



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0082459
(43) 공개일자 2017년07월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 493/14 (2006.01)
C07D 495/14 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 493/14 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-0000068
(22) 출원일자 2017년01월02일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020160001566 2016년01월06일 대한민국(KR)

(71) 출원인
(주)피엔에이치테크
경기도 용인시 기흥구 동백중앙로16번길 16-25,
706호(중동, 대우프론티어밸리1단지)
(72) 발명자
현서용
경기도 용인시 수지구 손곡로 54, 201동 503호
정성욱
충청북도 청주시 서원구 산남로 23, 101동 701호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
정은열

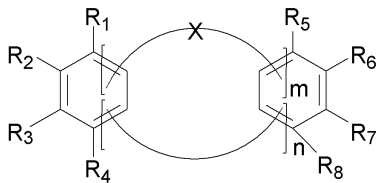
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

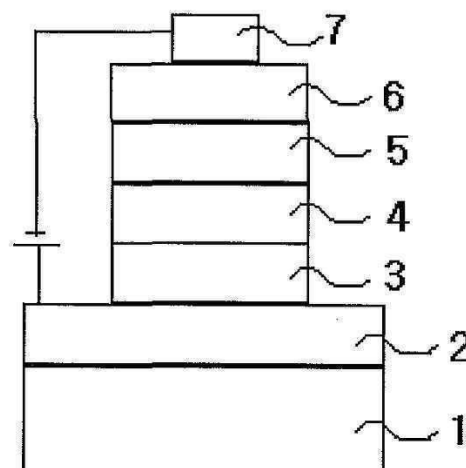
(57) 요약

본 발명은 유기전계발광소자에 채용되는 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 하기 [화학식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하고, 이를 발광층 내의 도판트 화합물로 채용하는 경우 구동전압, 휘도 및 장수명 등의 발광특성이 우수한 유기전계발광소자를 구현할 수 있다.

[화학식 1]



대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 495/14 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5048 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

김동원

충청북도 청주시 흥덕구 월명로23번길 10-7

이남진

충청북도 진천군 덕산면 함목3길 18-4, 그린빌 203호

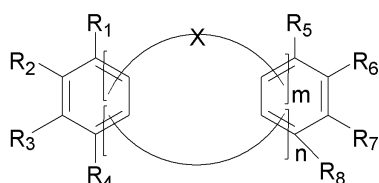
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

X는 NR, O, S, Se, SiRR 및 GeRR 중에서 선택되는 어느 하나이고, n 및 m은 각각 1 내지 3의 정수이며,

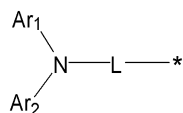
R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 아미노기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 실릴기 중에서 선택되며,

상기 R₁ 내지 R₈은 서로 또는 인접한 치환기와 연결되어 지환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, NR, SiRR 및 GeRR 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있고,

상기 R은 상기 R₁ 내지 R₈의 정의와 동일하며,

상기 R₁ 내지 R₈ 중 어느 하나는 하기 [구조식 1]로 표시되고,

[구조식 1]



상기 [구조식 1]에서,

L은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되며,

Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의

시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar_1 과 Ar_2 는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, NR, SiRR 및 GeRR (R은 상기 R_1 내지 R_8 의 정의와 동일함) 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 3

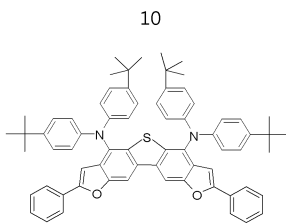
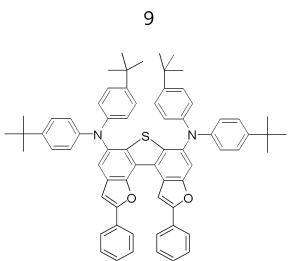
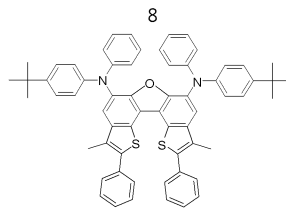
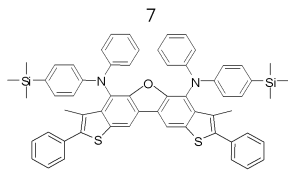
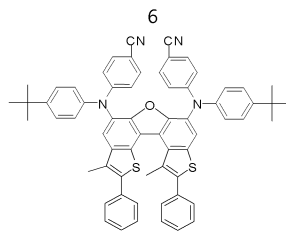
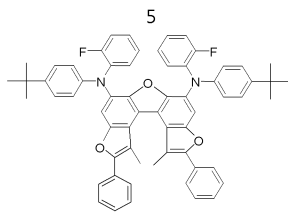
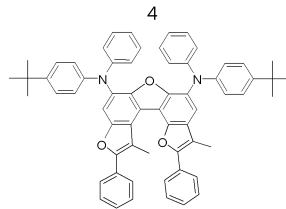
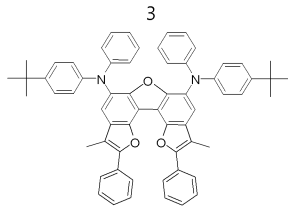
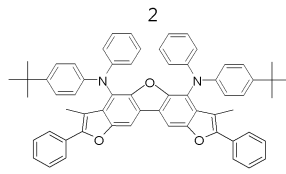
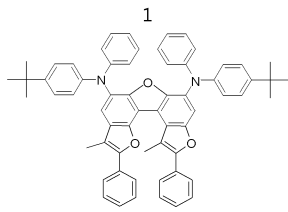
제1항에 있어서,

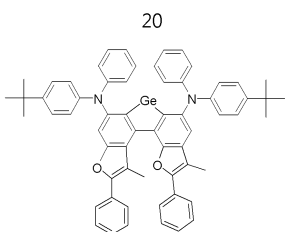
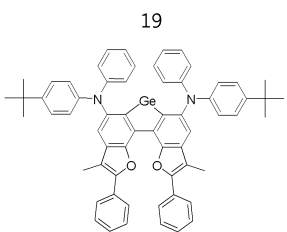
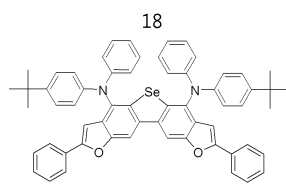
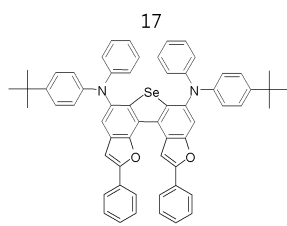
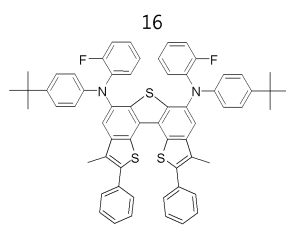
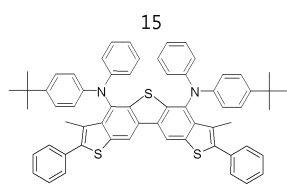
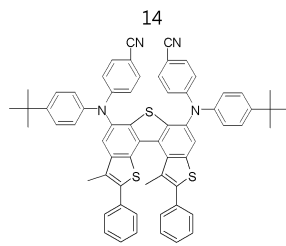
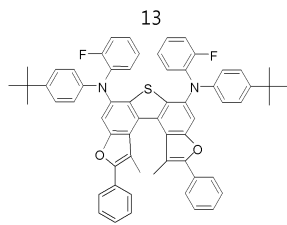
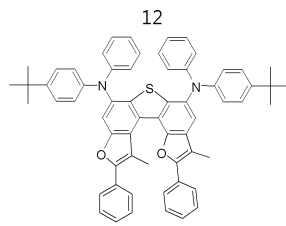
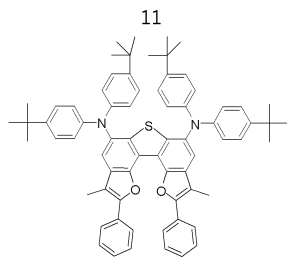
상기 R, R_1 내지 R_8 , L, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 중수소, 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 실릴기, 아미노기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기 및 할로젠기 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

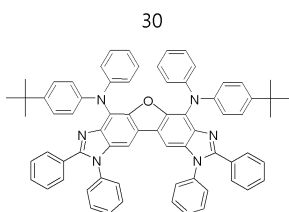
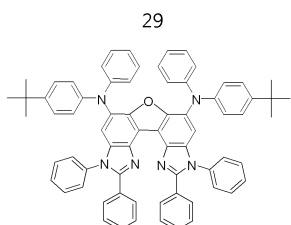
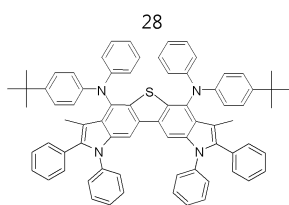
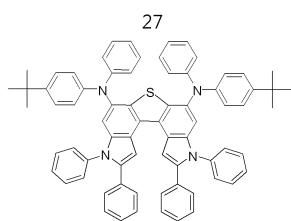
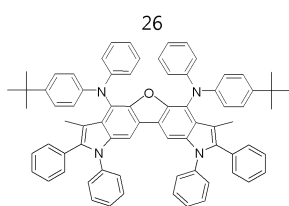
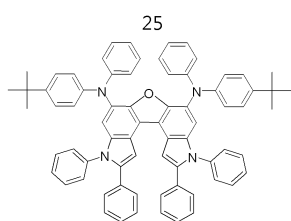
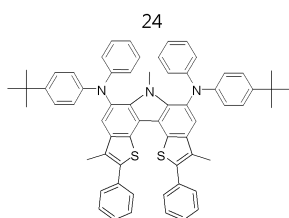
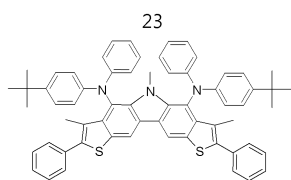
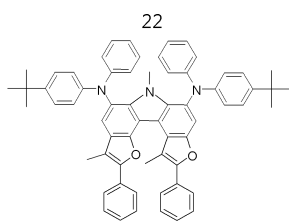
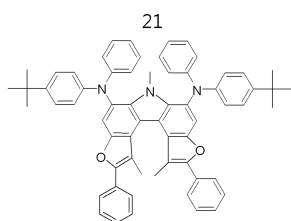
청구항 4

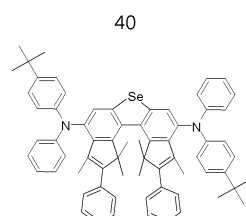
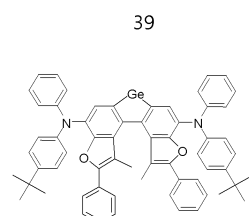
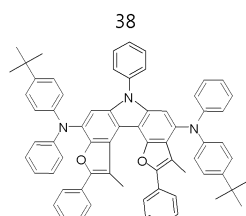
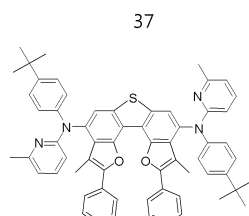
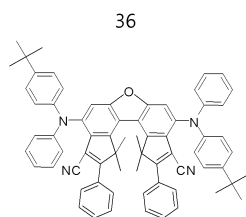
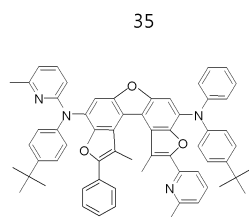
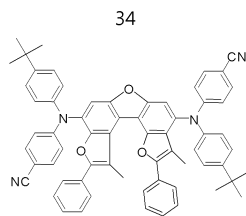
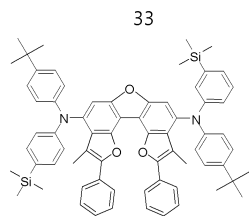
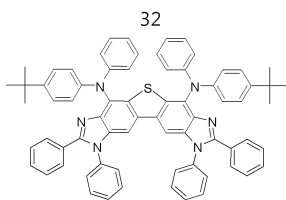
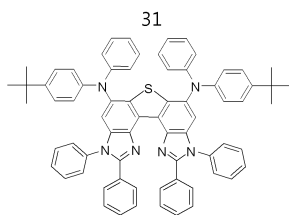
제1항에 있어서,

상기 [화학식 1]은 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 387] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

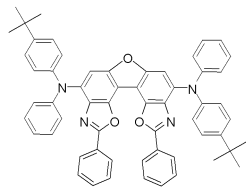




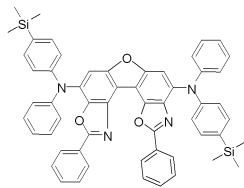




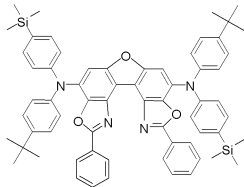
41



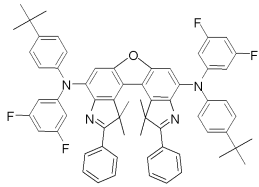
42



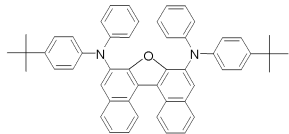
43



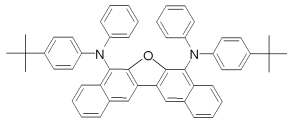
44



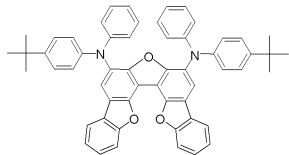
45



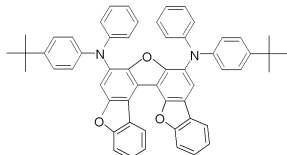
46



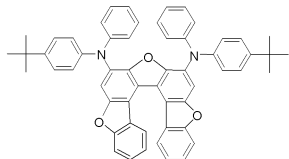
47



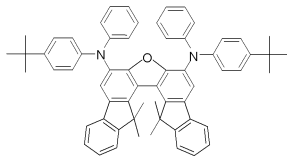
48



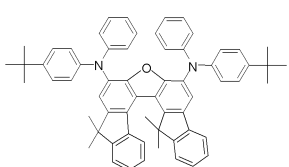
49



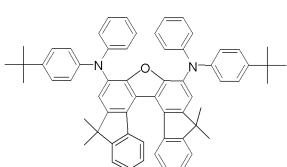
50

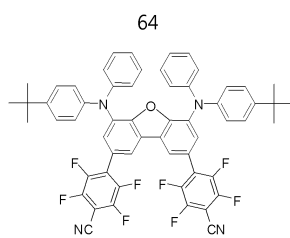
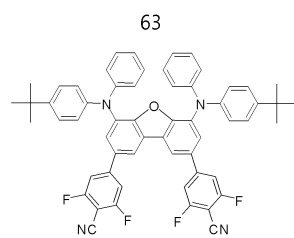
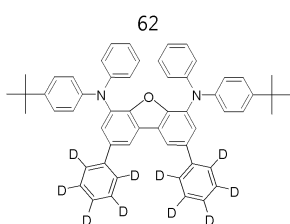
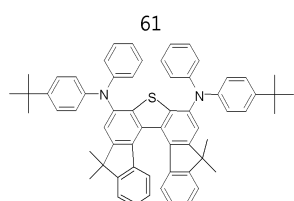
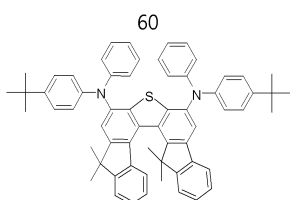
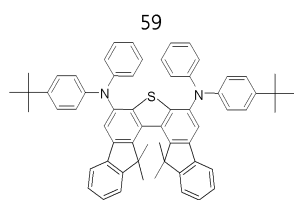
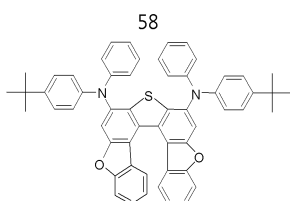
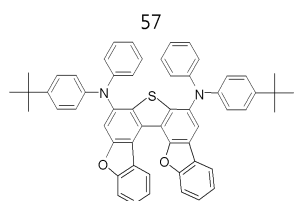
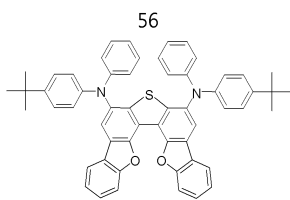
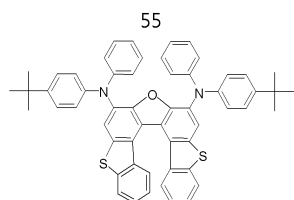
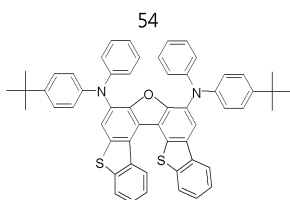
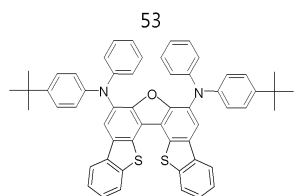


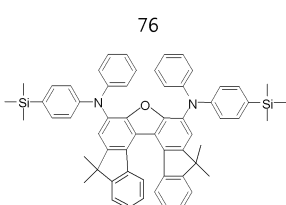
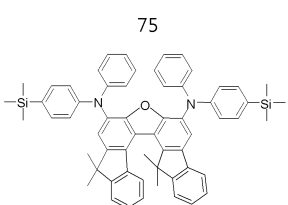
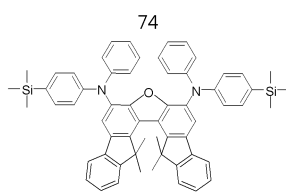
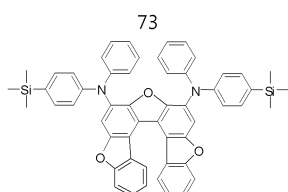
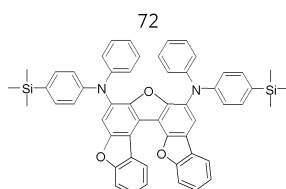
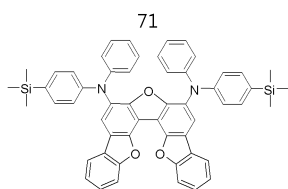
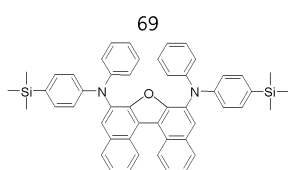
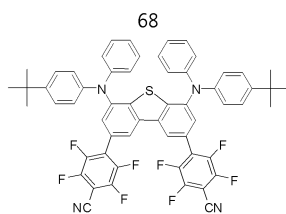
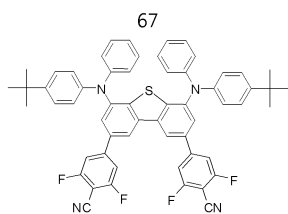
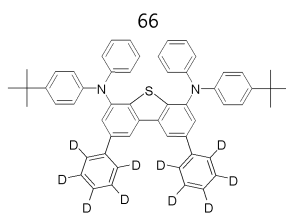
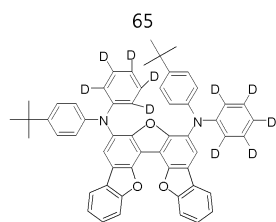
51

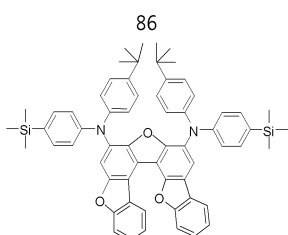
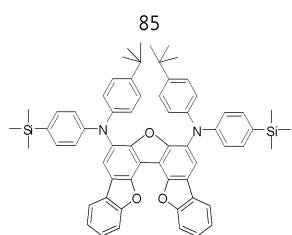
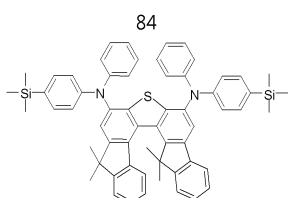
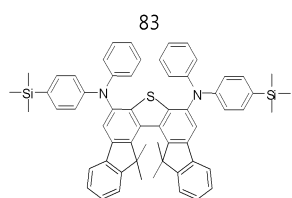
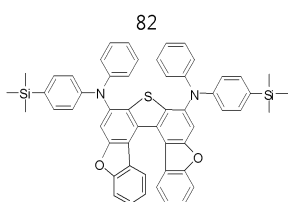
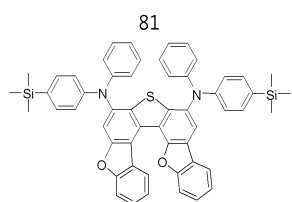
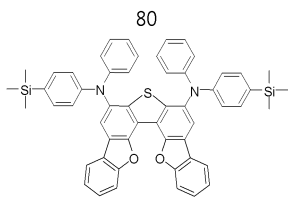
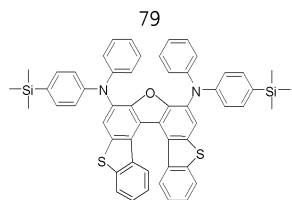
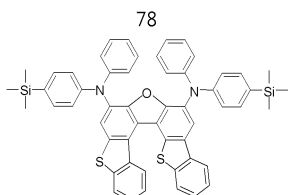
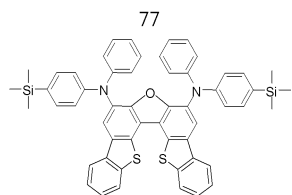


52



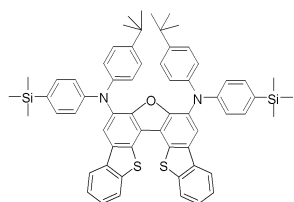




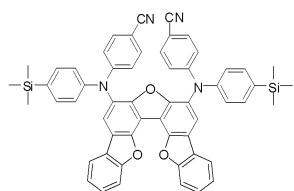


87

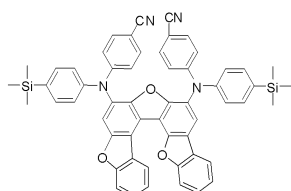
88



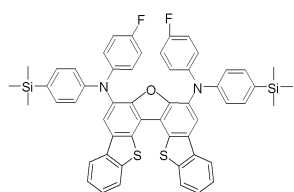
89



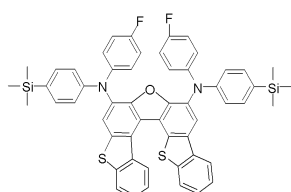
90



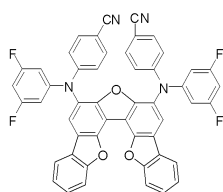
91



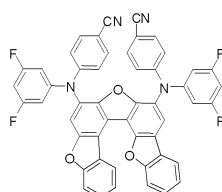
92



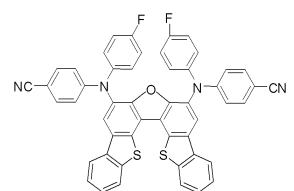
93



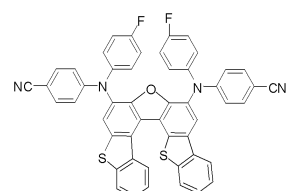
94



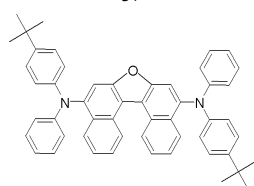
95



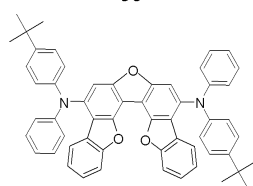
96



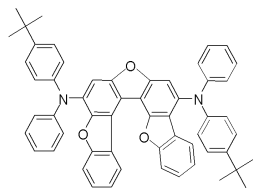
97



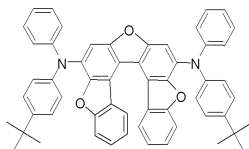
98



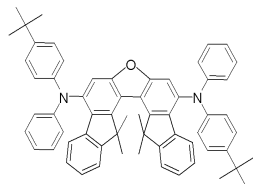
99



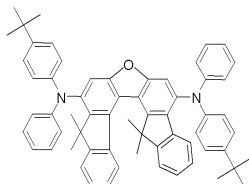
100



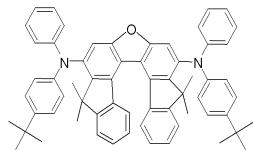
101



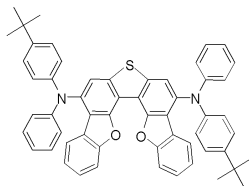
102



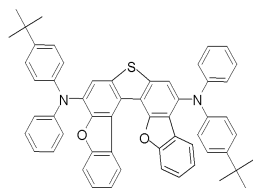
103



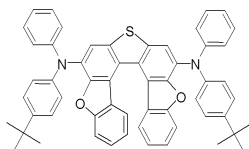
104



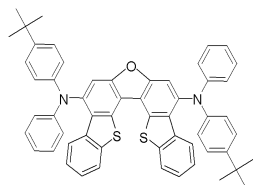
105



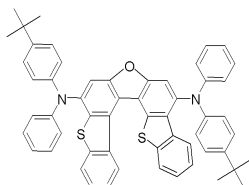
106



107

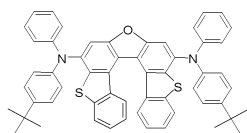


108

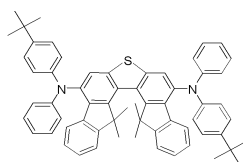
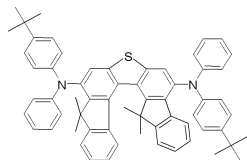


109

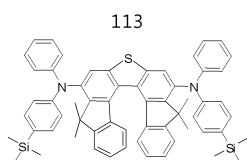
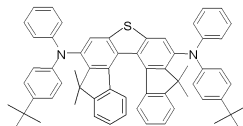
110



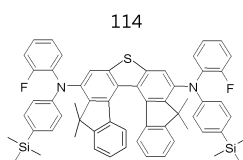
111



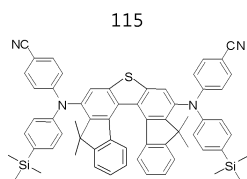
112



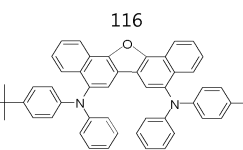
113



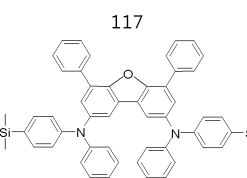
114



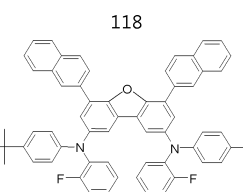
115



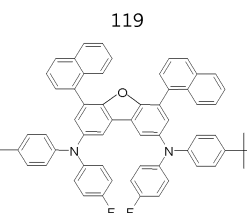
116



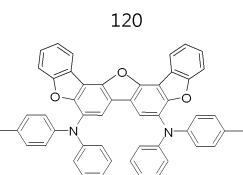
117



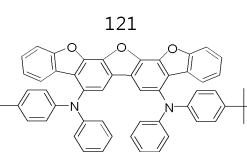
118



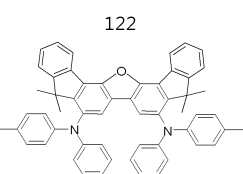
119



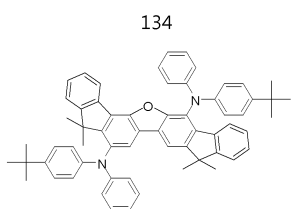
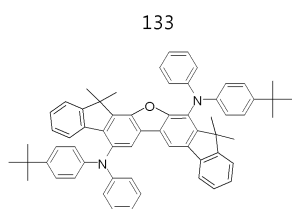
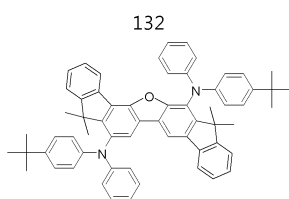
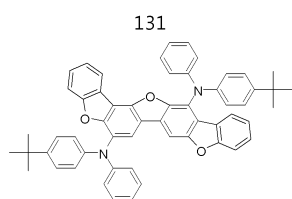
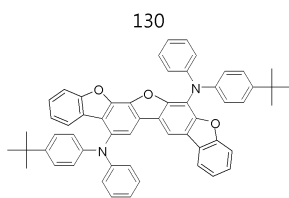
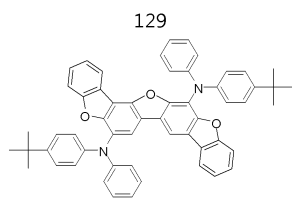
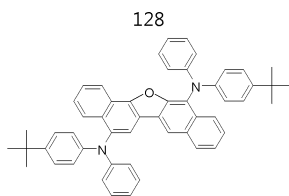
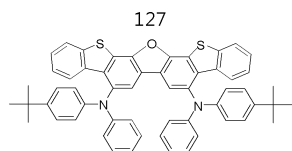
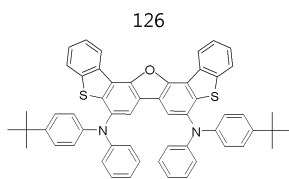
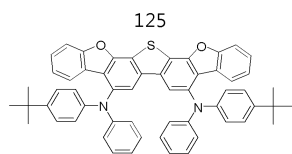
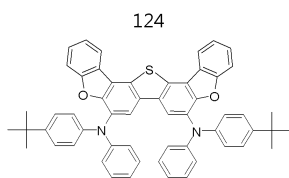
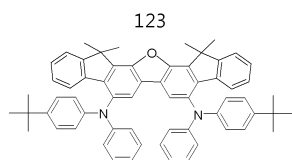
120

