



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0006007
(43) 공개일자 2016년01월18일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/90 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-0085277

(22) 출원일자 2014년07월08일

심사청구일자 2015년06월18일

(71) 출원인

(주)피엔에이치테크

경기도 용인시 기흥구 동백중앙로16번길 16-25,
706호(중동, 대우프론티어밸리1단지)

(72) 발명자

현서용

경기도 용인시 수지구 손곡로 54 201동 503호(동
천동, 수진마을아이파크효성화운트빌아파트)

정성욱

충청북도 청주시 흥덕구 산남로 23 101동 701호
(산남동, 산남계룡리슈빌아파트)

박성준

경기도 오산시 여계산로 58 511동 802호(금암동,
금암마을휴먼시아5단지아파트)

(74) 대리인

정은열

전체 청구항 수 : 총 10 항

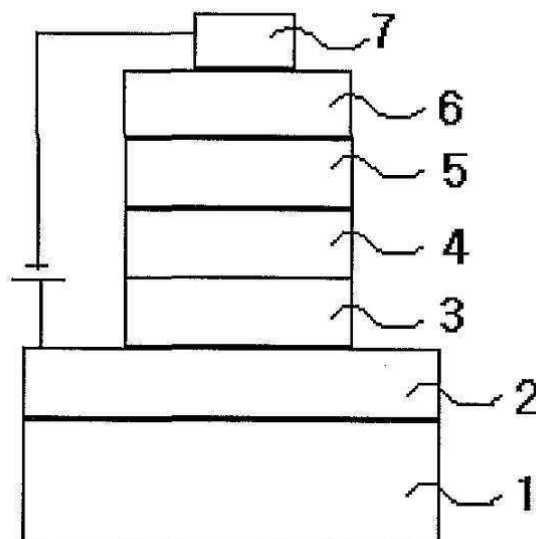
(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

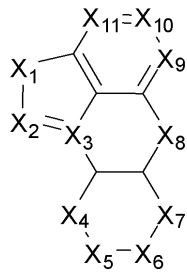
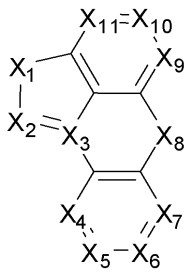
본 발명은 유기전계발광소자에 채용되는 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 하기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 것을 특징으로 하고, 이를 정공수송 기능층 또는 발광층 내의 인광 호스트 화합물로 채용하는 경우 구동전압, 휘도 및 장수명 등의 발광특성이 우수한 유기전계발광소자를 구현할 수 있다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1] [화학식 2]



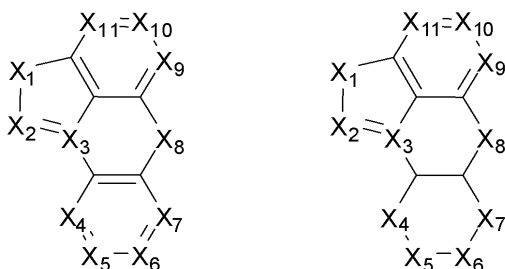
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1] [화학식 2]



상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]에서,

X_1 내지 X_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N, O, S, Te, CR_1 , NR_2 , CR_3R_4 , SiR_5R_6 , GeR_7R_8 , PR_9 및 BR_{10} 중에서 선택되고, 상기 R_3 와 R_4 , R_5 와 R_6 , R_7 와 R_8 은 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며,

상기 R_1 내지 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐기, 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, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기 및 아미드기 중에서 선택되며,

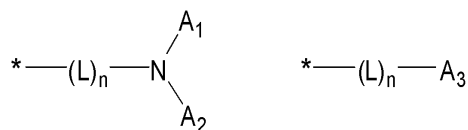
상기 R_1 내지 R_{10} 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 하기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 1] [구조식 2]



상기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]에서,

L은 단일결합이거나, 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 선택되고,

n은 0 내지 4의 정수이며, 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 L은 서로 동일하거나 상이하고,

A₁ 내지 A₃는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 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 선택되며,

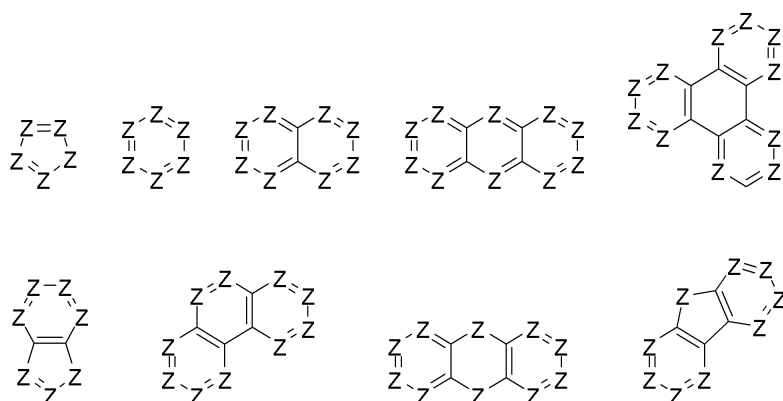
상기 L, A₁ 내지 A₃ 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 L 및 A₁ 내지 A₃는 각각 독립적으로 하기 [구조식 3] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 3]



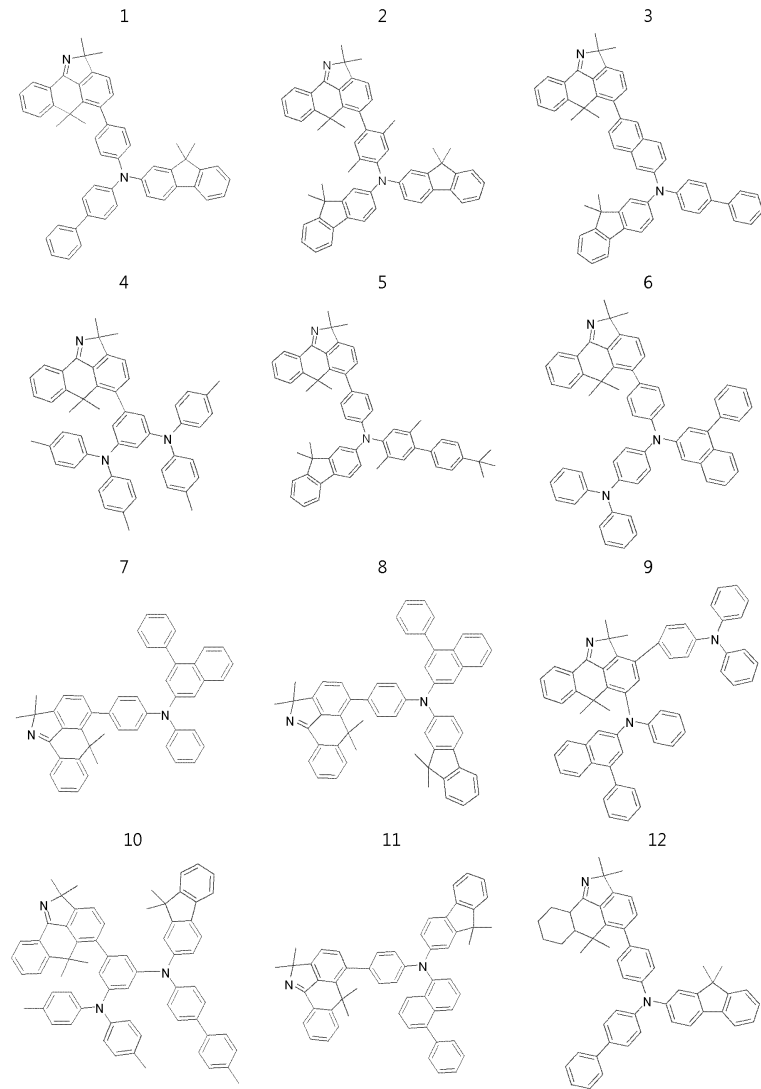
상기 [구조식 3]에서,

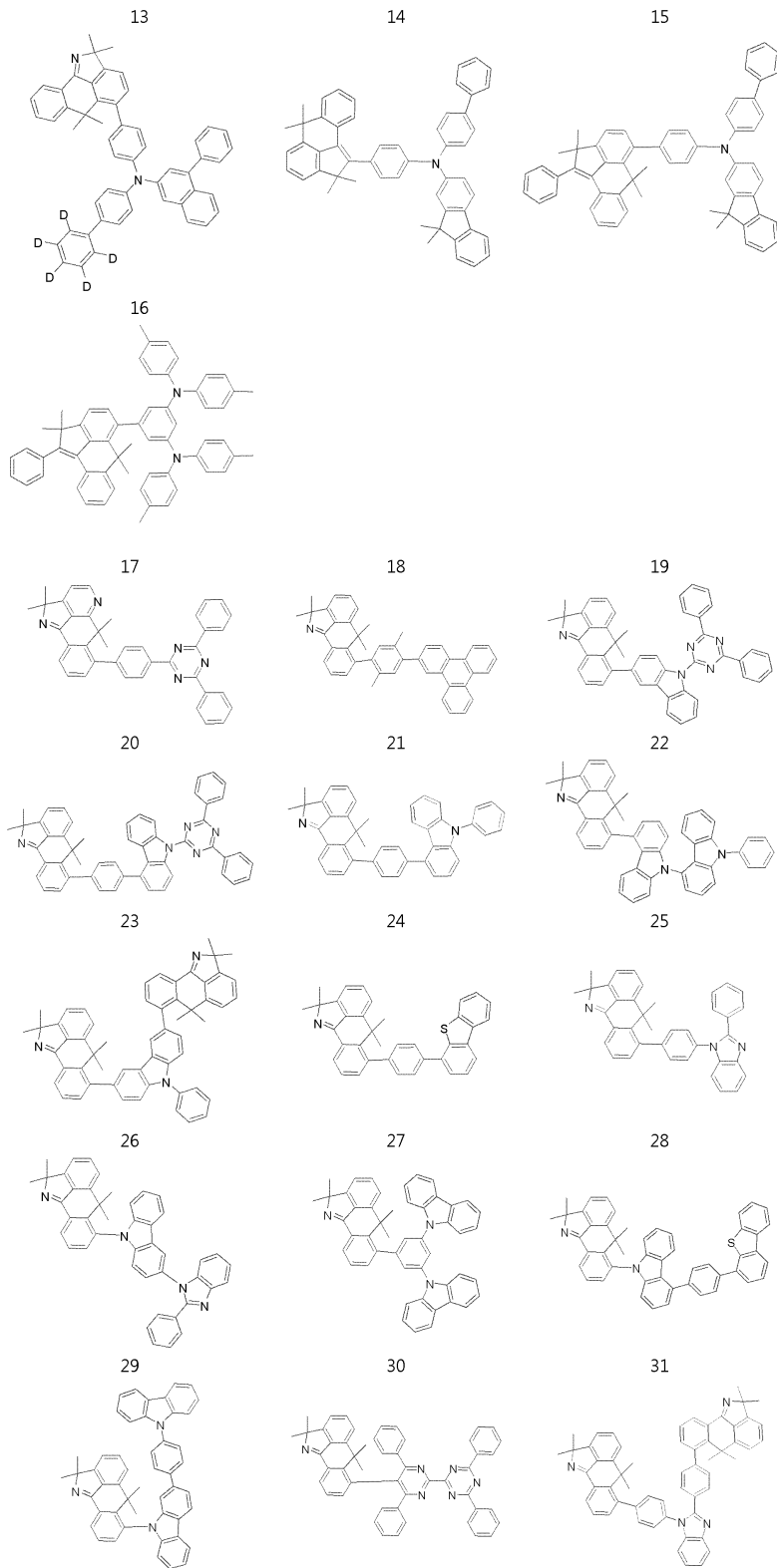
Z는 CR₁, NR₂, CR₃R₄, SiR₅R₆, GeR₇R₈, PR₉, BR₁₀, Te, O 및 S 중에서 선택되고, 상기 R₁ 내지 R₁₀은 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]에서의 정의와 동일하다.

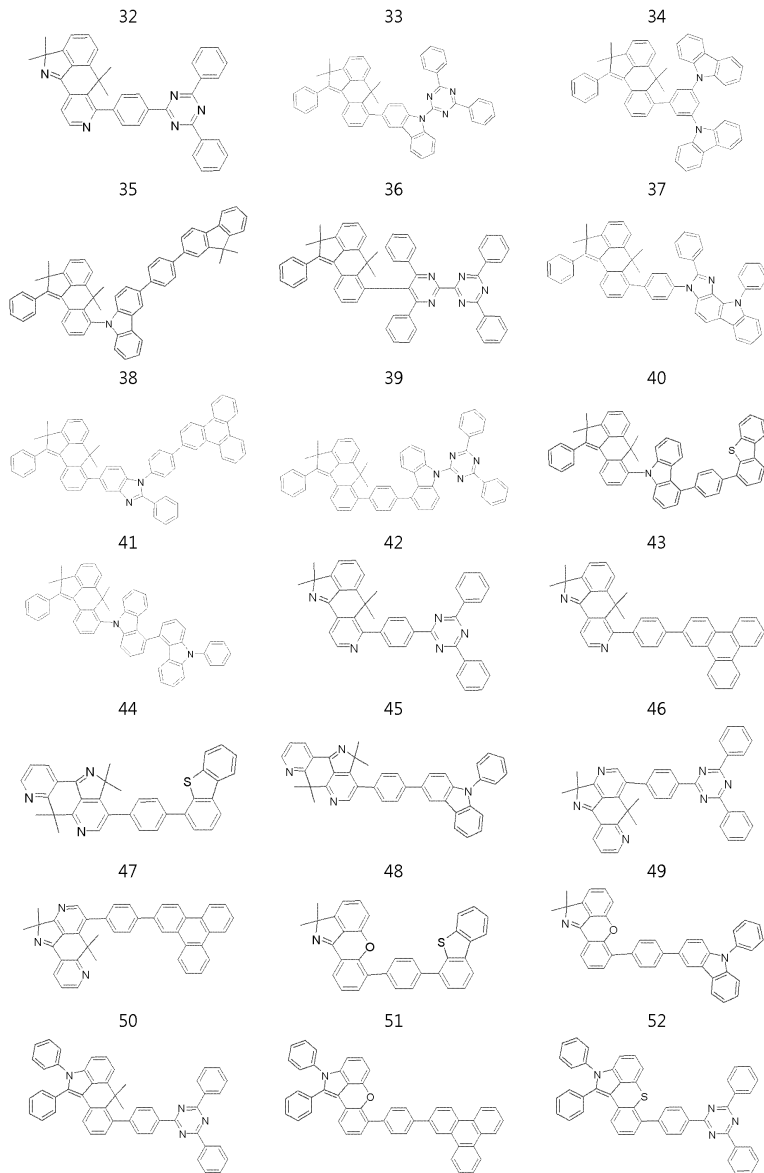
청구항 4

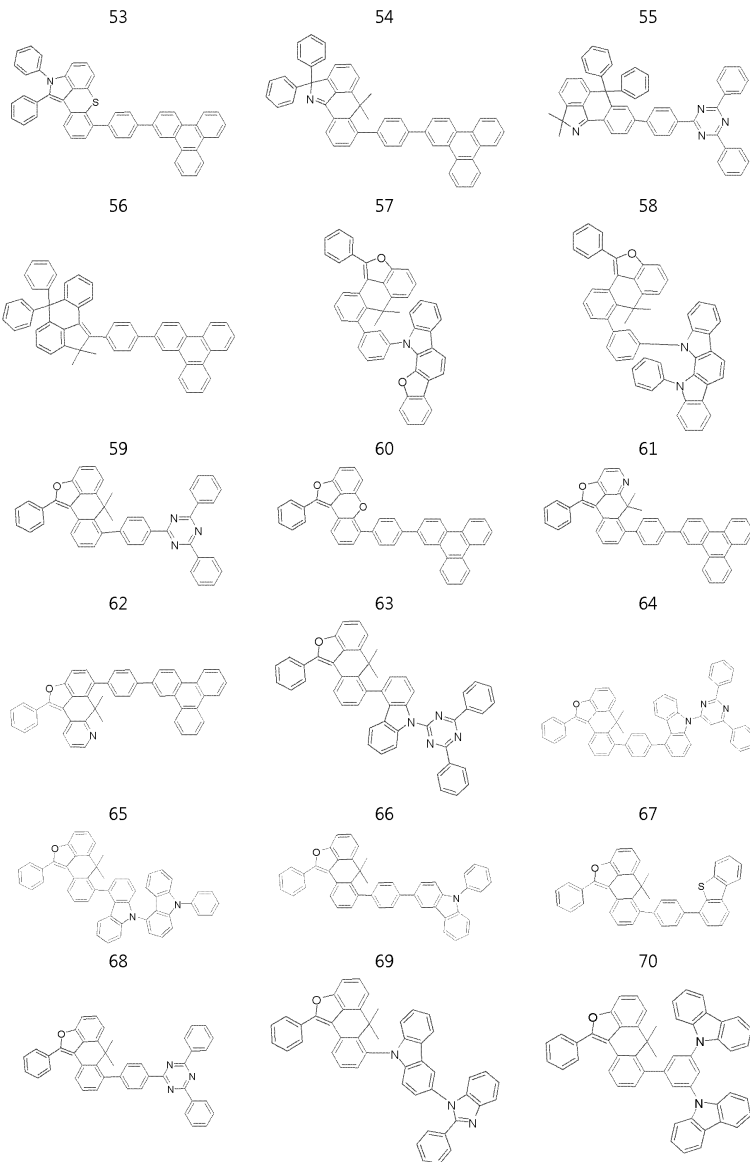
제1항에 있어서,

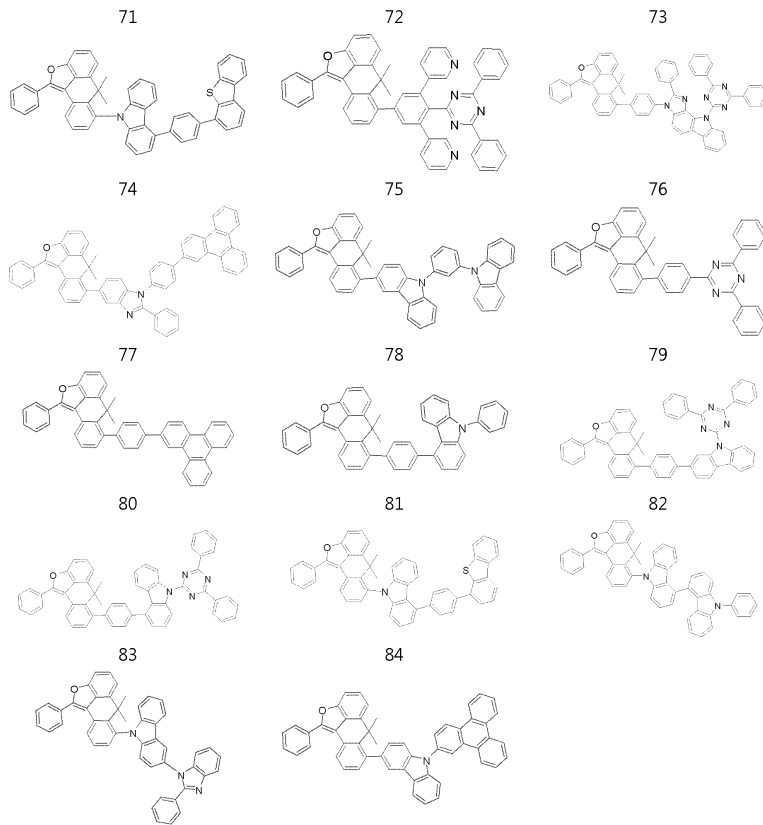
상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]는 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 752] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

