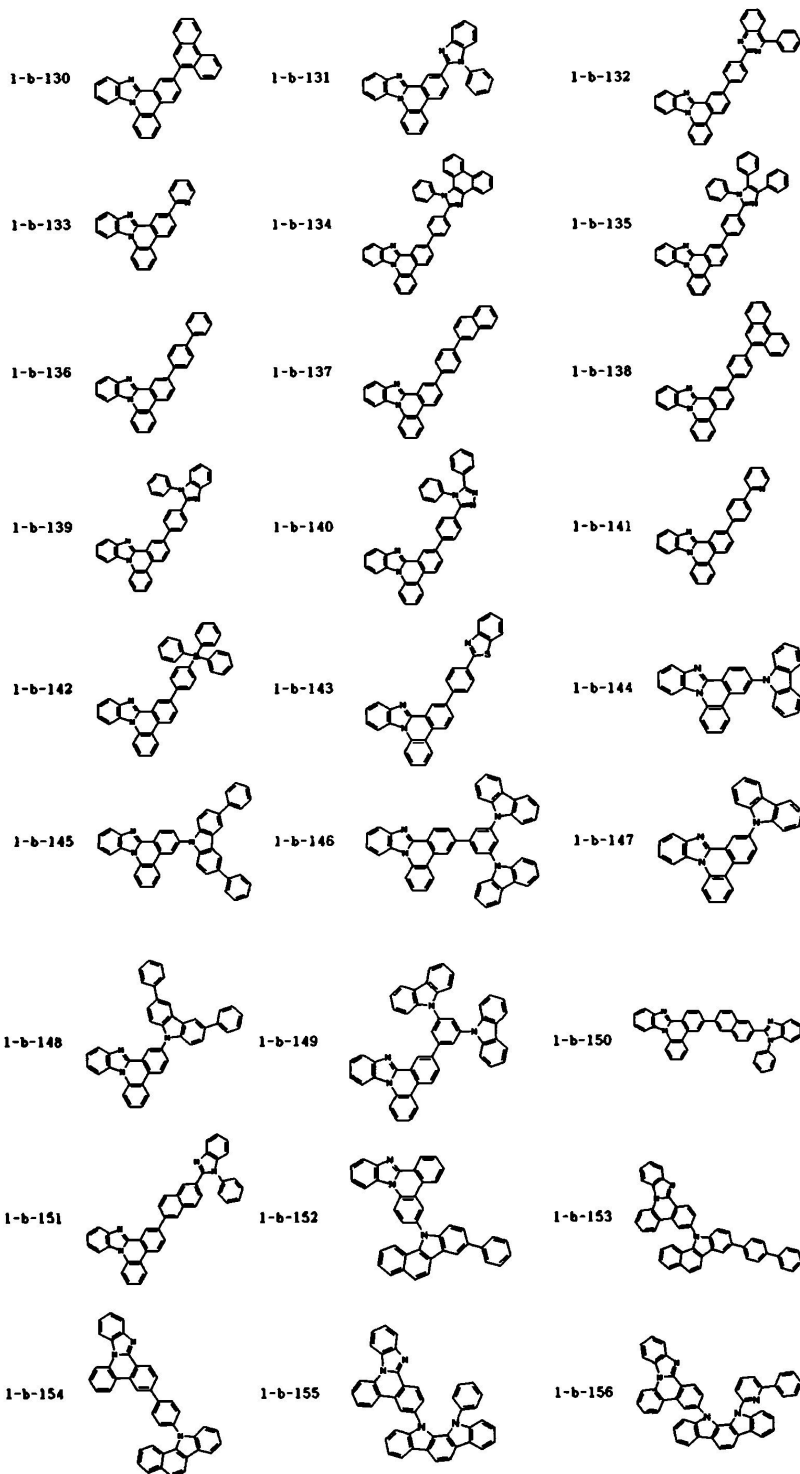
[0149]



[0150]



[0151]



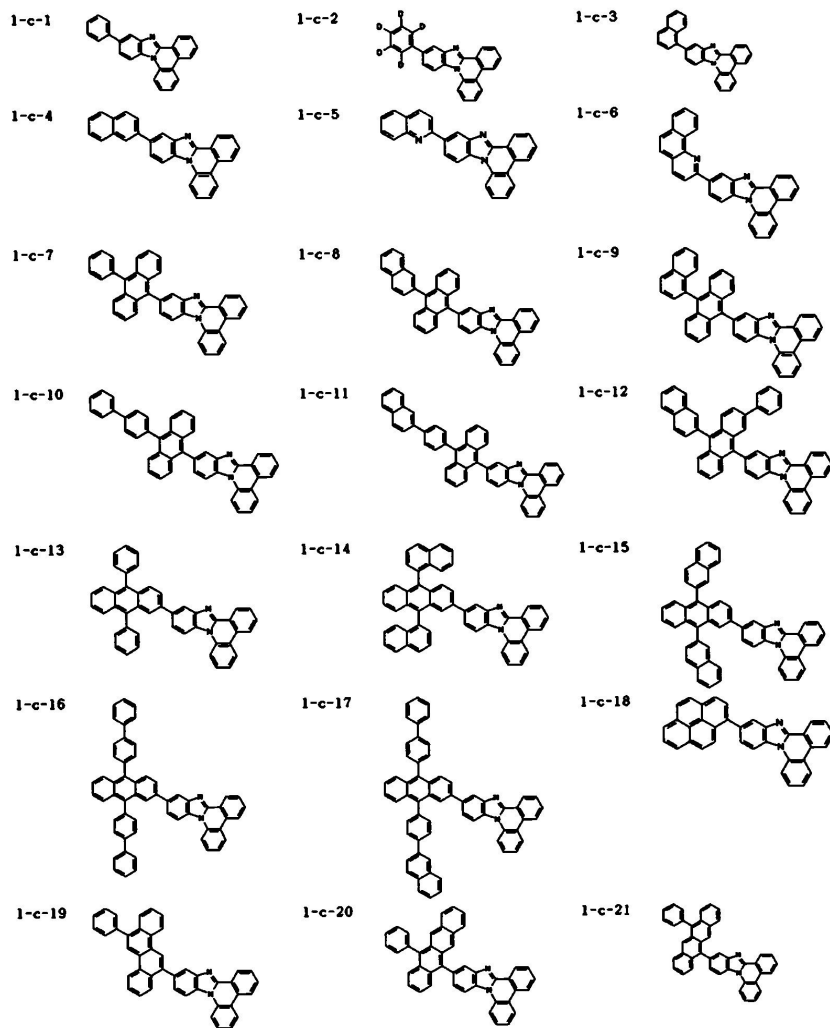
[0152]

[0153]

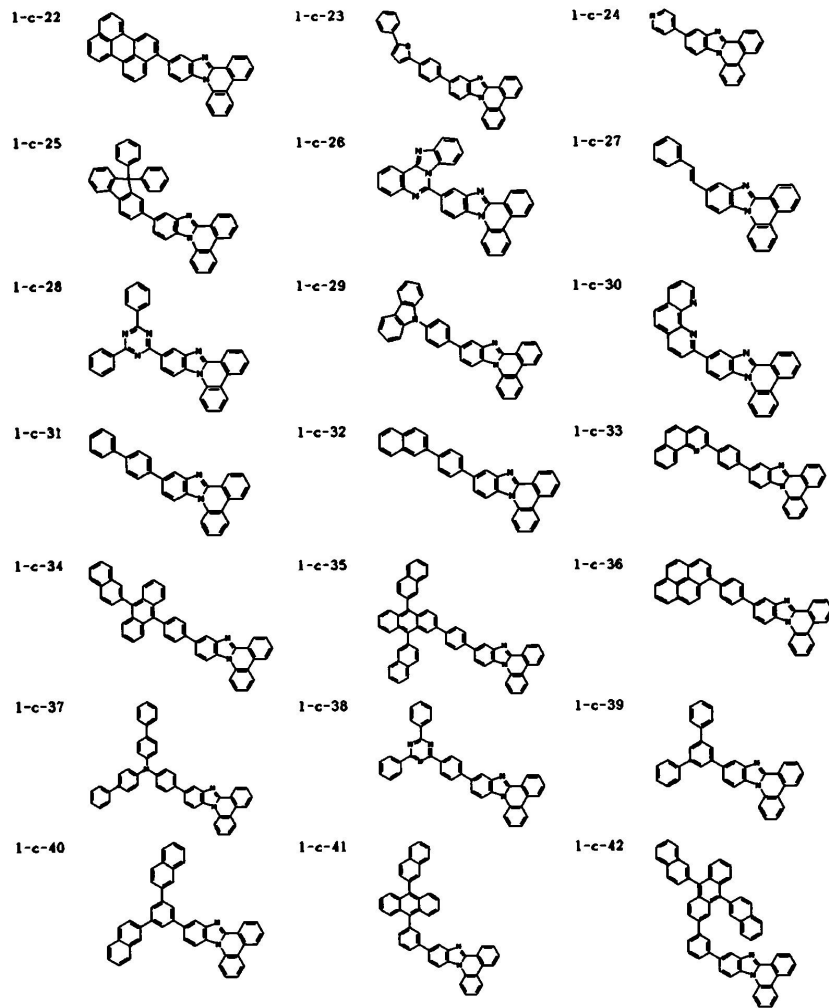
[0154]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

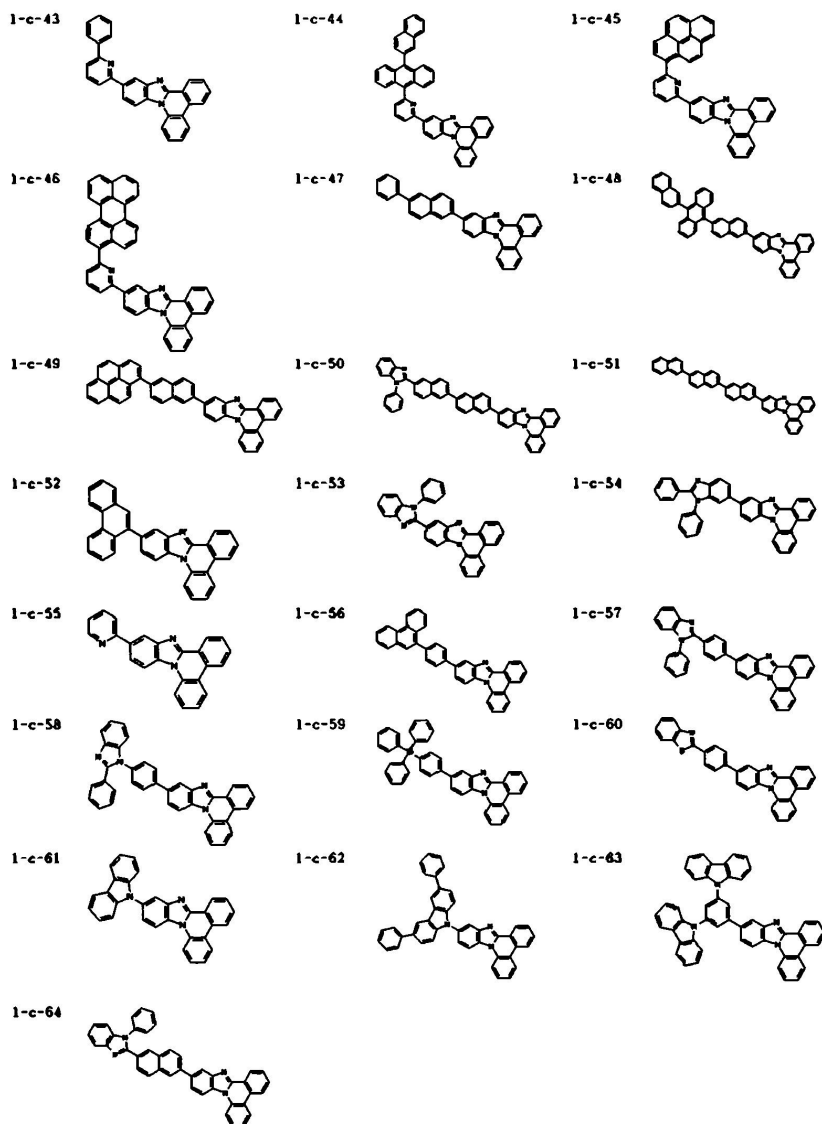
[0155] 표 3



[0156]



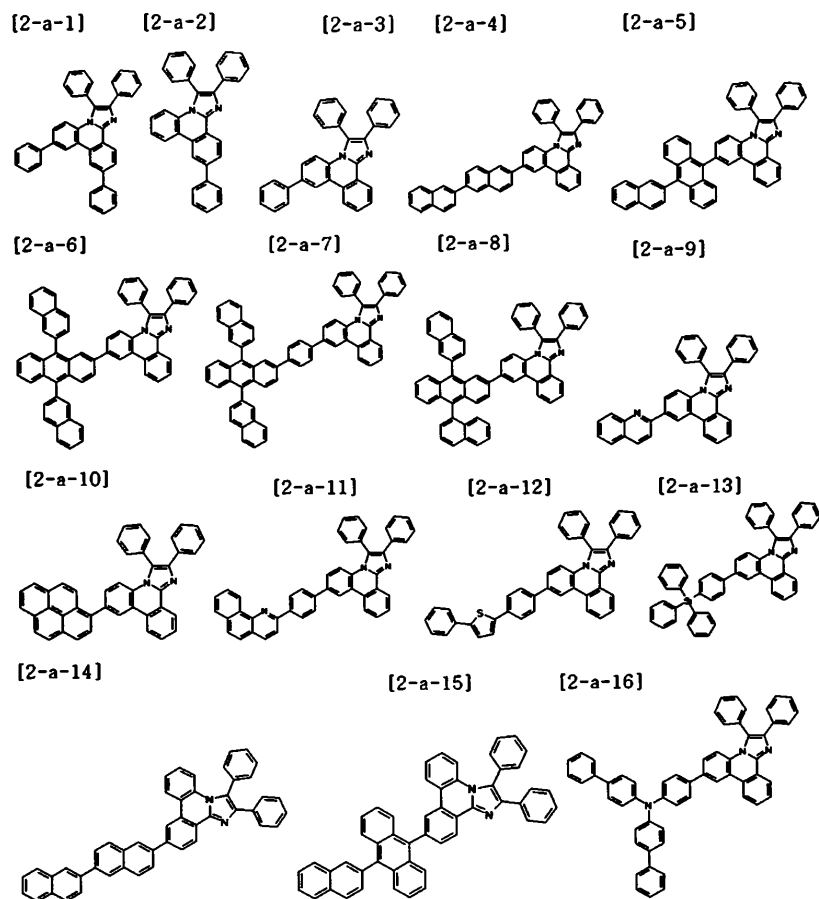
[0157]



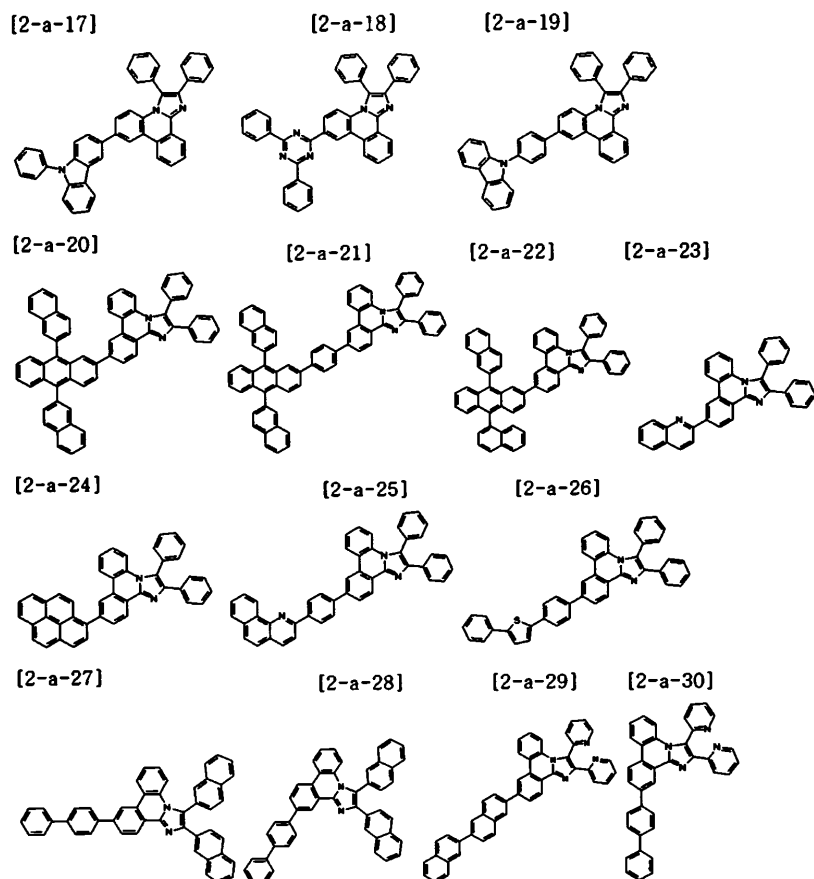
[0158]

[0159]

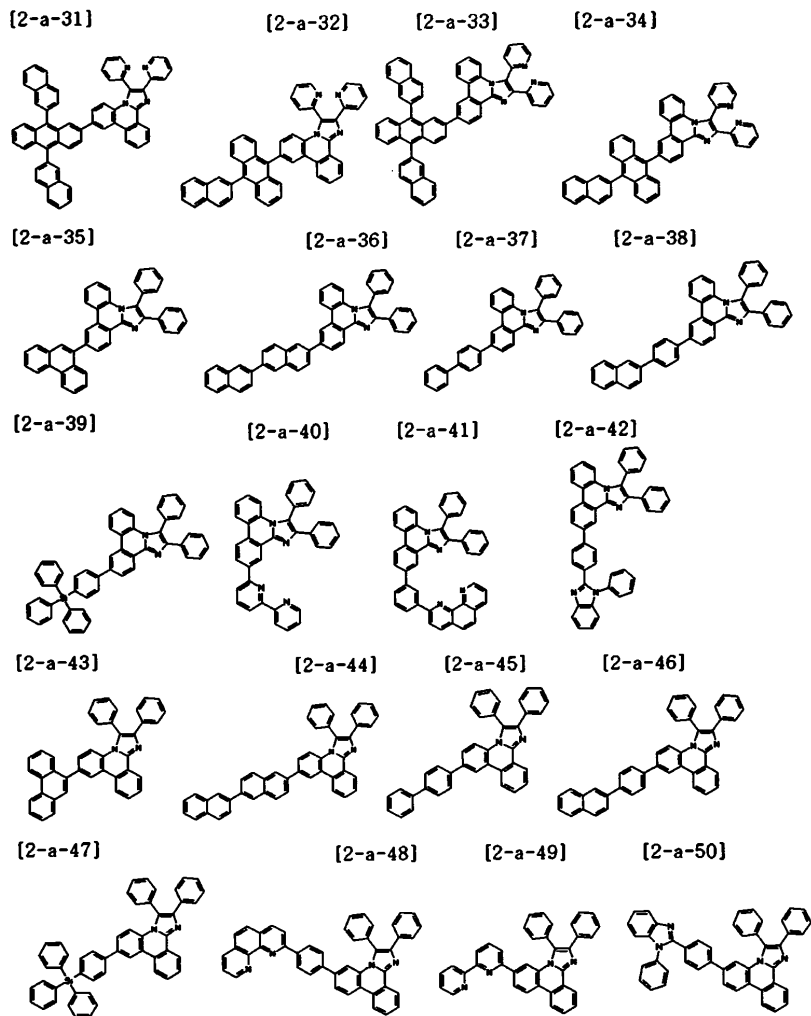
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



[0160]

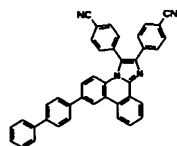


[0161]

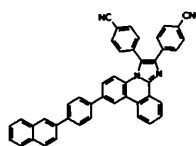


[0162]

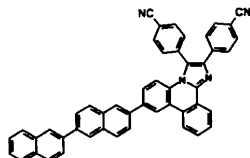
[2-a-51]



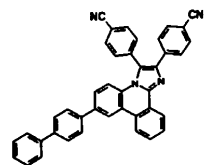
[2-a-52]



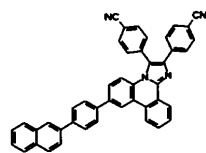
[2-a-53]



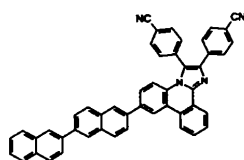
[2-a-54]



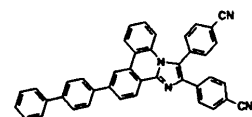
[2-a-55]



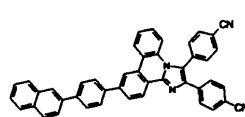
[2-a-56]



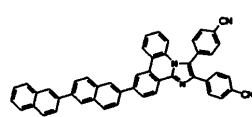
[2-a-57]



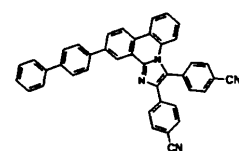
[2-a-58]



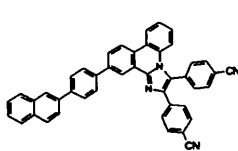
[2-a-59]



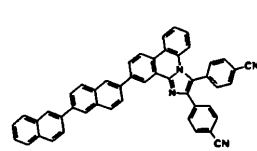
[2-a-60]



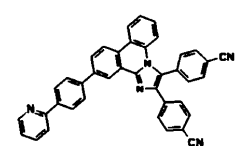
[2-a-61]



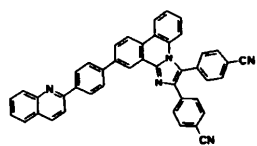
[2-a-62]



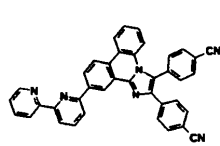
[2-a-63]



[2-a-64]



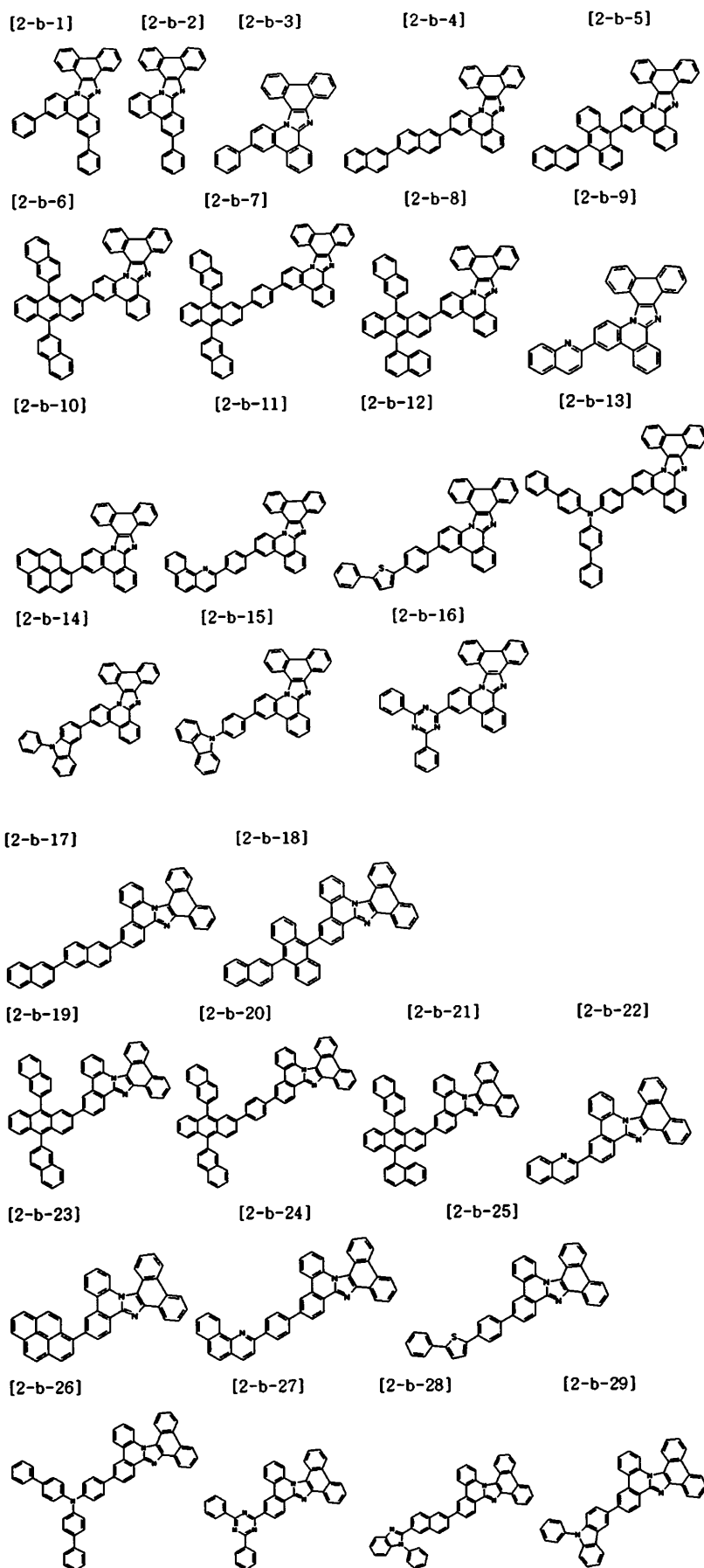
[2-a-65]