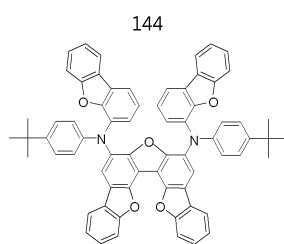
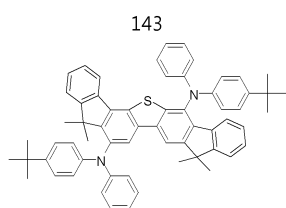
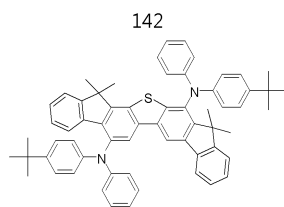
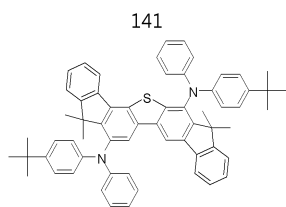
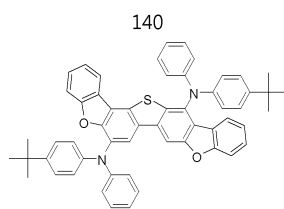
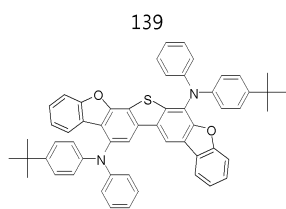
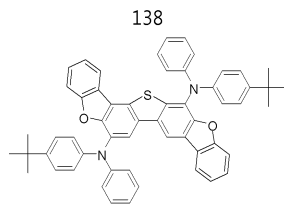
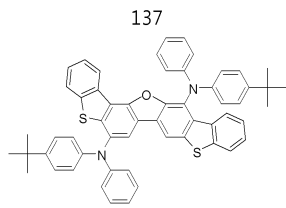
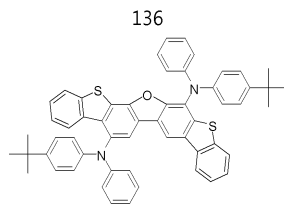
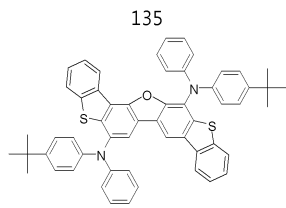


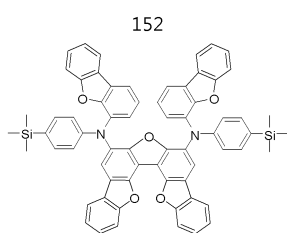
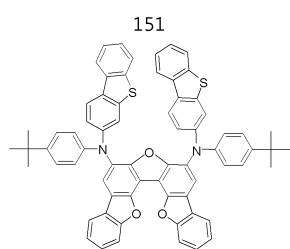
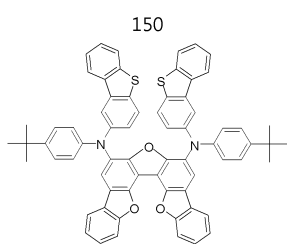
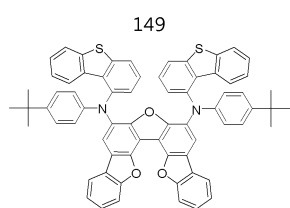
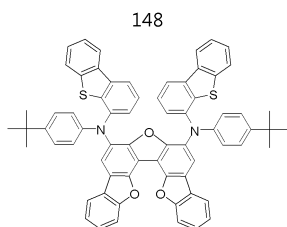
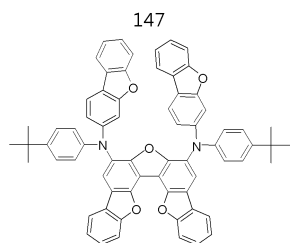
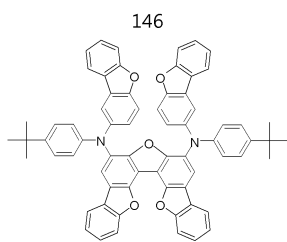
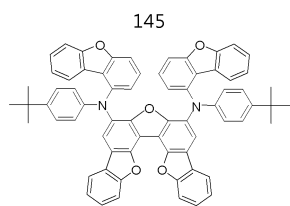
121



122

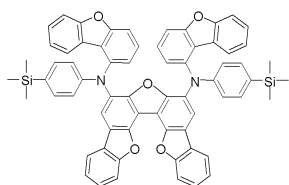




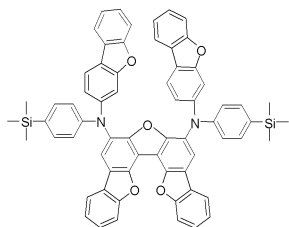


153

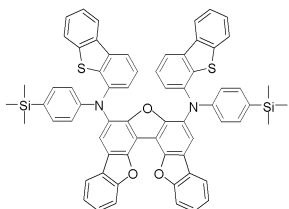
154



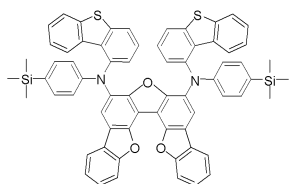
155



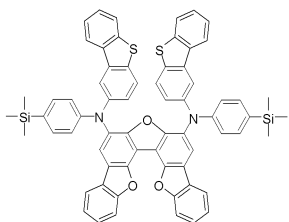
156



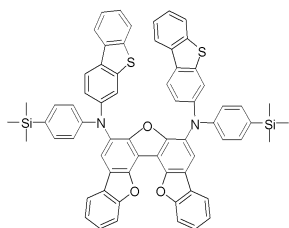
157



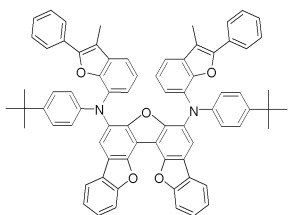
158



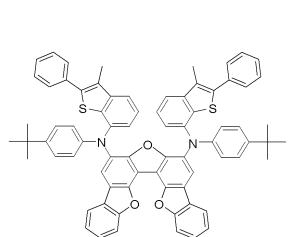
159



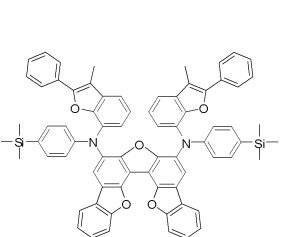
160

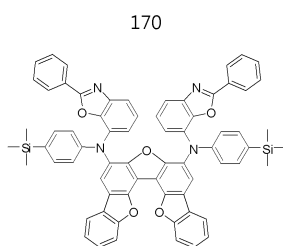
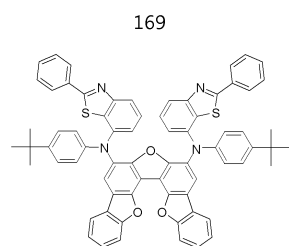
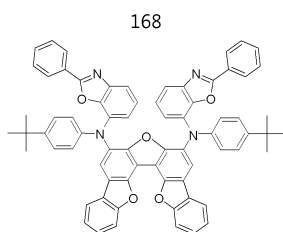
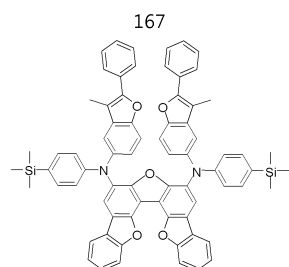
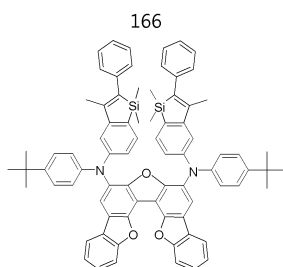
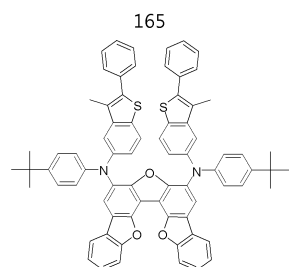
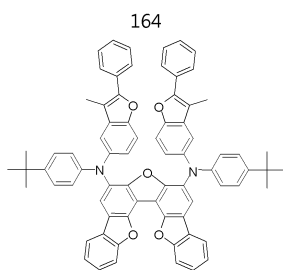
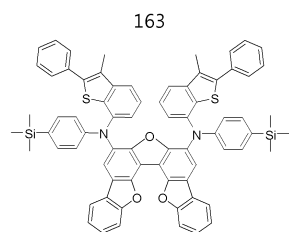


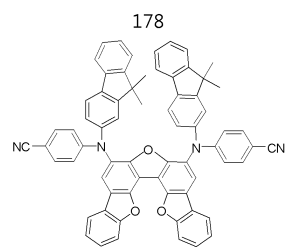
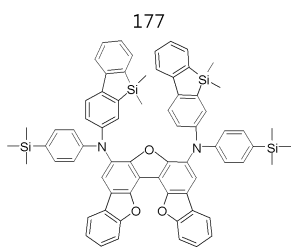
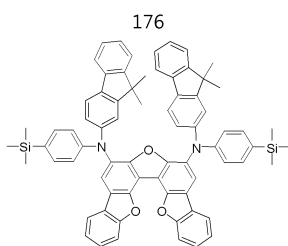
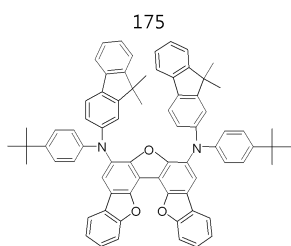
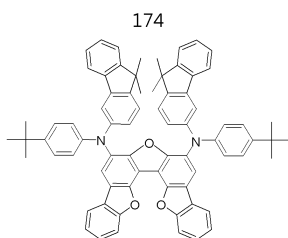
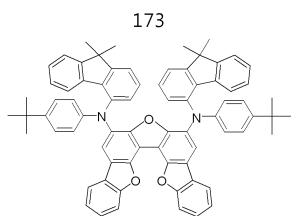
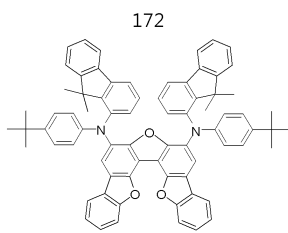
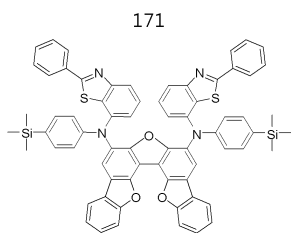
161



162

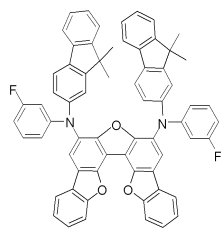




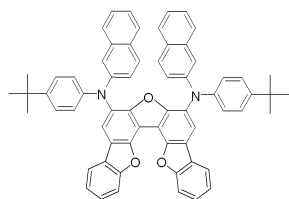


179

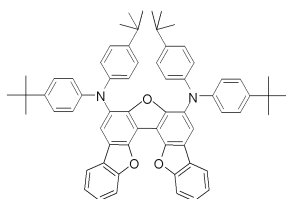
180



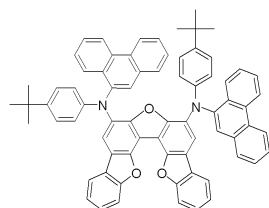
181



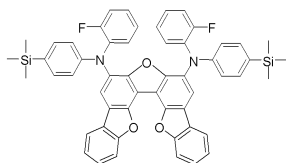
182



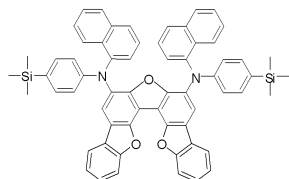
183



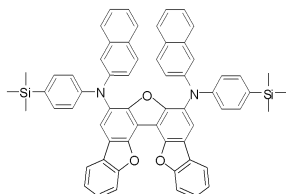
184



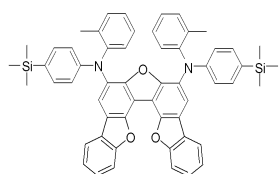
185



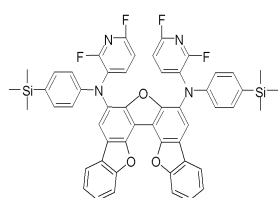
186



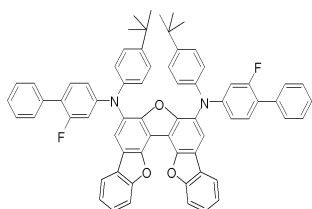
187



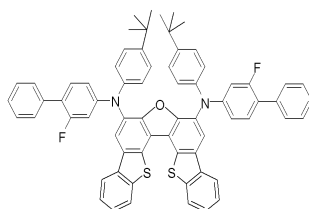
188

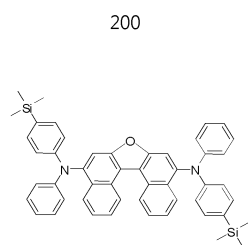
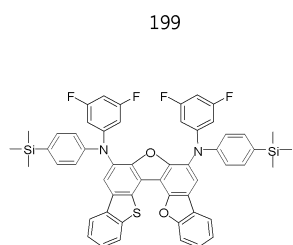
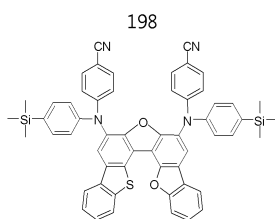
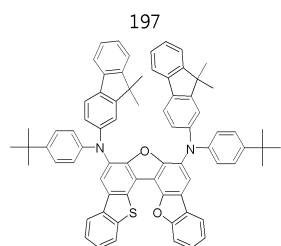
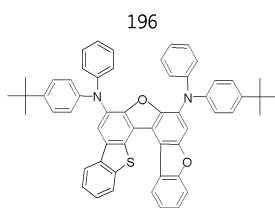
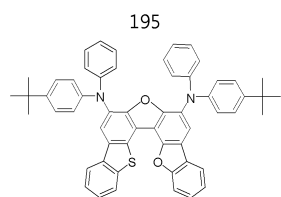
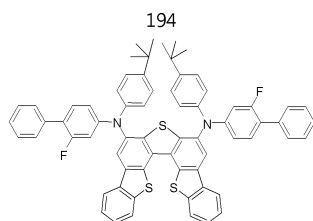
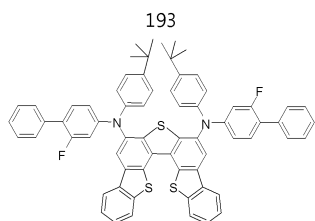
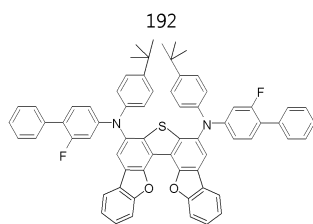
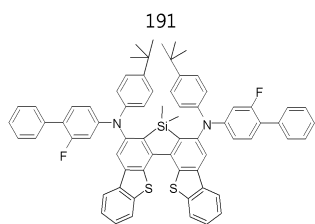


189

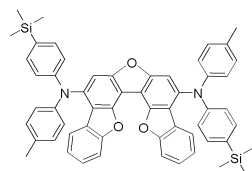


190

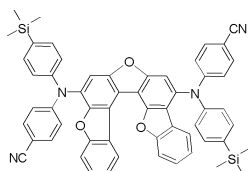




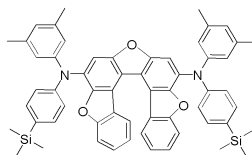
201



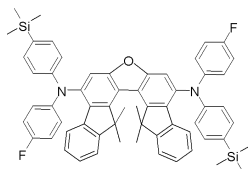
202



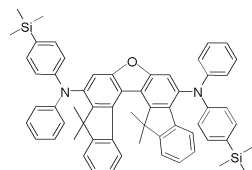
203



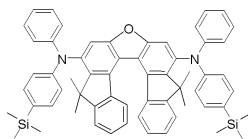
204



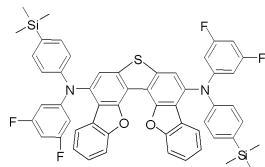
205



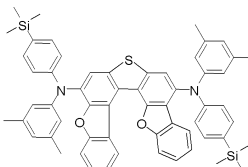
206



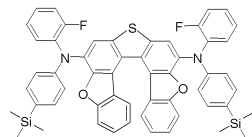
207



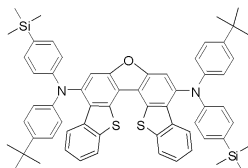
208



209

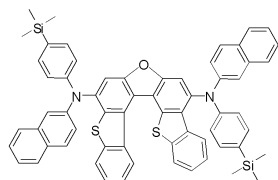


210

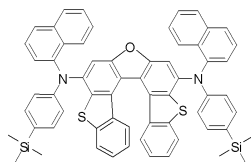


211

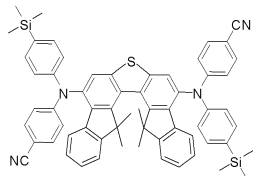
212



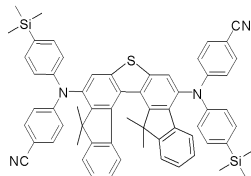
213



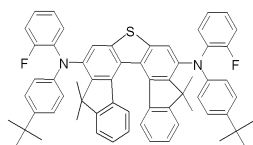
214



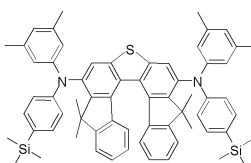
215



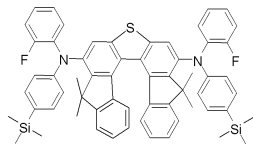
216



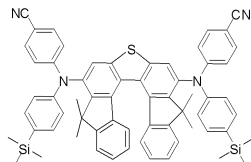
217



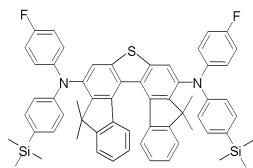
218



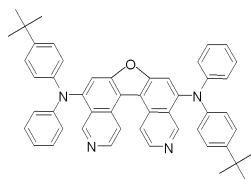
219



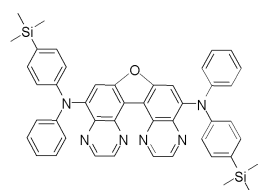
220



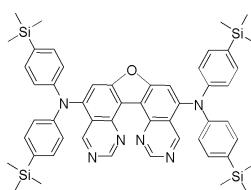
221



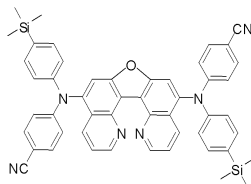
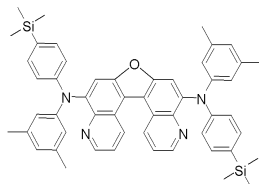
222



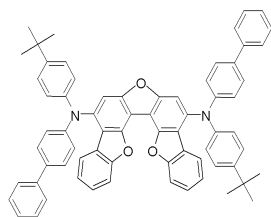
223



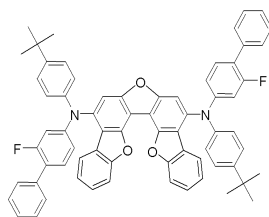
224



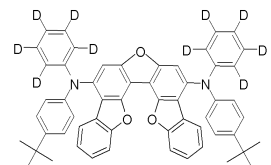
225



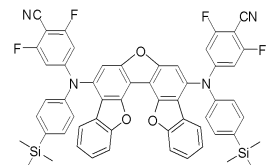
226



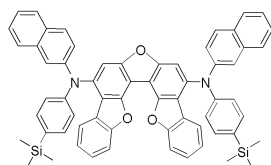
227



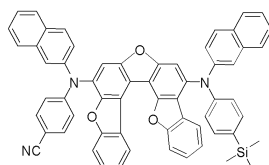
228



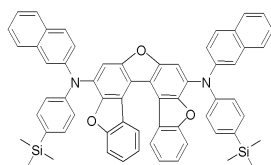
229



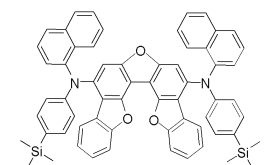
230



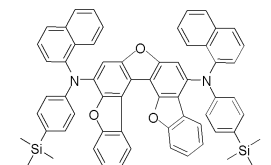
231



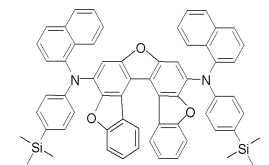
232



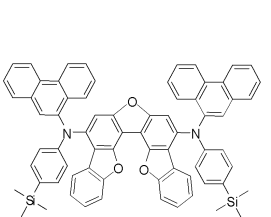
233



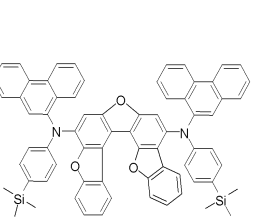
234

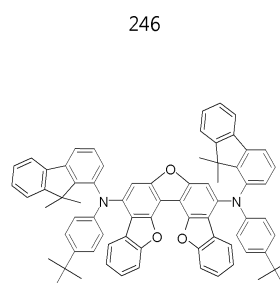
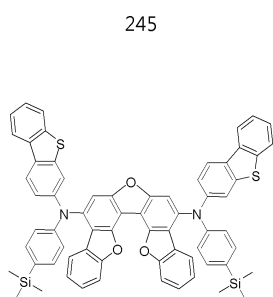
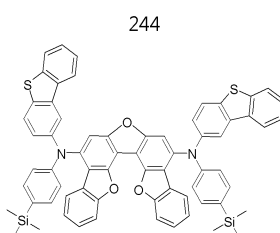
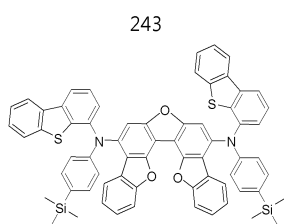
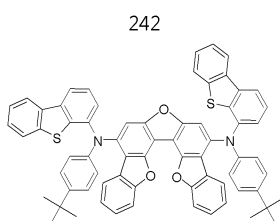
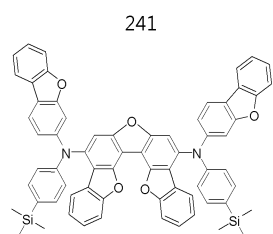
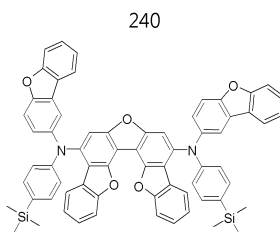
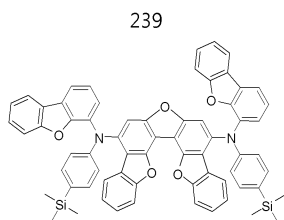
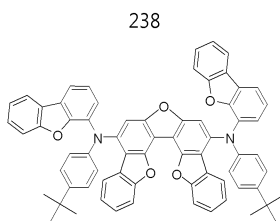
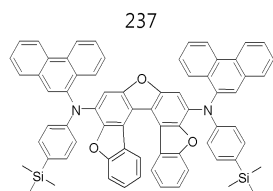


235

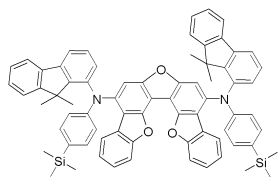


236

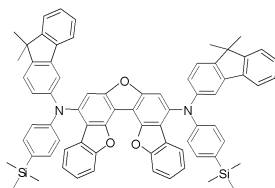




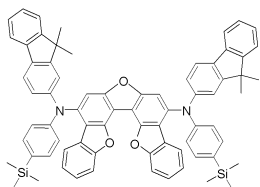
247



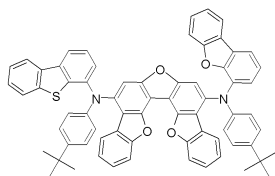
248



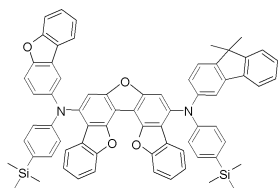
249



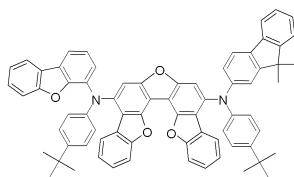
250



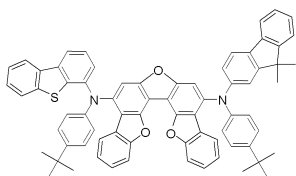
251



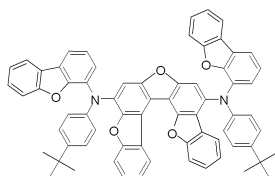
252



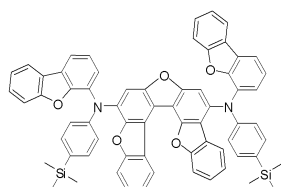
253



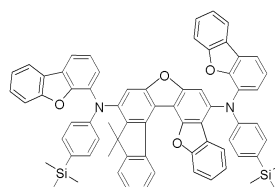
254



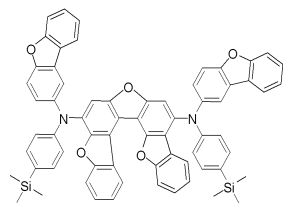
255



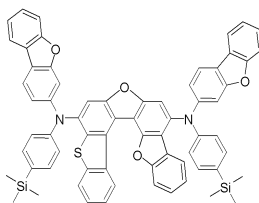
256



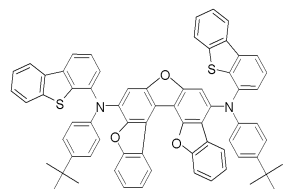
257



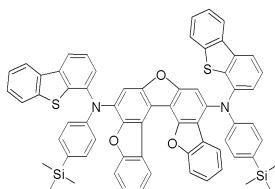
258



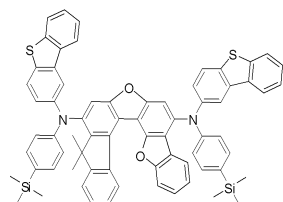
259



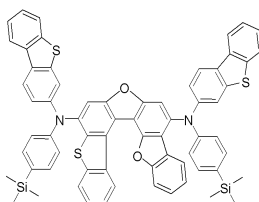
260



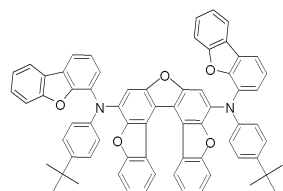
261



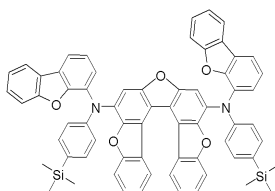
262



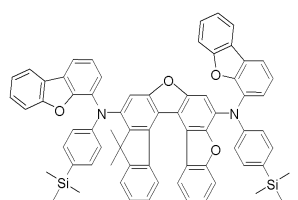
263



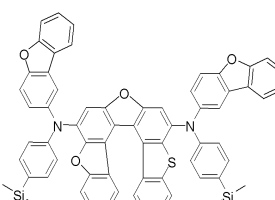
264



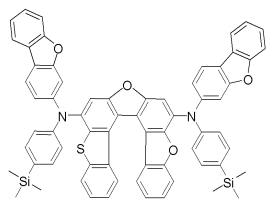
265



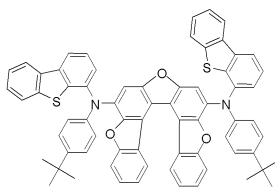
266



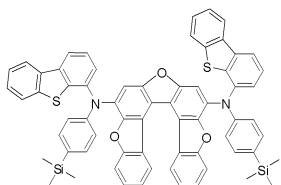
267



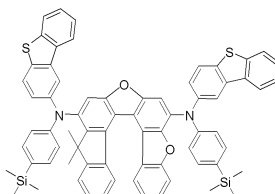
268



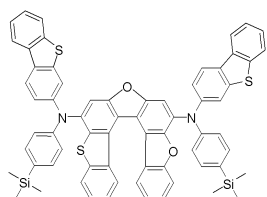
269



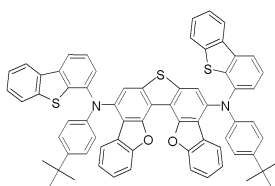
270



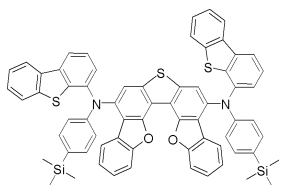
271



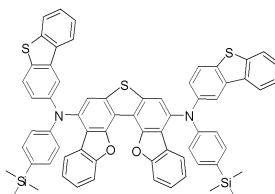
272



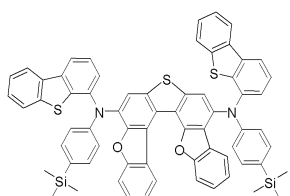
273



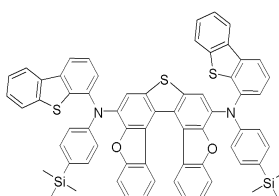
274

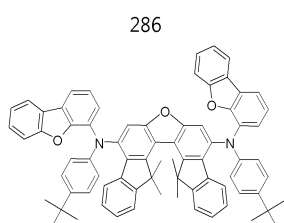
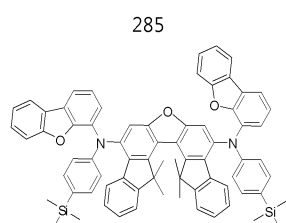
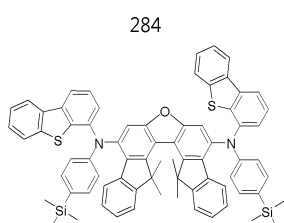
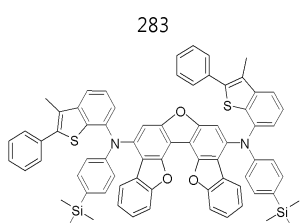
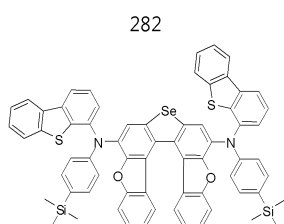
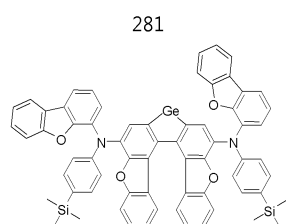
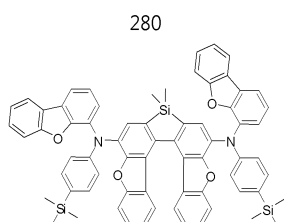
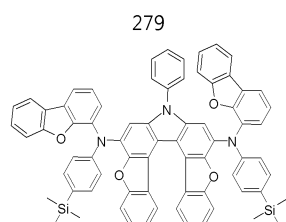
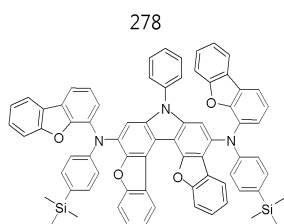
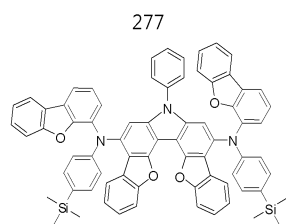