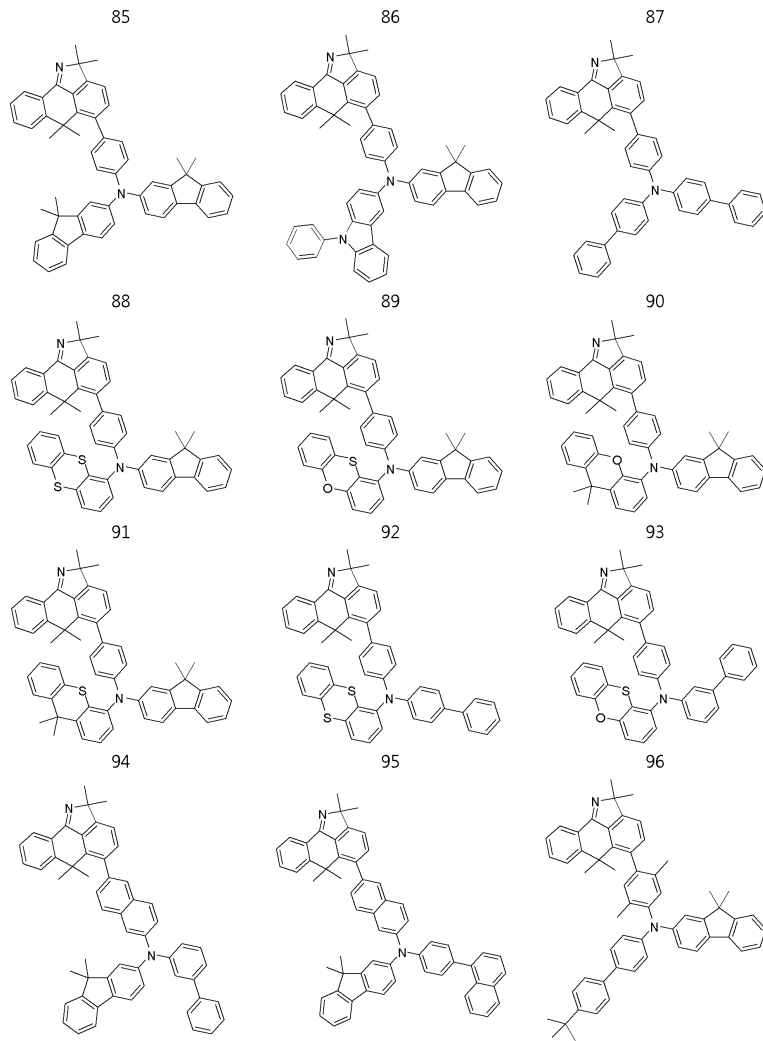


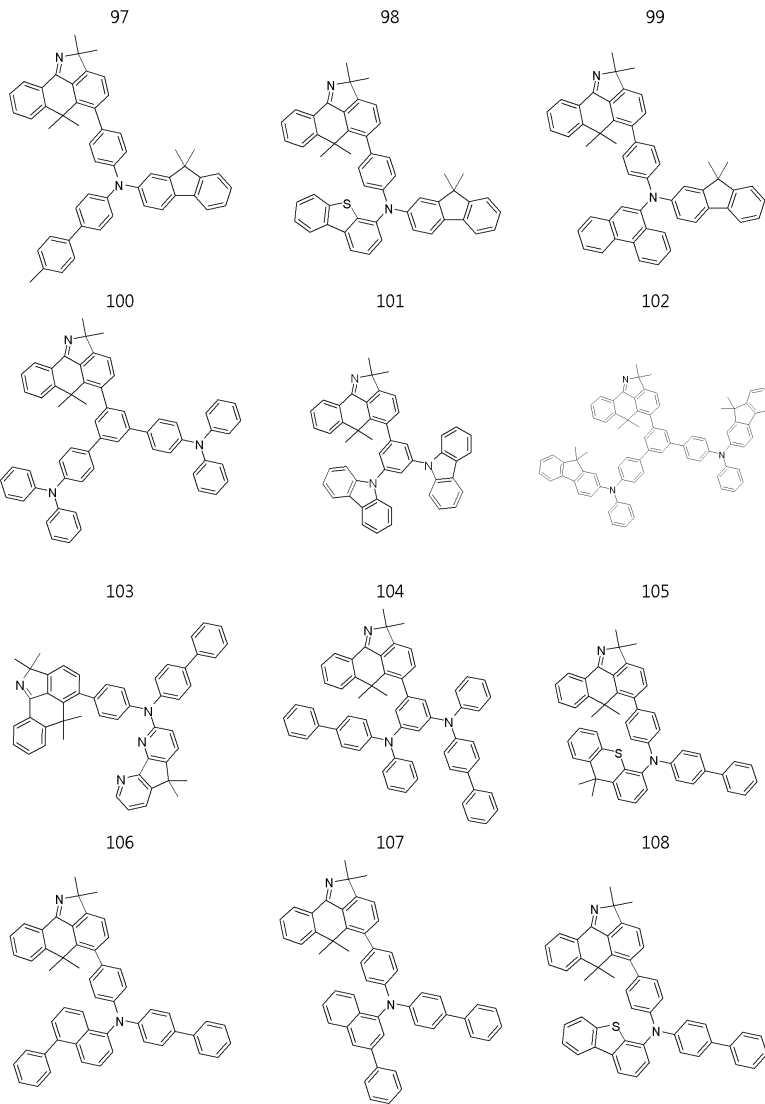


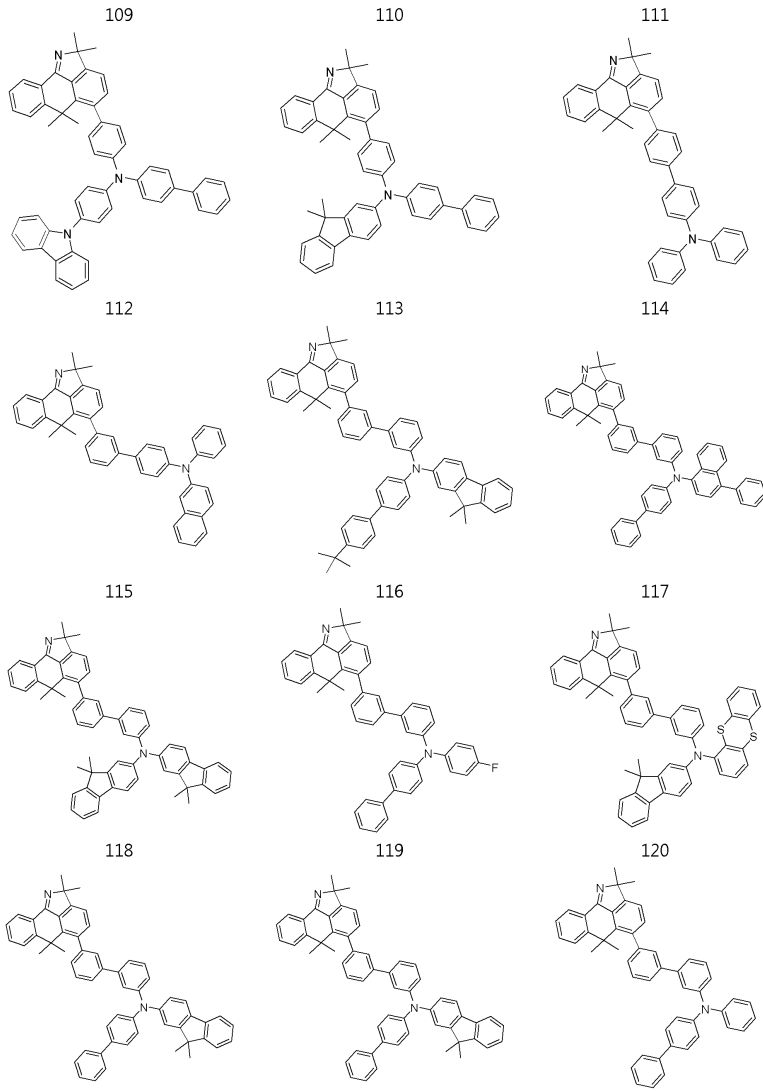


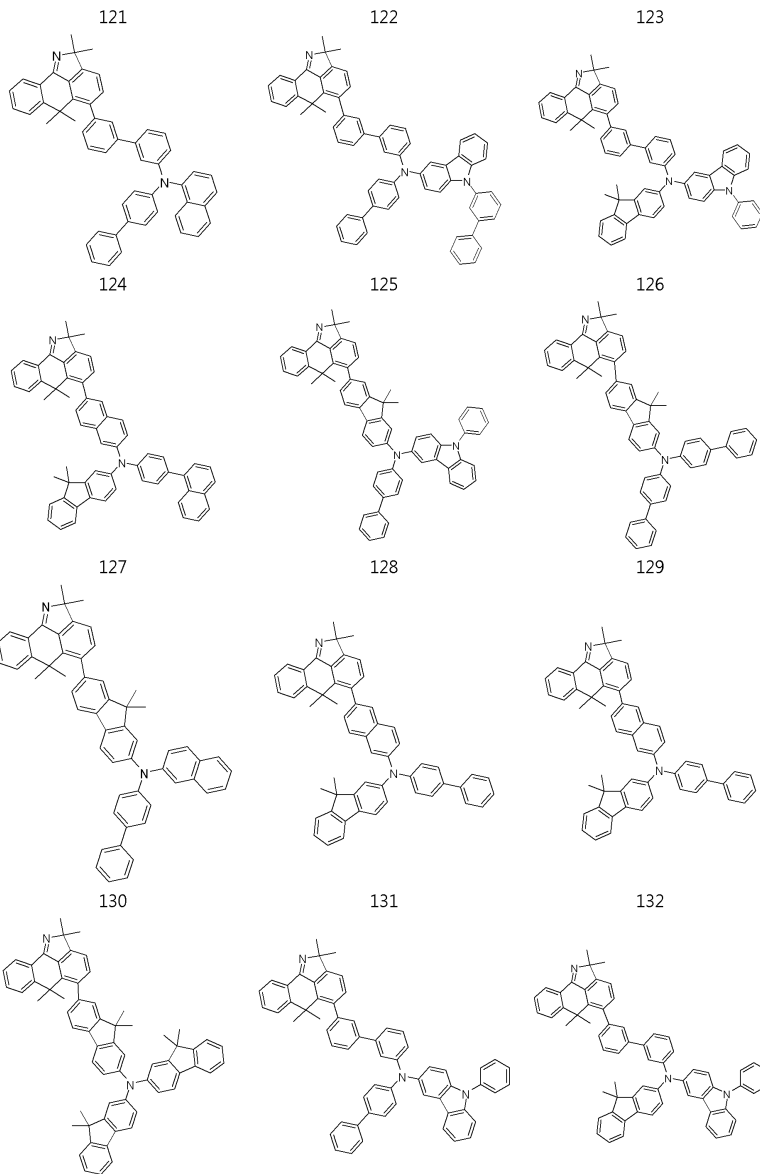




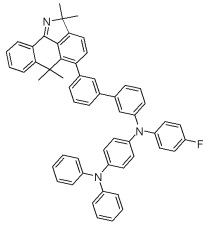




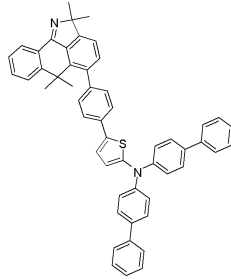




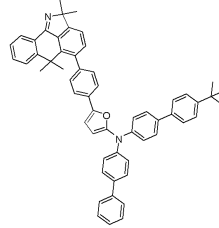
133



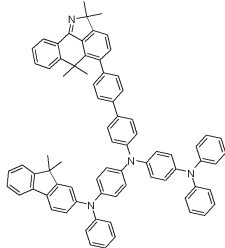
134



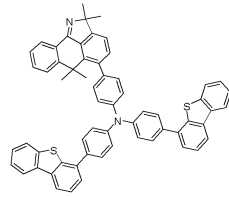
135



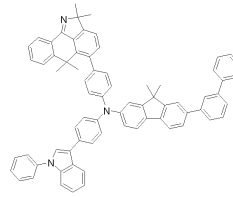
136



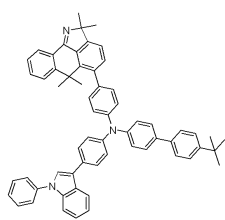
137



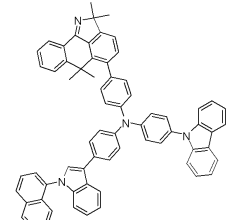
138



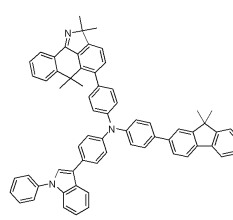
139



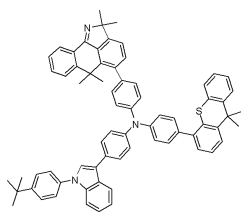
140



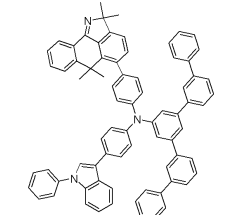
141



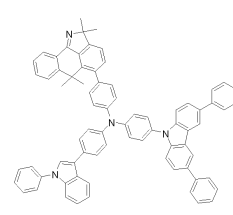
142



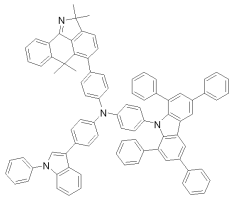
143



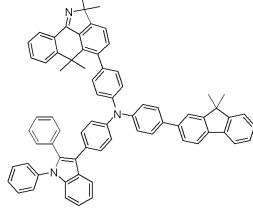
144



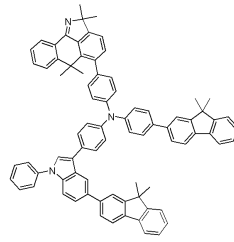
145



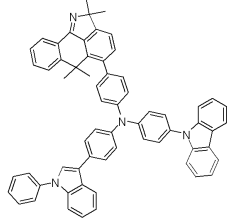
146



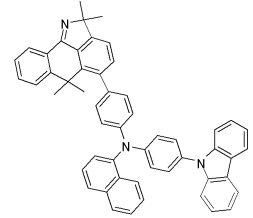
147



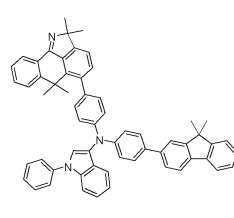
148



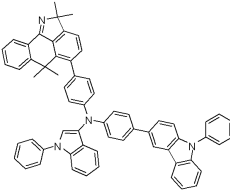
149



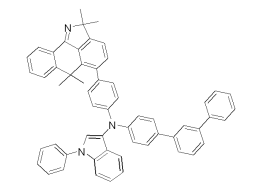
150



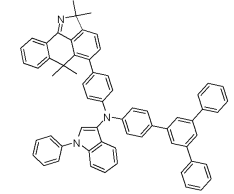
151



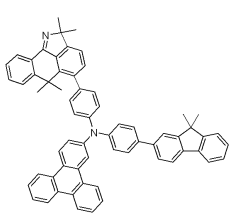
152



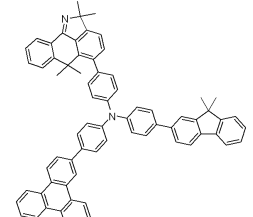
153



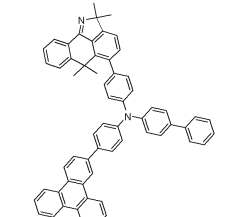
154

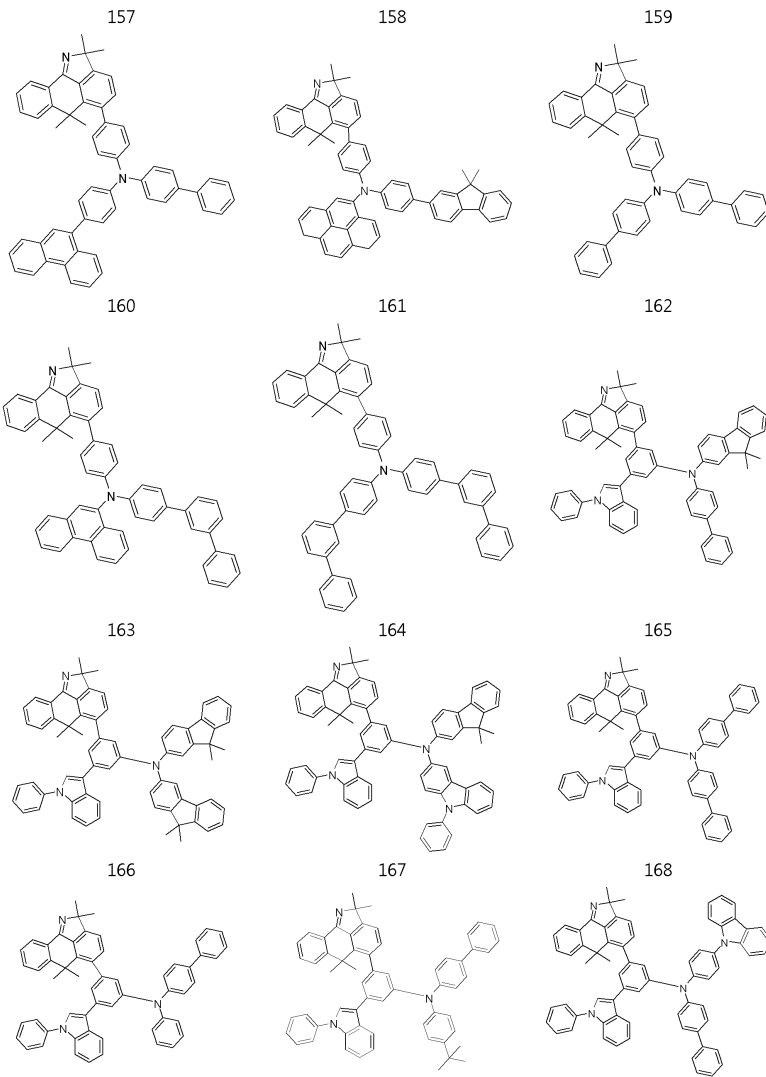


155

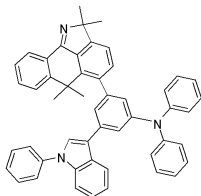


156

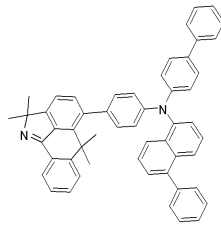




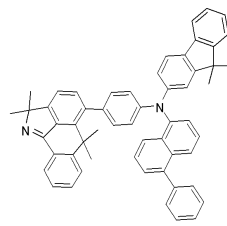
169



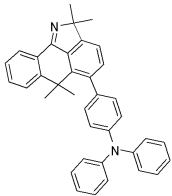
170



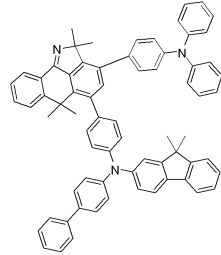
171



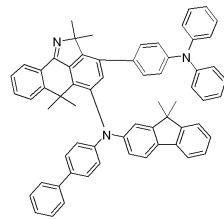
172



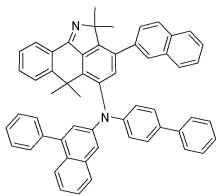
173



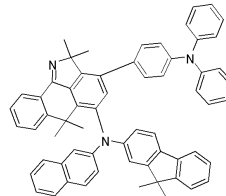
174



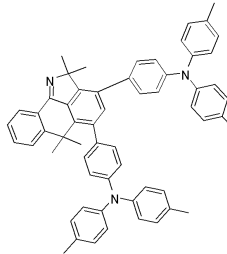
175



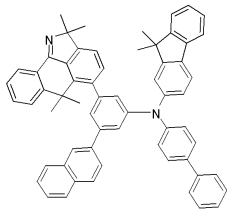
176



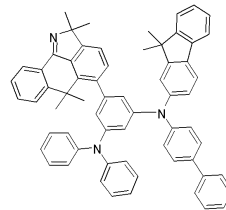
177



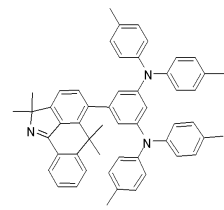
178

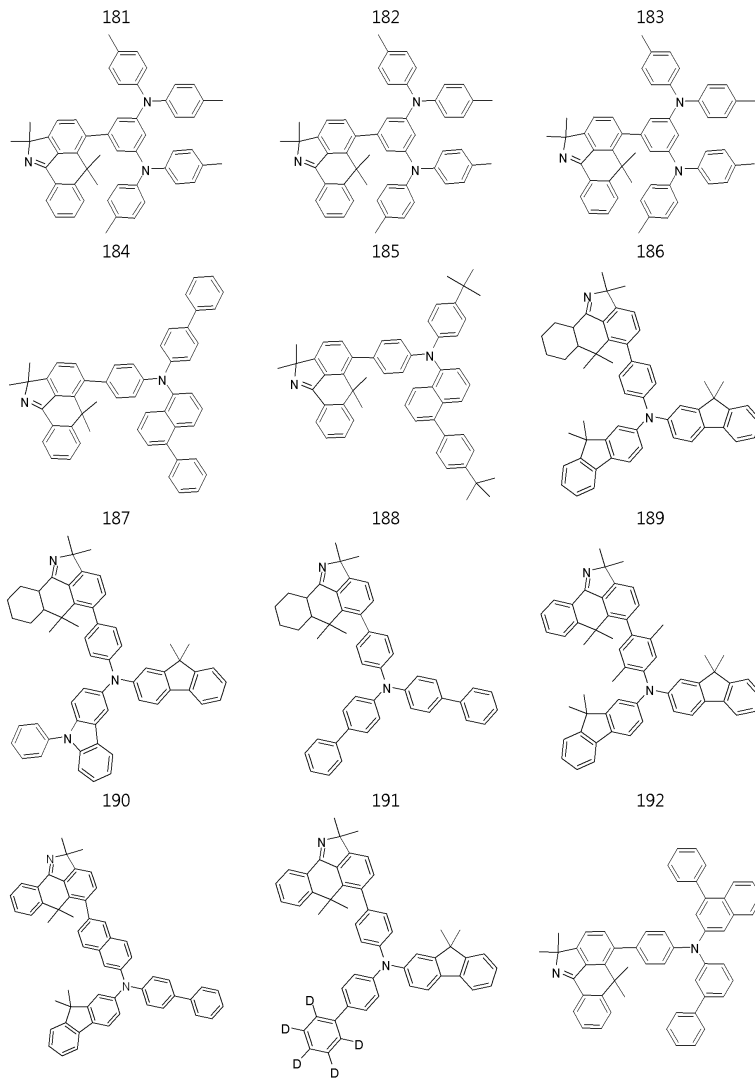


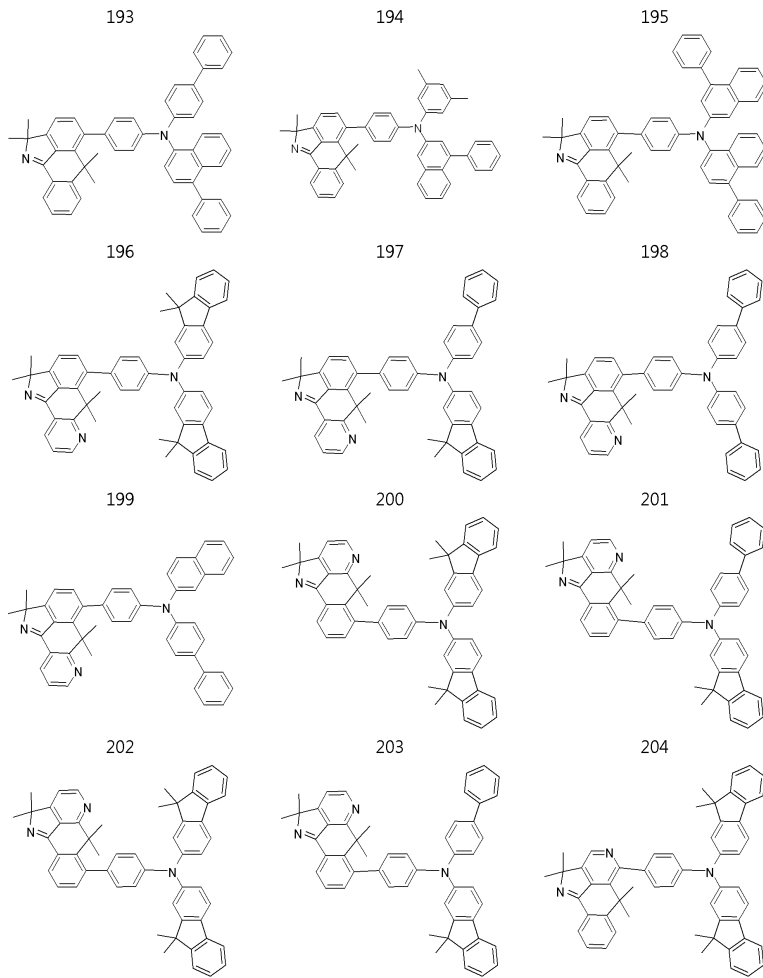
179

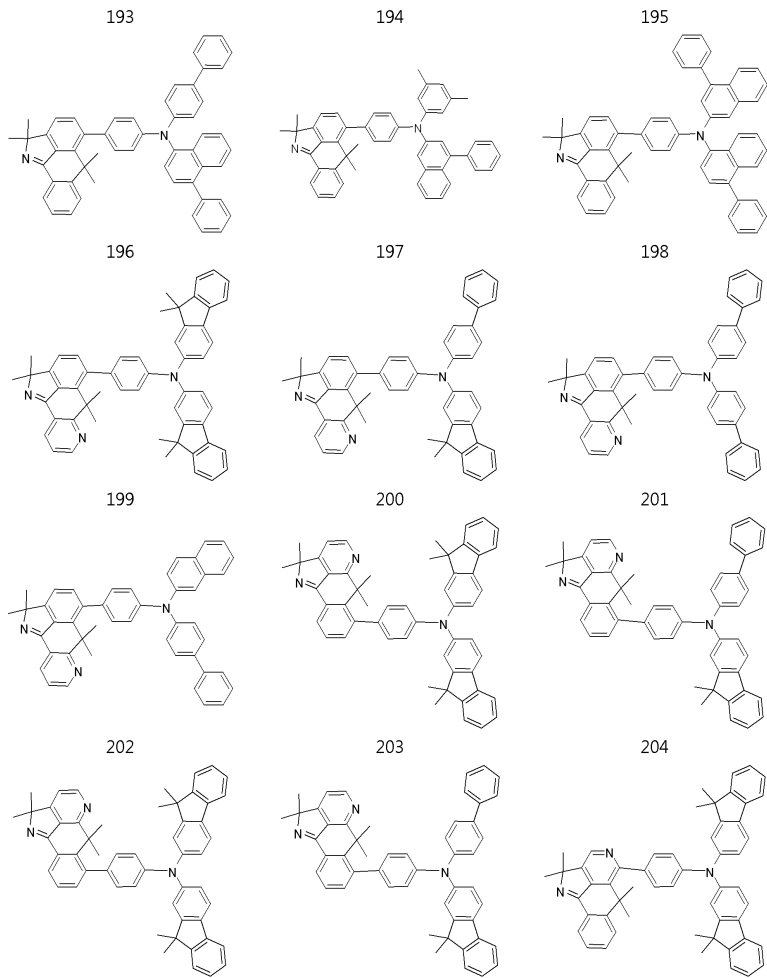


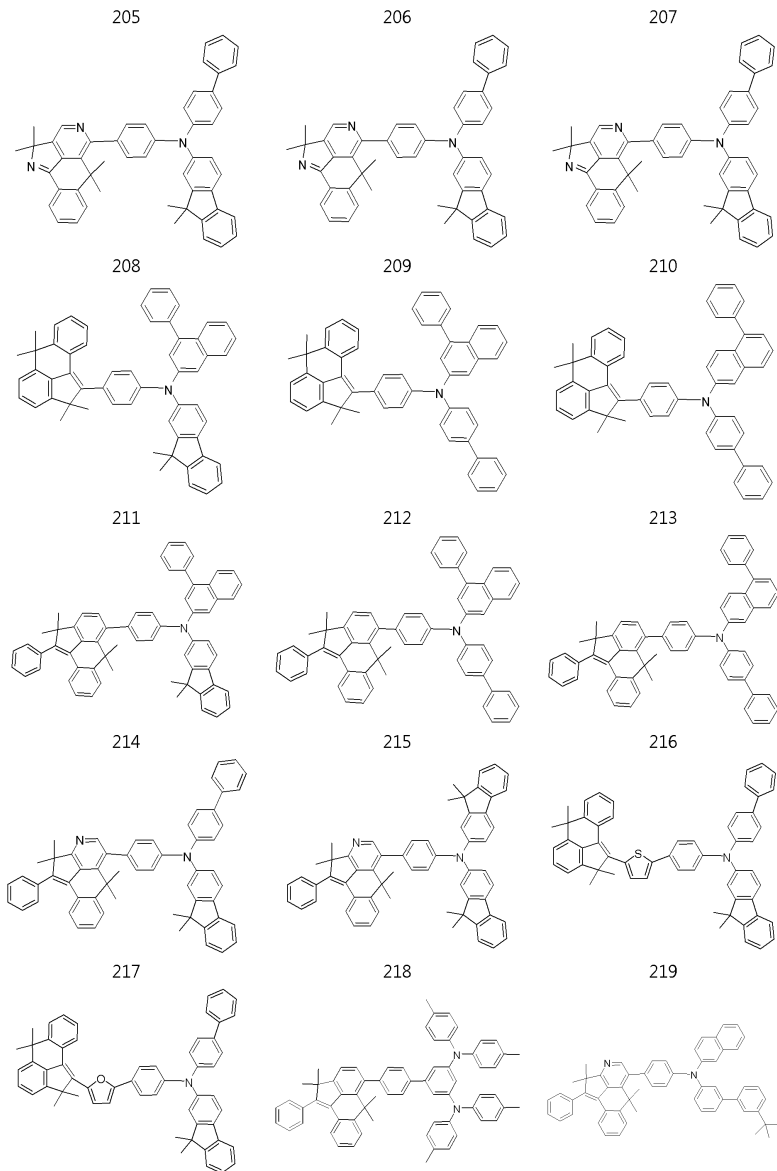
180

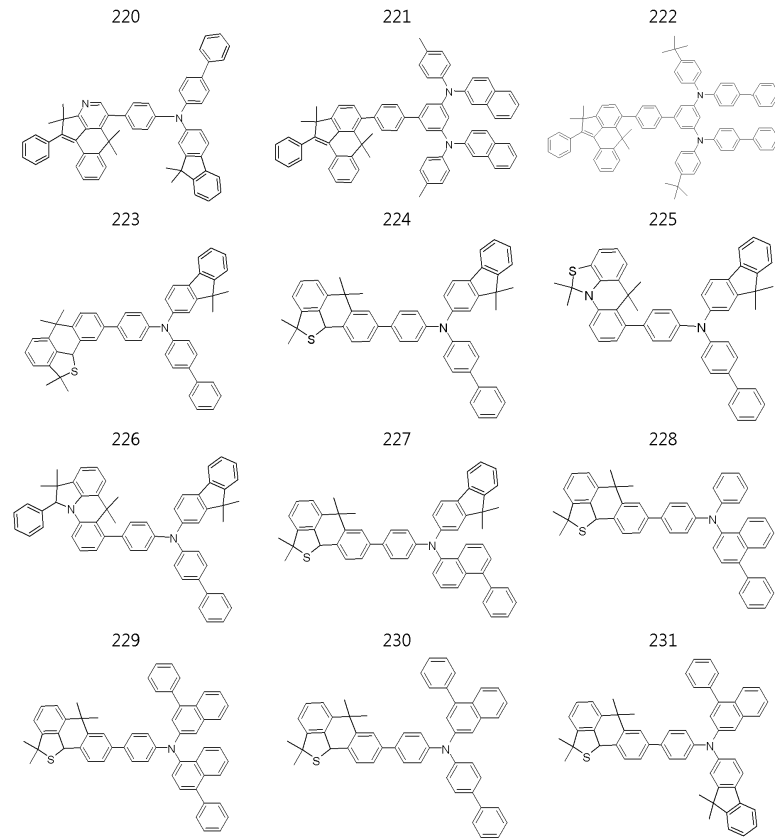


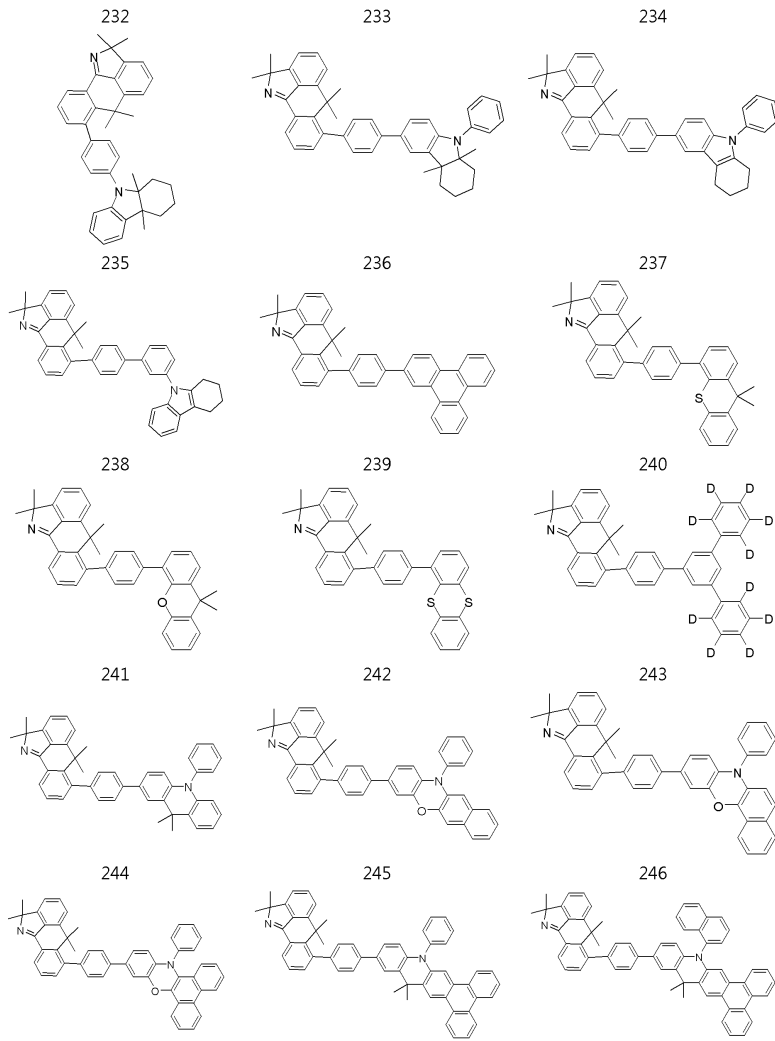


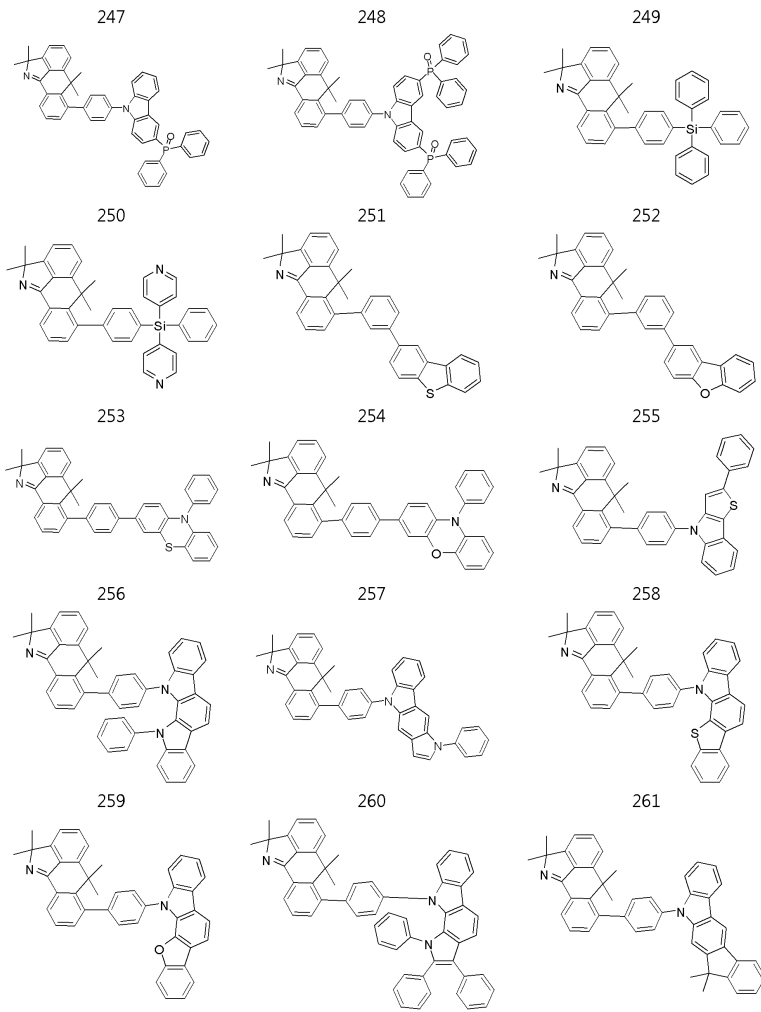




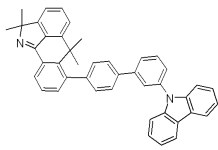




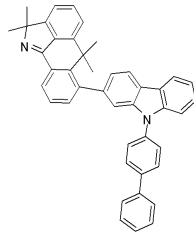




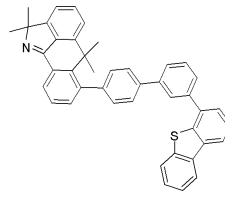
262



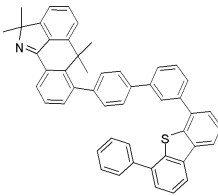
263



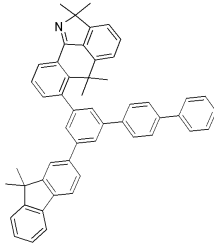
264



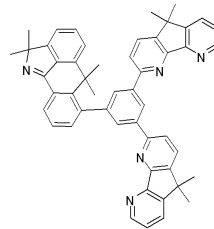
265



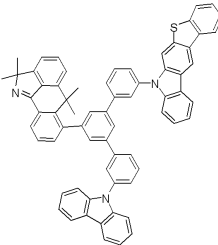
266



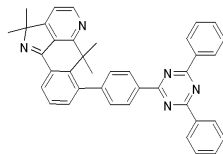
267



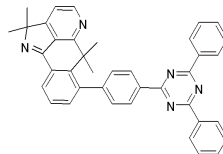
268



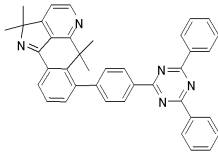
269



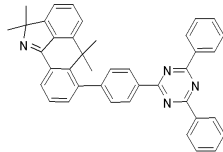
270



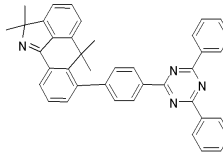
271



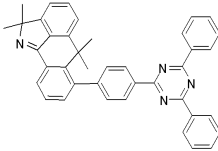
272



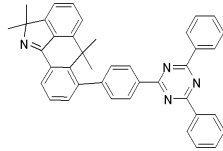
273



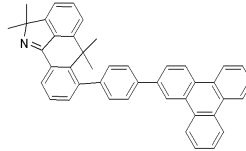
274

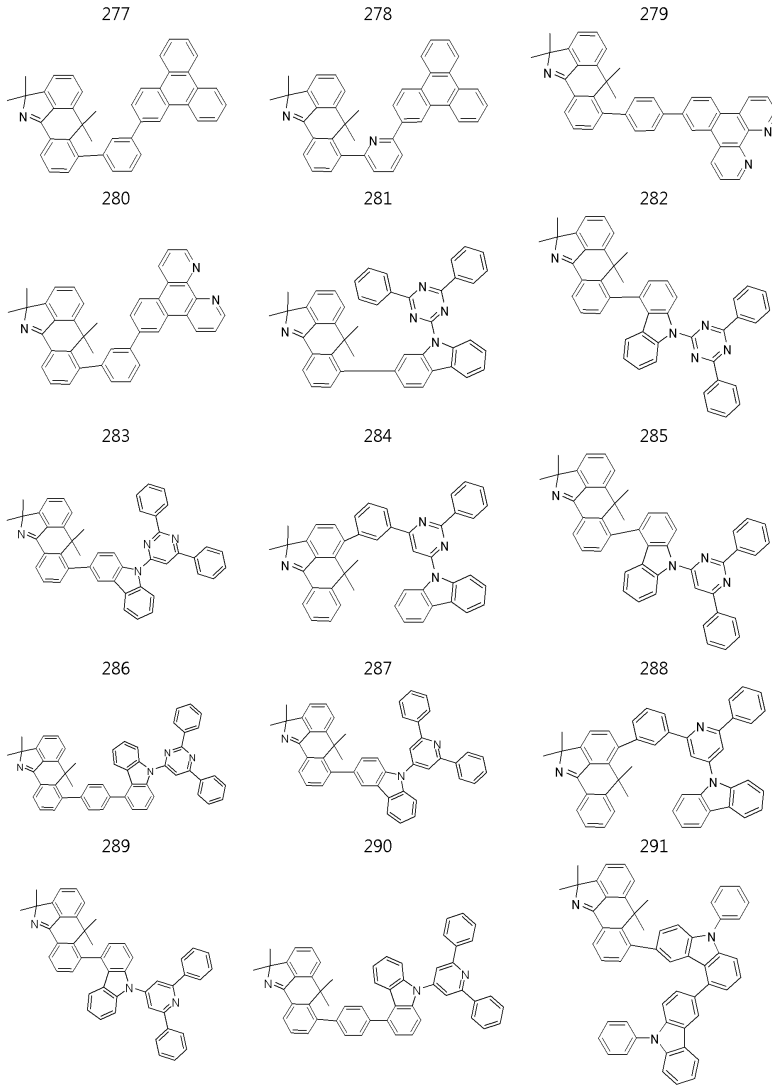


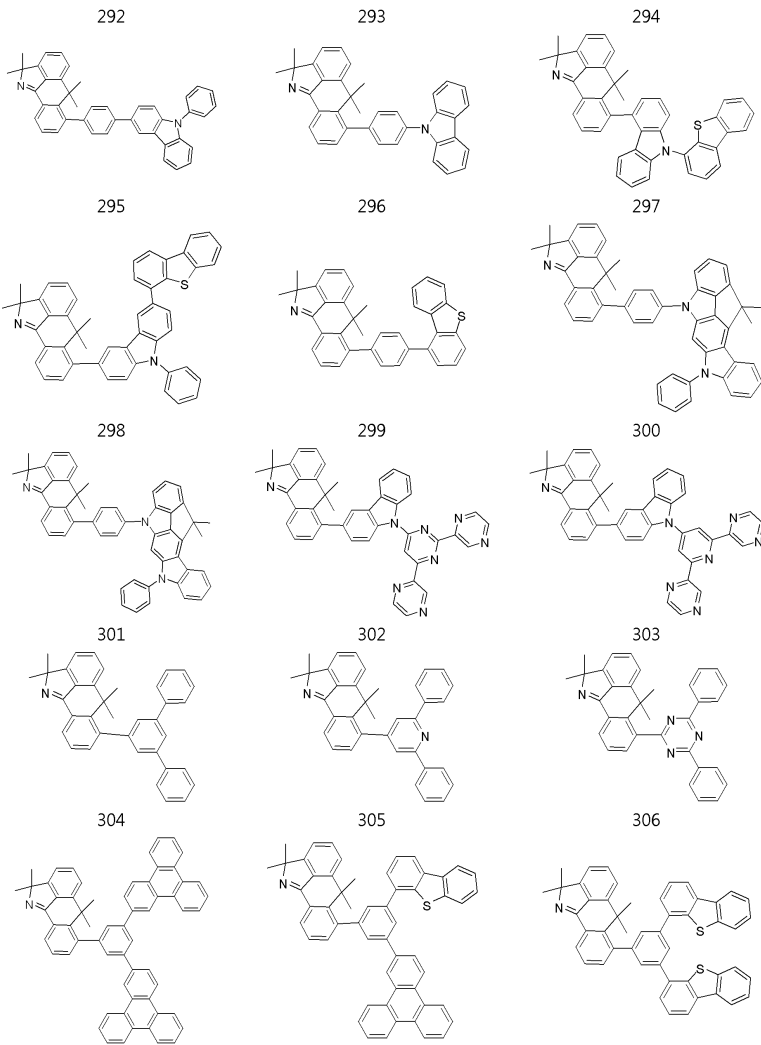
275

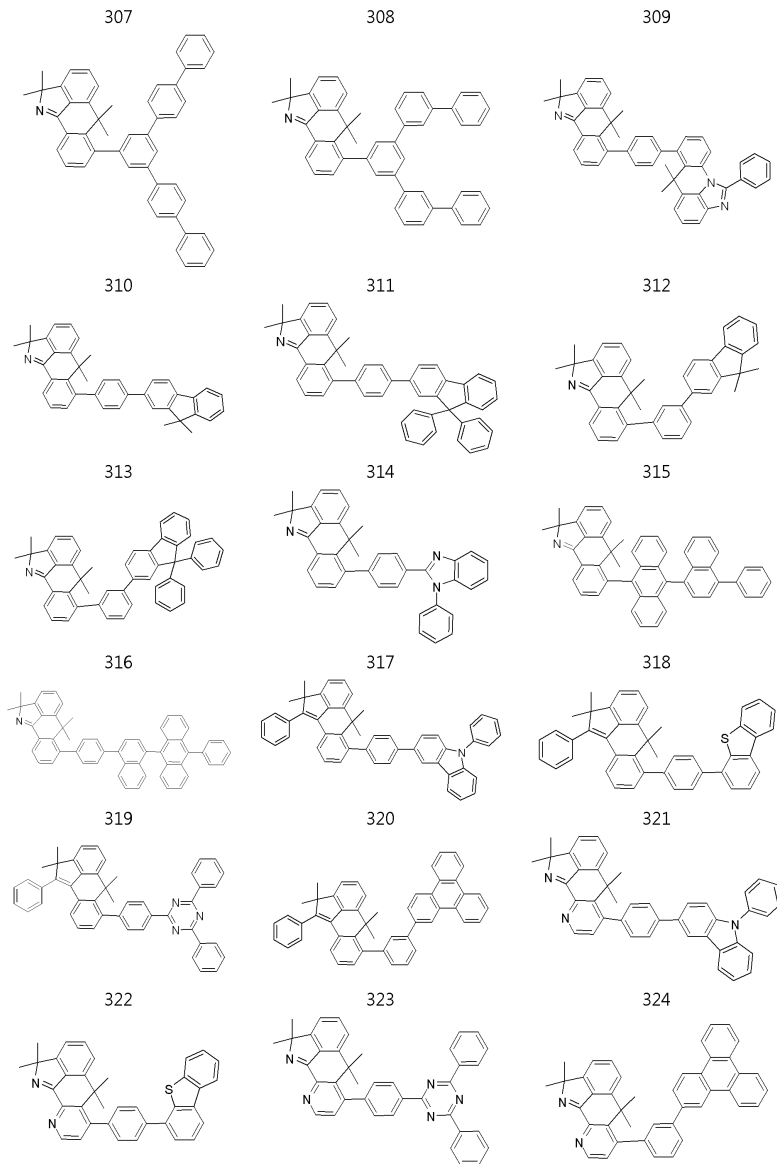


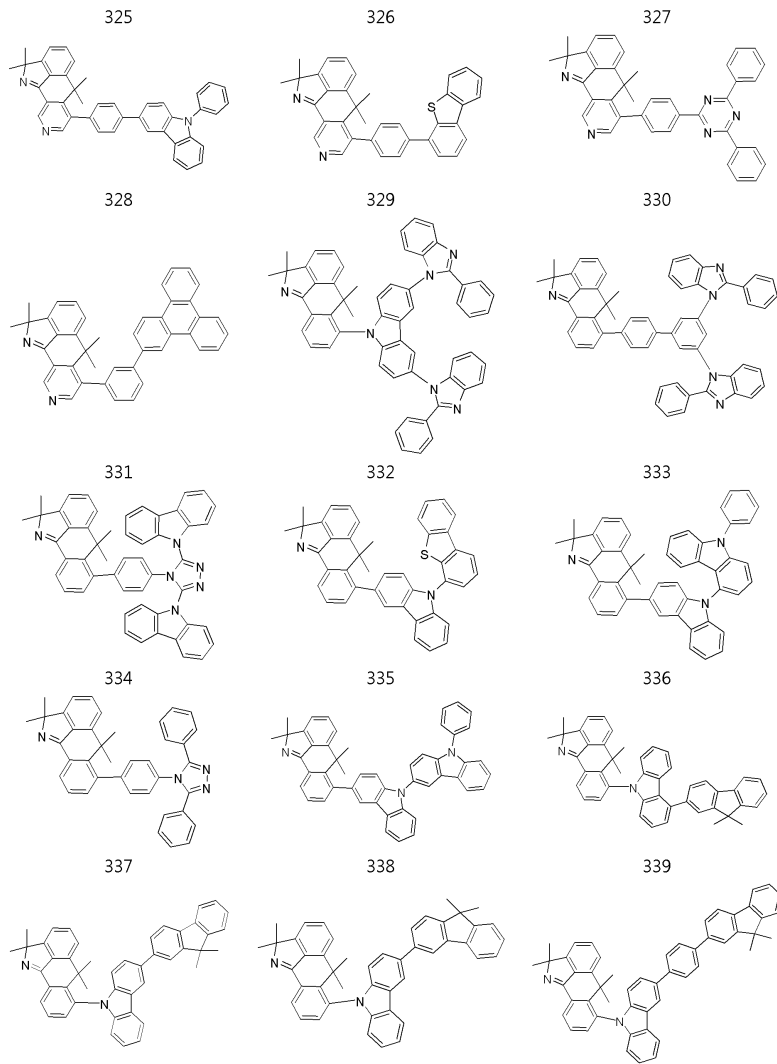
276

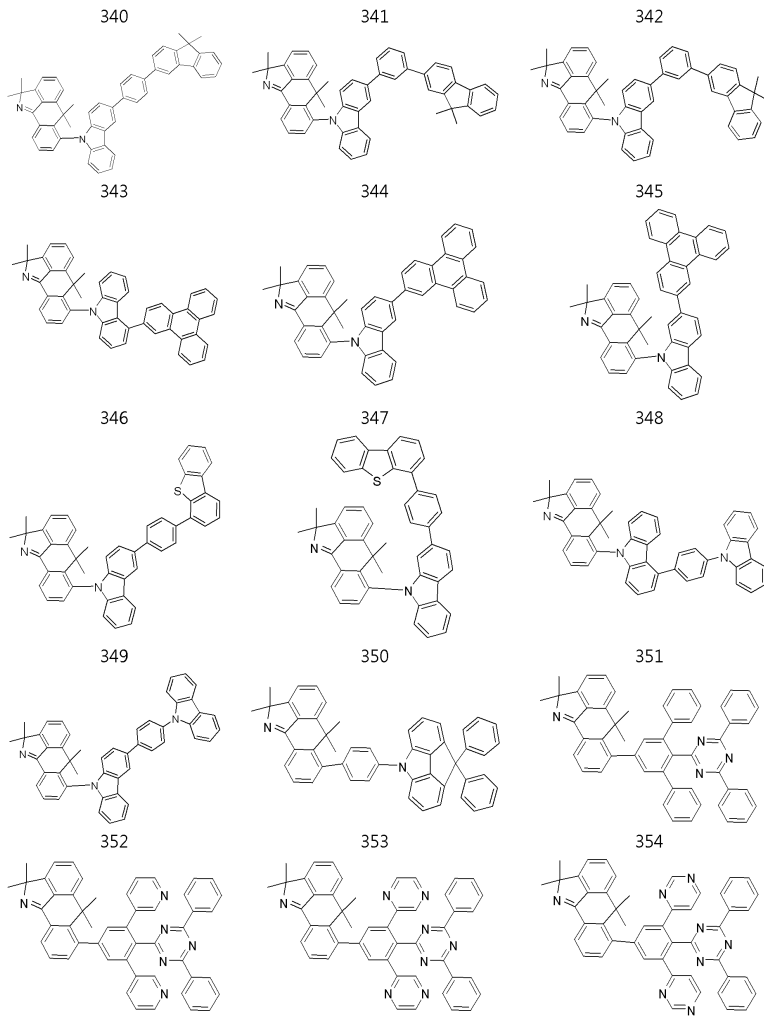


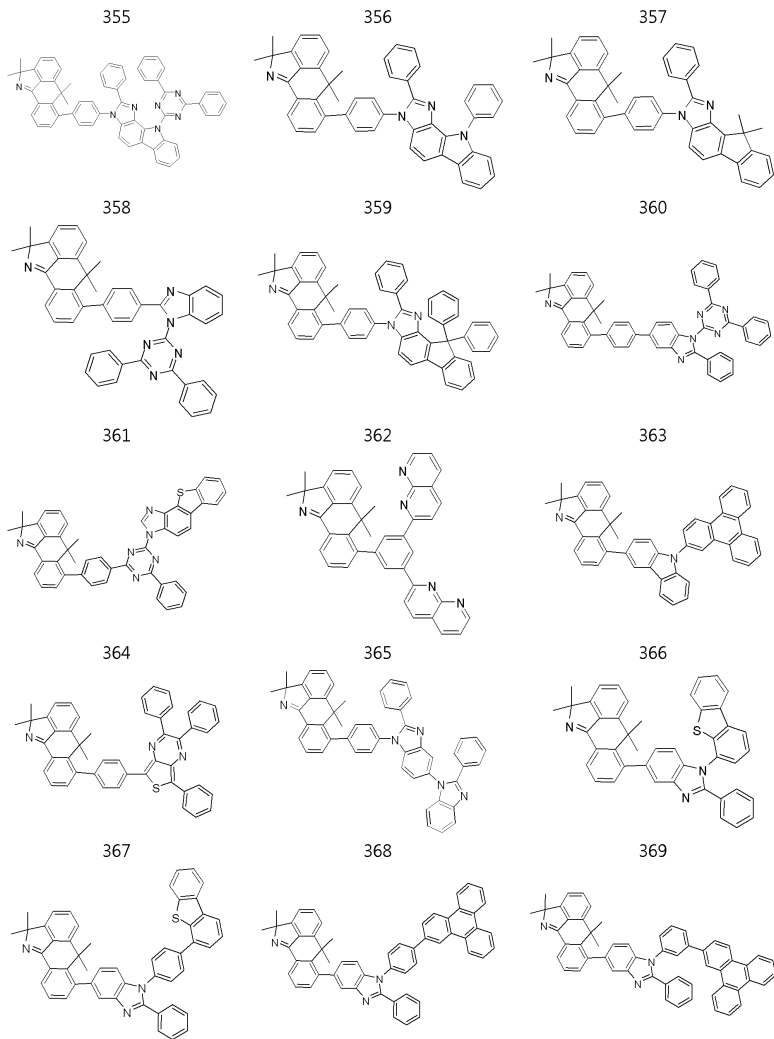


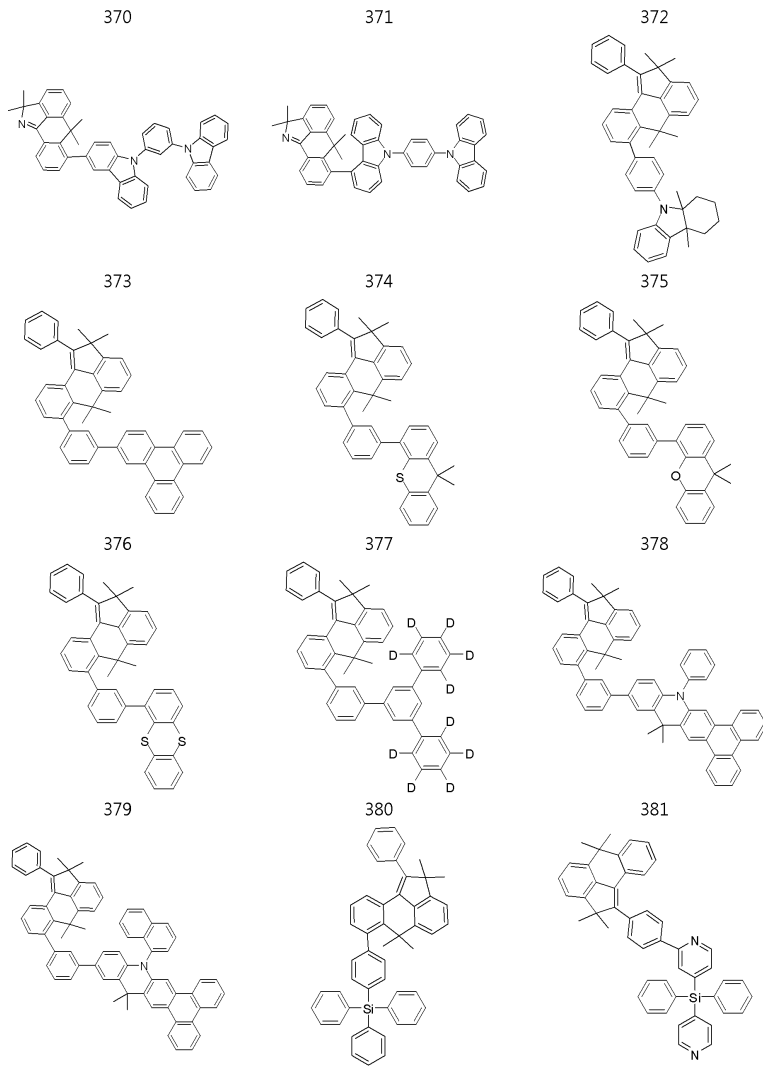


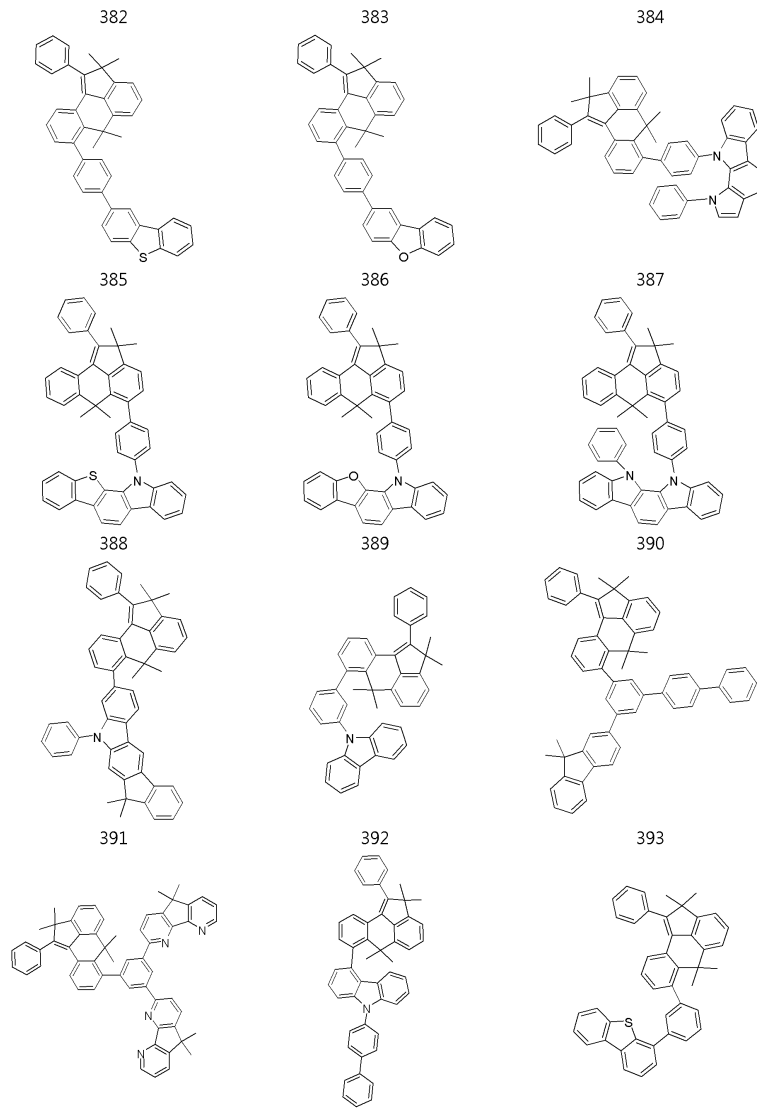


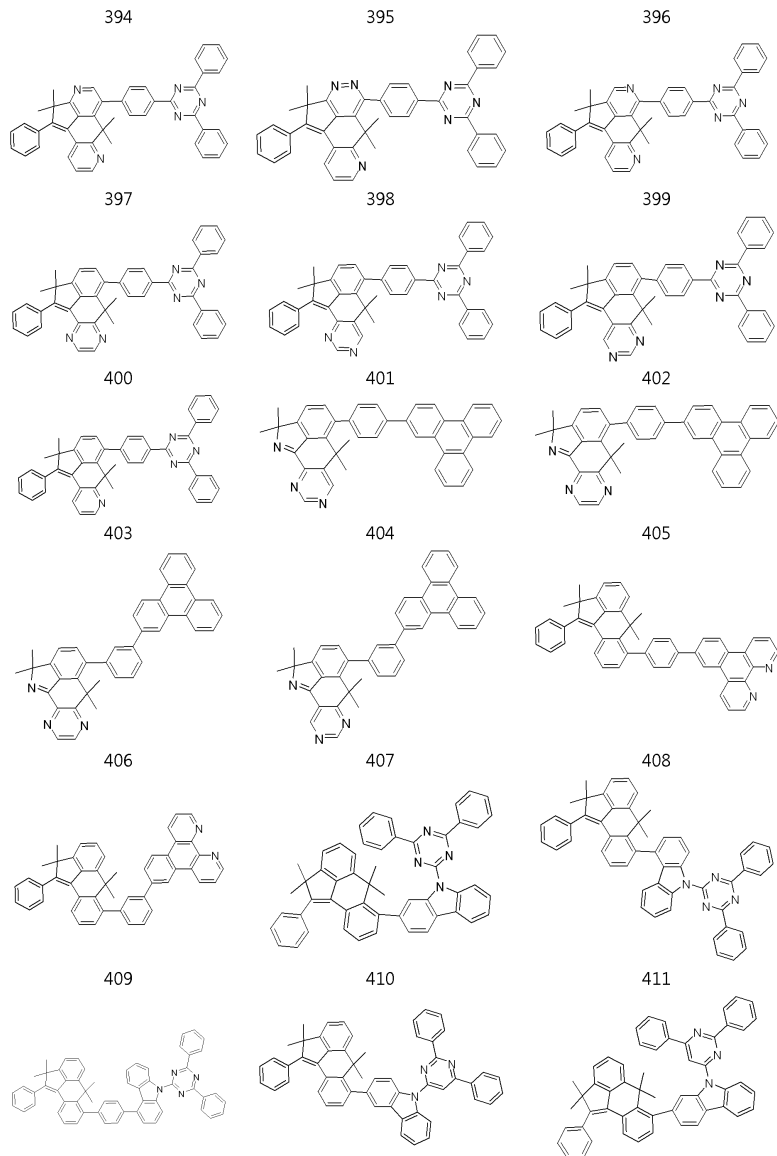


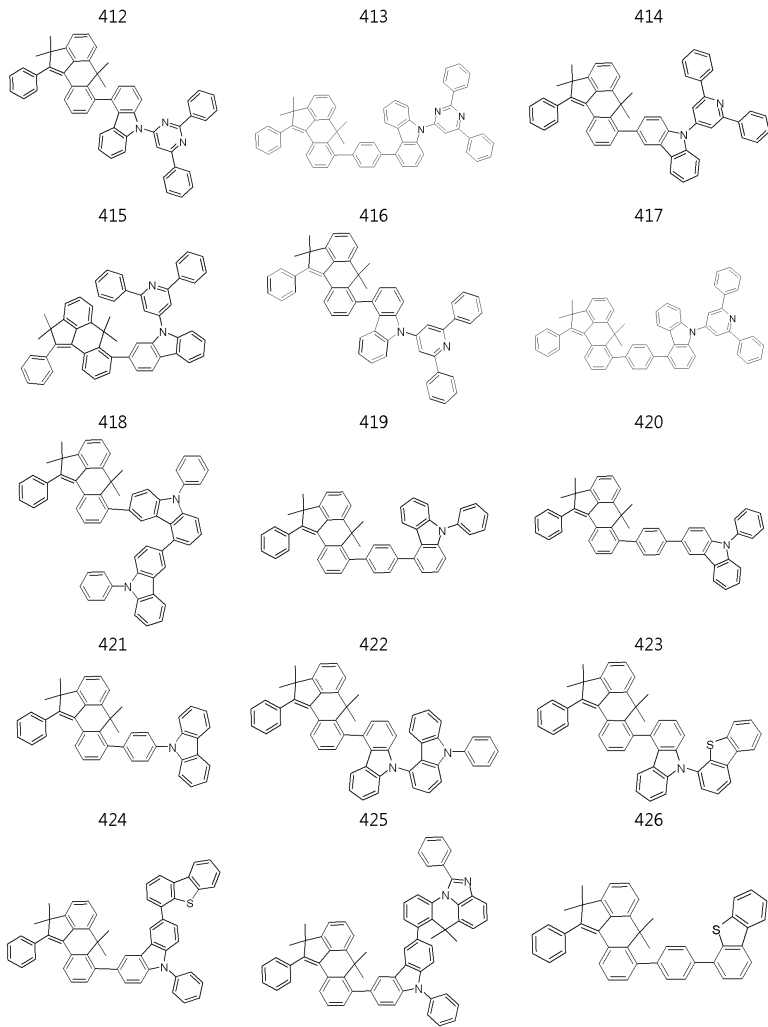


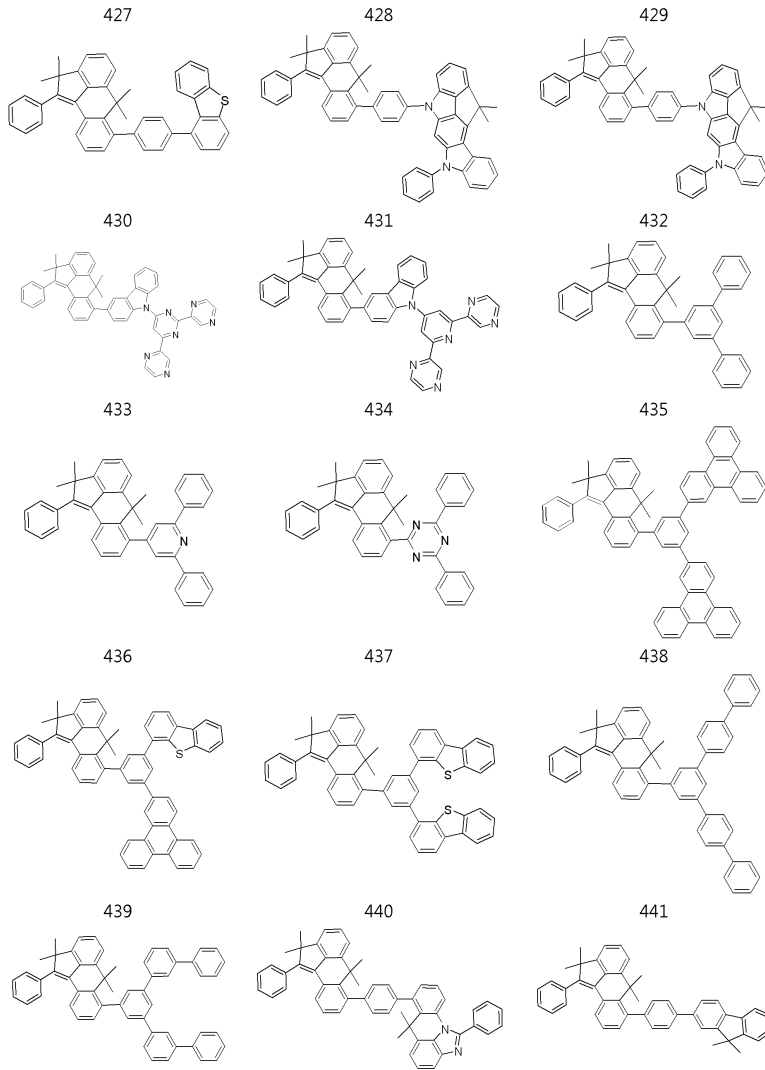


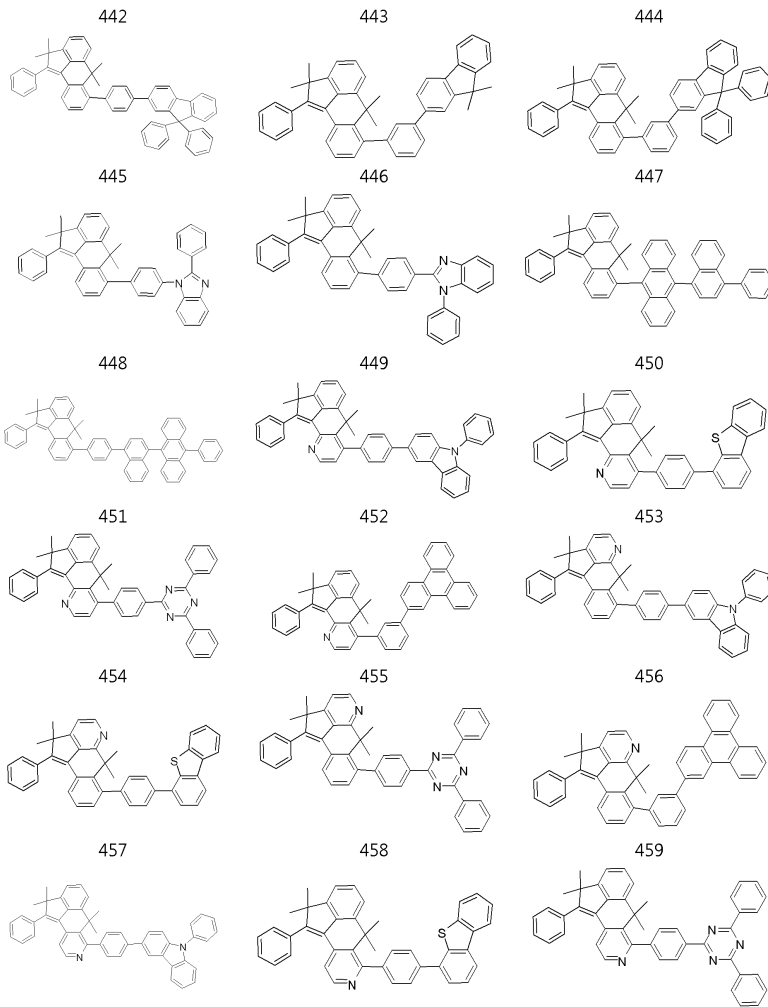


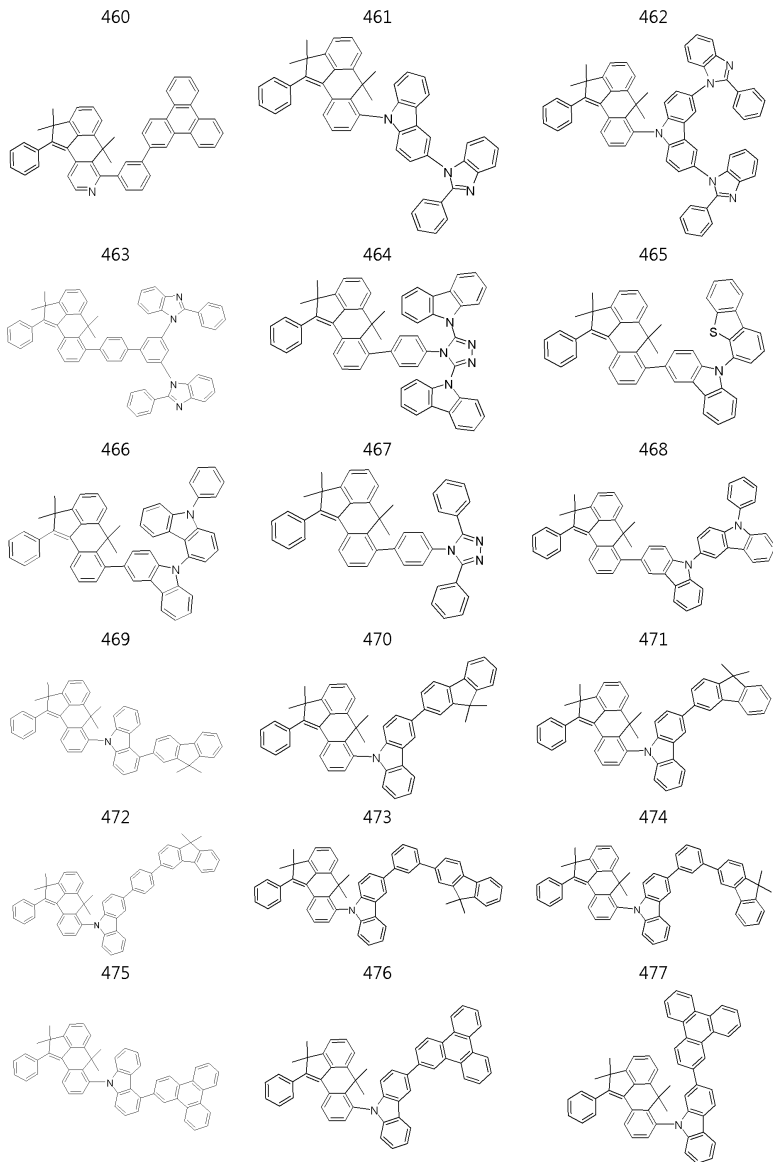




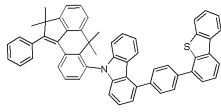




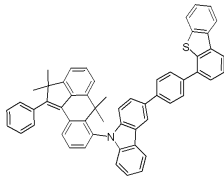




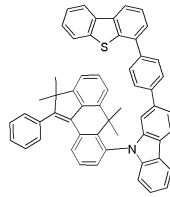
478



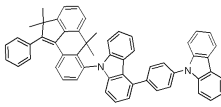
479



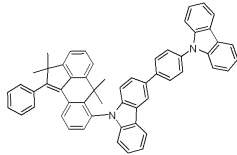
480



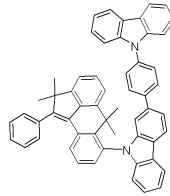
481



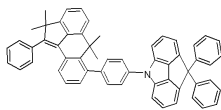
482



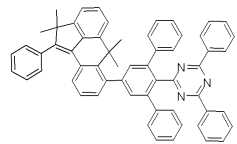
483



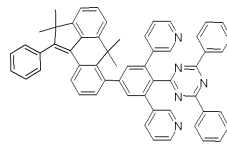
484



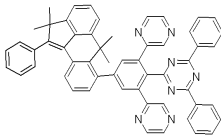
485



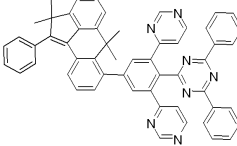
486



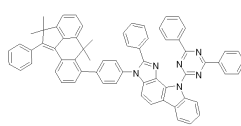
487



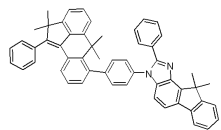
488



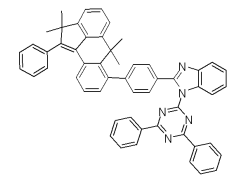
489



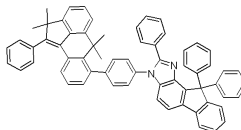
490



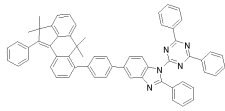
491



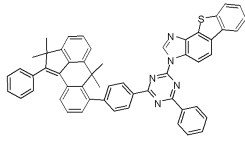
492



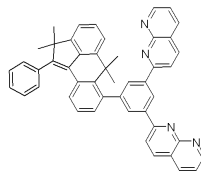
493



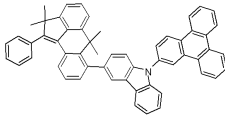
494



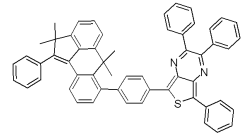
495



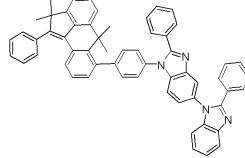
496



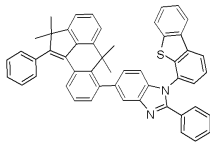
497



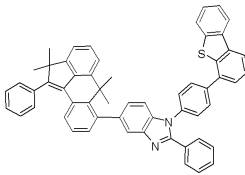
498



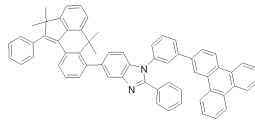
499



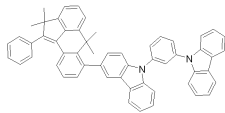
500



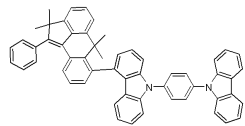
501



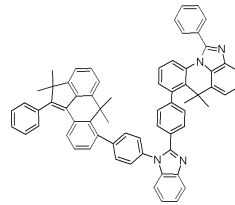
502



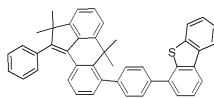
503



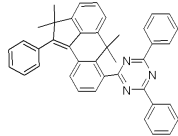
504



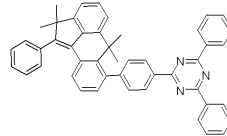
505



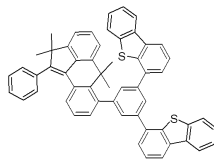
506



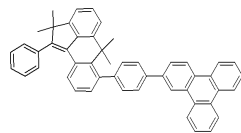
507



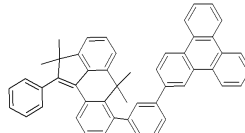
508

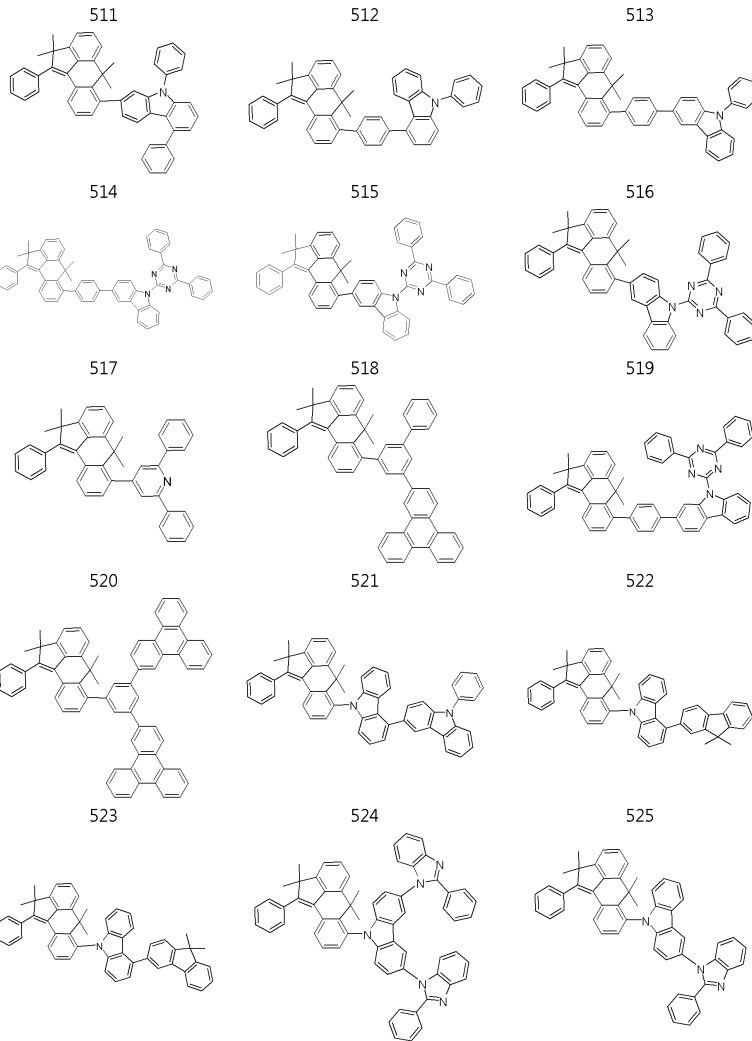


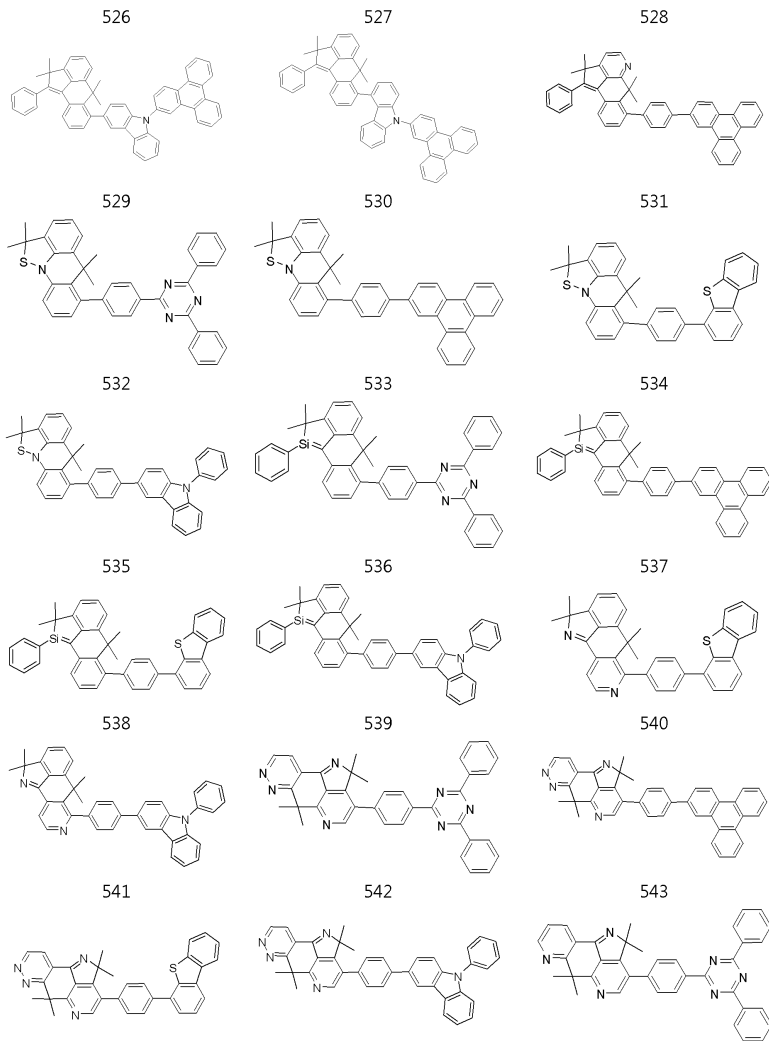
509

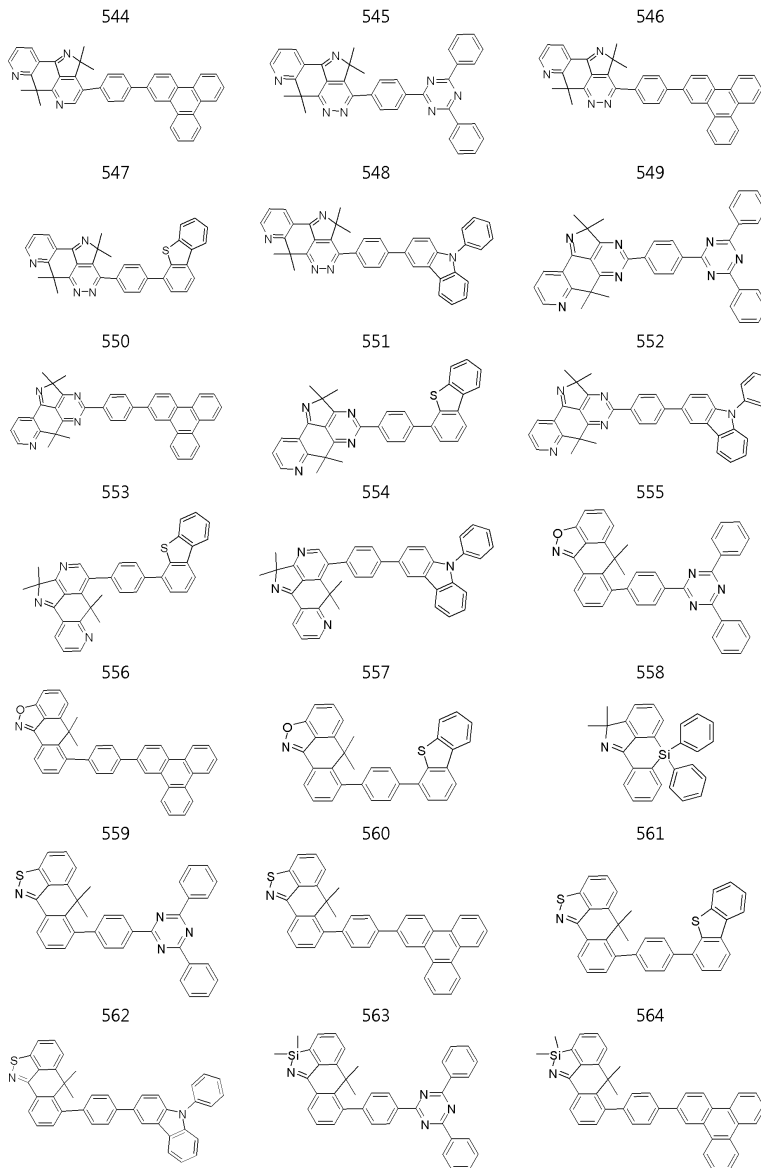


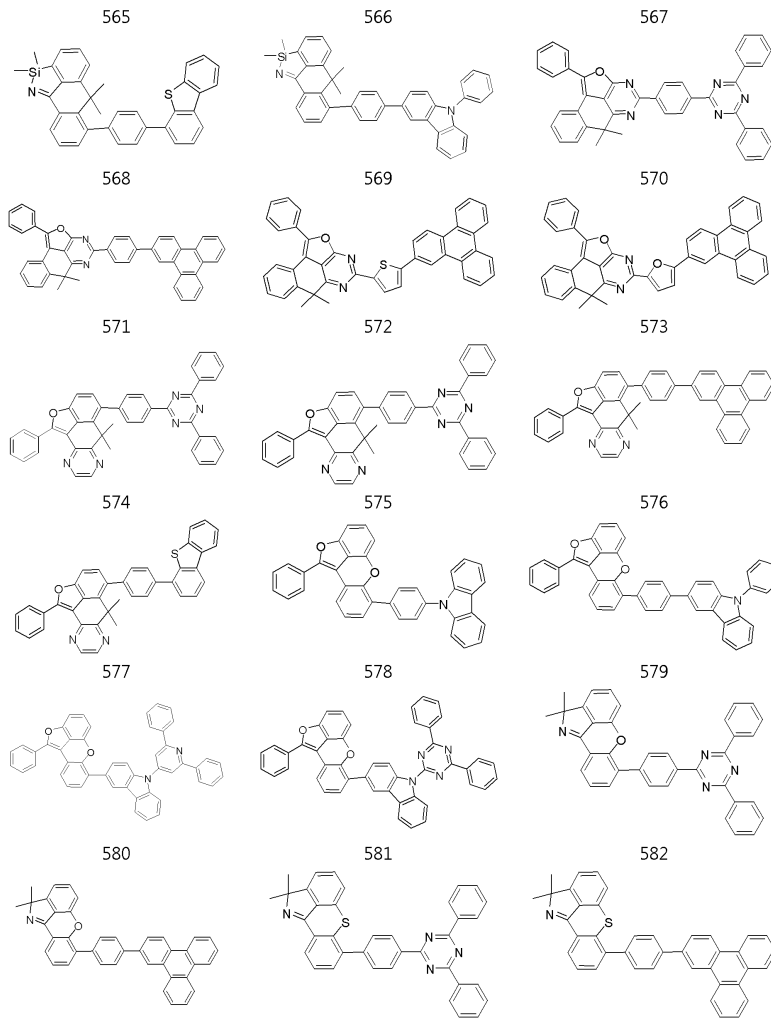
510

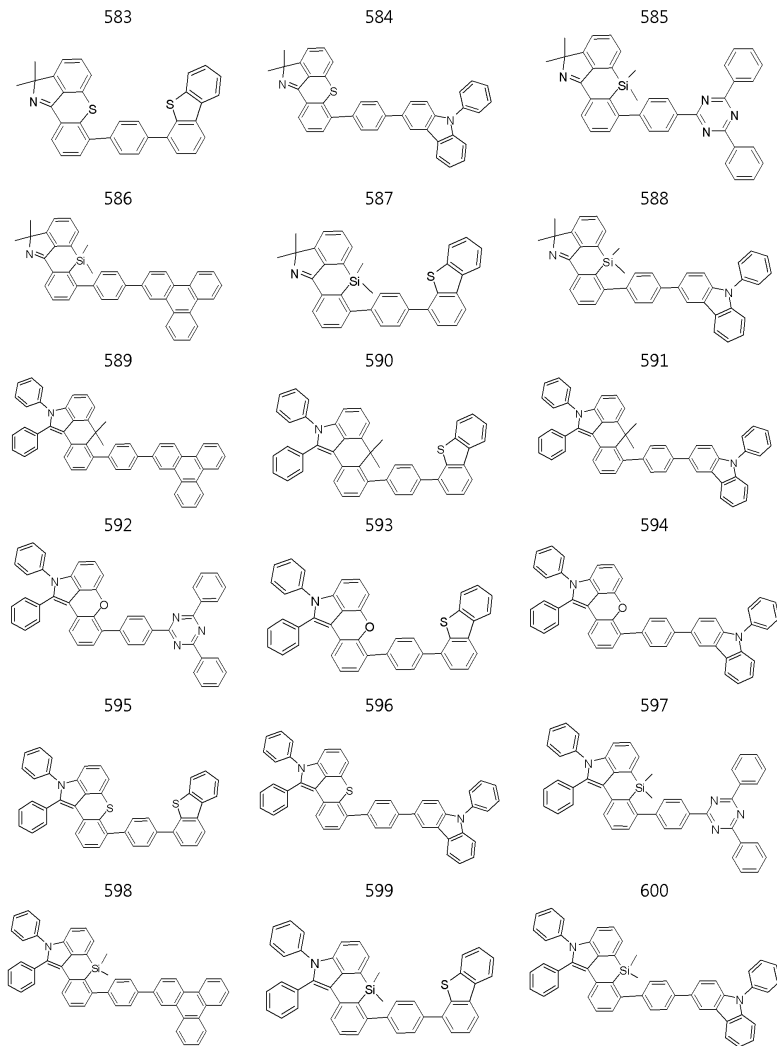


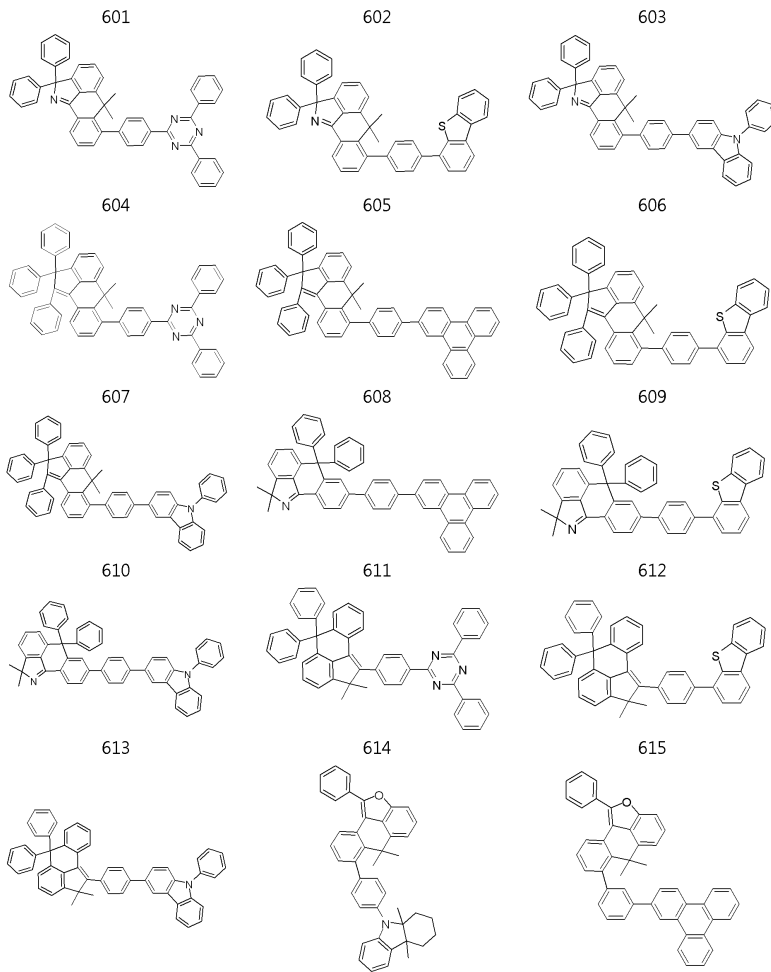


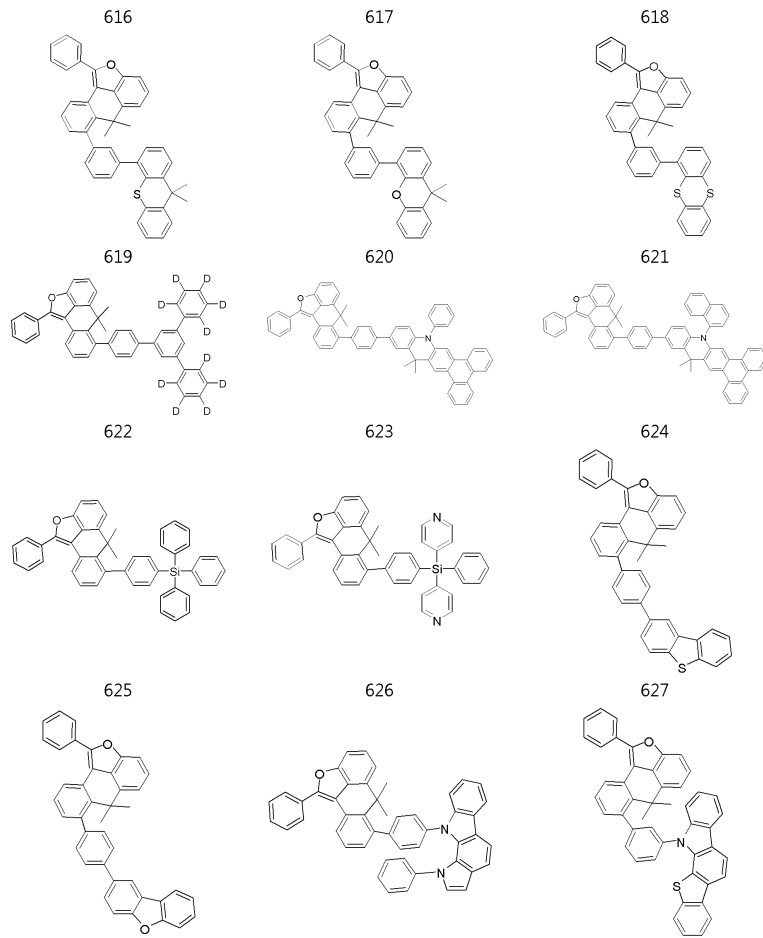




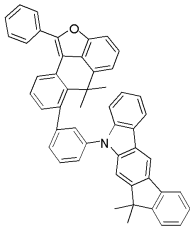




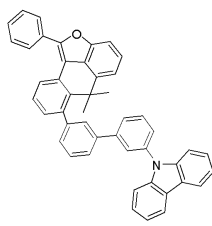




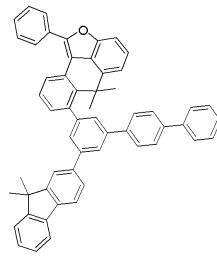
628



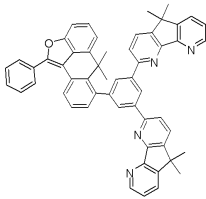
629



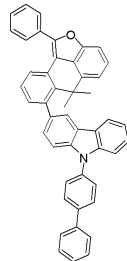
630



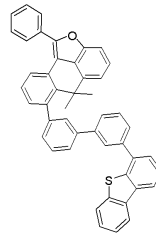
631



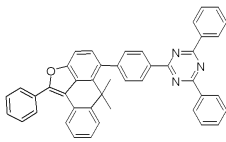
632



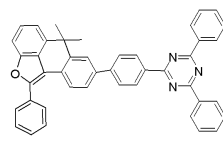
633



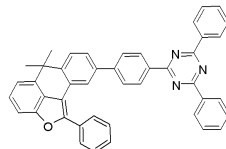
634



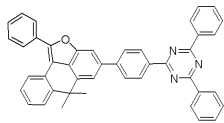
635



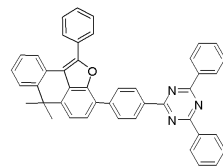
636



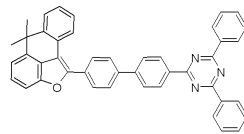
637



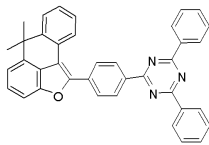
638



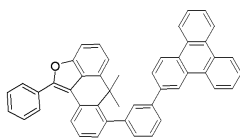
639



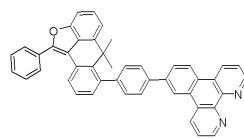
640

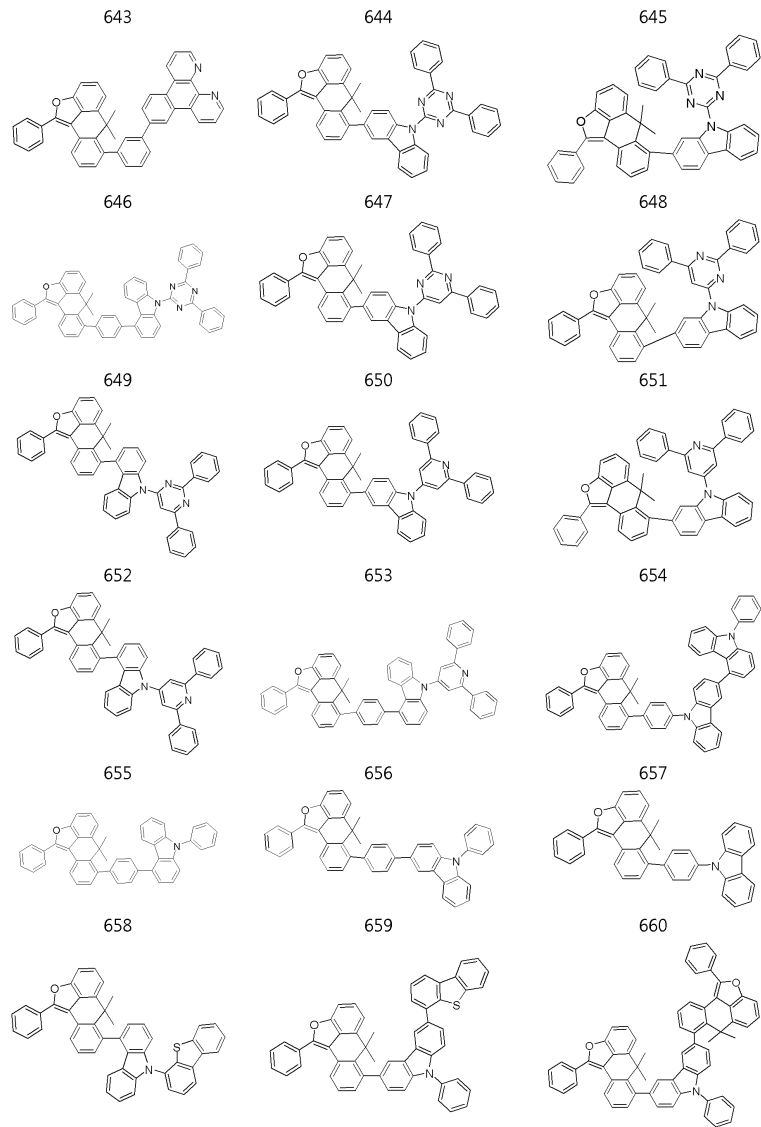


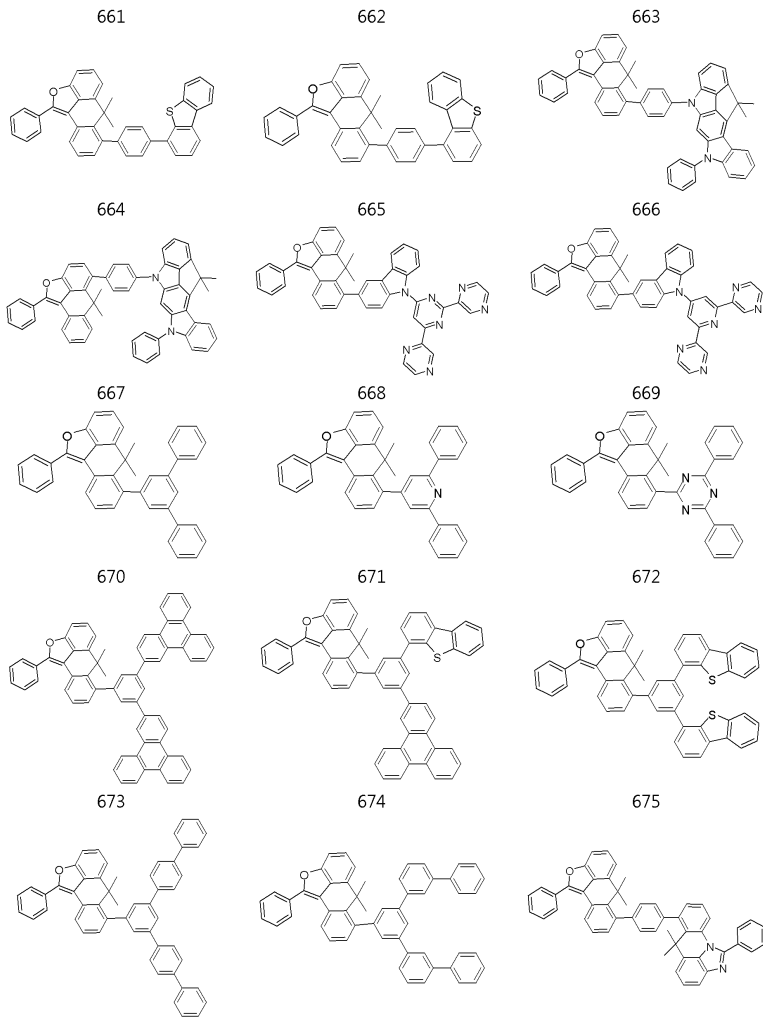
641

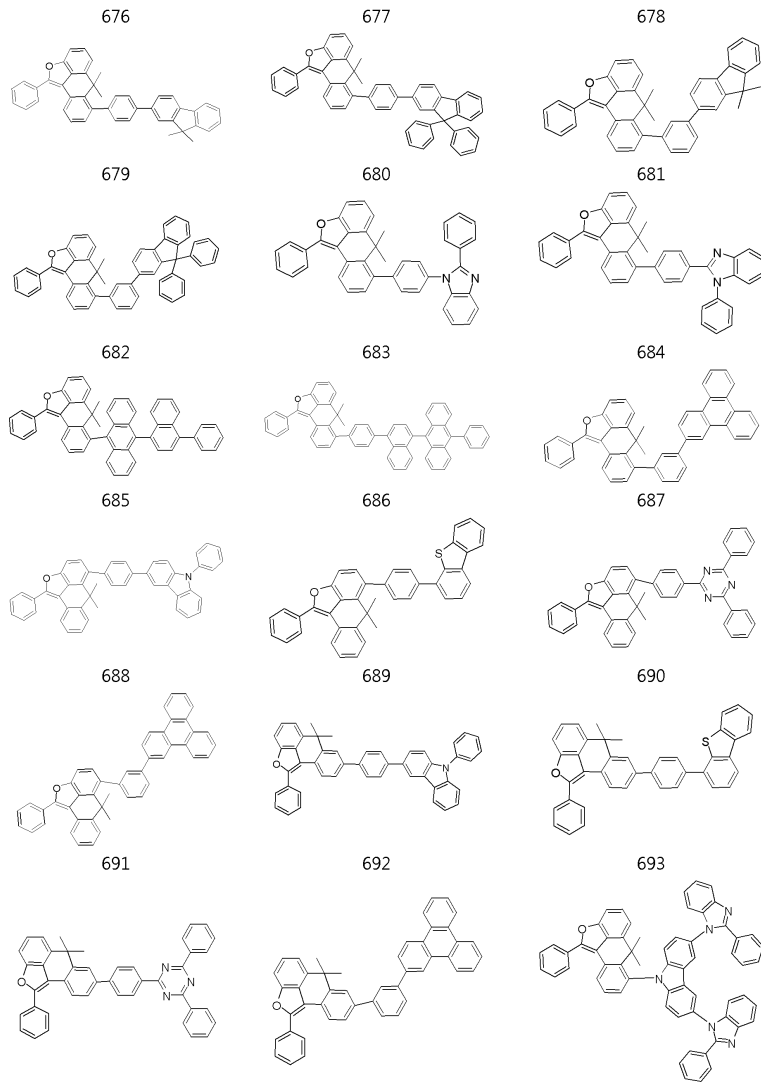


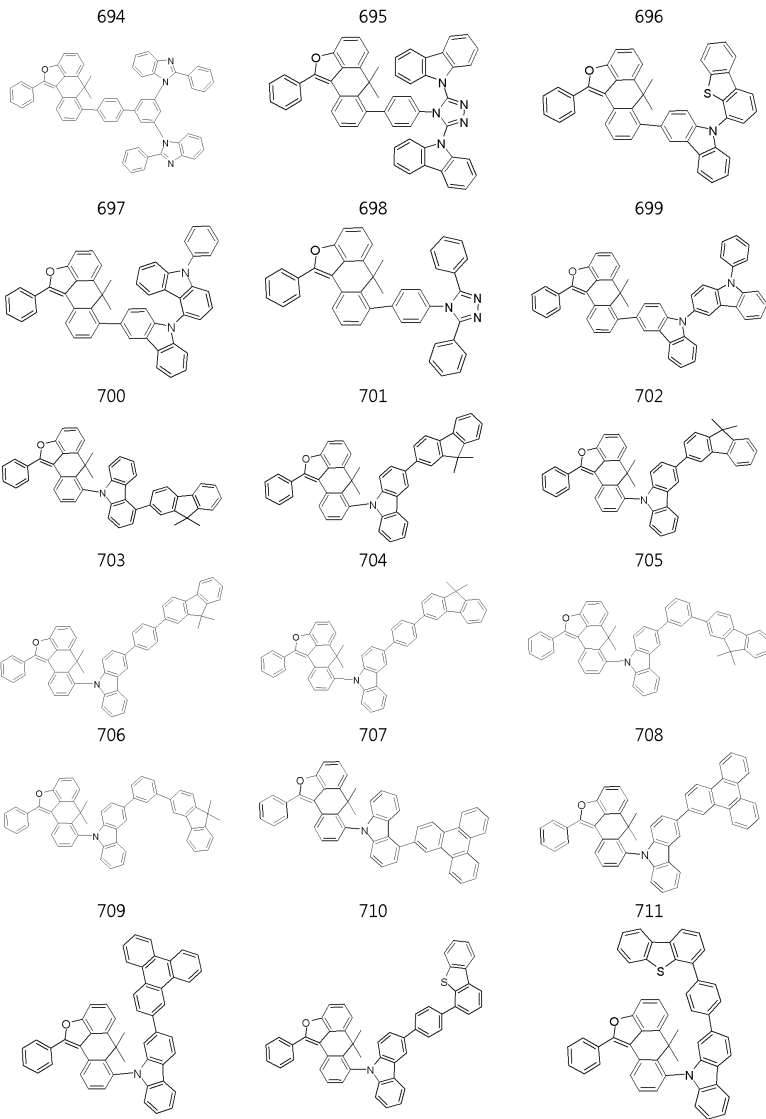
642



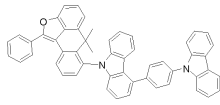




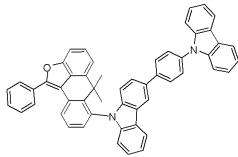




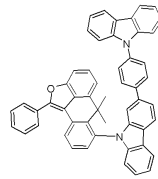
712



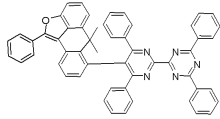
713



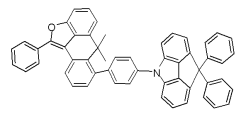
714



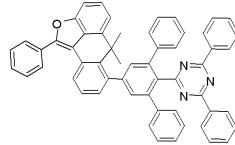
715



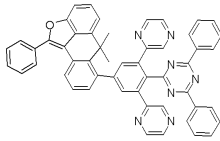
716



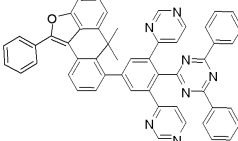
717



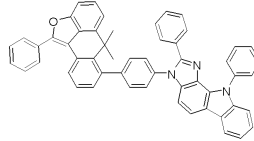
718



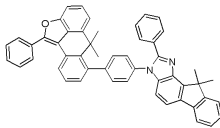
719



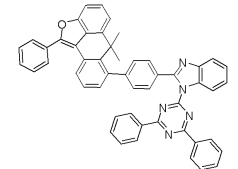
720



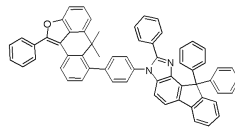
721



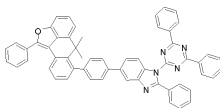
722



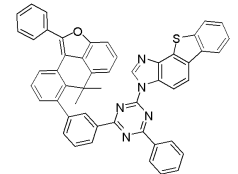
723



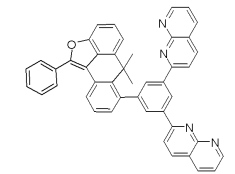
724



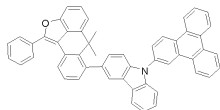
725



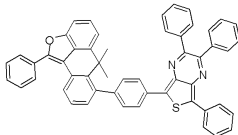
726



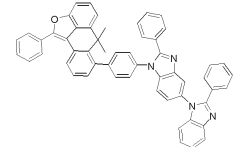
727

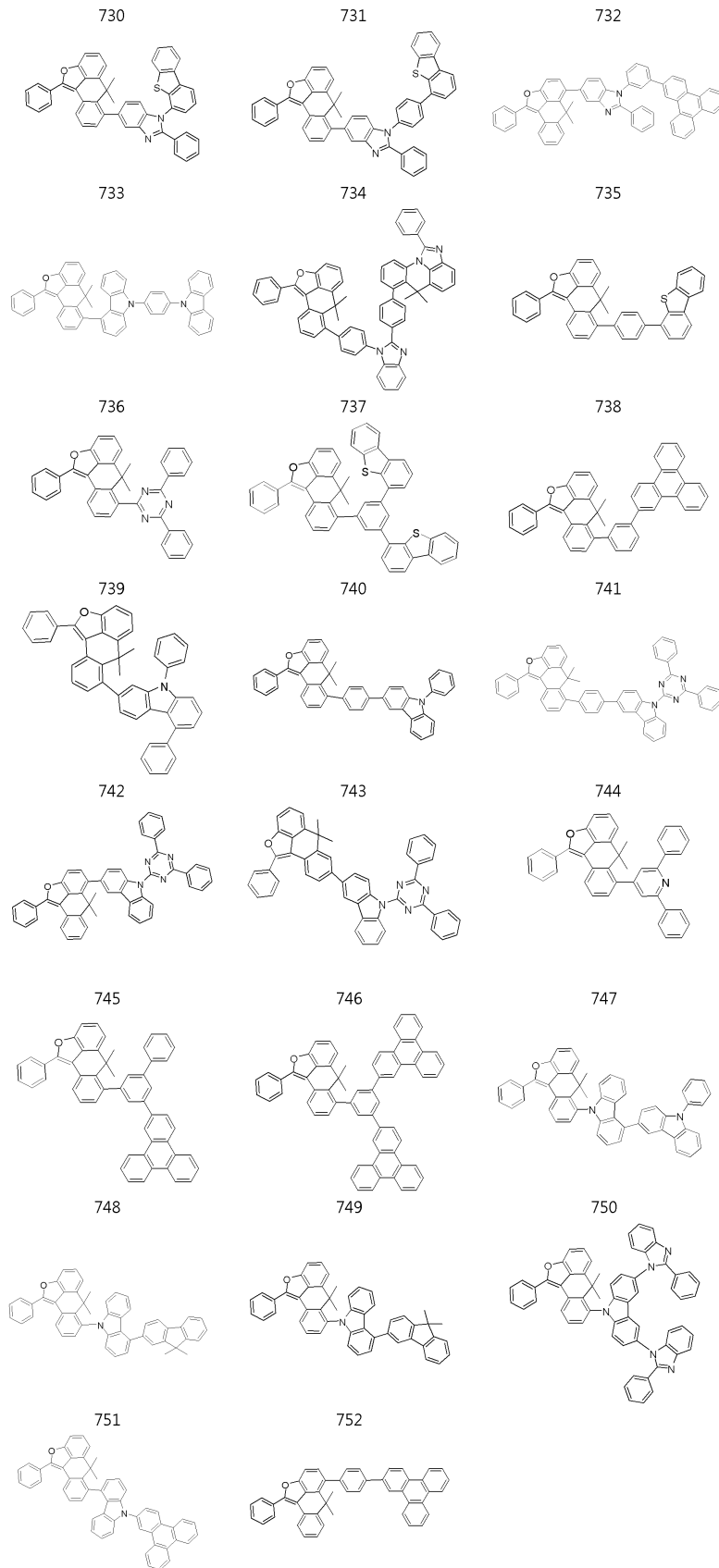


728



729





청구항 5

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

광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 제1항에 따른 [화학식 1] 또는 [화학식 2]의 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 발광층이 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 호스트 화합물로 사용되고, 상기 발광층은 도판트 화합물을 1종 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제6항에 있어서,

상기 정공수송층 또는 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층이 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물을 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 발광층 호스트 화합물 또는 정공수송 재료로 채용되는 유기발광 화합물 및 이를 채용하여 장수명 및 발광 효율이 현저히 향상된 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기전계발광소자는 투명 기관 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 전계 발광(EL) 디스플레이에 비해 10 V 이하의 저전압 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있고, 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 최근에 차세대 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0003] 다만, 이러한 유기전계발광소자가 상기와 같은 특징으로 발휘하기 위해서는 소자 내 유기층을 이루는 물질인 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지는 안정하고 효율적인 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 저전압 구동, 고효율 및 장수명을 갖는 새로운 재료의 개발이 계속