[0163]

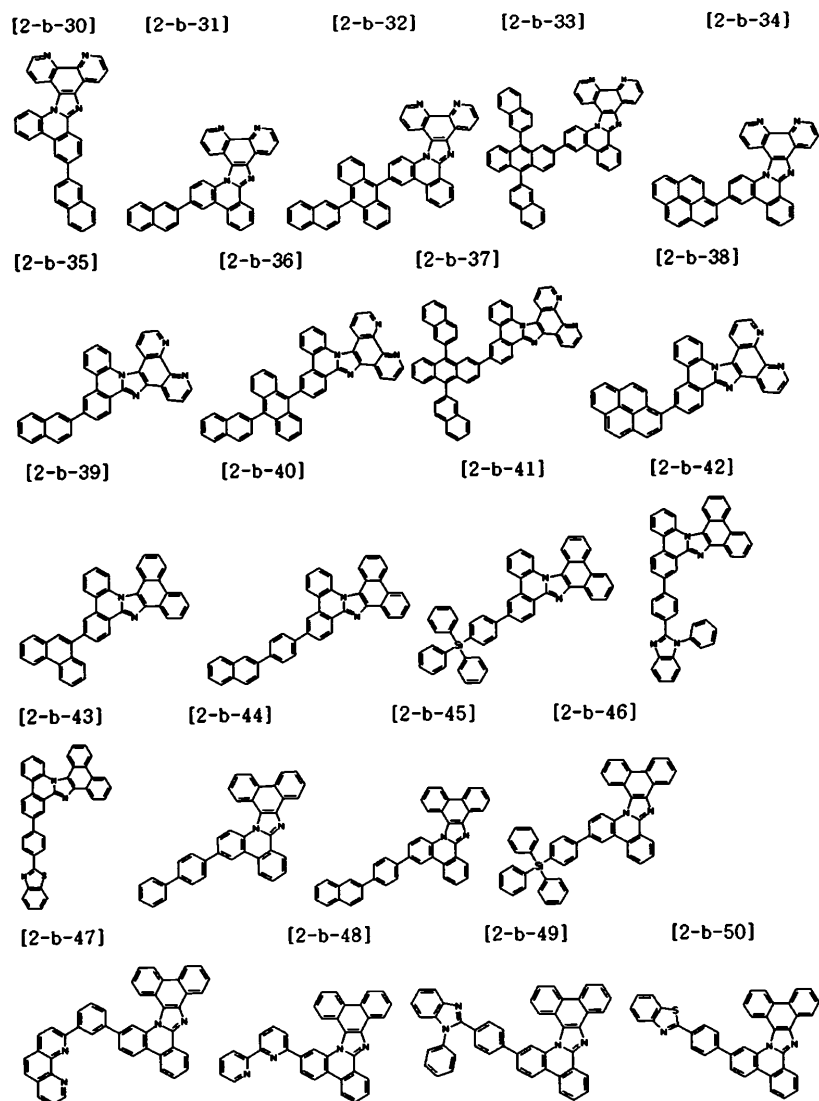
[0164]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



[0165]

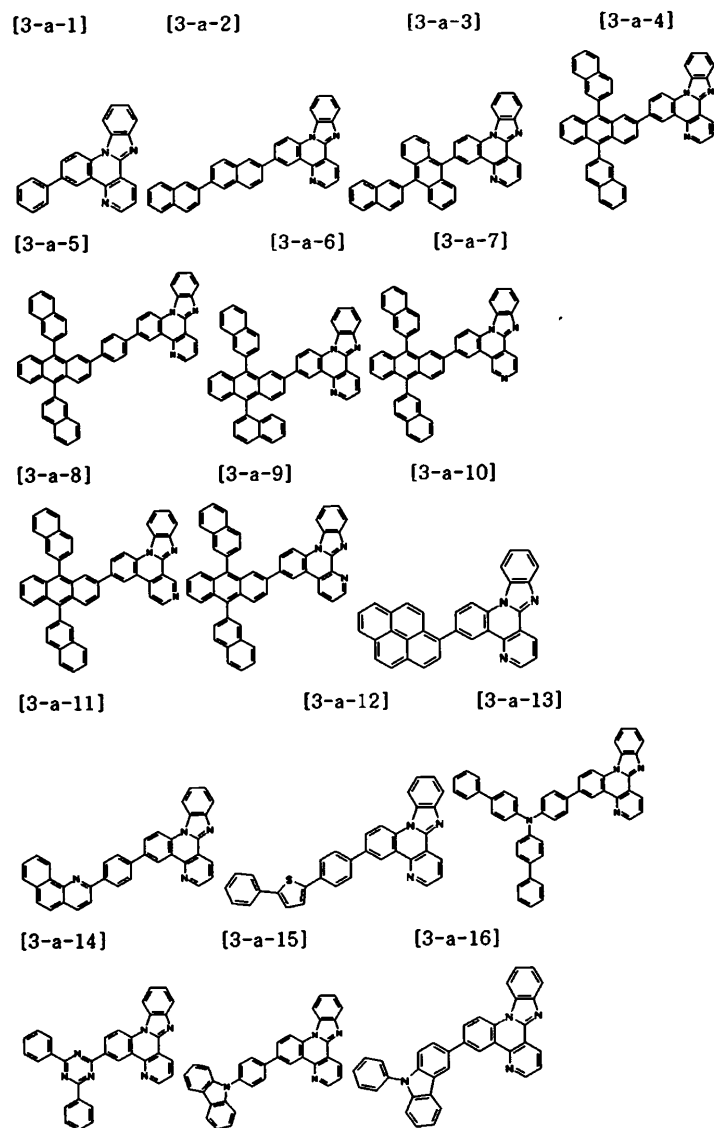
[0166]



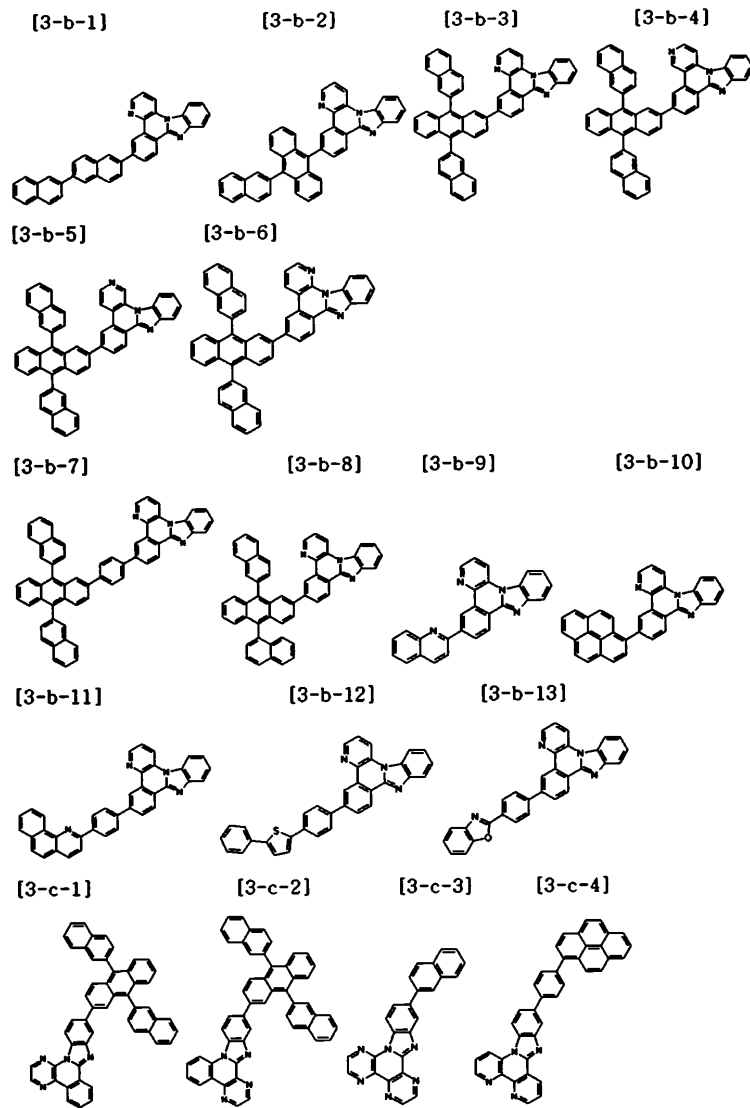
[0167]

[0168]

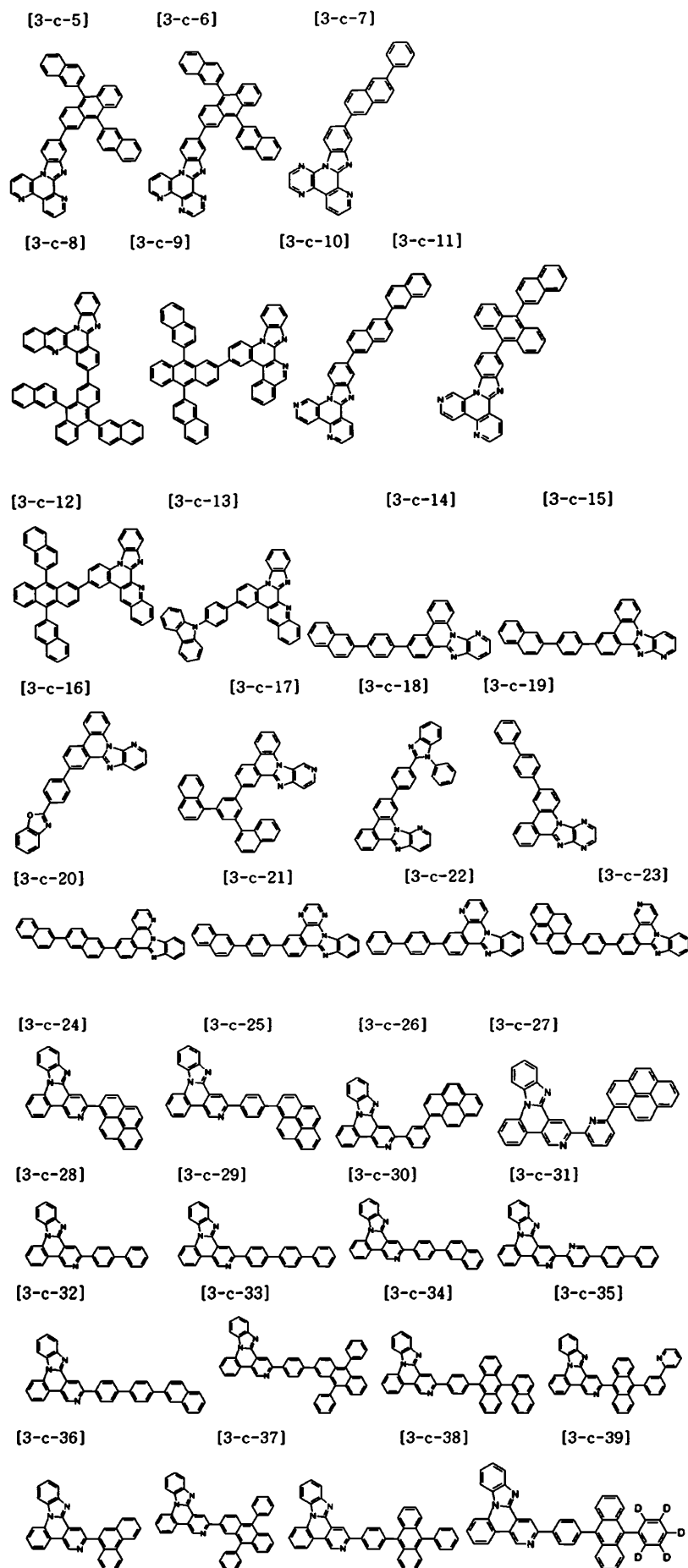
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



[0169]



[0170]



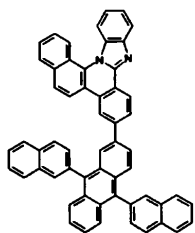
[0171]

[0172]

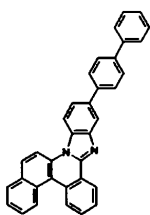
[0173]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

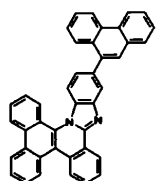
[4-a-1]



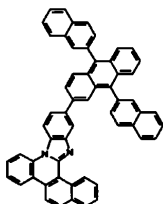
[4-a-2]



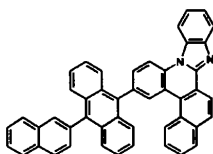
[4-a-3]



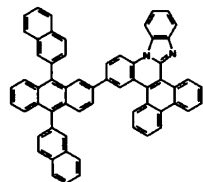
[4-a-4]



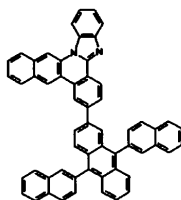
[4-a-5]



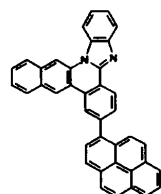
[4-a-6]



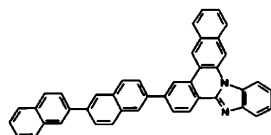
[4-a-7]



[4-a-8]



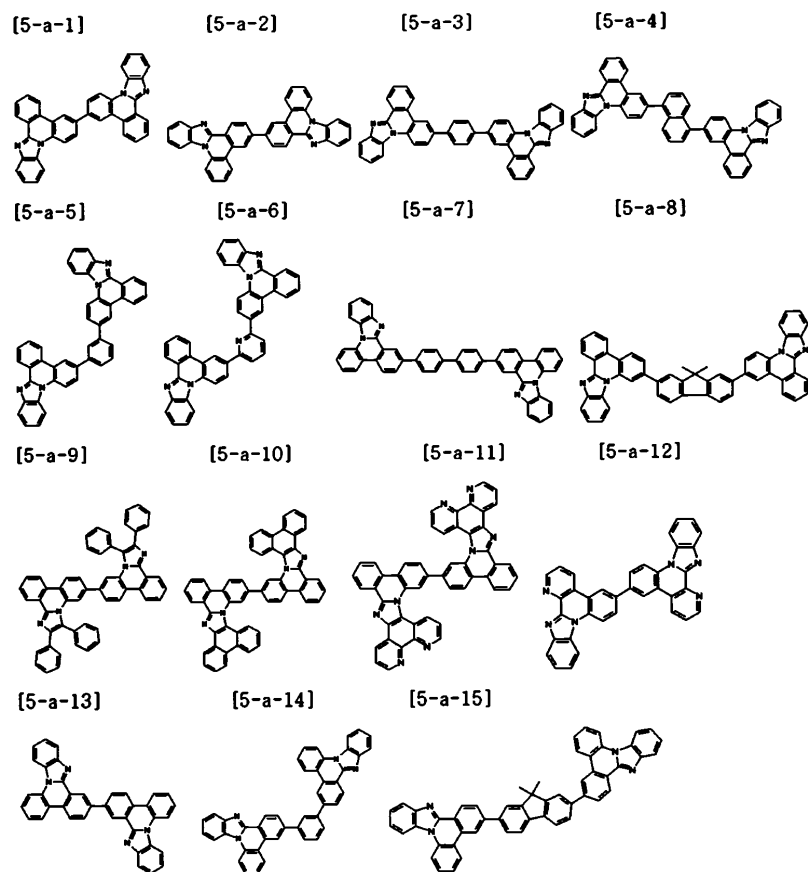
[4-a-9]



[0174]

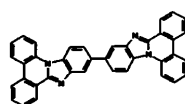
[0175]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

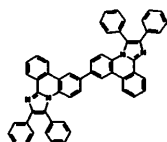


[0176]

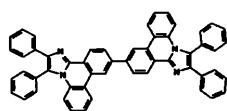
[5-a-16]



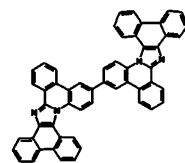
[5-a-17]



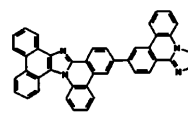
[5-a-18]



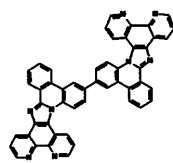
[5-a-19]



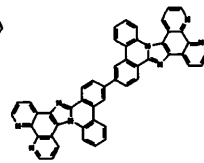
[5-a-20]



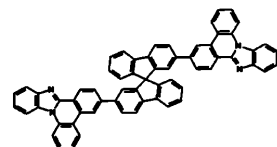
[5-a-21]



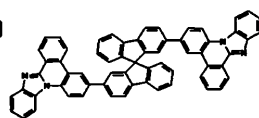
[5-a-22]



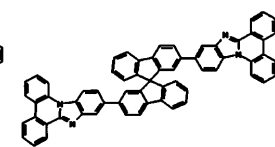
[5-a-23]



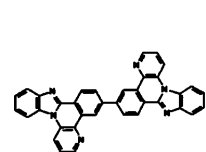
[5-a-24]



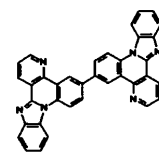
[5-a-25]



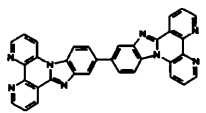
[5-a-26]



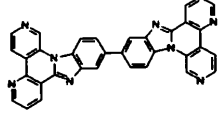
[5-a-27]



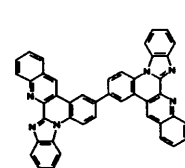
[5-a-28]



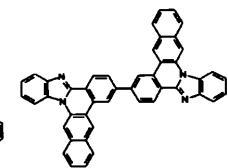
[5-a-29]



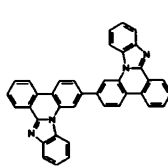
[5-a-30]



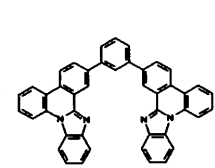
[5-a-31]



[5-a-32]

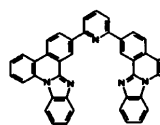


[5-a-33]

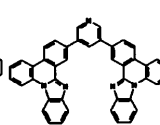


[0177]

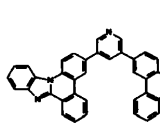
[5-a-34]



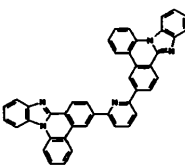
[5-a-35]



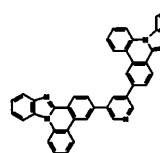
[5-a-36]



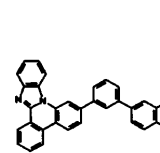
[5-a-37]



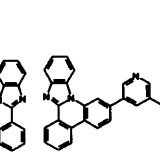
[5-a-38]



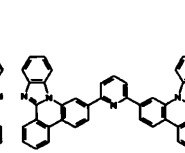
[5-a-39]



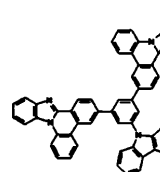
[5-a-40]



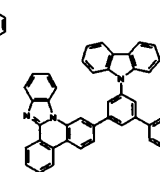
[5-a-41]



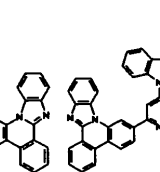
[5-a-42]



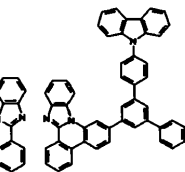
[5-a-43]



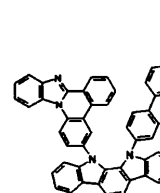
[5-a-44]



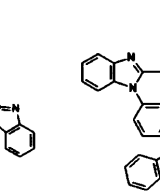
[5-a-45]



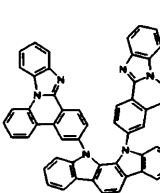
[5-a-46]



[5-a-47]

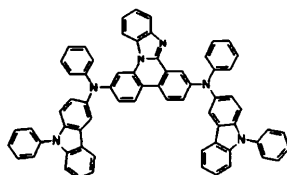


[5-a-48]

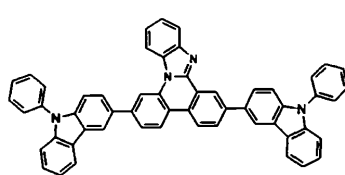


[0178]

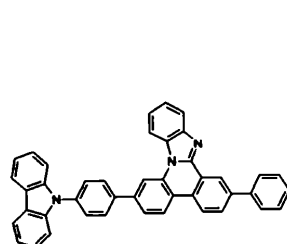
[5-a-49]



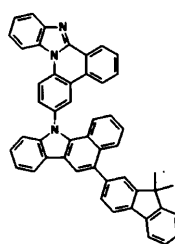
[5-a-50]



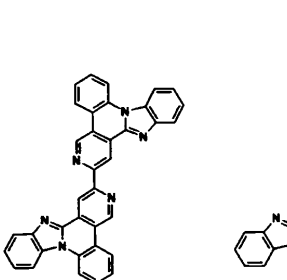
[5-a-51]



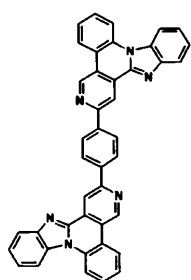
[5-a-52]



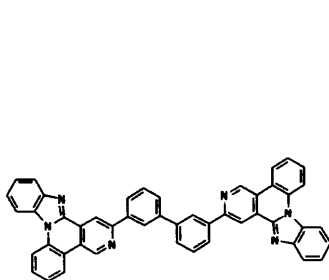
[5-a-53]



[5-a-54]

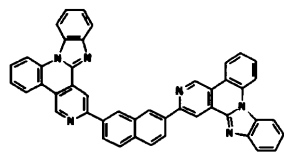


[5-a-55]

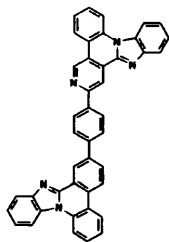


[0179]

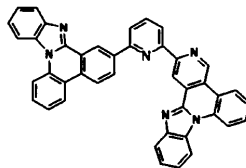
[5-a-56]



[5-a-57]



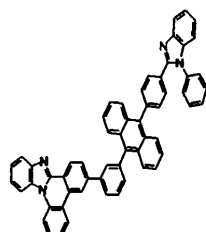
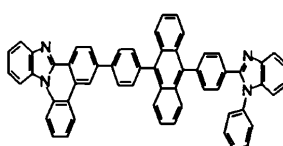
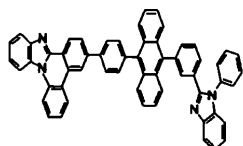
[5-a-58]



[5-a-59]

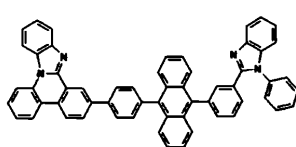
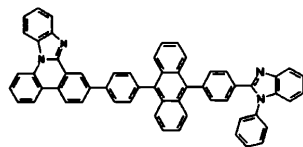
[5-a-60]

[5-a-61]



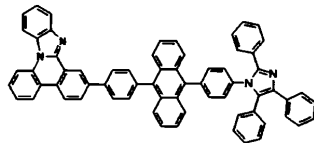
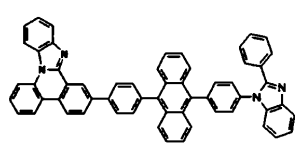
[5-a-62]

[5-a-63]



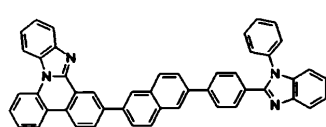
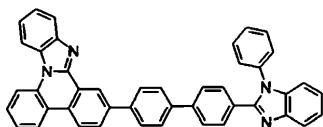
[5-a-62]

[5-a-63]



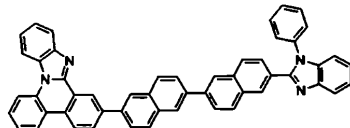
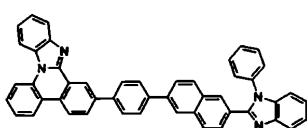
[5-a-64]

[5-a-65]



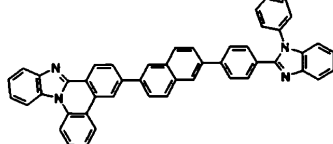
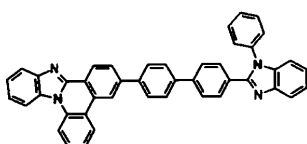
[5-a-66]

[5-a-67]



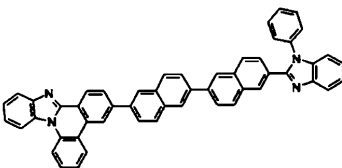
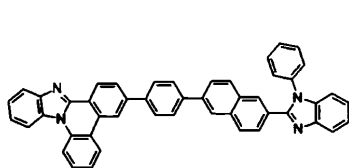
[5-a-68]

[5-a-69]



[5-a-70]

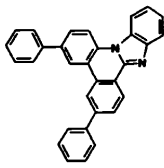
[5-a-71]



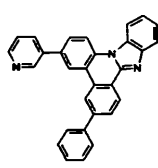
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되

는 것은 아니다.