275

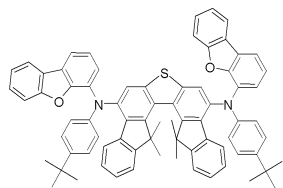


276

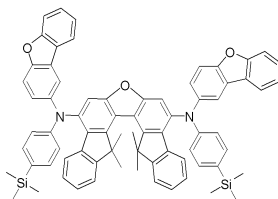




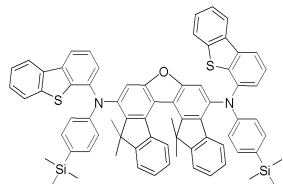
287



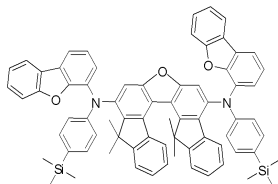
288



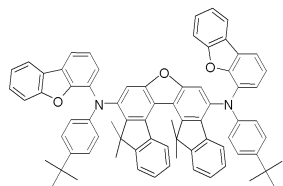
289



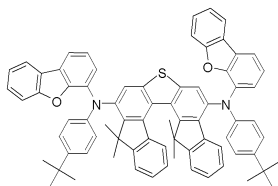
290



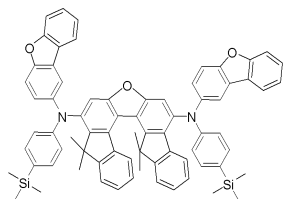
291



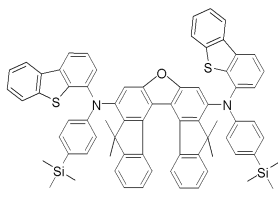
292



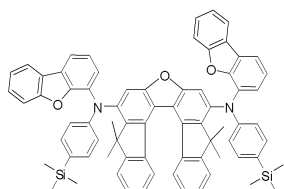
293



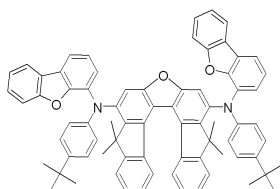
294



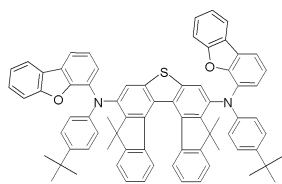
295



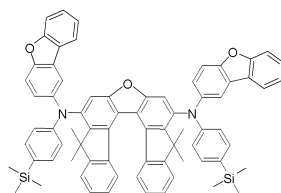
296



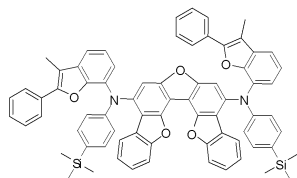
297



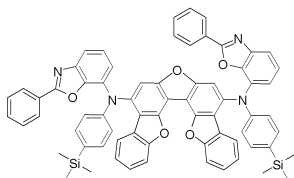
298



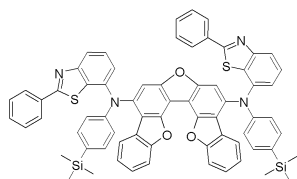
299



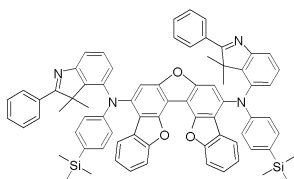
300



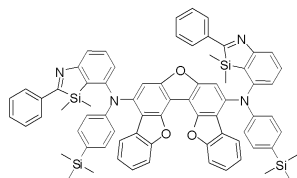
301



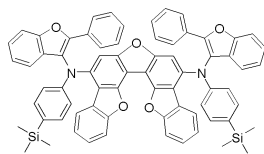
302



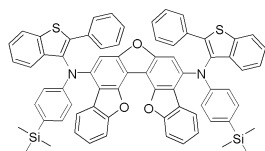
303



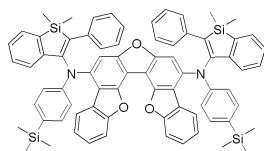
304



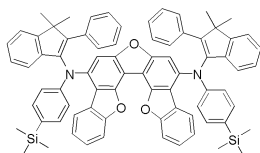
305



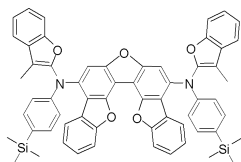
306



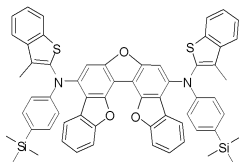
307



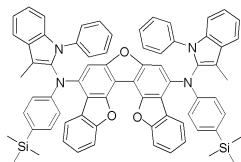
308



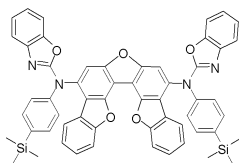
309



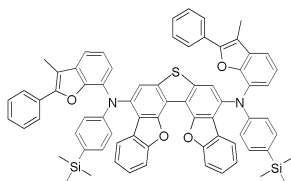
310



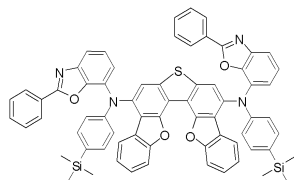
311



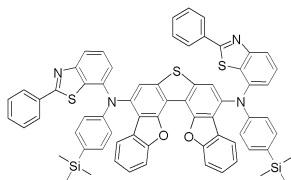
312



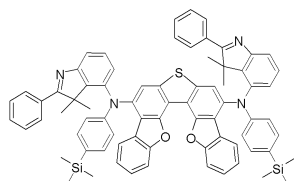
313



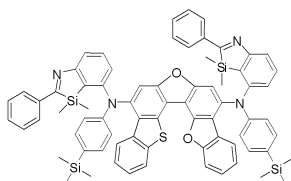
314



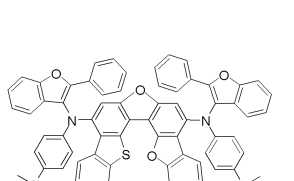
315



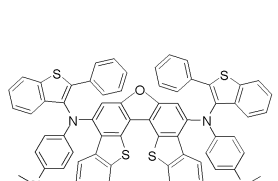
316



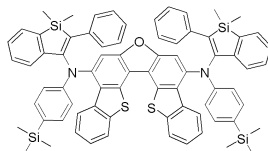
317



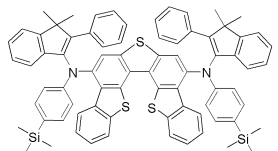
318

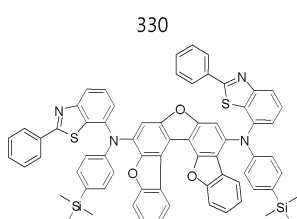
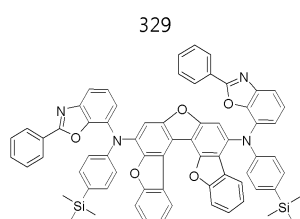
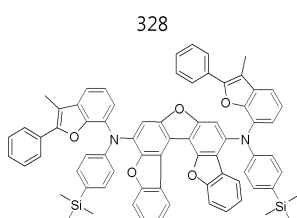
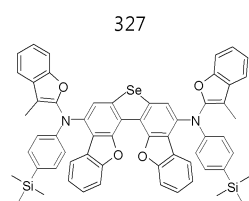
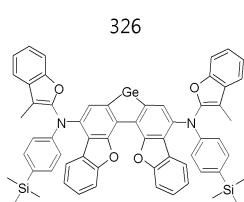
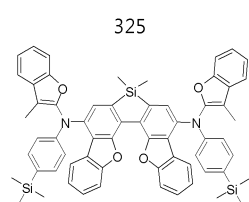
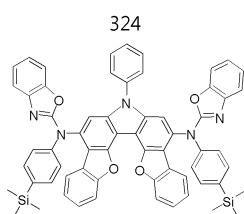
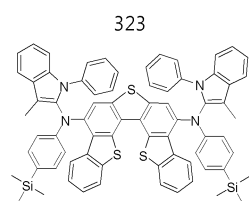
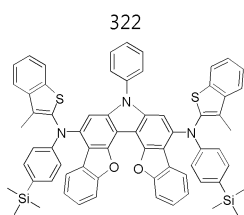
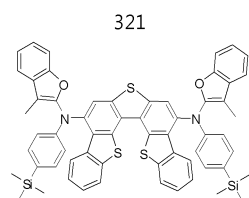


319



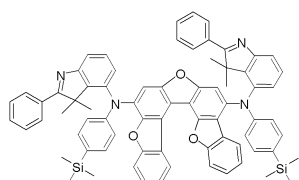
320



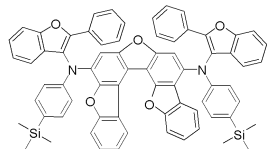


331

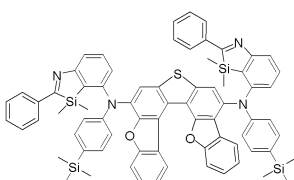
332



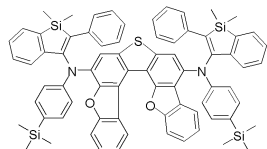
333



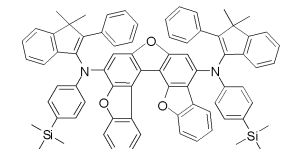
334



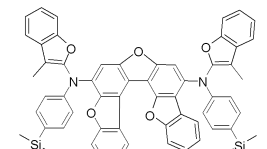
335



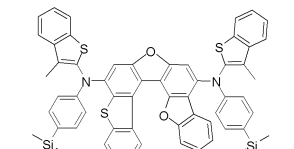
336



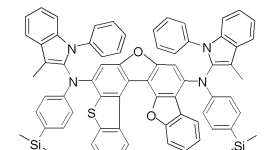
337



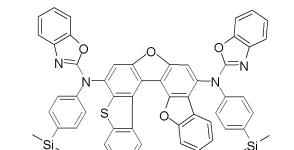
338



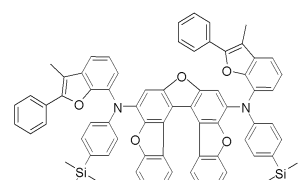
339



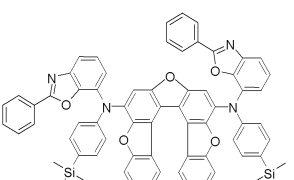
340



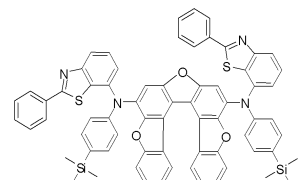
341



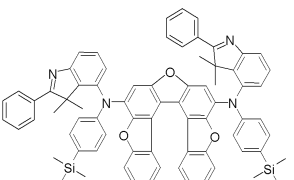
342

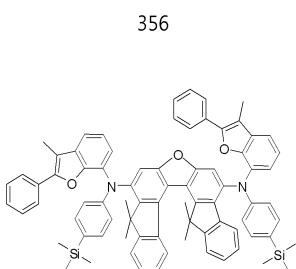
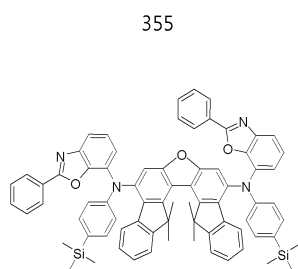
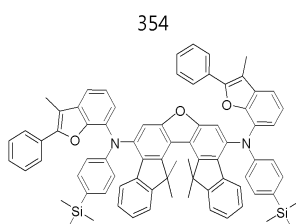
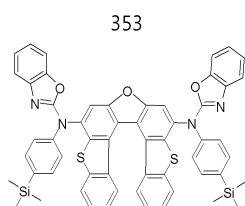
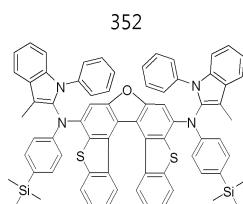
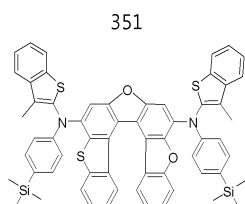
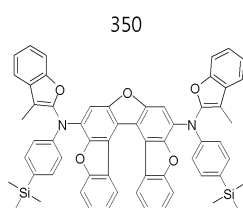
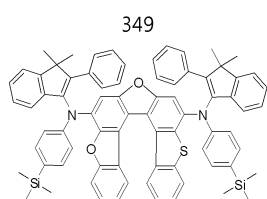
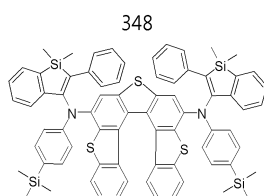
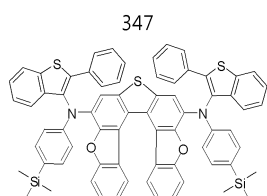
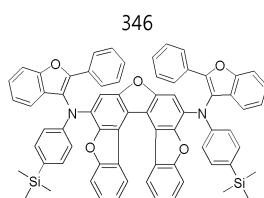
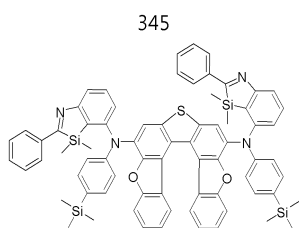


343

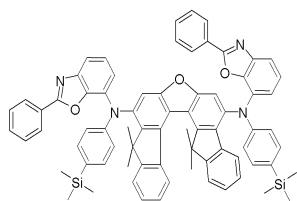


344

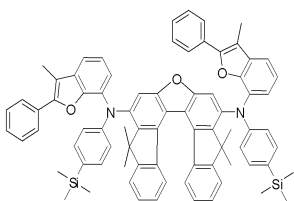




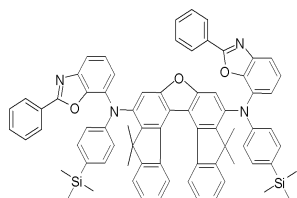
357



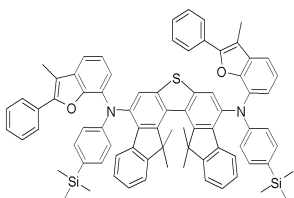
358



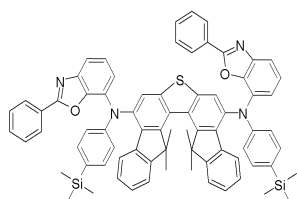
359



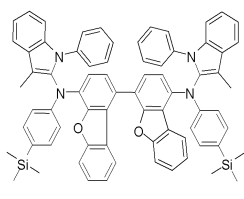
360



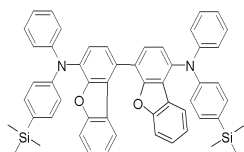
361



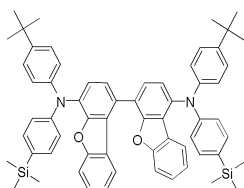
362



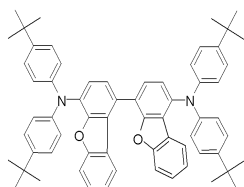
363



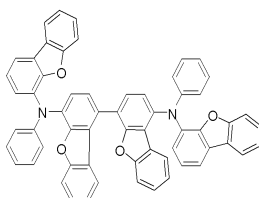
364



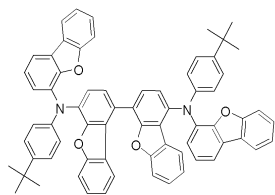
365



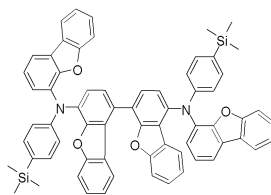
366



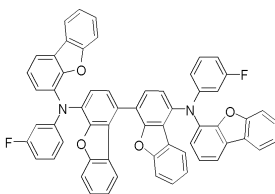
367



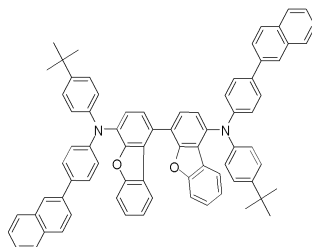
368



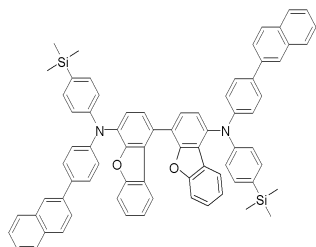
369



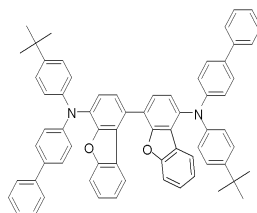
370



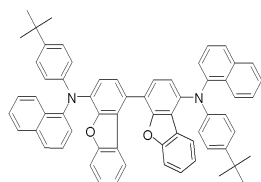
371



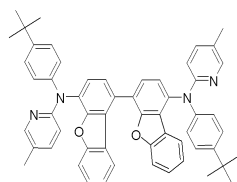
372



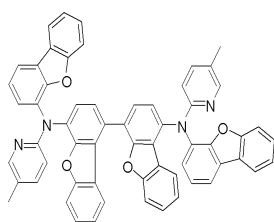
373



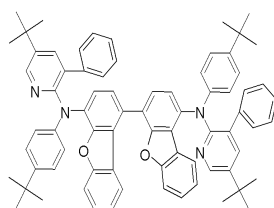
374

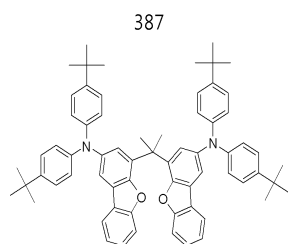
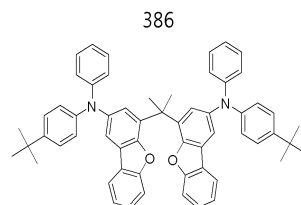
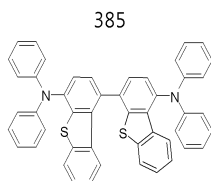
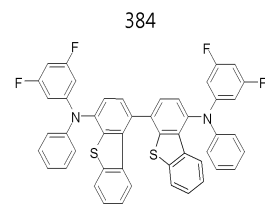
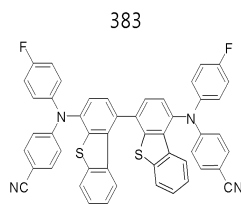
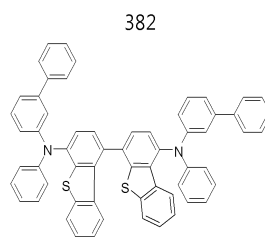
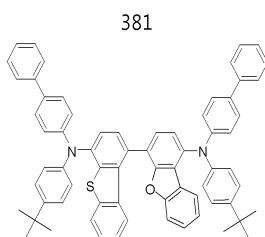
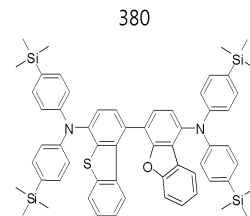
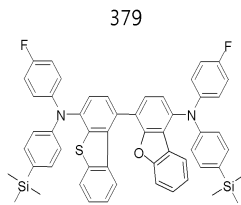
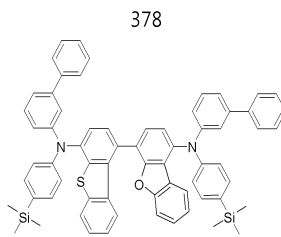
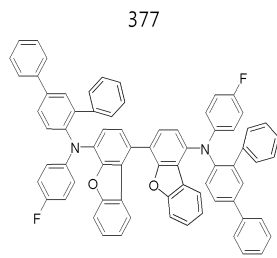


375



376





청구항 5

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 제1항에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 포함하는 것인 유기전계발광소자.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 및 발광층 중 1층 이상을 포함하고,

상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 도판트 화합물로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 발광층은 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물 외의 도판트 화합물과 호스트 화합물을 1종 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제5항에 있어서,

상기 유기물층에 적색, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 보다 구체적으로는 유기전계발광소자의 발광층에 도판트 화합물로 채용되는 유기발광 화합물 및 이를 채용하여 장수명 및 발광 효율이 현저히 향상된 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 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 유기전계발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0003] 유기전계발광소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질과 전하 수송 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다.

[0004] 한편, 발광 물질로서 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 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0005] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 발광 소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기 전자 소자에서도 마찬가지이다.

[0006] 청색발광물질로서 미국 등록특허 제US7053255에는 중심부는 디페닐안트라센 구조를 가지며, 아릴기가 말단에 치환된 청색 발광 화합물 및 이를 이용한 유기전계발광소자가 개시되어 있지만 발광효율 및 휘도가 충분하지 않다는 문제점이 있다. 한편, 미국등록특허공보 제US7233019호, 대한민국공개특허공보 제2006-0006760호에는 치환된 피렌계 화합물을 이용한 유기전계발광소자가 개시되어 있으나, 청색의 색순도가 낮아서 진한 청색(deep blue)의 구현이 어렵기 때문에 천연색의 풀컬러 디스플레이를 구현하는데 문제점이 있다.

발명의 내용

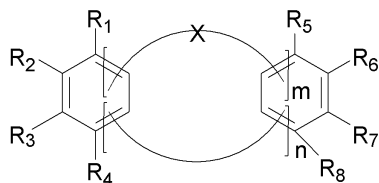
해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 유기전계발광소자의 발광층에 도판트 화합물로 채용되어 우수한 발광 특성을 구현할 수 있는 신규한 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광 소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0009] [화학식 1]



[0010]

[0011] 상기 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

[0012] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 발광층에 채용한 유기전계발광소자는 보다 향상된 발광 효율과 장수명 특성의 구현이 가능하여 이를 채용한 유기전계발광소자는 다양한 디스플레이 소자에 유용하여 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

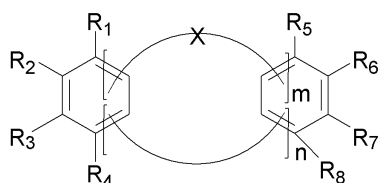
[0013] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 이하, 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다.

[0015] 본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0016] [화학식 1]



[0017]

- [0018] 상기 [화학식 1]에서,
- [0019] X는 NR, O, S, Se, SiRR 및 GeRR 중에서 선택되는 어느 하나이고, n 및 m은 각각 1 내지 3의 정수이다.
- [0020] R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 아미노기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 실릴기 중에서 선택된다.
- [0021] 상기 R₁ 내지 R₈은 서로 또는 인접한 치환기와 연결되어 지환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, NR, SiRR 및 GeRR 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있다. 또한, 상기 R은 상기 R₁ 내지 R₈의 정의와 동일하다.
- [0022] 상기 R₁ 내지 R₈ 중 어느 하나는 하기 [구조식 1]로 표시된다.
- [0023] [구조식 1]
- $$\begin{array}{c} \text{Ar}_1 \\ \diagdown \\ \text{N} - \text{L} - * \\ \diagup \\ \text{Ar}_2 \end{array}$$
- [0024]
- [0025] 상기 [구조식 1]에서,
- [0026] L은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택된다.
- [0027] Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.
- [0028] 또한, 상기 Ar₁과 Ar₂는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, NR, SiRR 및 GeRR (R은 상기 R₁ 내지 R₈의 정의와 동일함) 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있다.
- [0029] 또한, 상기 R, R₁ 내지 R₈, L, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 중수소, 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 실릴기, 아미노기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기 및

할로젠기 중에서 선택된다.

- [0030] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0031] 본 발명에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로펜틸메틸기, 시클로헥틸메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필펜틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0032] 본 발명에 있어서, 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 입체적 방해를 주지 않는 범위인 1 내지 30개인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, 이소프로폭시기, i-프로필옥시기, n-부톡시기, 이소부톡시기, tert-부톡시기, sec-부톡시기, n-펜틸옥시기, 네오펜틸옥시기, 이소펜틸옥시기, n-헥실옥시기, 3,3-디메틸부틸옥시기, 2-에틸부틸옥시기, n-옥틸옥시기, n-노닐옥시기, n-데실옥시기, 벤질옥시기, p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0033] 본 발명에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [0034] 본 발명에 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.
- [0035] 본 발명에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 페난트룰린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0036] 본 발명에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폰시기 및 아랄킬아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시기, p-토릴옥시기, m-토릴옥시기, 3,5-디메틸-페녹시기, 2,4,6-트리메틸페녹시기, ptert-부틸페녹시기, 3-비페닐옥시기, 4-비페닐옥시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 4-메틸-1-나프틸옥시기, 5-메틸-2-나프틸옥시기, 1-안트릴옥시기, 2-안트릴옥시기, 9-안트릴옥시기, 1-페난트릴옥시기, 3-페난트릴옥시기, 9-페난트릴옥시기 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으며, 아릴술폰시기로는 벤젠술폰시기, p-톨루엔술폰시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0037] 본 발명에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0038] 본 발명에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.
- [0039] 본 발명에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된

디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

[0040] 상기 아릴아민기의 구체적인 예로는 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 3-메틸-페닐아민기, 4-메틸-나프틸아민기, 2-메틸-비페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸기 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0041] 본 발명에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0042] 본 발명에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0043] 본 발명에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폭시기로는 메실, 에틸술폭시기, 프로필술폭시기, 부틸술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

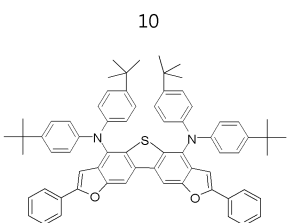
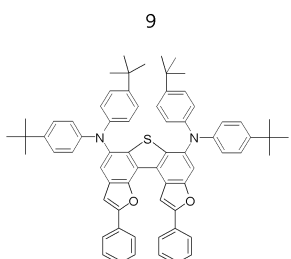
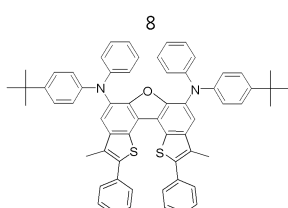
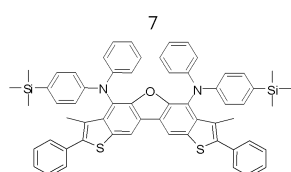
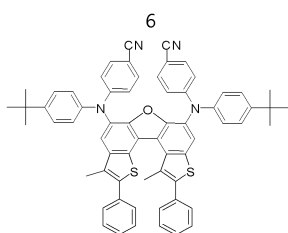
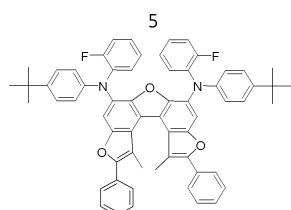
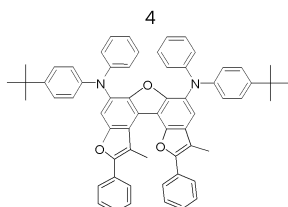
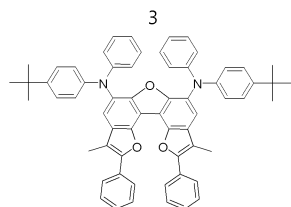
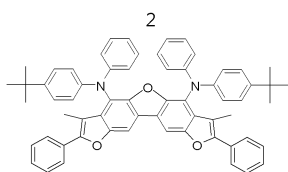
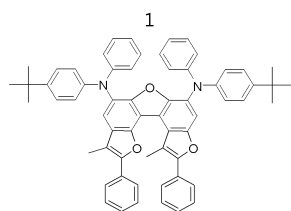
[0044] 본 발명에 있어서, "치환 또는 비치환된"이란, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 니트로기, 히드록시기, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티옥시기, 아릴티옥시기, 알킬술폭시기, 아릴술폭시기, 알케닐기, 실릴기, 붕소기, 알킬아민기, 아랄킬아민기, 아릴아민기, 아릴기, 플루오레닐기, 카바졸기 및 N, O 및 S 원자 중 1 개 이상을 포함하는 헤테로고리기 중 적어도 하나의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.

[0045] 본 발명에 있어서, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 페틸렌기, 테트라세닐기, 안트라세닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.

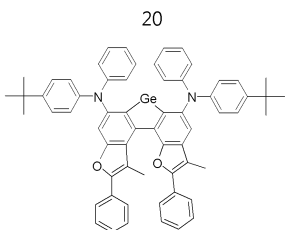
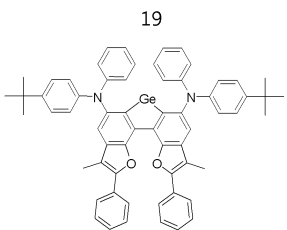
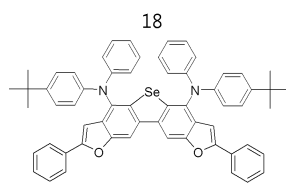
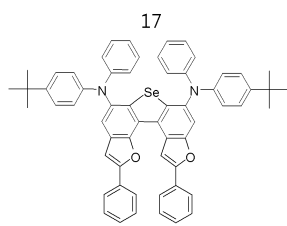
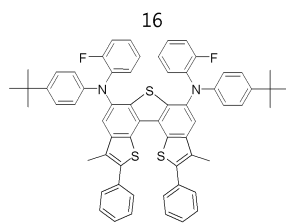
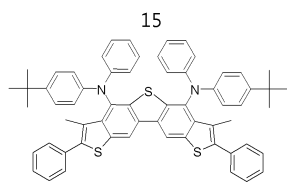
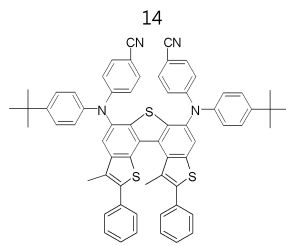
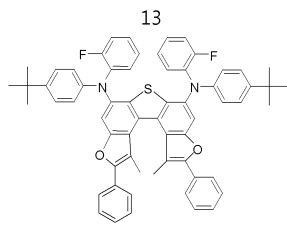
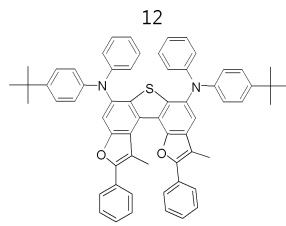
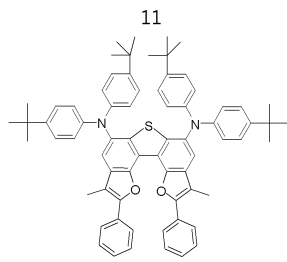
[0046] 본 발명에 있어서, 치환된 헤테로아릴렌기라 함은, 피리딜기, 티오펜기, 트리아진기, 퀴놀린기, 페난트롤린기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 카바졸기 및 이들의 축합헤테로고리기, 예컨대 벤즈퀴놀린기, 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.

[0047] 상기 [화합식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 다양한 유기물층에 사용될 수 있고, 바람직하게는 발광층 내의 도판트 화합물로 사용될 수 있다.