요구되고 있는 실정이다.

[0004] 특히, 종래 정공수송 재료로 구리 프탈로시아닌(CuPc), MTDATA, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(NPB), N,N'-다이페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(TPD) 등이 알려져 있으나, 이를 소자에 채용시 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있고, 이를 개량하기 위하여 다양한 치환기를 갖는 아릴아민계 화합물에 대해서 개발되고 있으나, 여전히 효율과 장수명을 동시에 충족시키기에는 충분하지 않은 문제점을 갖고 있다.

[0005] 또한, 유기 발광 소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있고, BALq 유도체를 호스트로 이용한 유기 발광 소자가 공지되어 있다.

[0006] 그러나, 인광 발광 재료를 사용한 유기 발광 소자는 형광 발광 재료를 사용한 소자에 비해 전류 효율이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BALq, CBP 등의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 소자에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율면에서 큰 이점이 없고, 또한, 소자의 수명 측면에서도 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정적이고, 고성능의 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

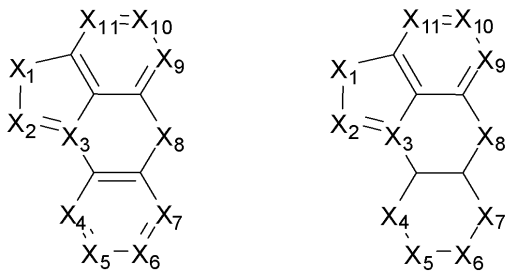
해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 유기전계발광소자의 발광층 또는 정공주입층 내지 정공수송층에 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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0009] [화학식 1] [화학식 2]



[0010]

[0011] 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]에 따른 유기발광 화합물의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

[0012] 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 구조 평판도가 우수하고, 높은 삼중항(triplet) 상태를 가져서 종래 인광 호스트 화합물이나 정공수송 화합물에 비하여 보다 향상된 발광 효율과 장수명 특성의 구현이 가능하여 이를 채용한 유기전계발광소자는 다양한 디스플레이 소자에 유용하여 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

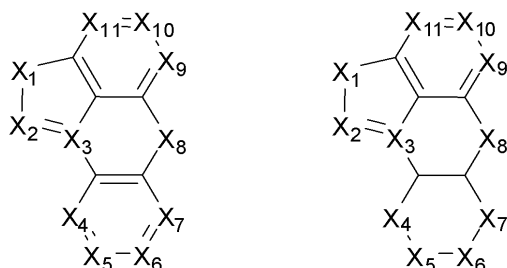
[0013] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 이하, 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다.

[0015] 본 발명은 하기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0016] [화학식 1] [화학식 2]



[0017]

[0018] 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]에서,

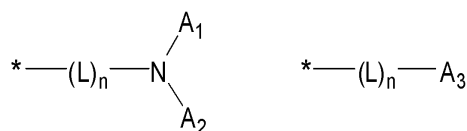
[0019] X_1 내지 X_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N, O, S, Te, CR_1 , NR_2 , CR_3R_4 , SiR_5R_6 , GeR_7R_8 , PR_9 및 BR_{10} 중에서 선택되고, 상기 R_3 와 R_4 , R_5 와 R_6 , R_7 와 R_8 은 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0020] 상기 R_1 내지 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐기, 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, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기 및 아미드기 중에서 선택된다.

[0021] 또한, 상기 R_1 내지 R_{10} 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

[0022] 또한, 상기 R_1 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 하기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]인 것을 특징으로 한다.

[0023] [구조식 1] [구조식 2]



[0024]

[0025] 상기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]에서,

[0026] L은 단일결합이거나, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐렌기, 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

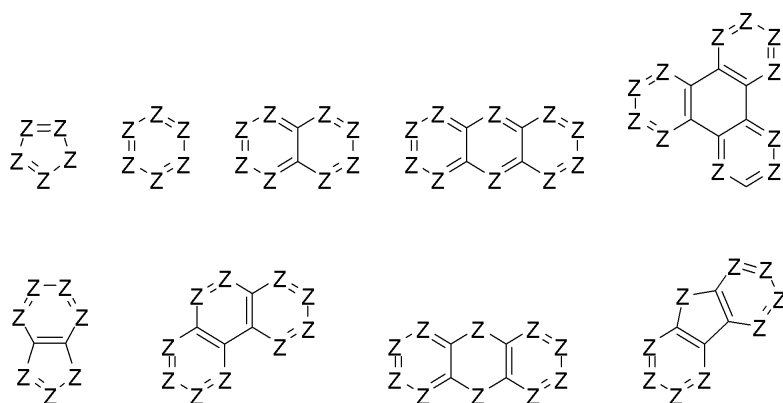
비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되고, n 은 0 내지 4의 정수이며, 상기 n 이 2 이상인 경우 복수의 L 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0027] A_1 내지 A_3 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 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] 상기 L , A_1 내지 A_3 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N , S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

[0029] 한편, 상기 L 및 A_1 내지 A_3 는 보다 구체적으로 각각 독립적으로 하기 [구조식 3] 중에서 선택될 수 있다.

[0030] [구조식 3]



[0031]

[0032] 상기 [구조식 3]에서,

[0033] Z 는 CR_1 , NR_2 , CR_3R_4 , SiR_5R_6 , GeR_7R_8 , PR_9 , BR_{10} , Te , O 및 S 중에서 선택되고, 상기 R_1 내지 R_{10} 은 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]에서의 정의와 동일하다.

[0034] 상기 L , A_1 내지 A_3 및 R_1 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 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, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포닐기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기 및 에스테르기 중에서 선택될 수 있다.

[0035] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0036] 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.

[0037] 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.

[0038] 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, 스티라닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0039] 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, 피아레닐기, 페릴레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 아세나프타세닐기, 트리페닐렌기, 플루오안트렌(fluoranthrene)기 등이 있으나, 본 발명의 범위가 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.

[0040] 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, 페난트롤린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0041] 본 발명에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술포시기 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, 아릴술포시기로는 벤젠술포시기, p-톨루엔술포시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0042] 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.

[0043] 본 발명에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0044] 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.

[0045] 상기 아릴아민기의 구체적인 예로는 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 3-메틸-페닐아민기, 4-메틸-나프틸아민기, 2-메틸-비페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아

민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸기 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 본 발명에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0047] 본 발명에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0048] 본 발명에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폰시기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폰시기로는 메실, 에틸술폰시기, 프로필술폰시기, 부틸술폰시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

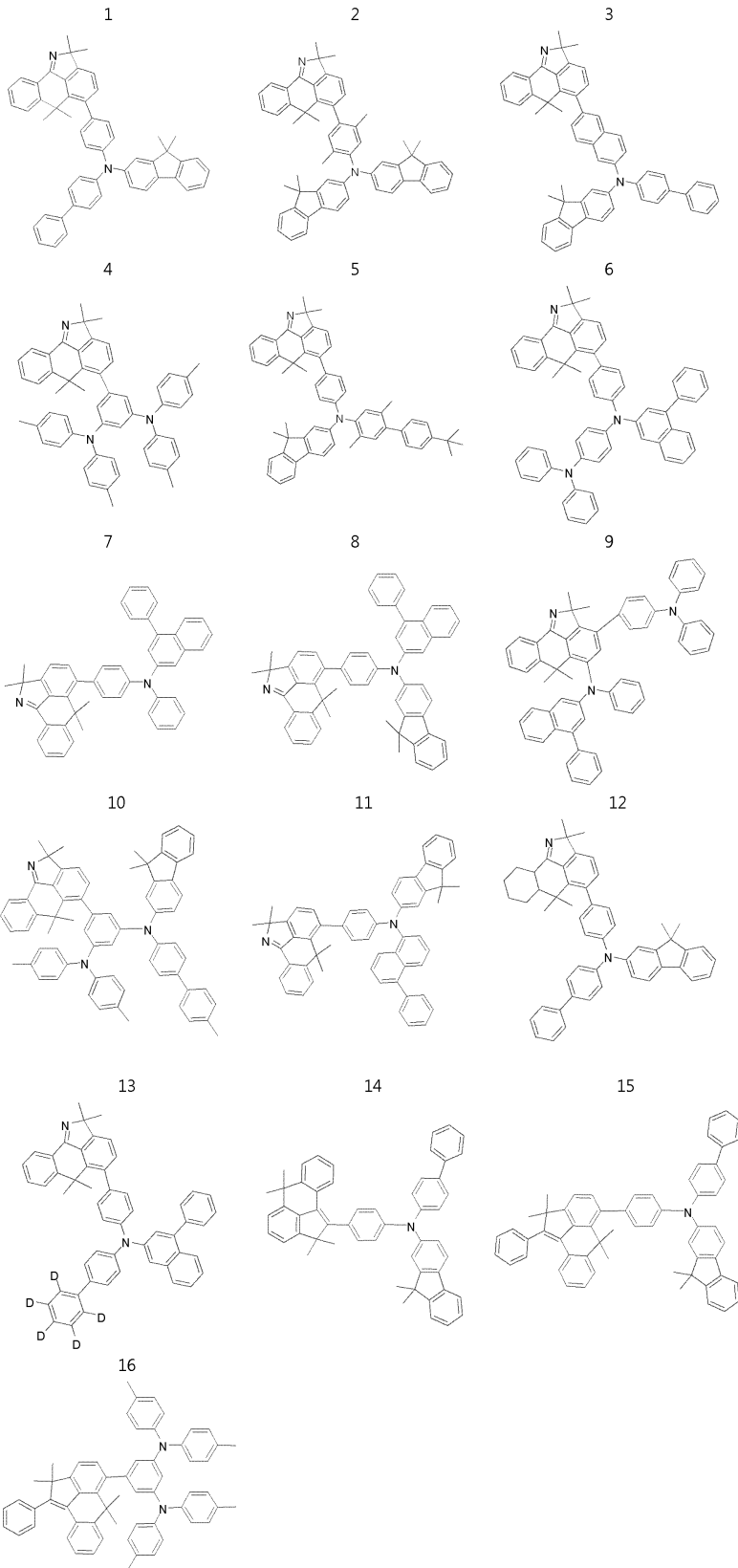
[0049] 본 발명에 있어서, "치환 또는 비치환된"이란, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 니트로기, 히드록시기, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티옥시기, 아릴티옥시기, 알킬술폰시기, 아릴술폰시기, 알케닐기, 실릴기, 붕소기, 알킬아민기, 아랄킬아민기, 아릴아민기, 아릴기, 플루오레닐기, 카바졸기 및 N, O 및 S 원자 중 1 개 이상을 포함하는 헤테로고리기 중 적어도 하나의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.

[0050] 본 발명에 있어서, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 페릴렌기, 테트라세닐기, 안트라센닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.

[0051] 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.

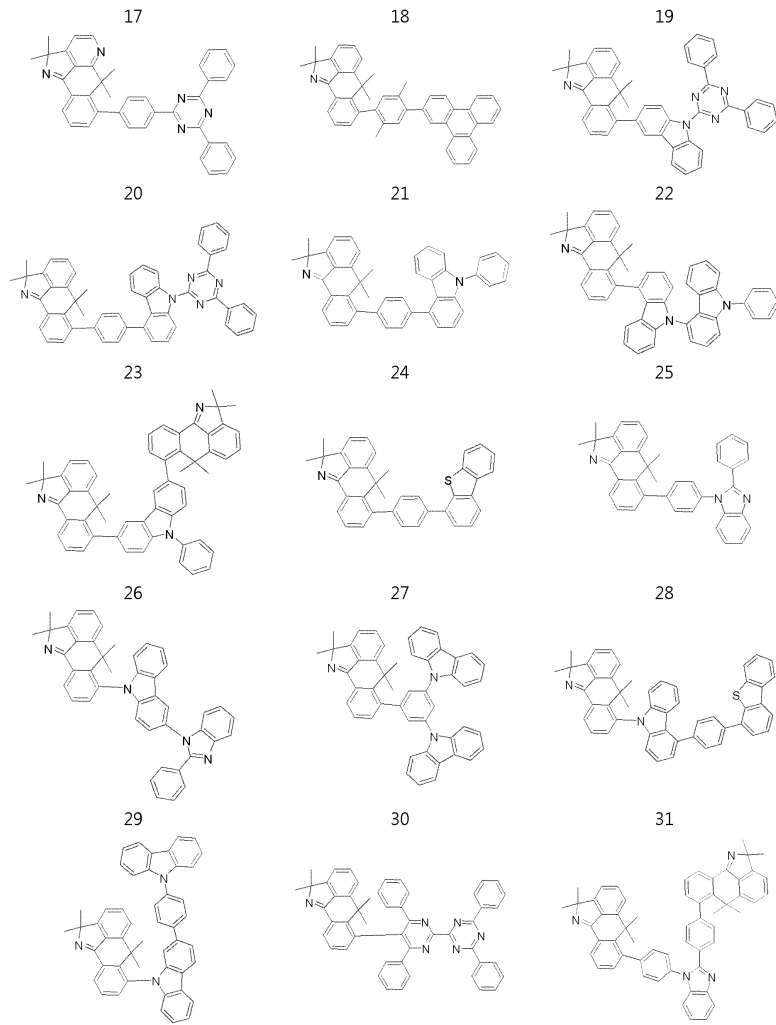
[0052] 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 유기물층으로 사용될 수 있고, 보다 구체적으로 유기물층 내의 정공수송 기능층에 정공수송 물질로 사용될 수 있다.

[0053] 특히, 본 발명에 따른 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 정공수송 기능층에 채용될 수 있는 유기발광 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

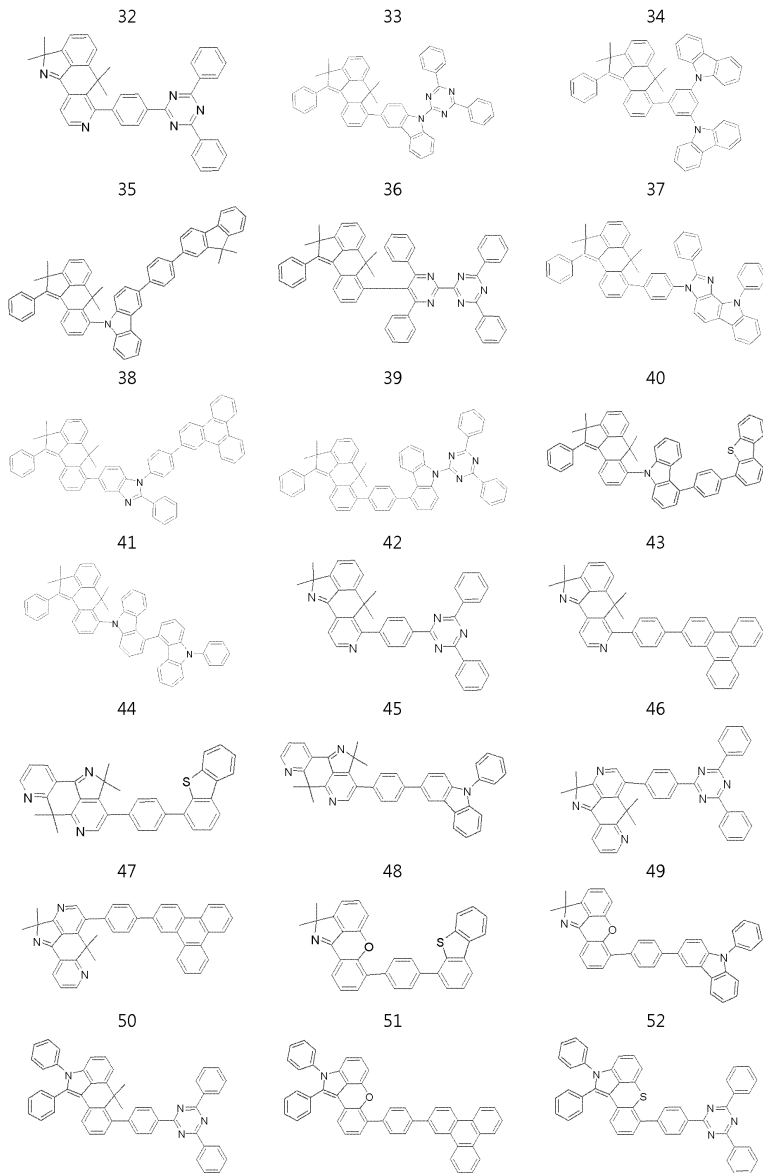


[0054]

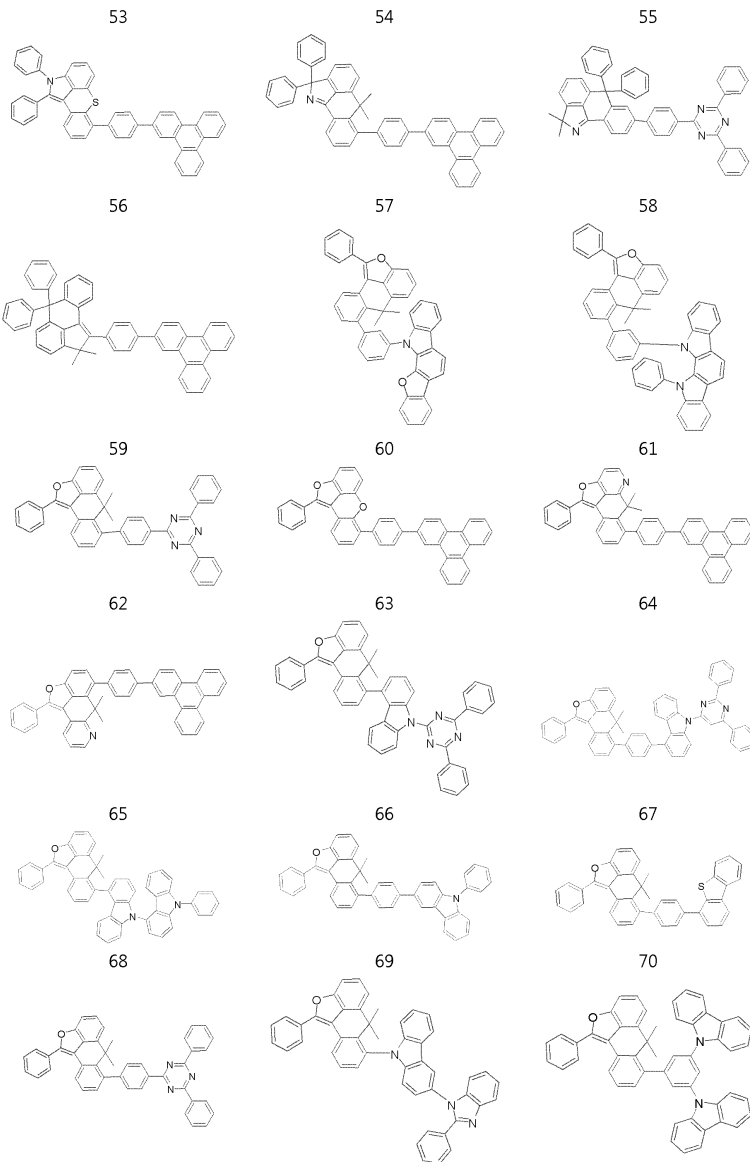
[0055]



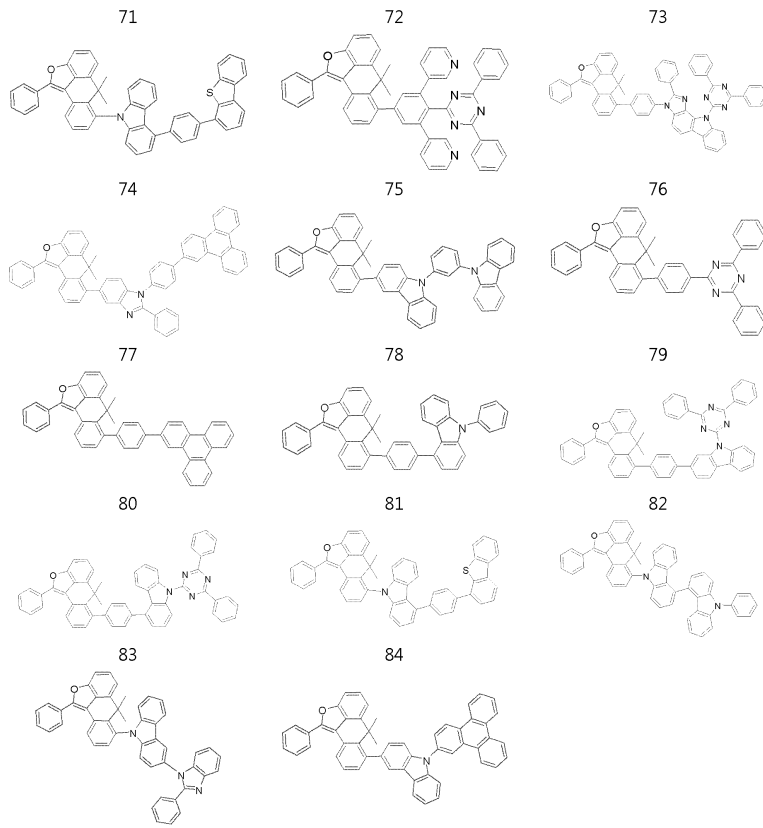
[0056]



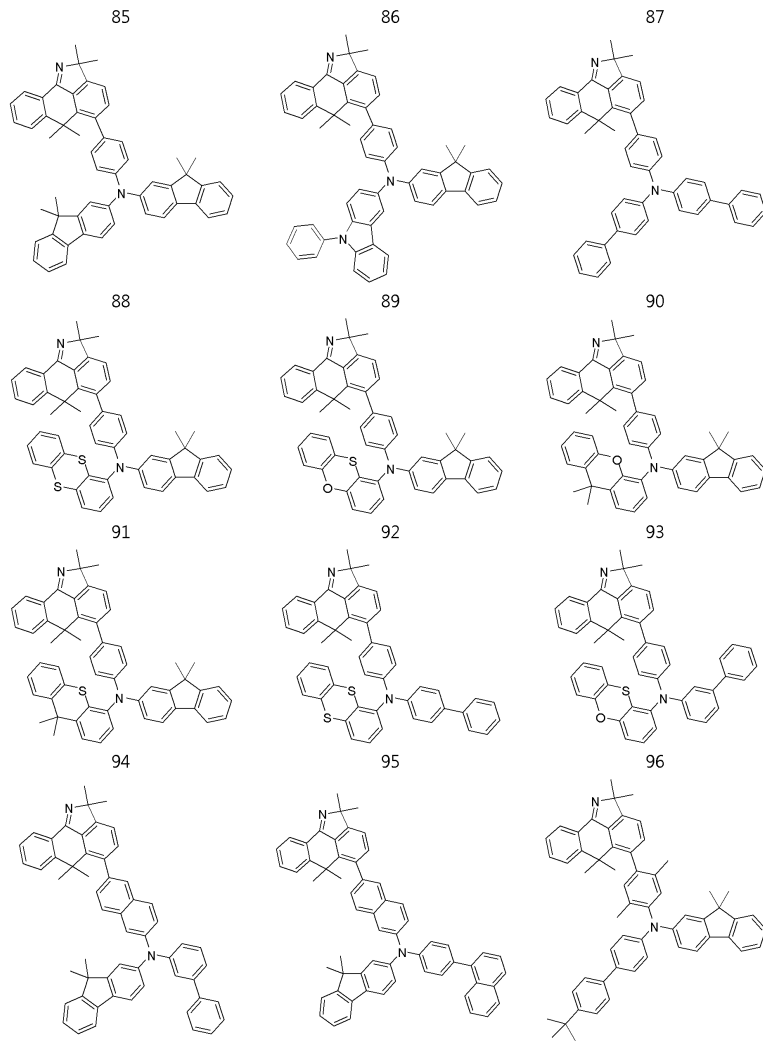
[0057]



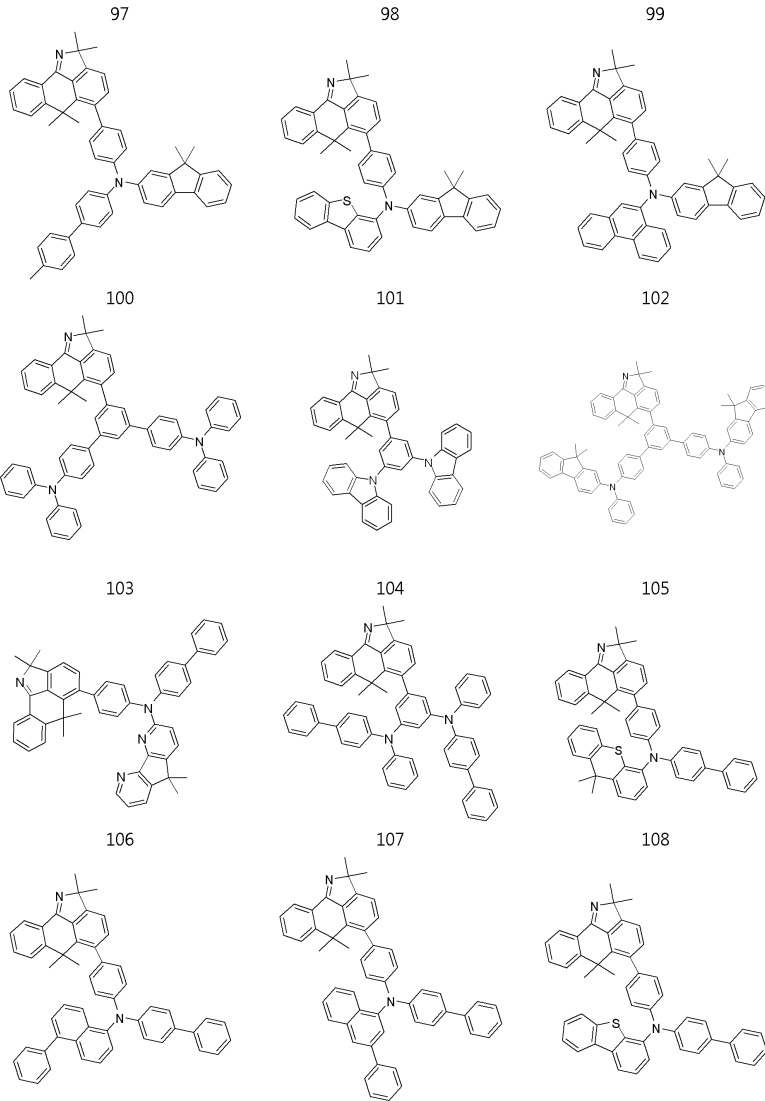
[0058]



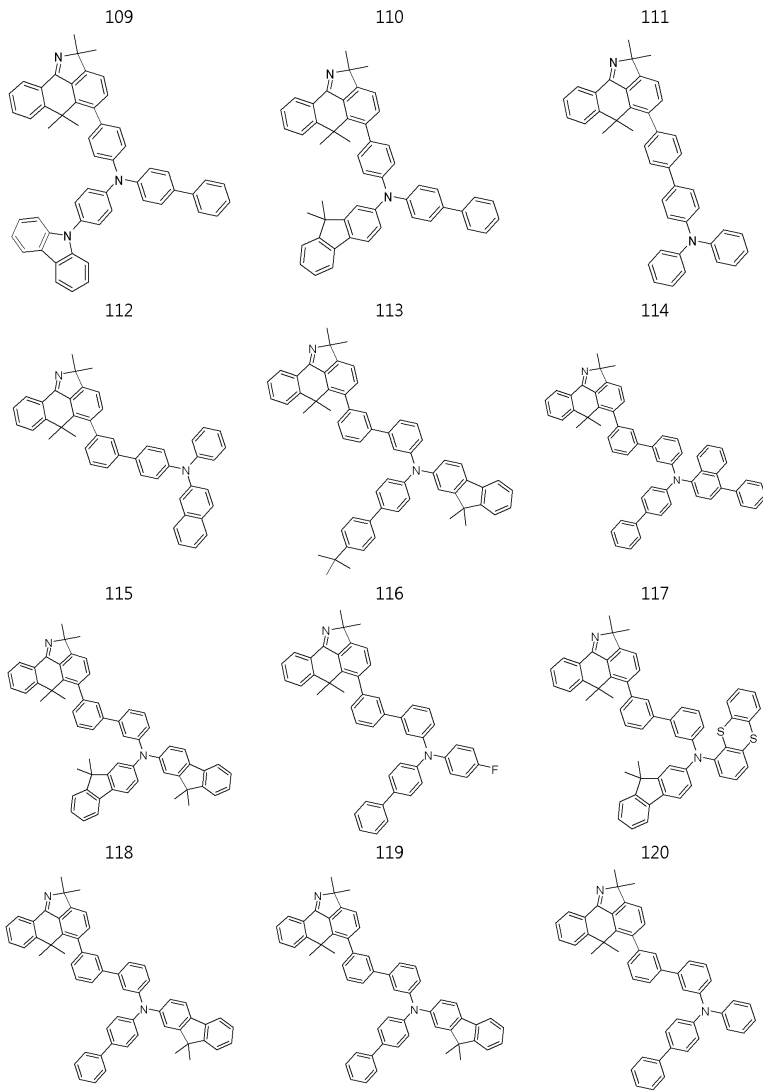
[0059]



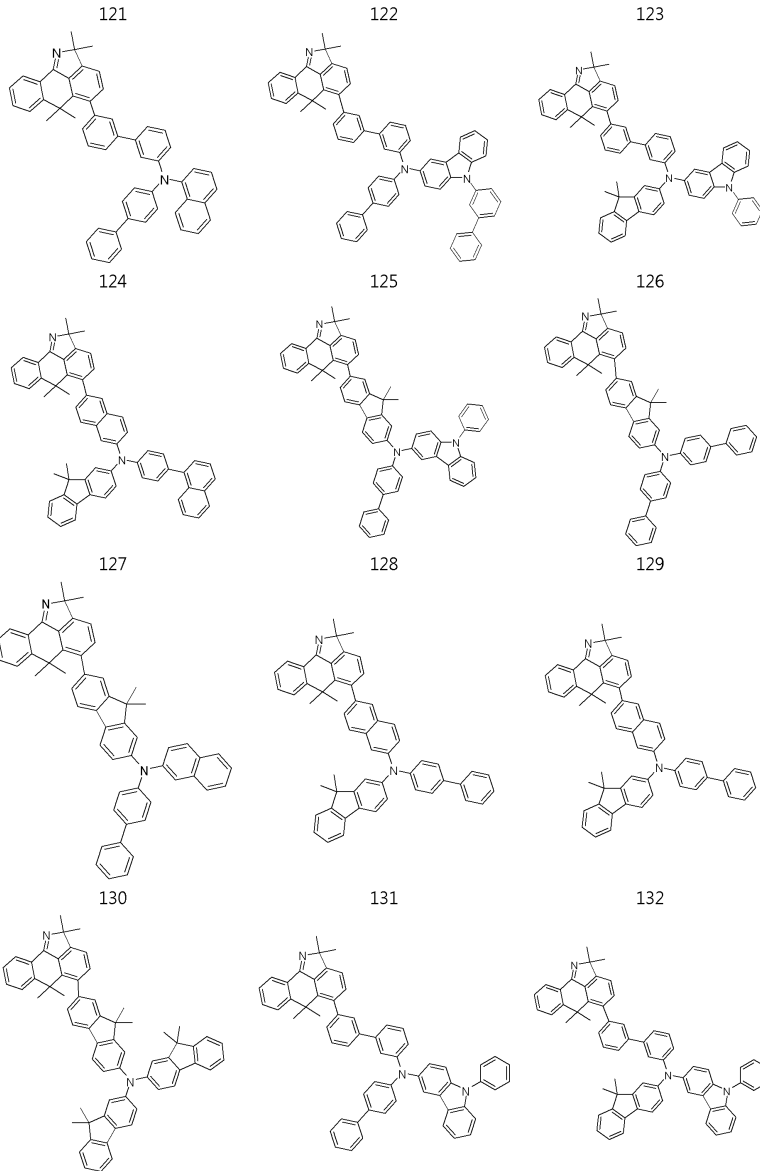
[0060]



[0061]

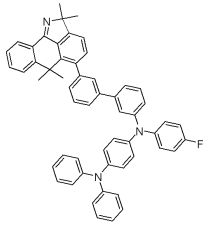


[0062]

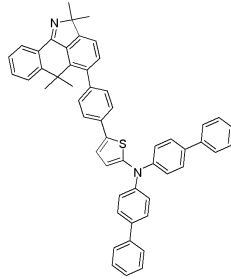


[0063]

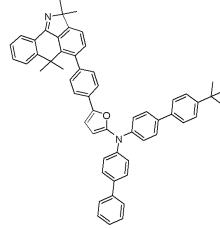
133



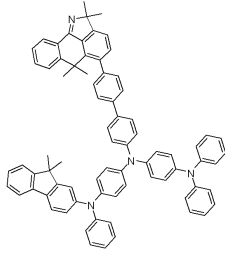
134



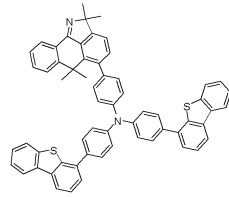
135



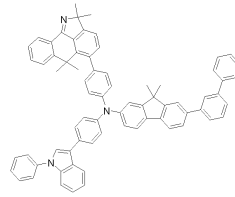
136



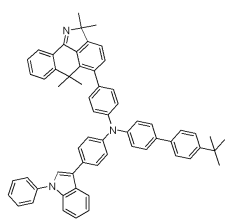
137



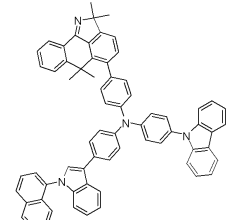
138



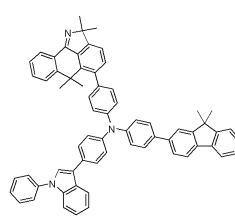
139



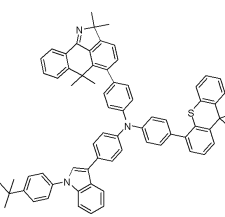
140



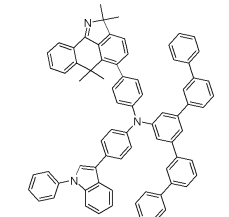
141



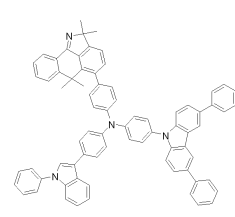
142



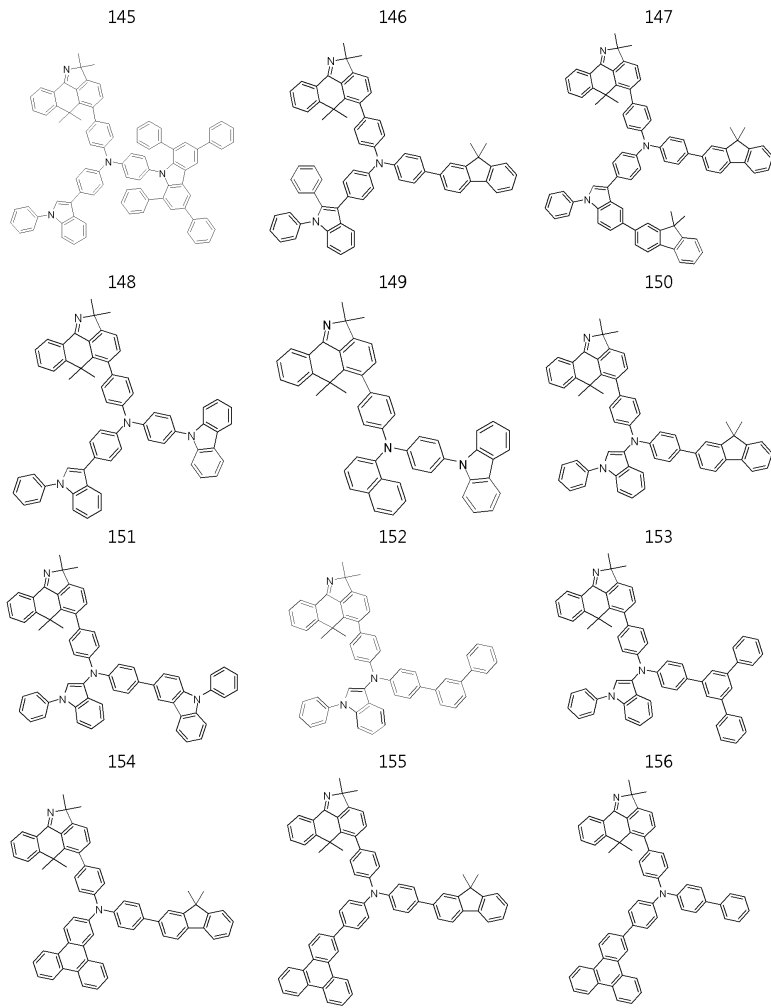
143



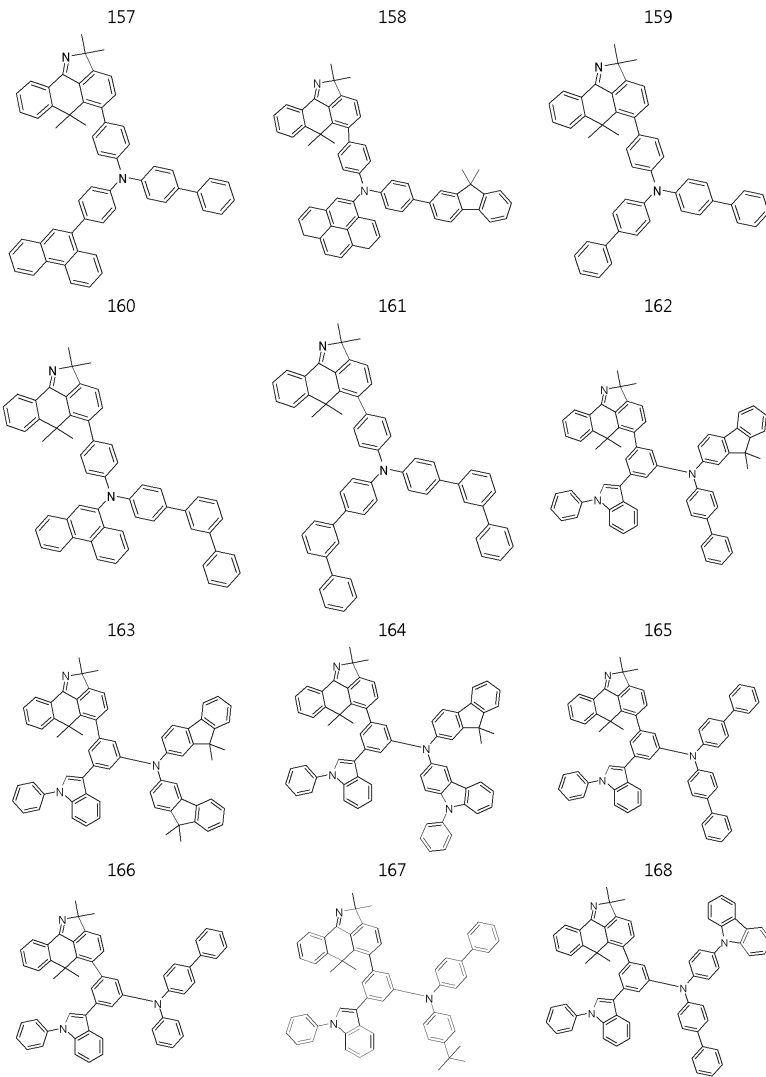
144



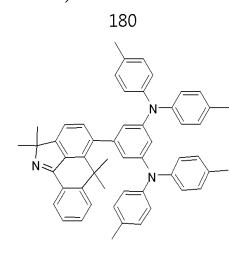
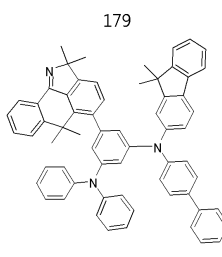
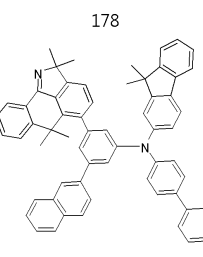
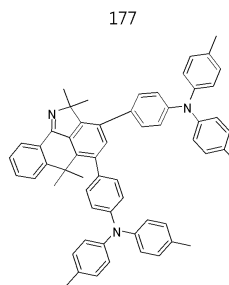
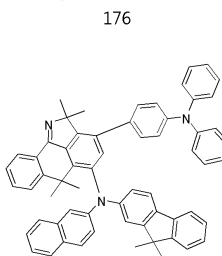
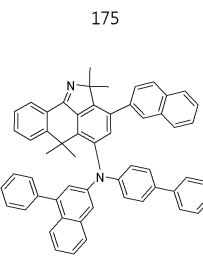
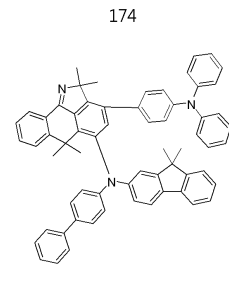
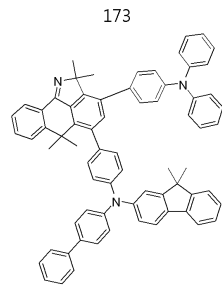
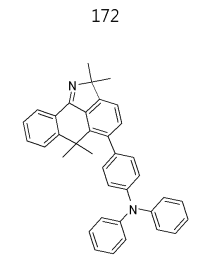
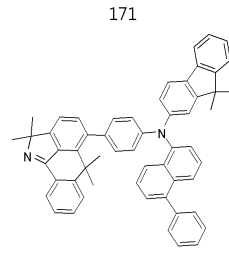
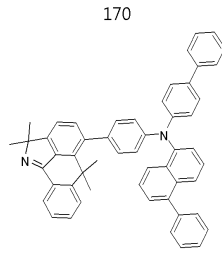
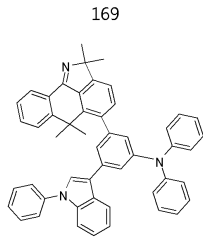
[0064]