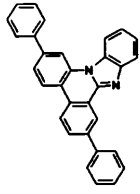
[6-a-1]



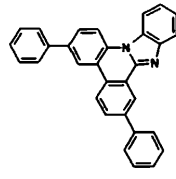
[6-a-2]



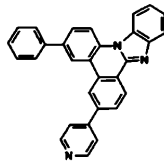
[6-a-3]



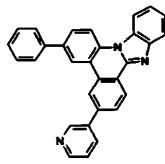
[6-a-4]



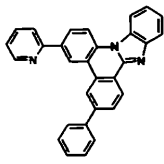
[6-a-5]



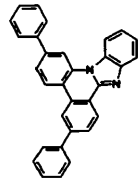
[6-a-6]



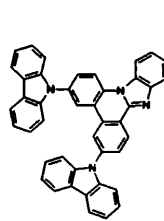
[6-a-7]



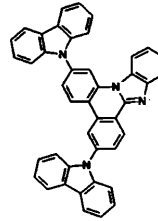
[6-a-8]



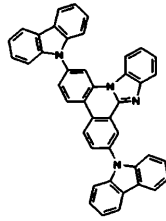
[6-a-9]



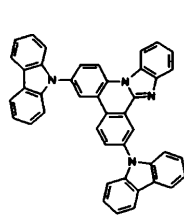
[6-a-10]



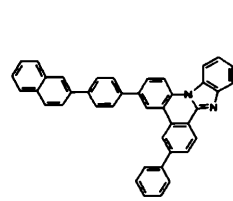
[6-a-11]



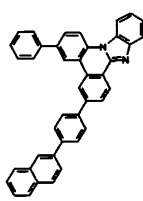
[6-a-12]



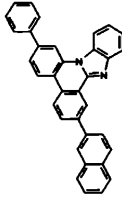
[6-a-13]



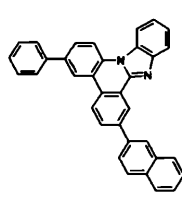
[6-a-14]



[6-a-15]

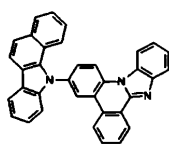


[6-a-16]

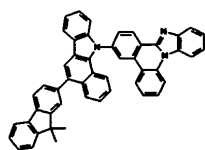


[0183]

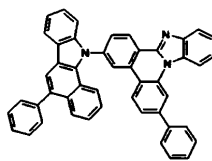
[6-a-17]



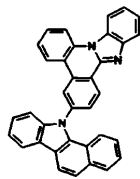
[6-a-18]



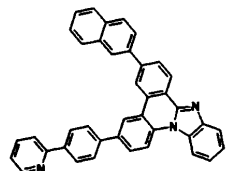
[6-a-19]



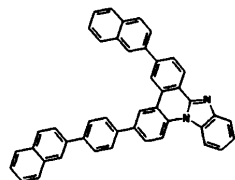
[6-a-20]



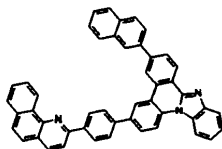
[6-a-21]



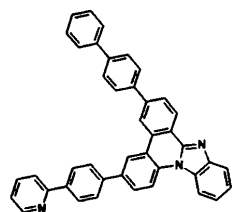
[6-a-22]



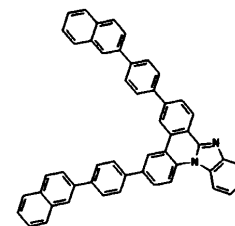
[6-a-23]



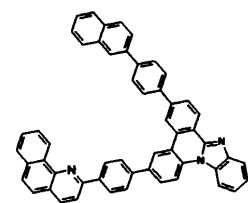
[6-a-24]



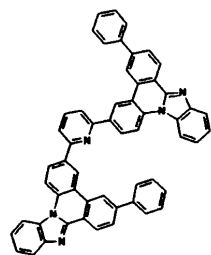
[6-a-25]



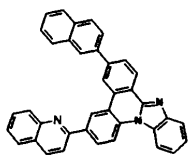
[6-a-26]



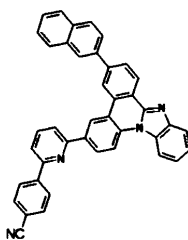
[6-a-27]



[6-a-28]

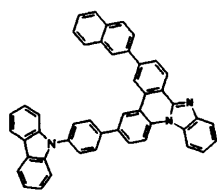


[6-a-29]

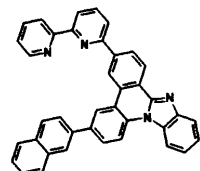


[0184]

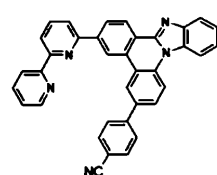
[6-a-30]



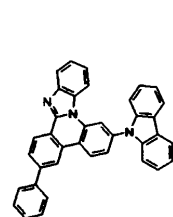
[6-a-33]



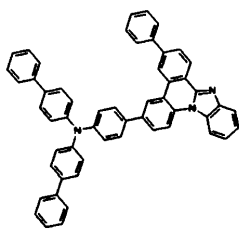
[6-a-36]



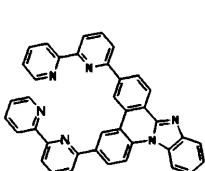
[6-a-39]



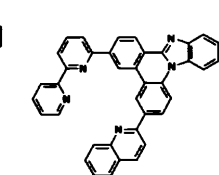
[6-a-31]



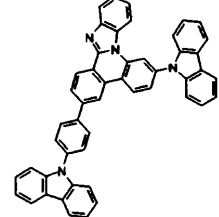
[6-a-34]



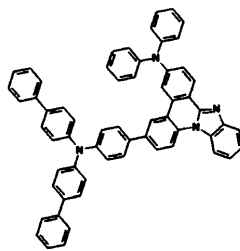
[6-a-37]



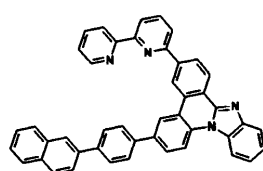
[6-a-40]



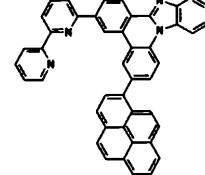
[6-a-32]



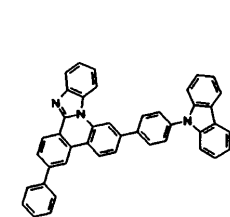
[6-a-35]



[6-a-38]



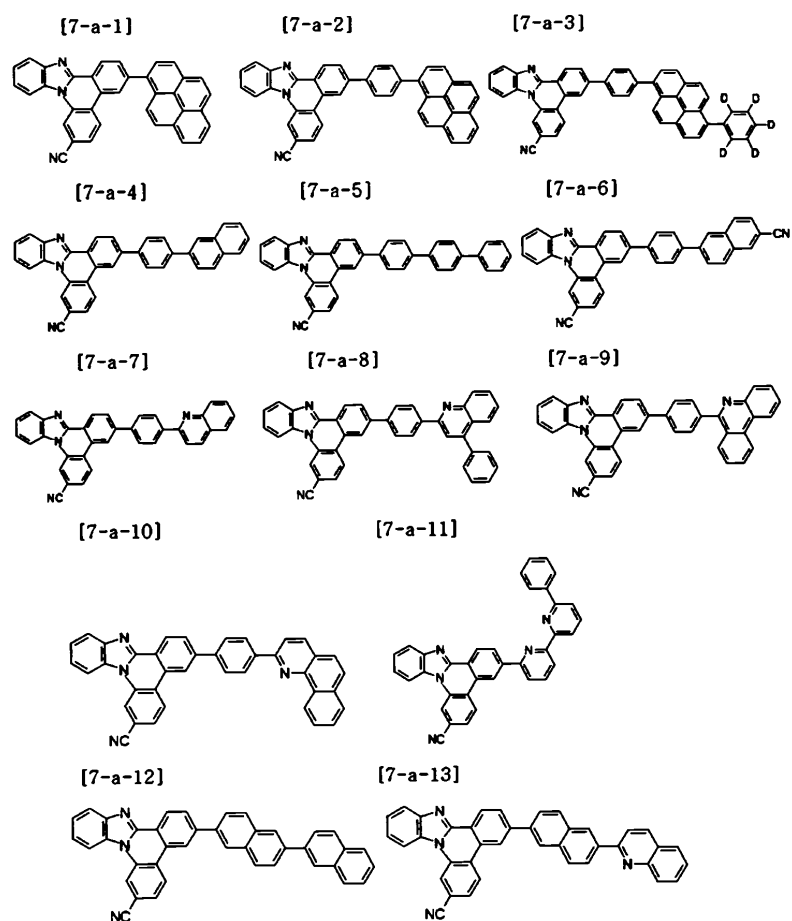
[6-a-41]



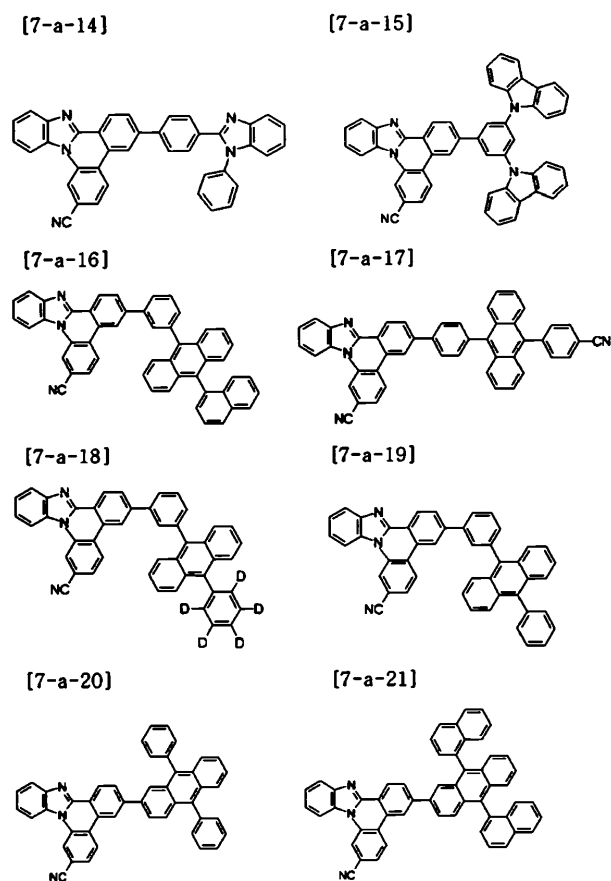
[0185]

[0186]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

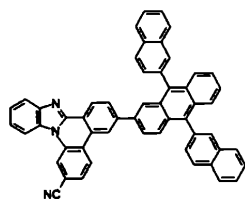


[0187]

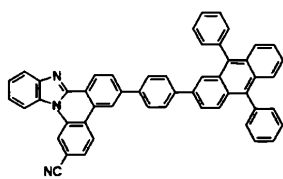


[0188]

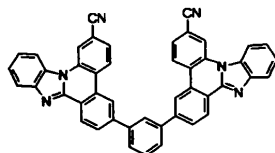
[7-a-21]



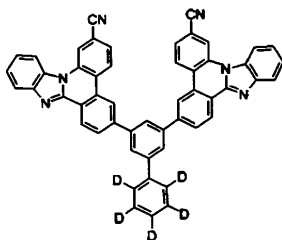
[7-a-22]



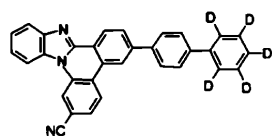
[7-a-23]



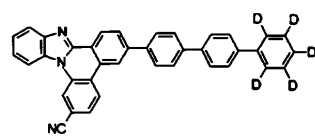
[7-a-24]



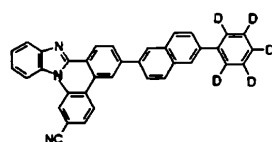
[7-a-25]



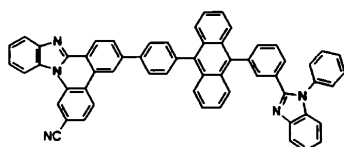
[7-a-26]



[7-a-27]



[7-a-28]



[0189]

또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유도체의 제조방법을 제공한다.

[0190]

상기 화학식 1로 표시되는 화합물(Cpd C)은 하기와 같이 제조될 수 있다. 우선, Pd 촉매 하에서 스즈키 결합 반응을 통해 화합물 Cpd A를 제조한 후, 1,2-디아미노벤젠과 포밀기가 도입된 화합물을 반응시켜 이미다졸 유도체 Cpd B로 제조할 수 있다. 이어서, 화학식 1의 구조는 Pd 촉매하에서 이미다졸기의 -NH와 클로로(Cl)기를 포함하고 있는 아릴기 또는 헤테로아릴기와 분자내 고리화 반응을 통해 제조될 수 있다. 앞에서 언급했듯이, X₁ 내지 X₄로 이루어진 아릴기 또는 헤테로아릴기의 오르토(ortho-)위치와 Y₁ 내지 Y₄로 이루어진 아릴기 또는 헤테로아릴기의 오르토(ortho-)위치를 각각 연결시킨 형태가 된 화학식 1을 제조할 수 있다.

[0192]

구체적으로, Cpd A로 표시되는 화합물은

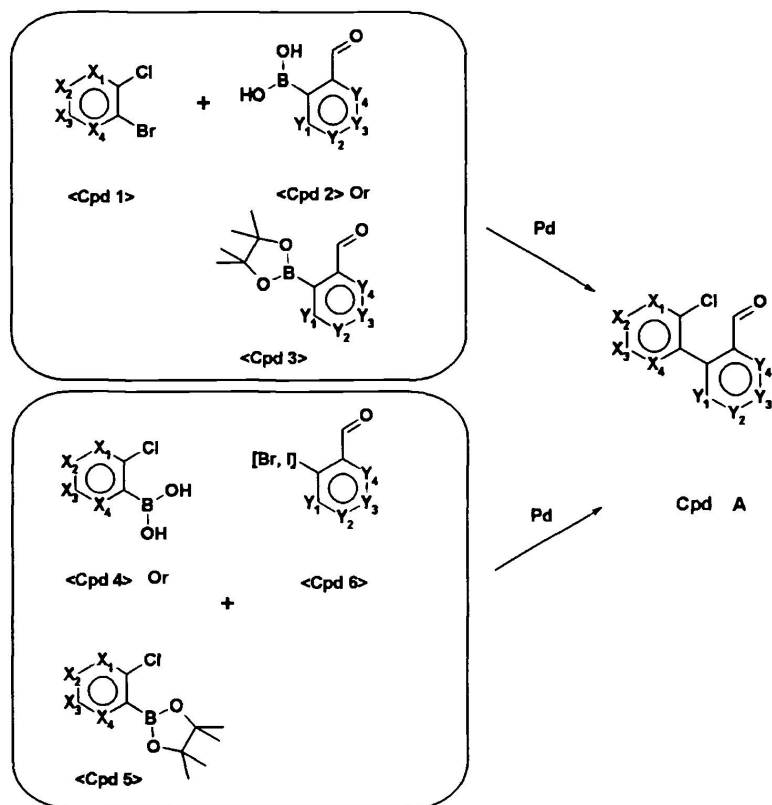
[0193]

1) 할로젠이 치환되어 있는 화합물 Cpd 1 과 포밀기가 치환되어 있는 보론산 Cpd 2 또는 보론 에스테르 Cpd 3을 Pd 촉매하에서 스즈키 결합반응을 통해 제조할 수 있다. 또는 할로젠이 치환되어 있는 보론산 Cpd 4 또는 보론 에스테르 Cpd 5 를 포밀기가 치환되어 있는 화합물 Cpd 6를 Pd 촉매하에서 스즈키 결합반응을 통해 제조할 수 있다.

[0194]

이와 같은 제조 방법은 하기 반응식 1으로 표시될 수 있다.

[0195] [반응식 1]



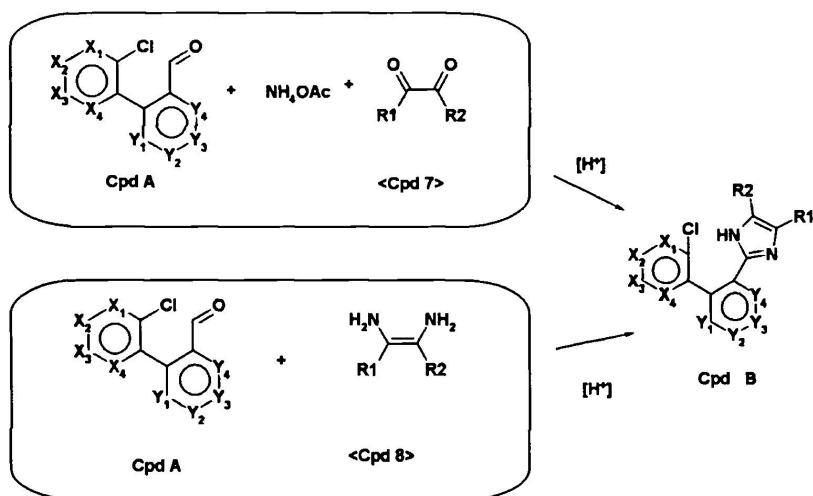
[0196]

[0197] 구체적으로, Cpd B로 표시되는 화합물은

[0198] 2) 할로젠기와 포밀기기가 치환되어 있는 Cpd A와 R1 및 R2 치환체를 갖는 디케토유도체(Cpd 7) 및, 암모늄아세테이트를 혼합하여 산 촉매를 통해 이미다졸기를 제조할 수 있다. 또는 할로젠기와 포밀기가 치환되어 있는 Cpd A와 R1 및 R2 치환체를 갖는 디아민(diamine) 유도체(Cpd 8)를 혼합하여 산 촉매를 통해 이미다졸기를 제조할 수 있다.

[0199] 이와 같은 제조 방법은 하기 반응식 2으로 표시될 수 있다.

[0200] [반응식 2]



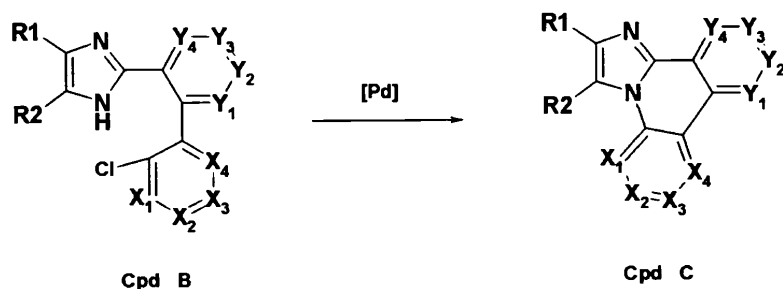
[0201]

[0202] 구체적으로, Cpd C로 표시되는 화합물은

[0203] 3) 할로젠기와 이미다졸기가 치환되어 있는 Cpd B를 Pd 촉매를 이용하여 분자내 고리화 반응을 통해 Cpd C(화학식 1)를 제조할 수 있다.

[0204] 이와 같은 제조 방법은 하기 반응식 3으로 표시될 수 있다.

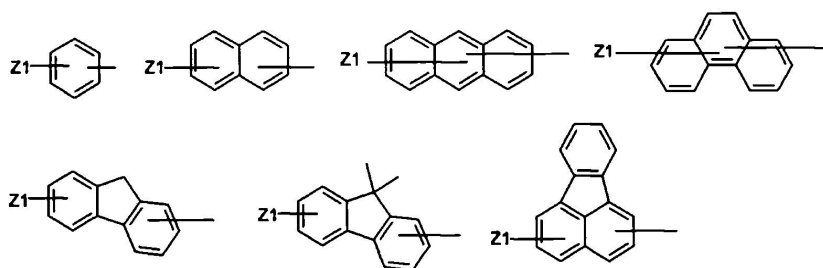
[0205] [반응식 3]



[0206]

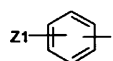
[0207] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기발광소자를 비롯한 유기전자소자의 제조시 사용되는 정공주입층 물질, 정공수송층 물질, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

[0208] 상기 화학식 1에 있어서 Y가 다음과 같은 아릴기일 경우, 이와 같은 아릴기는 전자와 정공 양쪽에 대해 안정성이 있으며 특히 L이 적당한 길이를 갖을 경우 밴드갭의 조절이 가능하다. 또한 열안정성, 승화성, 및 전기적인 안정성을 확보할 수 있으며, 실제 소자에 있어서 성능에 향상을 보일 수 있다.



[0209]

[0210] 상기 화학식 1에 있어서, -(L)p-의 p가 0이면서 상기 코어구조가 Y에 직접 연결된 경우, 이들 치환기의 특성상 전자와 정공에 안정성을 보이고, 적당한 Tg(유리전이온도)를 갖게 하여 열안정성이 향상될 수 있다.



[0211] 가 직접 결합된 화합물에서 Z1이 아릴기인 경우, 탄소 수 C6개 이상의 아릴기로 치환되는 것이 바람직하다. 이는 치환체의 적당한 길이를 갖으므로 유기전자 발광소자의 특성을 향상시킬 수 있기 때문이다.

[0212] 또한, 본 화학식 1의 구조는 적당한 치환체, 예를 들면 카바졸이나 벤즈 카바졸가 도입되면, 삼중항(triplet state)에서의 에너지 밴드갭[예; 도 30] 및 안정성을 확보할 수 있다. 이와 같은 결과로부터, 적색에서부터 청색까지의 다양한 인광도판트를 사용해서 형광뿐 아니라 인광소자의 발광층의 호스트까지 적용할 수 있다.

[0213] 결과적으로, 적당한 치환체를 포함한 상기 화학식 1의 구조는 유리 전이 온도(Tg)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다. 치환기의 길이나 종류에 따라서 HOMO, LUMO 에너지 준위 및 에너지 밴드 갭을 미세하게 조절 가능하며, 한편으로 유기물 사이에서의 계면 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.

[0214] 본 발명의 화합물은 코어와 치환체에 의해 조절이 자유롭기 때문에 인광 또는 형광 발광층의 호스트 이외의 다양한 층으로 작용할 수 있다.

[0215] 또한, 본 발명은 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전자소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것인 유기전자소자를 제공한다.

[0216] 상기 유기전자소자는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼 및 유기 트랜지스터로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0217] 또한, 상기 유기전자소자는 유기발광소자일 수 있다.

- [0218] 또한, 상기 유기발광소자는 기판상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 정방향 구조의 유기발광소자일 수 있다.
- [0219] 또한, 상기 유기발광소자는 기판상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조의 유기발광소자일 수 있다.
- [0220] 또한, 상기 유기발광소자의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 및 전자주입 및/또는 수송층을 포함할 수 있다.
- [0221] 또한, 상기 유기발광소자의 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 함질소 헤테로환 유도체는 발광층의 호스트로서 역할을 할 수 있다.
- [0222] 또한, 상기 유기발광소자의 유기물층은 전자수송 및/또는 주입층을 포함하고, 이 층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함할 수 있다.
- [0223] 또한, 상기 유기발광소자의 유기물층은 정공수송과 발광을 동시에 하는 층을 포함하고, 이 층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함할 수 있다.
- [0224] 또한, 상기 유기발광소자의 유기물층은 발광과 전자수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 이 층이 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함할 수 있다.
- [0225] 본 발명에 따른 함질소 헤테로환 유도체를 포함하는 유기물층은 상기 함질소 헤테로환 유도체를 호스트로 포함하고, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도판트로 포함할 수 있다.
- [0226] 본 발명에 따른 유기전자소자는 상기 함질소 헤테로환 유도체를 포함하는 유기물층 이외에 아릴아미노기, 카바졸기, 또는 벤즈카바졸기를 포함하는 화합물을 포함하는 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [0227] 본 발명의 유기전자소자는 전술한 화합물들을 이용하여 한층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기전자소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [0228] 이하에서는 유기발광소자에 대하여 예시한다.
- [0229] 본 발명의 하나의 실시 상태에 있어서, 유기발광소자는 제 1 전극과 제 2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있다. 본 발명의 유기발광소자 중 유기물층은 1층으로 이루어진 단층 구조일 수도 있으나, 발광층을 포함하는 2층 이상의 다층 구조일 수도 있다. 본 발명의 유기발광소자의 유기물층이 다층 구조인 경우, 이는 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 등이 적층된 구조일 수 있다. 그러나, 유기발광소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기발광소자는 도 1에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있다. 도 1에 있어서, 도면부호 1은 기판, 2는 양극, 3은 정공주입층, 4는 정공수송층, 5는 유기발광층, 6은 전자수송층, 7은 음극을 각각 나타낸다. 도 1과 같은 구조의 유기발광소자를 통상 정방향 구조의 유기발광소자라고 하는데, 본 발명은 이에 한정되지 않고 역방향 구조의 유기발광소자도 포함한다. 즉, 본 발명의 유기발광소자는 기판, 음극, 전자수송층, 유기발광층, 정공수송층, 정공주입층 및 양극이 순차적으로 적층된 구조를 가질 수 있다.
- [0230] 본 발명에 따른 유기발광소자가 다층 구조의 유기물층을 갖는 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층, 정공수송층, 정공수송과 발광을 동시에 하는 층, 발광과 전자수송을 동시에 하는 층, 전자수송층, 전자수송 및/또는 주입층 등에 포함될 수 있다. 본 발명에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 특히 전자주입 및/또는 수송층 또는 발광층에 포함되는 것이 바람직하다.
- [0231] 본 발명에 따른 유기발광소자는 전술한 화학식 1의 화합물을 유기발광소자의 유기물층 중 1층 이상에 사용한다는 것을 제외하고는, 통상의 유기발광소자의 제조방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다. 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 및 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 전술한 바와 같이 역방향 구조의 유기발광소자를 제작하기 위하여 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기발광소자를 만들 수도 있다.
- [0232] 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(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.