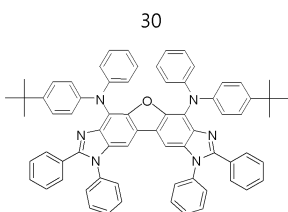
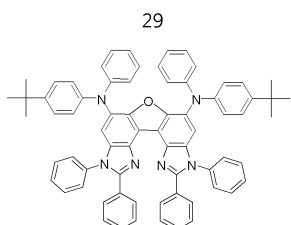
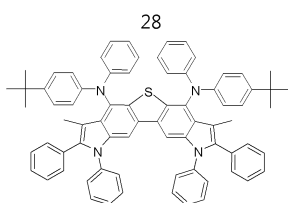
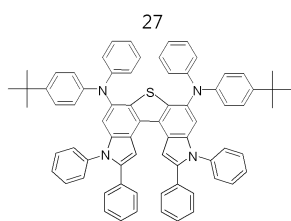
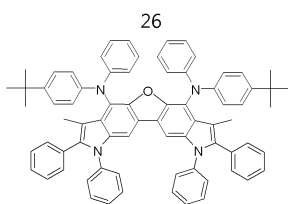
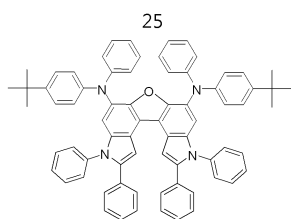
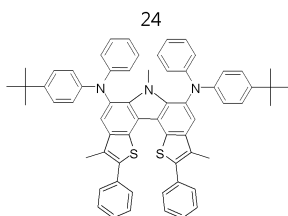
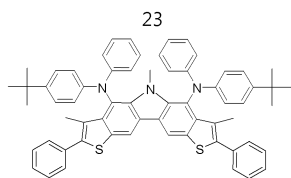
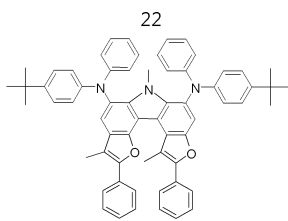
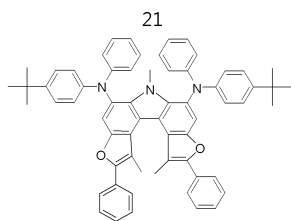
[0048] 본 발명에 따른 [화합식 1]로 표시되는 발광층의 도판트 화합물로 채용될 수 있는 유기발광 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



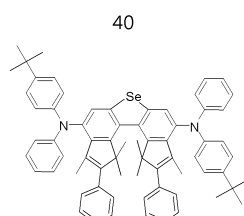
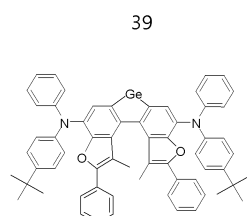
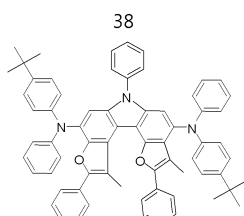
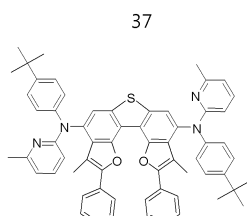
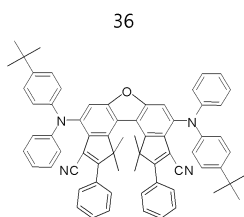
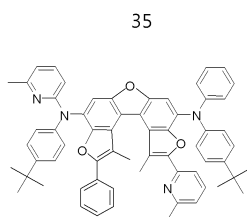
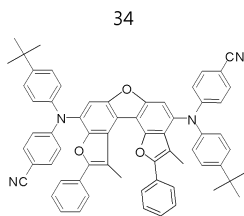
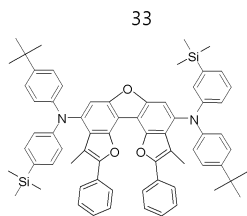
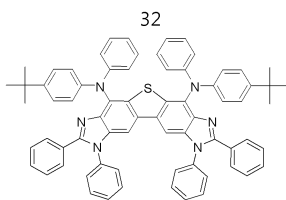
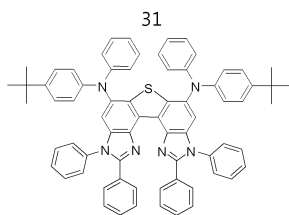
[0049]



[0050]

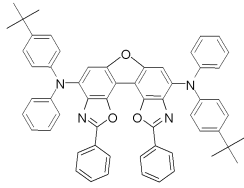


[0051]

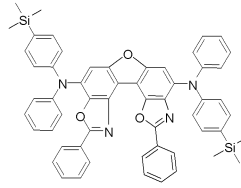


[0052]

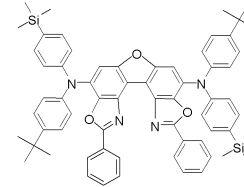
41



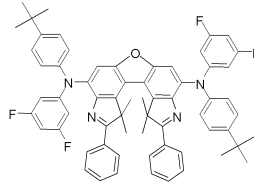
42



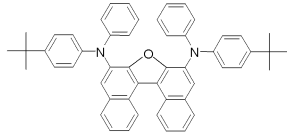
43



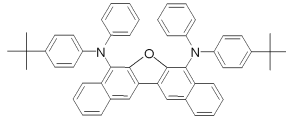
44



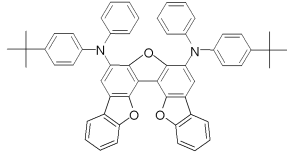
45



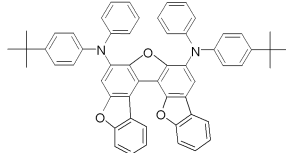
46



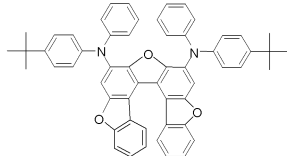
47



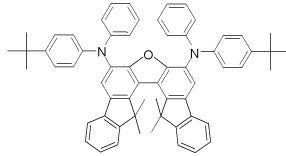
48



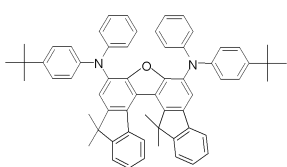
49



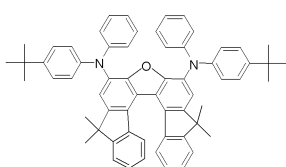
50



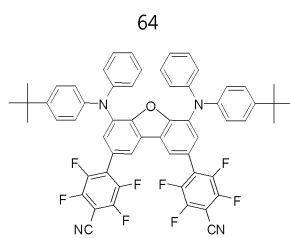
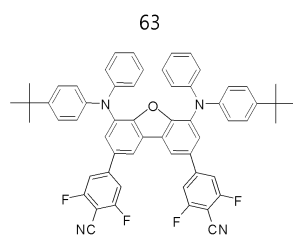
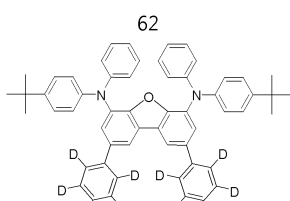
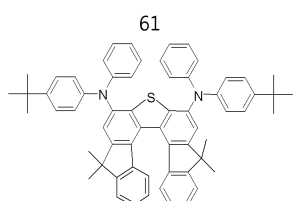
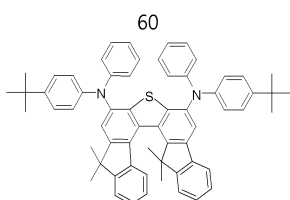
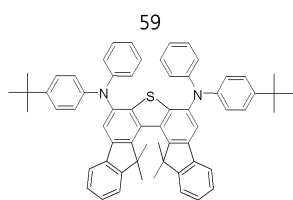
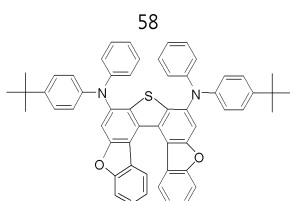
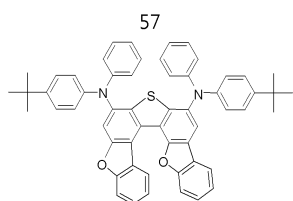
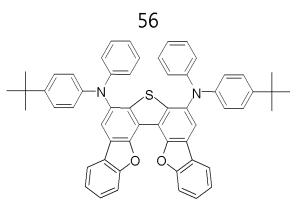
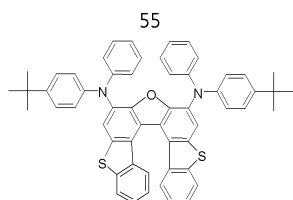
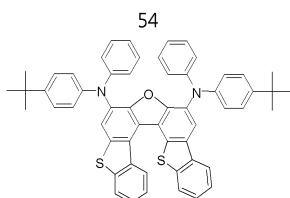
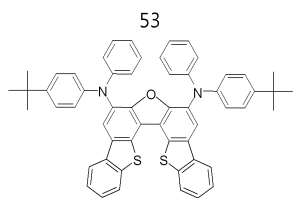
51



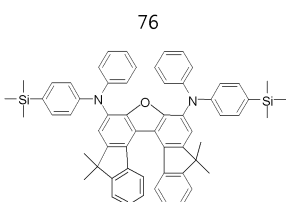
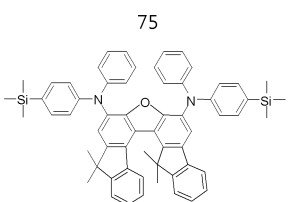
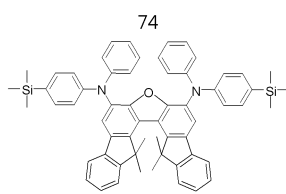
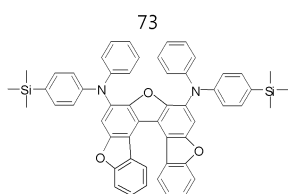
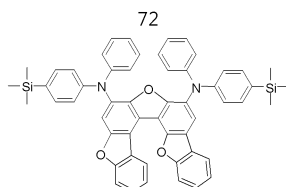
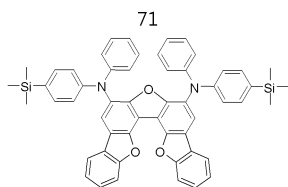
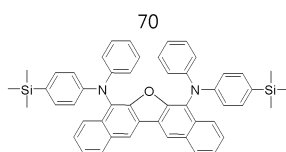
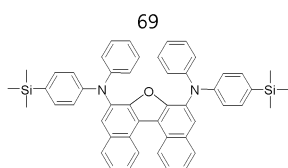
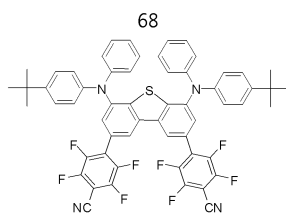
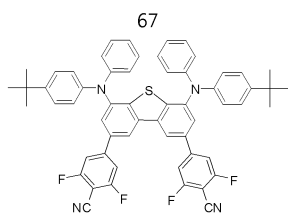
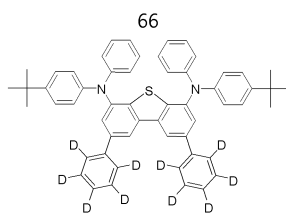
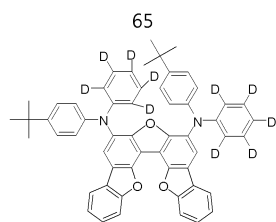
52



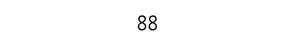
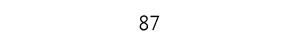
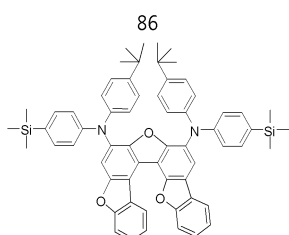
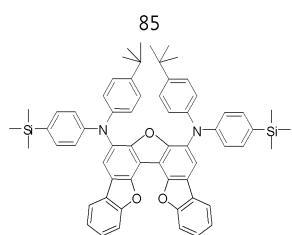
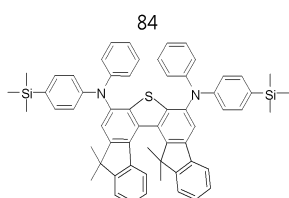
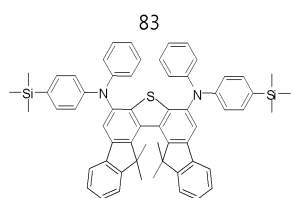
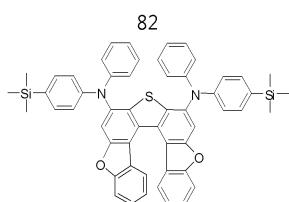
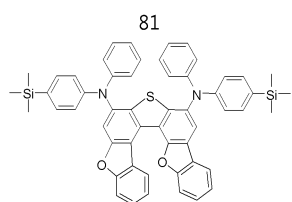
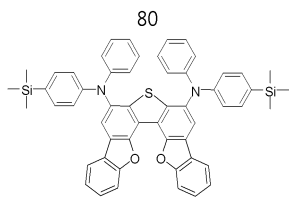
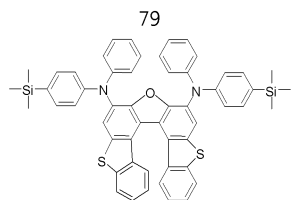
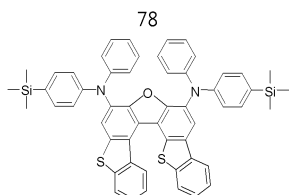
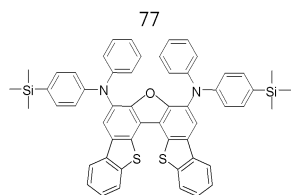
[0053]



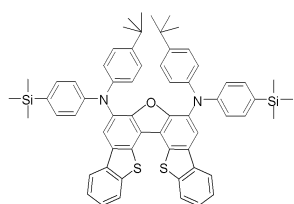
[0054]



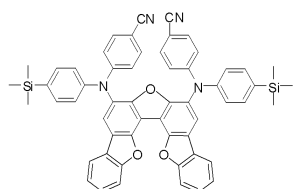
[0055]



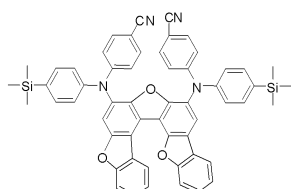
[0056]



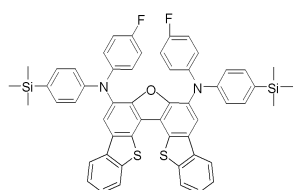
89



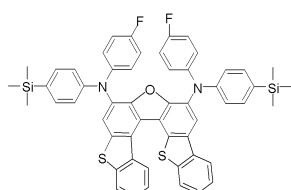
90



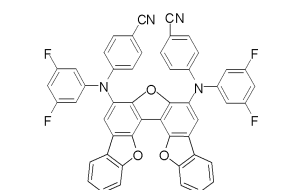
91



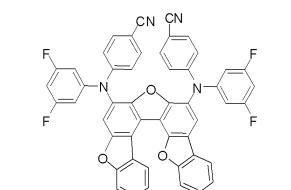
92



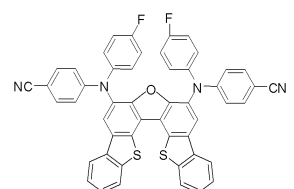
93



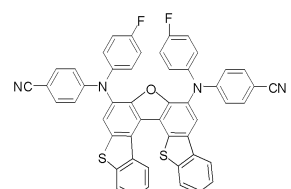
94



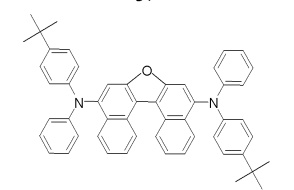
95



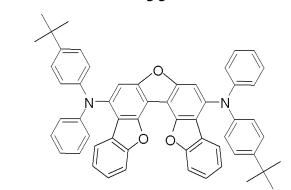
96



97

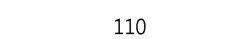
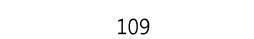
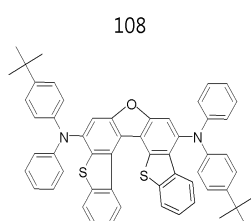
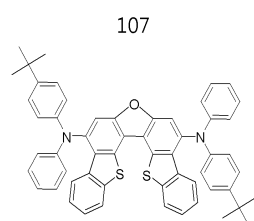
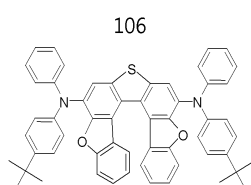
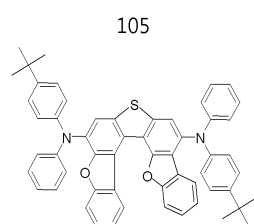
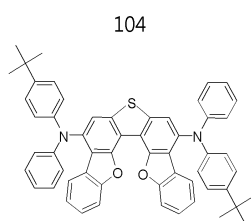
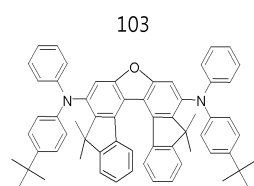
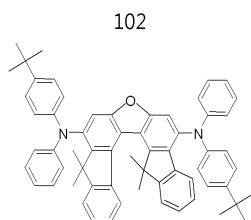
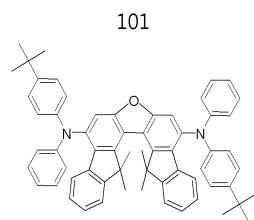
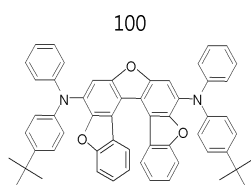
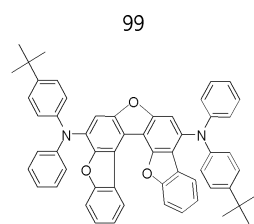


98

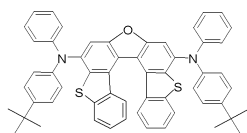


[0057]

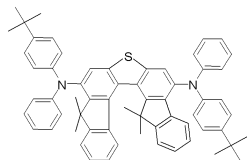
[0058]



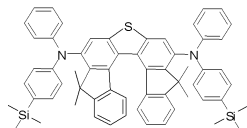
[0059]



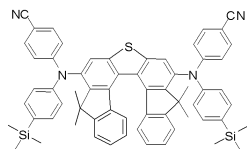
111



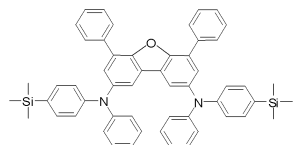
113



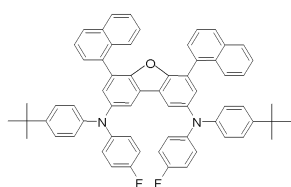
115



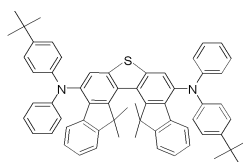
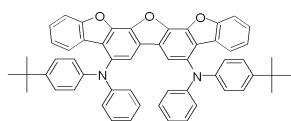
117



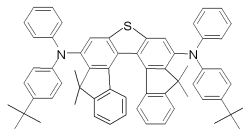
119



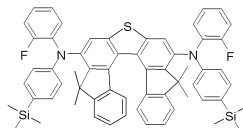
121



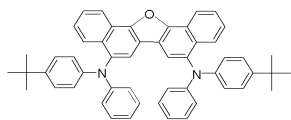
112



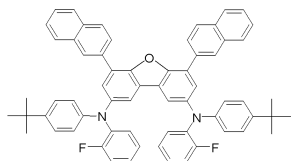
114



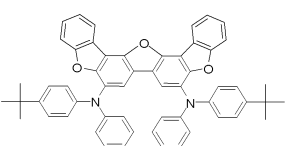
116



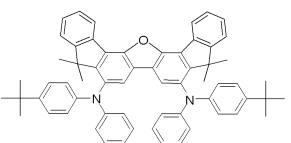
118



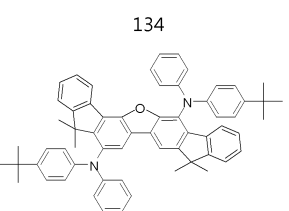
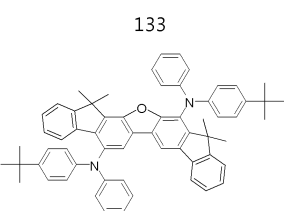
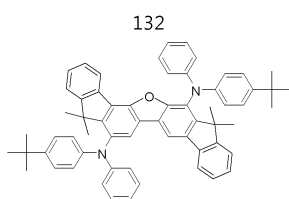
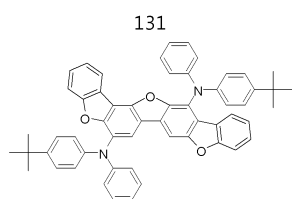
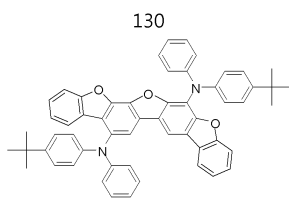
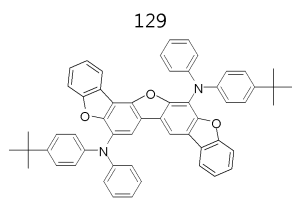
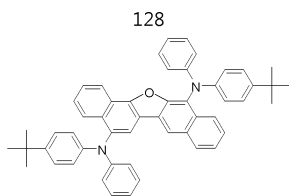
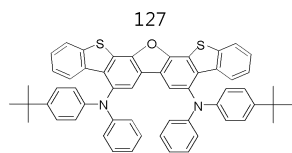
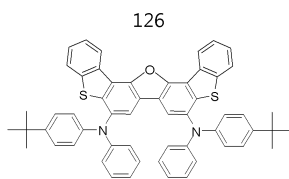
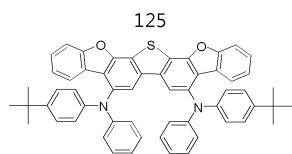
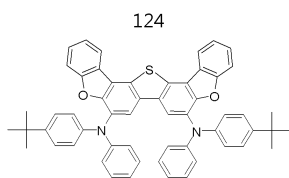
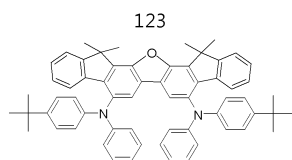
120



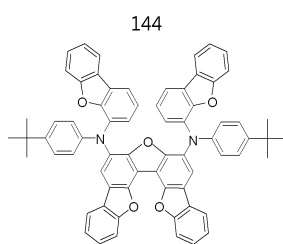
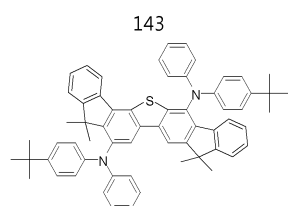
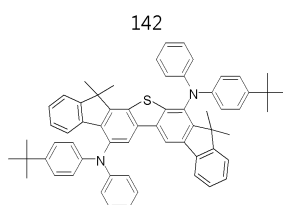
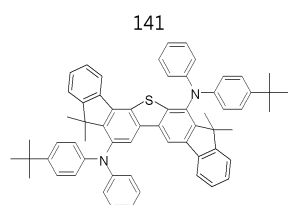
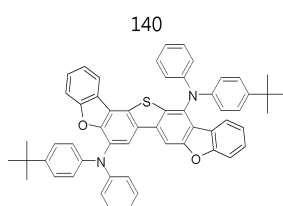
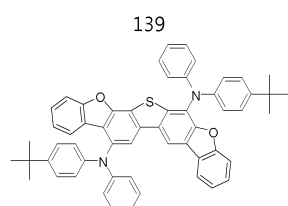
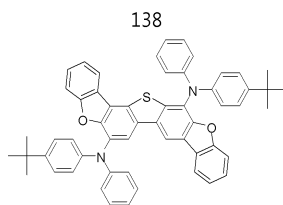
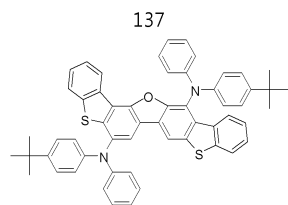
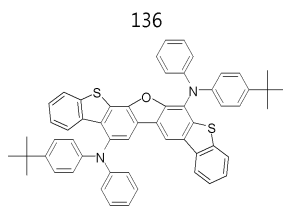
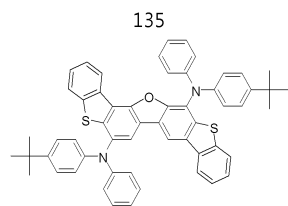
122



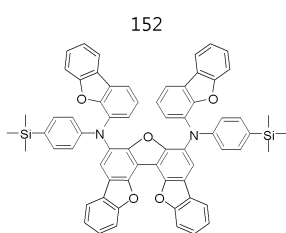
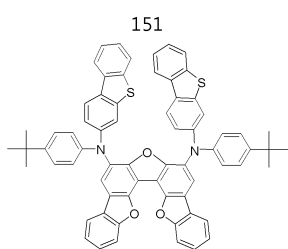
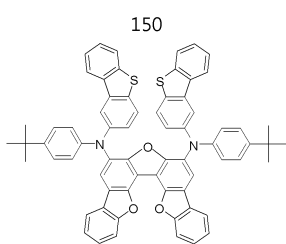
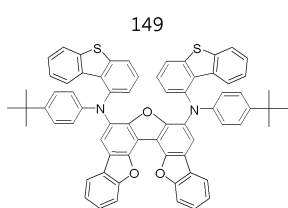
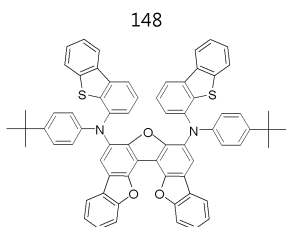
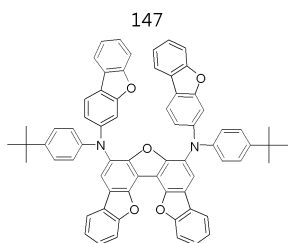
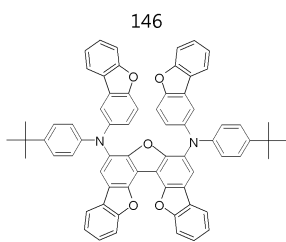
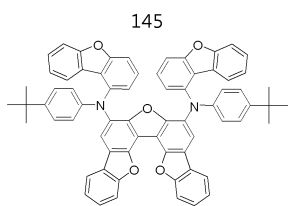
[0060]



[0061]



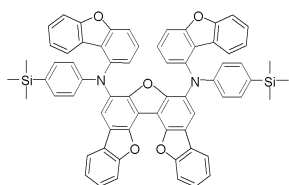
[0062]



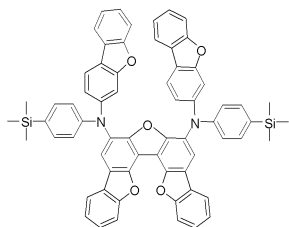
[0063]

153

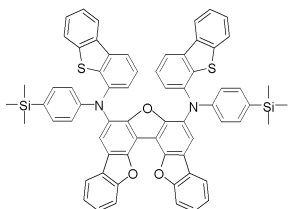
154



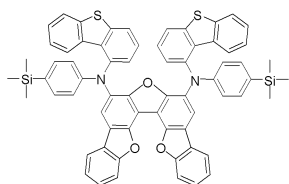
155



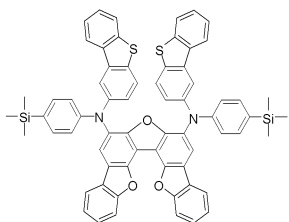
156



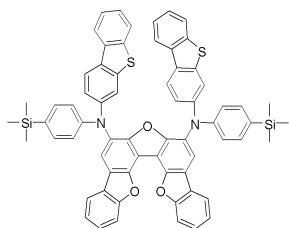
157



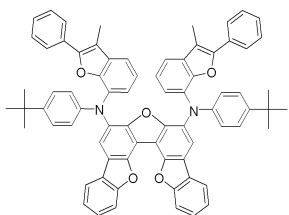
158



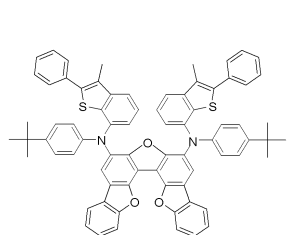
159



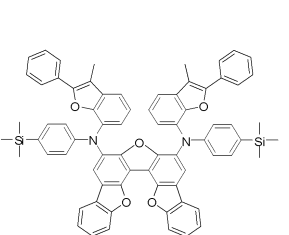
160



161

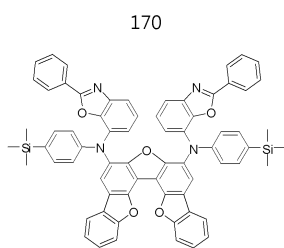
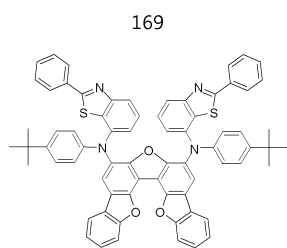
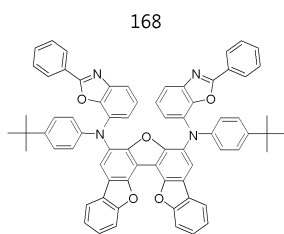
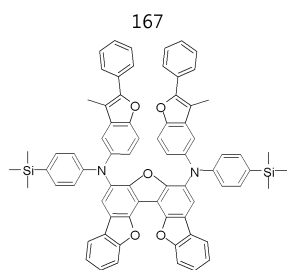
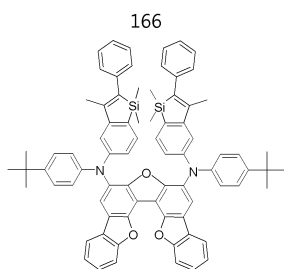
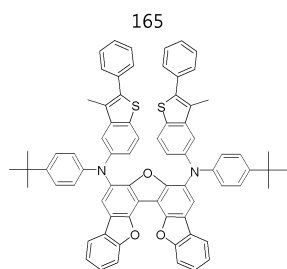
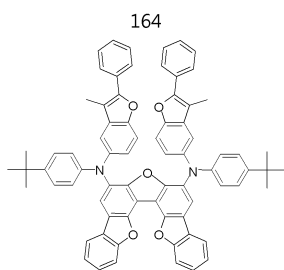
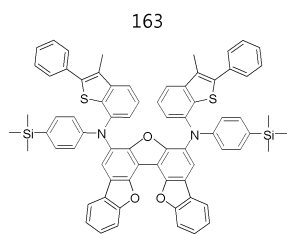