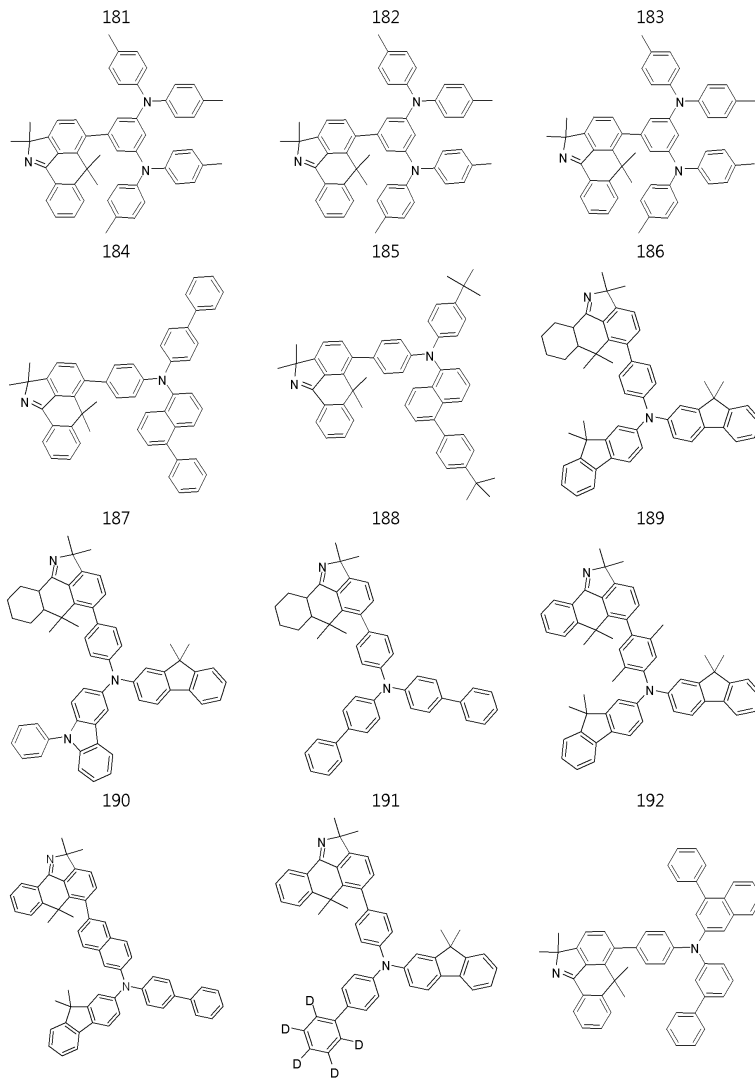
[0065]



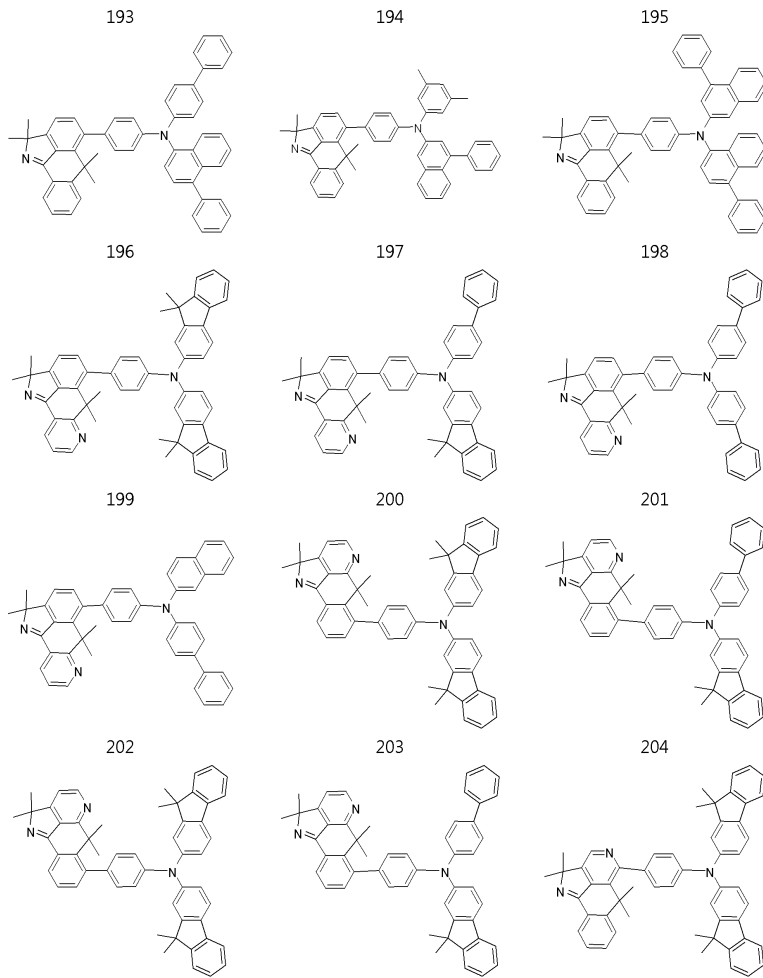
[0066]



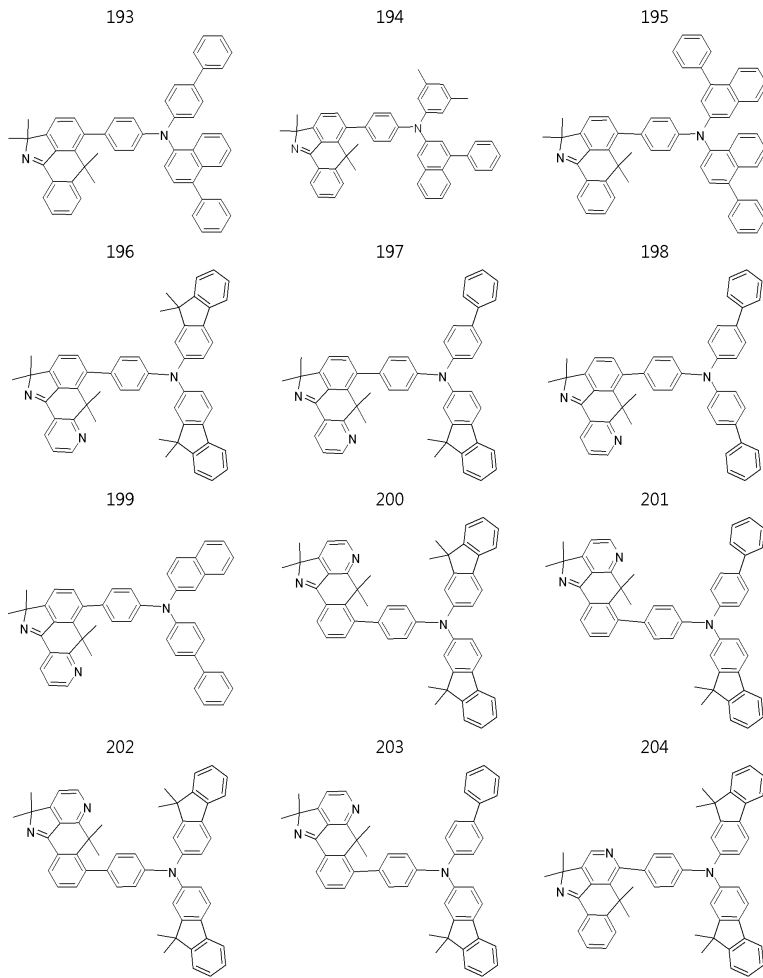
[0067]



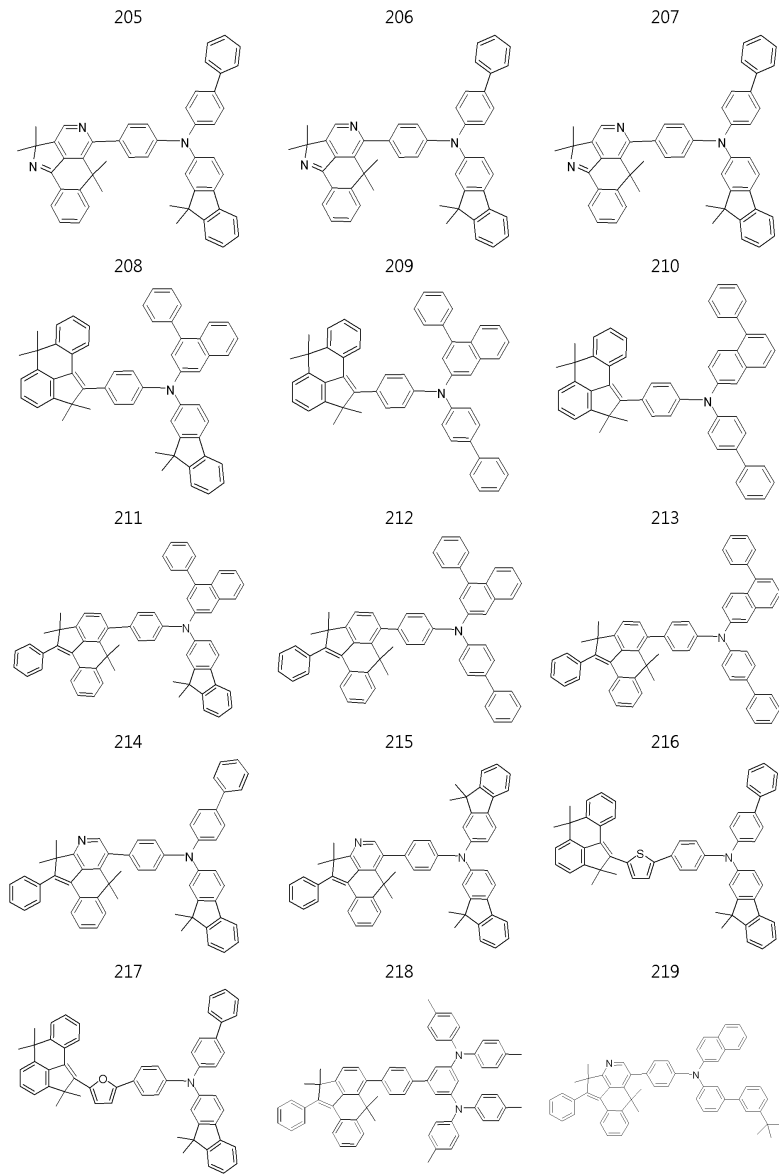
[0068]



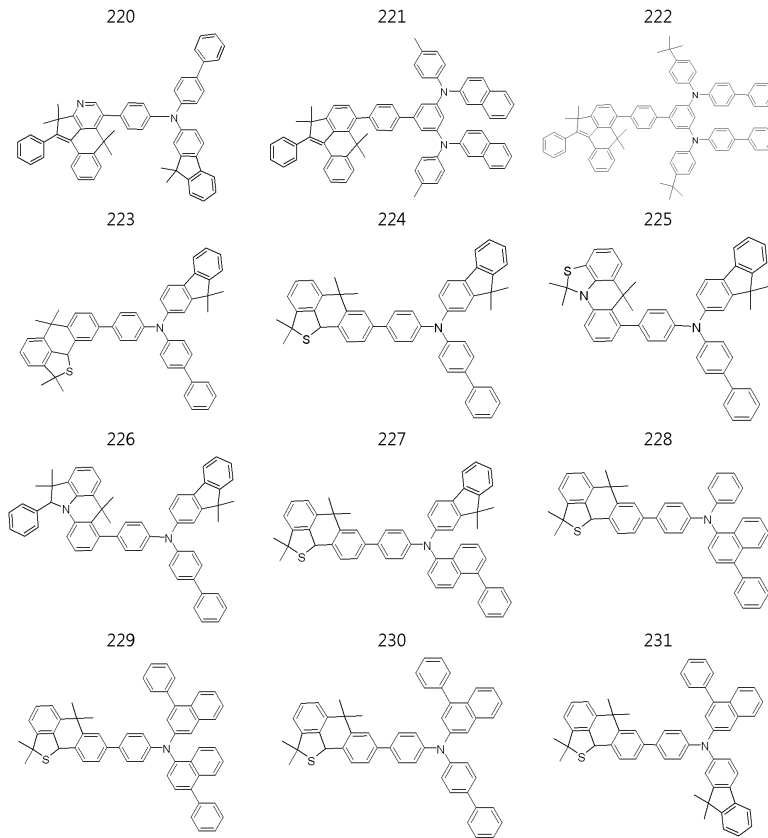
[0069]



[0070]



[0071]



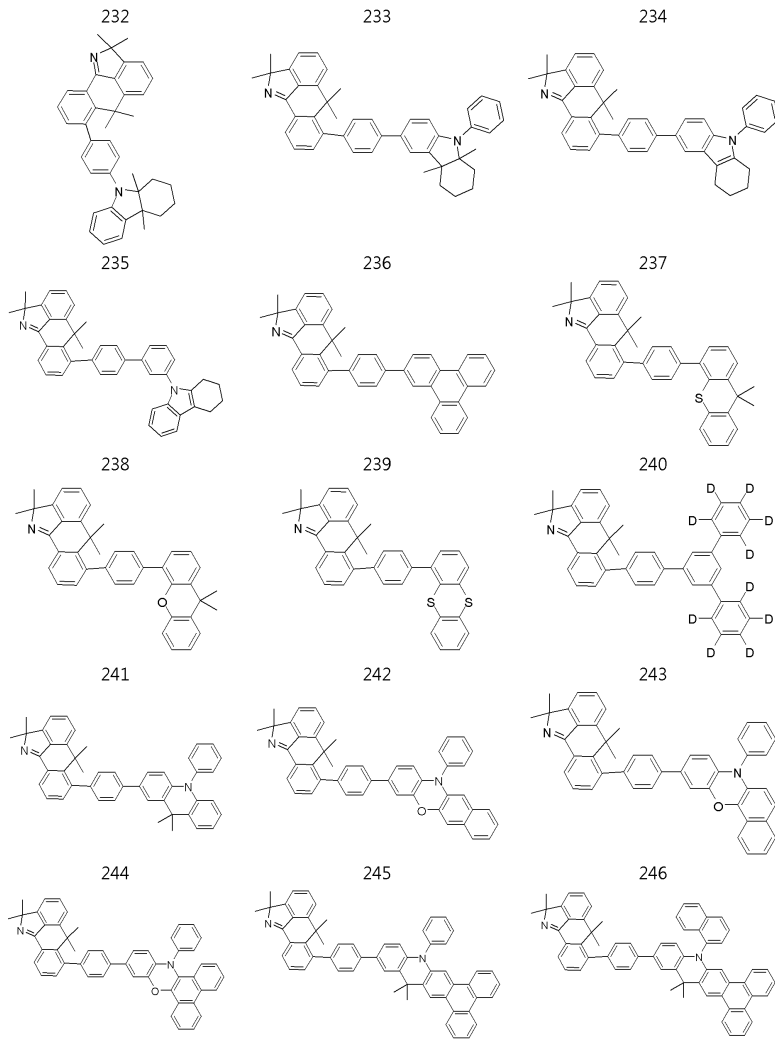
[0072]

[0073]

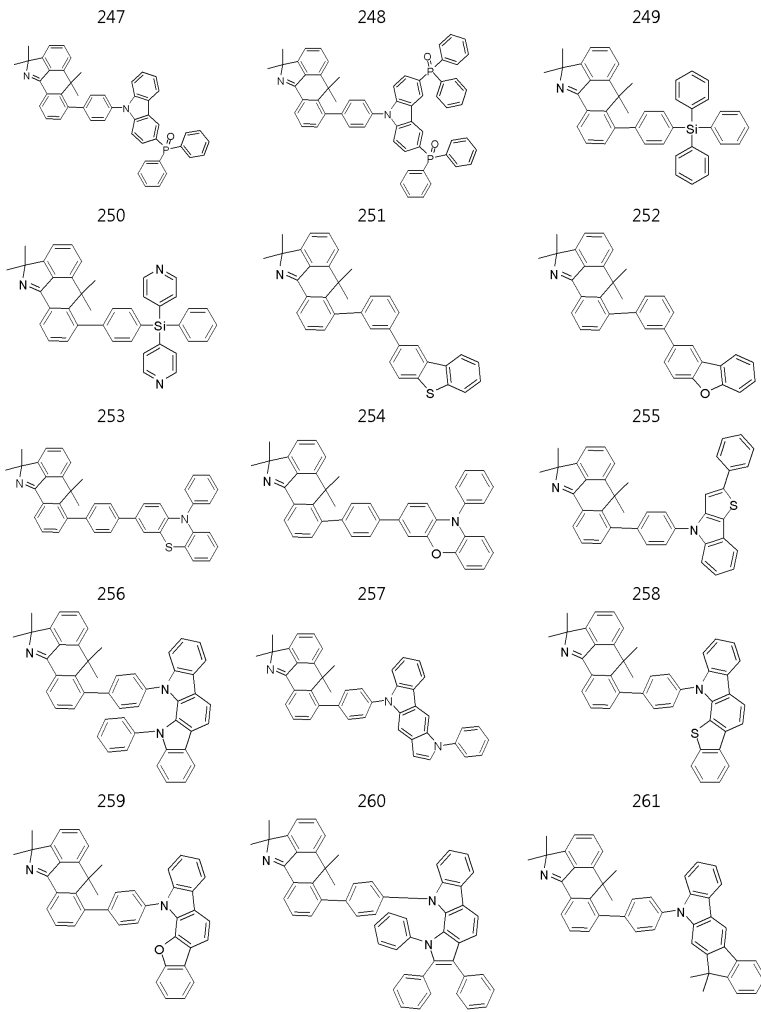
또한, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 유기물층으로 사용될 수 있고, 보다 구체적으로 발광층의 인광 호스트 화합물로 사용될 수 있다.

[0074]

본 발명에 따른 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 발광층의 인광 호스트 화합물로 채용될 수 있는 유기발광 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

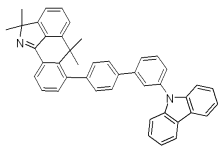


[0075]

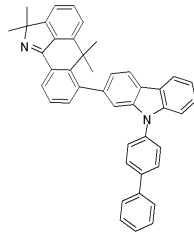


[0076]

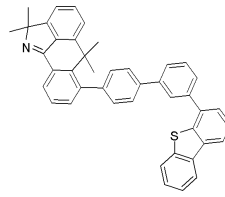
262



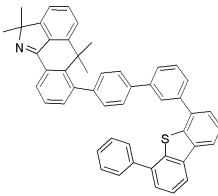
263



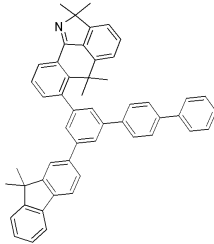
264



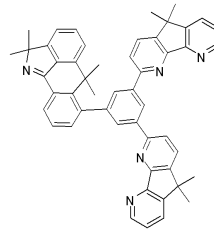
265



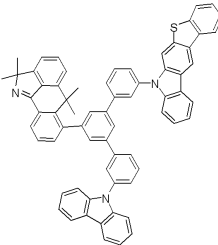
266



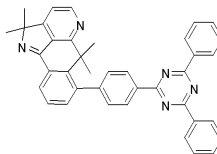
267



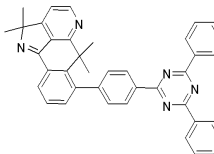
268



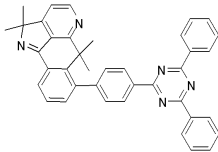
269



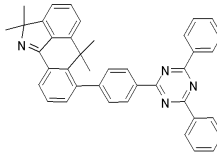
270



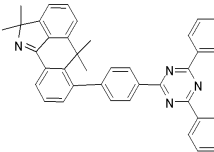
271



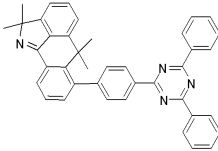
272



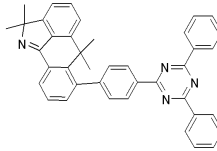
273



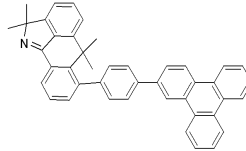
274



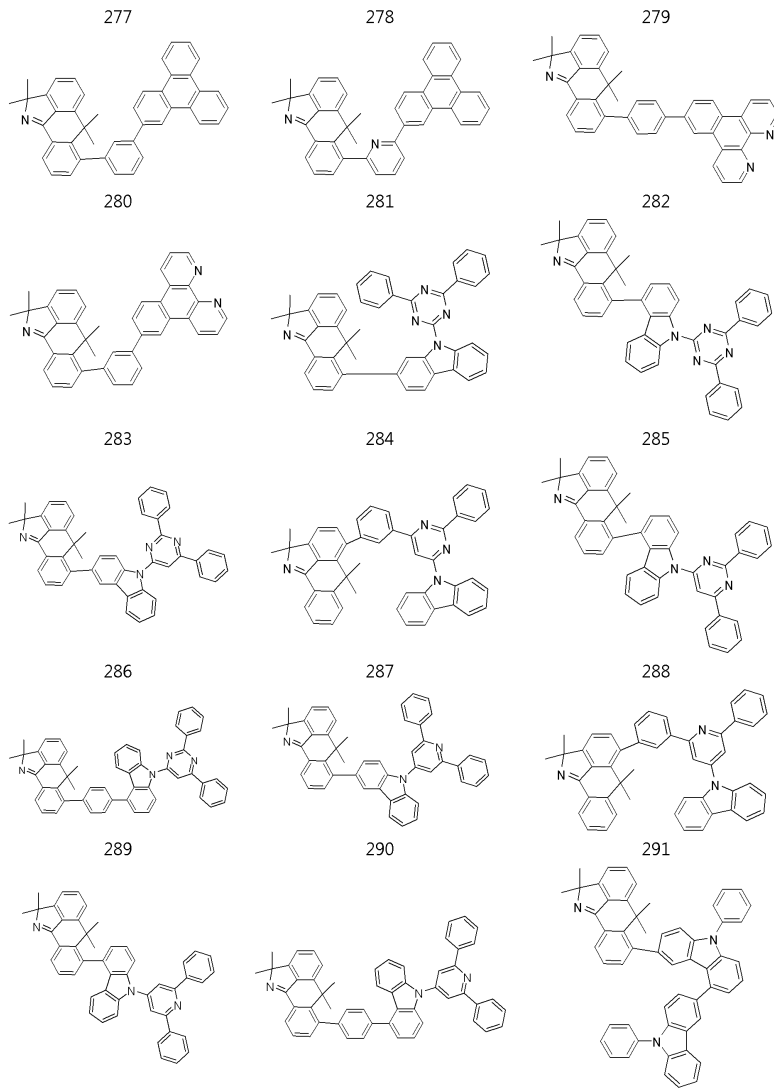
275



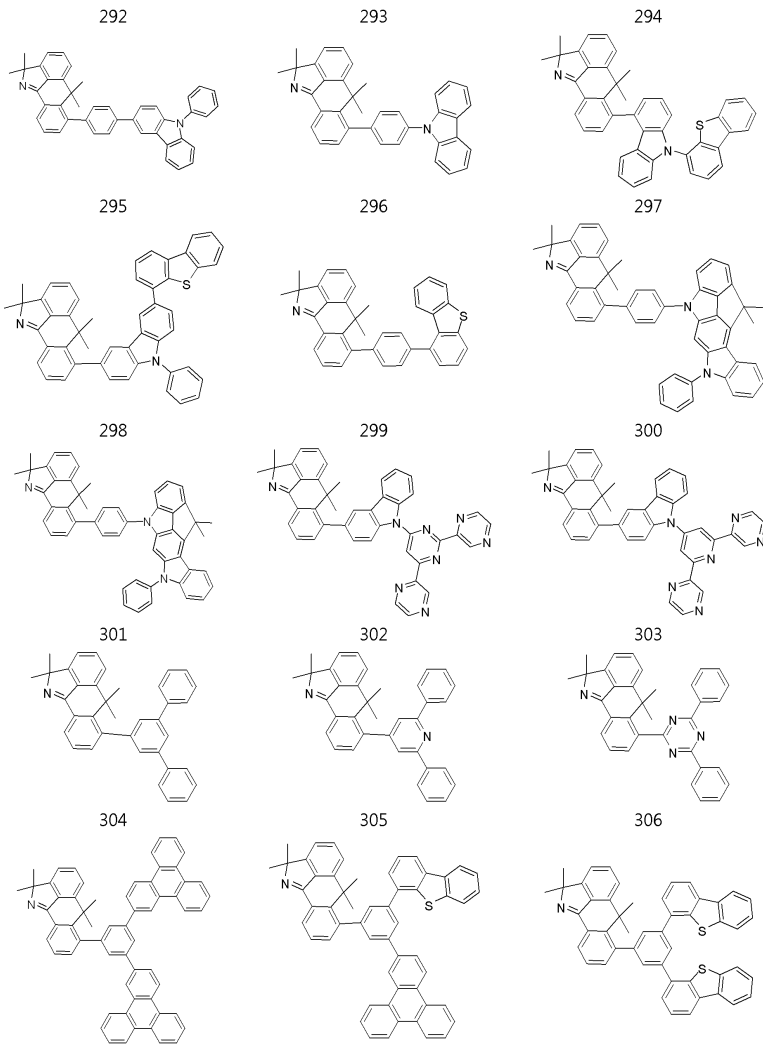
276



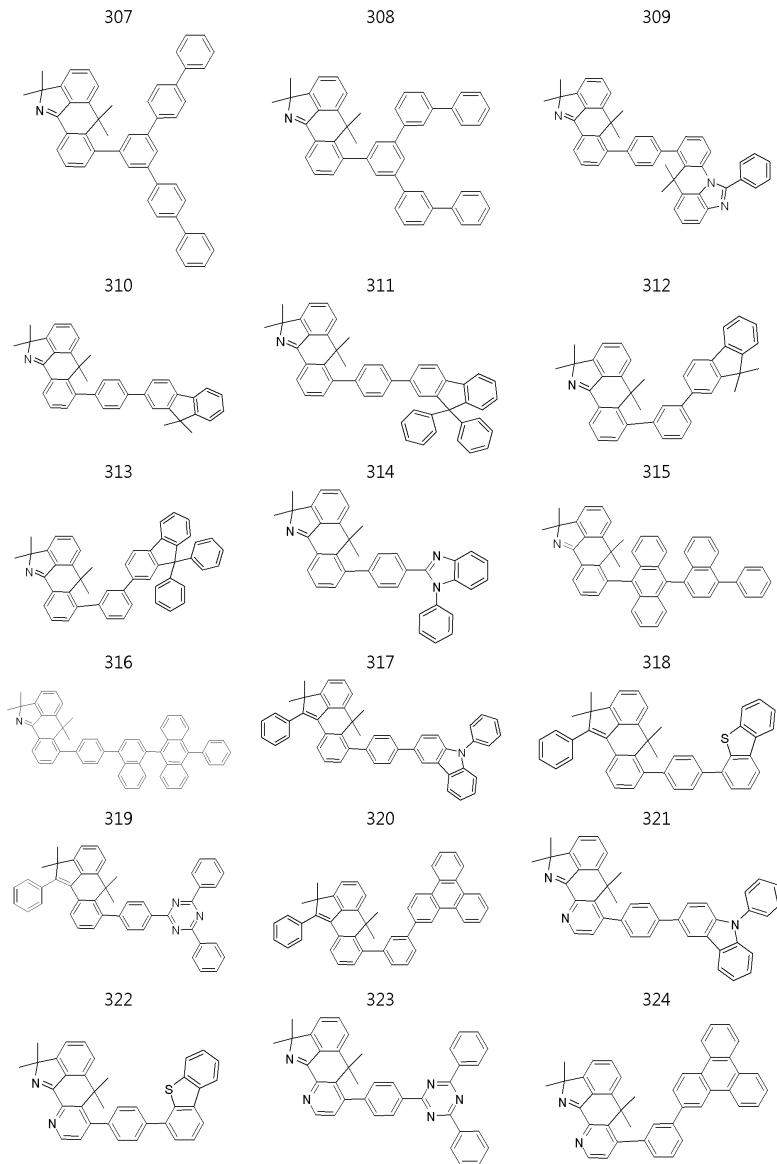
[0077]



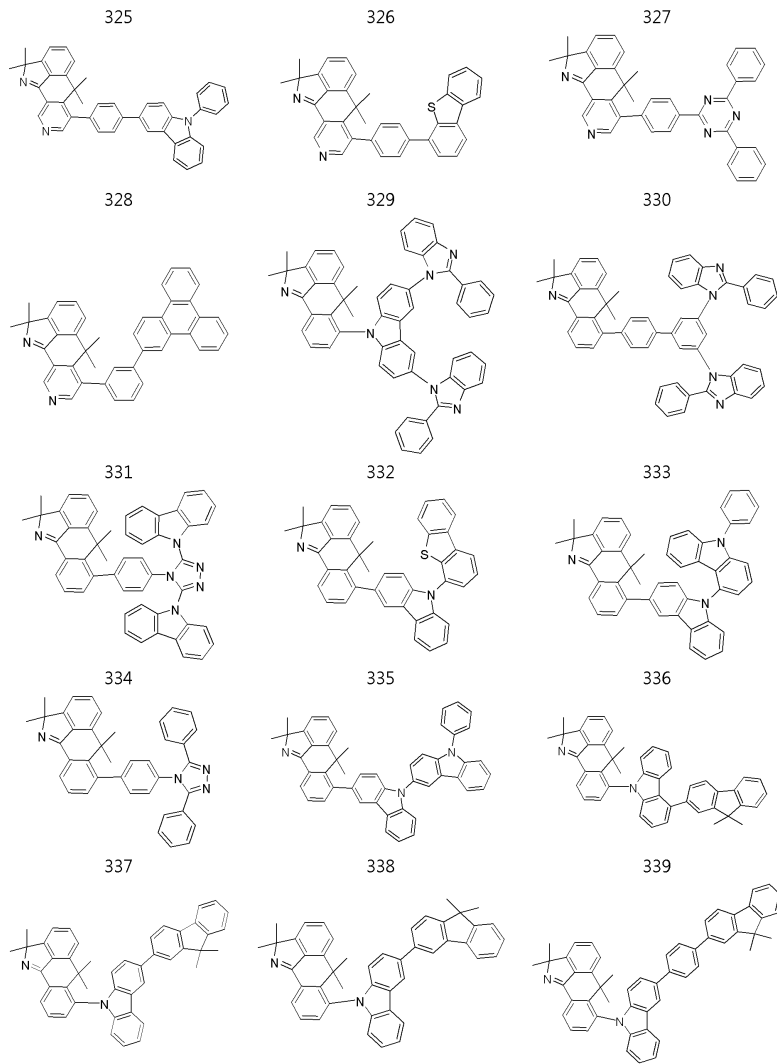
[0078]



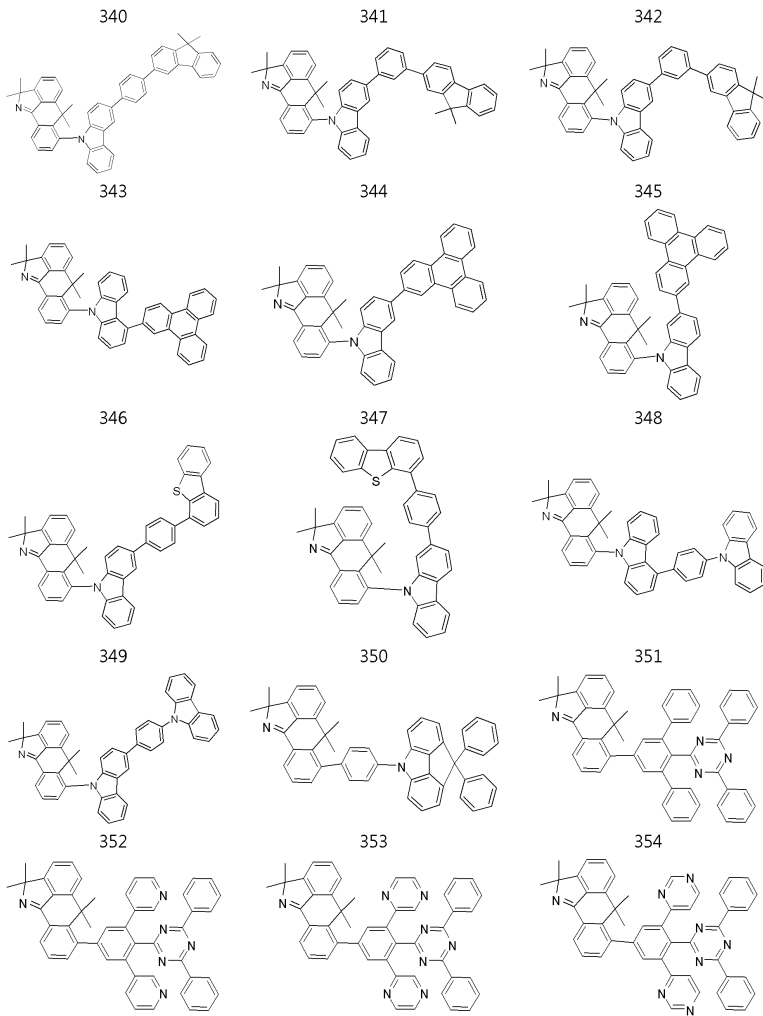
[0079]



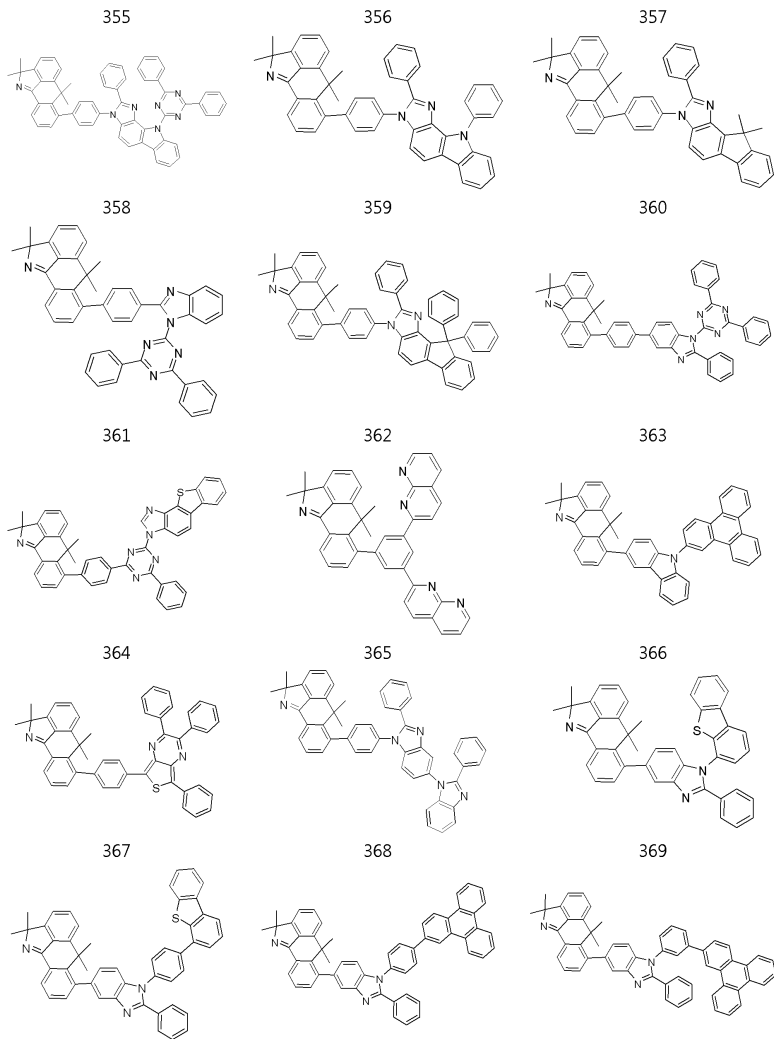
[0080]



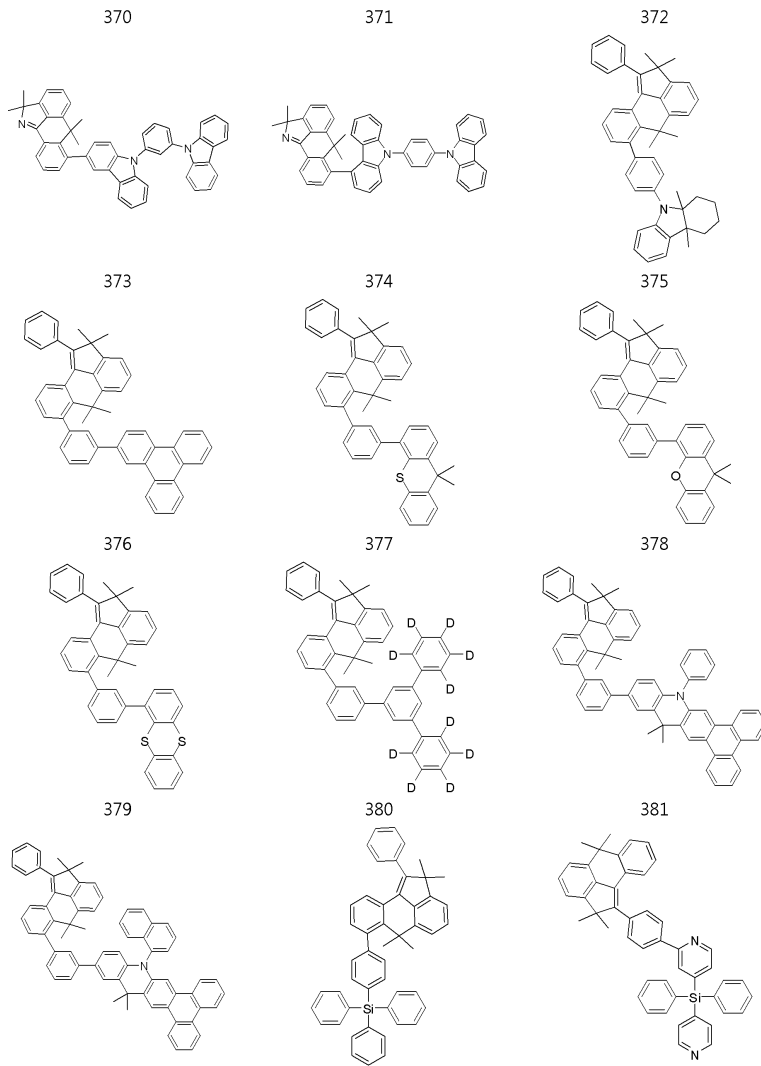
[0081]



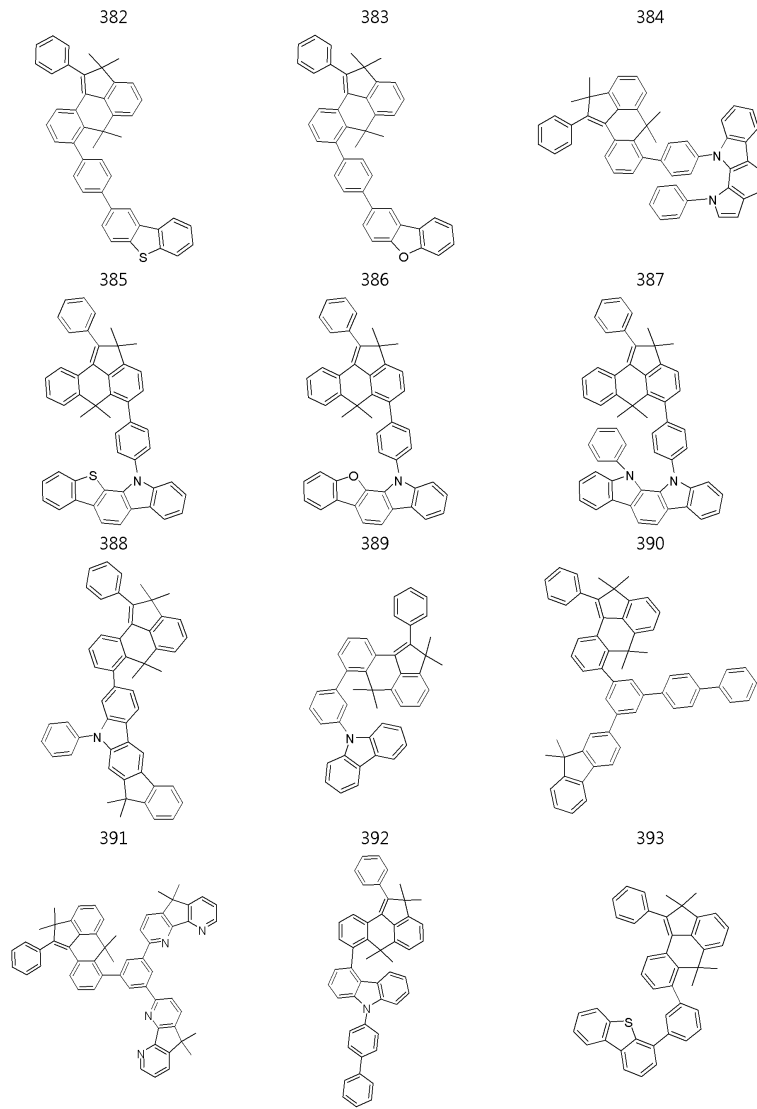
[0082]



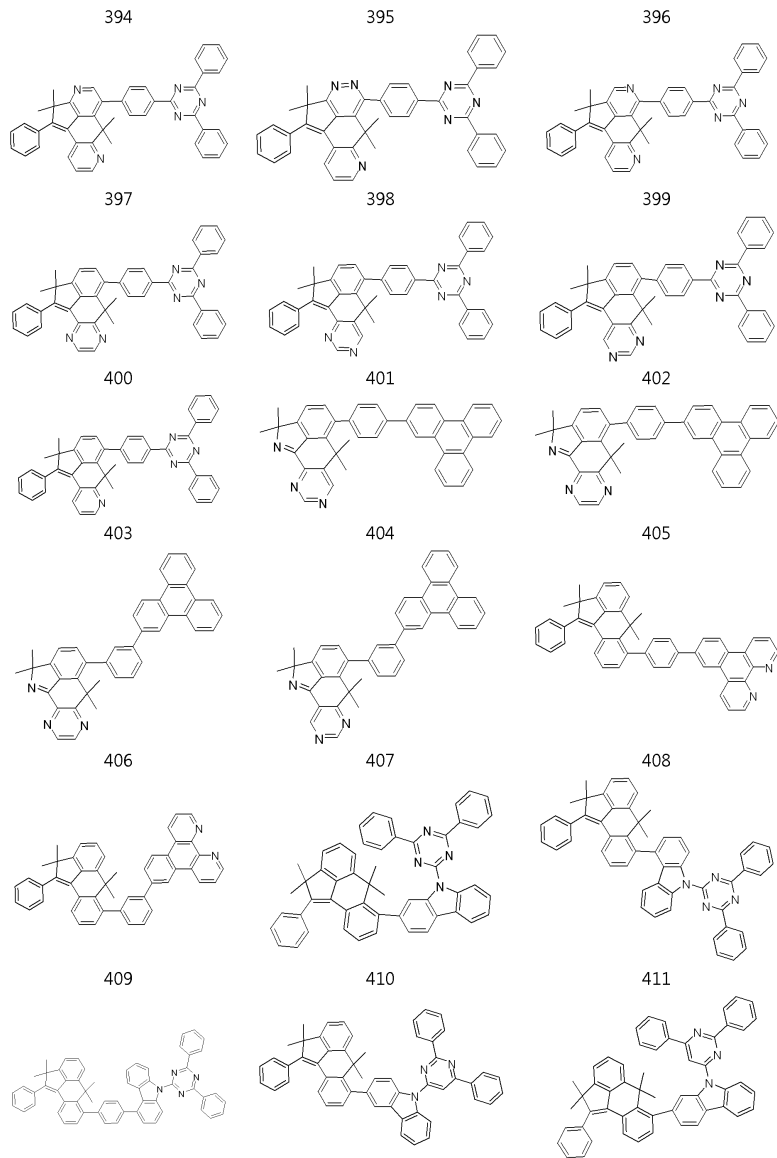
[0083]



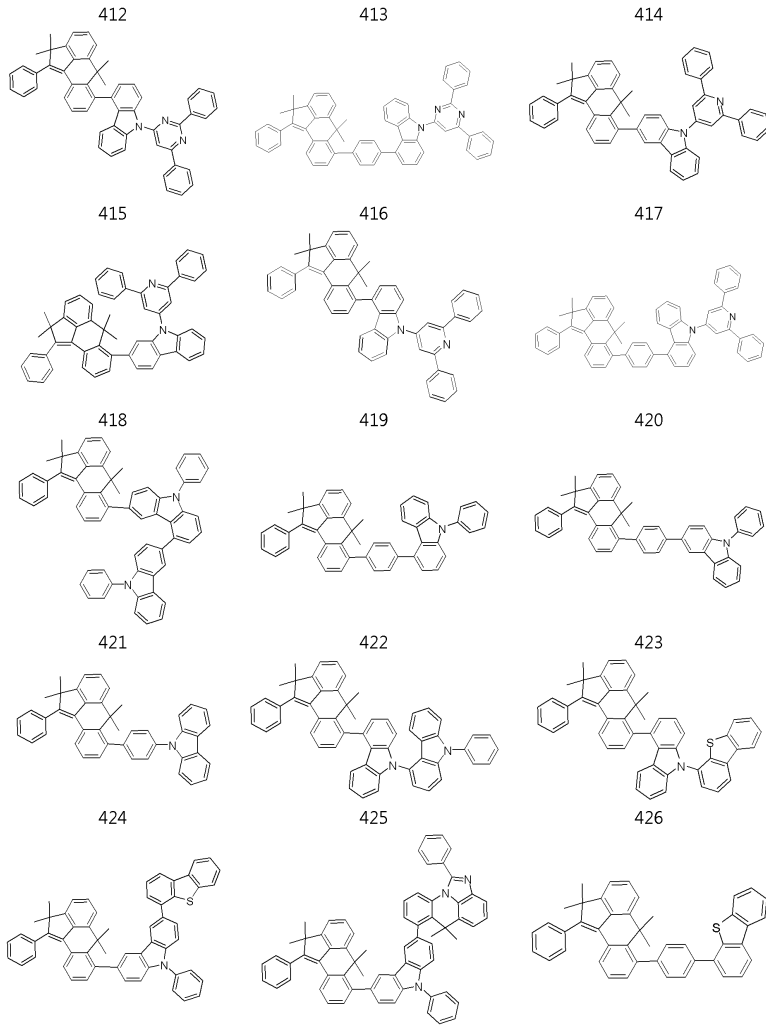
[0084]



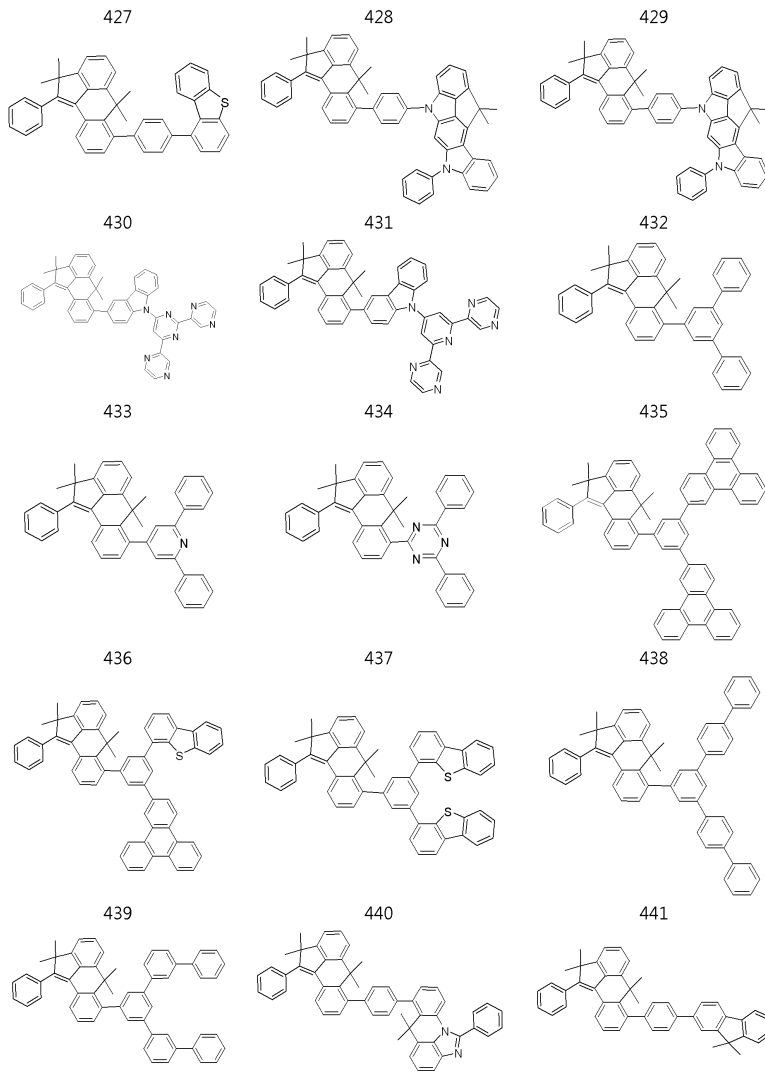
[0085]



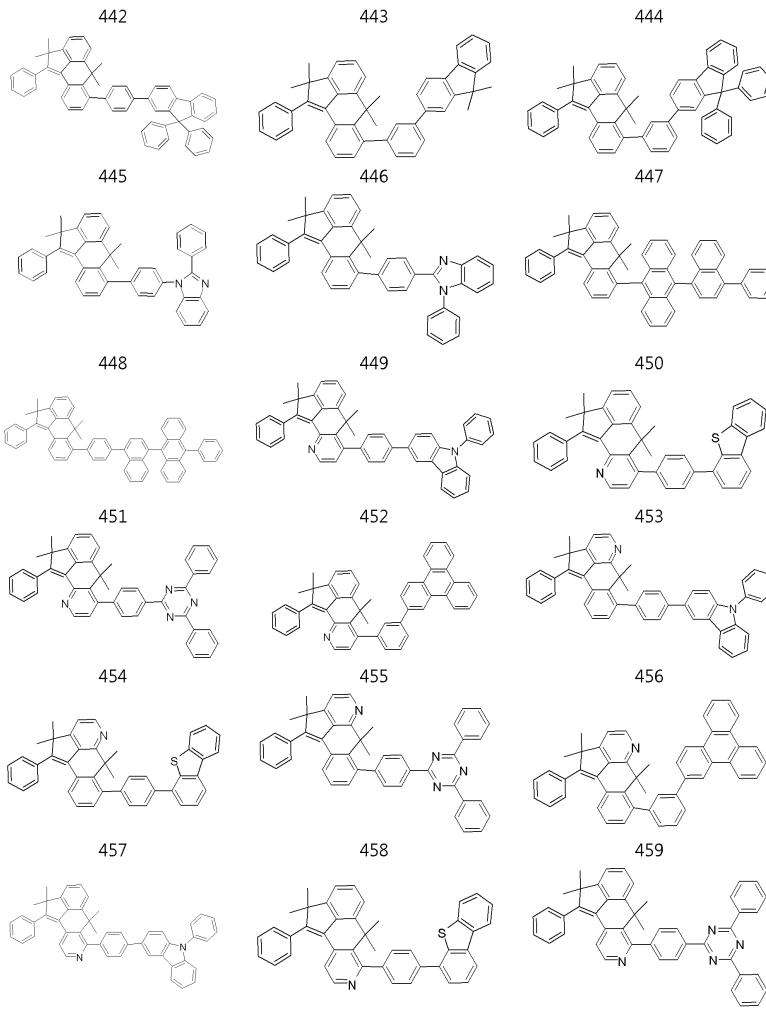
[0086]



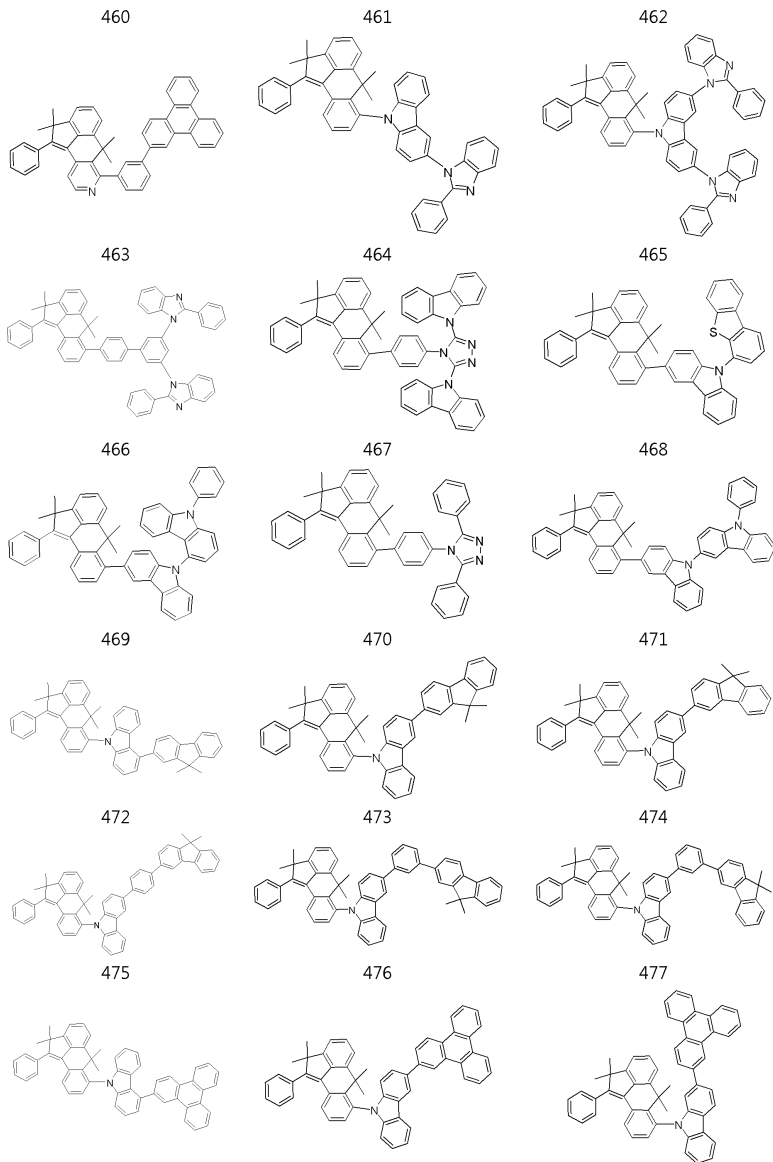
[0087]