[0233] 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 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0234] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 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.

[0235] 상기 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, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0236] 상기 정공수송 물질로는 양극이나 정공주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 화합물; 카바졸 계열의 화합물; 안트라센 계열의 화합물; 파이렌 계열의 화합물; 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0237] 상기 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송 받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물 (Alq₃); 카바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; 비스-메틸-8-히드록시퀴놀린 파라페닐페놀 알루미늄 착물(Balq); 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 안트라센 계열의 화합물; 파이렌계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0238] 상기 전자수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물; 안트라센 계열의 화합물; 파이렌계열의 화합물; 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 피리딜계열의 화합물; 페난트롤린 계열의 화합물; 퀴놀린 계열의 화합물; 퀴나졸린 계열의 화합물 등이 있으며, 또한 이들의 화합물들이 금속 또는 금속화합물과 도핑하여 전자 수송층을 형성할 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

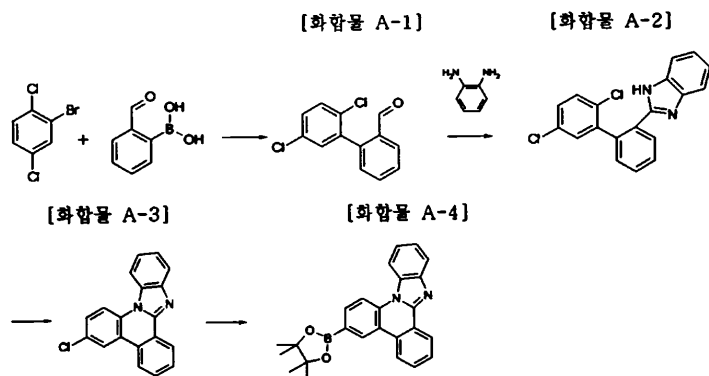
[0239] 본 발명에 따른 유기발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0240] 본 발명에 따른 화합물은 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터 등을 비롯한 유기전자소자에서도 유기발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다. 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 하기 실시예는 이해를 돕기 위한 것이며, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0241] **발명의 실시를 위한 형태**

[0242] **제조예**

[0243] (1) 하기 화합물 A-1, A-2, A-3, A-4의 제조



[0244]

[0245] <제조예 1> 화합물 A-1의 제조

[0246] 1-브로모-2,5-다이클로로벤젠(1-bromo-2,5-dichlorobenzene)(15.6g, 69.1 mmol)과 2-포밀페닐보로닉산(2-formylphenylboronic acid)(11.4g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF)(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘(MgSO_4)으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:10으로 컬럼하여 상기 화합물 A-1(13.9 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 251$

[0247] <제조예 2> 화합물 A-2의 제조

[0248] 상기 제조예 1에서 제조한 화합물 A-1(17.3g, 69.1 mmol)과 디아미노벤젠(7.47g, 69.1 mmol)을 디옥산(1,4-dioxane)(200 mL)과 아세트산(AcOH)(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(100 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르(ethyl ether)로 세정하여 상기 화합물 A-2 (12.9 g, 55 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 339$

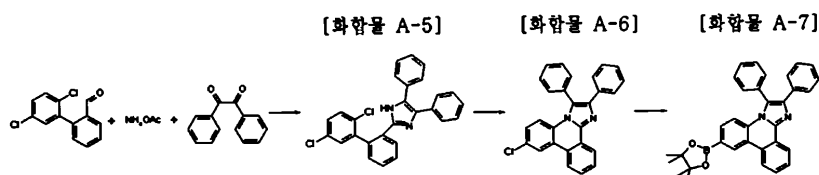
[0249] <제조예 3> 화합물 A-3의 제조

[0250] 상기 제조예 2에서 제조한 화합물 A-2(1.7g, 5.1 mmol)와 소듐-터셔리-부톡사이드(NaOt-Bu) (0.58g, 6.01 mmol) 및 $\text{Pd}[\text{P}(t\text{-Bu})_3]_2$ (51mg, 2 mol %)를 톨루엔(50 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 반응 용액에 증류수를 넣고 반응을 종료시키고, 유기층을 추출하여 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:5로 컬럼하여 상기 화합물 A-3(0.618 g, 40 %)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 303$

[0251] <제조예 4> 화합물 A-4의 제조

[0252] 상기 제조예 3에서 제조한 화합물 A-3(5.1g, 16.8 mmol)에 비스(피나콜라토)디보론(4.7g, 18.5 mmol) 및 아세트산 칼륨(4.96 g, 50.5 mmol)을 디옥산(100 mL)에 현탁시켰다. 상기 현탁액에 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.29g, 3 mol %)와 PCy_3 (0.28g, 6 mol %)를 가하였다. 혼합물을 약 8 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(100mL)로 희석하고 디클로로메탄(3 x 50 mL)으로 추출하였다. 유기 추출물을 황산 마그네슘 상에서 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압 농축시키고, 에틸에테르와 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-4(5.62g, 85 %)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 395$

[0253] (2) 하기 화합물 A-5, A-6, A-7의 제조



[0254]

[0255] <제조예 5> 화합물 A-5의 제조

[0256] 상기 제조예 2에서 제조한 화합물 A-2(2.51 g, 10 mmol), 벤질(Benzil)(2.1 g, 10 mmol), 암모늄아세테이트(2.32 g, 30 mmol)를 아세트산(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(50 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물(2.73 g, 62 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 441$

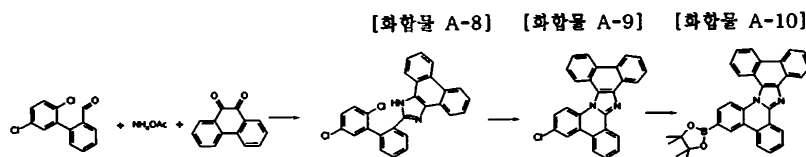
[0257] <제조예 6> 화합물 A-6의 제조

[0258] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 상기 제조예 5에서 제조한 화합물 A-5를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3과 동일한 방법으로 화합물 A-6(0.929 g, 45%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 405$

[0259] <제조예 7> 화합물 A-7의 제조

[0260] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 상기 제조예 6에서 제조한 화합물 A-6를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4과 동일한 방법으로 화합물 A-7(6.85 g, 82%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 497$

[0261] (3) 하기 화합물 A-8, A-9, A-10의 제조



[0262]

[0263] <제조예 8> 화합물 A-8의 제조

[0264] 상기 제조예 2에서 제조한 화합물 A-2(2.51 g, 10 mmol), 9,10-페난트렌퀴논(9,10-Phenanthrenequinone)(2.08 g, 10 mmol) 및 암모늄아세테이트(2.32 g, 30 mmol)를 아세트산(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(50 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물 A-8(3.07 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 439$

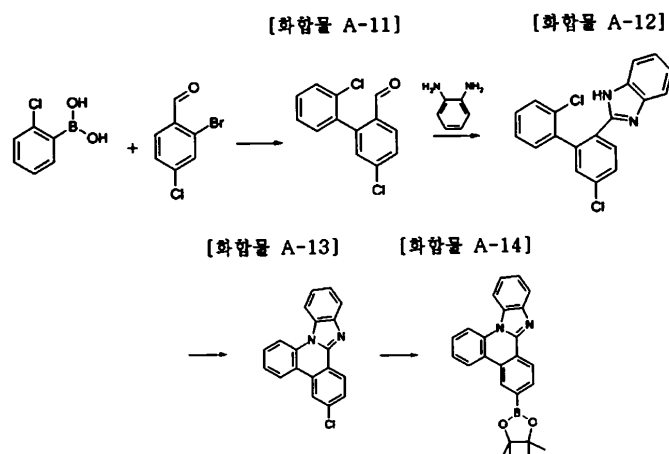
[0265] <제조예 9> 화합물 A-9의 제조

[0266] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 상기 제조예 8에서 제조한 화합물 A-8를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3과 동일한 방법으로 하여 화합물 A-9(0.863 g, 42%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 403$

[0267] <제조예 10> 화합물 A-10의 제조

[0268] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 상기 제조예 9에서 제조한 화합물 A-9를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4과 동일한 방법으로 화합물 A-10(6.24g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 495$

[0269] (4) 하기 화합물 A-11, A-12, A-13, A-14의 제조



[0270]

[0271] <제조예 11> 화합물 A-11의 제조

[0272] 2-브로모-4-클로로벤즈알데하이드(15.1g, 69.1 mmol)과 2-클로로페닐보로닉산(11.9g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:10으로 컬럼하여 상기 화합물 A-11(13.0 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 251$

[0273] <제조예 12> 화합물 A-12의 제조

[0274] 상기 제조예 11에서 제조한 화합물 A-11(17.3g, 69.1 mmol)과 디아미노벤젠(7.47g, 69.1 mmol)을 디옥산(1,4-dioxane)(200 mL)과 아세트산(AcOH)(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(100 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물 A-12 (13.4 g, 57 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 339$

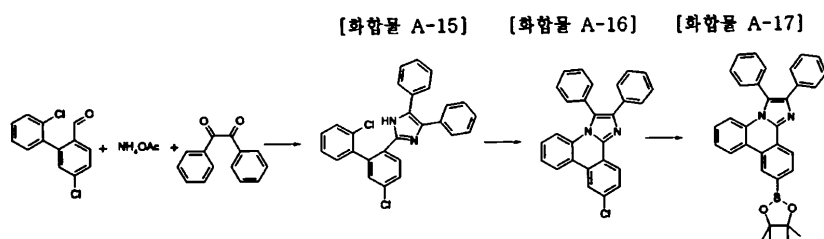
[0275] <제조예 13> 화합물 A-13의 제조

[0276] 상기 제조예 12에서 제조한 화합물 A-12(1.7g, 5.1 mmol)와 소듐-터셔리-부톡사이드(NaOt-Bu)(0.58g, 6.01 mmol) 및 $\text{Pd}[\text{P}(t\text{-Bu})_3]_2$ (51mg, 2 mol%)를 톨루엔(50 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 반응 용액에 증류수를 넣고 반응을 종료시키고, 유기층을 추출하여 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:5로 컬럼하여 상기 화합물 A-13(0.664 g, 43 %)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 303$

[0277] <제조예 14> 화합물 A-14의 제조

[0278] 상기 제조예 13에서 제조한 화합물 A-13(5.1g, 16.8 mmol)에 비스(피나콜라토)디보론(4.7g, 18.5 mmol) 및 아세트산 칼륨(4.96 g, 50.5 mmol)을 디옥산(100 mL)에 현탁시켰다. 상기 현탁액에 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.29g, 3 mol%)와 PCy_3 (0.28g, 6 mol%)를 가하였다. 혼합물을 약 8 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(100mL)로 희석하고 디클로로메탄(3 x 50 mL)으로 추출하였다. 유기 추출물을 황산 마그네슘 상에서 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 에틸에테르와 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-14(5.95g, 90 %)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 395$

[0279] (5) 하기 화합물 A-15, A-16, A-17의 제조



[0280]

[0281] <제조예 15> 화합물 A-15의 제조

[0282] 상기 제조예 12에서 제조한 화합물 A-12(2.51 g, 10 mmol), 벤질(Benzil)(2.1 g, 10 mmol) 및 암모늄아세테이트(2.32 g, 30 mmol)를 아세트산(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(50 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물 A-15(3.09 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 441$

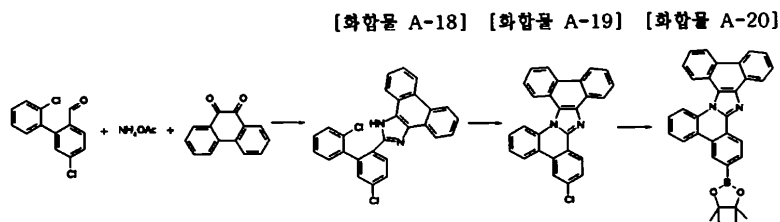
[0283] <제조예 16> 화합물 A-16의 제조

[0284] 상기 제조예 13 에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 15에서 제조한 화합물 A-15를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-16(0.847 g, 41%)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 405$

[0285] <제조예 17> 화합물 A-17의 제조

[0286] 상기 제조예 14 에서 화합물 A-13 대신 상기 제조예 16에서 제조한 화합물 A-16를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14과 동일한 방법으로 화합물 A-17(7.09 g, 85%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 497$

[0287] (6) 하기 화합물 A-18, A-19, A-20의 제조



[0288]

[0289] <제조예 18> 화합물 A-18의 제조

[0290] 상기 제조예 12에서 제조한 화합물 A-12(2.51 g, 10 mmol), 9,10-페난트렌퀴논(9,10-Phenanthrenequinone)(2.08 g, 10 mmol), 암모늄아세테이트(2.32 g, 30 mmol)를 아세트산(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(50 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물 A-18(3.51 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 439$

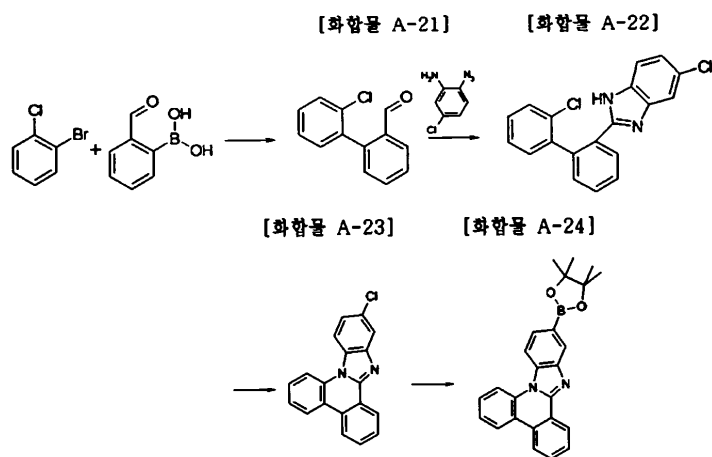
[0291] <제조예 19> 화합물 A-19의 제조

[0292] 상기 제조예 13 에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 18에서 제조한 화합물 A-18을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-19(0.822 g, 40%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 403$

[0293] <제조예 20> 화합물 A-20의 제조

[0294] 상기 제조예 14 에서 화합물 A-13 대신 상기 제조예 19 에서 제조한 화합물 A-19를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14과 동일한 방법으로 화합물 A-20 (6.82 g, 82%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 495$

[0295] (7) 하기 화합물 A-21, A-22, A-23, A-24의 제조



[0296]

[0297] <제조예 21> 화합물 A-21의 제조

[0298] 2-클로로-브로모벤젠(2-chloro-bromobenzene)(13.2, 69.1 mmol)과 2-포밀페닐보로닉산(2-formylphenylboronic acid)(11.4g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐($Pd(PPh_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:10으로 컬럼하여 상기 화합물 A-21(11.2 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 217$

[0299] <제조예 22> 화합물 A-22의 제조

[0300] 상기 제조예 21에서 제조한 화합물 A-21(14.9g, 69.1 mmol)과 2-아지도-4-클로로벤젠아민(2-azido-5-chlorobenzeneamine)(11.6g, 69.1 mmol)을 에탄올 (200 mL)과 아세트산(10 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 21 시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고, 감압 농축하고 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-22 (5.85 g, 25 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 339$

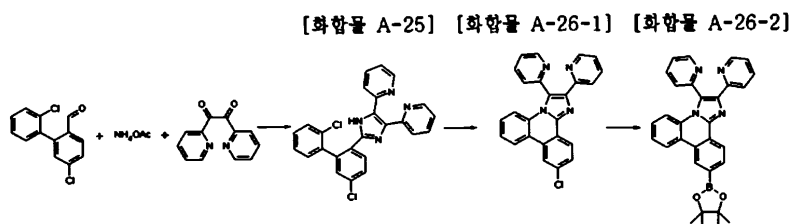
[0301] <제조예 23> 화합물 A-23의 제조

[0302] 상기 제조예 22에서 제조한 화합물 A-22(1.73g, 5.1 mmol)와 소듐-터셔리-부톡사이드($NaOt-Bu$) (0.58g, 6.01 mmol) 및 $Pd[P(t-Bu)_3]_2$ (51mg, 2 mol %)를 톨루엔 (50 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 반응 용액에 증류수를 넣고 반응을 종료시키고, 유기층을 추출하여 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:5로 컬럼하여 상기 화합물 A-23(0.618 g, 40 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 303$

[0303] <제조예 24> 화합물 A-24의 제조

[0304] 상기 제조예 23에서 제조한 화합물 A-23(5.09g, 16.8 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(4.7g, 18.5 mmol) 및 아세트산 칼륨(4.96 g, 50.5 mmol)을 디옥산(100 mL)에 현탁시켰다. 상기 현탁액에 $Pd(dba)_2$ (0.29g, 3 mol%)와 PCy_3 (0.28g, 6 mol%)를 가하였다. 혼합물을 약 8 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(100mL)로 희석하고 디클로로메탄(3 x 50 mL)으로 추출하였다. 유기 추출물을 황산 마그네슘 상에서 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 에틸에테르와 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-24(5.3g, 80 %)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 395$

[0305] (8) 하기 화합물 A-25, A-26-1, A-26-2 의 제조



[0306]

[0307] <제조예 25> 화합물 A-25의 제조

[0308] 상기 제조예 11에서 제조한 화합물 A-11(2.51 g, 10 mmol), 2,2'-피리딜(2,2'-Pyridyl)(2.12 g, 10 mmol) 및 암모늄아세테이트(2.32 g, 30 mmol)를 아세트산(20 mL)에 현탁시켰다. 얻어진 혼합물을 약 6 시간 동안 교반 환류하고, 상온으로 냉각하였다. 상기 혼합물을 물(50 mL)로 희석한 후, 생성된 고체를 여과하고, 물과 에틸에테르로 세정하여 상기 화합물 A-25 (2.66 g, 60 %)을 제조하였다.

[0309] MS: $[M+H]^+ = 443$

[0310] <제조예 26-1> 화합물 A-26-1의 제조

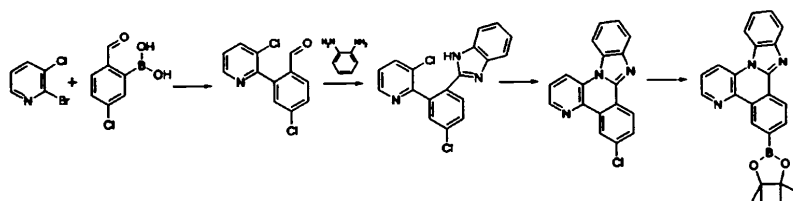
[0311] 상기 제조예 13 에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 25에서 제조한 화합물 A-25를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-26-1(0.726 g, 35%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 407$

[0312] <제조예 26-2> 화합물 A-26-2의 제조

[0313] 상기 제조예 14 에서 화합물 A-13 대신 상기에서 제조한 화합물 A-26-1을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14과 동일한 방법으로 화합물 A-26-2(3.35 g, 40%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 499$

[0314] (9) 하기 화합물 A-27, A-28, A-29, A-30의 제조

【화합물 A-27】 【화합물 A-28】 【화합물 A-29】 【화합물 A-30】



[0315]

[0316] <제조예 27> 화합물 A-27의 제조

[0317] 2-브로모-3-클로로-피리딘(13.26g, 69.1 mmol)과 5-클로로-2-포밀-벤젠보로닉산(13.98g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-27(7 g, 40 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 252$

[0318] <제조예 28> 화합물 A-28의 제조

[0319] 상기 제조예 12 에서 화합물 A-11 대신 상기 제조예 27에서 제조한 화합물 A-27을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 12과 동일한 방법으로 화합물 A-28(9.4g, 40%)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 340$

[0320] <제조예 29> 화합물 A-29의 제조

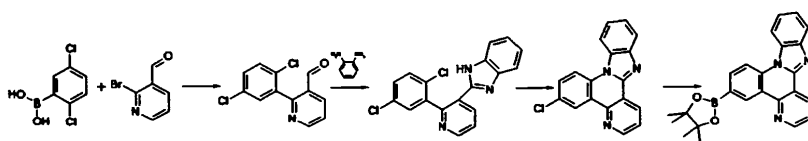
[0321] 상기 제조예 13 에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 28에서 제조한 화합물 A-28을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-29(0.620 g, 40%)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 304$

[0322] <제조예 30> 화합물 A-30의 제조

[0323] 상기 제조예 14 에서 화합물 A-13 대신 상기 제조예 29에서 제조한 화합물 A-29를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14과 동일한 방법으로 화합물 A-30(4.32 g, 65%)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 396$

[0324] (10) 하기 화합물 A-31, A-32, A-33, A-34의 제조

【화합물 A-31】 【화합물 A-32】 【화합물 A-33】 【화합물 A-34】



[0325]

[0326] <제조예 31> 화합물 A-31의 제조

[0327] 2-브로모-3-포밀-피리딘(12.85g, 69.1 mmol)과 2,5-다이클로로-벤젠보로닉산(14.4g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 헥산으로 재결정하여 상기 화합물 A-31(7.83 g, 45 %)을 제조하였다.

[0328] MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 252$

[0329] <제조예 32> 화합물 A-32의 제조

[0330] 상기 제조예 2 에서 화합물 A-1 대신 상기 제조예 31에서 제조한 화합물 A-31을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2과 동일한 방법으로 화합물 A-32(10.6g, 45%)를 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 340$

[0331] <제조예 33> 화합물 A-33의 제조

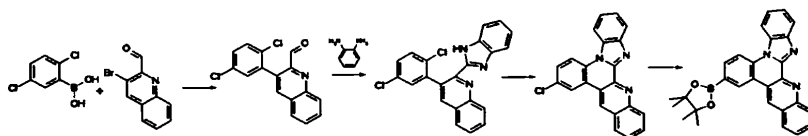
[0332] 상기 제조예 3 에서 화합물 A-2 대신 상기 제조예 32에서 제조한 화합물 A-32를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3과 동일한 방법으로 화합물 A-33(0.542 g, 35%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 304$

[0333] <제조예 34> 화합물 A-34의 제조

[0334] 상기 제조예 4 에서 화합물 A-3 대신 상기 제조예 33에서 제조한 화합물 A-33를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4과 동일한 방법으로 화합물 A-34(3.66 g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 396$

[0335] (11) 하기 화합물 A-35, A-36, A-37, A-38의 제조

【화합물 A-35】 【화합물 A-36】 【화합물 A-37】 【화합물 A-38】



[0336]

[0337] <제조예 35> 화합물 A-35의 제조

[0338] 3-브로모-2-포밀-퀴놀린(16.3g, 69.1 mmol)과 2,5-다이클로로-벤젠보로닉산(14.4g, 76 mmol)을 테트라하이드로퓨란(200 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(70 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐($Pd(PPh_3)_4$)(1.6g, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 에틸에테르로 재결정하여 상기 화합물 A-35(14.6 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 302$

[0339] <제조예 36> 화합물 A-36의 제조

[0340] 상기 제조예 2 에서 화합물 A-1 대신 상기 제조예 35에서 제조한 화합물 A-35를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2과 동일한 방법으로 화합물 A-36(16.2g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 390$

[0341] <제조예 37> 화합물 A-37의 제조

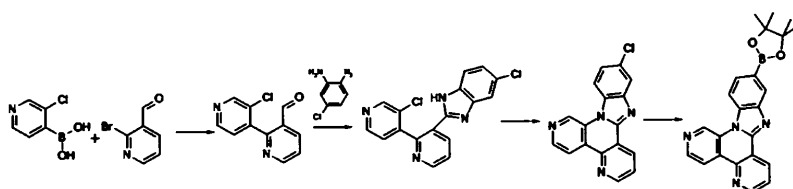
[0342] 상기 제조예 3 에서 화합물 A-2 대신 상기 제조예 32에서 제조한 화합물 A-32를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3과 동일한 방법으로 화합물 A-37(0.722 g, 40%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 354$

[0343] <제조예 38> 화합물 A-38의 제조

[0344] 상기 제조예 4 에서 화합물 A-3 대신 상기 제조예 33에서 제조한 화합물 A-33를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4과 동일한 방법으로 화합물 A-38(5.24 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 446$

[0345] (12) 하기 화합물 A-39, A-40, A-41, A-42의 제조

【화합물 A-39】 【화합물 A-40】 【화합물 A-41】 【화합물 A-42】

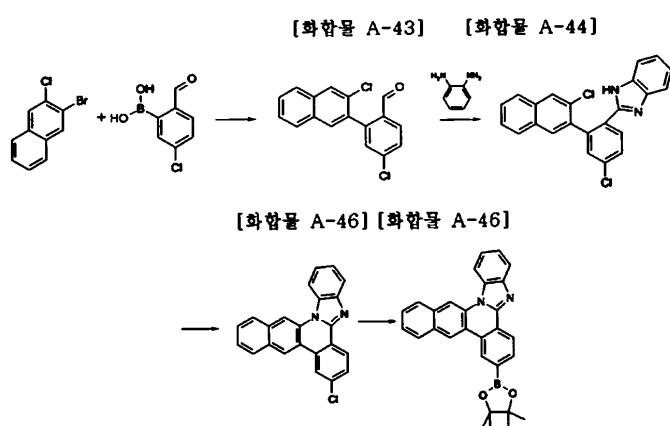


[0346]

[0347] <제조예 39> 화합물 A-39의 제조

[0348] 2-브로모-3-포밀-피리딘(1.86g, 10 mmol)과 3-클로로-4-피리딜보로닉산(1.57g, 10 mmol)을 테트라하이드로퓨란(30 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐($Pd(PPh_3)_4$)(231mg, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시켜 상기 화합물 A-39(1.31 g, 60 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 219$

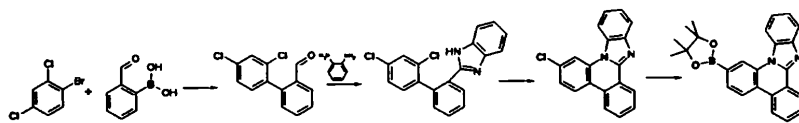
- [0349] <제조예 40> 화합물 A-40의 제조
- [0350] 상기 제조예 22 에서 화합물 A-21 대신 상기 제조예 39에서 제조한 화합물 A-39를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 22과 동일한 방법으로 화합물 A-40(5.9g, 25%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 341$
- [0351] <제조예 41> 화합물 A-41의 제조
- [0352] 상기 제조예 23 에서 화합물 A-22 대신 상기 제조예 40에서 제조한 화합물 A-40를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 23과 동일한 방법으로 화합물 A-41(0.622 g, 40%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 305$
- [0353] <제조예 42> 화합물 A-42의 제조
- [0354] 상기 제조예 24 에서 화합물 A-23 대신 상기 제조예 41에서 제조한 화합물 A-41을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 24과 동일한 방법으로 화합물 A-42(4.67g, 70%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 397$
- [0355] (13) 하기 화합물 A-43, A-44, A-45, A-46의 제조



- [0356]
- [0357] <제조예 43> 화합물 A-44의 제조
- [0358] 2-브로모-3-클로로나프탈렌(2.41g, 10 mmol)과 5-클로로-2-포밀-페닐보로닉산(1.84 g, 10 mmol) 을 테트라하이드로퓨란(50 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐($Pd(PPh_3)_4$)(231mg, 2 mol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 에틸에테르로 재결정하여 상기 화합물 A-43(2.41 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 301$
- [0359] <제조예 44> 화합물 A-44의 제조
- [0360] 상기 제조예 12 에서 화합물 A-11 대신 상기 제조예 43에서 제조한 화합물 A-43을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 12과 동일한 방법으로 화합물 A-44(18.82 g, 70%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 389$
- [0361] <제조예 45> 화합물 A-45의 제조
- [0362] 상기 제조예 13 에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 44에서 제조한 화합물 A-44를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-45(0.81 g, 45%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 353$
- [0363] <제조예 46> 화합물 A-46의 제조
- [0364] 상기 제조예 14 에서 화합물 A-13 대신 상기 제조예 45에서 제조한 화합물 A-45를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14과 동일한 방법으로 화합물 A-46(5.98 g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 445$

[0365] (14) 하기 화합물 A-47, A-48, A-49, A-50의 제조

[화합물 A-47] [화합물 A-48] [화합물 A-49] [화합물 A-50]



[0366]

[0367] <제조예 47> 화합물 A-47의 제조

[0368] 상기 제조예 1 에서 화합물 1-브로모-2,5-다이클로로벤젠 대신 상기 1-브로모-2,4-다이클로로벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 화합물 A-47(13.9 g, 80%)을 제조하였다.