162

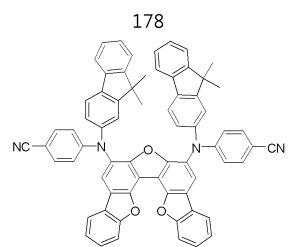
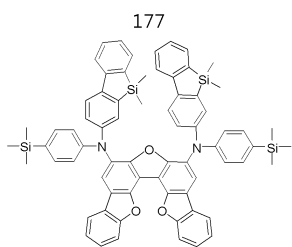
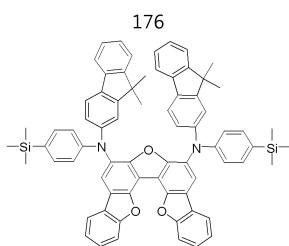
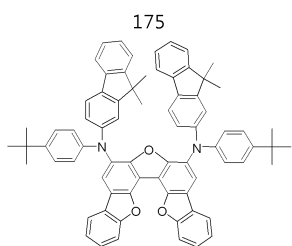
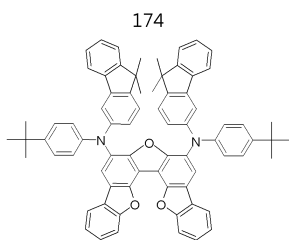
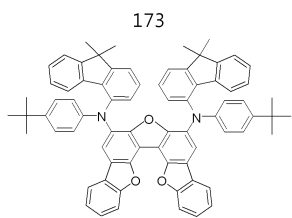
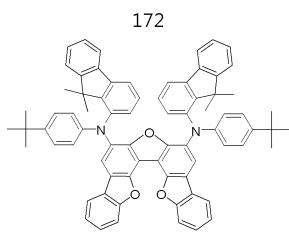
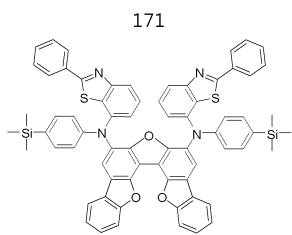


[0064]

[0065]



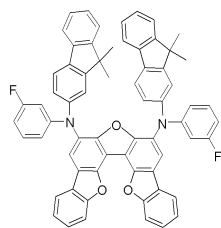
[0066]



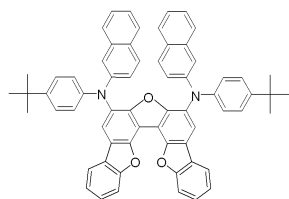
179

180

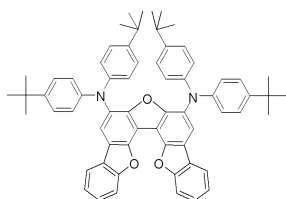
[0067]



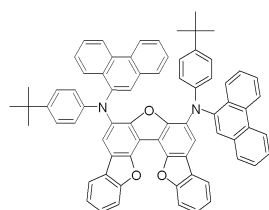
181



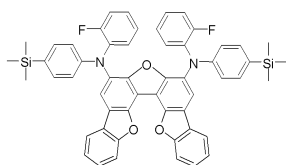
182



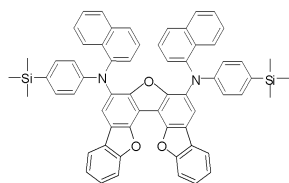
183



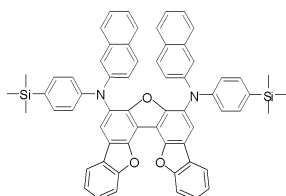
184



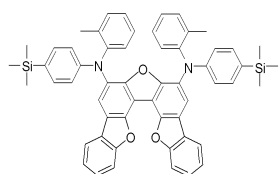
185



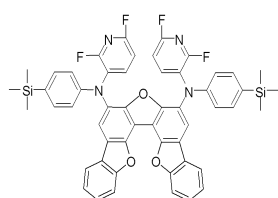
186



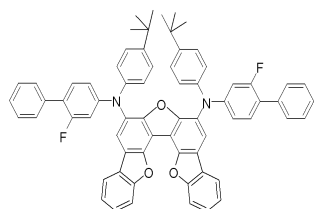
187



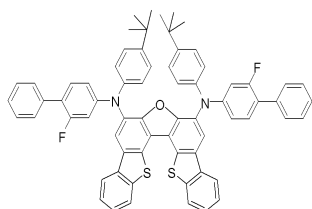
188



189

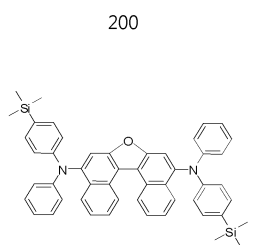
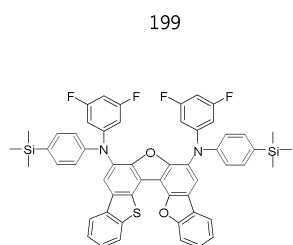
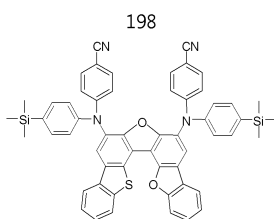
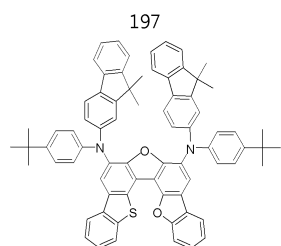
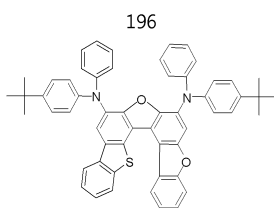
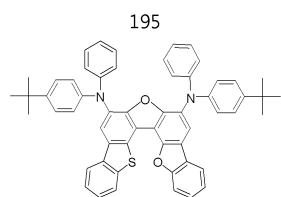
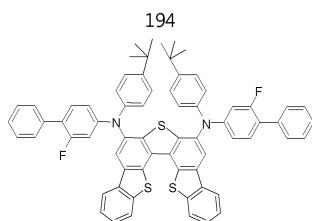
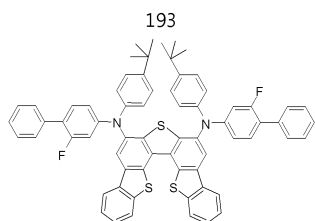
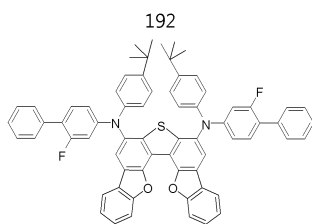
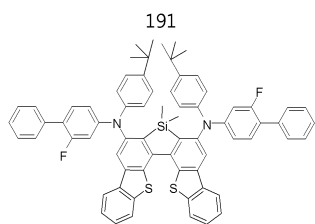


190



[0068]

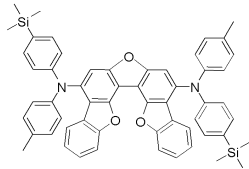
[0069]



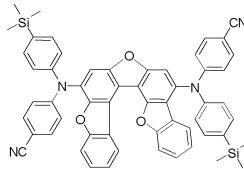
[0070]

[0071]

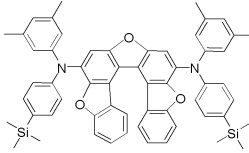
201



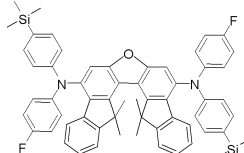
202



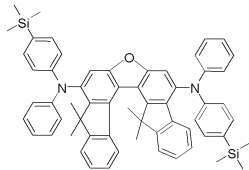
203



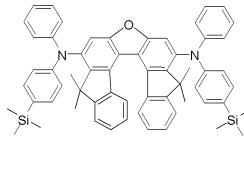
204



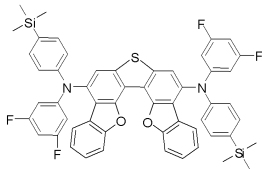
205



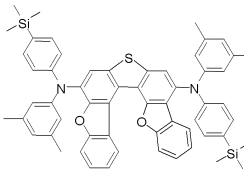
206



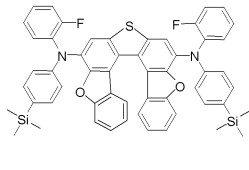
207



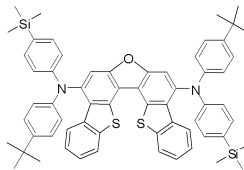
208



209



210



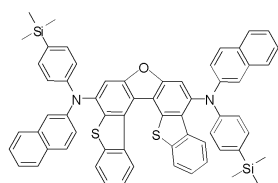
211



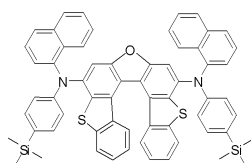
212



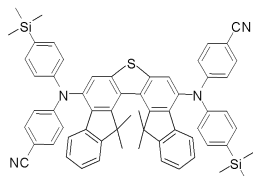
[0072]



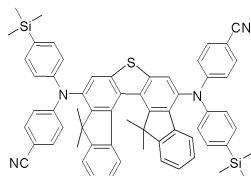
213



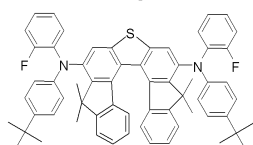
214



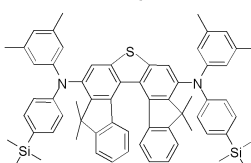
215



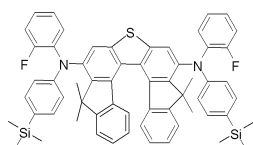
216



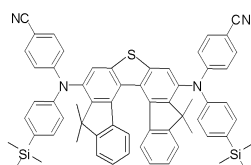
217



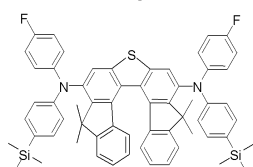
218



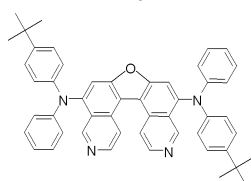
219



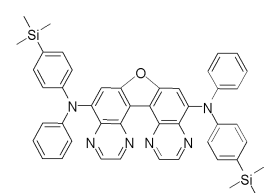
220



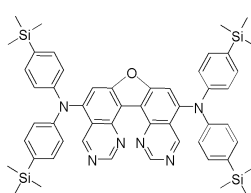
221



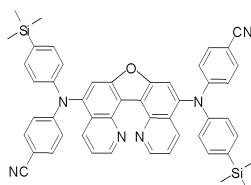
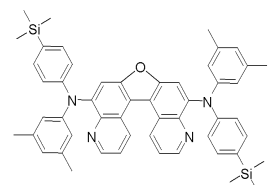
222



223



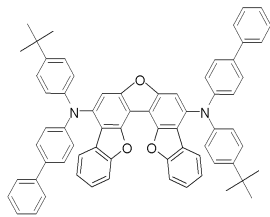
224



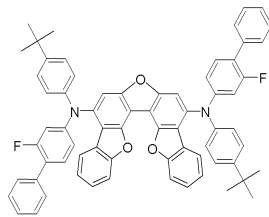
[0073]

[0074]

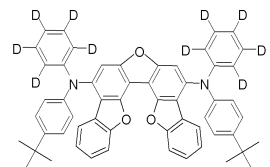
225



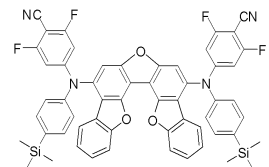
226



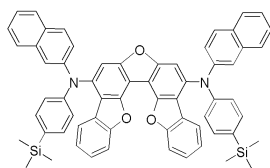
227



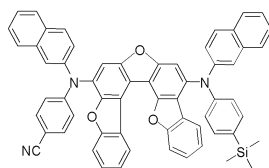
228



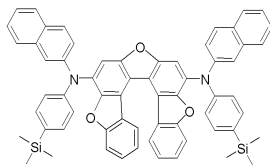
229



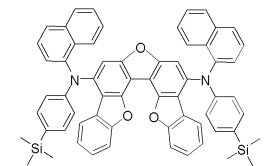
230



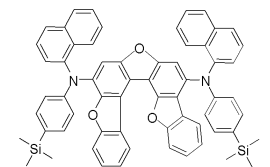
231



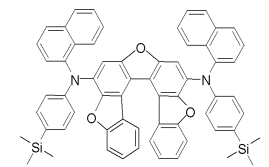
232



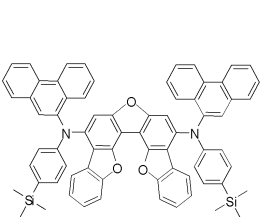
233



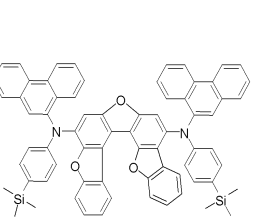
234



235

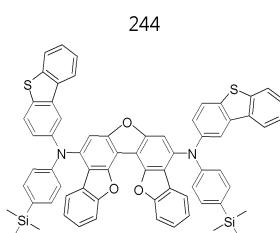
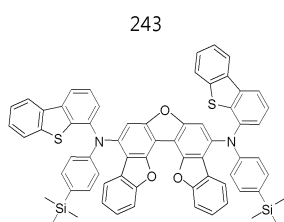
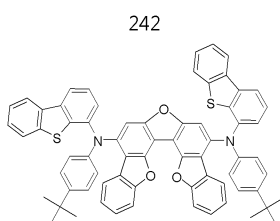
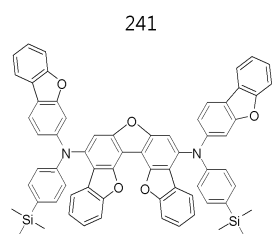
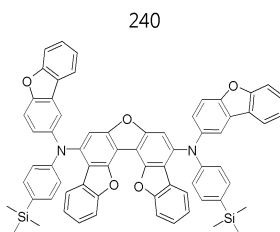
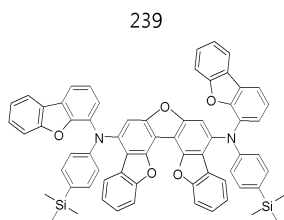
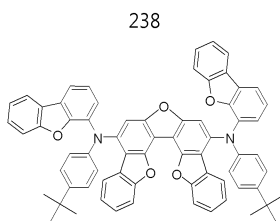
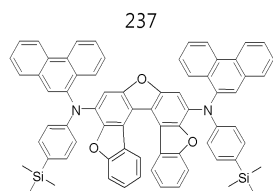


236

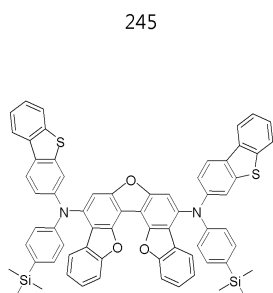


[0075]

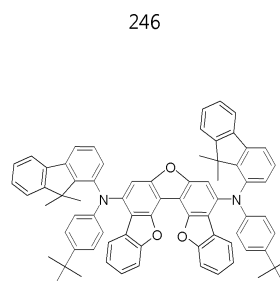
[0076]



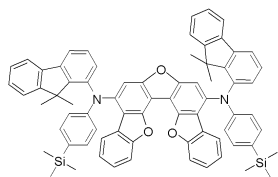
[0077]



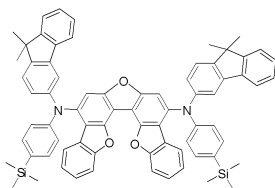
[0078]



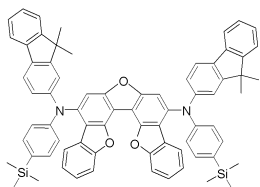
247



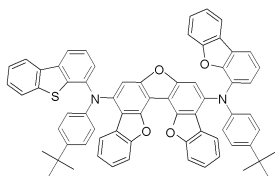
248



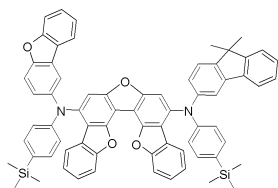
249



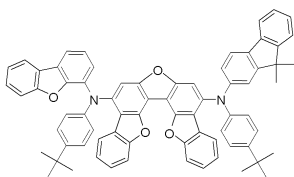
250



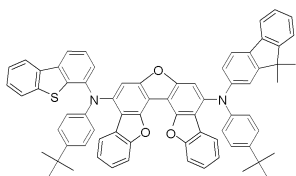
251



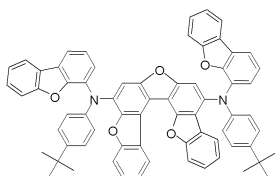
252



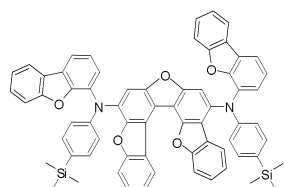
253



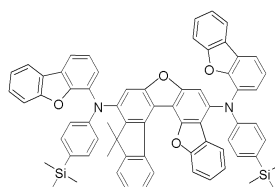
254



255



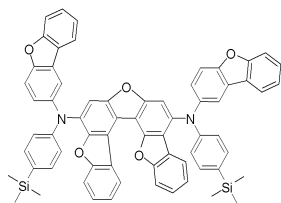
256



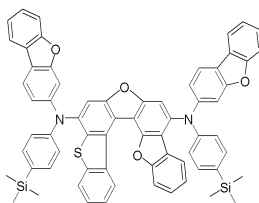
[0079]

[0080]

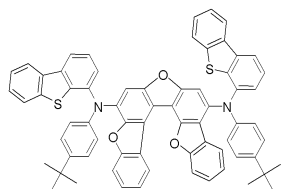
257



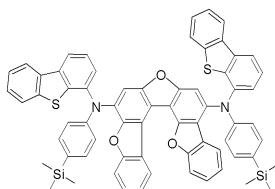
258



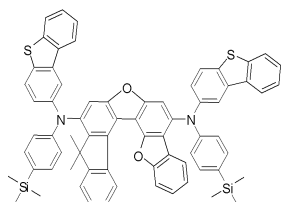
259



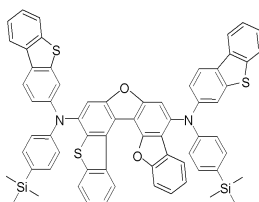
260



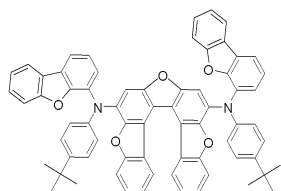
261



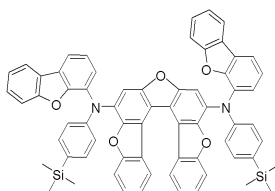
262



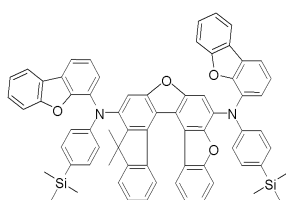
263



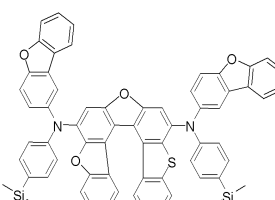
264



265



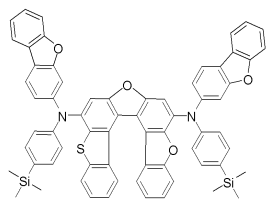
266



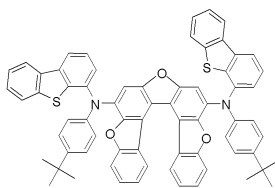
[0081]

[0082]

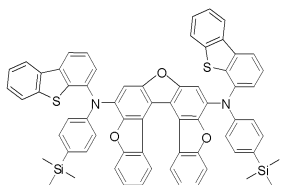
267



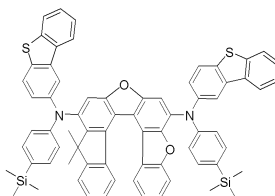
268



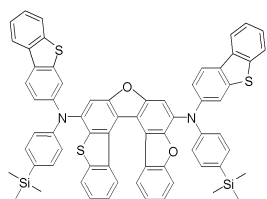
269



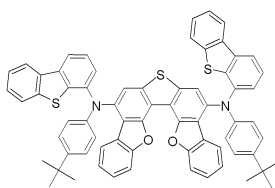
270



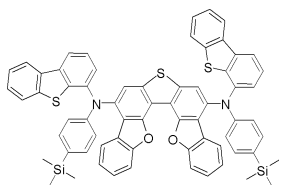
271



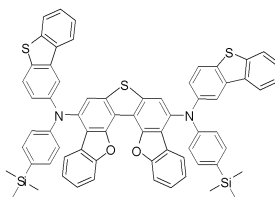
272



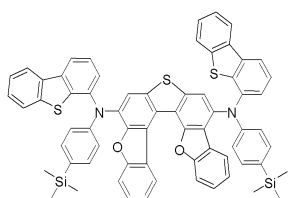
273



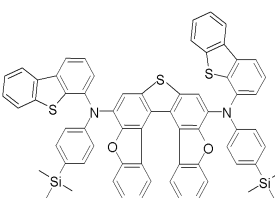
274



275

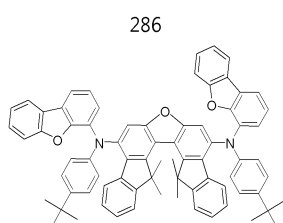
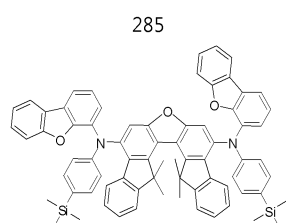
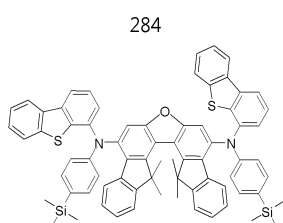
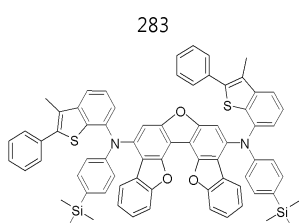
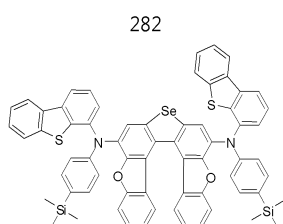
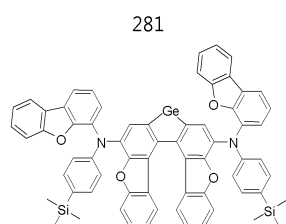
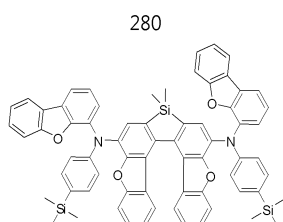
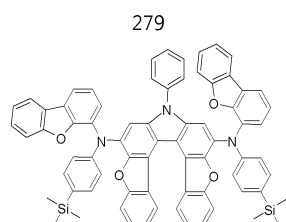
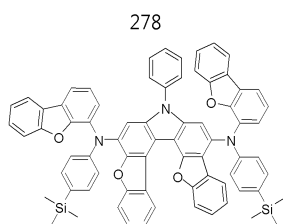
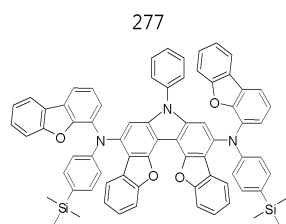


276



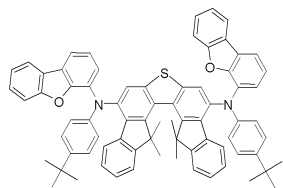
[0083]

[0084]

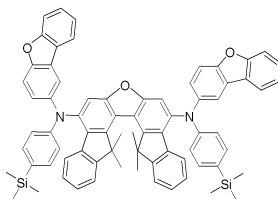


[0085]

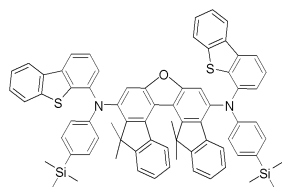
287



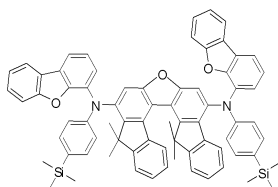
288



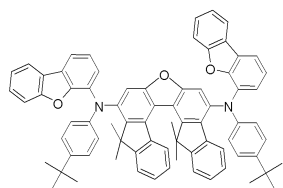
289



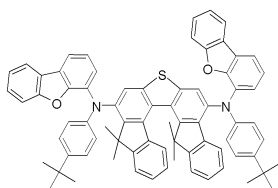
290



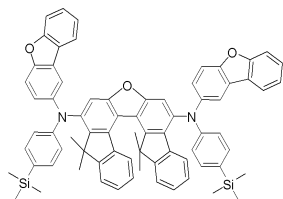
291



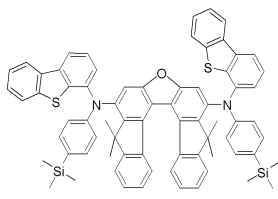
292



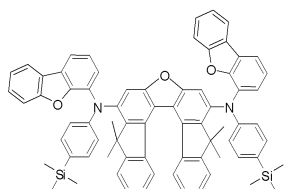
293



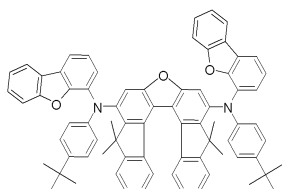
294



295



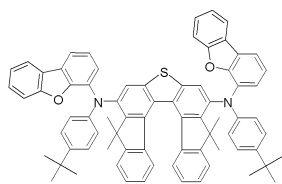
296



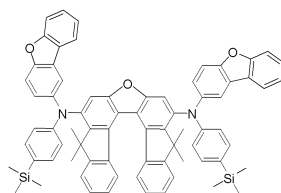
[0086]

[0087]

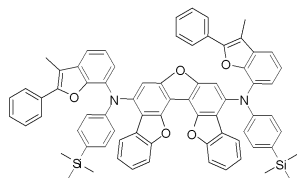
297



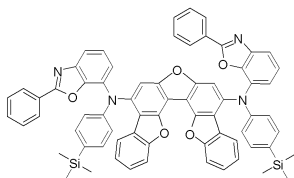
298



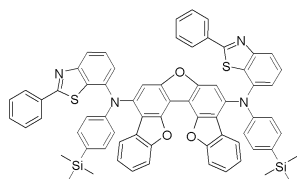
299



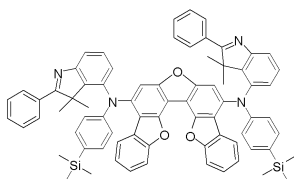
300



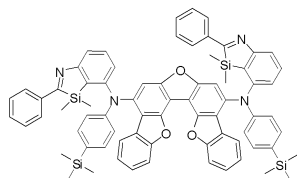
301



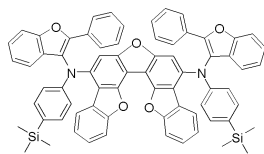
302



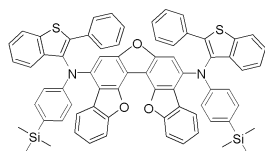
303



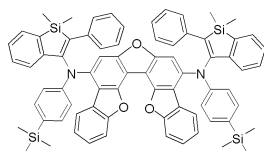
304



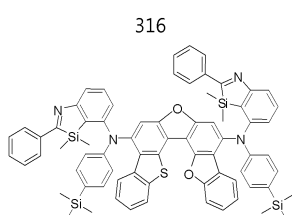
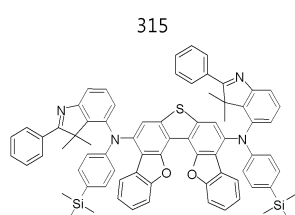
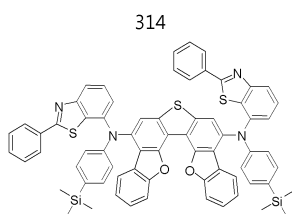
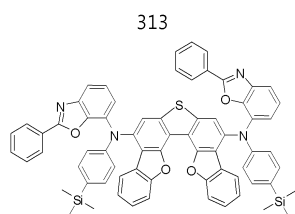
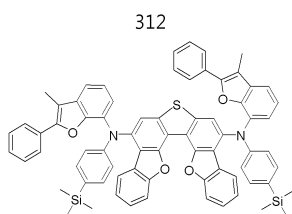
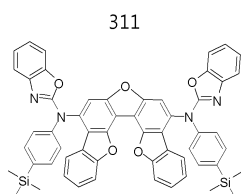
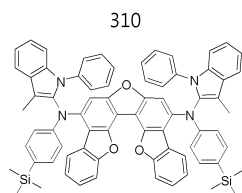
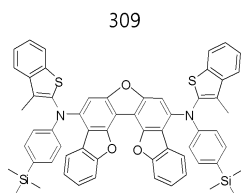
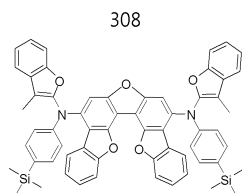
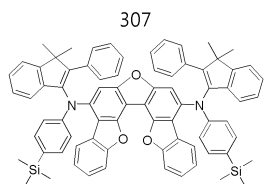
305



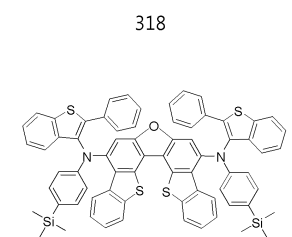
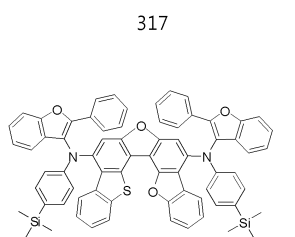
306



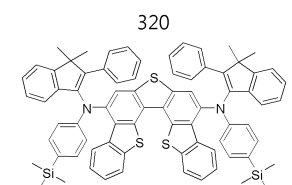
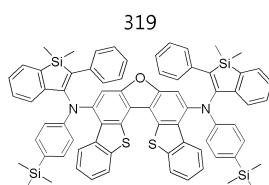
[0088]