[0088]

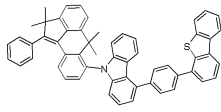


[0089]

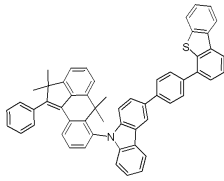


[0090]

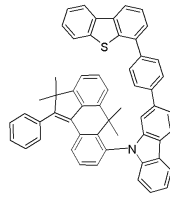
478



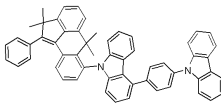
479



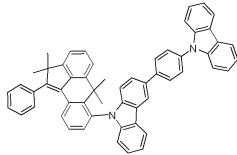
480



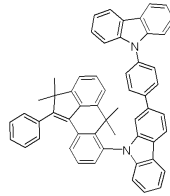
481



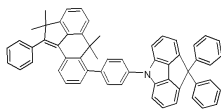
482



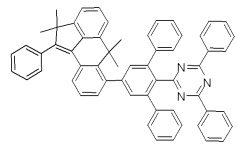
483



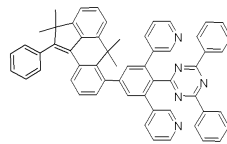
484



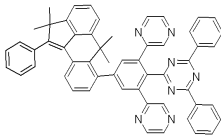
485



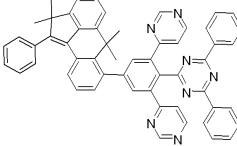
486



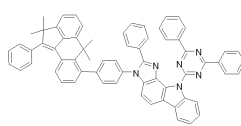
487



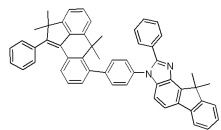
488



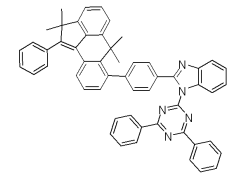
489



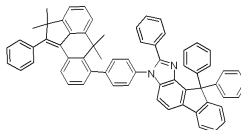
490



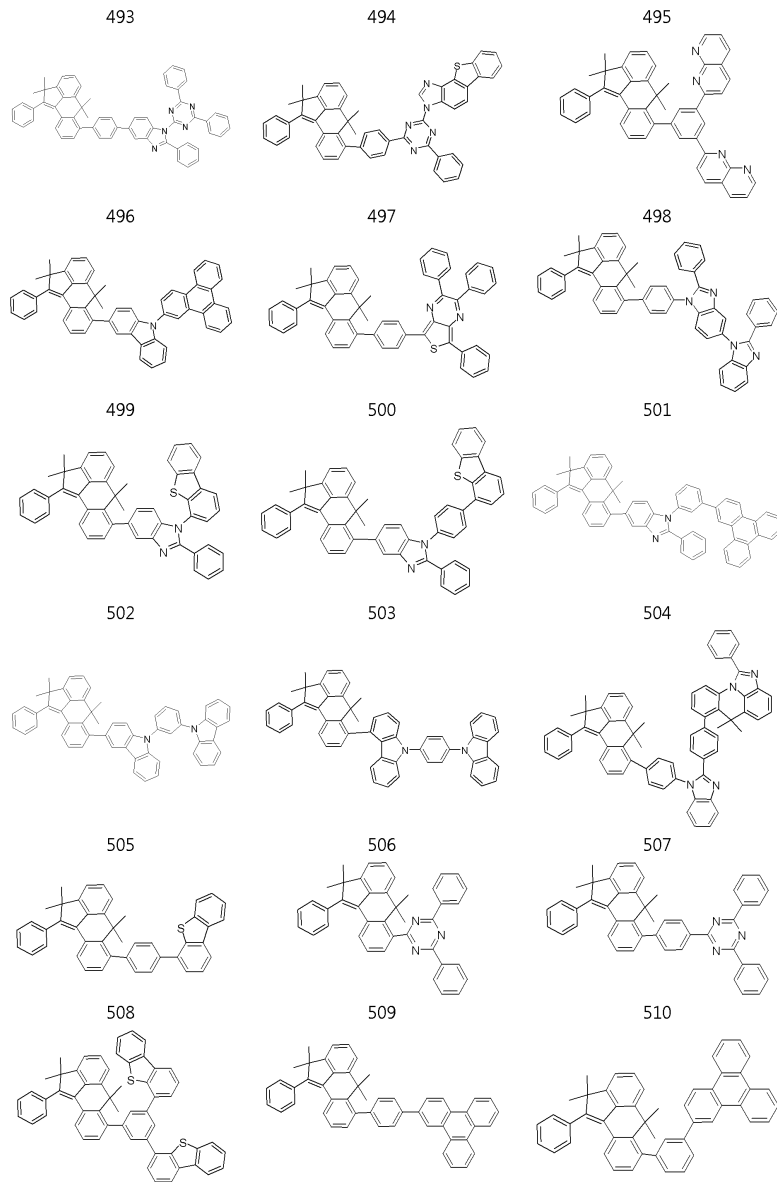
491



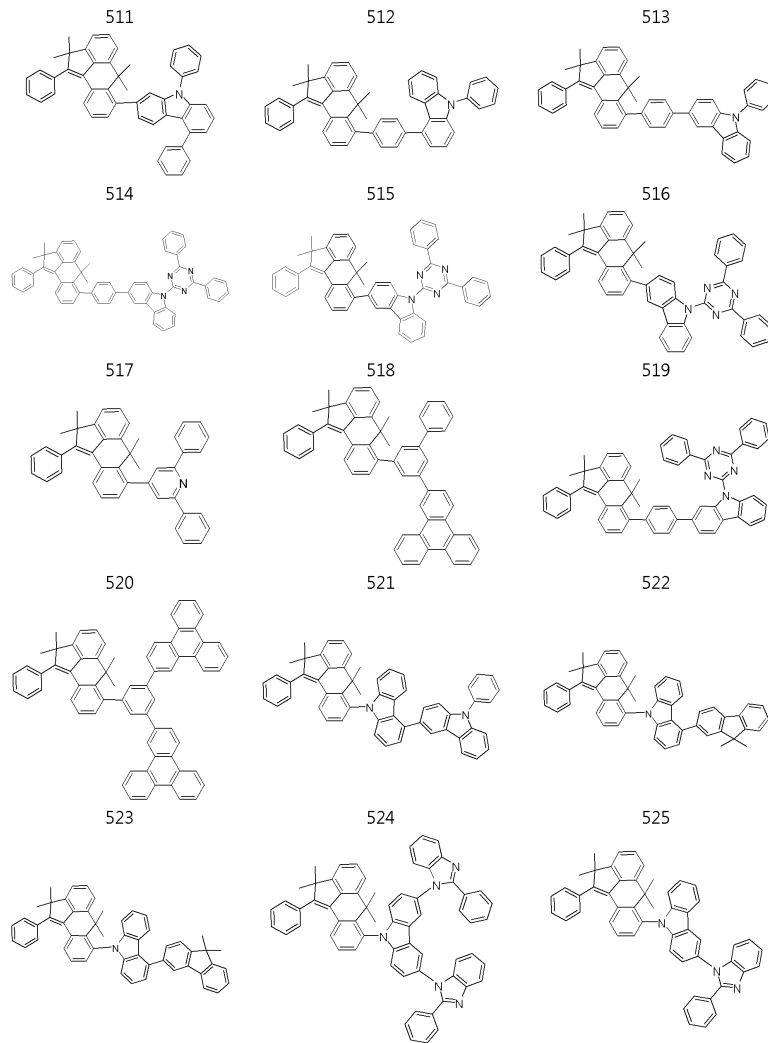
492



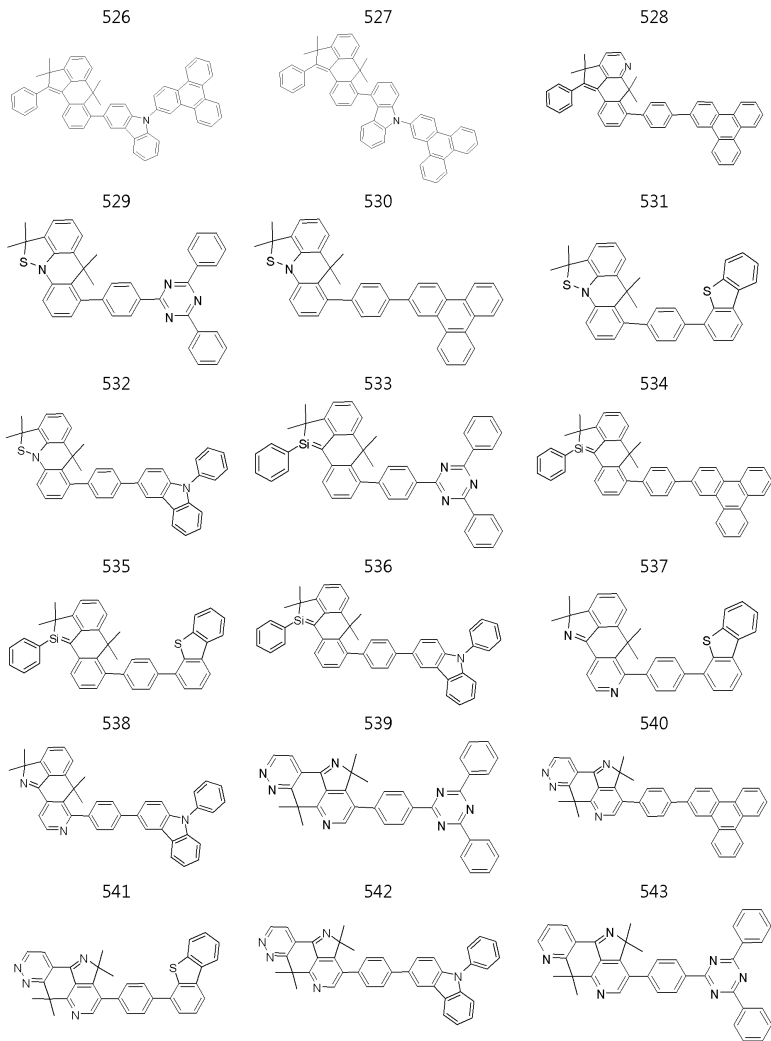
[0091]



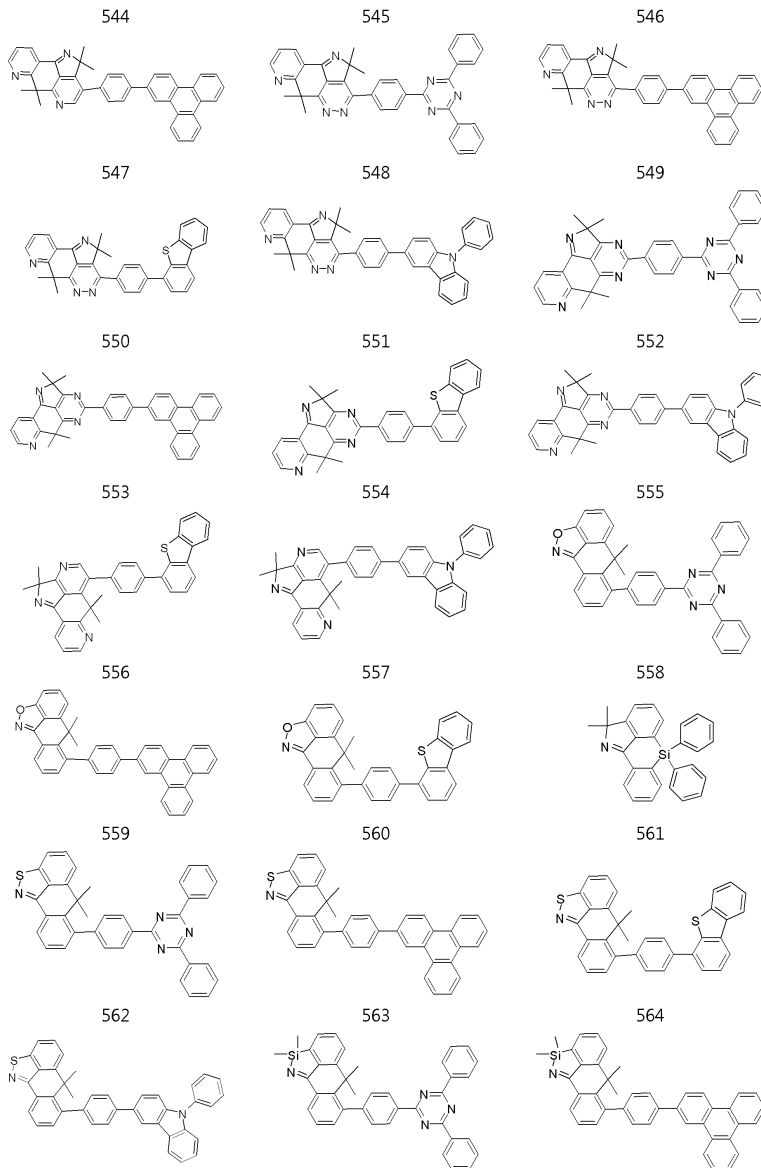
[0092]



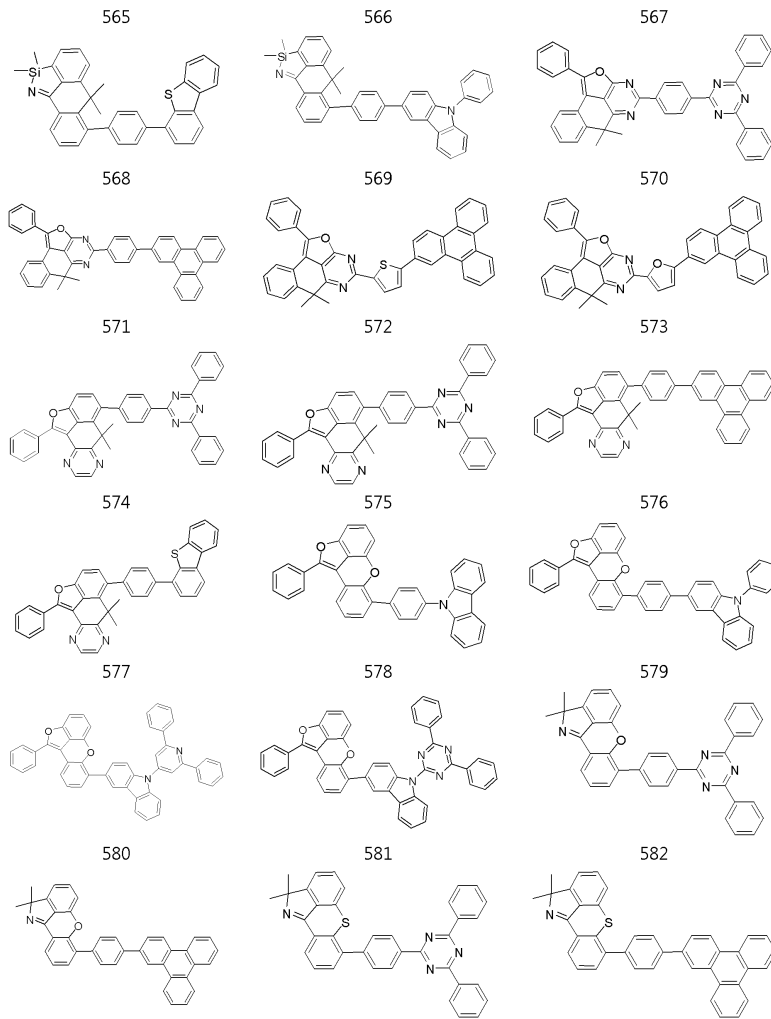
[0093]



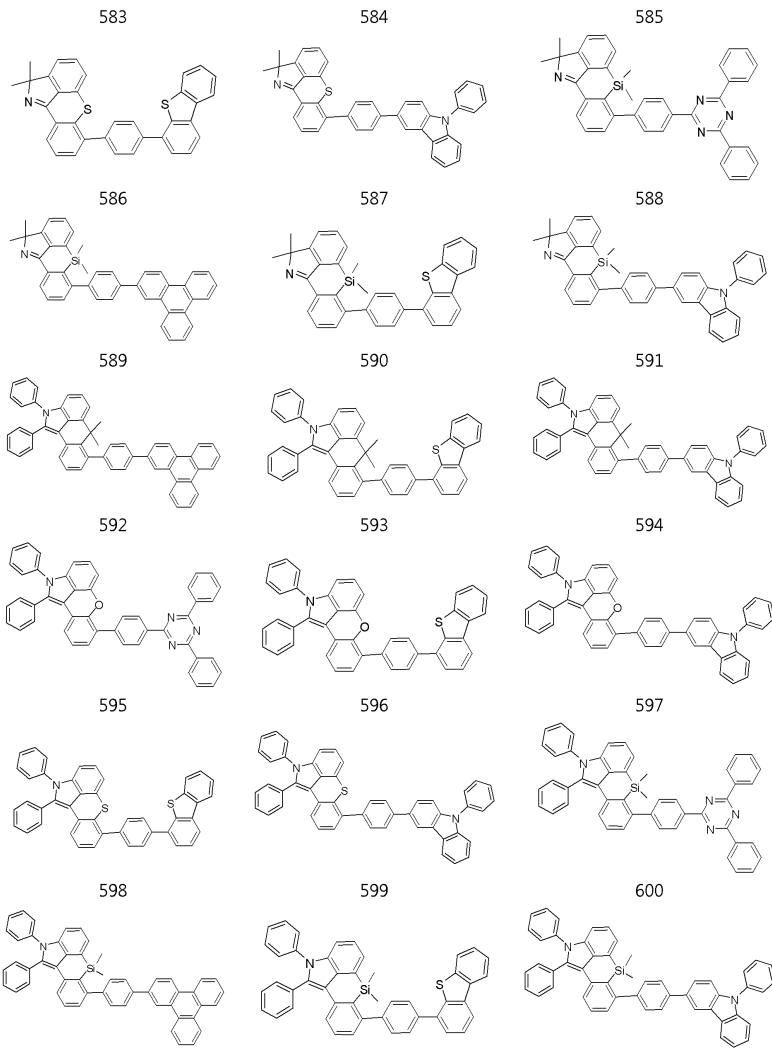
[0094]



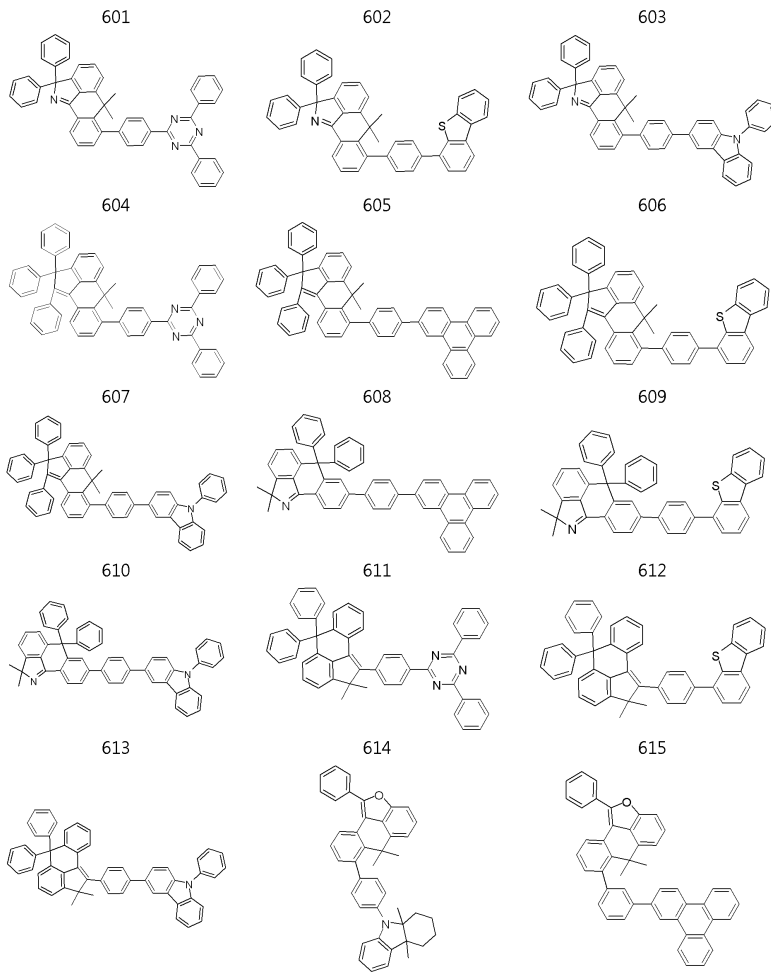
[0095]



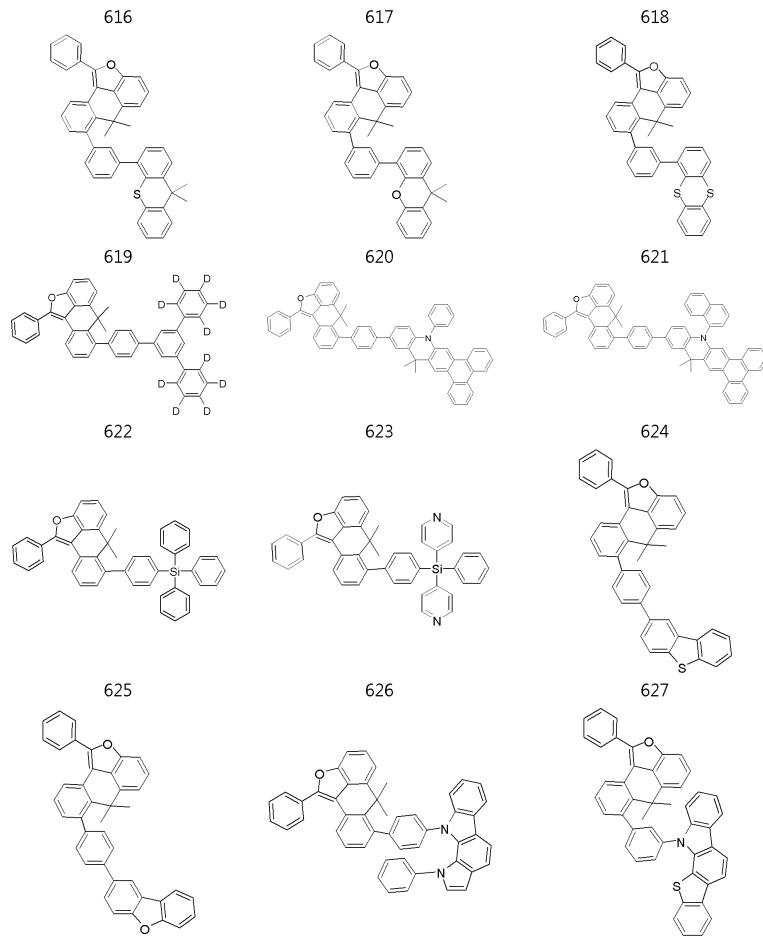
[0096]



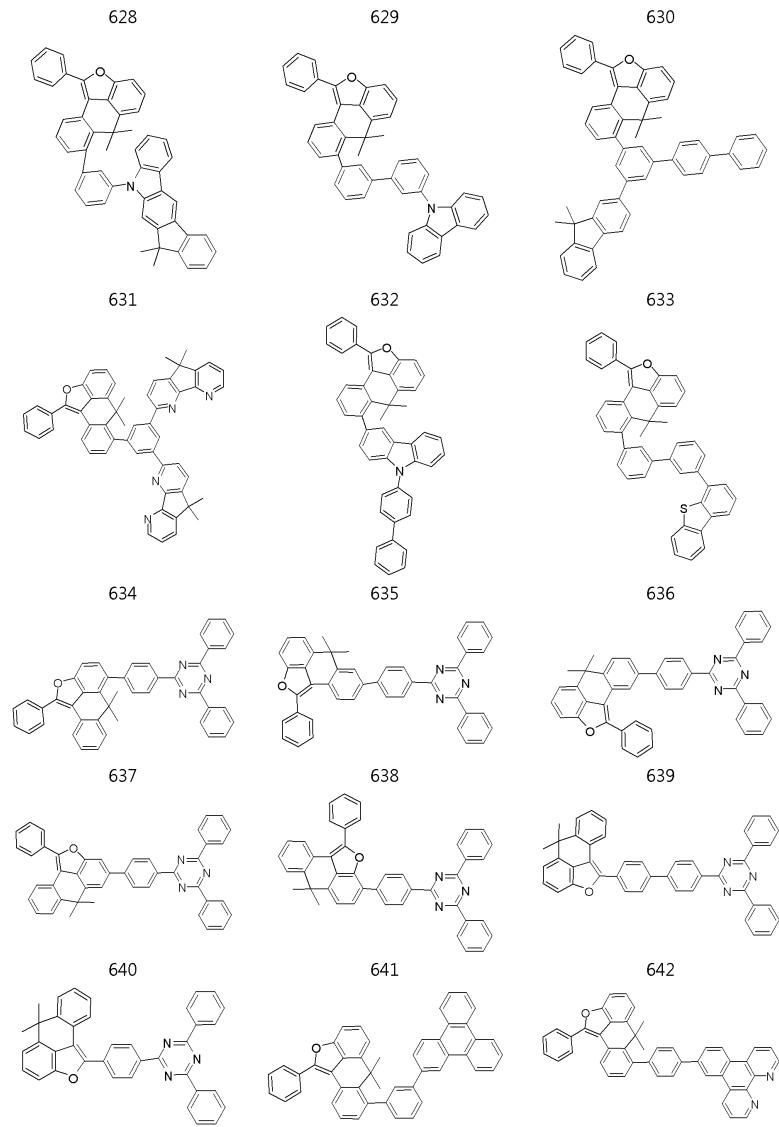
[0097]



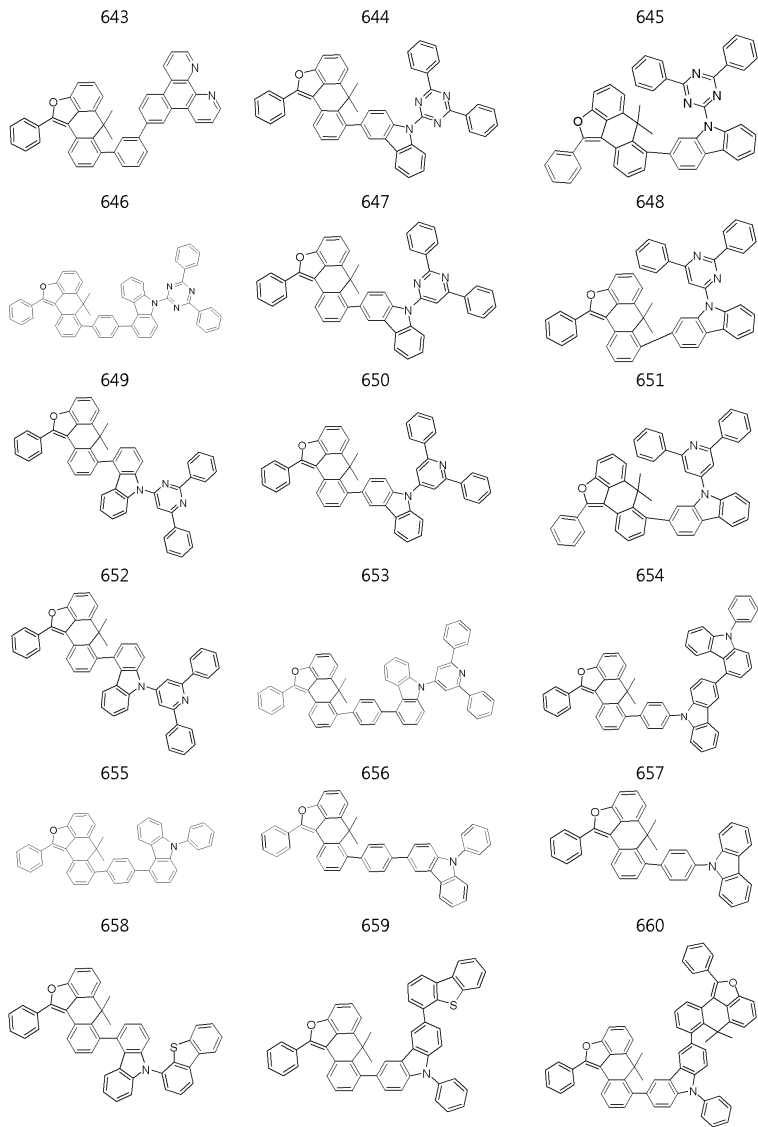
[0098]



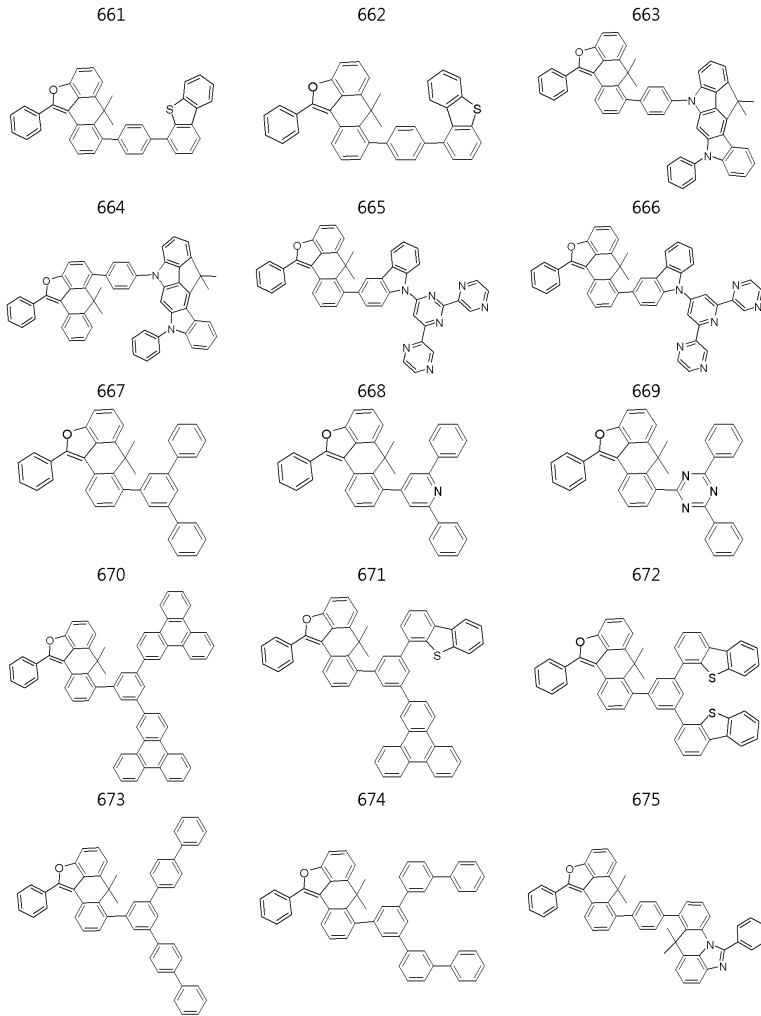
[0099]



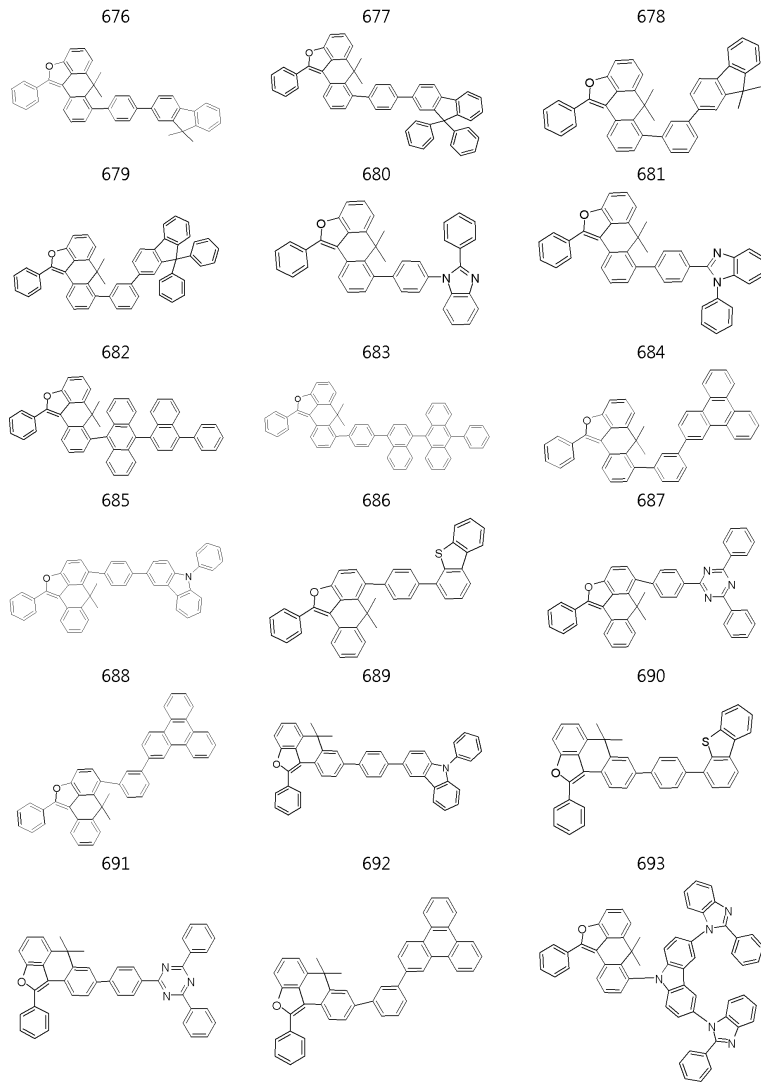
[0100]



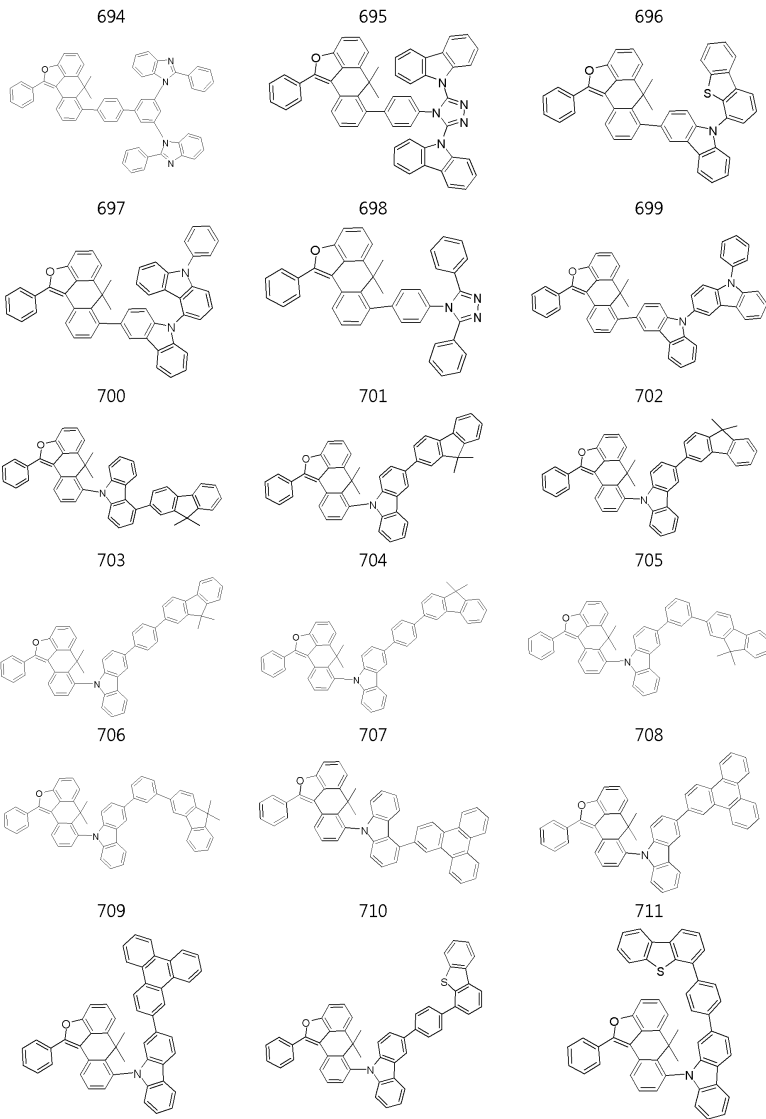
[0101]



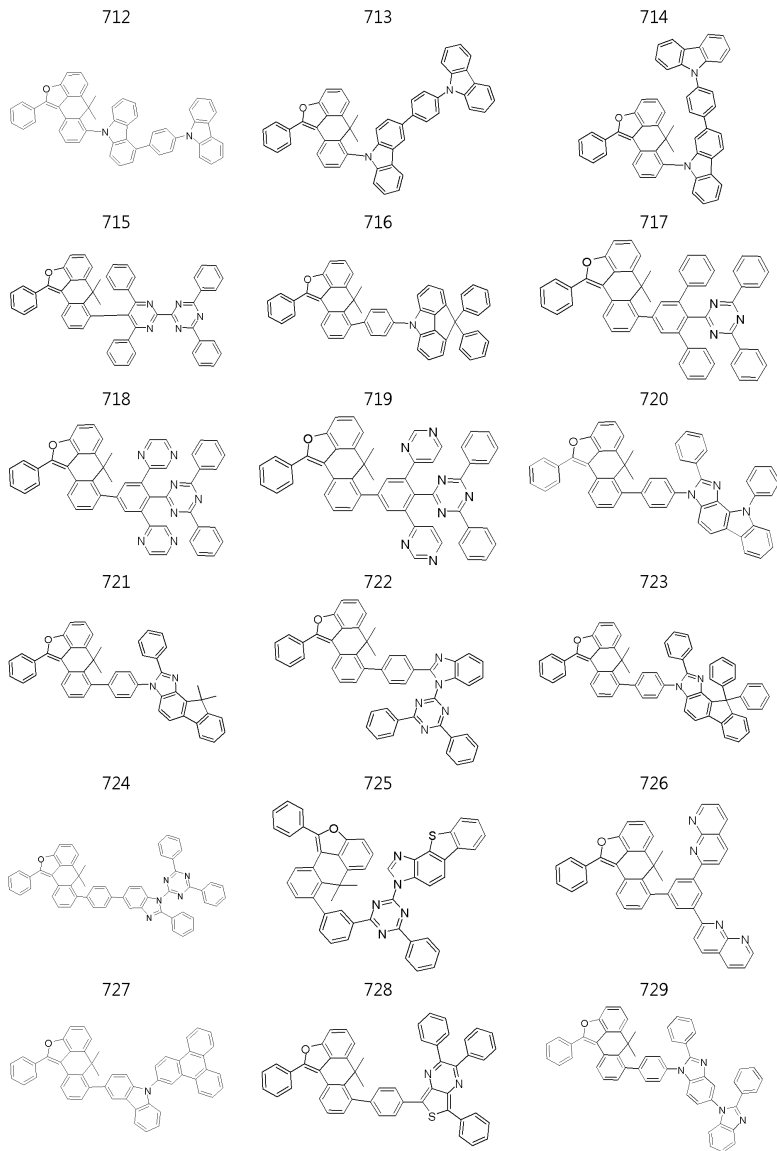
[0102]



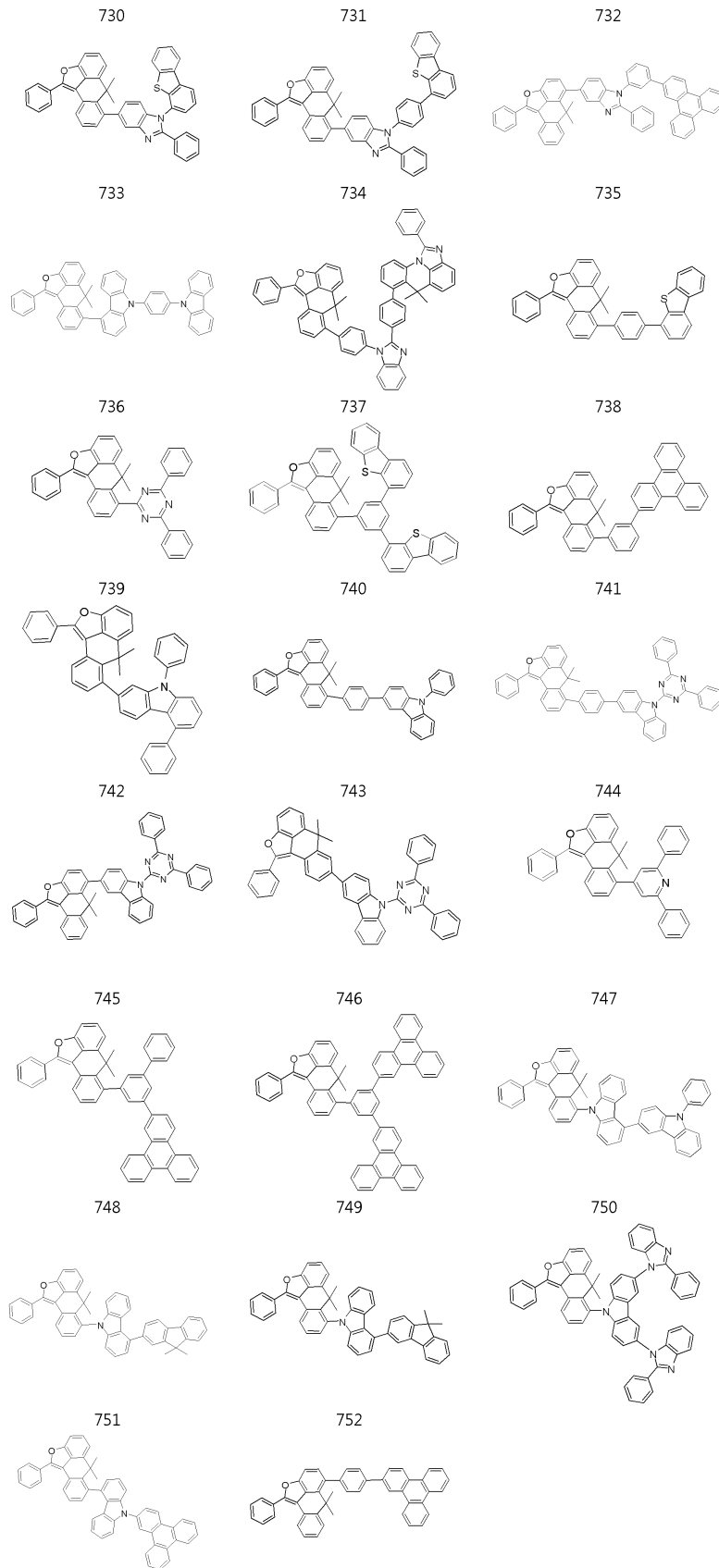
[0103]



[0104]



[0105]



상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화

합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

[0109] 특히, 본 발명에 따른 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기에서 살펴본 바와 같이, 특징적 코어 구조체에 치환기를 도입한 결과 평판 구조도가 우수하고, 높은 삼중항(triplet) 상태를 가짐을 확인하였는 바, 이를 유기전계발광소자의 유기물층에 채용시 효율, 구동전압, 수명 등에서 우수한 특성을 나타내는 유기전계발광소자의 구현이 가능하다.

[0110] 본 발명의 화합물은 유기전계발광소자의 통상의 제조방법에 따라 소자에 적용할 수 있다.

[0111] 본 발명의 하나의 실시예에 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.

[0112] 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.

[0113] 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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

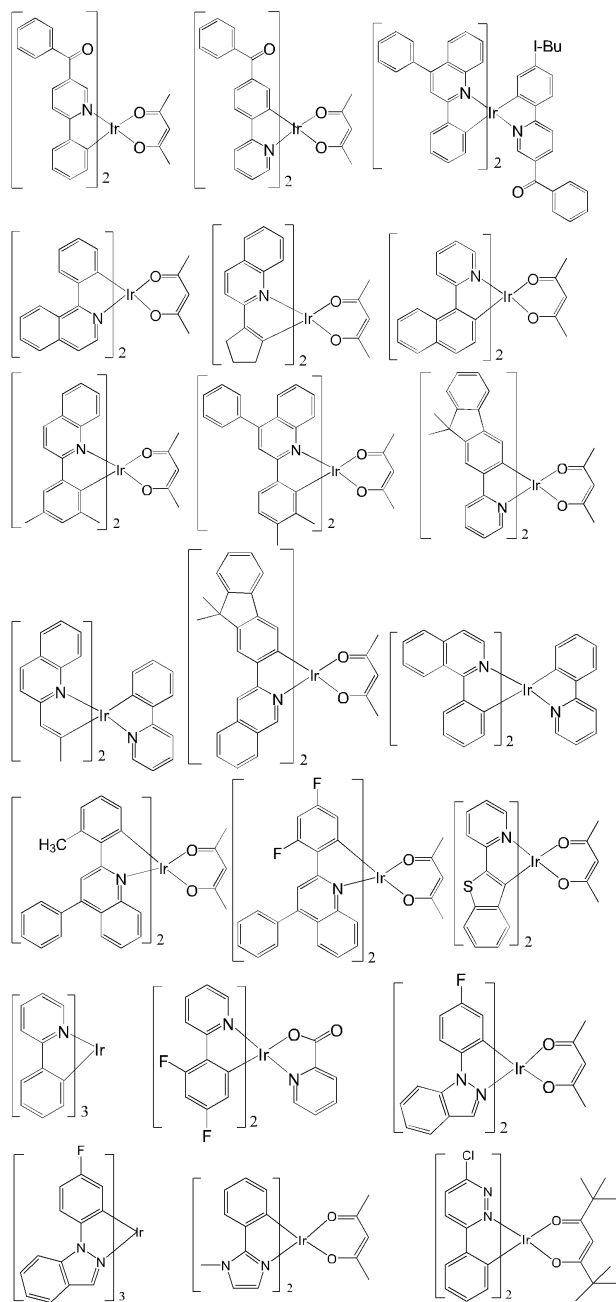
[0114] 특히, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 정공수송 기능층 또는 발광층에 포함될 수 있으며, 발광층 내 호스트 물질로서 포함될 수 있다.

[0115] 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물이 발광층 내 호스트 물질로서 포함되는 경우에, 상기 발광층은 1종 이상의 인광 도펀트를 포함할 수 있으며, 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.

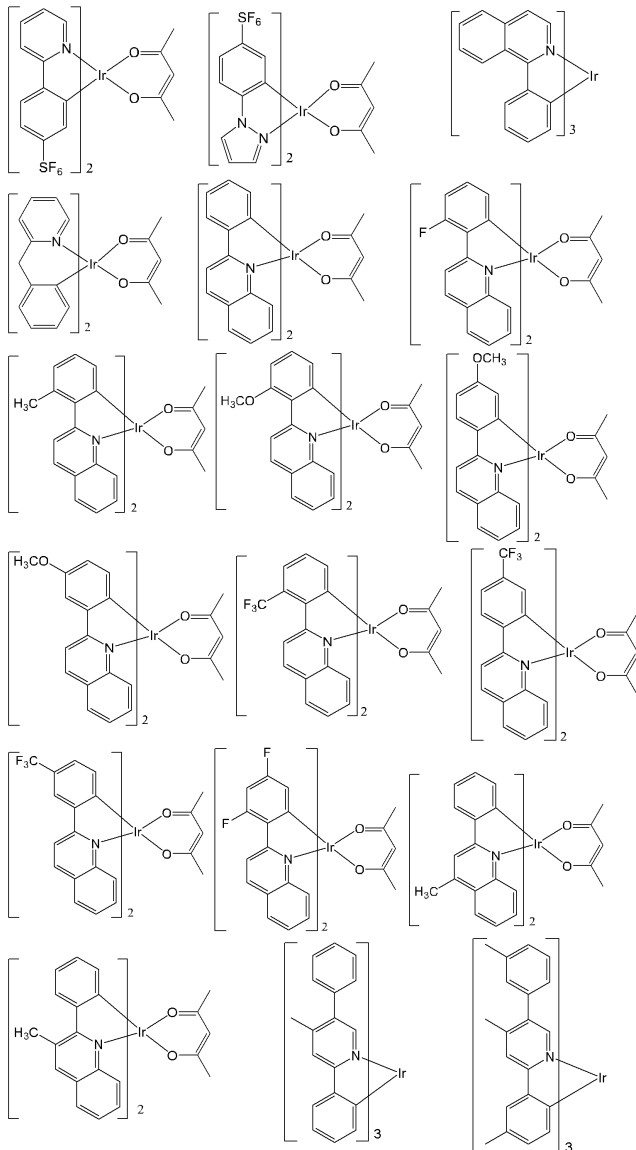
[0116] 본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 발광층에 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 호스트 화합물과 하기의 [구조식 4] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 도펀트 화합물을 1종 이상 더 포함할 수 있다.

[0117]

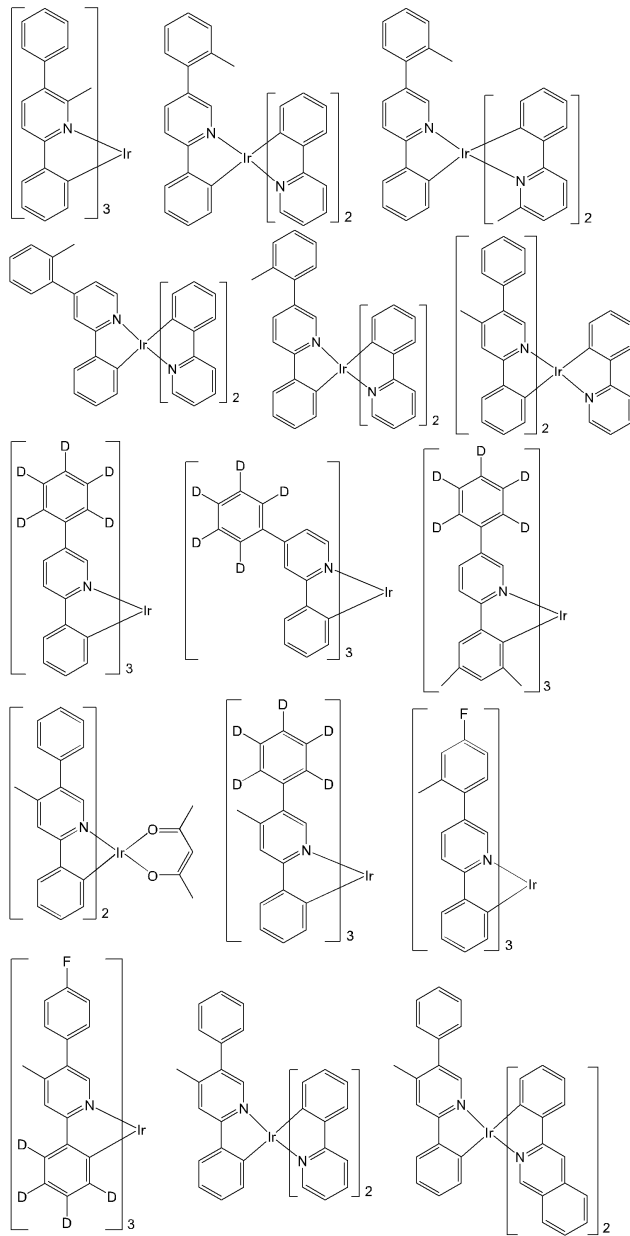
[구조식 4]



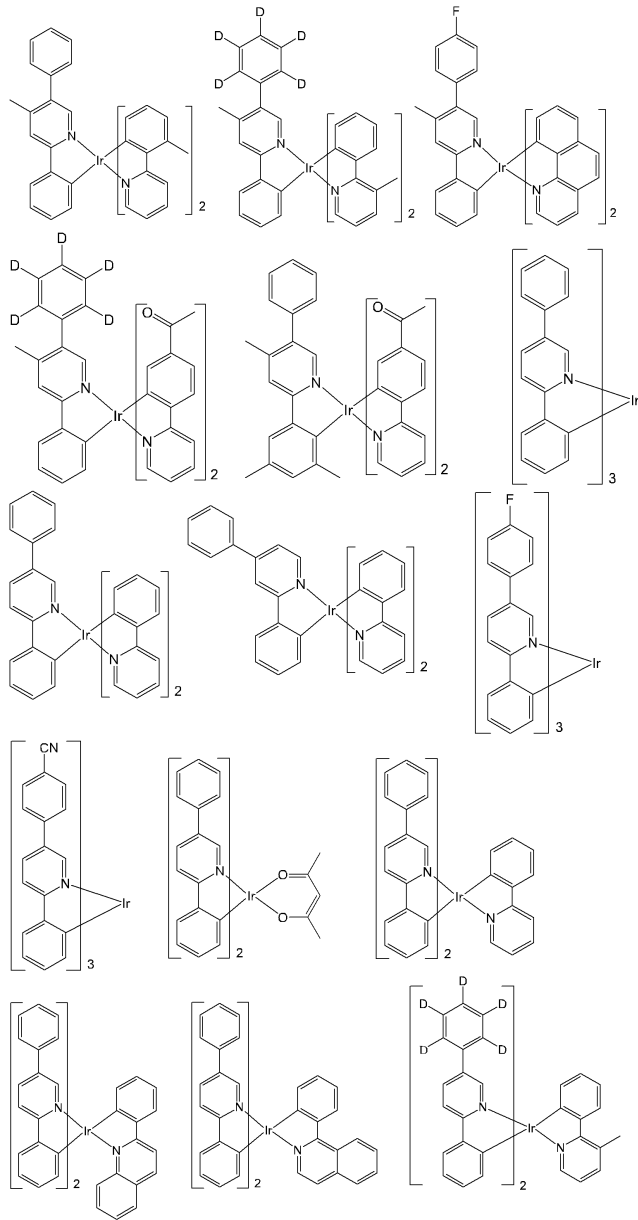
[0118]



[0119]

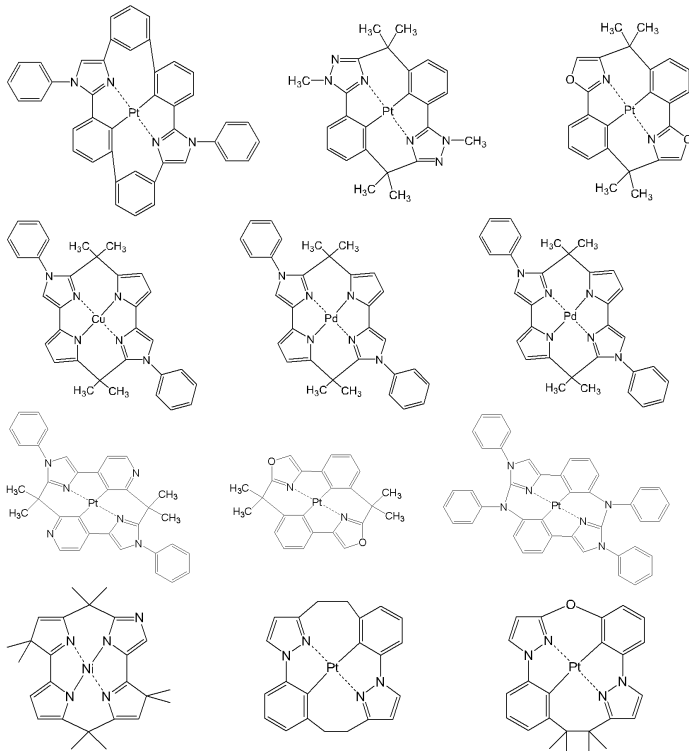


[0120]



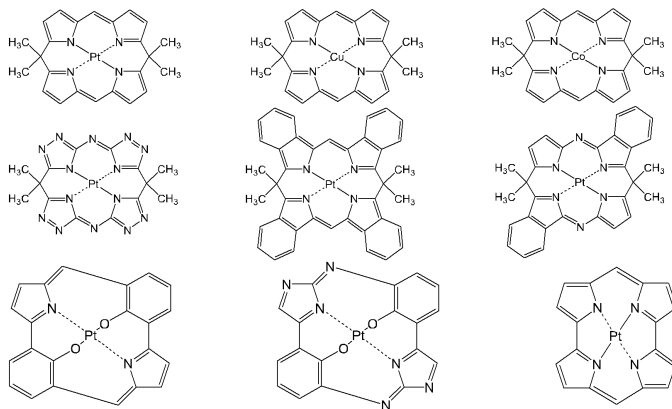
[0121]

[0125] [구조식 6]



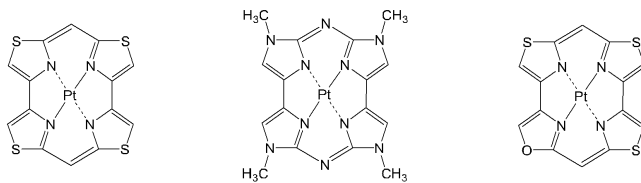
[0126]

[0127] [구조식 7]



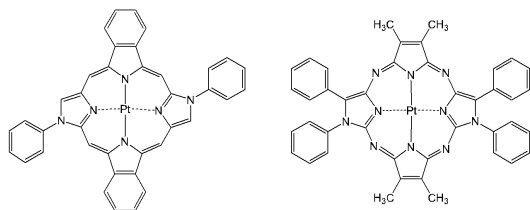
[0128]

[0129] [구조식 8]



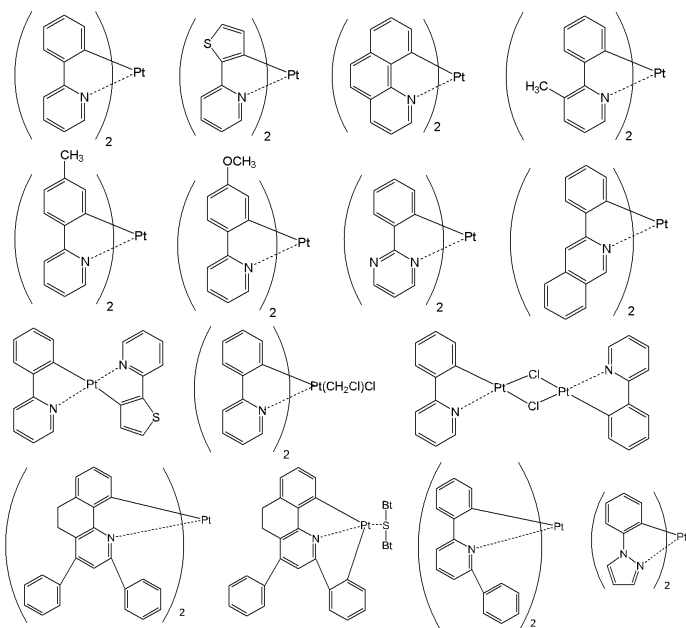
[0130]

[0131] [구조식 8]



[0132]

[0133] [구조식 10]



[0134]

[0135] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]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.