[0369] MS: $[M+H]^+ = 251$

[0370] <제조예 48> 화합물 A-48의 제조

[0371] 상기 제조예 2에서 화합물 A-1 대신 상기 제조예 47에서 제조한 화합물 A-47을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 2과 동일한 방법으로 화합물 A-48(12.9g, 55%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 339$

[0372] <제조예 49> 화합물 A-49의 제조

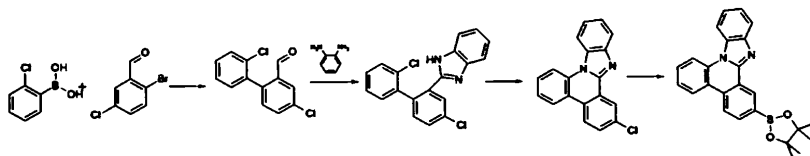
[0373] 상기 제조예 3에서 화합물 A-2 대신 상기 제조예 48에서 제조한 화합물 A-48을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 3과 동일한 방법으로 화합물 A-49(0.695g, 45%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 303$

[0374] <제조예 50> 화합물 A-50의 제조

[0375] 상기 제조예 4에서 화합물 A-3 대신 상기 제조예 49에서 제조한 화합물 A-49을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4와 동일한 방법으로 화합물 A-50(5.62g, 85%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 395$

[0376] (15) 하기 화합물 A-51, A-52, A-53, A-54의 제조

[화합물 A-51] [화합물 A-52] [화합물 A-53] [화합물 A-54]



[0377]

[0378] <제조예 51> 화합물 A-51의 제조

[0379] 상기 제조예 11 에서 화합물 2-브로모-4-클로로벤즈알데하이드 대신 상기 2-브로모-5-클로로벤즈알데하이드를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 11과 동일한 방법으로 화합물 A-51을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 251$

[0380] <제조예 52> 화합물 A-52의 제조

[0381] 상기 제조예 12에서 화합물 A-11 대신 상기 제조예 51에서 제조한 화합물 A-51을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 12와 동일한 방법으로 화합물 A-52(13.0g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 339$

[0382] <제조예 53> 화합물 A-53의 제조

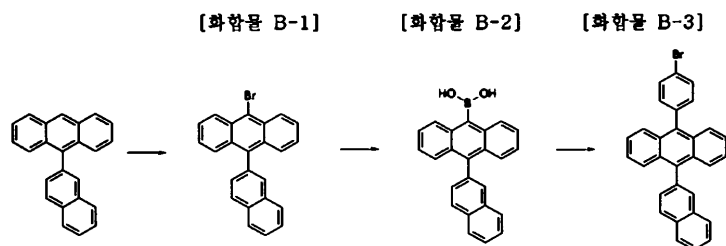
[0383] 상기 제조예 13에서 화합물 A-12 대신 상기 제조예 52에서 제조한 화합물 A-52를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 13과 동일한 방법으로 화합물 A-53(0.773 g, 50%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 303$

[0384] <제조예 54> 화합물 A-54의 제조

[0385] 상기 제조예 14에서 화합물 A-13 대신 상기 제조예 53에서 제조한 화합물 A-53을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 14와 동일한 방법으로 화합물 A-54(5.31g, 80%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 395$

[0386] 하기 제조예들은 상기 화학식 1의 화합물을 제조하기 위해 진행된 중간체들의 예이다.

[0387] <제조예 101> 화합물 B-1, B-2, B-3의 제조



[0388]

[0389] [화합물 B-1]

[0390] 상기 9-(2-나프틸)-안트라센(9-(2-naphthyl)-anthracene)(7.36 g, 24.2 mmol)을 클로로포름(150mL)에 녹이고, 아세트산(150mL)을 첨가한 후, 0℃ 하에서 Br₂(1.3 mL, 25.4 mmol)을 적가하였다. 얻어진 혼합물을 상온으로 올려 5시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 농축시키고 에탄올로 재결정하여 화합물 B-1(6.49 g, 70%)을 제조하였다. MS: [M]⁺=383

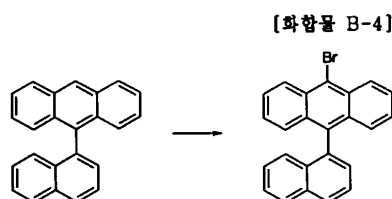
[0391] [화합물 B-2]

[0392] 상기 화합물 B-1 (6.86 g, 17.9 mmol)을 테트라하이드로퓨란(150 mL)에 녹인 후, -78 ℃로 온도를 낮추고 1.7M 터셔리-부틸리튬(*t*-BuLi)(10.5 mL, 17.9 mmol)을 천천히 가하였다. 동일 온도에서 한 시간 동안 교반한 후 트리메틸보레이트(B(OCH₃)₃)(3.72g, 35.8 mmol)을 가하고, 상온으로 온도를 서서히 올리면서 3시간동안 교반하였다. 반응 혼합물에 2 N 염산수용액(30 mL)를 가하고 1.5 시간 동안 상온에서 교반하였다. 생성된 침전물을 거르고 물과 에틸에테르로 차례로 씻은 후 진공 건조하였다. 건조후 에틸에테르에 분산시켜 두 시간 동안 교반한 후 여과하고 건조하여 화합물 B-2(4.44 g, 71 %)을 제조하였다. MS: [M+H]⁺ = 349

[0393] [화합물 B-3]

[0394] 상기 화합물 B-2 (3.48 g, 10.0 mmol)와 1-브로모-4-요오드벤젠(1-bromo-4-iodobenzene)(3.4 g, 12.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(Pd(PPh₃)₄)(0.231 g, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름으로 녹이고 무수 황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압 농축시키고, 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 B-3(3.30 g, 72%)을 제조하였다. MS: [M+H]⁺ = 460

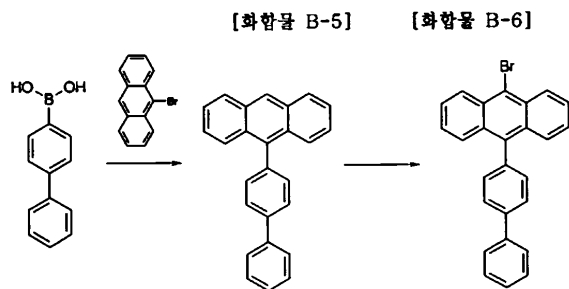
[0395] <제조예 102> 화합물 B-4의 제조



[0396]

[0397] 상기 제조예 101의 화합물 B-1의 제조에서 9-(2-나프틸)-안트라센(9-(2-naphthyl)-anthracene) 대신 9-(1-나프틸)-안트라센(9-(1-naphthyl)-anthracene)을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화합물 B-1의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 B-4(6.49 g, 70%)을 제조하였다. MS: [M]⁺ = 383

[0398] <제조예 103> 화합물 B-5, B-6의 제조



[0399]

[0400] [화합물 B-5]

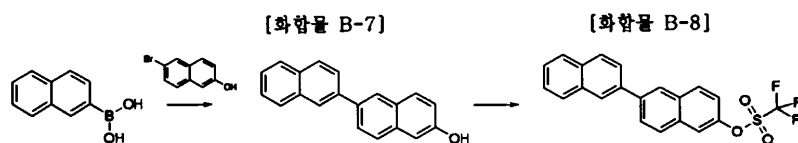
[0401] 9-브로모안트라센(8.2 g, 31.9 mmol), 바이페닐 보론산(7.6 g, 38.4 mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.737 g, 2 mol %)을 2M K_2CO_3 수용액(300 mL)과 테트라하이드로퓨란(300 mL)에 넣고, 약 24시간 환류 교반시켰다. 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액에서 유기층을 층 분리하고 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조한후 여과하였다. 여과액을 감압 농축시키고, 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 B-5 (8.5 g, 81%)을 제조하였다. MS: $[\text{M}]^+ = 330$

[0402] [화합물 B-6]

[0403] 상기 제조예 101의 화합물 B-1의 제조에서

[0404] 9-(2-나프틸)-안트라센(9-(2-naphthyl)-anthracene) 대신 화합물 B-5을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화합물 B-1의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 B-6(7.03 g, 71%)을 제조하였다. MS: $[\text{M}]^+ = 409$

[0405] <제조예 104> 화합물 B-7, B-8의 제조



[0406]

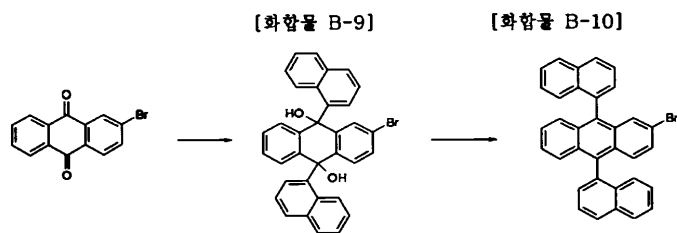
[0407] [화합물 B-7]

[0408] 2-나프탈렌 보론산(2-naphthalene boronic acid)(10 g 58.1 mmol)과 2-브로모-6-나프톨(2-bromo-6-naphthol)(10.8 g, 48.4 mmol)을 테트라하이드로-퓨란(100 mL)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(100 mL)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(1.12 g, 2 mol%)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 헥산으로 재결정하여 화합물 B-7(8.5 g, 65 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 271$

[0409] [화합물 B-8]

[0410] 화합물 B-7(7.2 g, 26.7 mmol)을 디클로로메탄에 녹인 후 트리에틸아민(7.47 mL, 53.6 mmol)을 첨가한 후 10분간 교반하였다. 0℃로 온도를 낮춘 후 트리플루오로메탄술폰산 무수물($(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{O}$)(6.76 mL, 40.2 mmol)을 천천히 첨가한 후 상온으로 온도를 올리고 1시간 동안 교반하였다. 탄산수소나트륨 수용액을 첨가한 후 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 수분을 제거하였다. 여과한 후 감압 농축하고 헥산으로 재결정하여 화합물 B-8(8.69 g, 81 %)을 제조하였다. MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 403$

[0411] <제조예 105> 화합물 B-9, B-10의 제조



[0412]

[0413] [화합물 B-9]

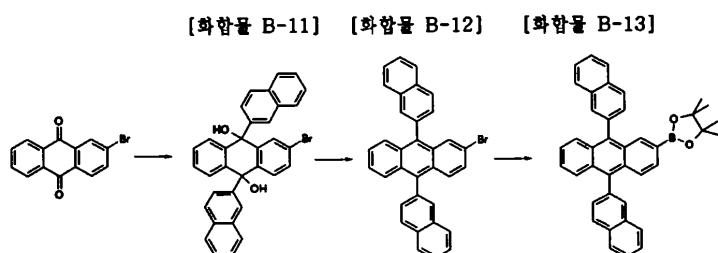
[0414] 1-브로모나프탈렌(1-bromo-naphthalene)(34.8 g, 168 mmol)을 테트라하이드로퓨란(170ml)에 녹인 후 -78℃로 온도를 낮추고 2.5 M n-부틸리튬(67.3 ml, 168 mmol)을 천천히 첨가한 후 1시간 동안 교반하였다.

[0415] 2-브로모안트라퀴논(21 g, 73.1 mmol)을 첨가하고 상온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반하였다. 포화염화암모늄수용액을 넣고 물층을 제거한 후 무수황산마그네슘으로 건조하고 여과한 후 감압 건조하였다. 에틸에테르로 재결정하여 화합물 B-9(32.5 g, 82 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 544$

[0416] [화합물 B-10]

[0417] 상기 화합물 B-9(32.3 g, 59.5 mmol), 요오드화 칼륨(29.6 g, 178.4 mmol) 및 차아인산소다(38 g, 256.8 mmol)를 아세트산(100 mL)에 넣고 3시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후, 생성된 침전물을 여과하고 물과 에탄올로 세정하여 화합물 B-10(25.4 g, 84 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 509$

[0418] <제조예 106> 화합물 B-11, B-12, B-13의 제조



[0419]

[0420] [화합물 B-11]

[0421] 상기 제조예 105의 화합물 B-9의 제조에서 1-브로모 나프탈렌 대신 2-브로모 나프탈렌을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화합물 B-9의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 B-11(31.8 g, 80 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 544$

[0422] [화합물 B-12]

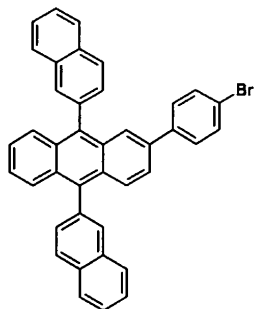
[0423] 상기 제조예 105의 화합물 B-10의 제조에서 화합물 B-9 대신 화합물 B-11을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화합물 B-10의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 B-12(25.4 g, 84%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 509$

[0424] [화합물 B-13]

[0425] 상기 제조예 4에서 화합물 A-4 대신 화합물 B-12를 사용한 것을 제외하고는, 제조예 4과 동일한 방법으로 화합물 B-13(8.6 g, 92%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 557$

[0426] <제조예 107> 화합물 B-14의 제조

【화합물 B-14】

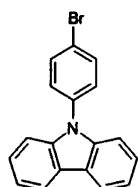


[0427]

[0428] 상기 제조예 101의 화합물 B-3의 제조에서 화합물 B-2 대신 화합물 B-13을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화합물 B-3의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 B-14(4.45 g, 76%)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 586$

[0429] <제조예 108> 화합물 B-15의 제조

【화합물 B-15】

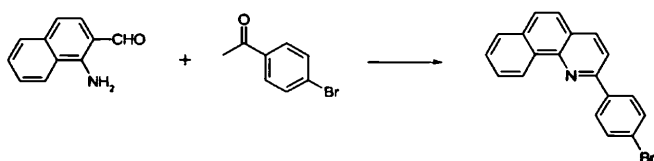


[0430]

[0431] 카바졸(3.34 g, 20 mmol), 1-브로모-4-요오드벤젠(6.79 g, 24 mmol), 탄산 칼륨(K_2CO_3)(5.52 g, 40 mmol), 요오드화구리(CuI)(0.381 g, 2 mmol) 및 1,10-페난트롤린(1,10-phenanthroline)(0.360 g, 2 mmol)을 자일렌 (50 mL)에 현탁시키고, 24시간 교반 환류하였다. 상온으로 냉각한 후, 상기 혼합물을 물(100 mL)로 희석한 후, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 에틸에테르와 헥산으로 재결정하여 화합물 B-15(4.83 g, 75 %)을 제조하였다. MS: $[M+H]^+ = 322$

[0432] <제조예 109> 화합물 B-16의 제조

【화합물 B-16】

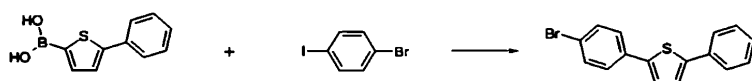


[0433]

[0434] 1-아미노-2-나프탈렌카바알데하이드(1-amino-2-naphthalenecarbaldehyde) (0.25g, 1.45mmol)와 4-브로모아세트 페논(2.88g, 1.45 mmol)을 에탄올 (15 mL)에 분산시키고, 에탄올에 KOH를 포화시켜 녹인 용액 0.5 mL를 천천히 가한다. 얻어진 혼합물을 15시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 냉각한 후, 생성된 고체를 여과하고 에탄올로 세정한 후 진공 건조하여 화합물 B-16(0.290 g, 60 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 334$

[0435] <제조예 110> 화합물 B-17의 제조

【화합물 B-17】



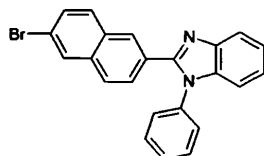
[0436]

[0437] 1-브로모-4-아이오도벤젠(2.82 g, 10 mmol)과 2-페닐-5-싸이오펜보론산(2.04 g, 10 mmol)을 테트라하이드로퓨란(30 mL)에 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(20 mL)을 첨가하고, 테트라키스트리페닐포스포늄염 (231 mg, 2mmol %)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 유기층을 무수황산마그

네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 에틸에테르로 재결정하여 화합물 B-17(2.2 g, 70 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 315$

[0438] <제조예 111> 화합물 B-18의 제조

[화합물 B-18]

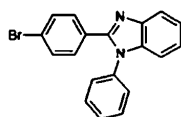


[0439]

[0440] 6-브로모-2-나프토산(5.0 g, 20 mmol)에 티오닐클로라이드(SOCl_2) (20 mL) 및 디메틸포름아미드(DMF)(1 mL)를 넣고 4시간 동안 교반 환류하였다. 과량의 티오닐클로라이드(SOCl_2)를 진공증류로 제거한 후, 반응 혼합물에 N-메틸피롤리딘(NMP) (20 mL), N-페닐-1,2-디아미노 벤젠(3.7 g, 20 mmol)을 넣고 160 °C에서 12 시간 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고, 과량의 물을 가하여 고체를 형성시켰다. 여과하고 물과 에탄올로 세정하고 건조시켜 화합물 B-18 (6.2 g, 78 %)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 399$

[0441] <제조예 112> 화합물 B-19의 제조

[화합물 B-19]

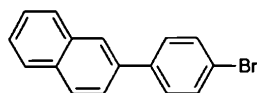


[0442]

[0443] 상기 제조예 111에서 6-브로모-2-나프토산 대신 4-브로모벤조산을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 111과 동일한 방법으로 화합물 B-19 (4.54 g, 65%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 349$

[0444] <제조예 113> 화합물 B-20의 제조

[화합물 B-20]

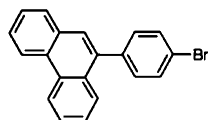


[0445]

[0446] 상기 제조예 110에서 2-페닐-5-싸이오펜보론산 대신 2-나프탈렌보론산을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 110과 동일한 방법으로 화합물 B-20 (2.12 g, 75%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 283$

[0447] <제조예 114> 화합물 B-21의 제조

[화합물 B-21]

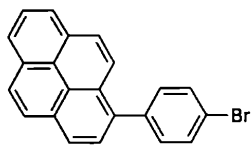


[0448]

[0449] 상기 제조예 110에서 2-페닐-5-싸이오펜보론산 대신 9-페난쓰렌보론산을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 110과 동일한 방법으로 화합물 B-21 (2.33 g, 70%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 333$

[0450] <제조예 115> 화합물 B-22의 제조

[화합물 B-22]

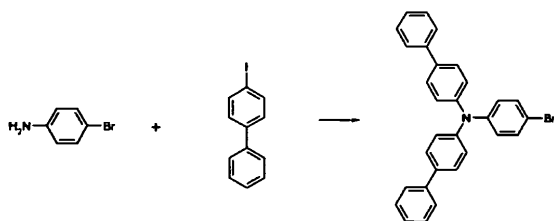


[0451]

[0452] 상기 제조예 110에서 2-페닐-5-싸이오펜보론산 대신 1-파이렌보론산을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 110과 동일한 방법으로 화합물 B-22 (2.14 g, 60%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 357$

[0453] <제조예 116> 화합물 B-23의 제조

[화합물 B-23]

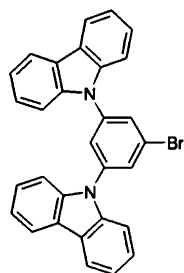


[0454]

[0455] 4-브로모-아닐린(4-bromo-aniline) (1.72 g, 10 mmol), 4-요오드바이페닐(4-iodobiphenyl) (6.72 g, 24 mmol), 탄산 칼륨(K_2CO_3) (5.52 g, 40 mmol), 요오드화구리(CuI) (0.381 g, 2 mmol) 및 1,10-페난트롤린(1,10-phenanthroline) (0.360 g, 2 mmol)을 자일렌 (50 mL)에 현탁시키고, 24시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 냉각한 후, 상기 혼합물을 물(100 mL)로 희석한 후, 에틸아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고, 헥산으로 재결정하여 화합물 B-23 (1.43 g, 30%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 476$

[0456] <제조예 117> 화합물 B-24의 제조

[화합물 B-24]

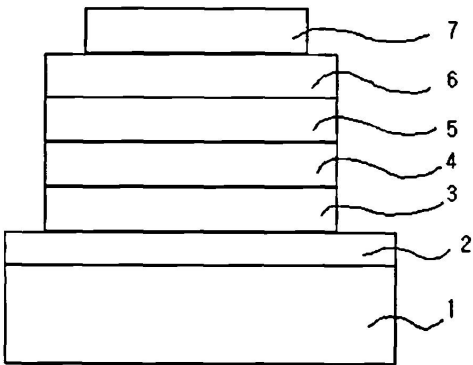


[0457]