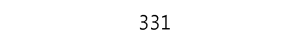
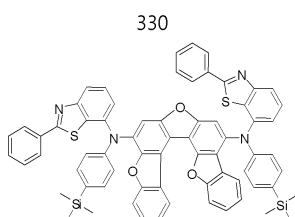
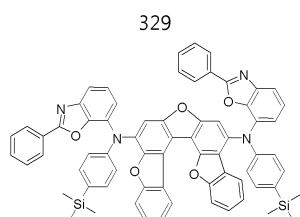
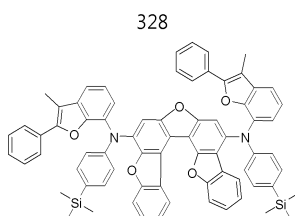
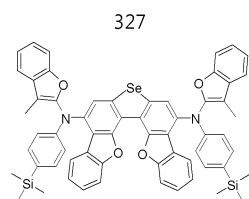
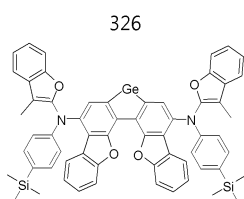
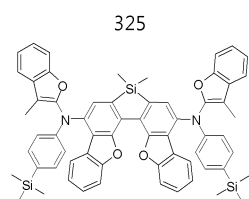
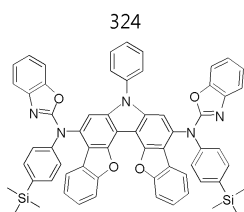
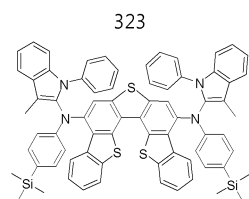
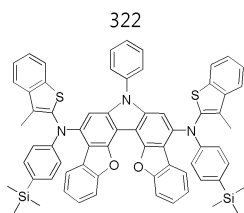
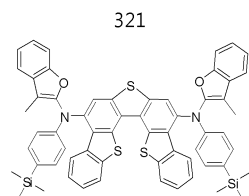


[0089]

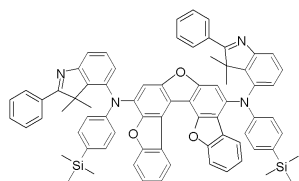


[0090]

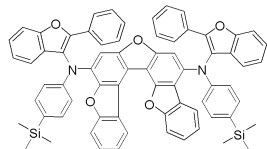




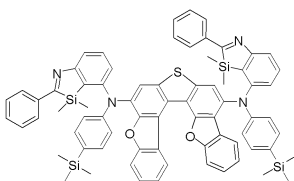
[0091]



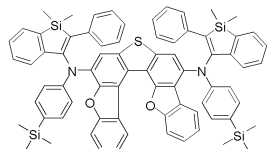
333



334

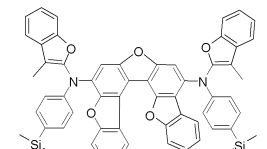


335



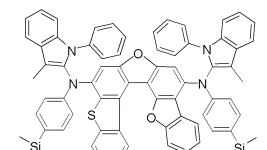
336

337



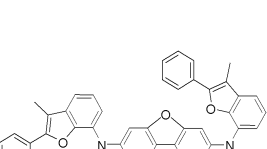
338

339

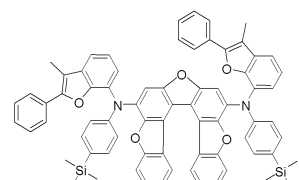


340

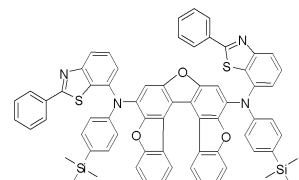
341



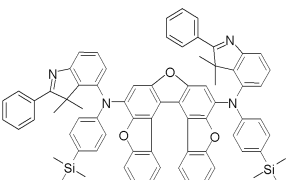
342



343

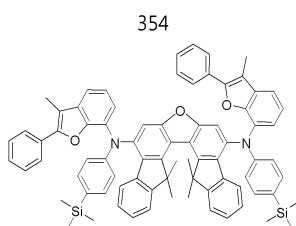
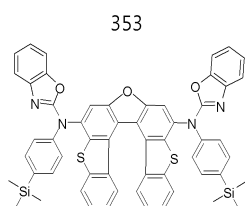
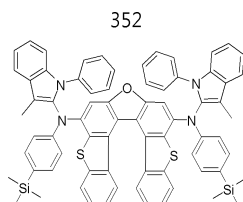
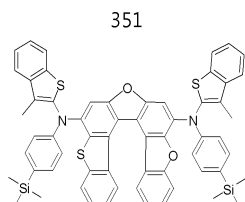
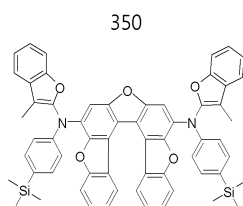
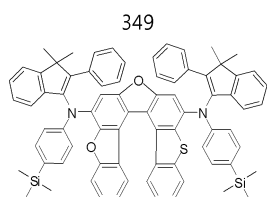
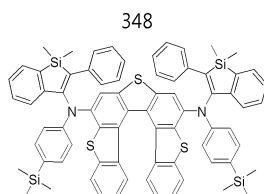
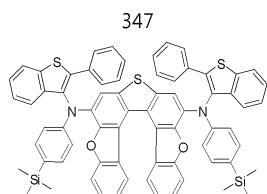
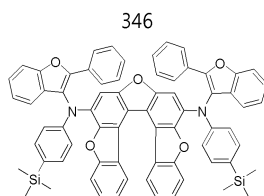
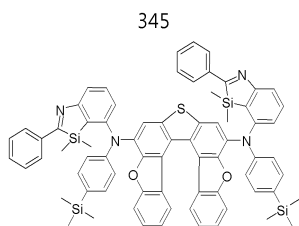


344



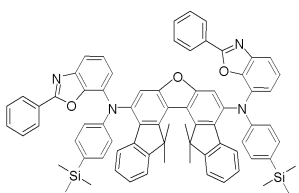
[0092]

[0093]



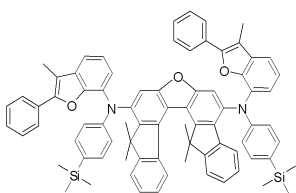
[0094]

355

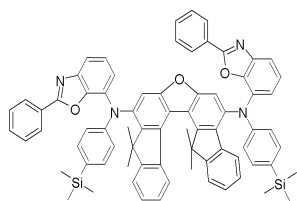


[0095]

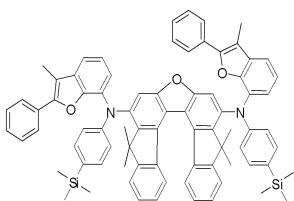
356



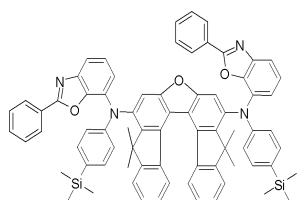
357



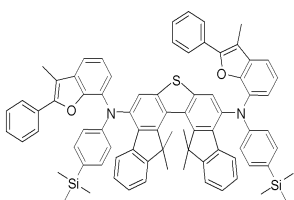
358



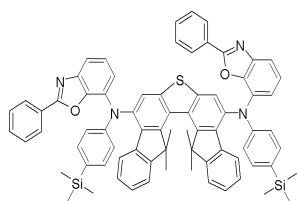
359



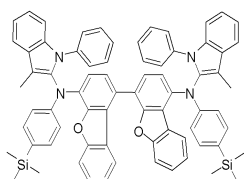
360



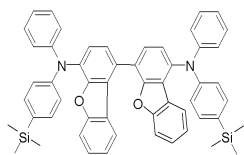
361



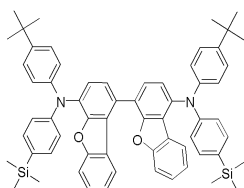
362



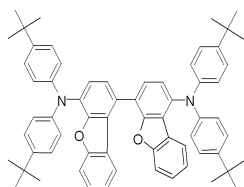
363



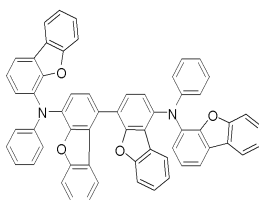
364



365

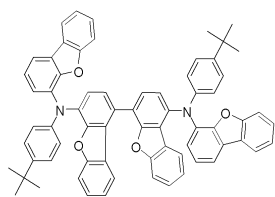


366

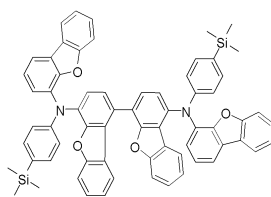


[0096]

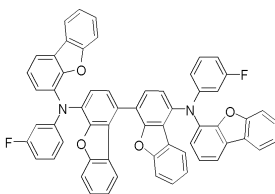
367



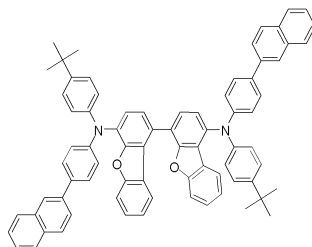
368



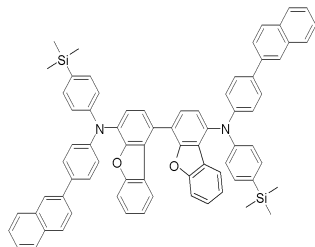
369



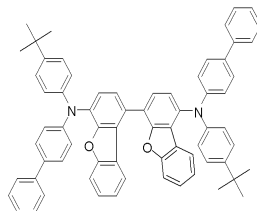
370



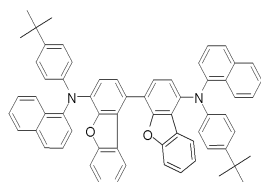
371



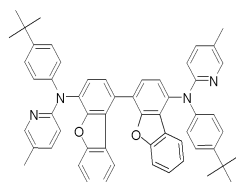
372



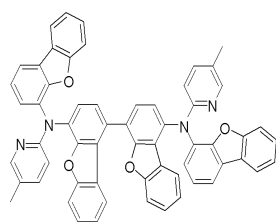
373



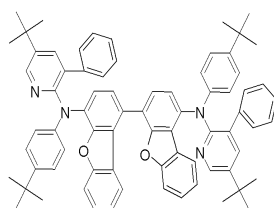
374



375

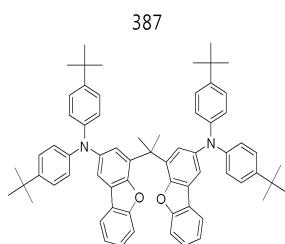
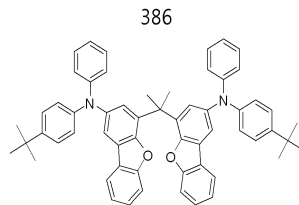
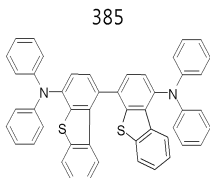
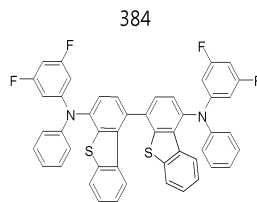
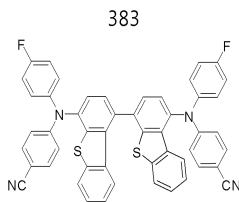
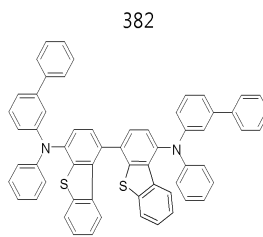
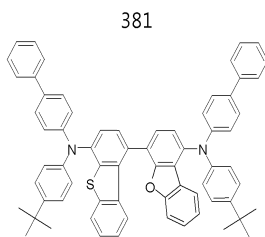
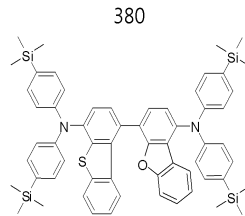
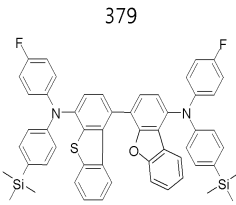
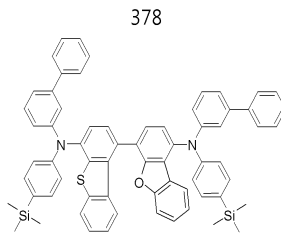
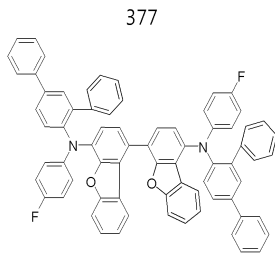


376



[0097]

[0098]



[0099]

[0100]

[0101]

상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

[0102]

특히, 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기에서 살펴본 바와 같이, 특징적 코어 구조체에 치환기를 도입하여 유기전계발광소자의 발광층에 채용시 효율, 구동전압, 수명 등에서 우수한 특성을 나타내는 유기전계발광소자의 구현이 가능함을 확인하였다.

[0103]

본 발명의 화합물은 유기전계발광소자의 통상의 제조방법에 따라 소자에 적용할 수 있다. 본 발명의 하나의 실

시에에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.

- [0104] 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수도 있다.
- [0105] 따라서, 본 발명의 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층, 전자 주입 및 전자수송을 동시에 하는 층 및 발광층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 바람직하게는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광층 내 호스트 또는 도판트 물질로서 포함될 수 있다.
- [0106] 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 발광층 내 도판트 물질로서 포함되는 경우에, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다. 또한, [화학식 1]로 구현되는 유기발광 화합물 이외에도 호스트 또는 도판트 화합물을 더 포함할 수도 있으며, 그 함량은 상기와 마찬가지로이다.
- [0107] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [0108] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0109] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0110] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0111] 도 3에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0112] 도 4에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0113] 도 5에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0114] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 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 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [0115] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전계발광소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0116] 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, 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(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](PEDT),

폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0117] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금, LiF/Al 또는 LiO_2/Al 과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0118] 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0119] 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0120] 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3), 카르바졸 계열 화합물, 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물, BAIq , 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물, 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자, 스피로(spiro) 화합물, 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0121] 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물, Alq_3 를 포함한 착물, 유기 라디칼 화합물, 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

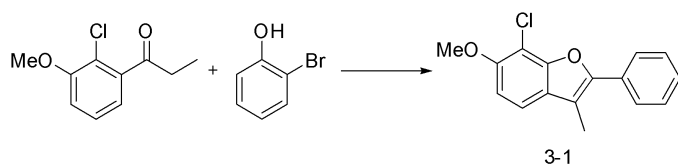
[0122] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0123] 또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기전계발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

[0124] 이하에서는 본 발명에 따른 구체적인 화합물의 합성방법과, 실시예 및 비교예를 통하여 본 발명을 더욱 상세히 설명한다. 그러나, 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하고자 하는 것이 아니다.

[0125] 실시예 1: 화합물 3 합성

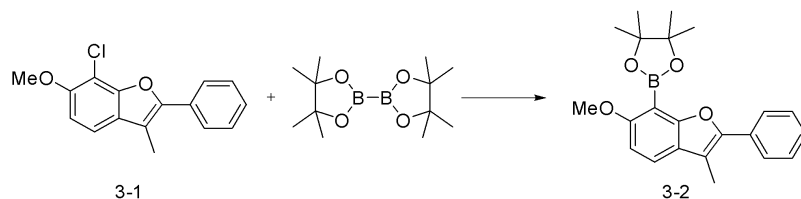
[0126] (1) 제조예 1 : 중간체 3-1의 합성



[0127]

[0128] $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.26 g, 0.0012 mol, sigma Aldrich), Di-*tert*-butylneopentylphosphine (DTBNpP, 0.25 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), Sodium *tert*-butoxide (16.66 g, 0.17 mol, sigma aldrich)를 넣고 교반 후 2-Bromophenol (10 g, 0.058 mol, sigma aldrich), 1-(2-chloro-3-methoxyphenyl)propan-1-one (13.78 g, 0.69 mol, Yurui), Toluene 100 mL 넣고 50 °C에서 24시간 동안 교반하여 반응시켰다. 24시간 반응 후 $\text{TAF}:\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (1:1, 100 mL) 추가 후 상온에서 2시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 $\text{NH}_4\text{Cl} : \text{EA}$ 에 층분리를 한 후 정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 3-1>을 14 g (수율 88.8%) 수득하였다.

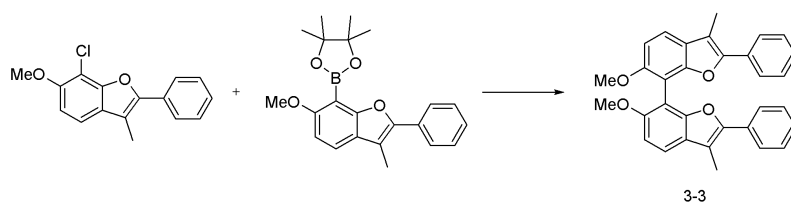
[0129] (2) 제조예 2 : 중간체 3-2의 합성



[0130]

[0131] 중간체 3-1 (10 g, 0.037 mol), Bis(pinacolato)diboron (12.10 g, 0.048 mol, sigma aldrich), potassium acetate (7.20 g, 0.073 mol, sigma aldrich), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (0.80 g, 0.0011 mol, sigma aldrich), 1,4-Dioxane 100 mL 넣고 95 °C 에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : Toluene 에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 3-2>를 8.2 g (수율 61%) 수득하였다.

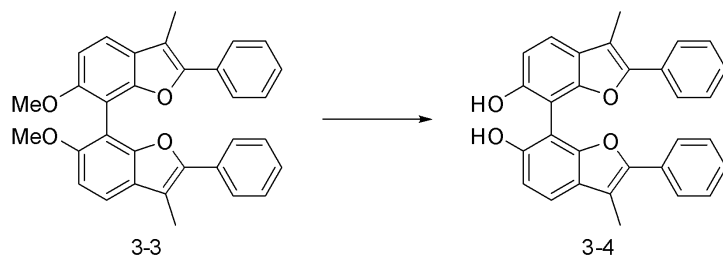
[0132] (3) 제조예 3 : 중간체 3-3의 합성



[0133]

[0134] 중간체 3-1 (10 g, 0.037 mol), 중간체 3-2 (16.03 g, 0.044 mol), potassium carbonate (15.20 g, 0.110 mol, sigma aldrich), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (2.12 g, 0.0018 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 30 mL 넣고 60 °C 에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : MC를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : M C)하여 <중간체 3-3>을 14.3 g (수율 82%) 수득하였다.

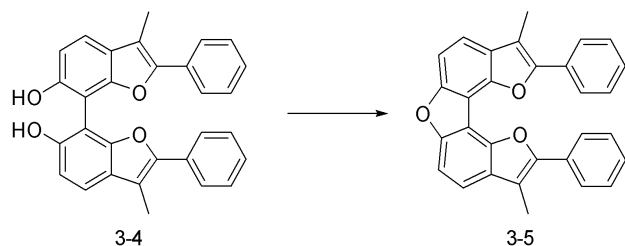
[0135] (4) 제조예 4 : 중간체 3-4의 합성



[0136]

[0137] 중간체 3-3 (10 g, 0.021 mol), dichlorodimethane 100 mL를 넣고 -78 °C 하에서 교반하면서 boron tribromide (17.42 g, 0.070 mol, sigma aldrich)을 천천히 떨어뜨리고 상온에서 5 시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 0 °C 로 냉각시켜 물과 ethyl acetate를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 3-4>를 8.5 g (수율 90%) 수득하였다.

[0138] (5) 제조예 5 : 중간체 3-5의 합성

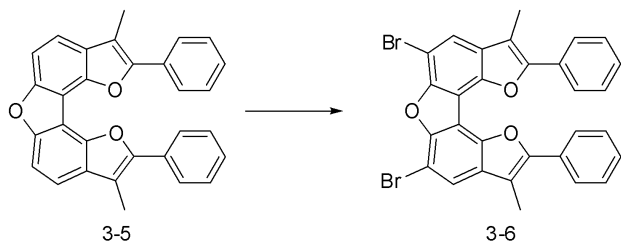


[0139]

[0140] 중간체 3-4 (17 g, 0.046 mol), p-TsOH (15.68 g, 0.055 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA를 이용하여 추출한 후 컬럼정

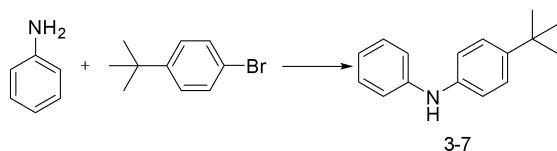
제 (N-HEXANE)하여 <중간체 3-5>를 6.4 g (수율 66.7%) 수득하였다.

(6) 제조예 6 : 중간체 3-6의 합성



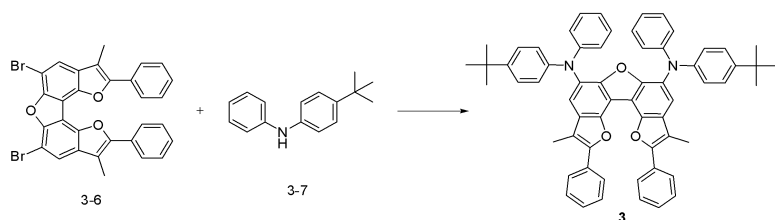
중간체 3-5 (10 g, 0.023 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (8.21 g, 0.051 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 3-6>을 11.5 g (수율 84%) 수득하였다.

(7) 제조예 7 : 중간체 3-7의 합성



1-bromo-4-tert-butylbenzene (10 g, 0.047 mol, sigma aldrich), aniline (5.24 g, 0.056 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (9.02 g, 0.094 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.35 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.95 g, 0.0047 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C 에서 2시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 3-7>을 8.6 g (수율 81%) 수득하였다.

(8) 제조예 8 : 화합물 3의 합성



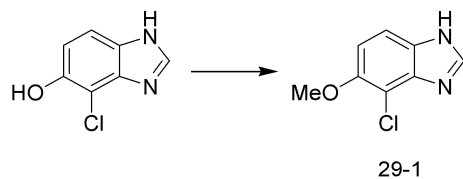
중간체 3-6 (10 g, 0.017 mol), 중간체 3-7 (9.58 g, 0.038 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (4.92 g, 0.051 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.49 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.35 g, 0.0017 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 2시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 3을 12 g (수율 80%) 수득하였다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 2H(7.65/s, 7.41/m, 6.81/m) 4H(8.10/d, 7.51/m, 7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 6H(1.93/s) 18H(1.35/s)

LC/MS: m/z=874[(M+1)⁺]

실시예 2 : 화합물 29 합성

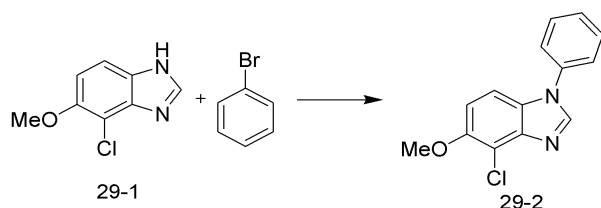
[0153] (1) 제조예 1 : 중간체 29-1의 합성



[0154]

[0155] 4-chloro-1H-benzo[d]imidazol-5-ol (10 g, 0.059 mol, Yurui), iodomethane (12.63 g, 0.089 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (24.59 g, 0.178 mol, sigma aldrich)에 DMF 150 mL를 넣고 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 29-1>을 9.5 g (수율 87.7%) 수득하였다.

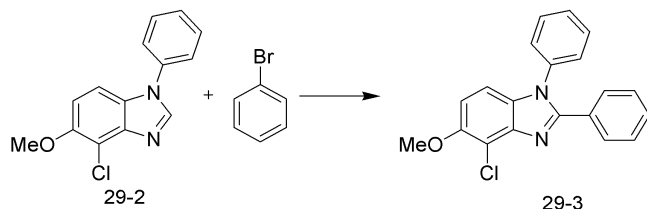
[0156] (2) 제조예 2 : 중간체 29-2의 합성



[0157]

[0158] 중간체 29-1 (10 g, 0.055 mol), bromobenzene (9.81 g, 0.066 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.53 g, 0.110 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.57 g, 0.0027 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (1.11 g, 0.0055 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 2시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 29-2>를 12 g (수율 84.7%) 수득하였다.

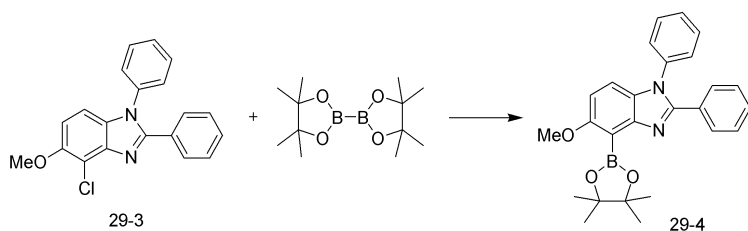
[0159] (3) 제조예 3 : 중간체 29-3의 합성



[0160]

[0161] 중간체 29-2 (10 g, 0.038 mol), MgO (1.87 g, 0.046 mol, sigma aldrich), dioxane 80 mL 넣고 상온에서 10 분 동안 교반시킨 후 CuI (14.72 g, 0.077 mol, sigma aldrich), Pd(OAc)₂ (0.43 g, 0.0019 mol, sigma aldrich), triphenylphosphine (2.03 g, 0.077 mol, sigma aldrich)을 bromobenzene (18.21 g, 0.12 mol, sigma Aldrich)를 dioxane 20 mL에 용해시켜 천천히 적가하고 150 °C 에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 MC를 투입하여 celite filter 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 29-3>을 11 g (수율 85%) 수득하였다.

[0162] (4) 제조예 4 : 중간체 29-4의 합성

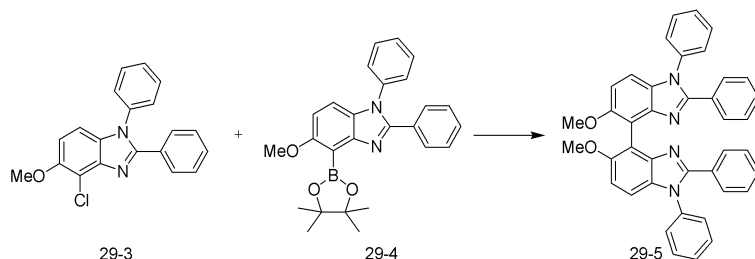


[0163]

[0164] 중간체 29-3 (10 g, 0.03 mol), Bis(pinacolato)diboron (9.86 g, 0.039 mol, sigma aldrich), potassium

acetate (5.86 g, 0.06 mol, sigma aldrich), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (0.66 g, 0.0009 mol, sigma aldrich), 1,4-Dioxane 150 mL 넣고 95 °C 에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : Toluene에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 29-4>를 8.6 g (수율 67.5%) 수득하였다.

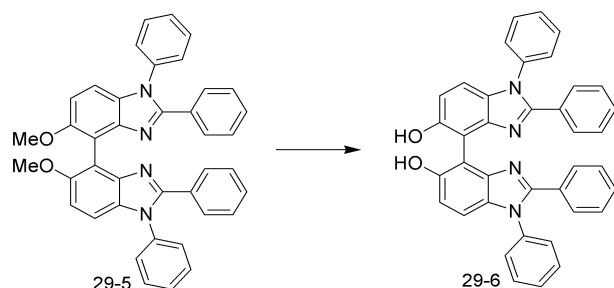
[0165] (5) 제조예 5 : 중간체 29-5의 합성



[0166]

[0167] 중간체 29-3 (10 g, 0.03 mol), 중간체 29-4 (15.28 g, 0.036 mol), potassium carbonate (12.38 g, 0.090 mol, sigma aldrich), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.73 g, 0.0018 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL, EtOH 30 mL, 물 10 mL 넣고 60 °C 에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 29-5>을 15 g (수율 83.9%) 수득하였다.

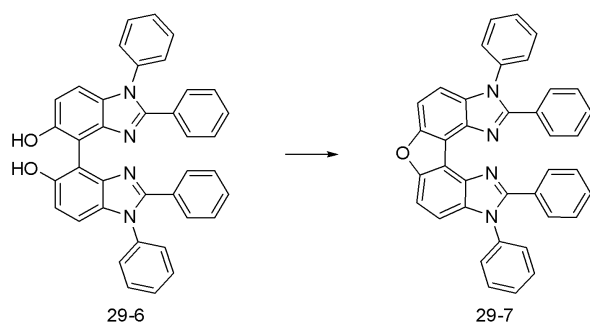
[0168] (6) 제조예 6 : 중간체 29-6의 합성



[0169]

[0170] 중간체 29-5 (10 g, 0.017 mol), dichlorodimethane 100 mL를 넣고 -78 °C 하에서 교반하면서 boron tribromide (16.74 g, 0.070 mol, sigma aldrich)을 천천히 떨어뜨리고 상온에서 5시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 0 °C 로 냉각시켜 물과 ethyl acetate를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : E A)하여 <중간체 29-6>를 8.5 g (수율 89%) 수득하였다.

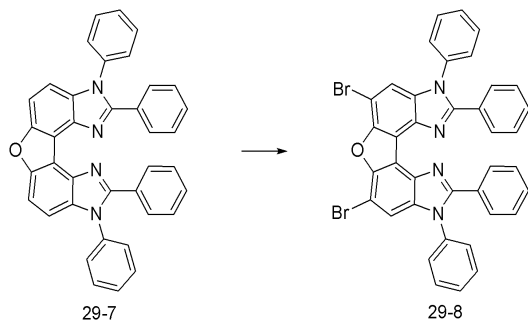
[0171] (7) 제조예 7 : 중간체 29-7의 합성



[0172]

[0173] 중간체 29-6 (10 g, 0.018 mol), p-TsOH (3.62 g, 0.055 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA를 이용하여 추출한 후 컬럼정제 (N-HEXANE)하여 <중간체 29-7>을 6.3 g (수율 65%) 수득하였다.

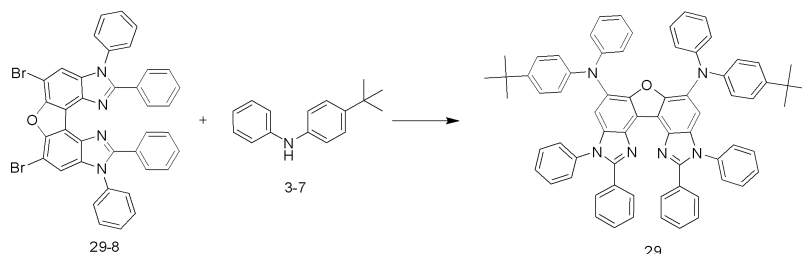
[0174] (8) 제조예 8 : 중간체 29-8의 합성



[0175]

[0176] 중간체 29-7 (10 g, 0.018 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (6.36 g, 0.040 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 29-8>을 10.2 g (수율 79.35%) 수득하였다.