[0136] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.

[0137] 도 1에는 기관(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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0138] 도 2에는 기관(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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0139] 도 3에는 기관(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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0140] 도 4에는 기관(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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

- [0141] 도 5에는 기관(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] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0142] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0143] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0144] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0145] 도 3에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0146] 도 4에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0147] 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0148] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관 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.
- [0149] 이와 같은 방법 외에도, 기관 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.
- [0150] 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.
- [0151] 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 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0152] 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.
- [0153] 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.

[0154] 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, 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자, 스피로(spiro) 화합물, 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0155] 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.

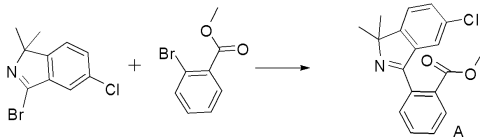
[0156] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0157] 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.

[0158] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 그러나, 하기의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

[0159] 실시예 1 : 화합물 1 합성

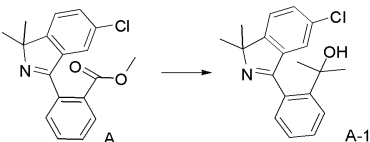
[0160] (1) 제조예 1 : 중간체 A의 합성



[0161]

[0162] 3-bromo-5-chloro-1,1-dimethyl-1H-isindole(2.6 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromobenzoate(2.6 g, 0.012 mol)을 넣고 60 mL ether에 녹이고, $-78^{\circ}C$ 로 냉각시킨 후 2.5 M BuLi(0.01 mL, 0.0005 mol)을 dropping시킨 후, 1시간 동안 교반하였다. 이를 서서히 실온으로 올려 4시간 동안 더 교반하였다. 반응완료 후 물 100 mL로 추출하여 유기층을 감압 건조하였다. 이를 EtOH : Acetone으로 재결정하여 중간체 A(1.3 g, 41%)를 수득하였다($m/z=313$).

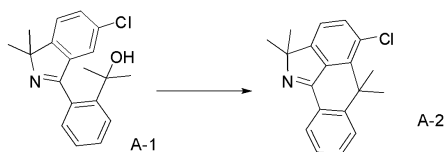
[0163] (2) 제조예 2 : 중간체 A-1의 합성



[0164]

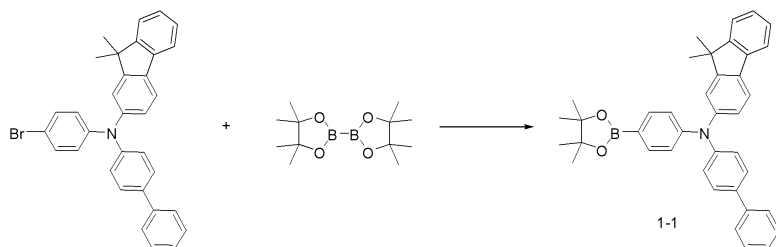
[0165] 중간체 A(3.1 g, 0.010 mol)를 30 mL ether에 녹이고, $-78^{\circ}C$ 로 냉각시킨 후 2.5 M BuLi(0.01 mL, 0.0005 mol)을 dropping시킨 후, 1시간 동안 교반하였다. 이를 서서히 실온으로 올려 4시간 동안 더 교반하였다. 반응 완료 후 물 100 mL로 추출하여 유기층을 감압 건조하였다. 이를 EtOH : Acetone 으로 재결정하여 중간체 A-1(2.0 g, 63%)을 수득하였다($m/z=313$).

(3) 제조예 3 : 중간체 A-2의 합성



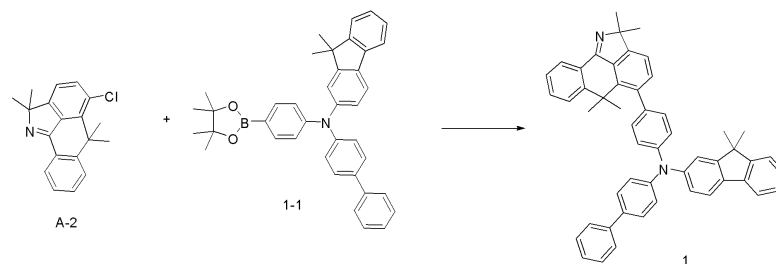
중간체 A-1(3.1 g, 0.010 mol)를 50 mL의 농축된 H_3PO_4 에 녹인 후 5시간 동안 교반시켰다. 이를 물 100 mL와 Ethyl Acetate 100 mL로 추출하고, 유기층을 감압 건조하였다. 이를 EtOH 100 mL로 재결정하여 중간체 A-2(2.1 g, 72%)를 수득하였다($m/z=295$).

(4) 제조예 4 : 중간체 1-1의 합성



N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(5.2 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(2.5 g, 0.012 mol), $PdCl_2(dppf)$ (0.4 g, 0.0005 mol), potassium-acetate(2.7 g, 0.020 mol)에 1,4-dioxane 100 mL를 넣고 95 °C에서 24시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H_2O : MC에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane : MC)하여 중간체 1-1을 4.0 g(수율 71%) 수득하였다($m/z=563$).

(5) 제조예 5 : 화합물 1의 합성



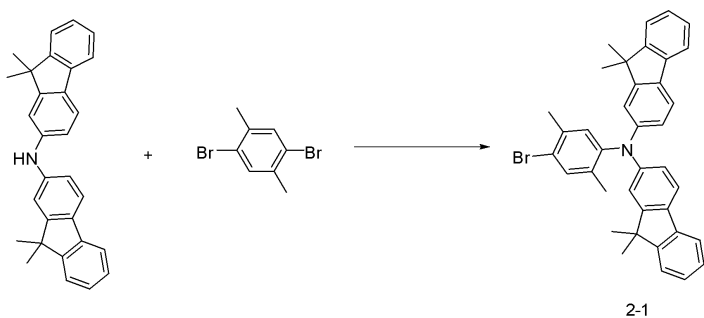
중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 1-1(6.8 g, 0.012 mol), $Pd(pph_3)_4$ (0.6 g, 0.0005 mol), potassium carbonate(2.8 g, 0.020 mol)에 THF 100 mL를 넣고 65 °C에서 18시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H_2O : MC에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane : MC)하여 <화합물 1>을 4.9 g(수율 70%) 수득하였다.

1H -NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(7.990/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.62/d, 7.61/m, 7.55/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.52/d, 1.61/s) 3H(7.51/m) 4H(6.69/d, 1.72/s) 5H(7.54/d)

LC/MS: $m/z=697$ [$(M+1)^+$]

실시예 2 : 화합물 2 합성

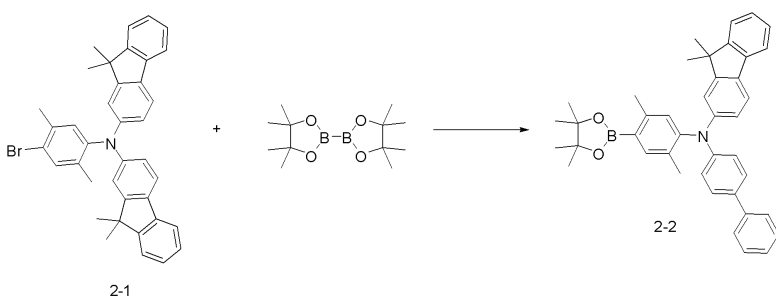
[0178] (1) 제조예 1 : 중간체 2-1의 합성



[0179]

[0180] bis(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)amine(4.0 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromo-2,5-dimethylbenzene(2.6 g, 0.010 mol), Pd(dba)₂(0.5 g, 0.0005 mol), sodium-tert-butoxide(1.9 g, 0.020 mol)에 Tol 100 mL를 넣고 95 ℃에서 4시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H₂O : MC에 충분히 후 컬럼정제(n-Hexane : MC)하여 중간체 2-1을 4.5 g(수율 77%) 수득하였다.(m/z=585)

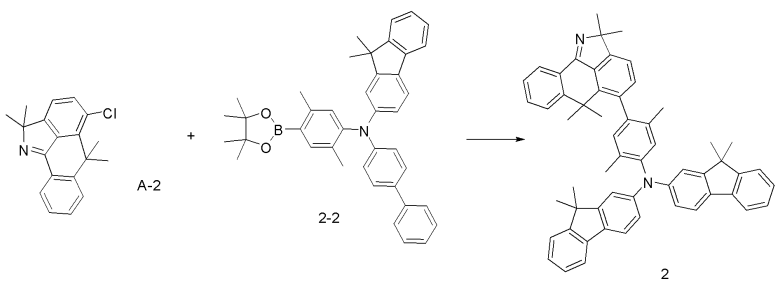
[0181] (2) 제조예 2 : 중간체 2-2의 합성



[0182]

[0183] 중간체 2-1(5.9 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 4.3 g(수율 72%)을 얻었다.(m/z=591)

[0184] (3) 제조예 3 : 화합물 2의 합성



[0185]

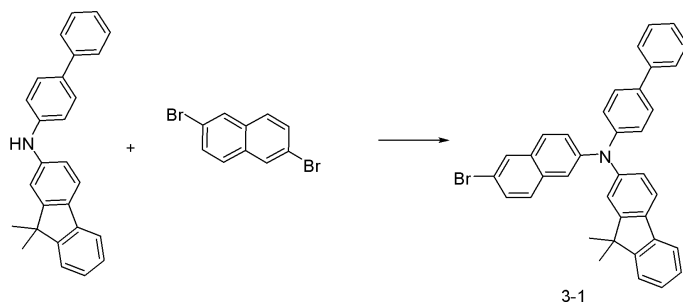
[0186] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 2-2(7.1 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 2> 5.5 g(수율 72%)을 얻었다.

[0187] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.90/d, 7.69/d, 7.61/m, 7.54/d, 7.51/m, 7.42/d, 7.23/d, 6.49/s, 2.59/s, 2.12/s) 2H(7.87/d, 7.62/d, 7.55/d, 7.38/m, 7.28/m, 6.75/d, 6.58/d, 1.61/s) 6H(1.72/s)

[0188] LC/MS: m/z=766[(M+1)⁺]

[0189] 실시예 3 : 화합물 3 합성

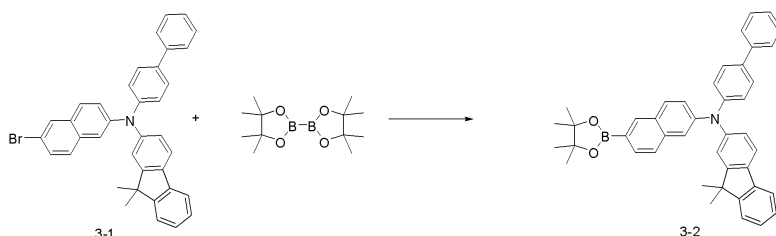
[0190] (1) 제조예 1 : 중간체 3-1 합성



[0191]

[0192] N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(3.6 g, 0.010 mol)에 2,6-dibromonaphthalene(2.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-1> 4.4 g(수율 77%)을 얻었다.(m/z=566)

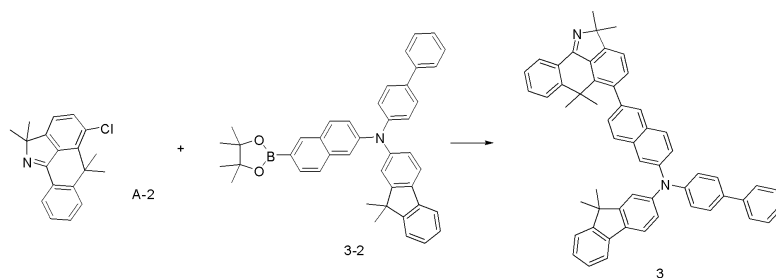
[0193] (2) 제조예 2 : 중간체 3-2 합성



[0194]

[0195] 중간체 3-1(5.7 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-2> 4.4 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=613)

[0196] (3) 제조예 3 : 화합물 3 합성



[0197]

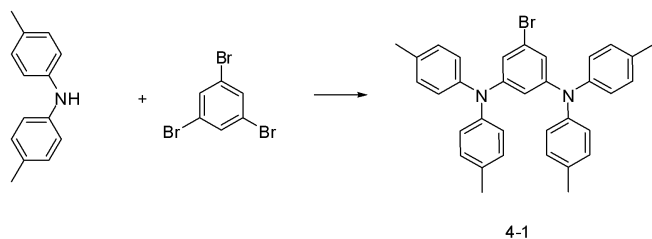
[0198] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 3-2(7.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 3> 5.4 g(수율 72%)을 얻었다.

[0199] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.90/d, 7.87/d, 7.84/d, 7.74/s, 7.64/d, 7.63/d, 7.61/m, 7.55/d, 7.54/d, 7.51/m, 7.49/d, 7.46/s, 7.38/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 6.69/d, 1.61/s) 4H(7.69/d, 1.72/s)

[0200] LC/MS: m/z= 747[(M+1)⁺]

[0201] 실시예 4 : 화합물 4 합성

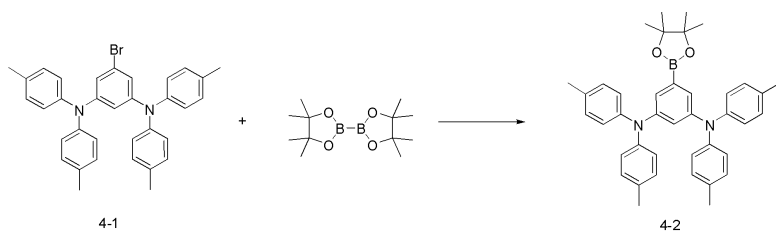
[0202] (1) 제조예 1 : 중간체 4-1의 합성



[0203]

[0204] dip-tolylamine(2.0 g, 0.010 mol)에 1,3,5-tribromobenzene(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-1> 4.2 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=547)

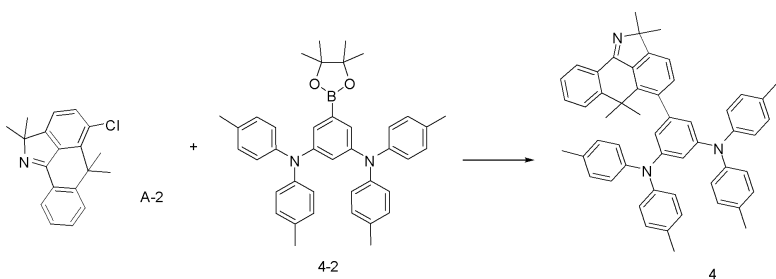
[0205] (2) 제조예 2 : 중간체 4-2의 합성



[0206]

[0207] 중간체 4-1(5.5 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-2> 4.3 g(수율 72%)을 얻었다.(m/z=595)

[0208] (3) 제조예 3 : 화합물 4의 합성



[0209]

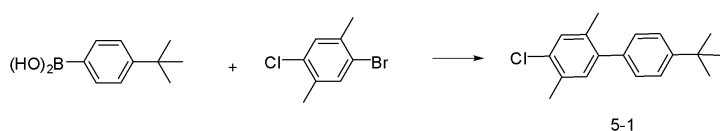
[0210] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(7.1 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 4> 5.2 g(수율 71%)을 얻었다.

[0211] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.90/d, 7.69/d, 7.61/m, 7.54/d, 7.51/m, 7.23/d, 5.73/s) 2H(6.25/s, 1.72/s, 1.61/s) 4H(2.34/s) 8H(6.98/d, 6.51/d)

[0212] LC/MS: m/z=728 [(M+1)⁺]

[0213] 실시예 5 : 화합물 5 합성

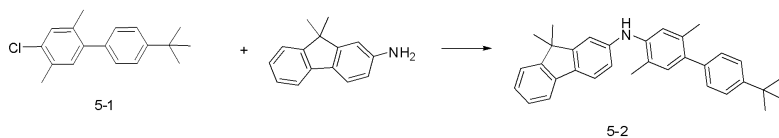
[0214] (1) 제조예 1 : 중간체 5-1의 합성



[0215]

[0216] 4-tert-butylphenylboronic acid(1.8 g, 0.010 mol)에 1-bromo-4-chloro-2,5-dimethylbenzene(1.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-1> 1.6 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=272)

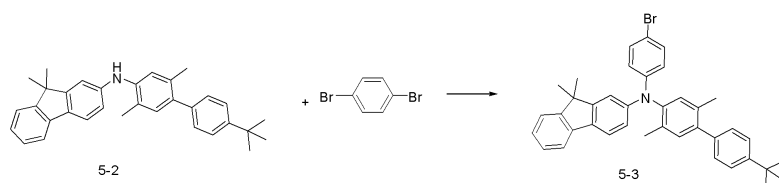
[0217] (2) 제조예 2 : 중간체 5-2의 합성



[0218]

[0219] 중간체 5-1(2.7 g, 0.010 mol)에 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(2.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-2> 3.4 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=445)

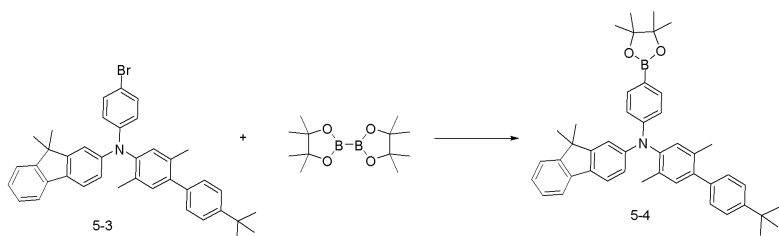
[0220] (3) 제조예 3 : 중간체 5-3의 합성



[0221]

[0222] 중간체 5-2(4.4 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-3> 4.6 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=600)

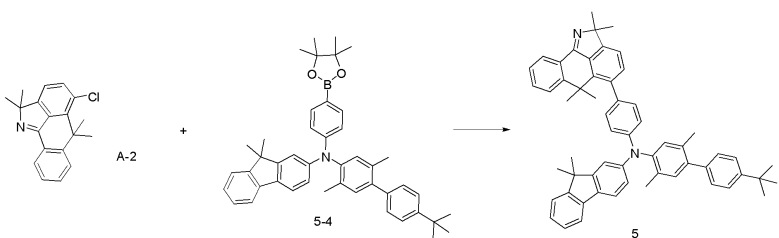
[0223] (4) 제조예 4 : 중간체 5-4의 합성



[0224]

[0225] 중간체 5-3(6.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 4.7 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=647)

[0226] (5) 제조예 5 : 화합물 5의 합성



[0227]

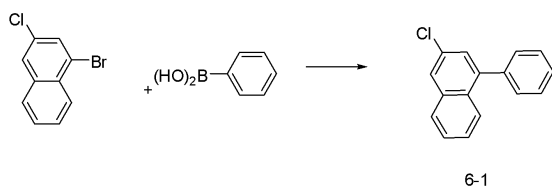
[0228] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(7.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 5> 5.5 g (수율 70%)을 얻었다.

[0229] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.90/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.62/d, 7.61/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.42/s, 7.38/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.75/s, 6.58/d, 6.49/s, 2.59/s, 2.12/s)

[0230] LC/MS: $m/z=782$ [$(M+1)^+$]

[0231] 실시예 6 : 화합물 6 합성

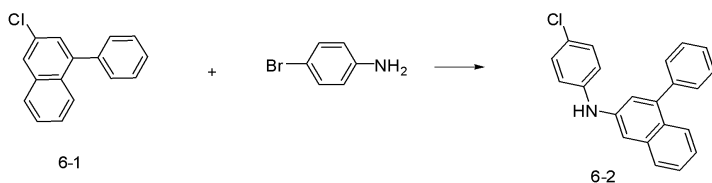
[0232] (1) 제조예 1 : 중간체 6-1의 합성



[0233]

[0234] 1-bromo-3-chloronaphthalene(2.4 g, 0.010 mol)에 phenyl-boronic acid (1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-1> 1.7 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=238$)

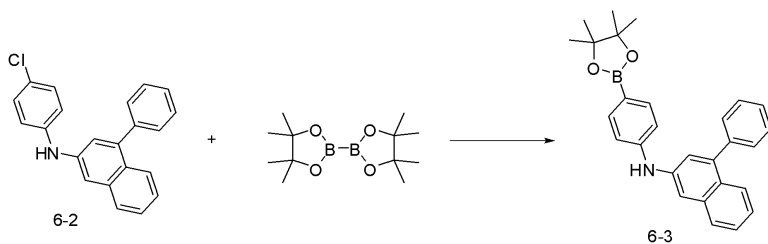
[0235] (2) 제조예 2 : 중간체 6-2의 합성



[0236]

[0237] 중간체 6-1(2.4 g, 0.010 mol)에 4-bromoaniline(1.7 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-2> 2.5 g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=329$)

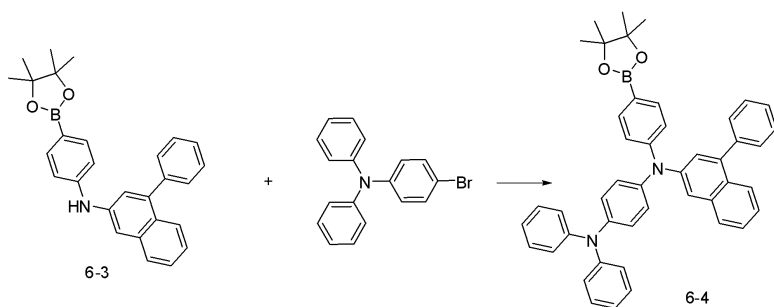
[0238] (3) 제조예 3 : 중간체 6-3의 합성



[0239]

[0240] 중간체 6-2(3.3 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 2.9 g (수율 70%)을 얻었다.($m/z=421$)

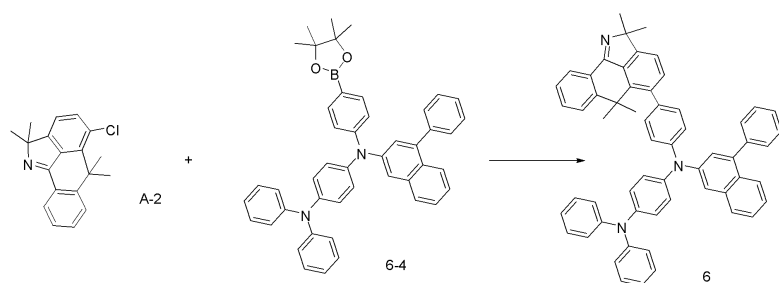
[0241] (4) 제조예 4 : 중간체 6-4의 합성



[0242]

[0243] 중간체 6-3(4.2 g, 0.010 mol)에 4-bromo-N,N-diphenylaniline(32.6 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-4> 3.9 g (수율 74%)을 얻었다.(m/z=664)

[0244] (5) 제조예 5 : 화합물 6의 합성



[0245]

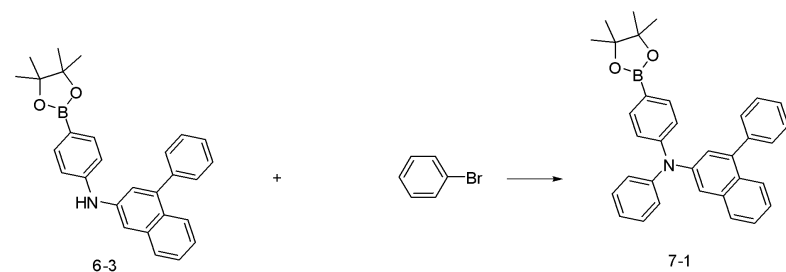
[0246] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(8.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 6> 5.8 g (수율 72%)을 얻었다.

[0247] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.43/d, 7.90/d, 7.85/d, 7.69/d, 7.61/m, 7.51/m, 7.46/m, 7.41/m, 7.32/m, 7.23/d, 6.99/s, 6.76/s) 2H(7.79/d, 7.51/m, 6.81/m, 6.69/d, 1.72/s, 1.61/s) 3H(7.54/d) 4H(7.20/m, 6.63/d, 6.38/d)

[0248] LC/MS: m/z=799 $[(\text{M}+1)^+]$

[0249] 실시예 7 : 화합물 7 합성

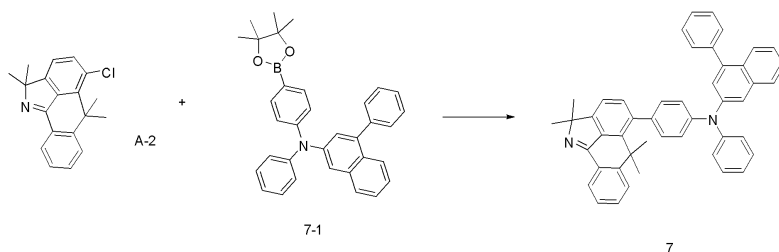
[0250] (1) 제조예 1 : 중간체 7-1의 합성



[0251]

[0252] 중간체 6-3(6.6 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.3 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 7-1> 3.8 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=497)

[0253] (2) 제조예 2 : 화합물 7의 합성



[0254]

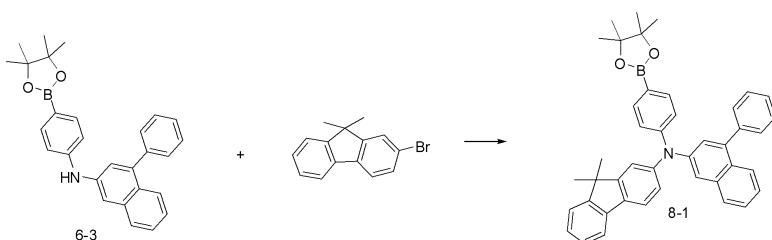
[0255] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 7-1(6.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 7> 4.5 g (수율 71%)을 얻었다.

[0256] H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(8.43/d, 7.90/d, 7.85/d, 7.69/d, 7.61/m, 7.51/m, 7.46/m, 7.41/m, 7.32/m, 7.23/d, 6.99/s, 6.81/m, 6.76/s) 2H(7.79/d, 7.51/m, 7.20/m, 6.69/d, 6.63/d, 1.72/s, 1.61/s) 3H(7.54/d)

[0257] LC/MS: $m/z=631[(M+1)^+]$

[0258] 실시예 8 : 화합물 8 합성

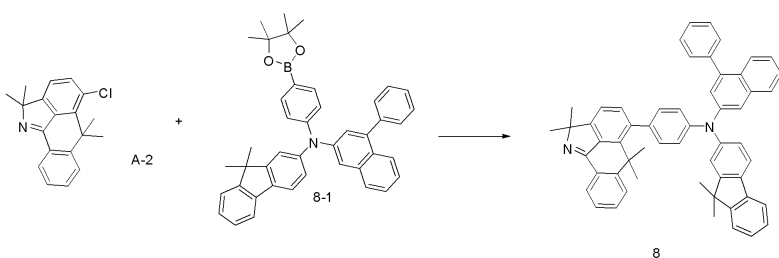
[0259] (1) 제조예 1 : 중간체 8-1의 합성



[0260]

[0261] 중간체 6-3(6.6 g, 0.010 mol)에 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene(2.2 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 8-1> 3.8 g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=613$)

[0262] (2) 제조예 2 : 화합물 8의 합성



[0263]

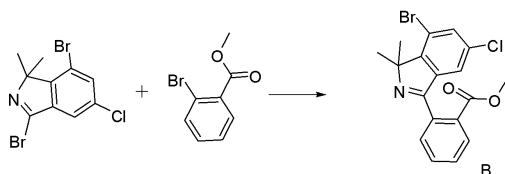
[0264] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 8-1(7.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 8> 5.4g (수율 72%)을 얻었다.

[0265] H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(8.43/d, 7.90/d, 7.87/d, 7.85/d, 7.69/d, 7.62/d, 7.61/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.46/m, 7.41/m, 7.38/m, 7.32/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.99/s, 6.76/s, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.79/d, 7.51/m, 6.69/d, 1.61/s) 3H(7.54/d) 4H(1.72/s)

[0266] LC/MS: $m/z=747$ $[(M+1)^+]$

[0267] 실시예 9 : 화합물 9 합성

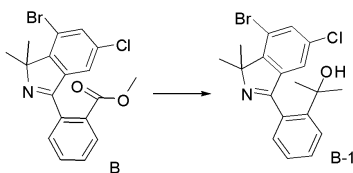
[0268] (1) 제조예 1 : 중간체 B의 합성



[0269]

[0270] 3,7-dibromo-5-chloro-1,1-dimethyl-1H-isindole(3.4 g, 0.010 mol)에 methyl-2-bromobenzoate(2.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 B> 1.8 g (수율 46%)을 얻었다.($m/z=392$)

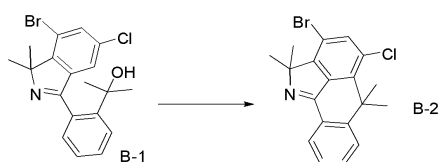
[0271] (2) 제조예 2 : 중간체 B-1의 합성



[0272]

[0273] 중간체 B(3.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 B-1> 2.6 g (수율 66%)을 얻었다.($m/z=392$)

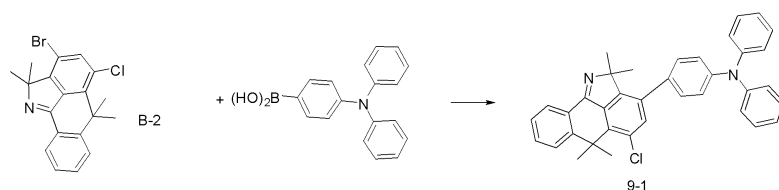
[0274] (3) 제조예 3 : 중간체 B-2의 합성



[0275]

[0276] 중간체 B-1(3.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 B-2> 2.5 g(수율 66%)을 얻었다.($m/z=374$)

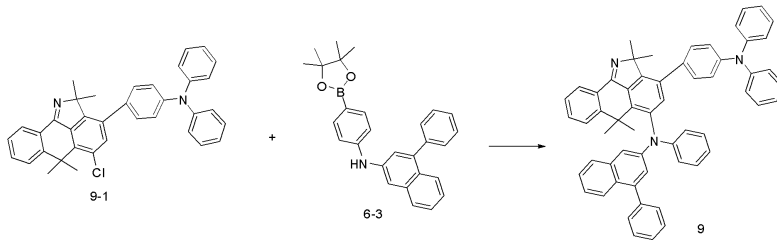
[0277] (4) 제조예 4 : 중간체 9-1의 합성



[0278]

[0279] 중간체 B-2(3.7 g, 0.010 mol)에 4-(diphenylamino)phenylboronic acid(3.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 9-1> 3.9 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=539$)

[0280] (5) 제조예 5 : 화합물 9의 합성



[0281]

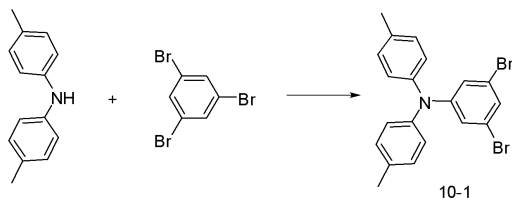
[0282] 중간체 9-1(5.4 g, 0.010 mol)에 중간체 6-3(6.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 9> 5.8 g (수율 73%)을 얻었다.

[0283] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.43/d, 7.90/d, 7.85/d, 7.61/m, 7.54/d, 7.51/m, 7.46/m, 7.41/m, 7.32/m, 6.99/s, 6.76/s, 6.55/s) 2H(7.79/d, 7.54/d, 7.51/m, 6.69/d, 1.72/s, 1.61/s) 3H(6.81/m) 6H(7.20/m, 6.63/d)

[0284] LC/MS: $m/z = 799[(M+1)^+]$

[0285] 실시예 10 : 화합물 10 합성

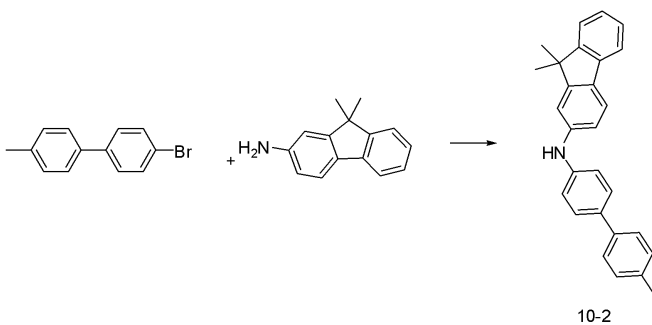
[0286] (1) 제조예 1 : 중간체 10-1의 합성



[0287]

[0288] dip-tolylamine(2.0 g, 0.010 mol)에 1,3,5-tribromobenzene(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체_10-1> 3.3g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=431$)

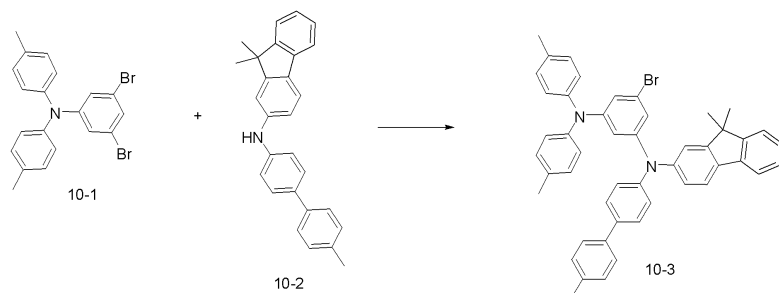
[0289] (2) 제조예 2 : 중간체 10-2의 합성



[0290]

[0291] 4-bromo-4'-methylbiphenyl(2.5 g, 0.010 mol)에 9,9-dimethyl-9H-fluorene-2-amine(2.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 10-2> 3.0 g (수율 80%)을 얻었다.($m/z=375$)

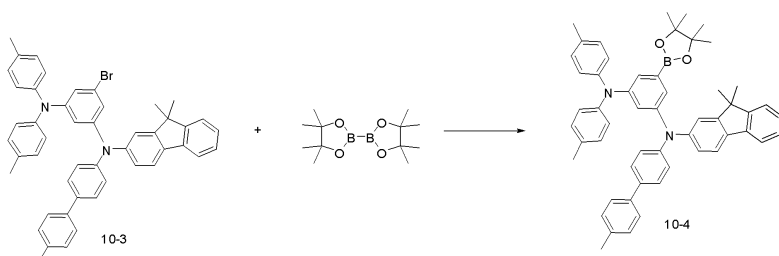
[0292] (3) 제조예 3 : 중간체 10-3의 합성



[0293]

[0294] 중간체 10-1(4.3 g, 0.010 mol)에 중간체 10-2(3.8 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 10-3> 5.6 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=725)

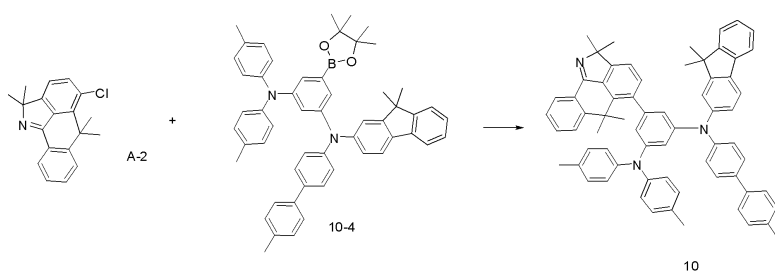
[0295] (4) 제조예 4 : 중간체 10-4의 합성



[0296]

[0297] 중간체 10-3(7.3 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 5.4 g (수율 70%)을 얻었다.(m/z=772)

[0298] (5) 제조예 5 : 화합물 10의 합성



[0299]

[0300] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(9.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 10> 6.8 g (수율 75%)을 얻었다.(m/z=000)

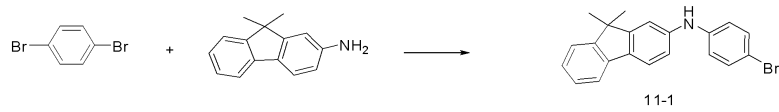
[0301] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.90/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.62/s, 7.61/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.38/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.75/s, 6.58/d, 5.73/s) 2H(7.33/d, 7.29/d, 6.69/d, 6.25/s, 1.61/s) 3H(7.54/d, 2.34/s) 4H(6.98/d, 6.51/d, 1.72/s)

[0302] LC/MS: m/z= 907[(M+1)⁺]

[0303] 실시예 11 : 화합물 11 합성

[0304]

(1) 제조예 1 : 중간체 11-1의 합성



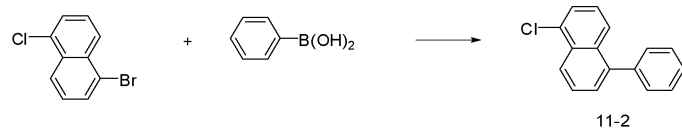
[0305]

[0306]

1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)에 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (2.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 11-1> 2.8 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=364)

[0307]

(2) 제조예 2 : 중간체 11-2의 합성



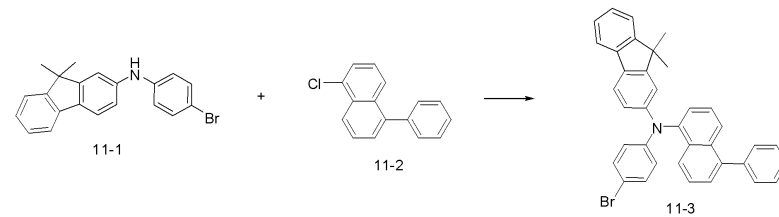
[0308]

[0309]

1-bromo-5-chloronaphthalene(2.4 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 11-2> 1.7 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=238)

[0310]

(3) 제조예 3 : 중간체 11-3의 합성



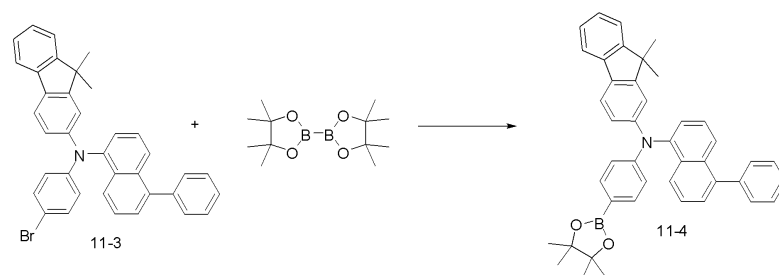
[0311]

[0312]

중간체 11-1(3.6 g, 0.010 mol)에 중간체 11-2(2.5 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 11-3> 4.4 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=566)

[0313]

(4) 제조예 4 : 중간체 11-4의 합성

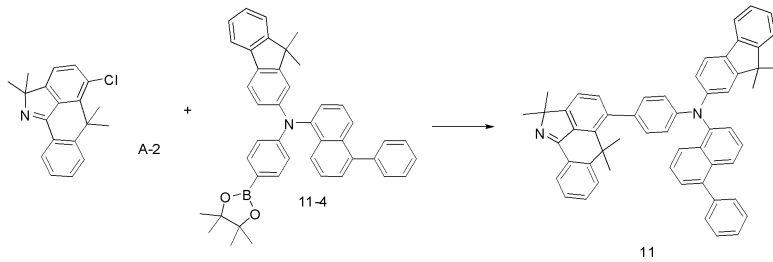


[0314]

[0315]

중간체 11-3(5.7 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 11-4> 4.4 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=613)

(5) 제조예 5 : 화합물 11의 합성



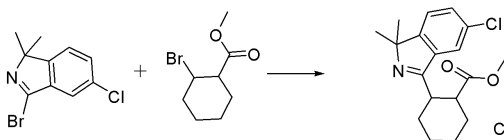
중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 11-4(7.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 11> 5.5 g (수율 73%)을 얻었다.(m/z=000)

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.40/d, 8.04/d, 8.03/d, 7.90/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.62/d, 7.61/m, 7.60/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.28/m, 7.23/d, 6.98/d, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.79/d, 7.51/m, 7.38/m, 6.69/d, 1.61/s) 3H(7.54/d) 4H(1.72/s)

LC/MS: m/z=747 [(M+1)⁺]

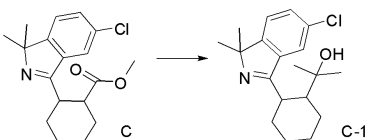
실시예 12 : 화합물 12 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 C의 합성



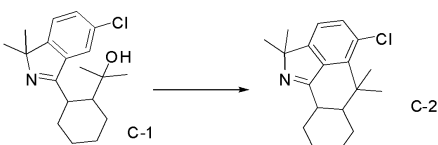
3-bromo-5-chloro-1,1-dimethyl-1H-indole(2.6 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromocyclohexanecarboxylate(2.7 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 C> 1.3 g (수율 41%)을 얻었다.(m/z=319)

(2) 제조예 2 : 중간체 C-1의 합성



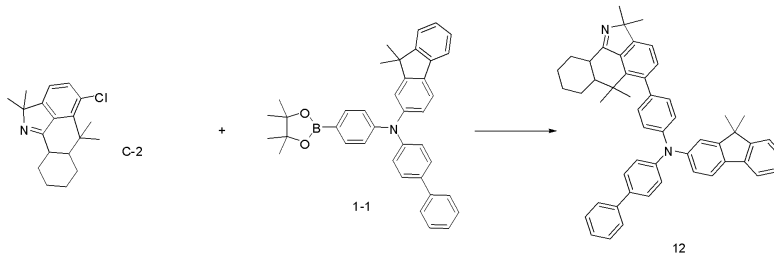
중간체 C(3.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 C-1> 2.0 g (수율 62%)을 얻었다.(m/z=319)

(3) 제조예 3 : 중간체 C-2의 합성



중간체 C-1(3.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 C-2> 2.0 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=301)

[0331] (4) 제조예 4 : 화합물 12의 합성



[0332]

[0333] 중간체 C-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 1-1(6.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 12> 4.4 g (수율 62%)을 얻었다.

[0334]

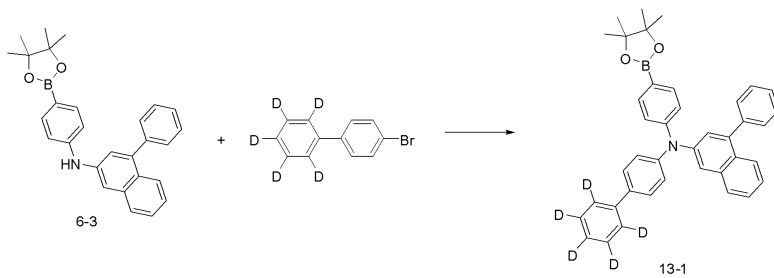
H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.69/d, 7.62/d, 7.55/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.28/m, 7.21/m, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.52/d, 7.51/m, 1.72/s, 1.53/s, 1.50/s, 1.40/s, 1.30/s) 3H(7.54/d) 4H(6.69/d)

[0335]

LC/MS: $m/z=703$ [$(M+1)^+$]

[0336] 실시예 13 : 화합물 13 합성

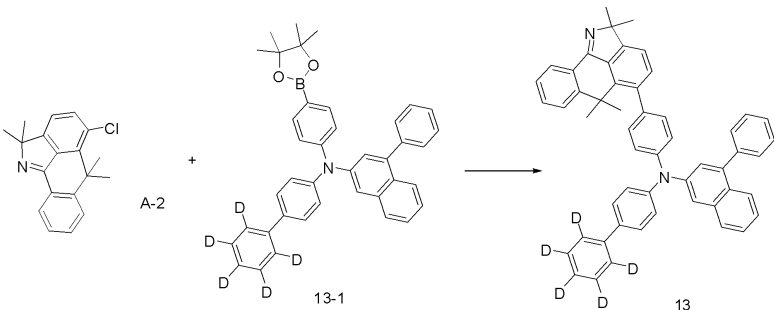
[0337] (1) 제조예 1 : 중간체 13-1의 합성



[0338]

[0339] 중간체 6-3(4.2 g, 0.010 mol)에 4-bromobiphenyl(2.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 13-1> 3.9 g (수율 67%)을 얻었다.($m/z=578$)

[0340] (2) 제조예 2 : 화합물 13의 합성



[0341]

[0342] 중간체 A-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(6.9 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 13> 5.1 g (수율 72%)을 얻었다.

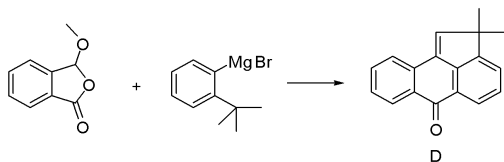
[0343]

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.43/d, 7.90/d, 7.85/d, 7.69/d, 7.61/m, 7.51/m, 7.46/m, 7.41/m, 7.32/m, 7.23/d, 6.99/s, 6.76/s) 2H(7.79/d, 7.51/m, 1.72/s, 1.61/s) 4H(6.69/d) 5H(7.54/d)

[0344] LC/MS: $m/z=712$ $[(M+1)^+]$

[0345] 실시예 14 : 화합물 14 합성

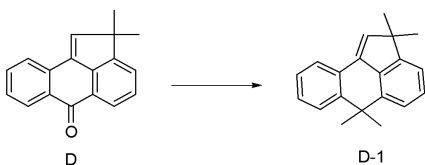
[0346] (1) 제조예 1 : 중간체 D의 합성



[0347]

[0348] 3-methoxyisobenzofuran-1(3H)-one(1.6 g, 0.010 mol)에 (2-tert-butylphenyl)magnesium bromide(2.8 g, 0.012 mol)을 넣고 THF 50 mL에 녹이고, -78°C 로 냉각시킨 후 2.5 M BuLi(0.01 mL, 0.0005 mol)을 dropping시킨 후, 1시간 동안 교반하였다. 이를 서서히 실온으로 올려 4시간 동안 더 교반하였다. 반응 완료 후 물 100 mL로 추출하여 유기층을 감압 건조하였다. 이를 EtOH : Acetone으로 재결정하여 중간체 D(1.0 g, 41%)수득하였다.($m/z=246$)

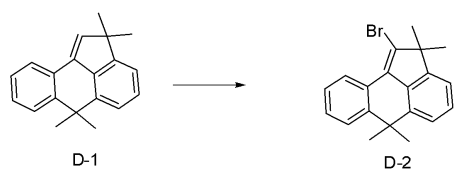
[0349] (2) 제조예 2 : 중간체 D-1의 합성



[0350]

[0351] 중간체 D(2.5 g, 0.010 mol)에 potassium fluoride(2.3 g, 0.040 mol)를 넣고, THF/ H_2O 를 5 : 2 비율로 50 mL를 넣고 25°C 에서 1시간 교반하여 반응시켰다..반응 종료 후 냉각하여 H_2O : MC에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane : MC)하여 중간체D-1을 1.3 g(수율 51%) 수득하였다. ($m/z=260$)

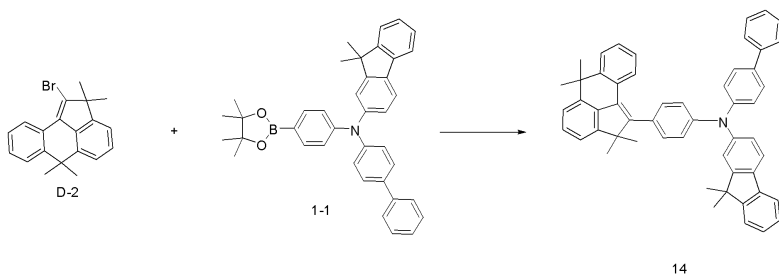
[0352] (3) 제조예 3 : 중간체 D-2의 합성



[0353]

[0354] 중간체 D-1(2.6 g, 0.010 mol)에 N-bromosuccinimide(1.8 g, 0.010 mol)에 DMF 100 mL를 넣고 20°C 에서 8시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H_2O : 아세트산에틸로 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane :MC)하여 중간체 D-2을 1.6 g(48%)수득하였다.($m/z=339$)

[0355] (4) 제조예 4 : 화합물 14의 합성



[0356]

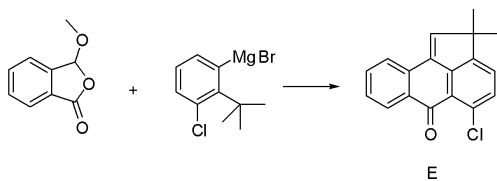
[0357] 중간체 D-2(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 1-1(6.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 14> 4.9 g (수율 70%)을 얻었다.

[0358] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.62/d, 7.55/d, 7.42/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.36/m, 7.30/d, 7.28/m, 7.27/m, 7.22/m, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.25/d, 7.12/d, 6.69/d, 6.63/d)

[0359] LC/MS: $m/z = 696[(M+1)^+]$

[0360] 실시예 15 : 화합물 15 합성

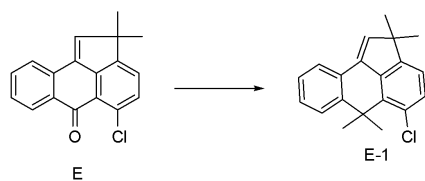
[0361] (1) 제조예 1 : 중간체 E의 합성



[0362]

[0363] 3-methoxyisobenzofuran-1(3H)-one(1.6 g, 0.010 mol)에 (2-tert-butyl-3-chlorophenyl)magnesium bromide(3.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 14-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 E> 1.1 g (수율 40%)을 얻었다.($m/z=280$)

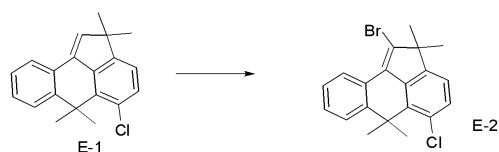
[0364] (2) 제조예 2 : 중간체 E-1의 합성



[0365]

[0366] 중간체 E(2.8 g, 0.010 mol)를 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 E-1> 2.1 g (수율 70%)을 얻었다.($m/z=294$)

[0367] (3) 제조예 3 : 중간체 E-2의 합성



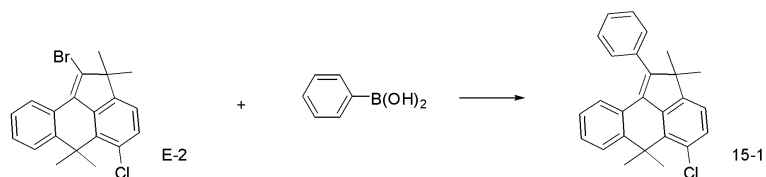
[0368]

[0369] 중간체 E-1(2.9 g, 0.010 mol)에 N-bromosuccinimide(1.8 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 14-제조예 (3)에서 사

용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 E-2> 1.5 g (수율 41%)수득하였다. m/z=373)

[0370]

(4) 제조예 4 : 중간체 15-1의 합성



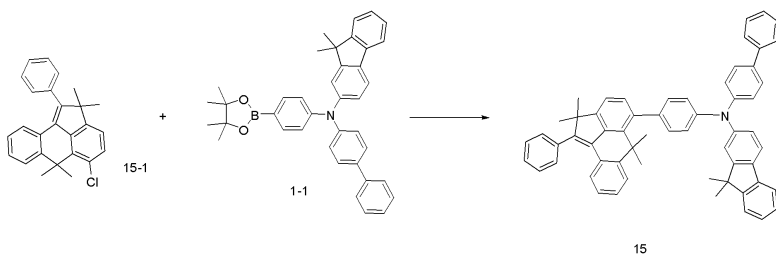
[0371]

[0372]

중간체 E-2(3.7 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid (1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 15-1> 2.7 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=370)

[0373]

(5) 제조예 5 : 화합물 15의 합성



[0374]

[0375]

중간체 15-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 1-1 (6.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 15> 5.5 g (수율 71%)을 얻었다.

[0376]

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.62/s, 7.55/d, 7.48/d, 7.42/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.30/d, 7.30/m, 7.28/m, 7.27/m, 7.22/m, 7.18/d, 6.75/s, 6.58/d) 2H(7.52/d, 7.51/m, 7.19/m, 6.95/d) 4H(7.54/d, 6.69/d) 6H(1.72/s)

[0377]

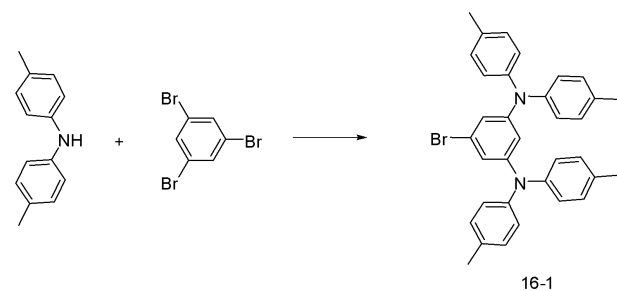
LC/MS: m/z=773 $[(M+1)^+]$

[0378]

실시예 16 : 화합물 16 합성

[0379]

(1) 제조예 1 : 중간체 16-1의 합성

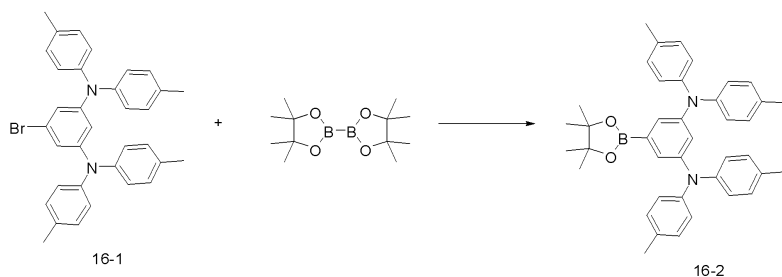


[0380]

[0381]

dip-tolylamine(2.0 g, 0.010 mol)에 1,3,5-tribromobenzene(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체_16-1> 4.8 g (수율 87%)을 얻었다.(m/z=547)

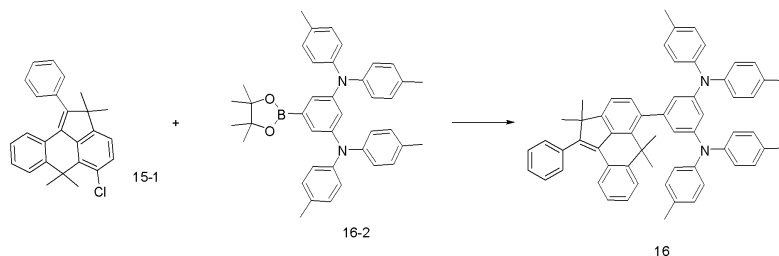
[0382] (2) 제조예 2 : 중간체 16-2의 합성



[0383]

[0384] 중간체 16-1(5.5 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 16-2> 4.3g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=594)

[0385] (3) 제조예 3 : 화합물 16의 합성



[0386]

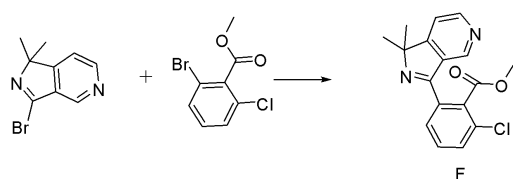
[0387] 중간체 15-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 16-2(7.1 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 16> 5.4g (수율 67%)을 얻었다.(m/z=000)

[0388] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.48/d, 7.42/d, 7.30/m, 7.30/d, 7.27/m, 7.22/m, 7.18/d, 5.73/s) 2H(7.19/m, 6.95/d, 6.25/s) 4H(2.34/s, 1.72/s) 8H(6.98/d, 6.51/d)

[0389] LC/MS: m/z=804 $[(M+1)^+]$

[0390] 실시예 17 : 화합물 17 합성

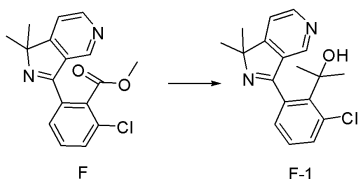
[0391] (1) 제조예 1 : 중간체 F의 합성



[0392]

[0393] 3-bromo-1,1-dimethyl-1H-pyrrolo[3,4-c]pyridine(2.3 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromo-6-chlorobenzoate(2.7 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 F> 1.2 g (수율 37%)을 얻었다.(m/z=314)

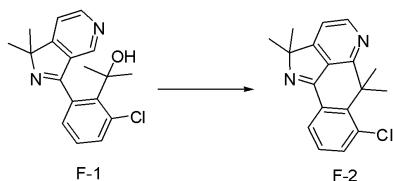
[0394] (2) 제조예 2 : 중간체 F-1의 합성



[0395]

[0396] 중간체 F(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 F-1> 1.8 g (수율 58%)을 얻었다.(m/z=314)

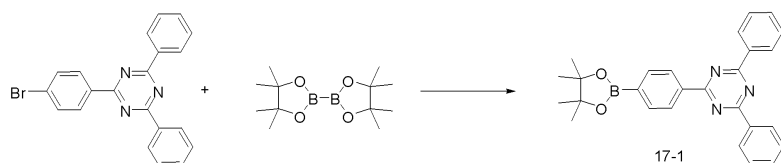
[0397] (3) 제조예 3 : 중간체 F-2의 합성



[0398]

[0399] 중간체 F-1(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 F-2> 2.0 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=296)

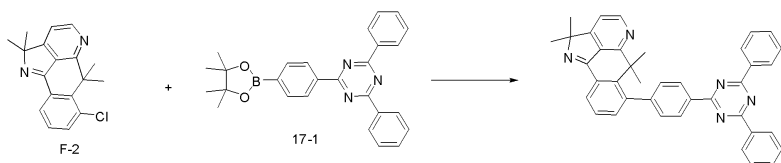
[0400] (4) 제조예 4 : 중간체 17-1의 합성



[0401]

[0402] 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(3.9 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 17-1> 3.1 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=435)

[0403] (5) 제조예 5 : 화합물 17의 합성



[0404]

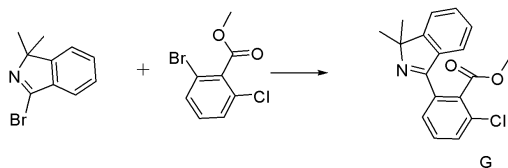
[0405] 중간체 F-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 17> 3.9g (수율 69%)을 얻었다.