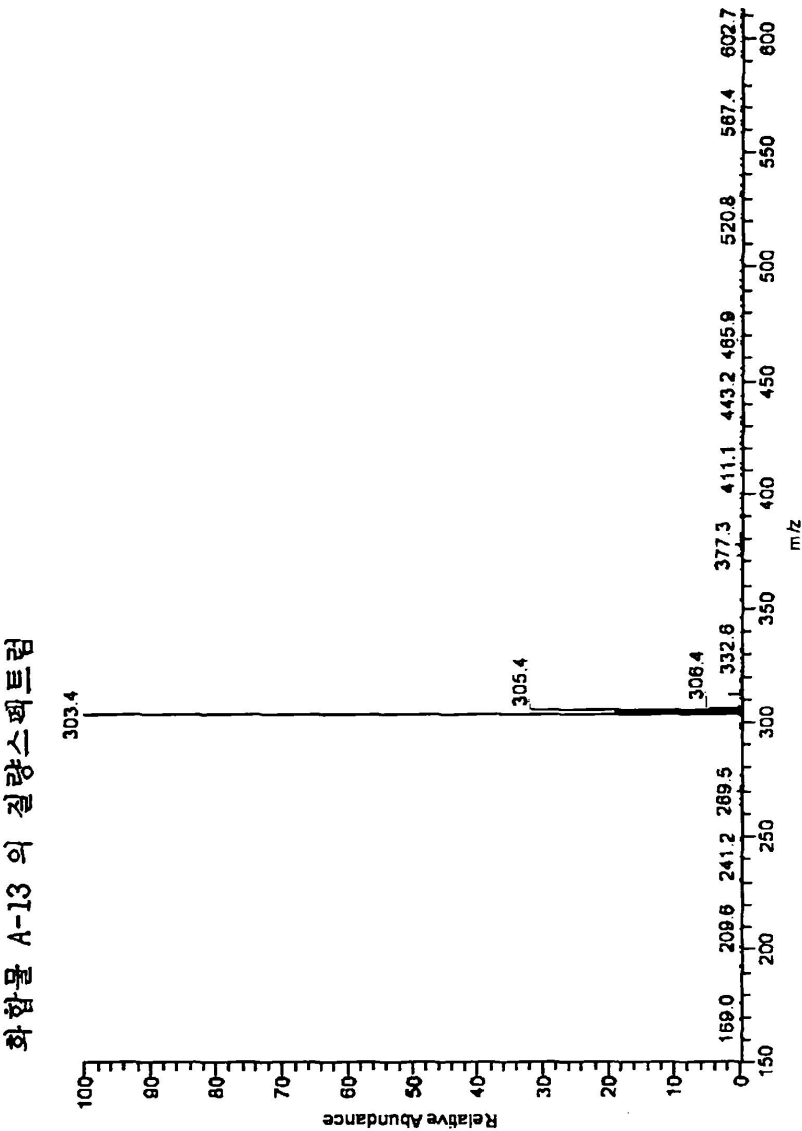
[0458] 상기 제조예 108에서 1-브로모-4-요오드벤젠 대신 1-브로모-3,5-다이요오드벤젠(1-bromo-3,5-diiodobenzene) (3.68 g, 9.0 mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 제조예 108과 동일한 방법으로 화합물 B-24 (1.75 g, 40%)을 제조하였다. MS: $[M]^+ = 487$