[0177] (9) 제조예 9 : 화합물 29의 합성



[0178]

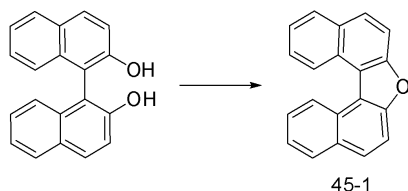
[0179] 중간체 29-8 (10 g, 0.014 mol), 중간체 3-7 (7.30 g, 0.032 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (4.06 g, 0.042 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.40 g, 0.0007 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.28 g, 0.0014 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 29 을 11 g (수율 78%) 수득하였다.

[0180] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 2H(7.45/m, 7.41/m, 6.81/m, 6.39/s) 4H(8.28/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

[0181] LC/MS: m/z=998[(M+1)⁺]

[0182] 실시예 3 : 화합물 45 합성

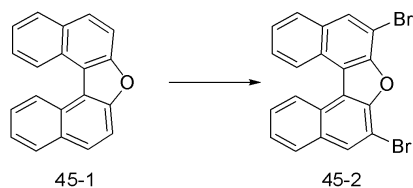
[0183] (1) 제조예 1 : 중간체 45-1의 합성



[0184]

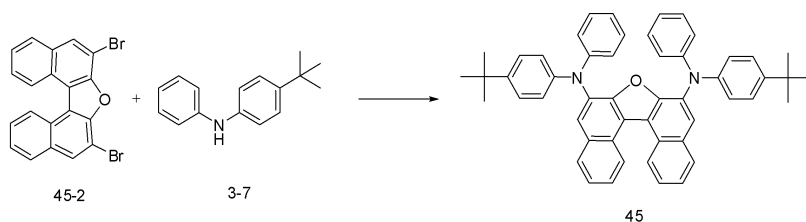
[0185] 1,1'-binaphthyl-2,2'-diol (10 g, 0.035 mol, sigma aldrich), p-TsOH (7.22 g, 0.042 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA 를 이용하여 추출한 후 컬럼정제 (N-HEXANE)하여 <중간체 45-1>을 6.6 g (수율 70%) 수득하였다.

(2) 제조예 2 : 중간체 45-2의 합성



중간체 45-1 (10 g, 0.037 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (13.1 g, 0.082 mol, sigma Aldrich)을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 45-2>을 14 g (수율 88%) 수득하였다.

(3) 제조예 3 : 화합물 45의 합성



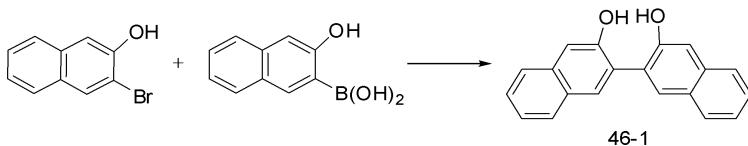
중간체 45-2 (10 g, 0.024 mol), 중간체 3-7 (11.63 g, 0.052 mol), Sodium tert-butoxide (6.77 g, 0.070 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.67 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.47 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 45를 13.7 g (수율 81.7%) 수득하였다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 2H(7.27/s, 6.81/m) 4H(8.0/d, 7.59/m, 7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

LC/MS: m/z=714[(M+1)⁺]

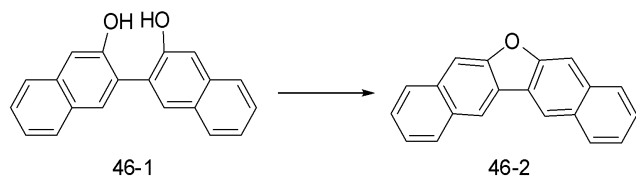
실시예 4 : 화합물 46 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 46-1의 합성



3-bromonaphthalen-2-ol (10 g, 0.045 mol, sigma aldrich), 3-hydroxynaphthalen-2-ylboronic acid (10.96 g, 0.058 mol, alfa), potassium carbonate (15.49 g, 0.112 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (2.59 g, 0.0022 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 46-1>을 10.9 g (수율 85%) 수득하였다.

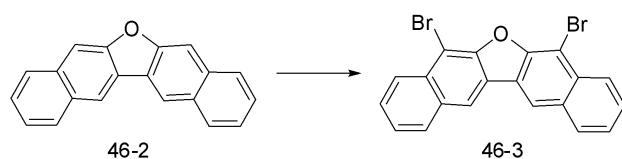
[0198] (2) 제조예 2 : 중간체 46-2의 합성



[0199]

[0200] 중간체 46-1 (10 g, 0.035 mol, sigma aldrich), p-TsOH (7.22 g, 0.042 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA를 이용하여 추출한 후 컬럼정제 (N-HEXANE)하여 <중간체 46-2>를 6.6 g (수율 70%) 수득하였다.

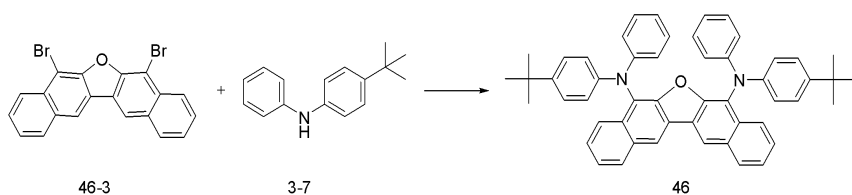
[0201] (3) 제조예 3 : 중간체 46-3의 합성



[0202]

[0203] 중간체 46-2 (10 g, 0.037 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (13.1 g, 0.082 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 46-3>을 14 g (수율 88%) 수득하였다.

[0204] (4) 제조예 4 : 화합물 46의 합성



[0205]

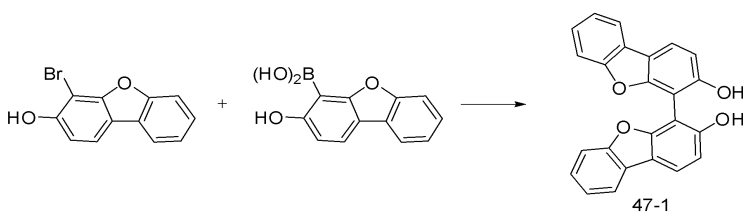
[0206] 중간체 46-3 (10 g, 0.024 mol), 중간체 3-7 (11.63 g, 0.052 mol), Sodium tert-butoxide (6.77 g, 0.070 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.67 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine(0.47 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 46을 13.7 g (수율 81.7%) 수득하였다.

[0207] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(6.98/s, 6.81/m) 4H(8.08/d, 7.55/m, 7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

[0208] LC/MS: m/z=714[(M+1)⁺]

[0209] 실시예 5 : 화합물 47 합성

[0210] (1) 제조예 1 : 중간체 47-1의 합성

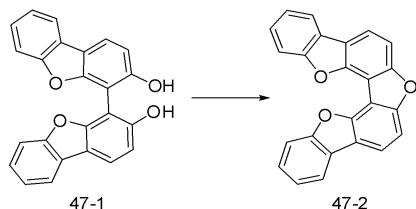


[0211]

[0212] 4-bromodibenzo[b,d]furan-3-ol (10 g, 0.038 mol, Yurui), 3-hydroxydibenzo[b,d]furan-4-ylboronic acid

(11.27 g, 0.050 mol, Yurui), potassium carbonate (13.13 g, 0.095 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (2.20 g, 0.0019 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 47-1>을 11.2 g (수율 80%) 수득하였다.

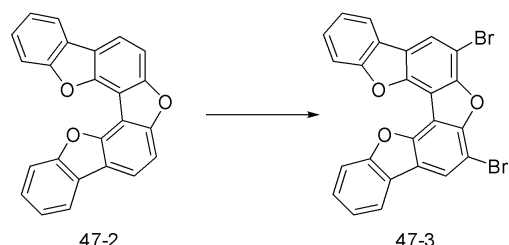
[0213] (2) 제조예 2 : 중간체 47-2의 합성



[0214]

[0215] 중간체 47-1 (10 g, 0.027 mol, sigma aldrich), p-TsOH (6.11 g, 0.036 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA를 이용하여 추출한 후 컬럼정제 (N-HEXANE)하여 <중간체 47-2>를 7.4 g (수율 77.8%) 수득하였다.

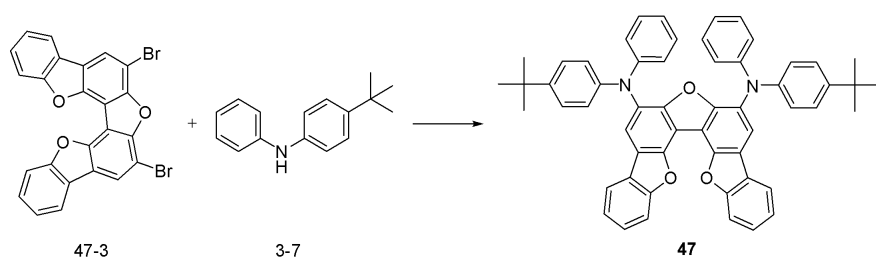
[0216] (3) 제조예 3 : 중간체 47-3의 합성



[0217]

[0218] 중간체 47-2 (10 g, 0.029 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (10.1 g, 0.063 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 47-3>을 12 g (수율 82.5%) 수득하였다.

[0219] (4) 제조예 4 : 화합물 47의 합성



[0220]

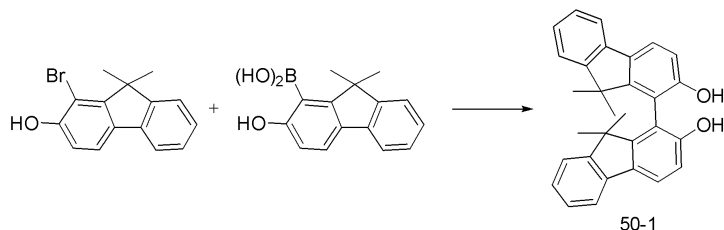
[0221] 중간체 47-3 (10 g, 0.02 mol), 중간체 3-7 (9.79 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.7 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 47을 13 g (수율 82.7%) 수득하였다.

[0222] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.89/d, 7.66/d, 7.65/s, 7.38/m, 7.32/m, 6.81/m) 4H(7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

[0223] LC/MS: m/z=714[(M+1)⁺]

[0224] 실시예 6 : 화합물 50 합성

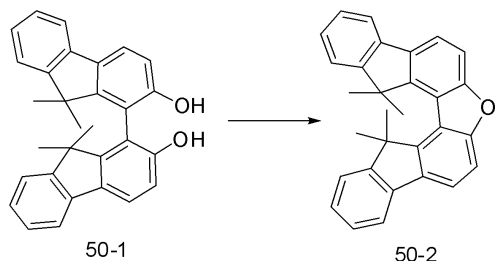
[0225] (1) 제조예 1 : 중간체 50-1의 합성



[0226]

[0227] 1-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-ol (10 g, 0.035 mol, Yurui), 2-hydroxy-9,9-dimethyl-9H-fluoren-1-ylboronic acid (10.54 g, 0.042 mol, Yurui), potassium carbonate (14.34 g, 0.104 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (2.00 g, 0.0017 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 50-1>을 12 g (수율 83%) 수득하였다.

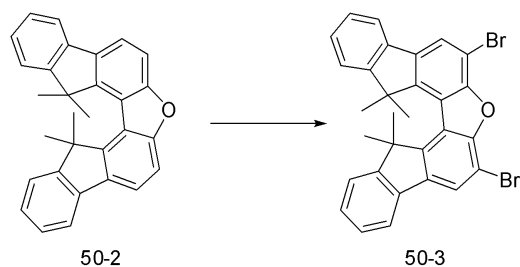
[0228] (2) 제조예 2 : 중간체 50-2의 합성



[0229]

[0230] 중간체 47-1 (10 g, 0.024 mol, sigma aldrich), p-TsOH (9.05 g, 0.053 mol, sigma aldrich), Toluene 100 mL 넣고 12시간 동안 환류교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 potassium carbonate solution : EA를 이용하여 추출한 후 컬럼정제 (N-HEXANE)하여 <중간체 50-2>를 8 g (수율 83.6%) 수득하였다.

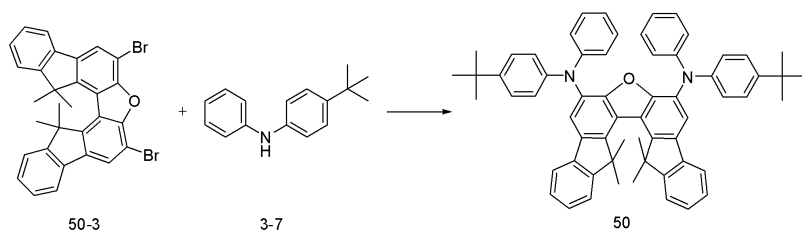
[0231] (3) 제조예 3 : 중간체 50-3의 합성



[0232]

[0233] 중간체 50-2 (10 g, 0.025 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (8.79 g, 0.055 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 50-3>을 11 g (수율 78.9%) 수득하였다.

[0234] (4) 제조예 4 : 화합물 50의 합성



[0235]

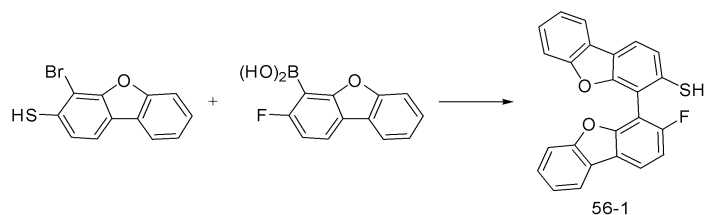
[0236] 중간체 50-3 (10 g, 0.018 mol), 중간체 3-7 (8.88 g, 0.039 mol), Sodium tert-butoxide (5.16 g, 0.054 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.51 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.36 g, 0.0018 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 50을 13 g (수율 82.7%) 수득하였다.

[0237] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(8.09/d, 7.61/d, 7.49/s, 7.44/m, 7.24/m, 6.81/d) 4H(7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 12H(1.72/s) 18H(1.35/s)

[0238] LC/MS: $m/z=846[(M+1)^+]$

[0239] 실시예 7 : 화합물 56 합성

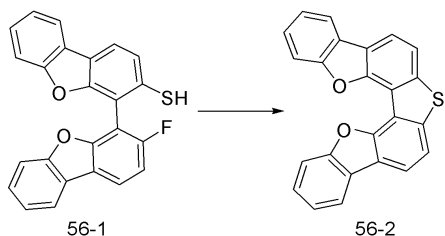
[0240] (1) 제조예 1 : 중간체 56-1의 합성



[0241]

[0242] 4-bromodibenzo[b,d]furan-3-thiol (10 g, 0.036 mol, Yurui), 3-fluorodibenzo[b,d]furan-4-ylboronic acid (9.89 g, 0.043 mol, Yurui), potassium carbonate (12.38 g, 0.090 mol, sigma aldrich), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (2.07 g, 0.0018 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 56-1>을 11.5 g (수율 83.5%) 수득하였다.

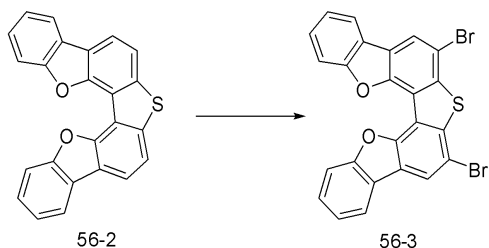
[0243] (2) 제조예 2 : 중간체 56-2의 합성



[0244]

[0245] 중간체 29-6 (10 g, 0.026 mol), NaH (0.94 g, 0.039 mol, sigma aldrich), Dimethyl sulfoxide 100 mL 넣고 140 °C에서 5 시간동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 56-2>를 4 g (수율 42%) 수득하였다.

[0246] (3) 제조예 3 : 중간체 56-3의 합성

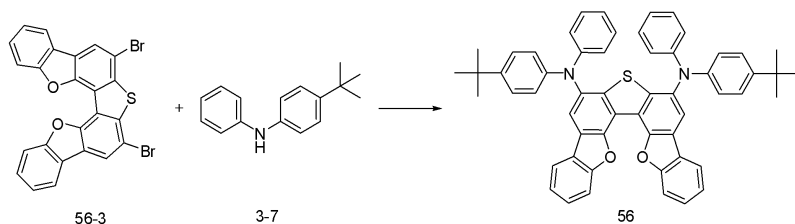


[0247]

[0248] 중간체 50-2 (10 g, 0.027 mol), chloroform 200 mL 넣고 0 °C로 냉각 후 교반하면서 bromine (9.65 g, 0.060 mol, sigma Aldrich) 을 천천히 떨어뜨린다. 0 °C에서 1시간 동안 교반 후 상온에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종료 후 탄산수소나트륨 수용액을 넣고 층분리를 한 후 재결정 진행하여 <중간체 50-3>을 11.5 g (수율

80%) 수득하였다.

[0249] (4) 제조예 4 : 화합물 56의 합성



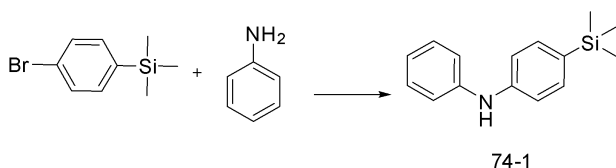
중간체 56-3 (10 g, 0.019 mol), 중간체 3-7 (9.49 g, 0.042 mol), Sodium tert-butoxide (5.52 g, 0.057 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.55 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.39 g, 0.0019 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 56을 13 g (수율 83.7%) 수득하였다.

H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.89/d, 7.66/d, 7.38/m, 7.32/m, 6.93/s, 6.81/d) 4H(7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

LC/MS: m/z=811[(M+1)⁺]

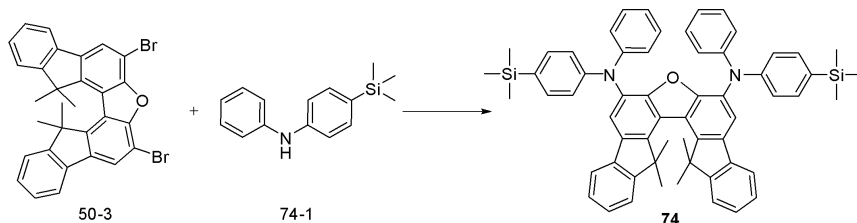
[0254] 실시예 8 : 화합물 74 합성

[0255] (1) 제조예 1 : 중간체 74-1의 합성



(4-bromophenyl)trimethylsilane (10 g, 0.044 mol, sigma aldrich), aniline (4.88 g, 0.052 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (8.39 g, 0.087 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.25 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.88 g, 0.0044 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 74-1>을 8.5 g (수율 80.7%) 수득하였다.

[0258] (2) 제조예 2 : 화합물 74의 합성



중간체 50-3 (10 g, 0.018 mol), 중간체 74-1 (9.51 g, 0.039 mol), Sodium tert-butoxide (5.16 g, 0.054 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.51 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.36 g, 0.0018 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 74을 13.4 g (수율 85%) 수득하였다.

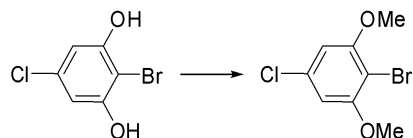
H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(8.09/d, 7.61/d, 7.49/s, 7.24/m, 6.81/m) 4H(7.20/m, 7.15/d, 6.63/d,

6.61/d) 12H(1.72/s) 18H(0.25/s)

[0262] LC/MS: m/z=878[(M+1)⁺]

[0263] 실시예 9 : 화합물 98 합성

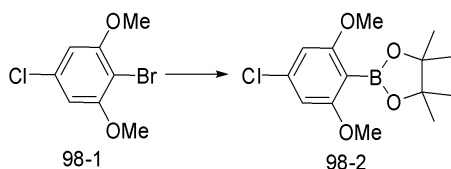
[0264] (1) 제조예 1 : 중간체 98-1의 합성



[0265]

[0266] 2-bromo-5-chlorobenzene-1,3-diol (10 g, 0.045 mol, Yurui), iodomethane (19.06 g, 0.134 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (30.93 g, 0.224 mol, sigma aldrich)에 DMF 150 mL를 넣고 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 98-1>을 10 g (수율 88.9%) 수득하였다.

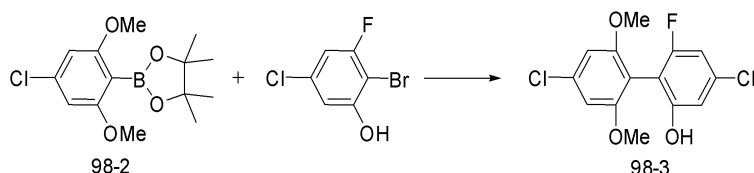
[0267] (2) 제조예 2 : 중간체 98-2의 합성



[0268]

[0269] 중간체 98-1 (10 g, 0.04 mol), Bis(pinacolato)diboron (13.13 g, 0.052 mol, sigma aldrich), potassium acetate (7.8 g, 0.080 mol, sigma aldrich), PdCl₂(dppf) (0.87 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), 1,4-Dioxane 150 mL 넣고 95 °C 에서 12시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : Toluene에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : MC)하여 <중간체 98-2>를 19 g (수율 40%) 수득하였다.

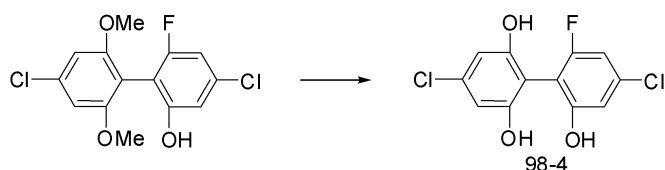
[0270] (3) 제조예 3 : 중간체 98-3의 합성



[0271]

[0272] 2-bromo-5-chloro-3-fluorophenol (10 g, 0.044 mol), 중간체 98-2 (15.89 g, 0.053 mol, Yurui), potassium carbonate (15.33 g, 0.111 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (2.56 g, 0.0022 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 98-3>을 11.8 g (수율 83.8%) 수득하였다.

[0273] (4) 제조예 4 : 중간체 98-4의 합성

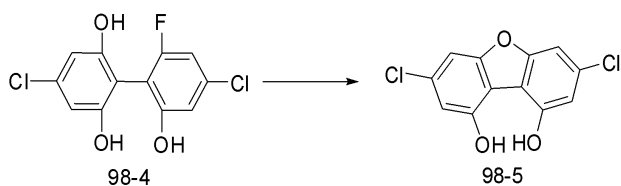


[0274]

[0275] 중간체 98-3 (10 g, 0.032 mol), dichlorodimethane 100 mL를 넣고 -78 °C 하에서 교반하면서 boron tribromide (26.07 g, 0.104 mol, sigma aldrich)을 천천히 떨어뜨리고 상온에서 5시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 0 °C로 냉각시켜 물과 ethyl acetate를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : E

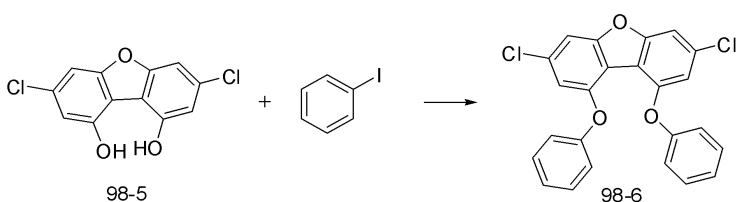
A)하여 <중간체 98-4>를 7.4 g (수율 81%) 수득하였다.

[0276] (5) 제조예 5 : 중간체 98-5의 합성



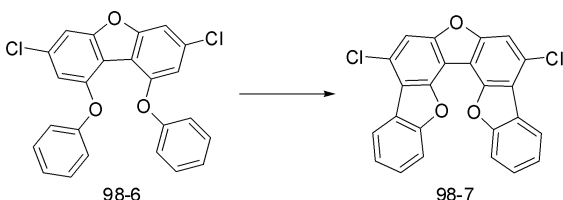
[0277] 중간체 98-4 (10 g, 0.035 mol), NaH (1.25 g, 0.052 mol, sigma aldrich), Dimethyl sulfoxide 100 mL 넣고 140 °C에서 5시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 98-5>를 4 g (수율 42%) 수득하였다.

[0279] (6) 제조예 6 : 중간체 98-6의 합성



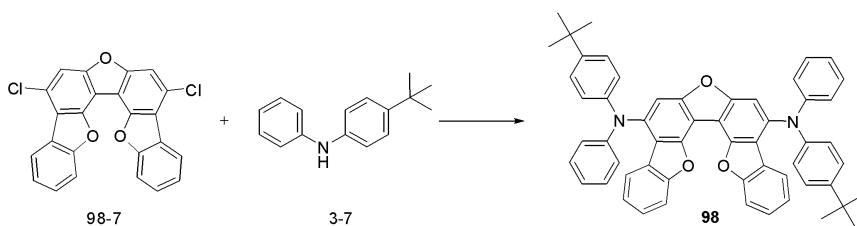
[0280] 중간체 98-5 (10 g, 0.037 mol), iodobenzene (19 g, 0.093 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (20.54 g, 0.149 mol, sigma aldrich), CuI (17.69 g, 0.093 mol, sigma aldrich), Fe(acac)₃ (1.31 g, 0.0037 mol, sigma aldrich), Dimethyl sulfoxide 100 mL 넣고 140 °C에서 60시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 98-6>를 12 g (수율 76.7%) 수득하였다.

[0282] (7) 제조예 7 : 중간체 98-7의 합성



[0283] 중간체 98-6 (10 g, 0.024 mol), potassium carbonate (0.66 g, 0.05 mol, sigma aldrich), Pd(OAc)₂ (0.27 g, 0.012 mol, sigma aldrich), pivalic acid 넣고 120 °C에서 36시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 98-7>를 7 g (수율 70.7%) 수득하였다.

[0285] (8) 제조예 8 : 화합물 98의 합성



[0286] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 3-7 (11.88 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.69 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료

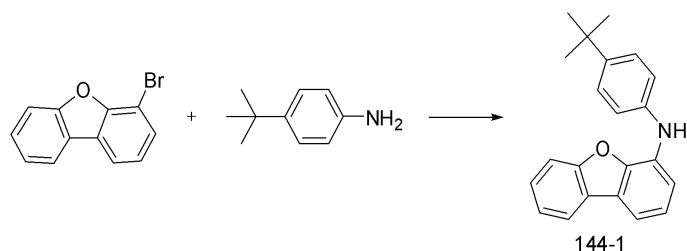
후 H₂O : EA를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 98을 15.9 g (수율 83.5%) 수득하였다.

[0288] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 2H(7.89/d, 7.66/d, 7.38/m, 7.32/m, 7.14/s, 6.81/m) 4H(7.20/m, 7.01/d, 6.63/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

[0289] LC/MS: m/z=794[(M+1)⁺]

[0290] 실시예 10 : 화합물 144 합성

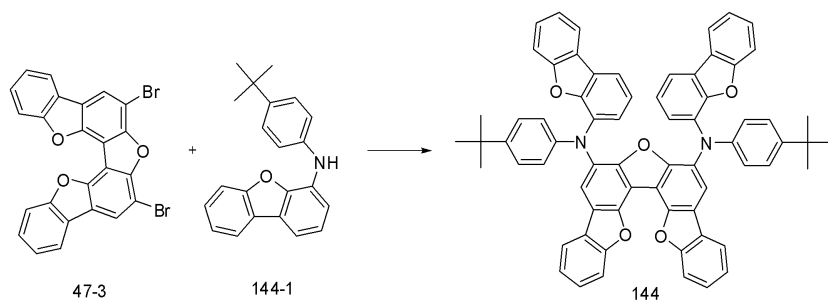
[0291] (1) 제조예 1 : 중간체 144-1의 합성



[0292]

[0293] 4-bromodibenzo[b,d]furan (10 g, 0.041 mol, sigma aldrich), 4-tert-butylaniline (7.25 g, 0.047 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (7.78 g, 0.081 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.16 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.82 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA 를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 144-1>을 10.2 g (수율 80%) 수득하였다.

[0294] (2) 제조예 2 : 화합물 144의 합성



[0295]

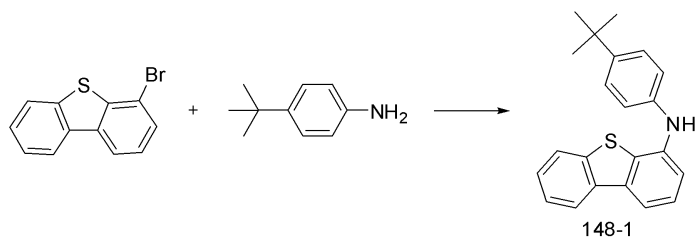
[0296] 중간체 47-3 (10 g, 0.020 mol), 중간체 144-1 (13.71 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.70 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 144을 15.7 g (수율 81.5%) 수득하였다.

[0297] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 2H(7.65/s, 7.25/d, 7.07/m, 6.39/d) 4H(7.89/d, 7.66/d, 7.38/m, 7.32/m, 7.01/d, 6.55/d) 18H(1.35/s)

[0298] LC/MS: m/z=974[(M+1)⁺]

[0299] 실시예 11 : 화합물 148 합성

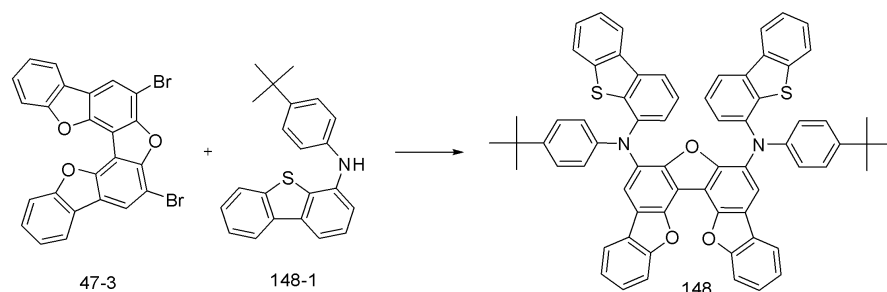
[0300] (1) 제조예 1 : 중간체 148-1의 합성



[0301]

[0302] 4-bromodibenzo[b,d]thiophene (10 g, 0.038 mol, sigma aldrich), 4-tert-butylaniline (6.81 g, 0.046 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.96 g, 0.114 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)_2 (1.09 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.77 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA 를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 148-1>을 10 g (수율 79%) 수득하였다.

[0303] (2) 제조예 2 : 화합물 148의 합성



[0304]

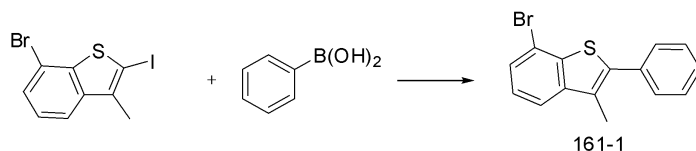
[0305] 중간체 47-3 (10 g, 0.020 mol), 중간체 148-1 (14.41 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.70 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)_2 (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 148을 16 g (수율 80%) 수득하였다.