[0406] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.68/d, 7.77/d, 7.71/d, 7.49/d, 7.40/m) 2H(7.85/d, 7.41/m, 7.25/d) 4H(8.28/d, 7.51/m, 1.72/s)

[0407] LC/MS: m/z=570[(M+1)⁺]

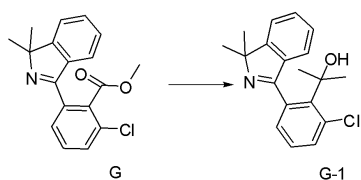
실시예 18 : 화합물 18 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 G의 합성



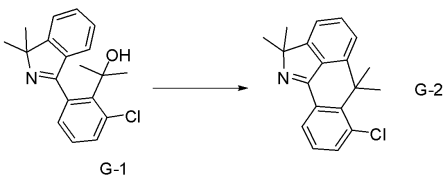
3-bromo-1,1-dimethyl-1H-indole(2.2 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromo-6-chlorobenzoate(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 G> 1.2 g (수율 37%)을 얻었다.(m/z=313)

(2) 제조예 2 : 중간체 G-1의 합성



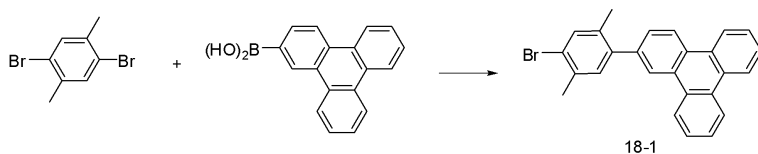
중간체 G(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 G-1> 2.0 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=313)

(3) 제조예 3 : 중간체 G-2의 합성



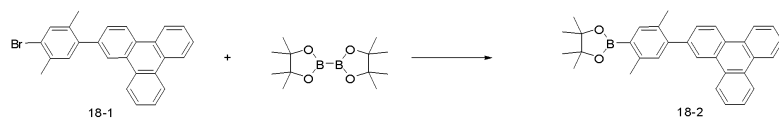
중간체 G-1(3.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 G-2> 1.8 g (수율 60%)을 얻었다.(m/z=296)

(4) 제조예 4 : 중간체 18-1의 합성



1,4-dibromo-2,5-dimethylbenzene(2.6 g, 0.010 mol)에 triphenylboronic acid (3.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 18-1> 3.0 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=411)

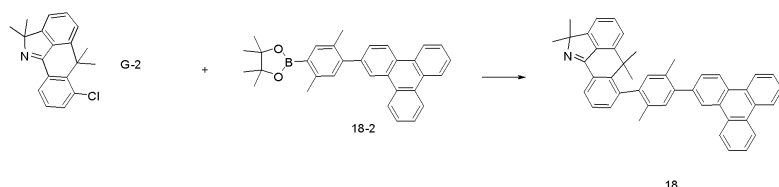
[0421] (5) 제조예 5 : 중간체 18-2의 합성



[0422]

[0423] 중간체 18-1(4.1 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 18-2> 3.3 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=458)

[0424] (6) 제조예 6 : 화합물 18의 합성



[0425]

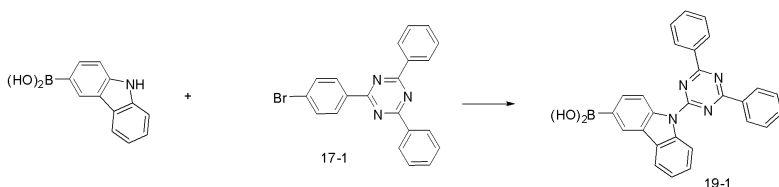
[0426] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 18-2(5.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 18> 4.0 g (수율 67%)을 얻었다.(m/z=000)

[0427] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.95/d, 7.86/d, 7.57/m, 7.36/m) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.73/s, 7.17/d, 2.59/s) 4H(1.72/s)

[0428] LC/MS: m/z=592 $[(M+1)^+]$

[0429] 실시예 19 : 화합물 19 합성

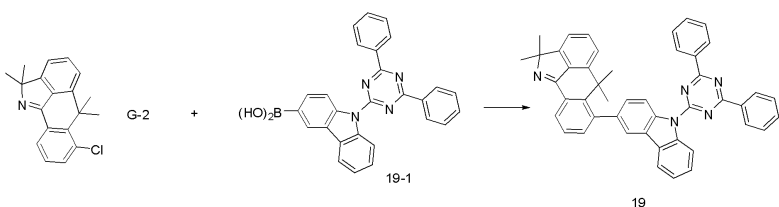
[0430] (1) 제조예 1 : 중간체 19-1의 합성



[0431]

[0432] 9H-carbazol-3-ylboronic acid(2.1 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(3.1 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 19-1> 3.2 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=442)

[0433] (2) 제조예 2 : 화합물 19의 합성



[0434]

[0435] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 19-1(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 19> 4.9 g (수율 75%)을 얻었다.(m/z=000)

[0436] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.95/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.86/d, 7.77/d, 7.69/d, 7.57/m,

7.36/m, 7.33/m, 7.25/m) 2H(7.41/m, 7.17/d) 4H(8.28/d, 7.51/m, 1.72/s)

LC/MS: $m/z=658[(M+1)^+]$

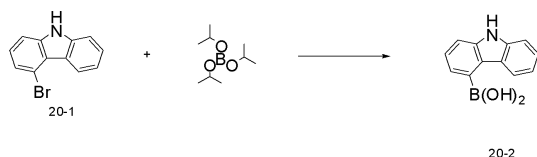
실시예 20 : 화합물 20 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 20-1의 합성



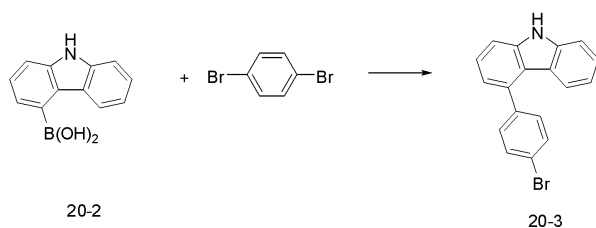
2-bromo-2'-nitrobiphenyl(5.0 g, 0.017 mol)에 triphenylphosphine(4.5 g, 0.017 mol)에 1,2-dichlorobenzene 100 mL 넣고 180 °C에서 24시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H₂O : MC에 충분히 리 후 컬럼정제(n-Hexane :MC)하여 중간체 20-1을 4.2 g(수율 83%)수득하였다.($m/z=246$)

(2) 제조예 2 : 중간체 20-2의 합성



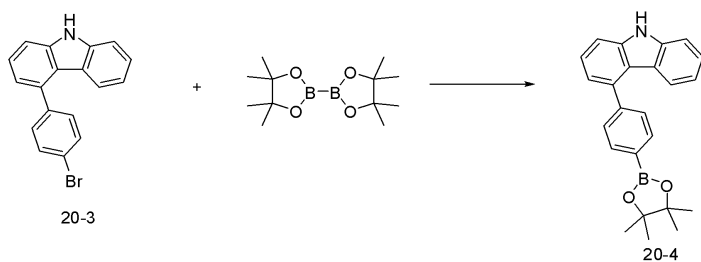
중간체 20-1(3.0 g, 0.012 mol)에 무수 THF 30 mL에 녹인 후, -78 °C에서 n-BuLi(2.5M) 5.9 mL를 천천히 적가하였다. 1시간 동안 유지시킨 후, triisopropyl borate(3.4 g, 0.018 mol)을 첨가한 후, 상온에서 24시간 교반하였다. 반응 종료 후 1N HCl을 넣고 1시간 교반한 뒤, EA : H₂O에 충분히 리 후 n-Hexane 으로 재결정 하여 <중간체 20-2> 1.8 g (수율 70%)을 얻었다.($m/z=211$)

(3) 제조예 3 : 중간체 20-3의 합성



중간체 20-2(2.1 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(1.9 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 20-3> 2.0g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=322$)

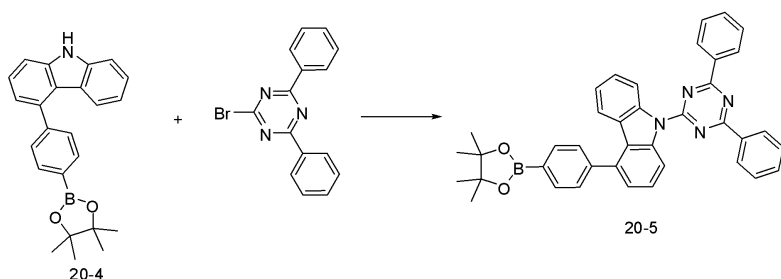
[0448] (4) 제조예 4 : 중간체 20-4의 합성



[0449]

[0450] 중간체 20-3(3.2 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 20-4> 2.9 g (수율 78%)을 얻었다.(m/z=369)

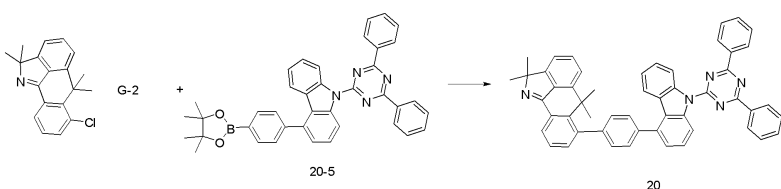
[0451] (5) 제조예 5 : 중간체 20-5의 합성



[0452]

[0453] 중간체 20-4(4.4 g, 0.012 mol)에 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 20-5> 4.3 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=600)

[0454] (6) 제조예 6 : 화합물 20의 합성



[0455]

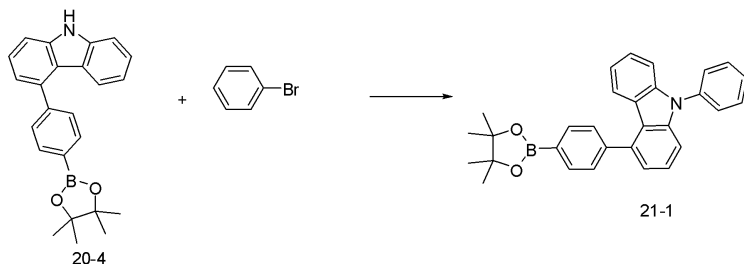
[0456] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 20-5(7.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 20> 5.4 g (수율 73%)을 얻었다.

[0457] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.95/d, 7.94/d, 7.86/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.57/m, 7.43/m, 7.36/m, 7.33/m, 7.25/m) 2H(7.41/m, 7.17/d) 4H(8.28/d, 7.51/m, 7.25/d, 1.72/s)

[0458] LC/MS: m/z=734[(M+1)⁺]

[0459] 실시예 21 : 화합물 21 합성

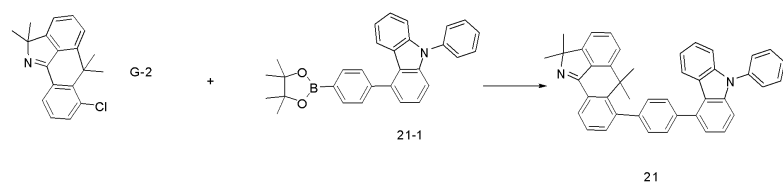
[0460] (1) 제조예 1 : 중간체 21-1의 합성



[0461]

[0462] 중간체 20-4(3.7 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.3 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 21-1> 2.7 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=445)

[0463] (2) 제조예 2 : 화합물 21의 합성



[0464]

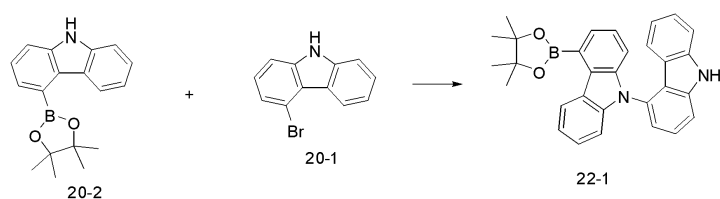
[0465] 중간체 G-2(3.1 g, 0.010 mol)에 중간체 21-1(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 21> 4.3 g (수율 74%)을 얻었다.

[0466] H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.95/d, 7.94/d, 7.86/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.57/m, 7.45/m, 7.43/m, 7.36/m, 7.33/m, 7.25/m) 2H(7.58/m, 7.50/d, 7.17/d) 4H(7.25/d, 1.72/s)

[0467] LC/MS: m/z=579[(M+1)⁺]

[0468] 실시예 22 : 화합물 22 합성

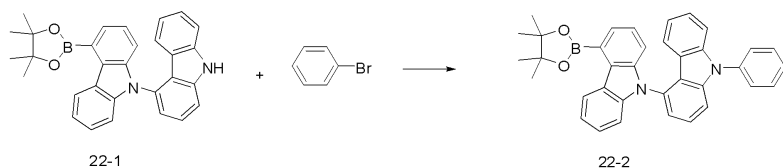
[0469] (1) 제조예 1 : 중간체 22-1의 합성



[0470]

[0471] 중간체 20-2(2.9 g, 0.010 mol)에 중간체 20-1(2.5 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 22-1> 3.5 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=458)

[0472] (2) 제조예 2 : 중간체 22-2의 합성

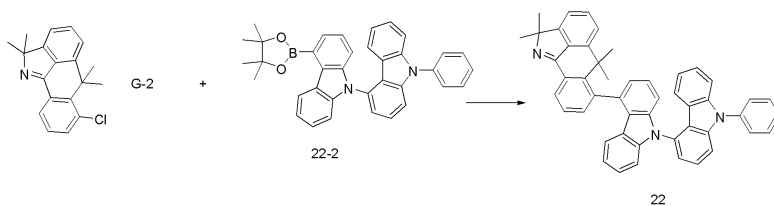


[0473]

[0474] 중간체 22-1(4.6 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동

일한 방법으로 합성하여 <중간체 22-2> 4.1 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=534)

[0475] (3) 제조예 3 : 화합물 22의 합성



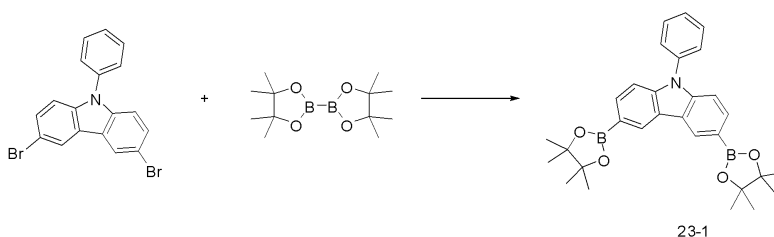
중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 22-2(6.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 22> 4.8 g (수율 72%)을 얻었다.

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.95/d, 7.86/d, 7.79/d, 7.63/d, 7.59/d, 7.57/m, 7.45/m, 7.43/m, 7.37/m, 7.36/m, 7.23/d) 2H(8.55/d, 7.94/d, 7.58/m, 7.50/d, 7.33/m, 7.25/m, 7.17/d) 4H(1.72/s)

LC/MS: m/z=668[(M+1)⁺]

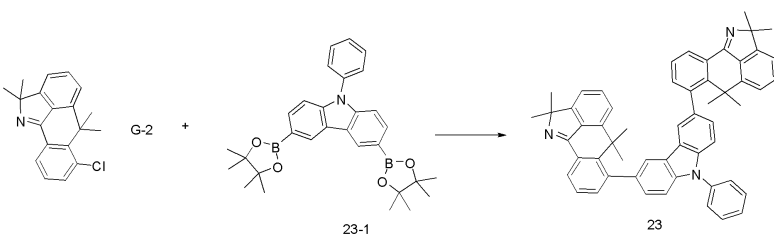
[0480] 실시예 23 : 화합물 23 합성

[0481] (1) 제조예 1 : 중간체 23-1의 합성



3,6-dibromo-9-phenyl-9H-carbazole(4.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato) diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 23-1> 3.5 g (수율 70%)을 얻었다.(m/z=495)

[0484] (2) 제조예 2 : 화합물 23의 합성



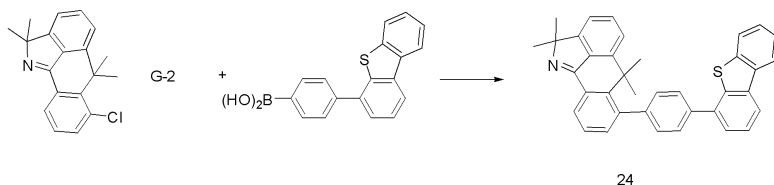
중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 4-2(5.9 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 23> 5.2 g (수율 68%)을 얻었다.(m/z=000)

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.18/d, 8.00/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.45/m) 2H(7.95/d, 7.86/d, 7.77/s, 7.58/m, 7.57/m, 7.50/d, 7.36/m) 4H(7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

LC/MS: m/z=762[(M+1)⁺]

실시예 24 : 화합물 24 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 24의 합성



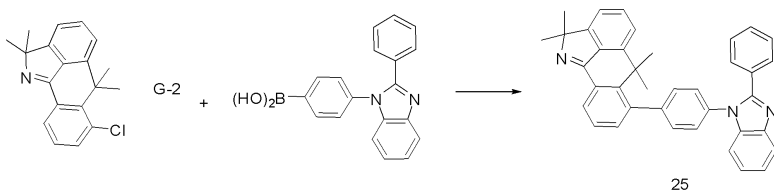
중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)phenylboronic acid(3.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 24> 3.7 g (수율 72%)을 얻었다.

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.95/d, 7.86/d, 7.58/m, 7.57/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.36/m) 2H(7.17/d, 1.72/s, 1.61/s) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=520[(M+1)^+]$

실시예 25 : 화합물 25 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 25의 합성



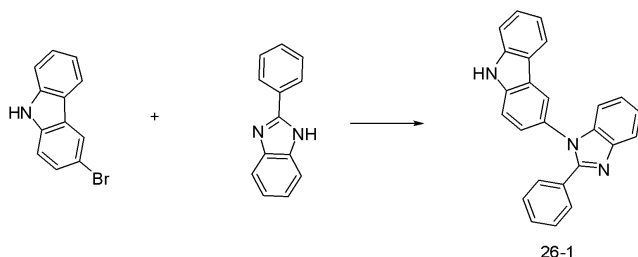
중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 4-(2-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-1-yl)phenylboronic acid(3.8 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 25> 3.9 g (수율 74%)을 얻었다.

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.56/d, 7.95/d, 7.86/d, 7.59/d, 7.57/m, 7.41/m, 7.36/m) 2H(8.28/d, 7.79/d, 7.68/d, 7.51/m, 7.22/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

LC/MS: $m/z=530[(M+1)^+]$

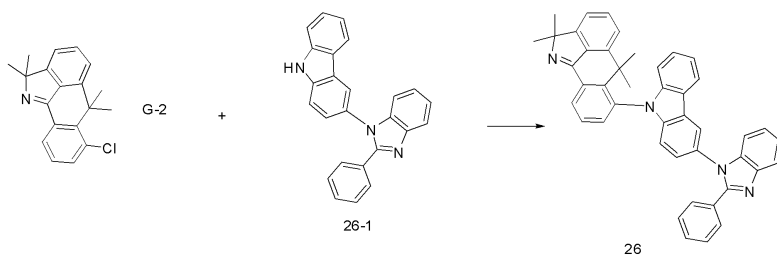
실시예 26 : 화합물 26 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 26-1의 합성



3-bromo-9H-carbazole(2.5 g, 0.010 mol)에 2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole (1.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 26-1> 3.0 g (수율 84%)을 얻었다.($m/z=359$)

[0505] (2) 제조예 2 : 화합물 26의 합성



[0506]

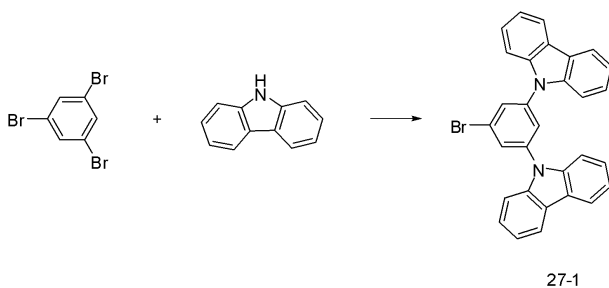
[0507] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 26-1(3.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 26> 4.8 g (수율 77%)을 얻었다.

[0508] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.56/d, 8.55/d, 7.94/d, 7.63/s, 7.59/d, 7.50/d, 7.50/s, 7.41/m, 7.36/m, 7.33/m, 7.31/d, 7.25/m) 2H(8.28/d, 7.51/m, 7.90/d, 7.22/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

[0509] LC/MS: $m/z=619[(M+1)^+]$

[0510] 실시예 27 : 화합물 27 합성

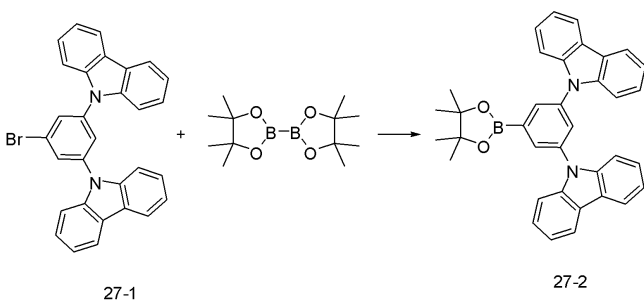
[0511] (1) 제조예 1 : 중간체 27-1의 합성



[0512]

[0513] 1,3,5-tribromobenzene(3.1 g, 0.010 mol)에 9H-carbazole(1.7 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체_27-1> 4.1g (수율 85%)을 얻었다.($m/z=487$)

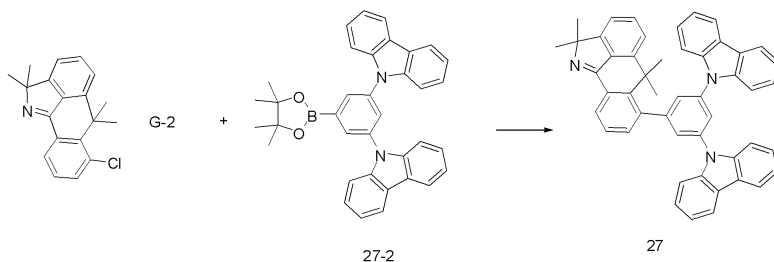
[0514] (2) 제조예 2 : 중간체 27-2의 합성



[0515]

[0516] 중간체 27-1(4.9 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 27-2> 4.0 g (수율 75%)을 얻었다.($m/z=534$)

(3) 제조예 3 : 화합물 27의 합성



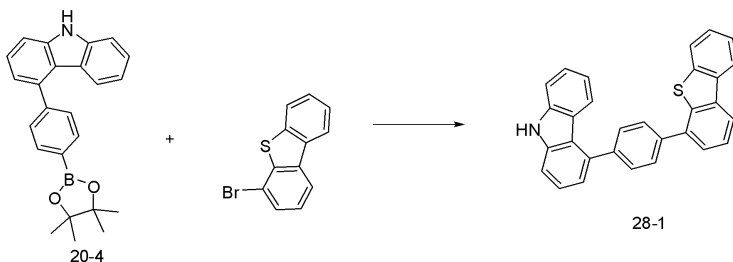
중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 27-2(6.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 27> 4.8 g (수율 72%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.95/d, 7.86/d, 7.57/m, 7.20/s) 2H(8.55/d, 8.12/d, 8.09/s, 7.94/d, 7.63/d, 7.50/m, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

LC/MS: $m/z=668[(M+1)^+]$

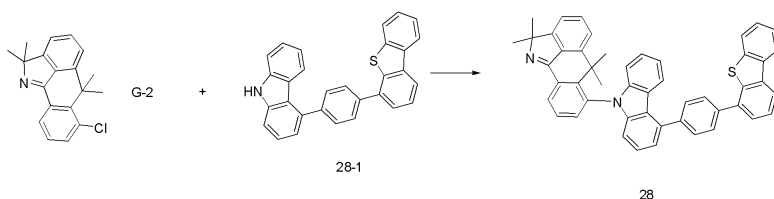
실시예 28 : 화합물 28 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 28-1의 합성



중간체 20-4(3.7 g, 0.010 mol)에 4-bromodibenzo[b,d]thiophene(2.1 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 28-1> 2.4 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=425)

(2) 제조예 2 : 화합물 28의 합성



중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 28-1(4.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 28> 5.3 g (수율 77%)을 얻었다.

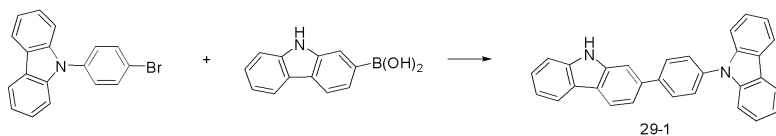
¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.50/d, 7.43/m, 7.33/m, 7.25/m) 2H(7.90/d, 7.17/d, 1.72/s, 1.61/s) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=685[(M+1)^+]$

실시예 29 : 화합물 29 합성

[0532]

(1) 제조예 1 : 중간체 29-1의 합성



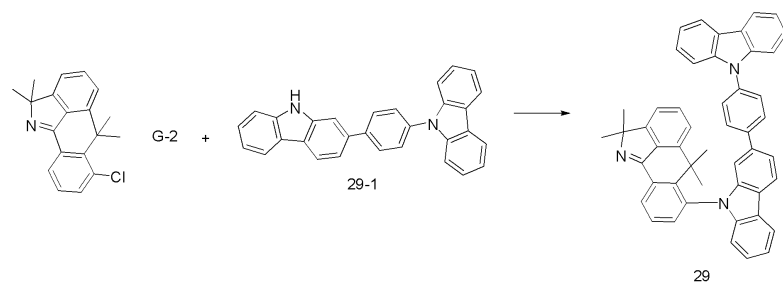
[0533]

[0534]

9-(4-bromophenyl)-9H-carbazole(3.2 g, 0.010 mol)에 9H-carbazol-2-ylboronic acid(2.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 29-1> 2.9 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=408)

[0535]

(2) 제조예 2 : 화합물 29의 합성



[0536]

[0537]

중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 29-1(4.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 29> 5.5 g (수율 82%)을 얻었다.

[0538]

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.91/m) 2H(8.55/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.63/d, 7.50/m, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

[0539]

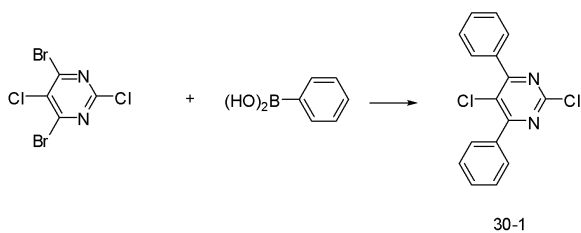
LC/MS: m/z=668[(M+1)⁺]

[0540]

실시예 30 : 화합물 30 합성

[0541]

(1) 제조예 1 : 중간체 30-1의 합성

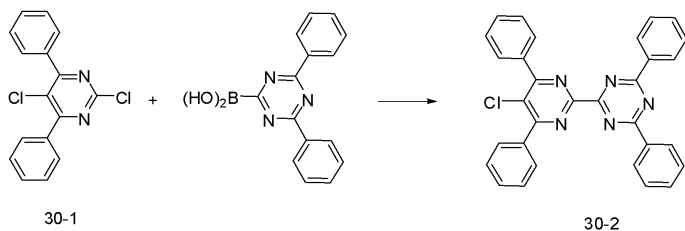


[0542]

[0543]

4,6-dibromo-2,5-dichloropyrimidine(3.1 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 30-1> 2.2 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=301)

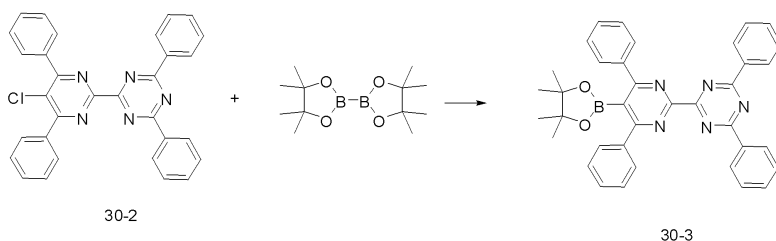
[0544] (2) 제조예 2 : 중간체 30-2의 합성



[0545]

[0546] 중간체 30-1(3.0 g, 0.010 mol)에 4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-ylboronic acid(3.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 30-2> 3.6 g (수율 72%)을 얻었다. (m/z=498)

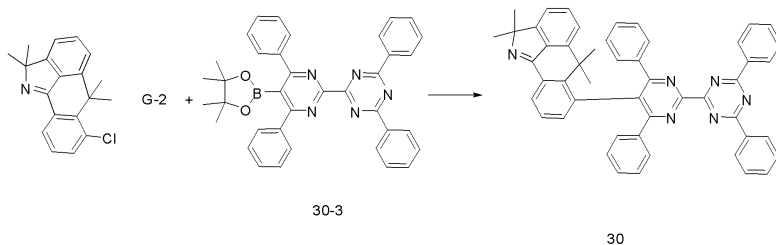
[0547] (3) 제조예 3 : 중간체 30-3의 합성



[0548]

[0549] 중간체 30-2(5.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 30-3> 4.2 g (수율 72%)을 얻었다. (m/z=589)

[0550] (4) 제조예 4 : 화합물 30의 합성



[0551]

[0552] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 30-3(7.1 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 30> 4.5 g (수율 62%)을 얻었다.

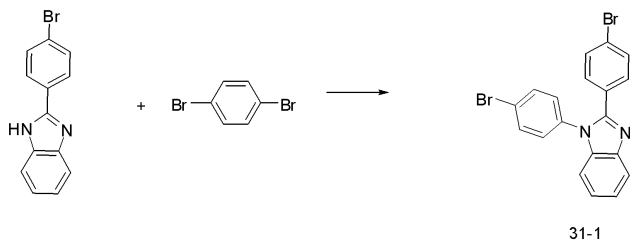
[0553] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.95/d, 7.86/d, 7.57/m, 7.36/m) 2H(7.17/d, 1.72/s, 1.61/s) 4H(8.28/d, 7.79/d, 7.41/m) 8H(7.51/m)

[0554] LC/MS: m/z=723[(M+1)⁺]

[0555] 실시예 31 : 화합물 31 합성

[0556]

(1) 제조예 1 : 중간체 31-1의 합성



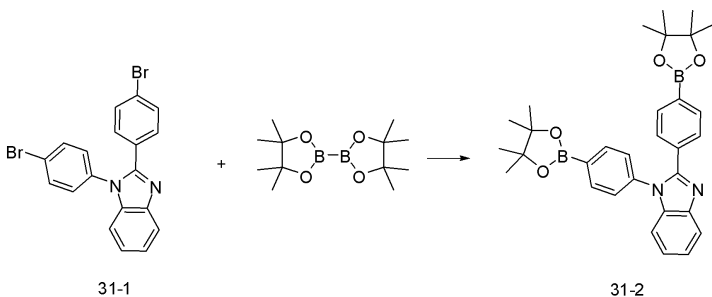
[0557]

[0558]

2-(4-bromophenyl)-1H-benzimidazole(2.7 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 31-1> 3.3g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=428)

[0559]

(2) 제조예 2 : 중간체 31-2의 합성



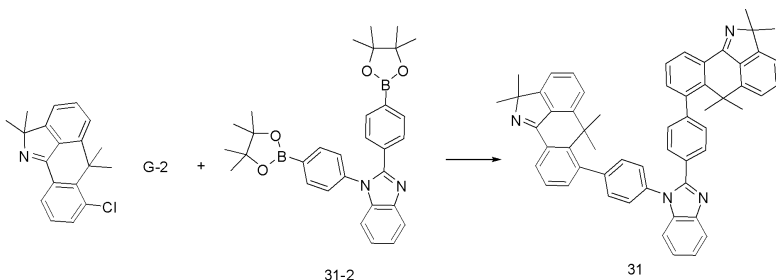
[0560]

[0561]

중간체 31-1(4.3 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 31-2> 3.8 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=522)

[0562]

(3) 제조예 3 : 화합물 31의 합성



[0563]

[0564]

중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 31-2(6.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 31> 5.2 g (수율 66%)을 얻었다.

[0565]

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.56/d, 7.59/d) 2H(7.95/d, 7.86/d, 7.85/d, 7.79/d, 7.68/d, 7.57/m, 7.36/m, 7.25/d, 7.22/m) 4H(7.17/d, 1.72/s, 1.61/s)

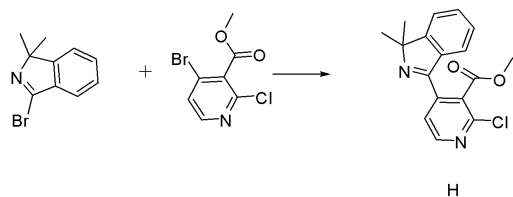
[0566]

LC/MS: m/z=790[(M+1)⁺]

[0567]

실시예 32 : 화합물 32 합성

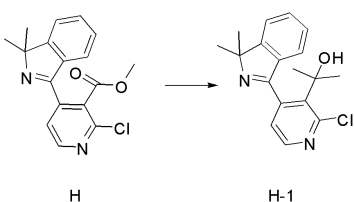
[0568] (1) 제조예 1 : 중간체 H의 합성



[0569]

[0570] 3-bromo-1,1-dimethyl-1H-indole(2.2 g, 0.010 mol)에 methyl 4-bromo-2-chloronicotinate(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 H> 1.2 g (수율 39%)을 얻었다.(m/z=314)

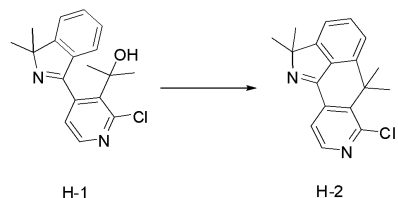
[0571] (2) 제조예 2 : 중간체 H-1의 합성



[0572]

[0573] 중간체 H(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 H-1> 1.6 g (수율 51%)을 얻었다.(m/z=314)

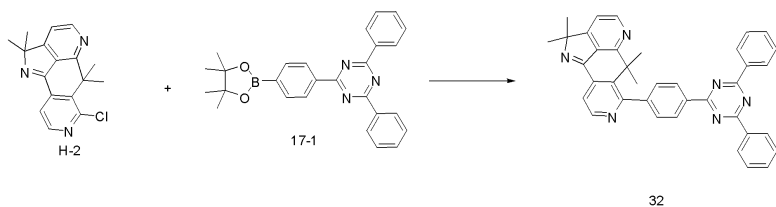
[0574] (3) 제조예 3 : 중간체 H-2의 합성



[0575]

[0576] 중간체 H-1(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 H-2> 1.5 g (수율 52%)을 얻었다.(m/z=296)

[0577] (4) 제조예 4 : 화합물 32의 합성



[0578]

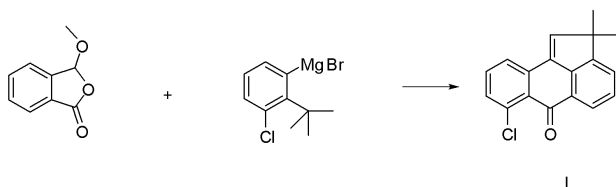
[0579] 중간체 H-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 32> 3.7 g (수율 65%)을 얻었다.

[0580] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.60/d, 7.36/m, 7.21/d) 2H(8.81/d, 7.88/d, 7.41/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.30/s) 4H(8.28/d, 7.51/m)

[0581] LC/MS: $m/z=570[(M+1)^+]$

[0582] 실시예 33 : 화합물 33 합성

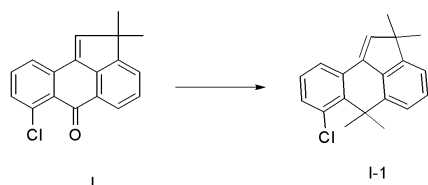
[0583] (1) 제조예 1 : 중간체 I의 합성



[0584]

[0585] 3-methoxyisobenzofuran-1(3H)-one(1.6 g, 0.010 mol)에 (2-tert-butyl-3-chlorophenyl)magnesium bromide(3.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 14-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 I> 1.1 g (수율 40%)을 얻었다.($m/z=280$)

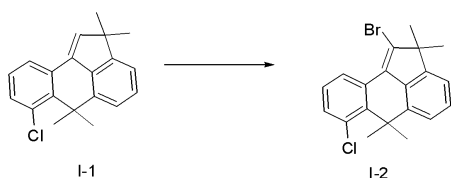
[0586] (2) 제조예 2 : 중간체 I-1의 합성



[0587]

[0588] 중간체 I(2.8 g, 0.010 mol)를 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 I-1> 1.9 g (수율 63%)을 얻었다.($m/z=294$)

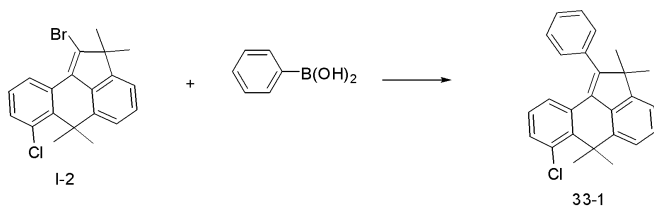
[0589] (3) 제조예 3 : 중간체 I-2의 합성



[0590]

[0591] 중간체 I-1(2.9 g, 0.010 mol)에 N-bromosuccinimide(1.8 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 14-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 I-2> 1.3 g (수율 34%)수득하였다.($m/z=373$)

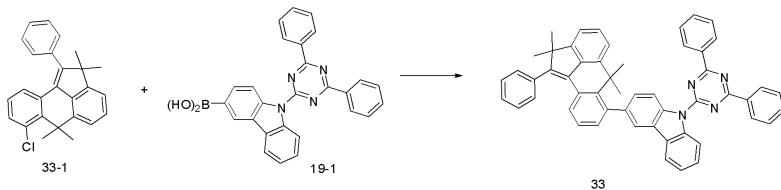
[0592] (4) 제조예 4 : 중간체 33-1의 합성



[0593]

[0594] 중간체 I-2(3.7 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid (1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 33-1> 2.2 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=370$)

[0595] (5) 제조예 5 : 화합물 33의 합성



[0596]

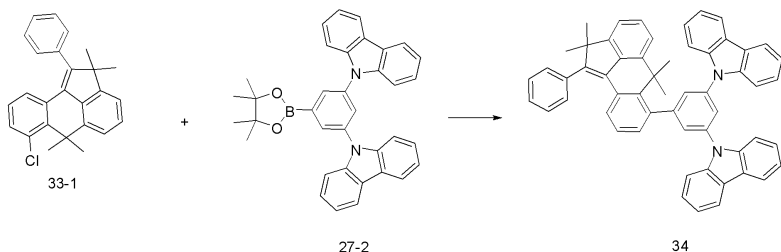
[0597] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 19-1(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 33> 4.8 g (수율 66%)을 얻었다.

[0598] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.56/d, 7.38/d, 7.36/m, 7.30/m, 7.25/m) 2H(7.41/m, 7.33/m, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s) 4H(8.28/d, 7.51/m)

[0599] LC/MS: $m/z=733[(M+1)^+]$

[0600] 실시예 34 : 화합물 34 합성

[0601] (1) 제조예 1 : 화합물 34의 합성



[0602]

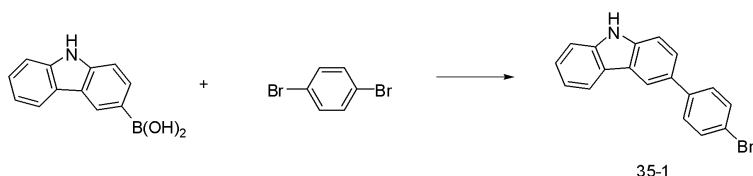
[0603] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 27-2(6.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 34> 5.2 g (수율 70%)을 얻었다.

[0604] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.56/d, 7.38/d, 7.36/m, 7.34/m, 7.31/m, 7.20/s) 2H(8.55/d, 8.12/d, 8.09/s, 7.94/d, 7.63/d, 7.50/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.29/m, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s)

[0605] LC/MS: $m/z=743[(M+1)^+]$

[0606] 실시예 35 : 화합물 35 합성

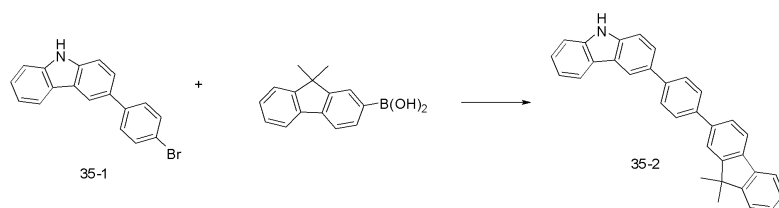
[0607] (1) 제조예 1 : 중간체 35-1의 합성



[0608]

[0609] 9H-carbazol-3-ylboronic acid(2.1 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(1.9 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 35-1> 1.8 g (수율 71%)을 얻었다.($m/z=322$)

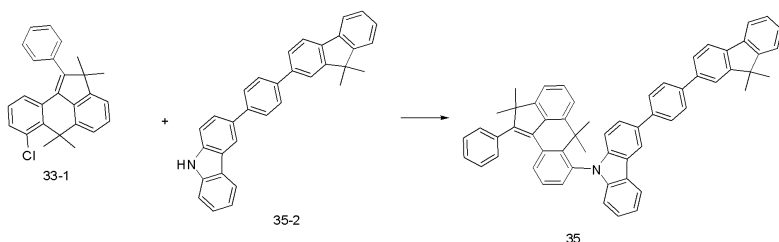
[0610] (2) 제조예 2 : 중간체 35-2의 합성



[0611]

[0612] 중간체 35-1(3.2 g, 0.010 mol)에 9,9-dimethyl-9H-fluorene-2-ylboronic acid(2.9 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 35-2> 3.1 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=435)

[0613] (3) 제조예 3 : 화합물 35의 합성



[0614]

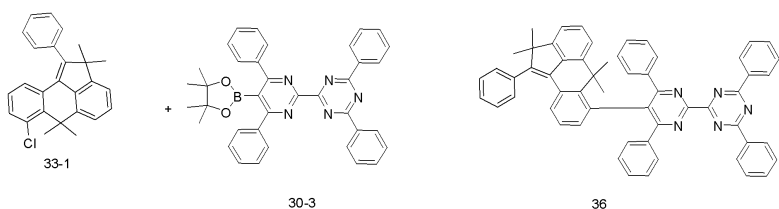
[0615] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 35-2(4.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 35> 6.0 g (수율 78%)을 얻었다.

[0616] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.93/d, 7.69/d, 7.66/m, 7.63/d, 7.55/d, 7.42/d, 7.38/m, 7.36/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.28/m, 7.25/m, 7.11/d) 2H(7.87/d, 7.77/s, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.69/s) 4H(7.25/d, 1.72/s)

[0617] LC/MS: m/z=771[(M+1)⁺]

[0618] 실시예 36 : 화합물 36 합성

[0619] (1) 제조예 1 : 화합물 36의 합성



[0620]

[0621] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 30-3 (6.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 36> 5.3 g (수율 67%)을 얻었다.

[0622] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.56/d, 7.38/d, 7.36/m, 7.33/m, 7.30/m) 2H(7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s) 4H(8.28/d, 7.79/d, 7.41/m) 8H(7.51/m)

[0623] LC/MS: m/z=798[(M+1)⁺]

[0624] 실시예 37 : 화합물 37 합성

[0625] (1) 제조예 1 : 중간체 37-1의 합성

37-1

[0626]

[0627] 2-bromo-3,10-dihydroimidazo[4,5-a]carbazole(2.9 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 37-1> 2.8 g (수율 77%)을 얻었다. (m/z=362)

[0628] (2) 제조예 2 : 중간체 37-2의 합성

Chemical reaction scheme showing the synthesis of compound 37-2 from compound 37-1 and phenylboronic acid.

Compound 37-1 (a benzimidazole derivative with a bromine atom at the 2-position and a phenyl group on the nitrogen) reacts with phenylboronic acid ($\text{C}_6\text{H}_5\text{B}(\text{OH})_2$) to form compound 37-2 (the corresponding 2-phenylbenzimidazole derivative).

[0629]

[0630] 중간체 37-1(3.6 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사 용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 37-2> 2.6 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=359)

[0631] (3) 제조예 3 : 중간체 37-3의 합성

Chemical reaction scheme showing the synthesis of compound 37-3 from compound 37-2 and 1,4-dibromobenzene.

Compound 37-2 (a fluorene derivative with a phenyl group at position 9 and a 2-phenyl-1H-indol-3-yl group at position 2) reacts with 1,4-dibromobenzene (Br-C₆H₄-Br) to form compound 37-3 (the same fluorene derivative as 37-2, but with a 4-bromophenyl group at position 2 instead of the indolyl group).

[0632]

[0633] 중간체 37-2(3.6 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조에 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 37-3> 4.1 g (수율 80%)을 얻었다.(m/z=514)

[0634] (4) 제조예 4 : 중간체 37-4의 합성

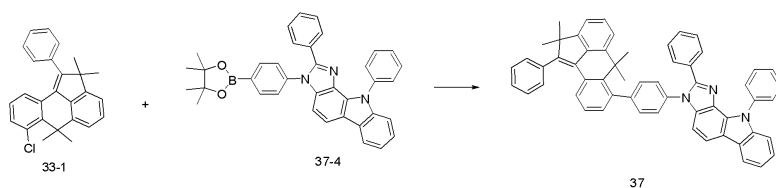
Chemical reaction scheme showing the synthesis of compound 37-4 from compound 37-3 and tetrakis(trimethylsiloxy)borane.

Compound 37-3 (4-bromo-1-(2-phenyl-1H-indol-3-yl)-4-phenyl-1H-pyrazole) reacts with tetrakis(trimethylsiloxy)borane to form compound 37-4 (4-(4-(2-phenyl-1H-indol-3-yl)-4-phenyl-1H-pyrazol-1-yl)phenylboronic acid pinacol ester).

[0635]

[0636] 중간체 37-3(5.1 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)dibron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 37-4> 4.0 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=561)

[0637] (5) 제조예 5 : 화합물 37의 합성



[0638]

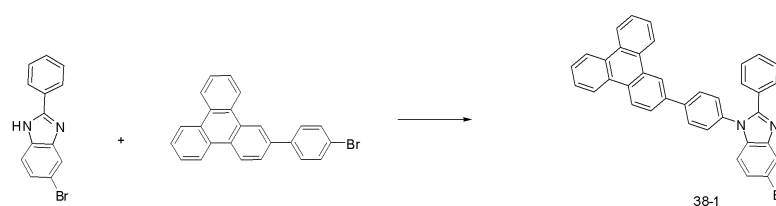
[0639] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 37-4(6.7 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 37> 5.0 g (수율 65%)을 얻었다.

[0640] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.22/d, 7.94/d, 7.85/d, 7.58/m, 7.56/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.38/d, 7.36/m, 7.30/m, 7.25/m) 2H(8.28/d, 7.79/d, 7.68/d, 7.51/m, 7.50/d, 7.33/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s) 3H(7.19/m)

[0641] LC/MS: $m/z=770[(M+1)^+]$

[0642] 실시예 38 : 화합물 38 합성

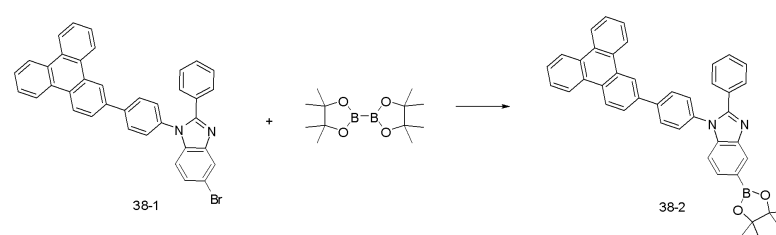
[0643] (1) 제조예 1 : 중간체 38-1의 합성



[0644]

[0645] 5-bromo-2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole(2.7 g, 0.010 mol)에 2-(4-bromophenyl)triphenylene(3.8 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 38-1> 4.7 g (수율 81%)을 얻었다.($m/z=575$)

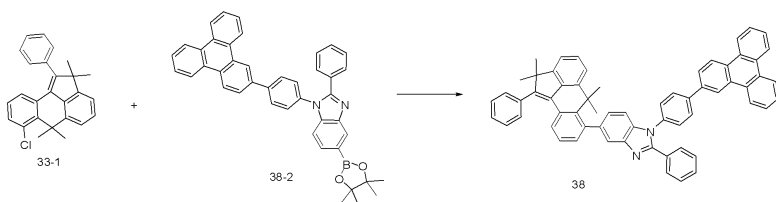
[0646] (2) 제조예 2 : 중간체 38-2의 합성



[0647]

[0648] 중간체 38-1(5.8 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 38-2> 4.5 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=622$)

[0649] (3) 제조예 3 : 화합물 38의 합성



[0650]

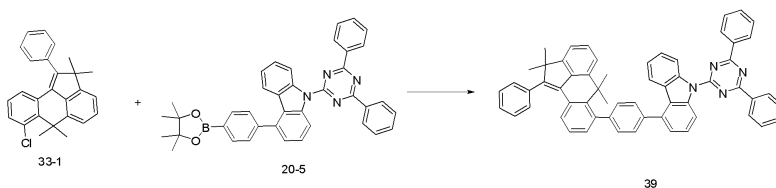
[0651] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 38-2(7.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 38> 6.0 g (수율 72%)을 얻었다.

[0652] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.07/d, 8.04/d, 7.92/s, 7.56/d, 7.41/m, 7.38/d, 7.36/m, 7.33/m, 7.30/m) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.79/d, 7.68/d, 7.51/m, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s)

[0653] LC/MS: $m/z=832[(M+1)^+]$

[0654] 실시예 39 : 화합물 39 합성

[0655] (1) 제조예 1 : 화합물 39의 합성



[0656]

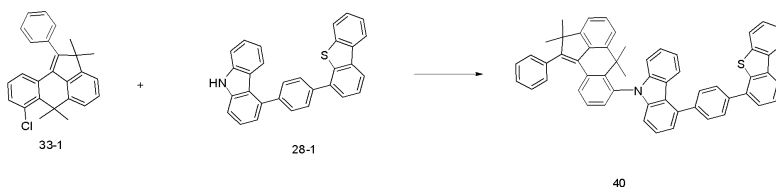
[0657] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 20-5(7.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 39> 5.0 g (수율 62%)을 얻었다.

[0658] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1h(8.55/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.56/d, 7.43/m, 7.38/d, 7.36/m, 7.30/m, 7.25/m) 2H(7.41/m, 7.33/m, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s) 4H(8.28/d, 7.51/m, 7.25/d)

[0659] LC/MS: $m/z=810[(M+1)^+]$

[0660] 실시예 40 : 화합물 40 합성

[0661] (1) 제조예 1 : 화합물 40의 합성



[0662]

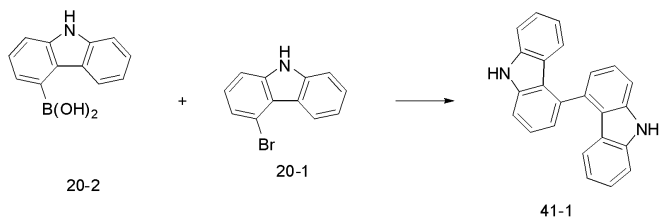
[0663] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 28-1(4.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 40> 6.1 g (수율 80%)을 얻었다.

[0664] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.66/m, 7.59/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.43/m, 7.42/d, 7.36/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.11/d) 2H(7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s) 4H(7.25/d)

[0665] LC/MS: $m/z=761[(M+1)^+]$

[0666] 실시예 41 : 화합물 41 합성

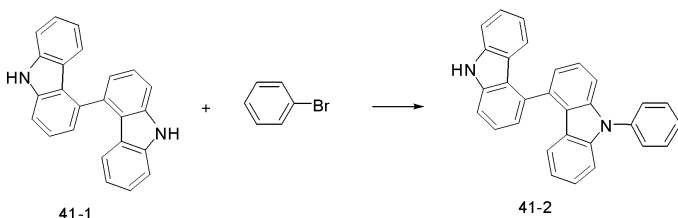
[0667] (1) 제조예 1 : 중간체 41-1의 합성



[0668]

[0669] 중간체 20-2(2.1 g, 0.010 mol)에 중간체 20-1(2.0 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 41-1> 2.4 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=332$)

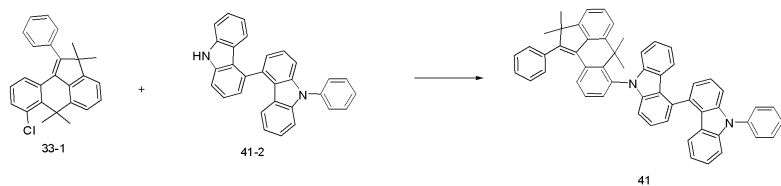
[0670] (2) 제조예 2 : 중간체 41-2의 합성



[0671]

[0672] 중간체 41-1(3.3 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 41-2> 3.4 g (수율 83%)을 얻었다.($m/z=408$)

[0673] (3) 제조예 3 : 화합물 41의 합성



[0674]

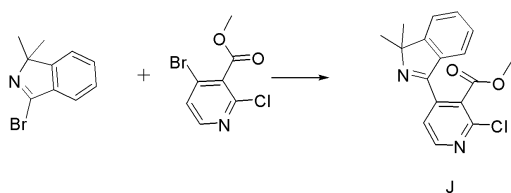
[0675] 중간체 33-1(3.7 g, 0.010 mol)에 중간체 41-2(4.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 41> 5.7 g (수율 77%)을 얻었다.

[0676] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.94/d, 7.90/d, 7.79/d, 7.66/m, 7.63/d, 7.59/d, 7.50/m, 7.45/m, 7.43/m, 7.42/d, 7.39/m, 7.36/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.29/m, 7.25/m, 7.11/d) 2H(7.58/m, 7.50/d, 7.19/m, 7.12/d, 6.95/d, 1.72/s, 1.69/s)

[0677] LC/MS: $m/z=743[(M+1)^+]$

[0678] 실시예 42 : 화합물 42 합성

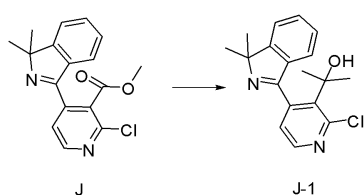
[0679] (1) 제조예 1 : 중간체 J의 합성



[0680]

[0681] 3-bromo-1,1-dimethyl-1H-indole(2.2 g, 0.010 mol)에 methyl 4-bromo-2-chloronicotinate(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 J> 1.3 g (수율 40%)을 얻었다.(m/z=314)

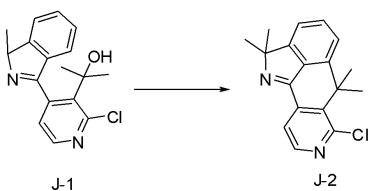
[0682] (2) 제조예 2 : 중간체 J-1의 합성



[0683]

[0684] 중간체 J(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 J-1> 2.1 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=314)

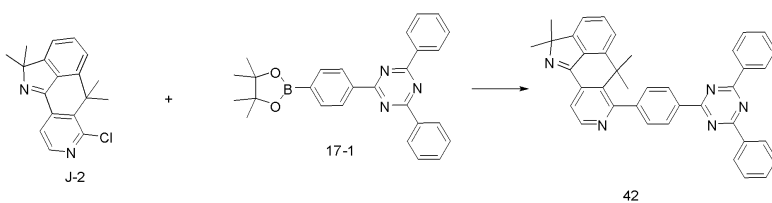
[0685] (3) 제조예 3 : 중간체 J-2의 합성



[0686]

[0687] 중간체 J-1(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 J-2> 2.0 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=297)

[0688] (4) 제조예 4 : 화합물 42의 합성



[0689]

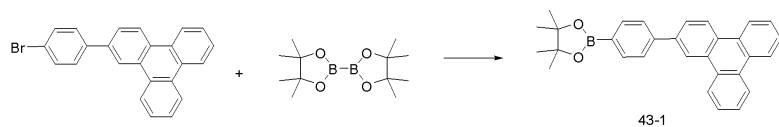
[0690] 중간체 J-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 42> 4.2 g (수율 74%)을 얻었다.