도면

도면1

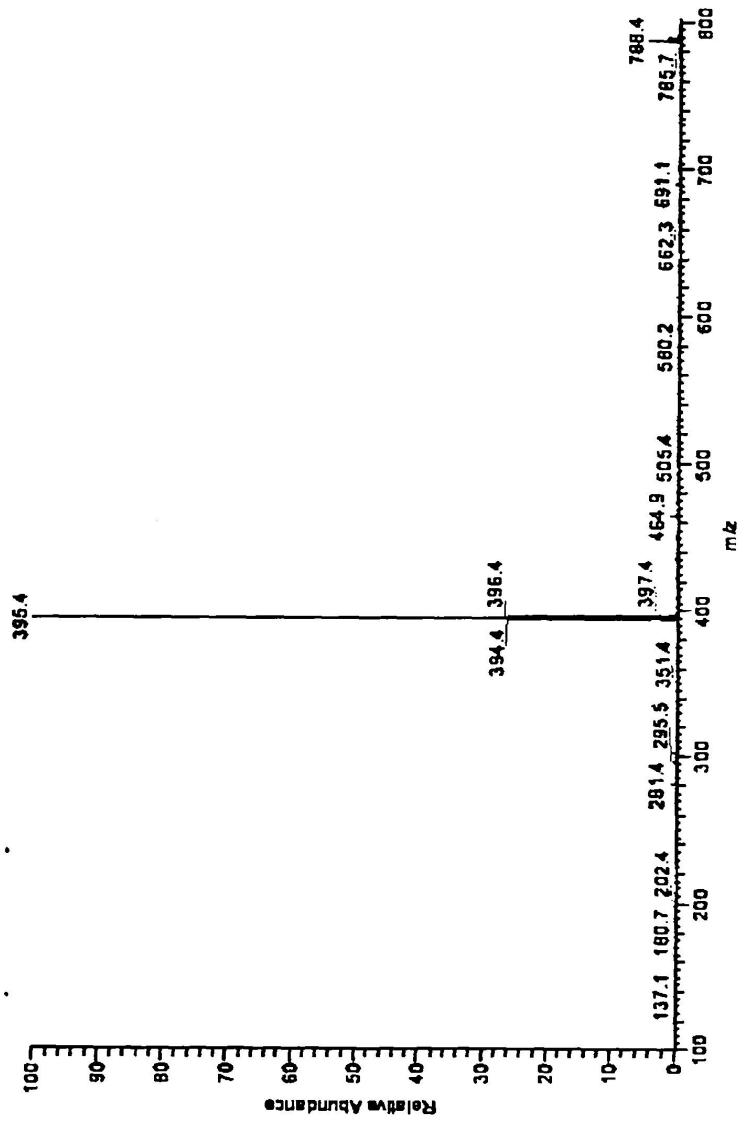


도면2



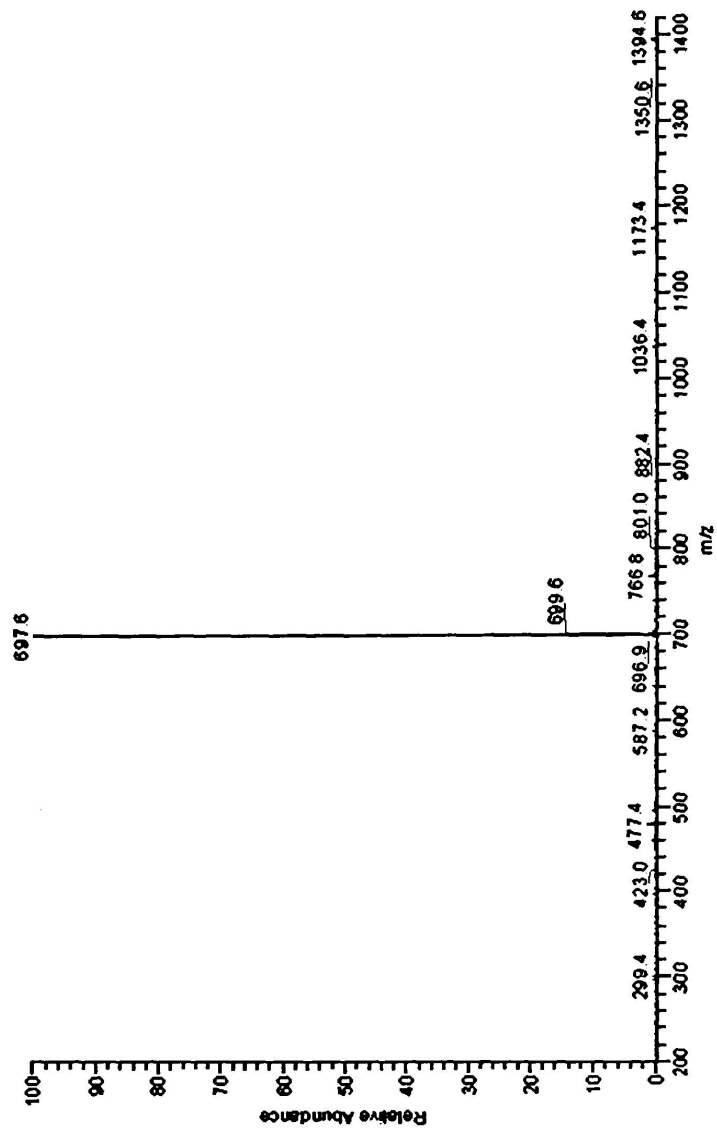
도면3

화합물 A-14 의 질량스펙트럼

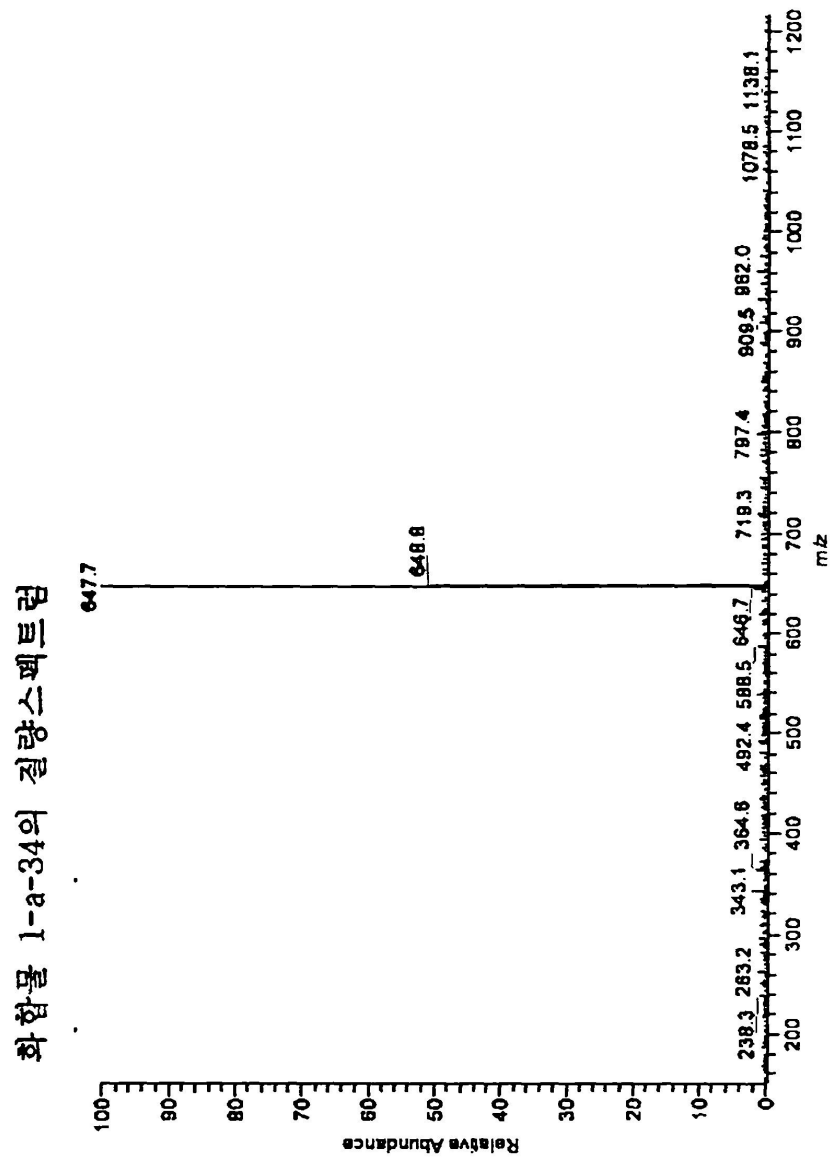


도면4

화합물 1-a-15 의 질량스펙트럼

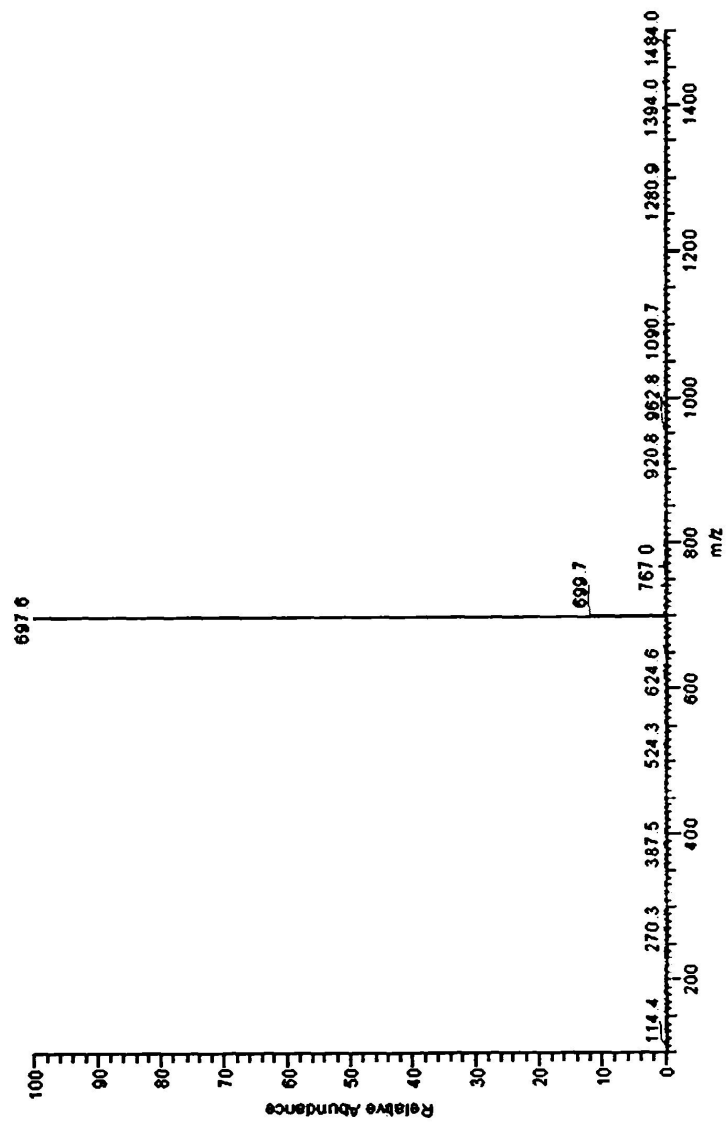


도면5



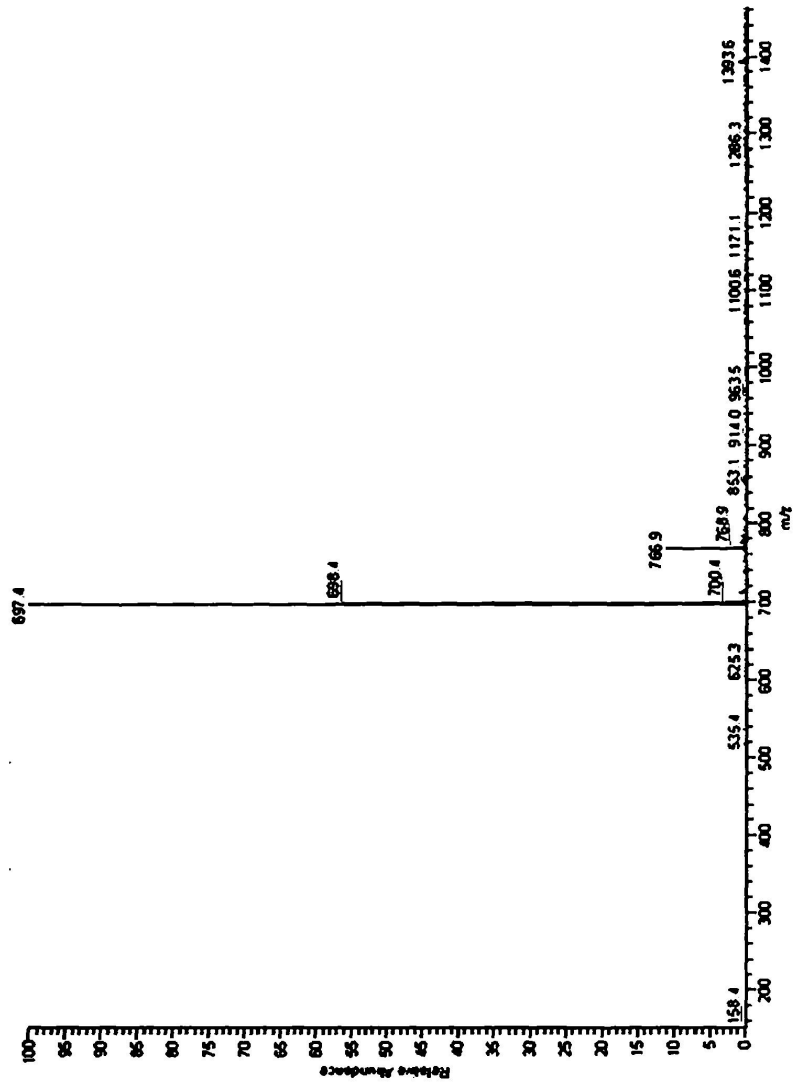
도면6

화합물 1-a-58의 질량스펙트럼



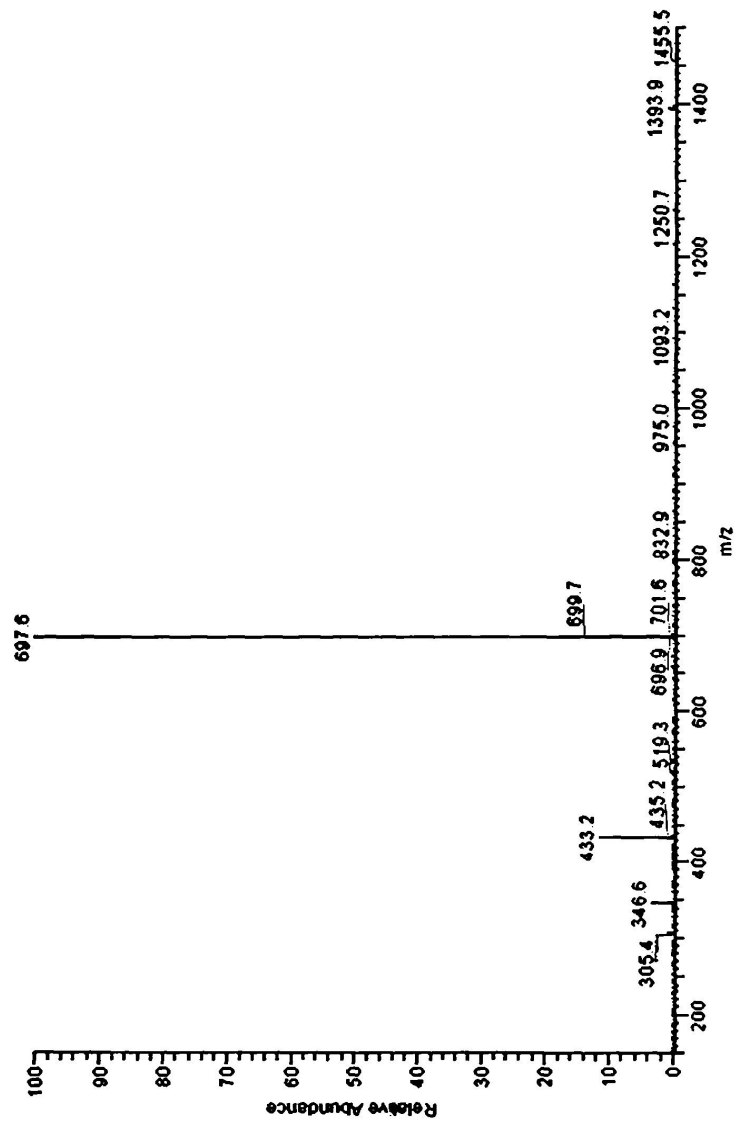
도면7

화합물 1-b-15의 질량스펙트럼



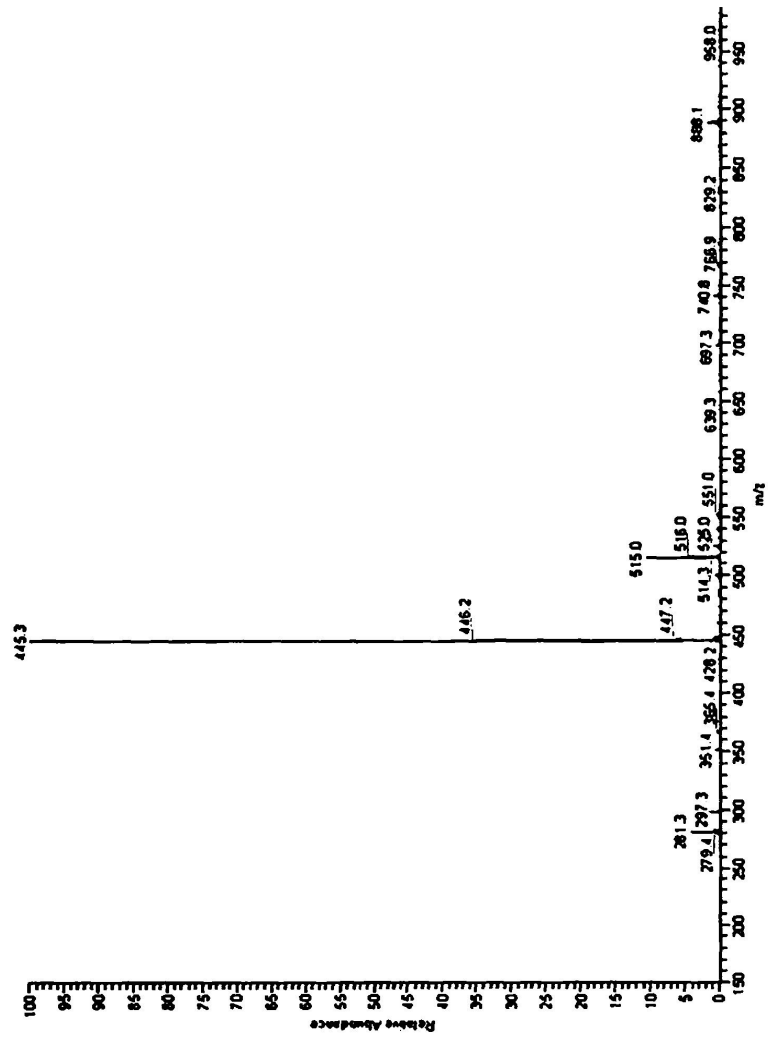
도면8

화합물 1-b-100 의 질량스펙트럼

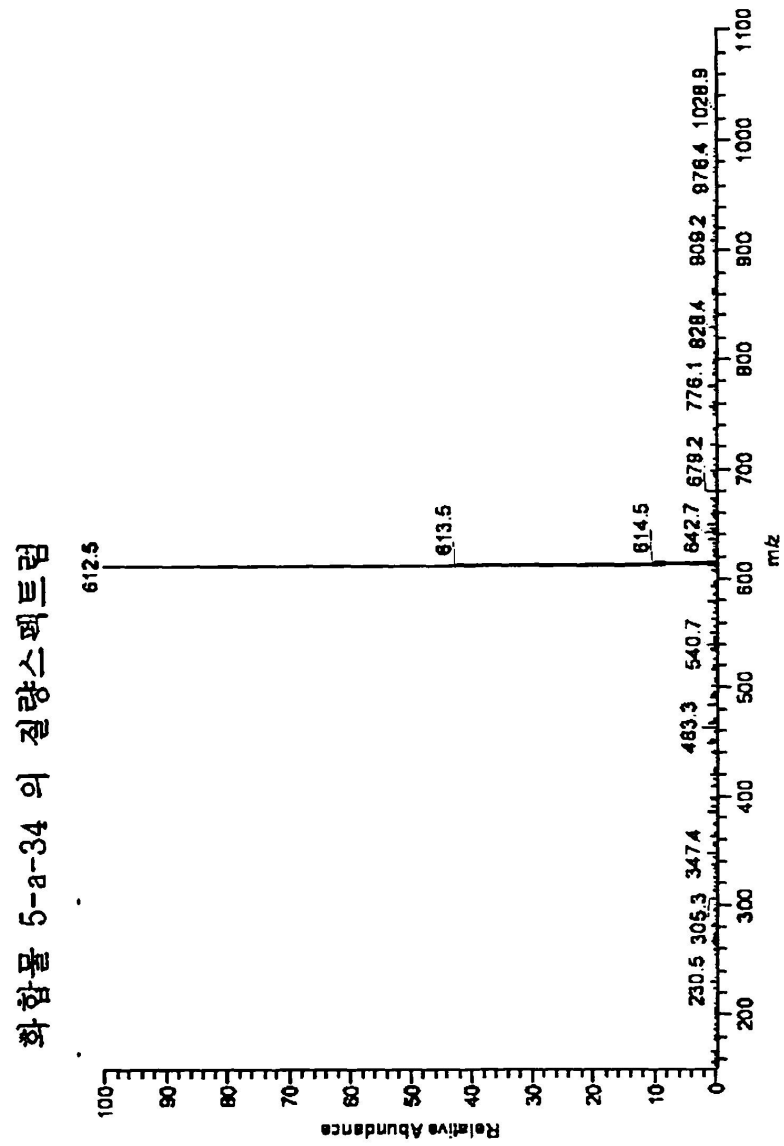


도면9

화합물 1-b-117 의 질량스펙트럼

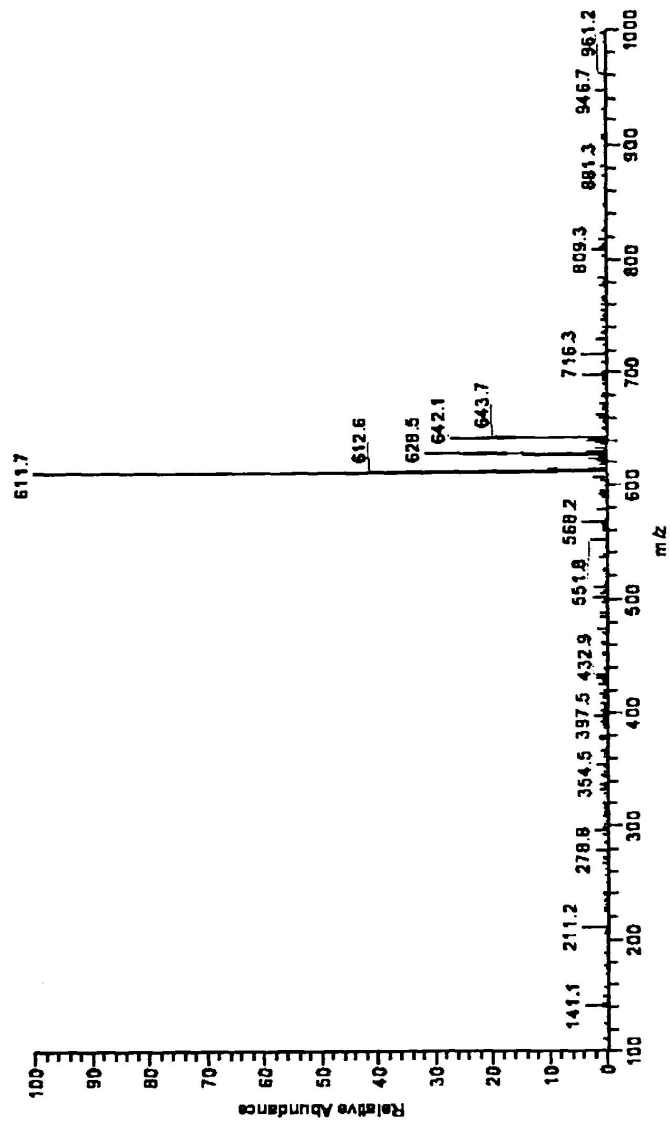


도면10



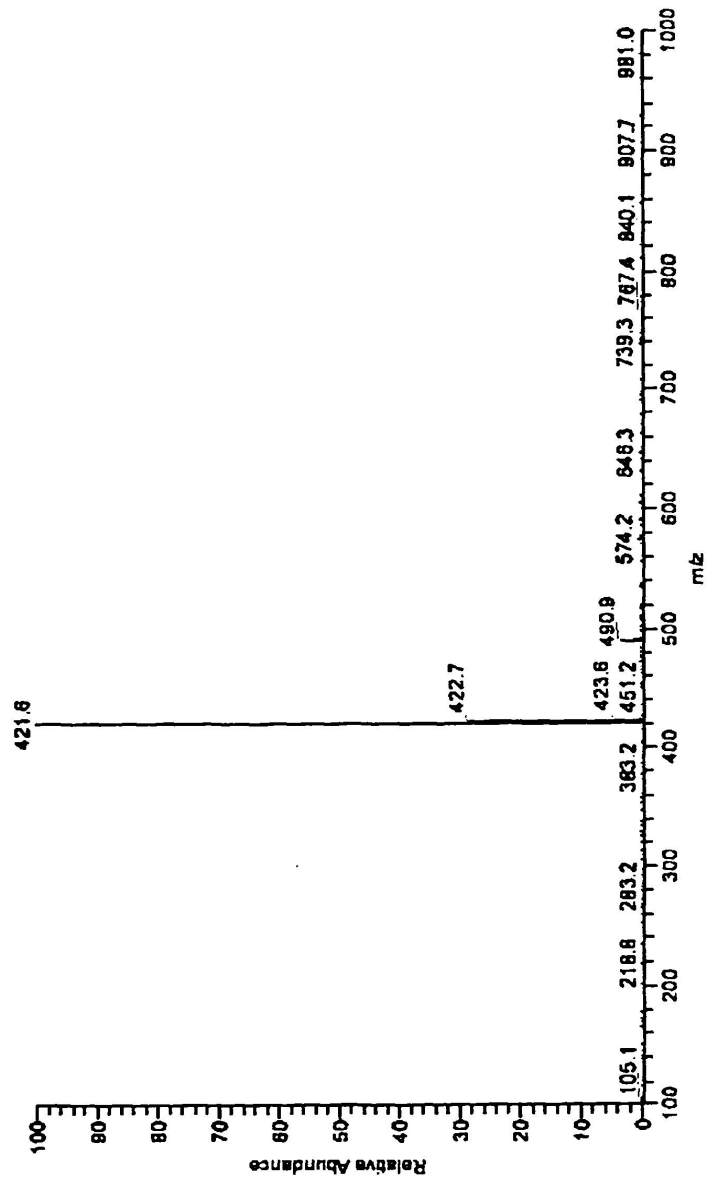
도면11

화합물 5-a-33 의 질량스펙트럼



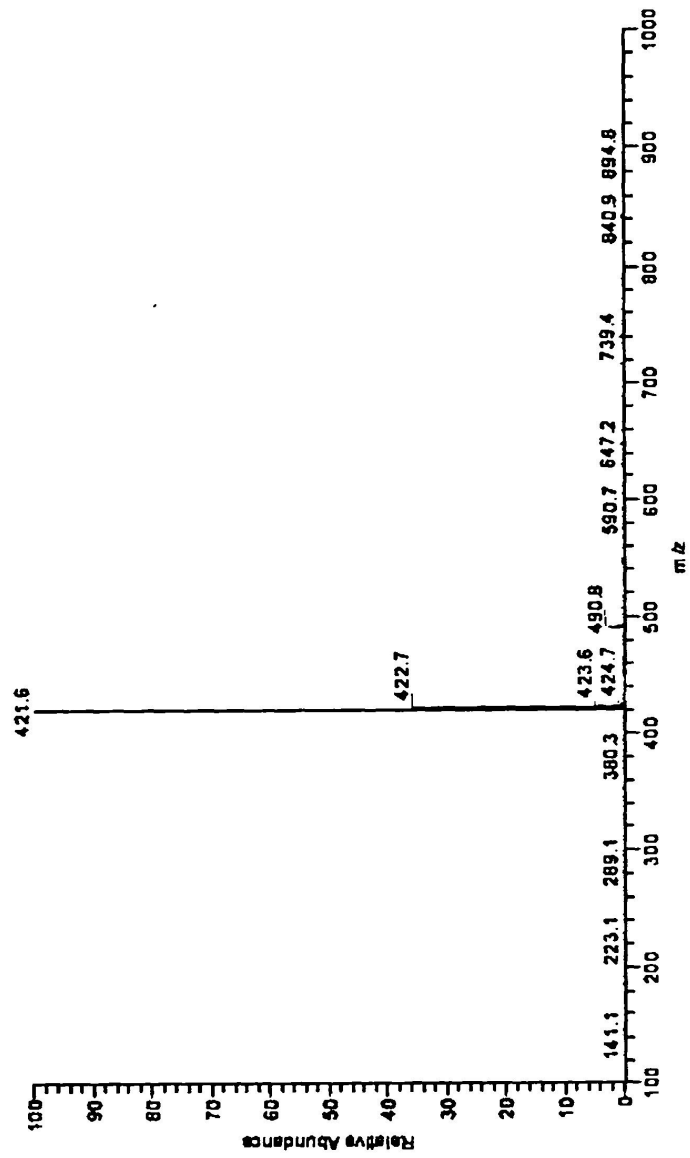
도면12

화합물 1-a-74 의 질량스펙트럼



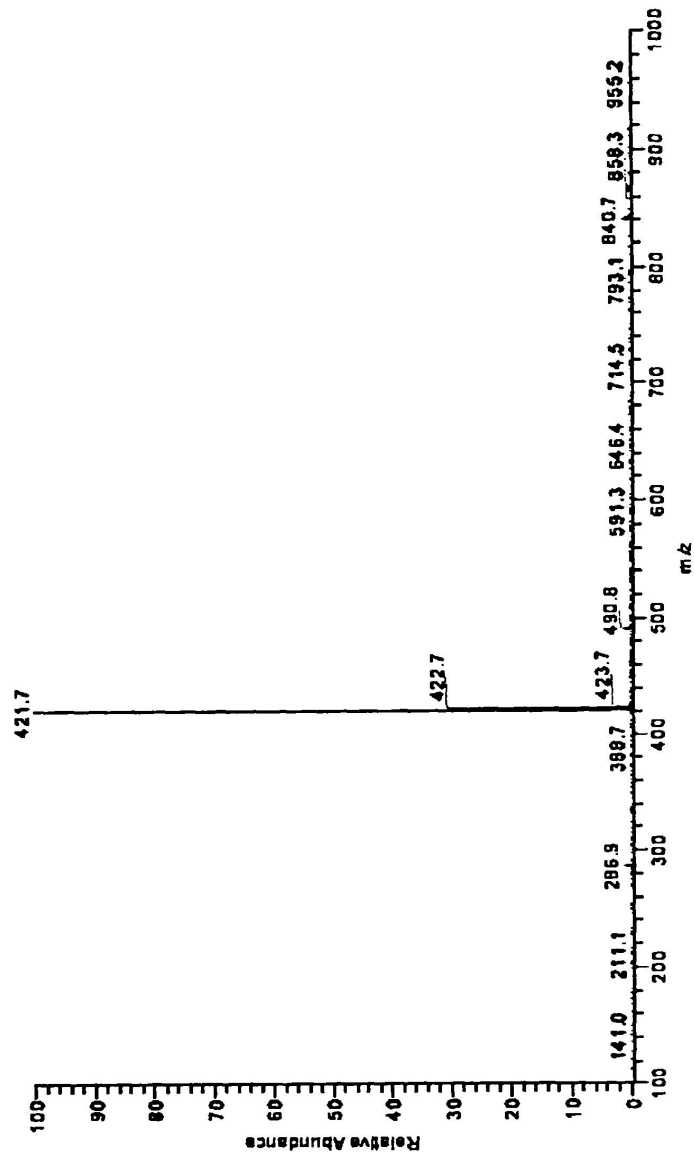
도면13

화합물 1-a-31 의 질량스펙트럼



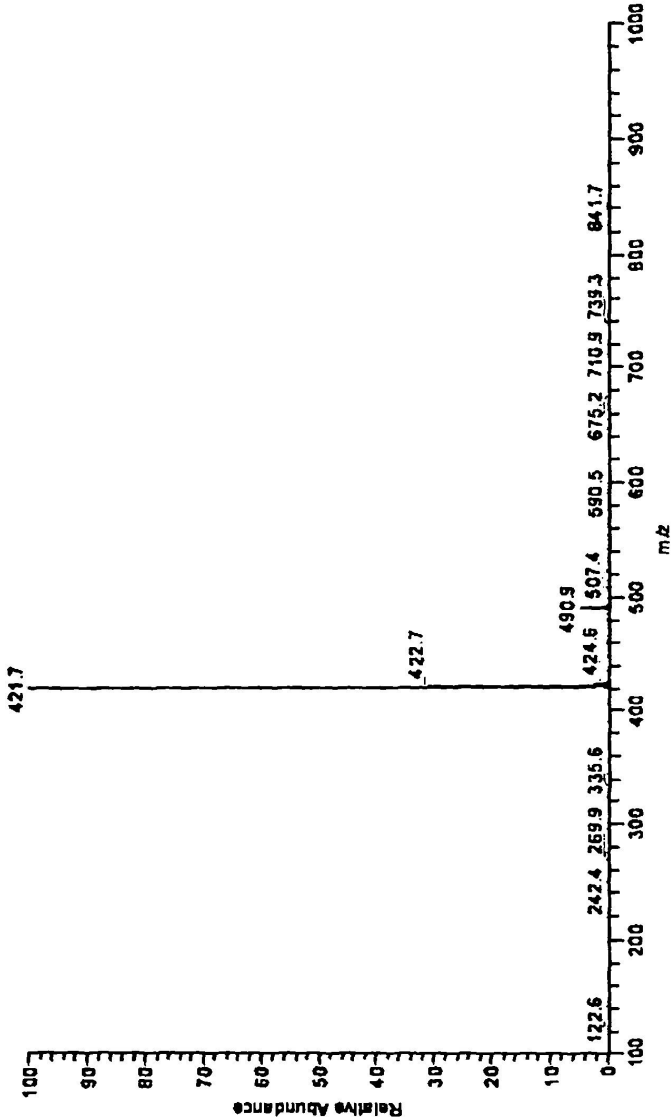
도면14

화합물 1-b-136 의 질량스펙트럼

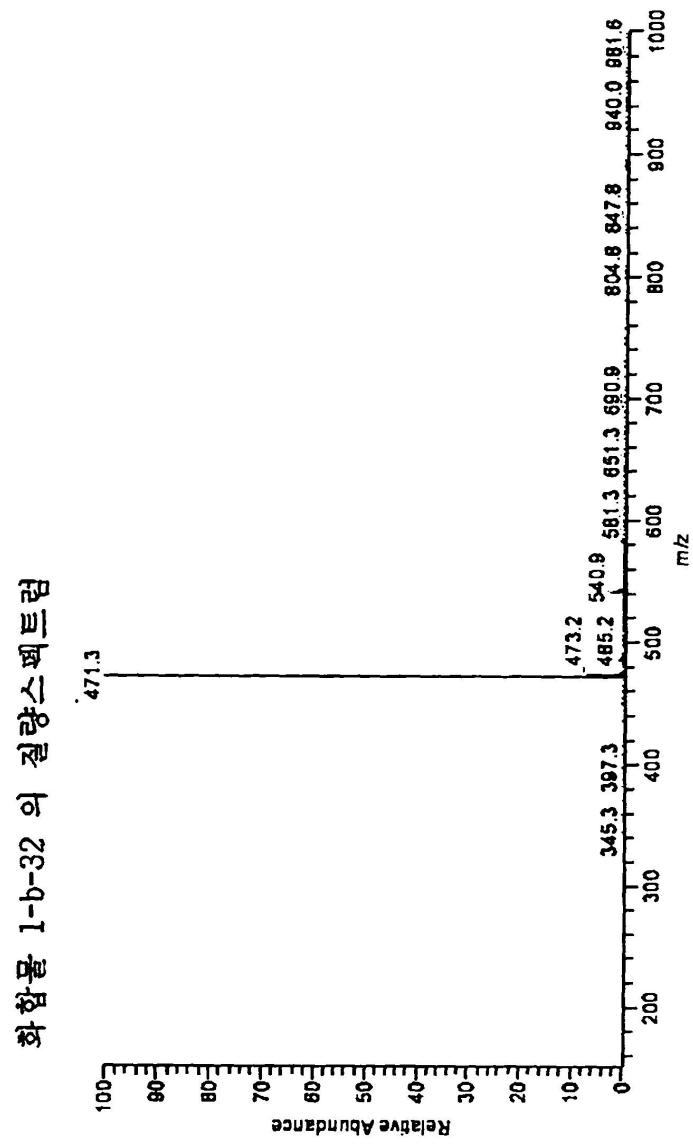


도면15

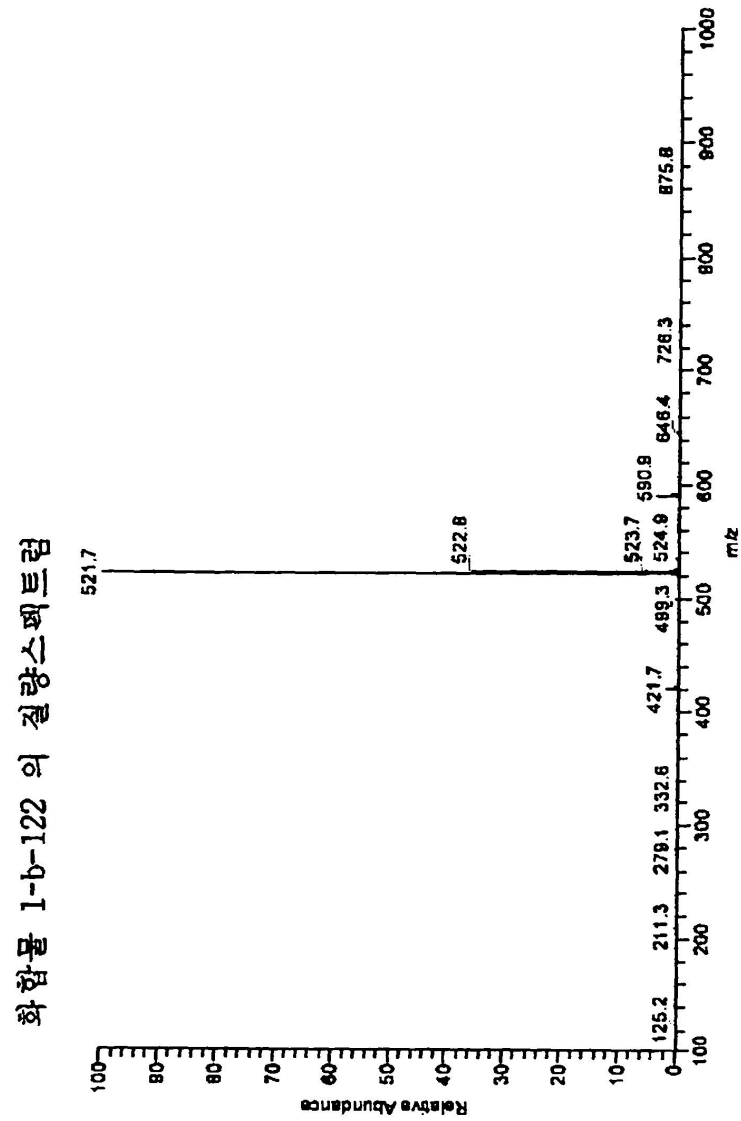
화합물 1-b-31 의 질량스펙트럼



도면16

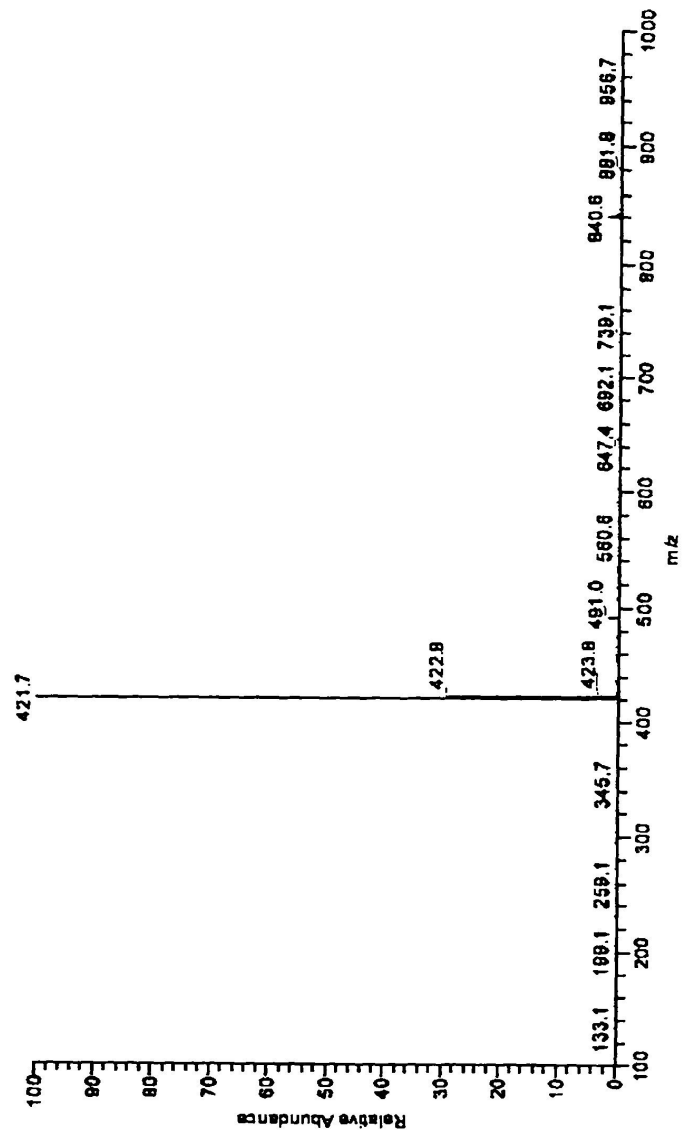


도면17

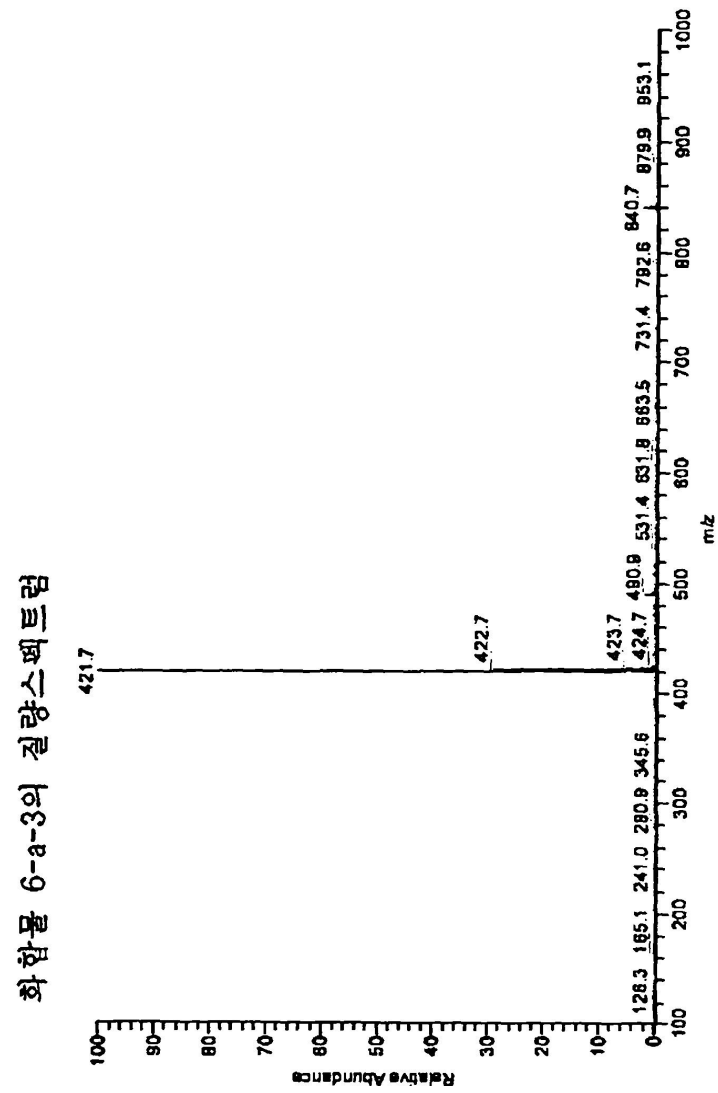


도면18

화합물 6-a-1의 질량스펙트럼

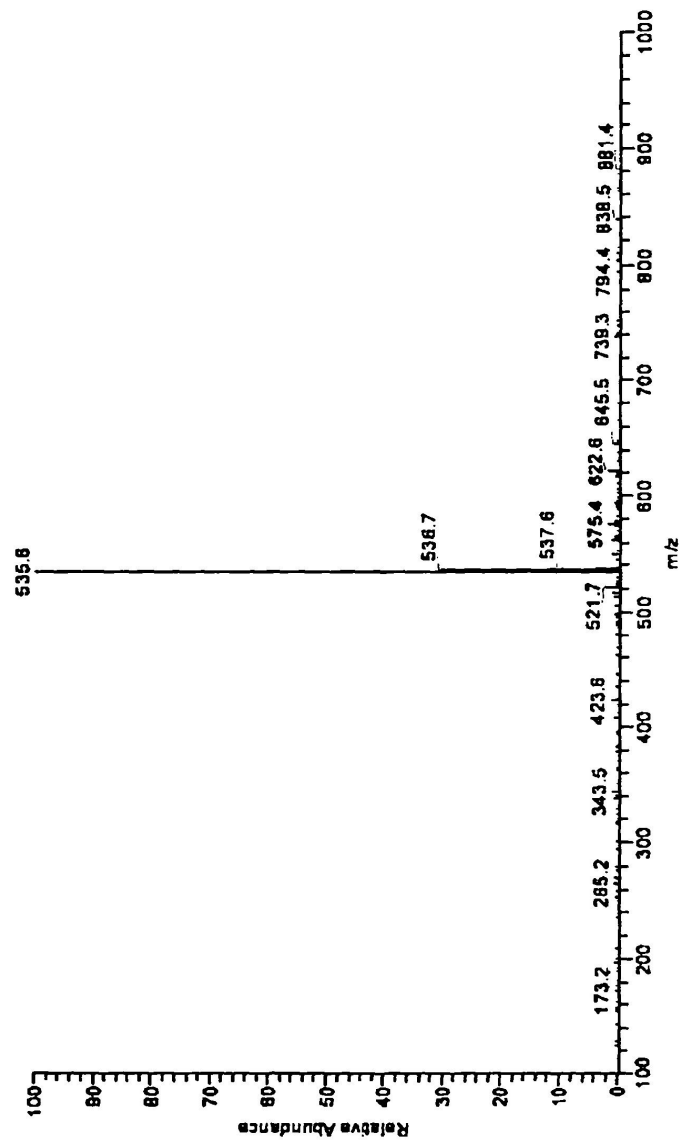


도면19

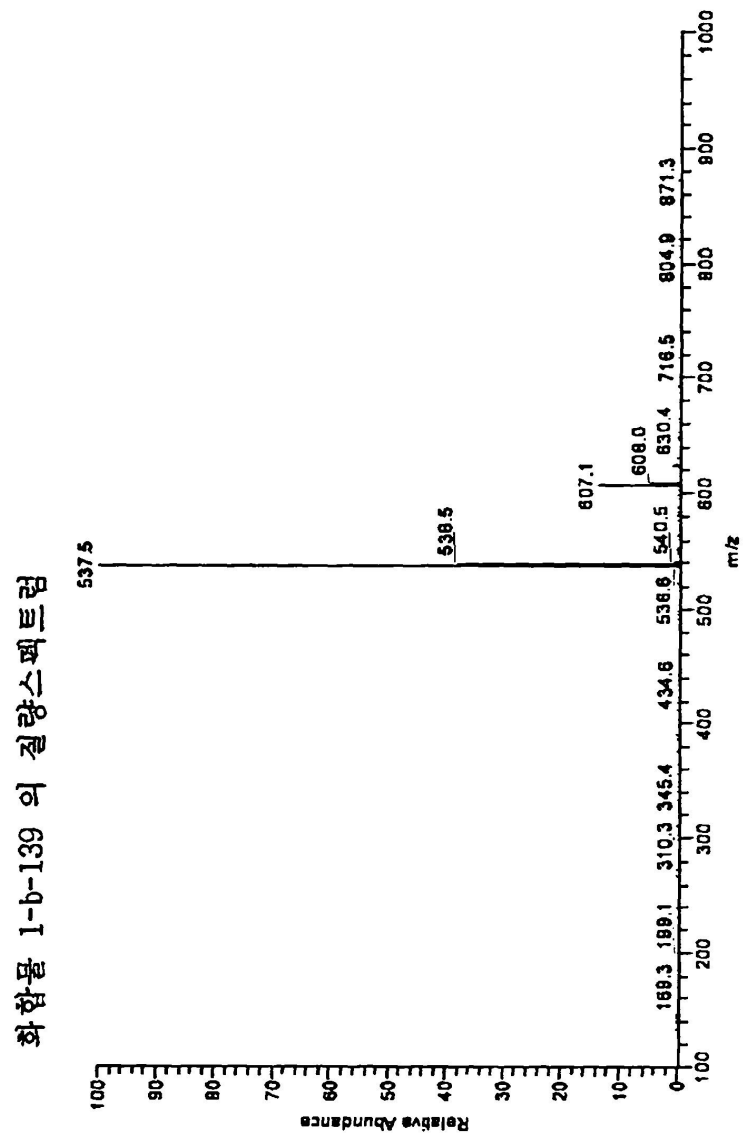


도면20

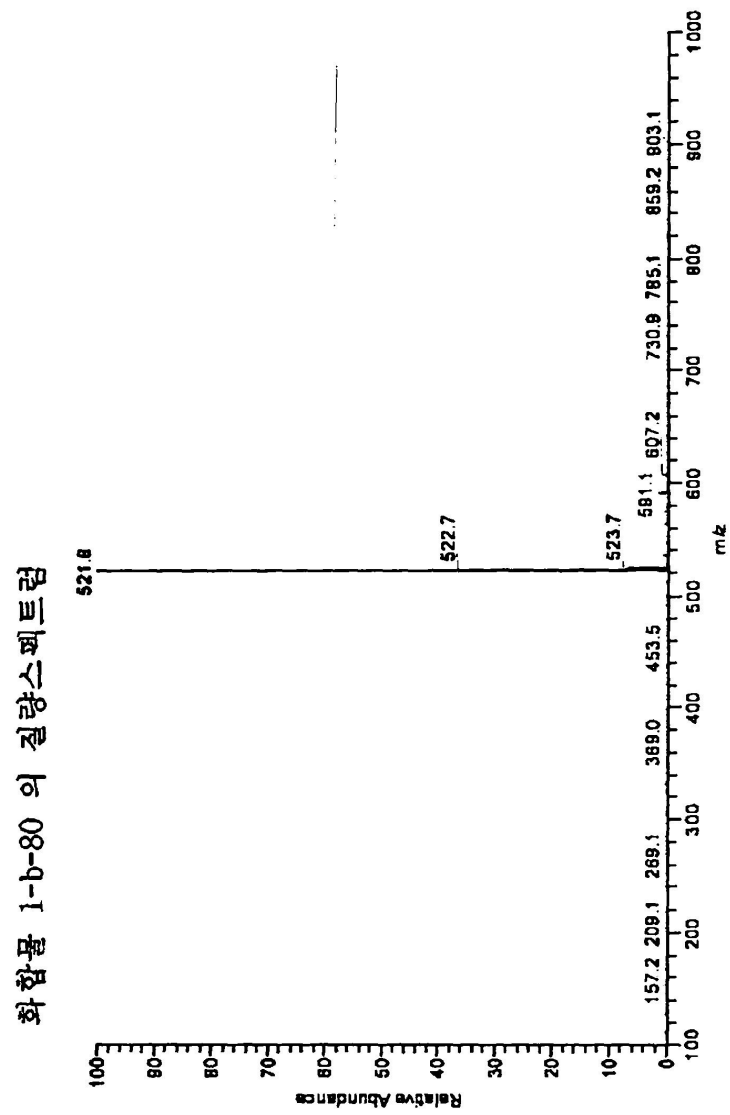
화합물 5-a-13 의 질량스펙트럼