[0306] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(8.45/d, 7.98/d, 7.86/d, 7.81/d, 7.56/m, 7.54/d, 7.49/m, 7.39/m, 7.31/m, 7.08/m, 6.51/d, 6.39/s) 4H(7.01/d, 6.38/d) 18H(1.33/s)

[0307] LC/MS: $m/z=1006[(M+1)^+]$

[0308] 실시예 12 : 화합물 161 합성

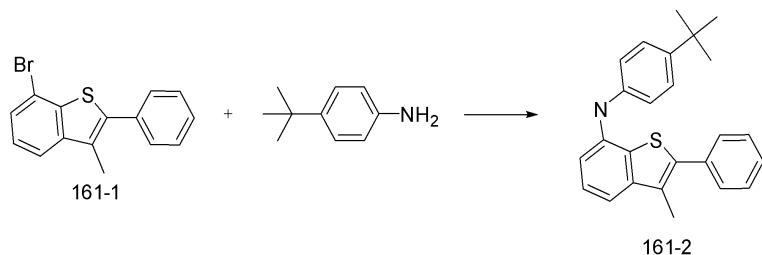
[0309] (1) 제조예 1 : 중간체 161-1의 합성



[0310]

[0311] 2-bromo-3-methylbenzo[b]thiophene (10 g, 0.028 mol, Yurui), phenylboronic acid (4.14 g, 0.034 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (11.75 g, 0.085 mol, sigma aldrich), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (1.64 g, 0.0014 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 161-1>을 7.2 g (수율 83.8%) 수득하였다.

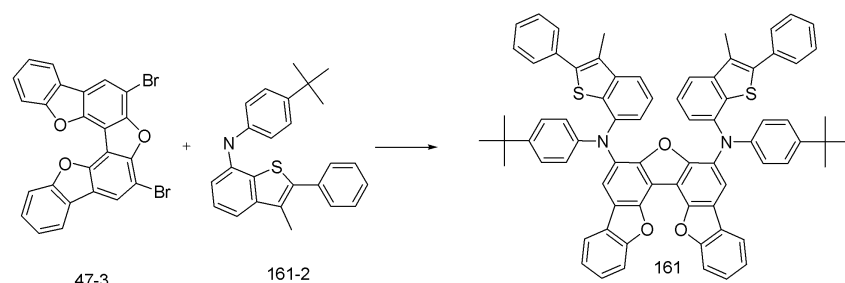
[0312] (2) 제조예 2 : 중간체 161-2의 합성



[0313]

[0314] 중간체 161-1 (10 g, 0.033 mol), 4-tert-butylaniline (5.91 g, 0.040 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (9.51 g, 0.099 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.95 g, 0.0016 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.67 g, 0.0033 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 161-2>를 10 g (수율 81.8%) 수득하였다.

[0315] (3) 제조예 3 : 화합물 161의 합성



[0316]

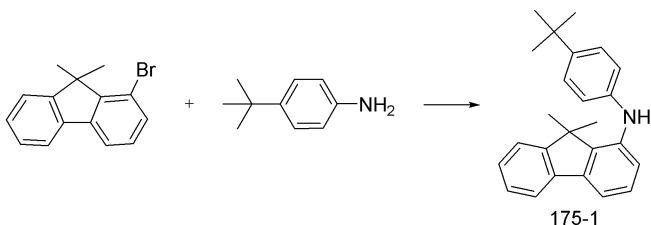
[0317] 중간체 47-3 (10 g, 0.020 mol), 중간체 161-2 (16.11 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.70 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 161을 17.4 g (수율 81%) 수득하였다.

[0318] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.31/m, 7.1/m, 7.09/d, 6.5/d, 6.39/s) 4H(7.01/d, 6.38/d) 6H(2.21/s) 10H(7.48/m) 18H(1.33/s)

[0319] LC/MS: $m/z=1086[(M+1)^+]$

[0320] 실시예 13 : 화합물 175 합성

[0321] (1) 제조예 1 : 중간체 175-1의 합성

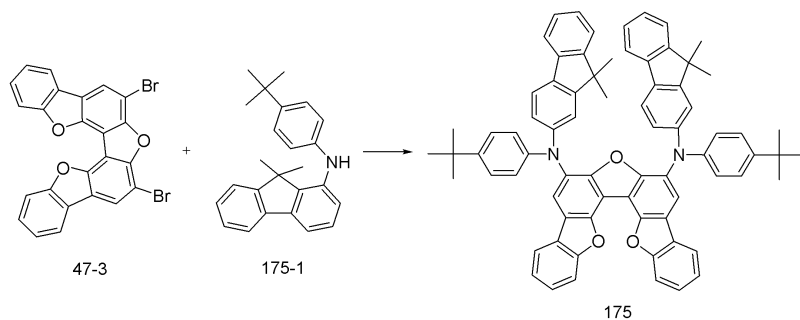


[0322]

[0323] 1-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (10 g, 0.037 mol, Yurui), 4-tert-butylaniline (6.56 g, 0.044 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.55 g, 0.110 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (1.05 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.74 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA 를 이용하여 증분리를 한 후 컬럼정제 (N-

HEXANE : EA)하여 <중간체 175-1>을 10.7 g (수율 85.6%) 수득하였다.

(2) 제조예 2 : 화합물 175의 합성



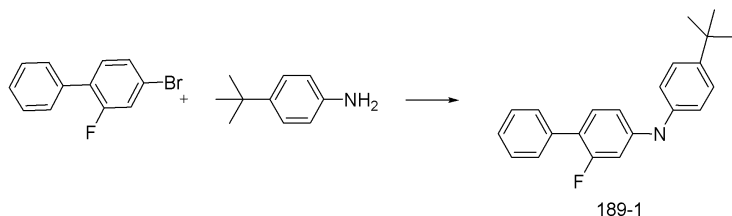
중간체 47-3 (10 g, 0.020 mol), 중간체 175-1 (14.84 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.70 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 175을 17 g (수율 83.8%) 수득하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.84/d, 7.59/d, 7.55/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.38/m, 7.31/m, 7.28/m, 6.75/s, 6.58/d, 6.39/s) 4H(7.01/d, 6.38/d) 12H(1.67/s) 18H(1.33/s)

LC/MS: $m/z=1026[(M+1)^+]$

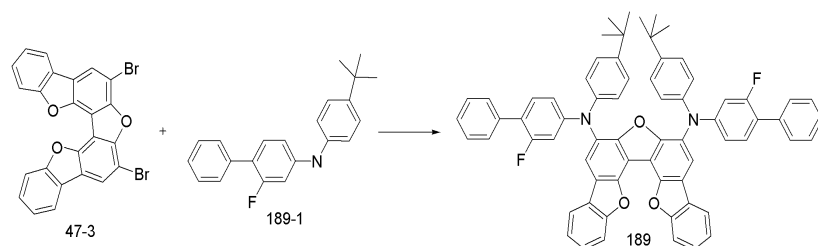
실시예 14 : 화합물 189 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 189-1의 합성



4-bromo-2-fluorobiphenyl (10 g, 0.037 mol, sigma aldrich), 4-tert-butylaniline (6.56 g, 0.044 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.55 g, 0.110 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (1.05 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.74 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA 를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 175-1>을 10.7 g (수율 85.6%) 수득하였다.

(2) 제조예 2 : 화합물 189의 합성



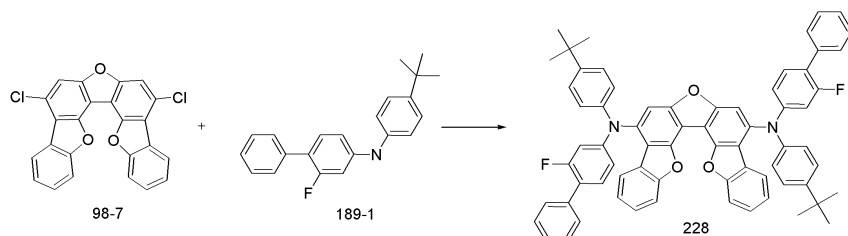
중간체 47-3 (10 g, 0.020 mol), 중간체 189-1 (14.54 g, 0.044 mol), Sodium tert-butoxide (5.70 g, 0.059 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.57 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.40 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료

후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 189을 15.7 g (수율 80.8%) 수득하였다.

[0336] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.31/m, 7.21/d, 6.39/s, 6.29/d, 6.23/) 4H(7.46/m, 7.01/d, 6.38/d) 6H(7.48/d) 18H(1.33/s)

[0337] LC/MS: m/z=982[(M+1)⁺]

[0338] 실시예 15 : 화합물 228 합성



[0339]

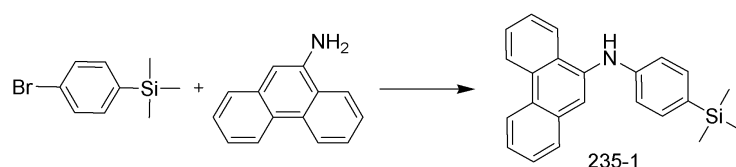
[0340] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 189-1 (17.63 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.69 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 228을 19 g (수율 80.6%) 수득하였다.

[0341] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.31/m, 7.21/d, 6.62/s, 6.29/d, 6.23/s) 4H(7.46/m, 7.01/d, 6.38/d) 6H(7.48/d) 18H(1.33/s)

[0342] LC/MS: m/z=982[(M+1)⁺]

[0343] 실시예 16 : 화합물 235 합성

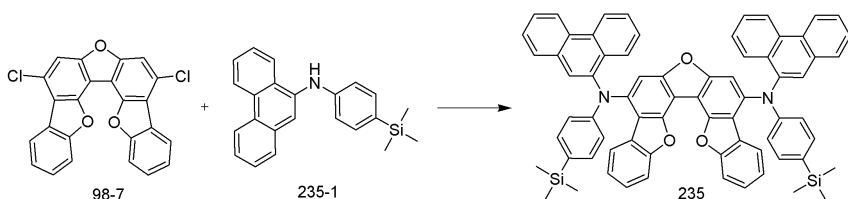
[0344] (1) 제조예 1 : 중간체 235-1의 합성



[0345]

[0346] (4-bromophenyl)trimethylsilane (10 g, 0.044 mol, sigma aldrich), 9-aminophenanthrene (7.29 g, 0.052 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (12.58 g, 0.131 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.25 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.88 g, 0.0044 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 235-1>을 12.6 g (수율 84.6%) 수득하였다.

[0347] (2) 제조예 2 : 화합물 235의 합성



[0348]

[0349] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 235-1 (18.01 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.69 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g,

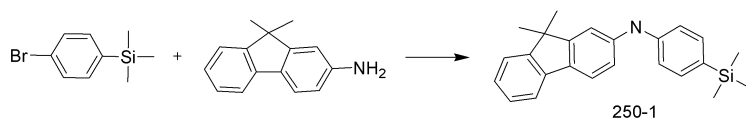
0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 235을 20.1 g (수율 81.6%) 수득하였다.

[0350] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.31/m, 6.91/s, 6.62/s) 4H(8.93/d, 8.12/s, 7.88/m, 7.82/m, 7.23/d, 6.44/d) 18H(0.66/s)

[0351] LC/MS: $m/z=1026[(M+1)^+]$

[0352] 실시예 17 : 화합물 250 합성

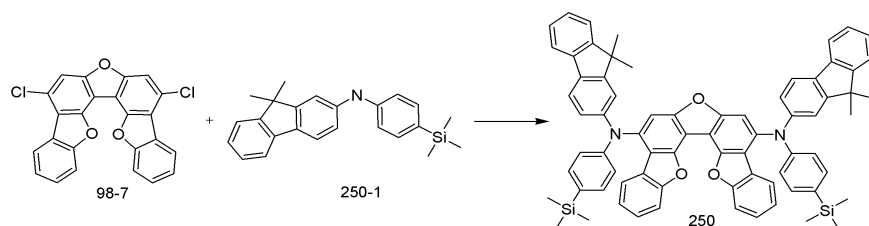
[0353] (1) 제조예 1 : 중간체 250-1의 합성



[0354]

[0355] (4-bromophenyl)trimethylsilane (10 g, 0.044 mol, sigma aldrich), 2-amino-9,9-dimethyl-9H-fluorene (10.96 g, 0.052 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (12.58 g, 0.131 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1.25 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.88 g, 0.0044 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 250-1>을 13.2 g (수율 81%) 수득하였다.

[0356] (2) 제조예 2 : 화합물 250의 합성



[0357]

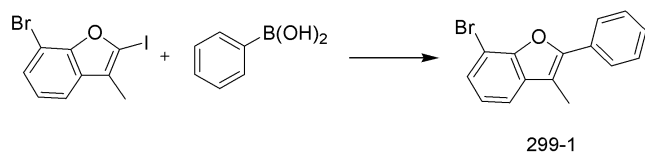
[0358] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 250-1 (19.65 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.69 g, 0.0012 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 250을 21 g (수율 82.7%) 수득하였다.

[0359] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.84/d, 7.59/d, 7.55/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.38/m, 7.31/m, 7.28/m, 6.75/s, 6.62/s, 6.58/d) 4H(7.23/d, 6.44/d) 12H(1.67/s) 18H(0.66/s)

[0360] LC/MS: $m/z=1058[(M+1)^+]$

[0361] 실시예 18 : 화합물 299 합성

[0362] (1) 제조예 1 : 중간체 299-1의 합성

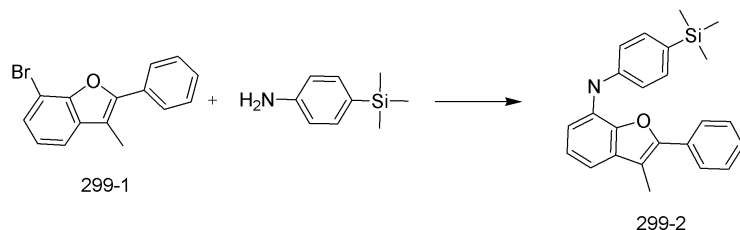


[0363]

[0364] 7-bromo-2-iodo-3-methylbenzofuran (10 g, 0.030 mol, Yurui), phenylboronic acid (4.34 g, 0.036 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (12.31 g, 0.089 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (1.64 g, 0.0014 mol,

sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 161-1>을 7.2 g (수율 82%) 수득하였다.

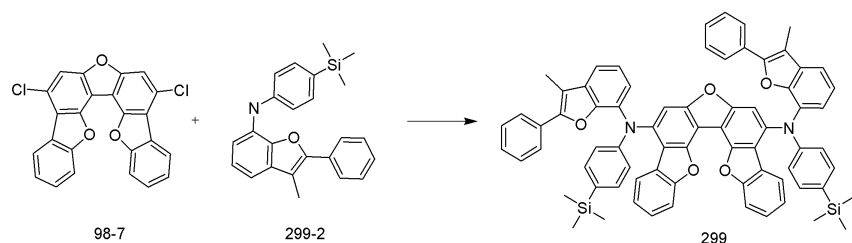
[0365] (2) 제조예 2 : 중간체 299-2의 합성



[0366]

[0367] 중간체 299-1 (10 g, 0.035 mol), 4-(trimethylsilyl)benzenamine (6.91 g, 0.042 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.04 g, 0.105 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (1 g, 0.0017 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.70 g, 0.0035 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C 에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 299-2>를 10.6 g (수율 82%) 수득하였다.

[0368] (3) 제조예 3 : 화합물 299의 합성



[0369]

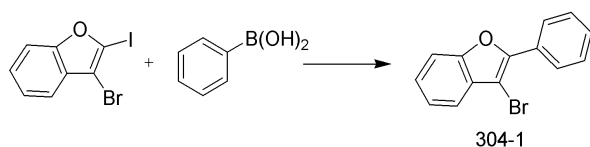
[0370] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 299-2 (19.54 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 Pd(dba)₂ (0.69 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 299을 21 g (수율 80.6%) 수득하였다.

[0371] H-NMR (200MHz, CDC13): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.39/m, 7.31/m, 6.9/m, 6.8/d, 6.62/s, 6.4/d) 4H(7.60/m, 7.23/d, 6.44/d) 6H(7.48/m, 1.94/s) 18H(0.66/s)

[0372] LC/MS: m/z=1086[(M+1)⁺]

[0373] 실시예 19 : 화합물 304 합성

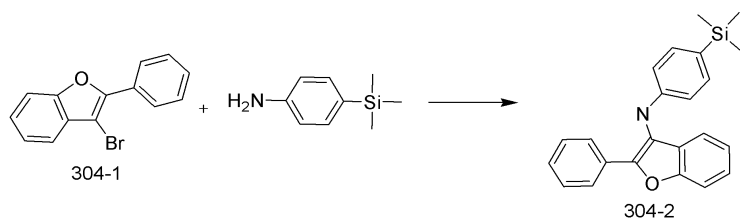
[0374] (1) 제조예 1 : 중간체 304-1의 합성



[0375]

[0376] 3-bromo-2-iodobenzofuran (10 g, 0.030 mol, Yurui), phenylboronic acid (4.53 g, 0.037 mol, sigma aldrich), potassium carbonate (12.84 g, 0.093 mol, sigma aldrich), Pd(PPh₃)₄ (1.79 g, 0.0015 mol, sigma aldrich), THF 100 mL, 물 25 mL 넣고 60 °C에서 6시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H₂O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 304-1>을 6.8 g (수율 80%) 수득하였다.

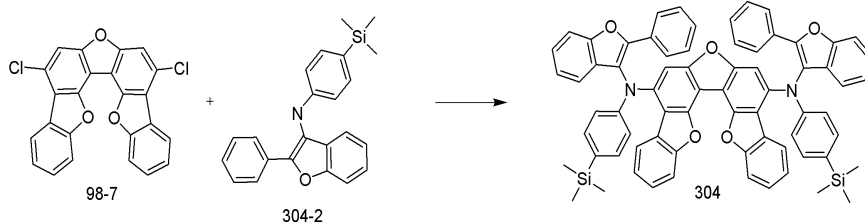
[0377] (2) 제조예 2 : 중간체 304-2의 합성



[0378]

[0379] 중간체 304-1 (10 g, 0.037 mol), 4-(trimethylsilyl)benzenamine (7.26 g, 0.044 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (10.56 g, 0.11 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (1.05 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.74 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : E A)하여 <중간체 304-2>를 11 g (수율 81%) 수득하였다.

[0380] (3) 제조예 3 : 화합물 304의 합성



[0381]

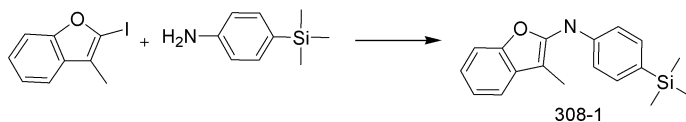
[0382] 중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 304-2 (19.64 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.69 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 304을 20.5 g (수율 80.7%) 수득하였다.

[0383] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.50/d, 7.4/d, 7.31/m, 7.1/m, 6.62/s) 4H(7.60/m, 7.39/m, 7.23/d, 6.44/d) 6H(7.48/d) 18H(0.66/s)

[0384] LC/MS: $m/z=1058[(M+1)^+]$

[0385] 실시예 20 : 화합물 308 합성

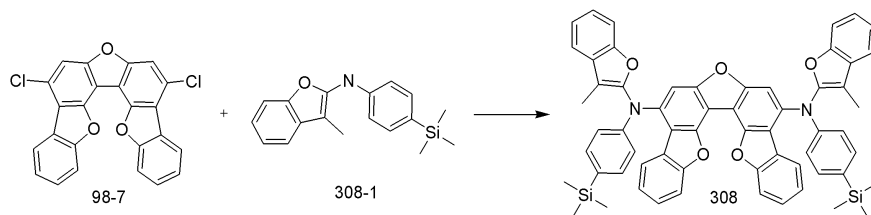
[0386] (1) 제조예 1 : 중간체 308-1의 합성



[0387]

[0388] 2-iodo-3-methylbenzofuran (10 g, 0.039 mol), 4-(trimethylsilyl) benzenamine (7.69 g, 0.047 mol, sigma aldrich), Sodium tert-butoxide (11.17 g, 0.12 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (1.11 g, 0.002 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.78 g, 0.004 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 <중간체 308-1>를 9.3 g (수율 81.5%) 수득하였다.

(2) 제조예 2 : 화합물 308의 합성



중간체 98-7 (10 g, 0.024 mol), 중간체 308-1 (15.53 g, 0.053 mol), Sodium tert-butoxide (6.91 g, 0.072 mol, sigma aldrich), 촉매 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.69 g, 0.001 mol, sigma aldrich), tri-tert-Bu-phosphine (0.48 g, 0.0024 mol, sigma aldrich)에 Toluene 100 mL를 넣고 100 °C에서 4시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : EA를 이용하여 층분리를 한 후 컬럼정제 (N-HEXANE : EA)하여 화합물 308을 18 g (수율 80%) 수득하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.98/d, 7.54/d, 7.50/d, 7.4/d, 7.31/m, 7.1/m, 6.62/s) 4H(7.39/m, 7.23/d, 6.44/d) 6H(1.94/s) 18H(0.66/s)

LC/MS: $m/z=934[(M+1)^+]$

소자 실시예

본 발명에 따른 실시예에서, ITO 투명 전극은 25 mm × 25 mm × 0.7 mm의 유리 기판 위에, ITO 투명 전극이 부착된 ITO 유리 기판을 이용하여, 발광 면적이 2 mm × 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-6} torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 하기 구조로 유기물과 금속을 증착하였다.

소자 실시예 1 내지 20

본 발명에 따른 [화학식]로 구현되는 화합물을 발광층의 화합물로 하여, 하기와 같은 소자 구조를 갖는 청색 발광 유기전계발광소자를 제조하여, 발광 효율을 포함한 발광 특성을 측정하였다.

ITO / 정공주입층(HAT_CN 5 nm) / 정공수송층(α -NPB 100 nm) / 발광층(b-AND 20 nm) / 전자수송층(201:Liq 30 nm) / LiF(1 nm) / Al (100 nm)

ITO 투명 전극에 정공주입층을 형성하기 위해 [HAT-CN]을 이용하여 정공주입층의 두께를 5 nm로 진공 열증착 방법으로 형성하고, 이후 정공수송층을 α -NPB를 사용하여 성막하였다. 또한 발광층에는 호스트 화합물로는 [BH 1]을 사용하고, 도판트 화합물로 본 발명으로 구현되는 [화학식]을 사용하여 두께가 20 nm 정도가 되도록 성막하였으며, 추가로 전자 수송층(하기 [201] 화합물 Liq 50% 도핑) 30 nm 및 LiF 1nm 및 알루미늄 100 nm를 증착 방법으로 성막하여, 유기전계발광소자를 제조하였다.

소자 비교예 1

소자 비교예 1를 위한 유기전계발광소자는 상기 실시예 1의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 형광 도펀트 물질로 많이 사용되고 있는 화합물 BD1를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작을 제외하고 동일하게 제작하였다

실험예 1 : 소자 실시예 1 내지 20의 발광 특성

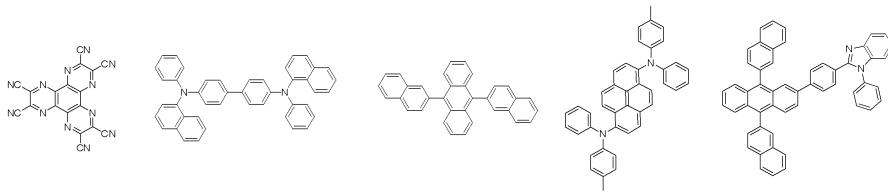
상기 실시예에 따라 제조된 유기전계발광소자는 Source meter (Model 237, Keithley)와 휘도계 (PR-650, Photo Research)를 이용하여 전압, 전류 및 발광 효율을 측정하였고, 전류 밀도 10 mA/cm^2 가 되는 전압을 "구동 전압"으로 정의하여 비교하였다. 결과는 하기 [표 1]과 같다.

표 1

실시예	발광재료	V	cd/A	lm/w	CIE _x	CIE _y
1	화학식 3	4.1	6.0	4.60	0.131	0.124
2	화학식 29	4.0	5.9	4.63	0.132	0.129

3	화학식 45	4.0	6.1	4.79	0.130	0.116
4	화학식 46	3.9	6.1	4.91	0.130	0.120
5	화학식 47	4.2	6.3	4.71	0.129	0.110
6	화학식 50	4.1	6.2	4.75	0.132	0.112
7	화학식 56	4.1	6.1	4.67	0.133	0.113
8	화학식 74	4.2	6.0	4.49	0.128	0.122
9	화학식 98	4.0	6.4	5.02	0.129	0.119
10	화학식 144	3.9	6.2	4.99	0.132	0.127
11	화학식 148	4.2	5.8	4.34	0.130	0.121
12	화학식 161	4.0	6.4	5.02	0.130	0.125
13	화학식 175	4.1	6.2	4.75	0.132	0.121
14	화학식 189	4.0	6.3	4.95	0.128	0.108
15	화학식 228	4.2	6.1	4.56	0.131	0.117
16	화학식 235	4.0	6.0	4.71	0.132	0.127
17	화학식 250	3.9	5.9	4.75	0.130	0.130
18	화학식 299	4.2	6.3	4.71	0.131	0.130
19	화학식 304	4.1	6.2	4.75	0.129	0.127
20	화학식 308	4.0	6.1	4.79	0.131	0.124
비교예	BD1	4.6	5.3	3.62	0.132	0.150

[0405] 상기 [표 1]에 나타낸 결과를 살펴보면, 먼저, 본 발명에 따른 전자저지층을 화합물 소자에 적용한 경우에 종래 소자(비교예)에 비하여 발광 효율, 양자 효율 등 발광 특성이 현저히 우수함을 확인할 수 있다.

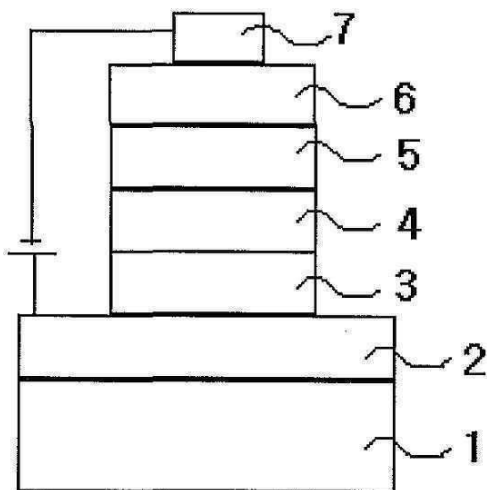


[0406]

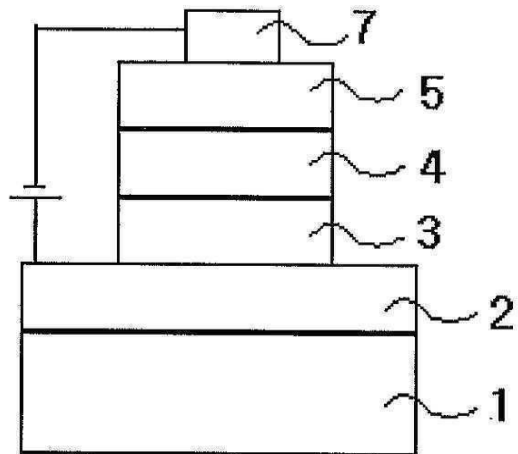
[0407] [HAT_CN] [α-NPB] [BH1] [BD1] [201]

도면

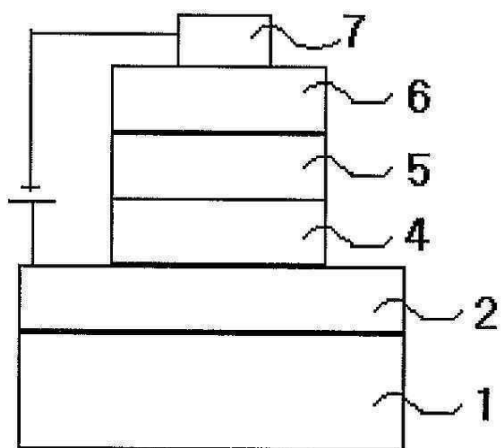
도면1



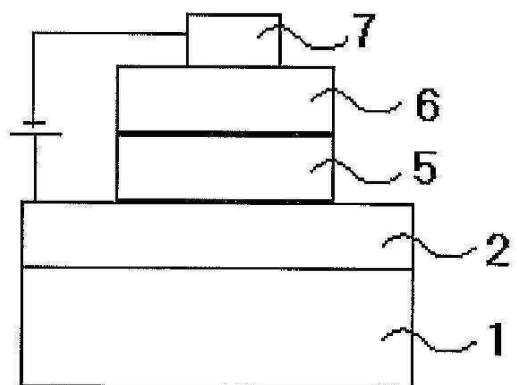
도면2



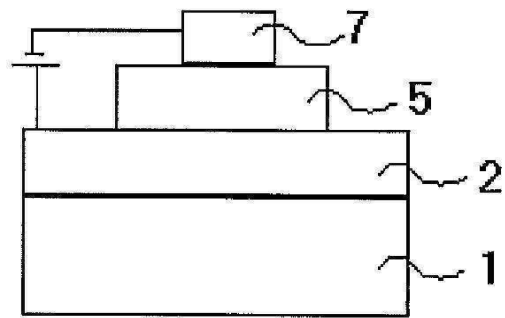
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020170082459A	公开(公告)日	2017-07-14
申请号	KR1020170000068	申请日	2017-01-02
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社P&H技术		
申请(专利权)人(译)	(注) 皮恩扎HI TECH		
当前申请(专利权)人(译)	(注) 皮恩扎HI TECH		
[标]发明人	HYUN SEO YONG 현서용 JUNG SUNG OUK 정성욱 KIM DONG WON 김동원 LEE NAM JIN 이남진		
发明人	현서용 정성욱 김동원 이남진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D493/14 C07D495/14 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	Y02B20/181		
优先权	1020160001566 2016-01-06 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光器件中使用的有机发光化合物。并且如下所示[化学式1]，并且其中包括驱动电压，亮度和寿命等的光发射率优异的有机电致发光器件可以实现为发光层内的掺杂剂化合物。通过案例。[化学式1] imgtagRe @