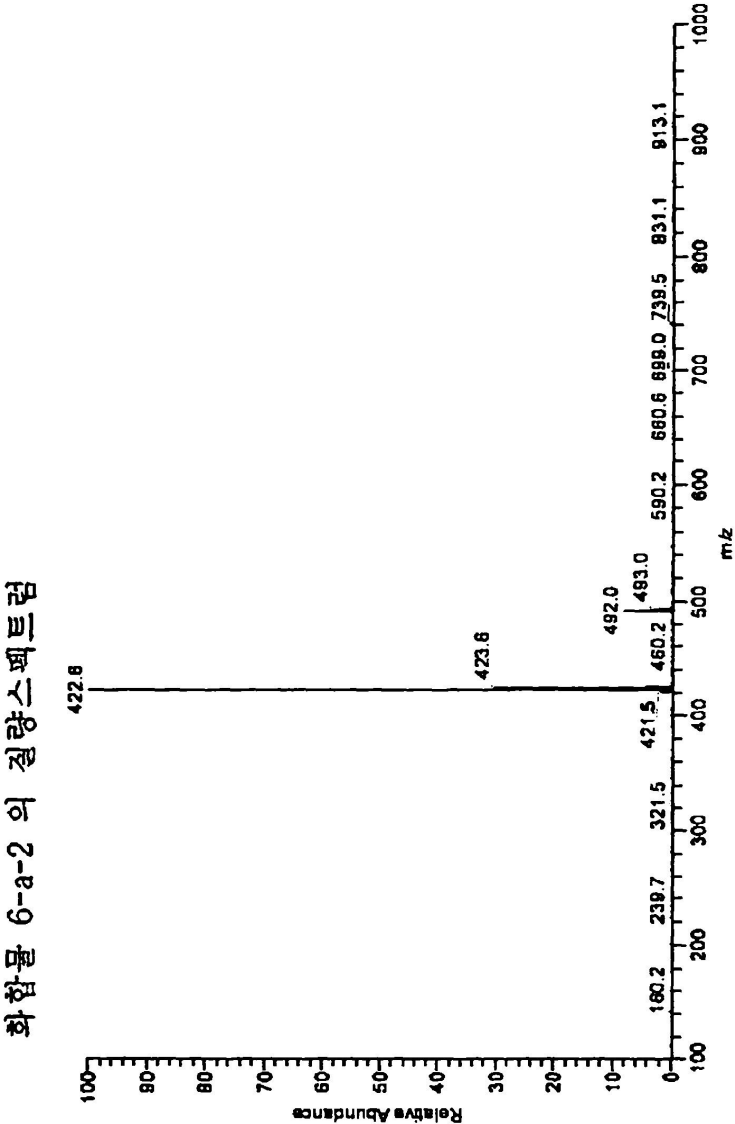
도면21



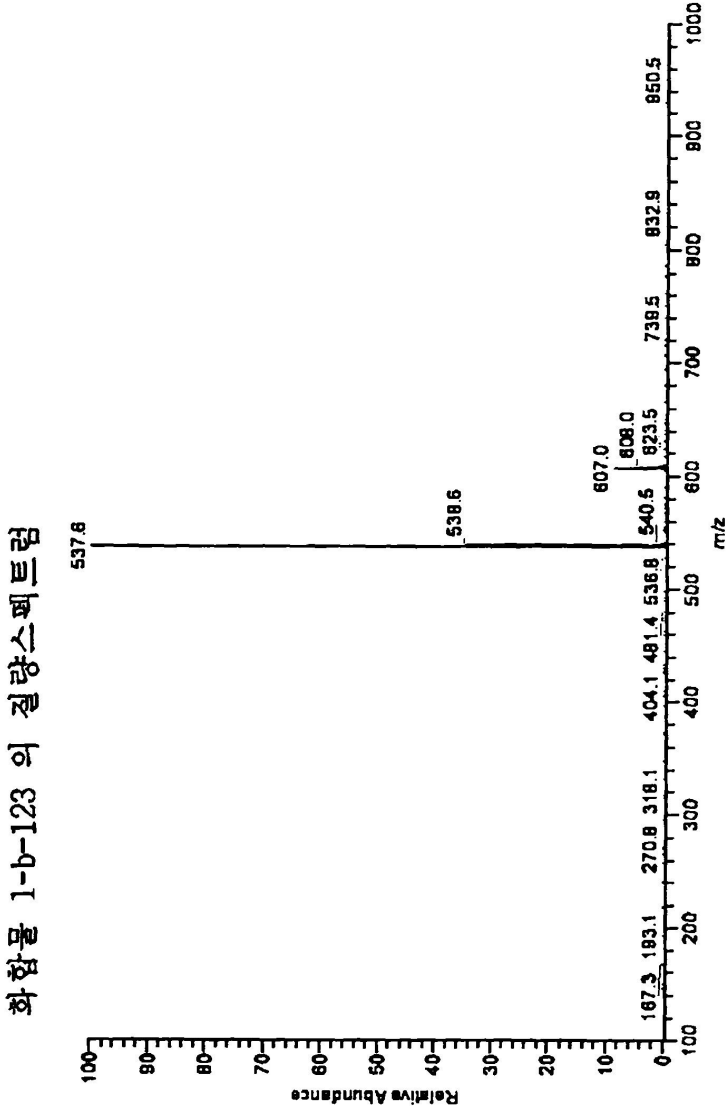
도면22



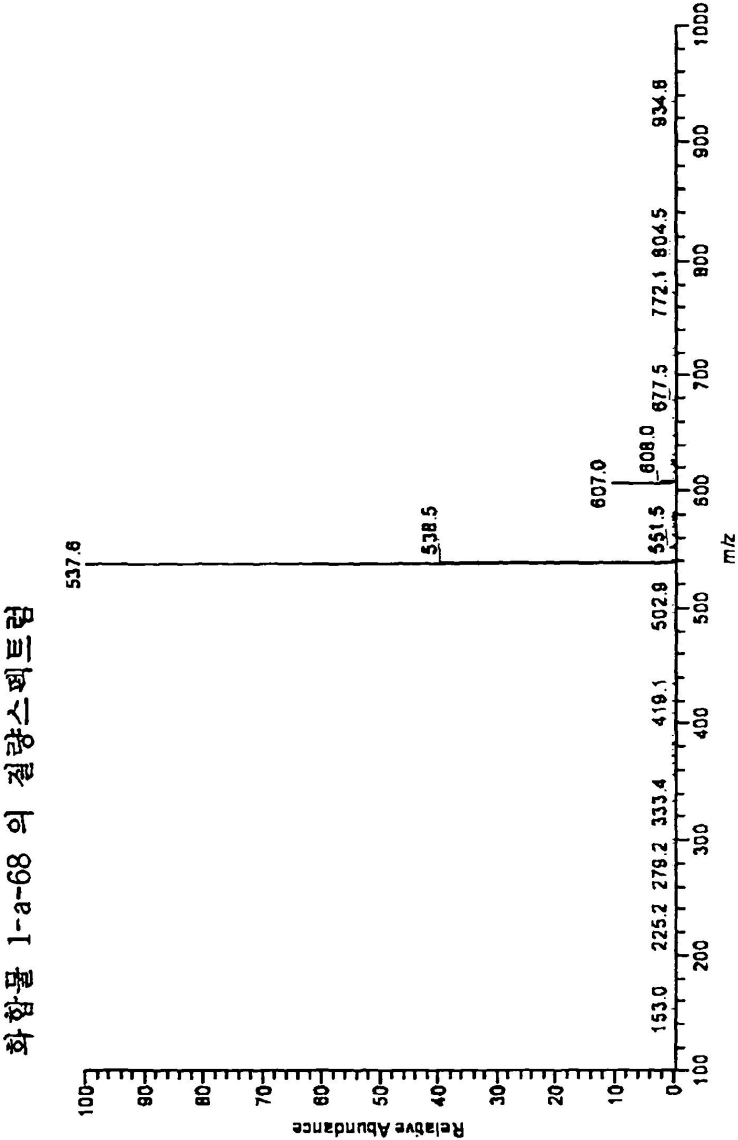
도면23



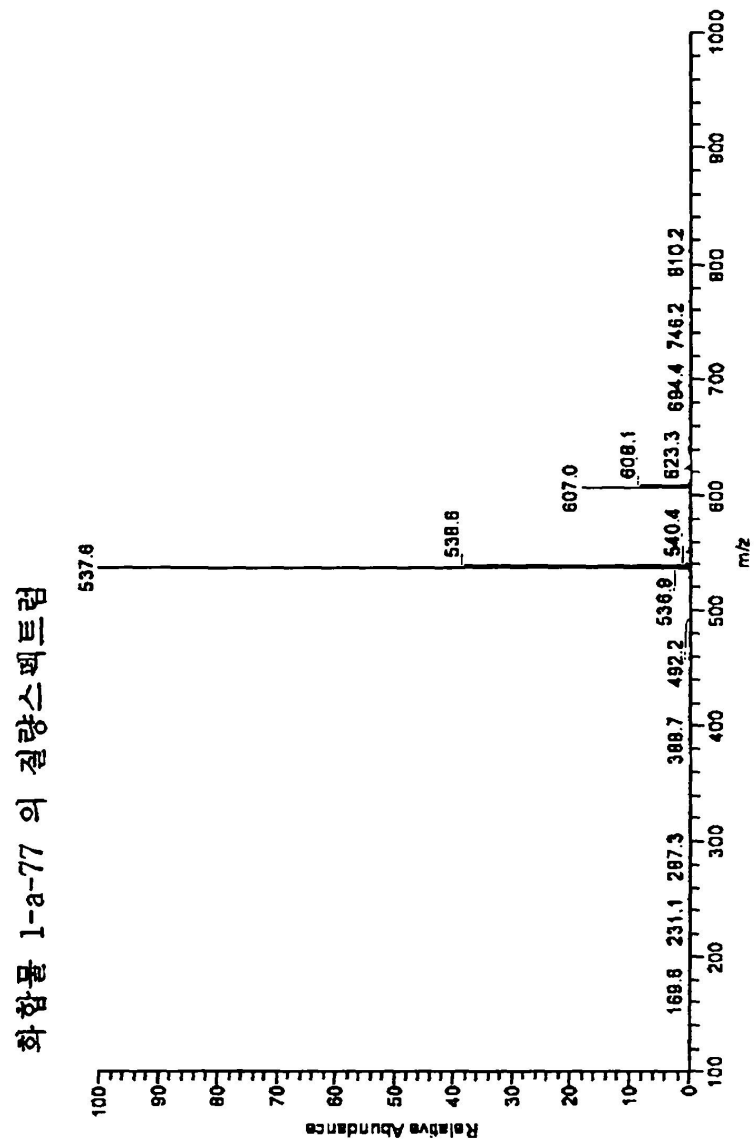
도면24



도면25

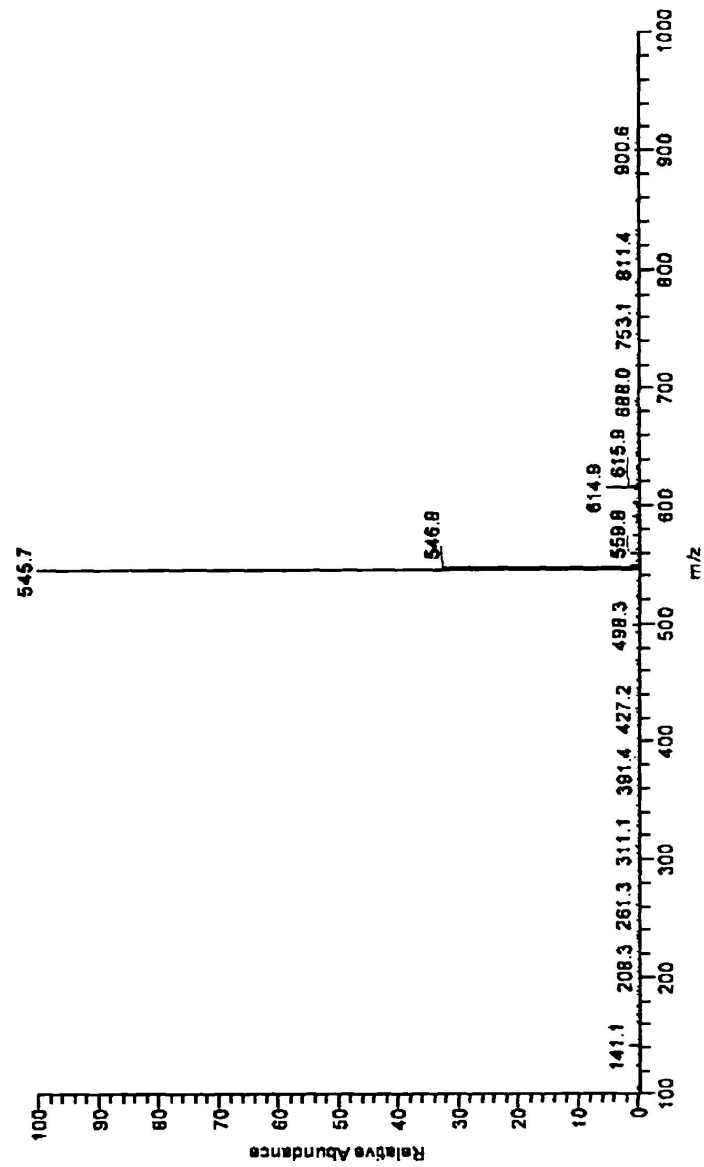


도면26



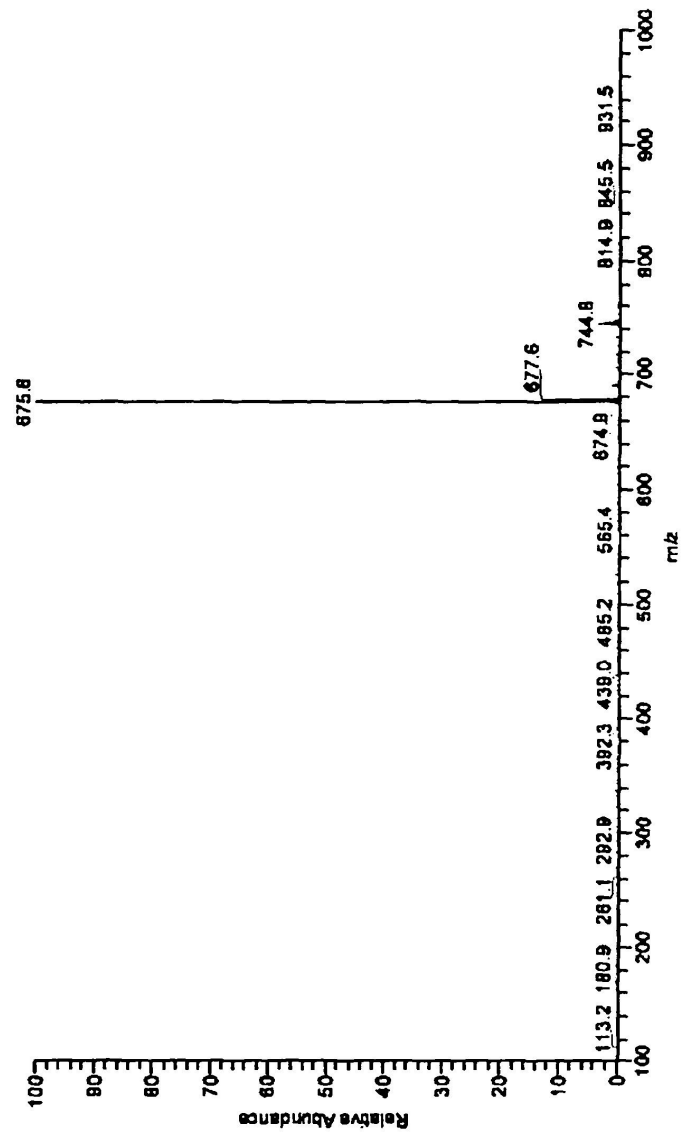
도면27

화합물 1-b-39 의 질량스펙트럼



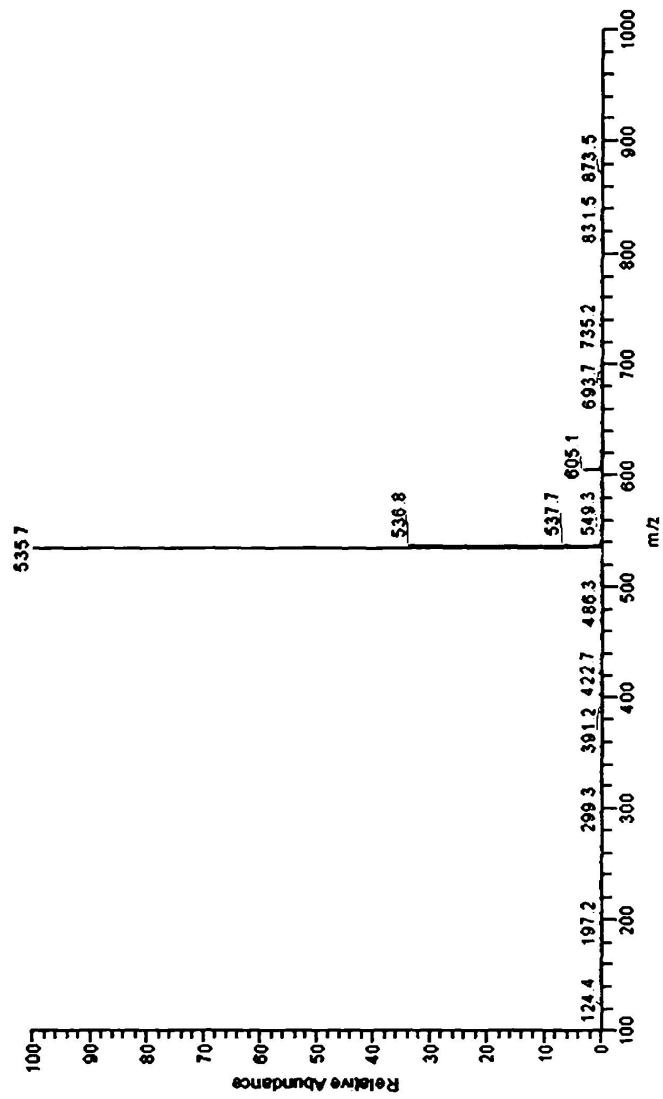
도면28

화합물 1-b-146 의 질량스펙트럼



도면29

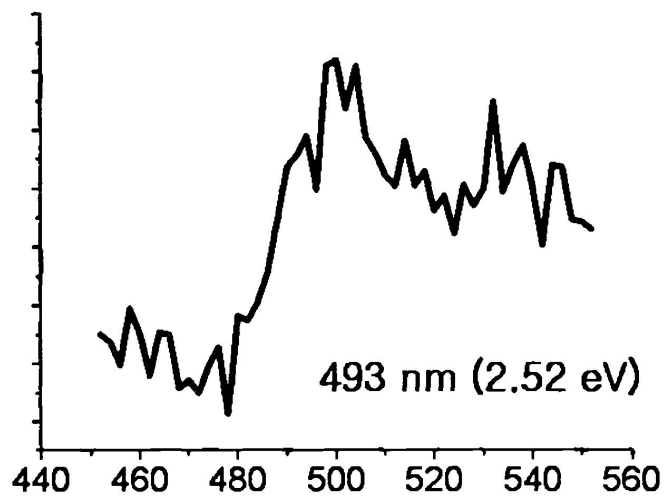
화합물 5-a-2 의 질량스펙트럼



도면30

화합물 6-a-18

(77K 에서 Methyl THF에서 측정한 인광 PL)



专利名称(译)	新的含氮杂环化合物和使用其的有机电子器件		
公开(公告)号	KR101052973B1	公开(公告)日	2011-07-29
申请号	KR1020097023115	申请日	2009-11-03
[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	LEE DONG HOON 이동훈 PARK TAE YOON 박태운 BAE JAE SOON 배재순 NAM HYUN 남현 JANG JUN GI 장준기 HONG SUNG KIL 홍성길		
发明人	이동훈 박태운 배재순 남현 장준기 홍성길		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D403/14		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D401/14 C07D401/04 Y02E10/549 C07D471/02 C09K2211/1044 H01L51/5012 H01L51/5048 H01L51/5056 H01L51/5072		
优先权	1020090006437 2009-11-03 KR 1020080108602 2008-11-03 KR		
其他公开文献	KR1020100062973A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供一种新型氮杂环衍生物和使用该衍生物的有机电子器件。根据本发明的有机电致发光器件 在效率，驱动电压和寿命方面表现出优异的特性。