[0691] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.60/d, 7.36/m, 7.21/d) 2H(8.81/d, 7.88/d, 7.41/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.30/s) 4H(8.28/d, 7.51/m)

[0692] LC/MS: $m/z=570[(M+1)^+]$

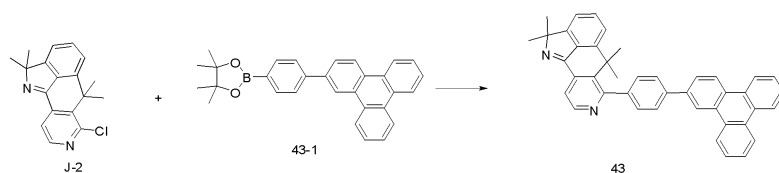
[0693] 실시예 43 : 화합물 43 합성

[0694] (1) 제조예 1 : 중간체 43-1의 합성



[0696] 2-(4-bromophenyl)triphenylene(3.8 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron (3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 43-1> 3.1 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=430$)

[0697] (2) 제조예 2 : 화합물 43의 합성



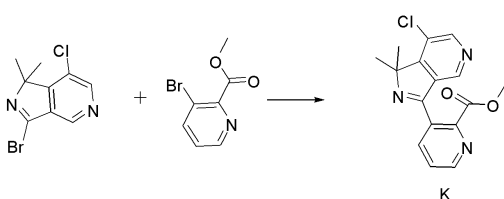
[0699] 중간체 J-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 43> 4.1 g (수율 72%)을 얻었다.

[0700] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.60/d, 8.18/d, 8.04/d, 7.36/m, 7.21/d) 2H(8.93/d, 8.81/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.88/d, 7.82/m, 7.17/d, 1.72/s, 1.30/s)

[0701] LC/MS: $m/z=565[(M+1)^+]$

[0702] 실시예 44 : 화합물 44 합성

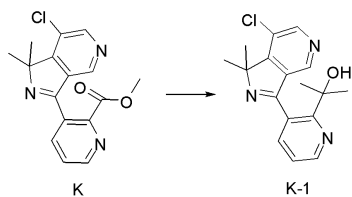
[0703] (1) 제조예 1 : 중간체 K의 합성



[0704]

[0705] 3-bromo-7-chloro-1,1-dimethyl-1H-pyrrolo[3,4-c]pyridine(2.6 g, 0.010 mol)에 methyl 3-bromopicolinate(2.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 K> 1.4 g (수율 43%)을 얻었다.($m/z=316$)

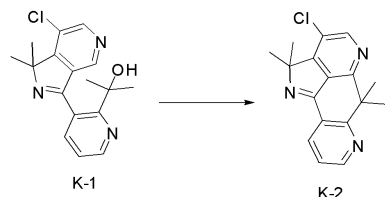
[0706] (2) 제조예 2 : 중간체 K-1의 합성



[0707]

[0708] 중간체 K(3.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 K-1> 2.1 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=316)

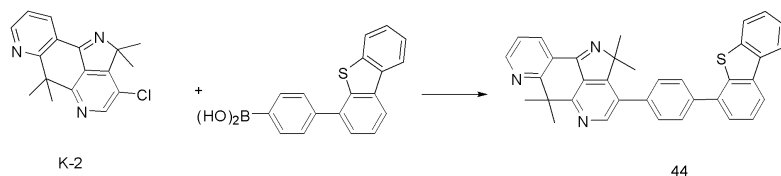
[0709] (3) 제조예 3 : 중간체 K-2의 합성



[0710]

[0711] 중간체 K-1(3.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 K-2> 1.4 g (수율 48%)을 얻었다.(m/z=297)

[0712] (4) 제조예 4 : 화합물 44의 합성



[0713]

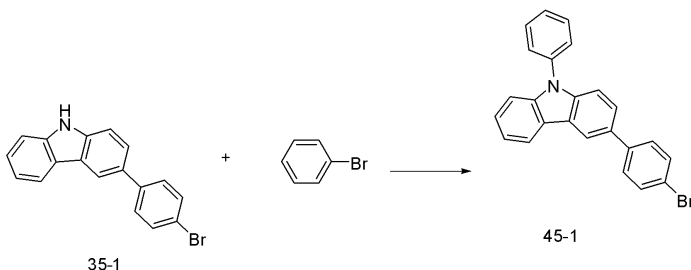
[0714] 중간체 K-2(3.0 g, 0.010 mol)에 4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)phenylboronic acid(3.7 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 44> 3.6 g (수율 69%)을 얻었다.

[0715] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.09/s, 8.68/d, 8.41/d, 8.20/d, 8.17/d, 7.98/d, 7.58/m, 7.52/d, 7.50/m, 7.49/m) 2H(1.72/s, 1.30/s) 4H(7.25/d)

[0716] LC/MS: m/z=522[(M+1)⁺]

[0717] 실시예 45 : 화합물 45 합성

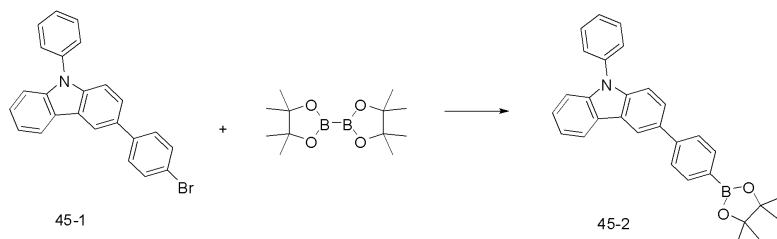
[0718] (1) 제조예 1 : 중간체 45-1의 합성



[0719]

[0720] 중간체 35-1(3.2 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 45-1> 3.1 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=398)

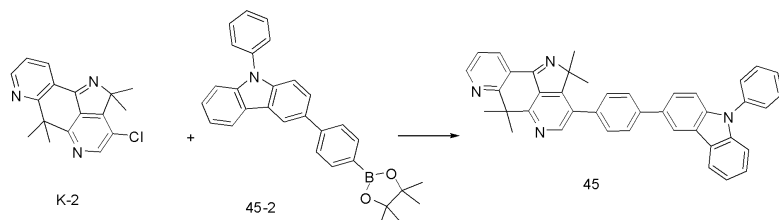
[0721] (2) 제조예 2 : 중간체 45-2의 합성



[0722]

[0723] 중간체 45-1(4.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 45-2> 3.3 g (수율 74%)을 얻었다.(m/z=445)

[0724] (3) 제조예 3 : 화합물 45의 합성



[0725]

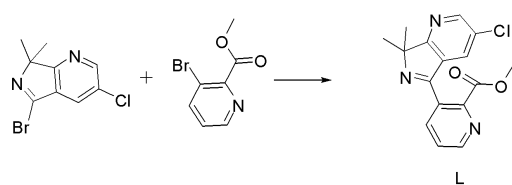
[0726] 중간체 K-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 45-2(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 45> 4.1 g (수율 71%)을 얻었다.

[0727] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.09/s, 8.68/d, 8.55/d, 8.17/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.49/m, 7.45/m, 7.33/m, 7.25/m) 2H(7.58/m, 7.50/d, 1.72/s, 1.30/s) 4H(7.25/d)

[0728] LC/MS: m/z=581[(M+1)⁺]

[0729] 실시예 46 : 화합물 46 합성

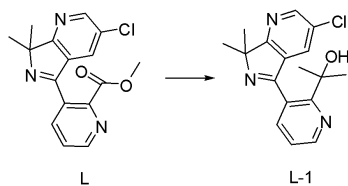
[0730] (1) 제조예 1 : 중간체 L의 합성



[0731]

[0732] 5-bromo-3-chloro-7,7-dimethyl-7H-pyrrolo[3,4-b]pyridine(2.6 g, 0.010 mol)에 methyl 3-bromopicolinate(2.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 L> 1.3 g (수율 41%)을 얻었다.(m/z=316)

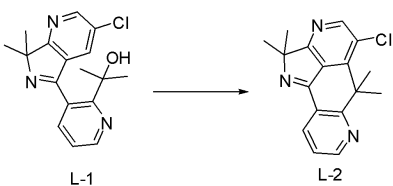
[0733] (2) 제조예 2 : 중간체 L-1의 합성



[0734]

[0735] 중간체 L(3.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 L-1> 1.6 g (수율 51%)을 얻었다.(m/z=316)

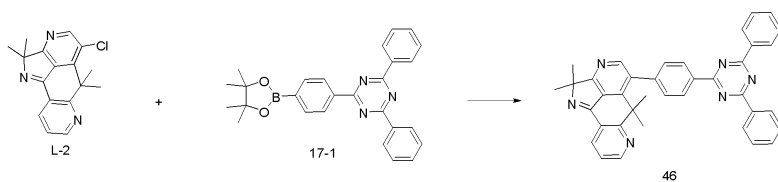
[0736] (3) 제조예 3 : 중간체 L-2의 합성



[0737]

[0738] 중간체 L-1(3.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 L-2> 2.0 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=297)

[0739] (4) 제조예 4 : 화합물 46의 합성



[0740]

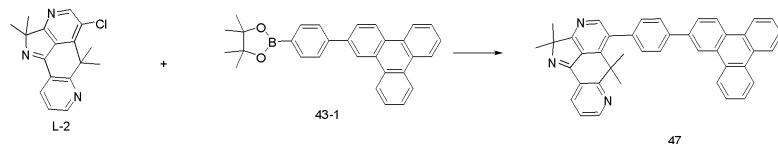
[0741] 중간체 L-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 46> 3.6 g (수율 63%)을 얻었다.

[0742] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.09/s, 8.68/d, 8.17/d, 7.49/m) 2H(7.85/d, 7.41/m, 7.25/d, 1.72/s, 1.30/s) 4H(8.28/d, 7.51/m)

[0743] LC/MS: m/z=571[(M+1)⁺]

[0744] 실시예 47 : 화합물 47 합성

[0745] (1) 제조예 1 : 화합물 47의 합성



[0746]

[0747] 중간체 L-2(3.0 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 47> 4.0 g (수율 71%)을 얻었다.

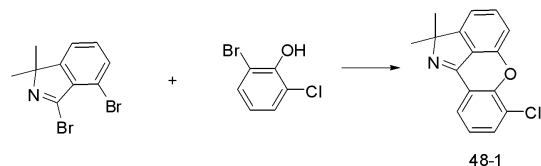
[0748] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 9.09/s, 8.68/d, 8.18/d, 8.17/d, 8.04/d, 7.49/m) 2H(8.93/d,

8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 1.72/s, 1.30/s) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=566[(M+1)^+]$

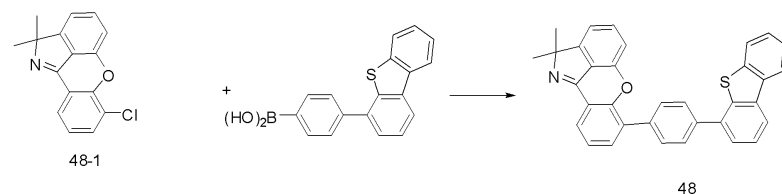
실시예 48 : 화합물 48 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 48-1의 합성



3,4-dibromo-1,1-dimethyl-1H-isoindole(3.0 g, 0.010 mol)에 2-bromo-6-chlorophenol(2.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 48-1> 1.1 g (수율 41%)을 얻었다. ($m/z=269$)

(2) 제조예 2 : 화합물 48의 합성



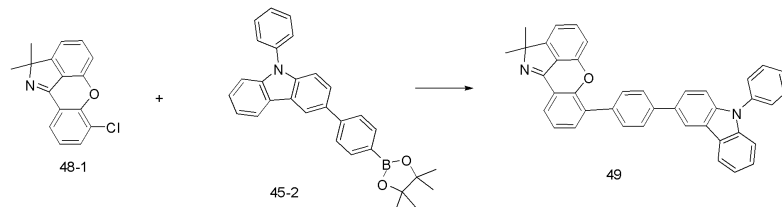
중간체 48-1(2.7 g, 0.010 mol)에 4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)phenylboronic acid(3.7 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 48> 3.6 g (수율 73%)을 얻었다.

$^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.99/d, 7.98/d, 7.90/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.47/m, 7.40/m, 7.21/d, 7.07/d) 2H(1.61/s) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=494[(M+1)^+]$

실시예 49 : 화합물 49 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 49의 합성



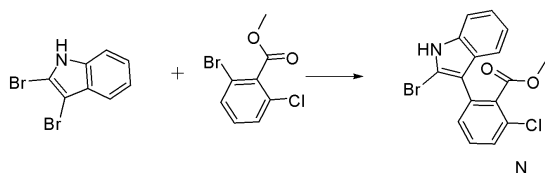
중간체 48-1(2.7 g, 0.010 mol)에 중간체 45-2(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 49> 3.5 g (수율 64%)을 얻었다.

$^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.99/d, 7.94/d, 7.90/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/s, 7.47/m, 7.45/m, 7.40/m, 7.33/m, 7.26/d, 7.25/m, 7.07/d) 2H(7.58/m, 7.50/d, 1.61/s) 4H(7.25/d)

[0764] LC/MS: $m/z=553[(M+1)^+]$

[0765] 실시예 50 : 화합물 50 합성

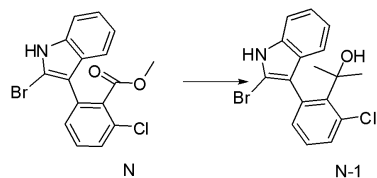
[0766] (1) 제조예 1 : 중간체 N의 합성



[0767]

[0768] 2,3-dibromo-1H-indole(2.7 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromo-6-chlorobenzoate(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 N> 1.6 g (수율 41%)을 얻었다.($m/z=364$)

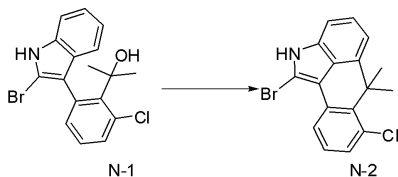
[0769] (2) 제조예 2 : 중간체 N-1의 합성



[0770]

[0771] 중간체 N(3.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 N-1> 2.1 g (수율 658%)을 얻었다.($m/z=364$)

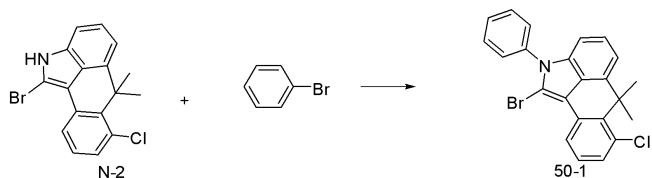
[0772] (3) 제조예 3 : 중간체 N-2의 합성



[0773]

[0774] 중간체 N-1(3.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 N-2> 2.1 g (수율 62%)을 얻었다.($m/z=346$)

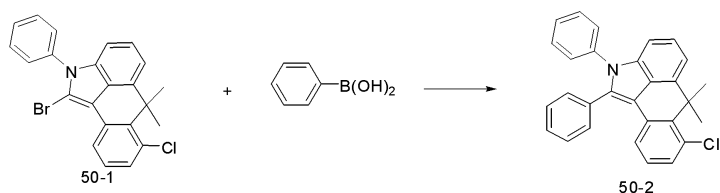
[0775] (4) 제조예 4 : 중간체 50-1의 합성



[0776]

[0777] 중간체 N-2(3.5 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 50-1> 3.2 g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=422$)

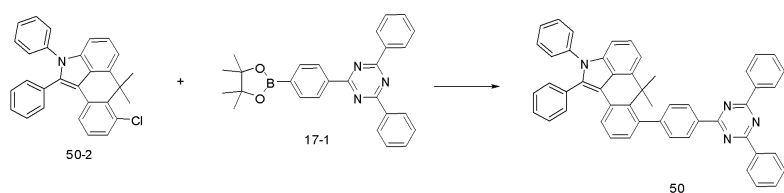
[0778] (5) 제조예 5 : 중간체 50-2의 합성



[0779]

[0780] 중간체 50-1(4.2 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 50-2> 3.0 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=419)

[0781] (6) 제조예 6 : 화합물 50의 합성



[0782]

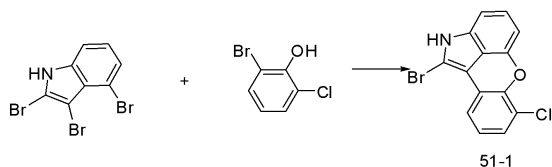
[0783] 중간체 50-2(4.2 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 50> 5.0 g (수율 72%)을 얻었다.

[0784] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.53/d, 7.45/m, 7.39/m, 7.34/m, 7.00/d) 2H(7.85/d, 7.79/d, 7.67/d, 7.58/m, 7.50/d, 7.25/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d) 6H(7.51/m)

[0785] LC/MS: m/z=693[(M+1)⁺]

[0786] 실시예 51 : 화합물 51 합성

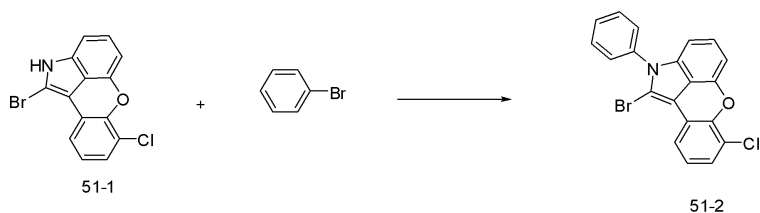
[0787] (1) 제조예 1 : 중간체 51-1의 합성



[0788]

[0789] 2,3,4-tribromo-1H-indole(3.5 g, 0.010 mol)에 2-bromo-6-chlorophenol(2.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 51-1> 2.1g (수율 65%)을 얻었다.(m/z=320)

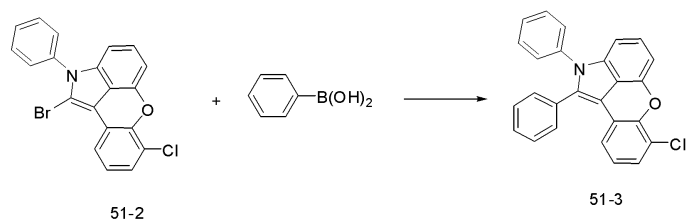
[0790] (2) 제조예 2 : 중간체 51-2의 합성



[0791]

[0792] 중간체 51-1(3.2 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 51-2> 3.0g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=396)

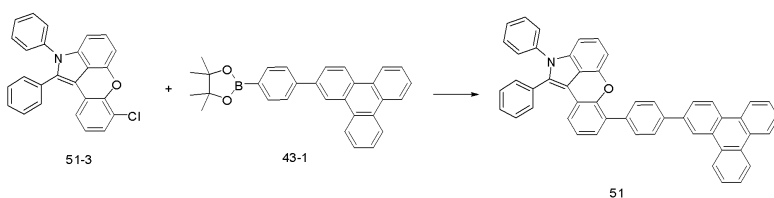
[0793] (3) 제조예 3 : 중간체 51-3의 합성



[0794]

[0795] 중간체 51-2(4.0 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 51-3> 2.8 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=393)

[0796] (4) 제조예 4 : 화합물 51의 합성



[0797]

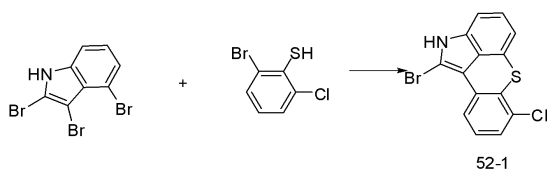
[0798] 중간체 51-3(3.9 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 51> 4.9g (수율 74%)을 얻었다.(m/z=000)

[0799] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.45/m, 7.43/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.29/m, 6.88/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.79/d, 7.71/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d) 4H(7.25/d)

[0800] LC/MS: m/z=662[(M+1)⁺]

[0801] 실시예 52 : 화합물 52 합성

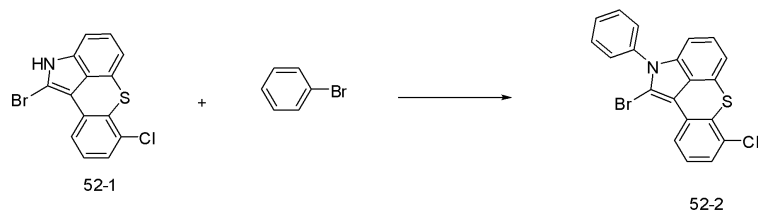
[0802] (1) 제조예 1 : 중간체 52-1의 합성



[0803]

[0804] 2,3,4-tribromo-1H-indole(3.5 g, 0.010 mol)에 2-bromo-6-chlorobenzenethiol(2.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 52-1> 1.8 g (수율 55%)을 얻었다.(m/z=336)

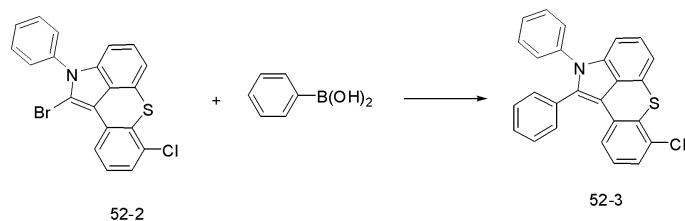
[0805] (2) 제조예 2 : 중간체 52-2의 합성



[0806]

[0807] 중간체 52-1(3.4 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 52-2> 3.2 g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=412)

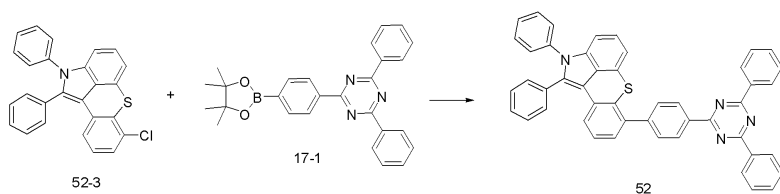
[0808] (3) 제조예 3 : 중간체 52-3의 합성



[0809]

[0810] 중간체 52-2(4.1 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 52-3> 2.9 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=409)

[0811] (4) 제조예 4 : 화합물 52의 합성



[0812]

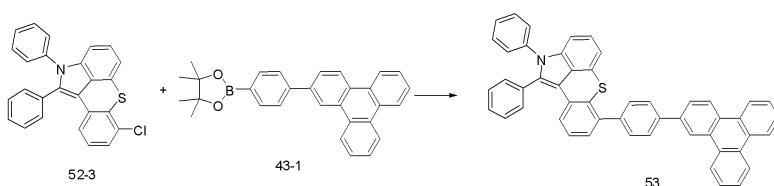
[0813] 중간체 52-3(4.1 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 52> 4.9 g (수율 72%)을 얻었다.

[0814] H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(7.45/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.31/m, 7.22/m, 7.10/d) 2H(7.85/d, 7.79/d, 7.58/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.50/d, 7.41/m, 7.25/d) 4H(8.28/d, 7.51/m)

[0815] LC/MS: m/z=683[(M+1)⁺]

[0816] 실시예 53 : 화합물 53 합성

[0817] (1) 제조예 1 : 화합물 53의 합성



[0818]

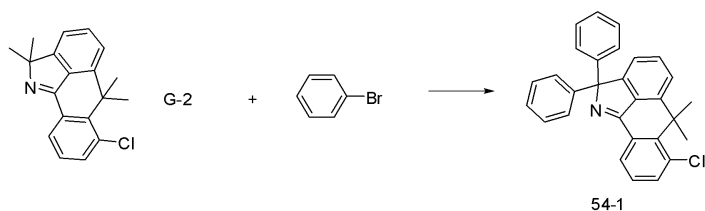
[0819] 중간체 52-3(4.1 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 53> 4.9 g (수율 73%)을 얻었다.

[0820] H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.45/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.31/m, 7.22/m, 7.10/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.79/d, 7.58/m, 7.55/d, 7.51/m, 7.50/d) 4H(7.25/d)

[0821] LC/MS: m/z=678[(M+1)⁺]

[0822] 실시예 54 : 화합물 54 합성

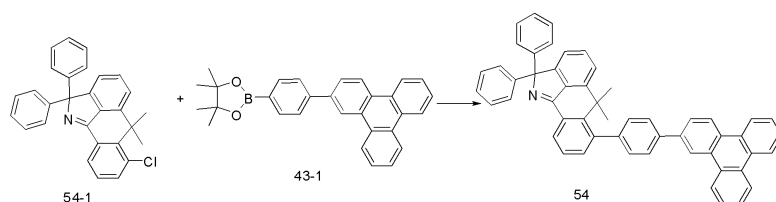
[0823] (1) 제조예 1 : 중간체 54-1의 합성



[0824]

[0825] 중간체 G-2(3.0 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(3.2 g, 0.020 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 54-1> 2.4 g (수율 58%)을 얻었다.(m/z=419)

[0826] (2) 제조예 2 : 화합물 54의 합성



[0827]

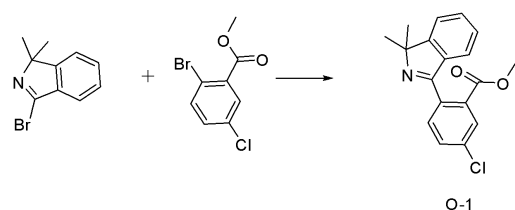
[0828] 중간체 54-1(4.2 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 54> 4.8 g (수율 72%)을 얻었다.

[0829] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.95/d, 7.86/d, 7.57/m, 7.32/m, 7.16/d, 7.10/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.26/m, 1.72/s) 4H(7.33/m, 7.25/d, 7.23/d)

[0830] LC/MS: m/z=688[(M+1)⁺]

[0831] 실시예 55 : 화합물 55 합성

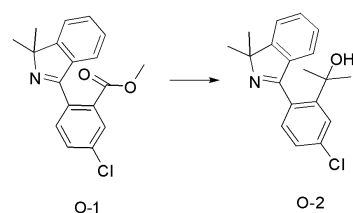
[0832] (1) 제조예 1 : 중간체 0-1의 합성



[0833]

[0834] 3-bromo-1,1-dimethyl-1H-isoindolepyridine(2.2 g, 0.010 mol)에 methyl 2-bromo-5-chlorobenzoate(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 0-1> 1.3 g (수율 41%)을 얻었다.(m/z=313)

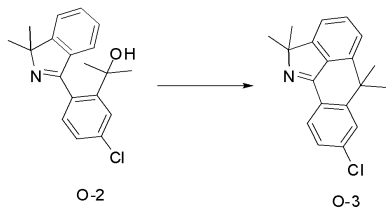
[0835] (2) 제조예 2 : 중간체 0-2의 합성



[0836]

[0837] 중간체 0-1(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 0-2> 1.8 g (수율 56%)을 얻었다.(m/z=313)

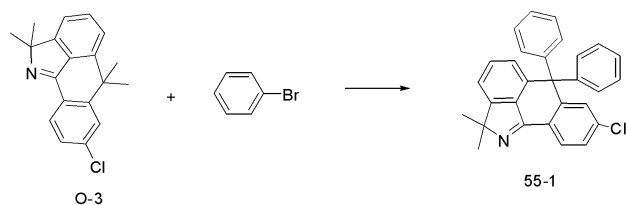
[0839] (3) 제조예 3 : 중간체 0-3의 합성



[0839]

[0840] 중간체 0-2(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 0-3> 1.9 g (수율 66%)을 얻었다.(m/z=295)

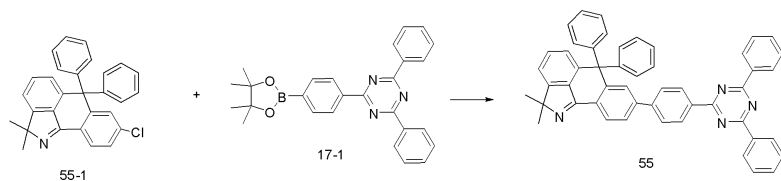
[0841] (4) 제조예 4 : 중간체 55-1의 합성



[0842]

[0843] 중간체 0-3(3.0 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(3.3 g, 0.020 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 55-1> 2.4 g (수율 57%)을 얻었다.(m/z=419)

[0844] (5) 제조예 5 : 화합물 55의 합성



[0845]

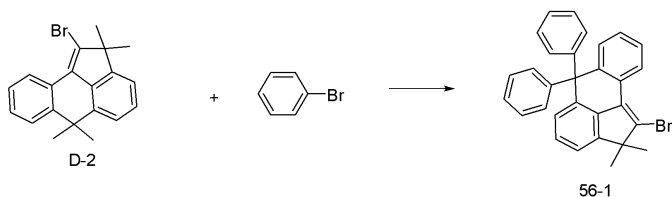
[0846] 중간체 55-1(4.2 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 55> 5.0 g (수율 72%)을 얻었다.

[0847] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.03/d, 7.92/d, 7.69/d, 7.32/d, 7.16/d) 2H(7.85/d, 7.41/m, 7.26/m, 7.25/d, 1.61/s) 4H(8.28/d, 7.51/m, 7.33/m, 7.11/d)

[0848] LC/MS: m/z=693[(M+1)⁺]

[0849] 실시예 56 : 화합물 56 합성

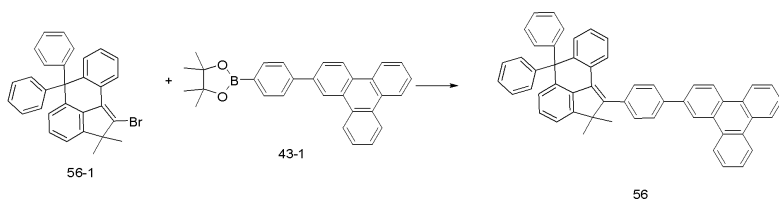
[0850] (1) 제조예 1 : 중간체 56-1의 합성



[0851]

[0852] 중간체 D-2(3.4 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(3.5 g, 0.020 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 56-1> 2.4 g (수율 51%)을 얻었다.(m/z=463)

[0853] (2) 제조예 2 : 화합물 56의 합성



[0854]

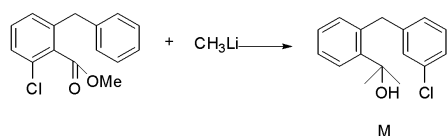
[0855] 중간체 56-3(4.6 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 56> 4.8 g (수율 70%)을 얻었다.

[0856] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.64/d, 7.56/d, 1.69/s) 4H(7.26/m) 6H(7.33/m, 7.11/d)

[0857] LC/MS: m/z=687[(M+1)⁺]

[0858] 실시예 57 : 화합물 57 합성

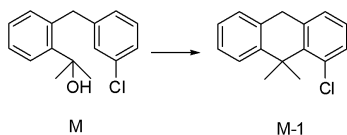
[0859] (1) 제조예 1 : 중간체 M의 합성



[0860]

[0861] methyl 2-benzyl-6-chlorobenzoate(2.6 g, 0.010 mol)에 MeLi을 dropping시킨 후 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 M> 0.8 g (수율 31%)을 얻었다.(m/z=260)

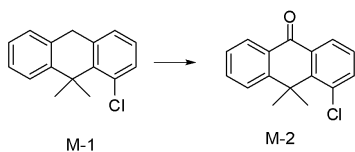
[0862] (2) 제조예 2 : 중간체 M-1의 합성



[0863]

[0864] 중간체 M(2.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 M-1> 1.5 g (수율 60%)을 얻었다.(m/z=242)

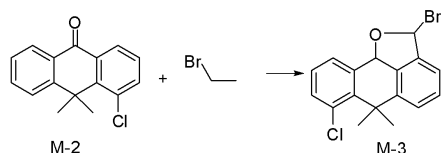
[0865] (3) 제조예 3 : 중간체 M-2의 합성



[0866]

[0867] 중간체 M-1(2.4 g, 0.010 mol)에 KMnO_4 (3.2 g, 0.0020 mol)에 MC 60 mL를 넣고 25 °C에서 48시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H_2O : EA에 층분리 후 컬럼정제 (n-Hexane : EA)하여 중간체 M-2를 1.8 g(수율 71%) 수득하였다. ($m/z=256$)

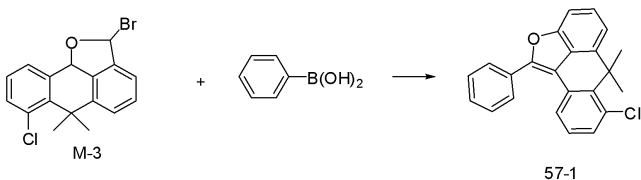
[0868] (4) 제조예 4 : 중간체 M-3의 합성



[0869]

[0870] 중간체 M-2(2.6 g, 0.010 mol)에 bromoethane(1.1 g, 0.010 mol), Potassium carbonate(2.8 g, 0.020 mol), Copper(0.1 g, 0.0020 mol), iodine copper(1.1 g, 0.006 mol)에 n-butyl ether 70 mL에 녹인 후 질소하에서 48시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 실온으로 냉각하여 H_2O : MC 층분리 후 컬럼정제 (n-Hexane : EA)하여 중간체 M-3을 2.4 g(수율 68%)수득하였다. ($m/z=349$)

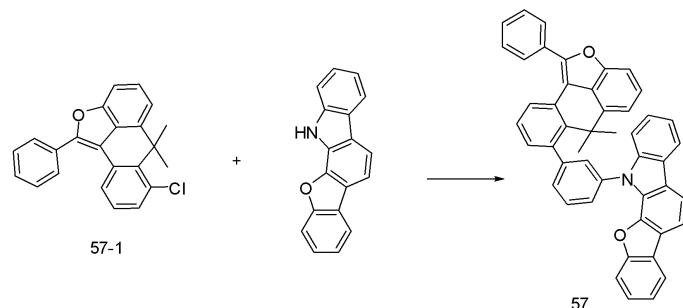
[0871] (5) 제조예 5 : 중간체 57-1의 합성



[0872]

[0873] 중간체 M-3(3.5 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 57-1> 2.5 g (수율 74%)을 얻었다. ($m/z=344$)

[0874] (6) 제조예 6 : 화합물 57의 합성



[0875]

[0876] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 12H-benzofuro[2,3-a]carbazole(2.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 57> 4.6 g (수율 72%)을 얻었다.

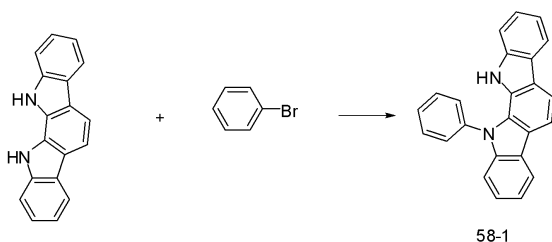
[0877] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.09/d, 7.66/d, 7.53/d, 7.52/m, 7.51/m, 7.48/d, 7.46/d,

7.41/m, 7.39/m, 7.38/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.22/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.89/d, 7.67/d, 7.51/m, 1.72/s)

LC/MS: $m/z=642[(M+1)^+]$

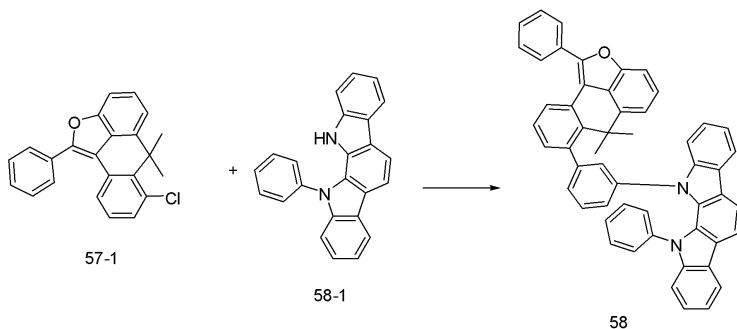
실시예 58 : 화합물 58 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 58-1의 합성



11,12-dihydroindolo[2,3-a]carbazole(2.6 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 58-1> 2.6 g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=332$)

(2) 제조예 2 : 화합물 58의 합성



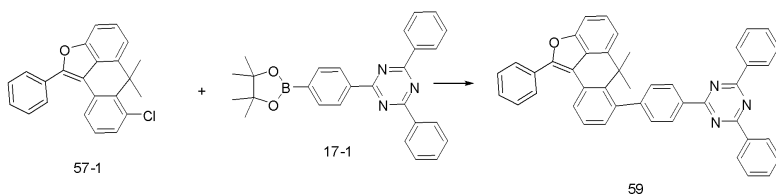
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 58-1(3.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 58> 5.6 g (수율 78%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 1H(8.12/d, 8.09/d, 7.57/d, 7.52/d, 7.46/m, 7.45/m, 7.42/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/s) 2H(8.55/d, 8.10/d, 7.94/d, 7.67/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.33/m, 7.25/m, 1.72/s)

LC/MS: $m/z=717[(M+1)^+]$

실시예 59 : 화합물 59 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 59의 합성



중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동

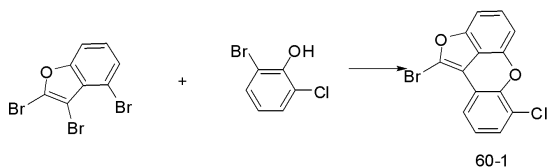
일한 방법으로 합성하여 <화합물 59> 4.7 g (수율 76%)을 얻었다.

H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.48/d, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.85/d, 7.67/d, 7.51/m, 7.25/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d, 7.51/m)

LC/MS: $m/z=618[(M+1)^+]$

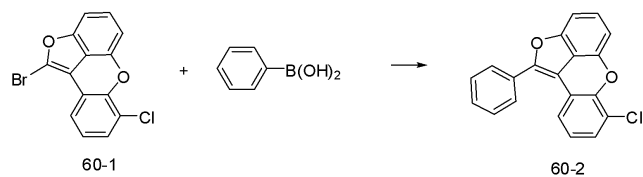
실시예 60 : 화합물 60 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 60-1의 합성



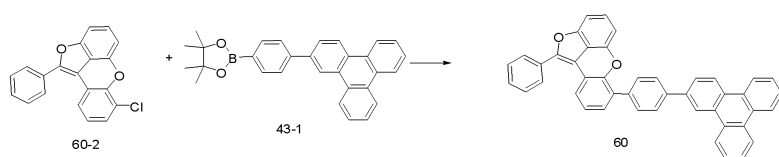
2,3,4-tribromobenzofuran(3.5 g, 0.010 mol)에 2-bromo-6-chlorophenol(2.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 60-1> 1.8g (수율 55%)을 얻었다.($m/z=321$)

(2) 제조예 2 : 중간체 60-2의 합성



중간체 60-1(3.2 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 60-2> 2.4 g (수율 76%)을 얻었다.($m/z=318$)

(3) 제조예 3 : 화합물 60의 합성



중간체 60-2(3.2 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 60> 4.1 g (수율 69%)을 얻었다.

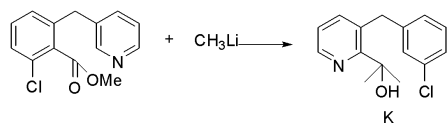
H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.41/m, 7.38/d, 7.34/m, 7.29/m, 7.13/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.71/d, 7.51/m) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=587[(M+1)^+]$

실시예 61 : 화합물 61 합성

[0907]

(1) 제조예 1 : 중간체 K의 합성



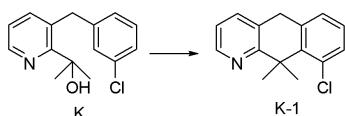
[0908]

[0909]

methyl 2-chloro-6-(pyridin-3-ylmethyl)benzoate(5.2 g, 0.020 mol)에 MeLi을 dropping시킨 후 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 K> 1.5 g (수율 29%)을 얻었다.(m/z=261)

[0910]

(2) 제조예 2 : 중간체 K-1의 합성



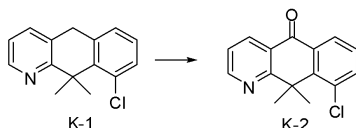
[0911]

[0912]

중간체 K(2.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (3)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 K-1> 1.5 g (수율 60%)을 얻었다.(m/z=242)

[0913]

(3) 제조예 3 : 중간체 K-2의 합성



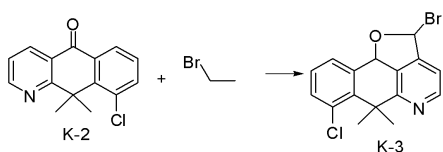
[0914]

[0915]

중간체 K-1(2.4 g, 0.010 mol)에 KMnO₄(3.2 g, 0.0020 mol)에 MC 60 mL를 넣고 25 °C에서 48시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H₂O : EA에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane : EA)하여 중간체 K-2를 1.7 g(수율 68%) 수득하였다. (m/z=256)

[0916]

(4) 제조예 4 : 중간체 K-3의 합성



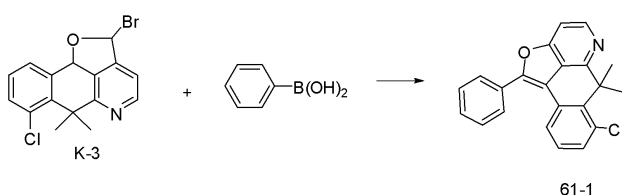
[0917]

[0918]

중간체 K-2(2.6 g, 0.010 mol)에 bromoethane(1.1 g, 0.010 mol), Potassium carbonate(2.8 g, 0.020 mol), Copper(0.1 g, 0.0020 mol), iodine copper(1.1 g, 0.006 mol)에 n-butyl ether 70 mL에 녹인 후 질소하에서 48시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 실온으로 냉각하여 H₂O : MC 층분리 후 컬럼정제 (n-Hexane : EA)하여 중간체 K-3을 2.2 g(수율 62%)수득하였다.(m/z=351)

[0919]

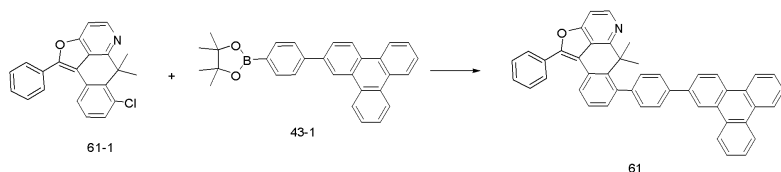
(5) 제조예 5 : 중간체 61-1의 합성



[0920]

[0921] 중간체 K-3(3.5 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 61-1> 2.4 g (수율 70%)을 얻었다.(m/z=345)

[0922] (6) 제조예 6 : 화합물 61의 합성



[0923]

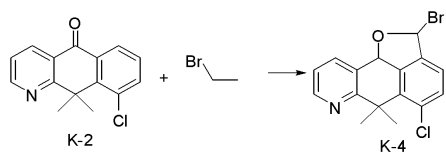
[0924] 중간체 61-1(3.5 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 61> 4.4 g (수율 72%)을 얻었다.

[0925] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.43/d, 8.18/d, 8.04/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.18/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.67/d, 7.51/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[0926] LC/MS: m/z=614[(M+1)⁺]

[0927] 실시예 62 : 화합물 62 합성

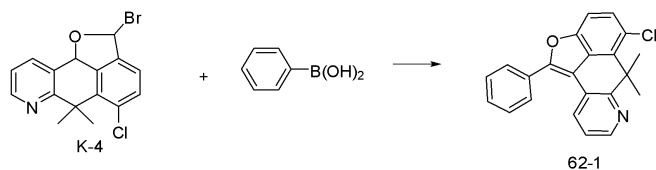
[0928] (1) 제조예 1 : 중간체 K-4의 합성



[0929]

[0930] 중간체 K-2(2.6 g, 0.010 mol)에 bromoethane(1.1 g, 0.010 mol), Potassium carbonate(2.8 g, 0.020 mol), Copper(0.1 g, 0.0020 mol), iodine copper(1.1 g, 0.006 mol)에 n-butyl ether 70 mL에 녹인 후 질소하에서 48시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 실온으로 냉각하여 H₂O : MC 층분리 후 컬럼정제 (n-Hexane : EA)하여 중간체 K-4을 2.1 g(수율 60%)수득하였다.(m/z=351)

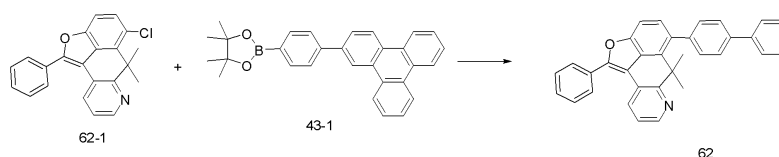
[0931] (2) 제조예 2 : 중간체 62-1의 합성



[0932]

[0933] 중간체 K-4(3.5 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 62-1> 2.5 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=345)

[0934] (3) 제조예 3 : 화합물 62의 합성



[0935]

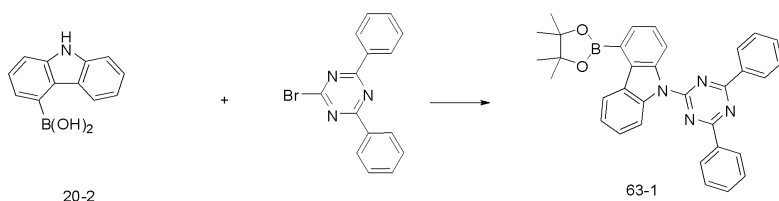
[0936] 중간체 K-4(3.5 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 62> 4.6 g (수율 75%)을 얻었다.

[0937] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.39/d, 8.18/d, 8.04/d, 7.89/d, 7.73/d, 7.54/d, 7.41/m) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.51/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[0938] LC/MS: $m/z=614$ [$(M+1)^+$]

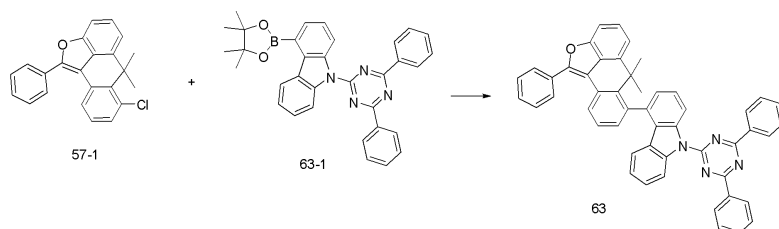
[0939] 실시예 63 : 화합물 63 합성

[0940] (1) 제조예 1 : 중간체 63-1의 합성



[0941] 중간체 20-2(2.1 g, 0.010 mol)에 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(2.6 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 63-1> 4.0g (수율 77%)($m/z=524$)

[0943] (2) 제조예 2 : 화합물 63의 합성



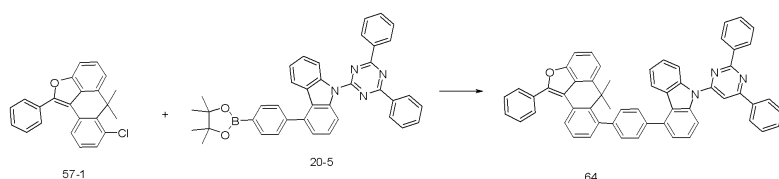
[0944] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 63-1(6.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 63> 4.4 g (수율 62%)을 얻었다.

[0945] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.48/d, 7.43/m, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d) 6H(7.51/m)

[0947] LC/MS: $m/z=707$ [$(M+1)^+$]

[0948] 실시예 64 : 화합물 64 합성

[0949] (1) 제조예 1 : 화합물 64의 합성



[0950] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 20-5(7.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 64> 5.9 g (수율 76%)을 얻었다.

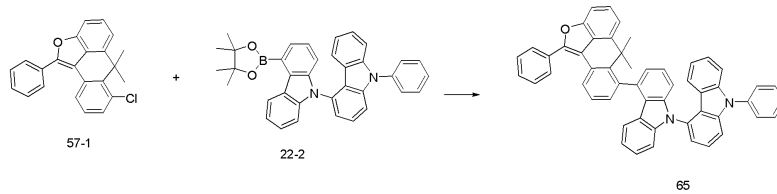
[0952] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.59/d, 7.48/d, 7.43/m, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m,

7.25/m, 7.00/d) 2H(8.28/d, 8.10/d, 7.67/d, 1.72/s) 3H(7.79/d, 7.41/m) 4H(7.25/d) 6H(7.51/m)

LC/MS: $m/z=782[(M+1)^+]$

실시예 65 : 화합물 65 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 65의 합성



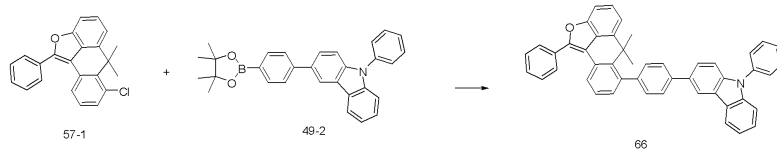
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 22-2(6.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 65> 5.2 g (수율 72%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.79/d, 7.63/d, 7.59/d, 7.48/d, 7.43/m, 7.39/m, 7.37/m, 7.30/m, 7.23/d, 7.00/d) 2H(8.55/d, 8.10/d, 7.94/d, 7.67/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.41/m, 7.33/m, 7.25/m, 1.72/s)

LC/MS: $m/z=717[(M+1)^+]$

실시예 66 : 화합물 66 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 66의 합성



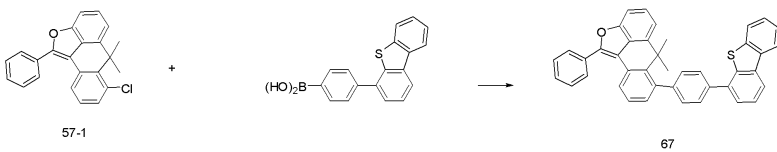
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 49-2(2.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 66> 4.1 g (수율 72%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.48/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.39/m, 7.30/m, 7.29/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 1.72/s) 4H(7.25/d)

LC/MS: $m/z=628[(M+1)^+]$

실시예 67 : 화합물 67 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 67의 합성



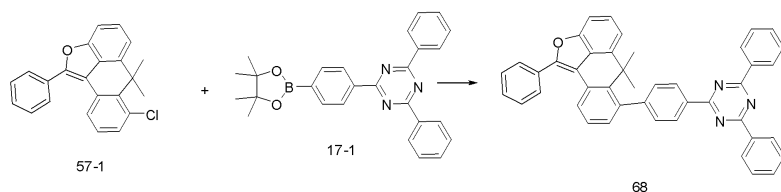
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)phenylboronic acid(3.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 67> 3.3g (수율 58%)을 얻었다.

[0970] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.48/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 7.51/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[0971] LC/MS: $m/z=569[(M+1)^+]$

[0972] 실시예 68 : 화합물 68 합성

[0973] (1) 제조예 1 : 화합물 68의 합성



[0974]

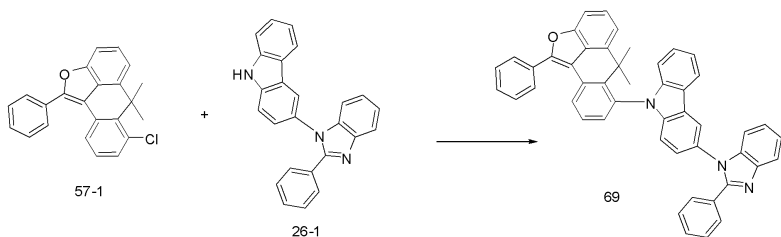
[0975] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 17-1(5.2 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 68> 3.8 g (수율 61%)을 얻었다.

[0976] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.48/d, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.85/d, 7.67/d, 7.25/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d) 6H(7.51/m)

[0977] LC/MS: $m/z=618[(M+1)^+]$

[0978] 실시예 69 : 화합물 69 합성

[0979] (1) 제조예 1 : 화합물 69의 합성



[0980]

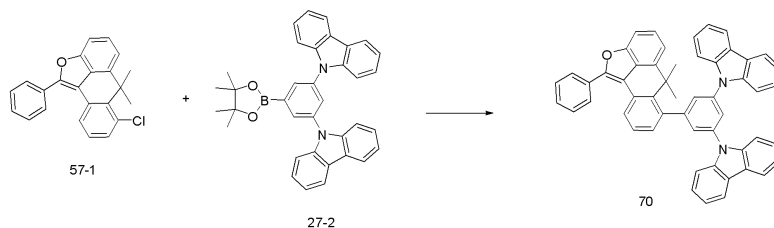
[0981] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 26-1(3.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 69> 4.3 g (수율 65%)을 얻었다.

[0982] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.56/d, 8.55/d, 7.94/d, 7.71/d, 7.63/d, 7.59/d, 7.50/s, 7.48/d, 7.31/d, 7.30/m, 7.25/m, 7.22/d, 7.00/d) 2H(8.28/d, 8.10/d, 7.41/m, 7.33/m, 7.22/m, 1.72/s) 4H(7.51/m)

[0983] LC/MS: $m/z=668[(M+1)^+]$

[0984] 실시예 70 : 화합물 70 합성

[0985] (1) 제조예 1 : 화합물 70의 합성



[0986]

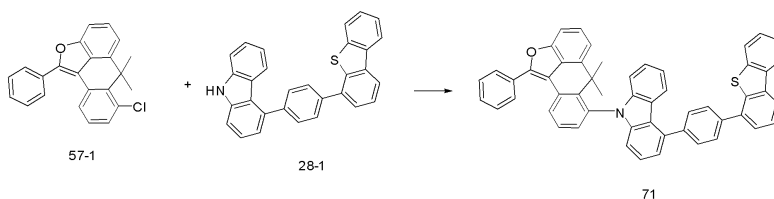
[0987] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 27-2(6.4 g, 0.011 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 70> 4.4g (수율 62%)을 얻었다.

[0988] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.48/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.30/m, 7.20/s, 7.00/d) 2H(8.55/d, 8.12/d, 8.10/d, 8.09/s, 7.94/d, 7.67/d, 7.63/d, 7.51/m, 7.50/m, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m, 1.72/s)

[0989] LC/MS: $m/z=717[(M+1)^+]$

[0990] 실시예 71 : 화합물 71 합성

[0991] (1) 제조예 1 : 화합물 71의 합성



[0992]

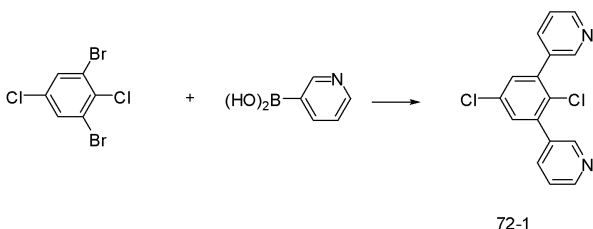
[0993] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 28-1(4.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 71> 5.6 g (수율 76%)을 얻었다.

[0994] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.59/d, 7.52/m, 7.51/m, 7.50/m, 7.48/d, 7.43/m, 7.41/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.22/d, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.51/m, 7.33/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[0995] LC/MS: $m/z=734[(M+1)^+]$

[0996] 실시예 72 : 화합물 72 합성

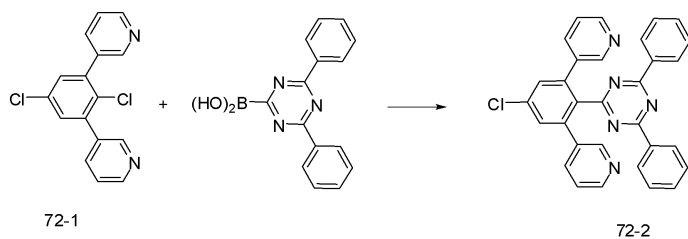
[0997] (1) 제조예 1 : 중간체 72-1의 합성



[0998]

[0999] 1,3-dibromo-2,5-dichlorobenzene(3.0 g, 0.010 mol)에 pyridin-3-ylboronic acid(2.8 g, 0.024 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 72-1> 2.2g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=301$)

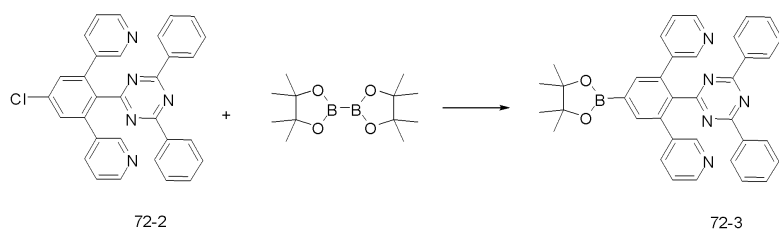
[1000] (2) 제조예 2 : 중간체 72-2의 합성



[1001]

[1002] 중간체 72-1(3.0 g, 0.010 mol)에 4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-ylboronic acid(3.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 72-2> 3.0g (수율 61%)을 얻었다.(m/z=498)

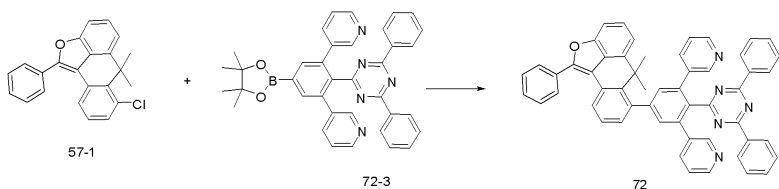
[1003] (3) 제조예 3 : 중간체 72-3의 합성



[1004]

[1005] 중간체 72-2(5.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 3.5g (수율 60%)을 얻었다.(m/z=590)

[1006] (4) 제조예 4 : 화합물 72의 합성



[1007]

[1008] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 72-3(7.1 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 72> 4.5 g (수율 57%)을 얻었다.

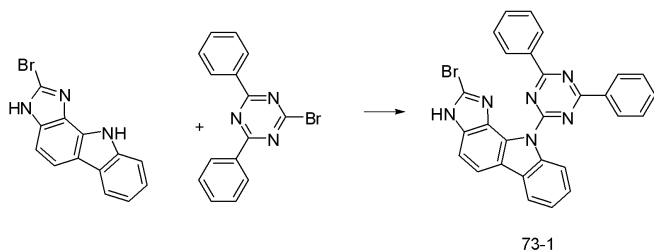
[1009] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.48/d, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(9.24/s, 8.70/d, 8.42/d, 8.10/d, 7.72/s, 7.67/d, 7.57/m, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d) 6H(7.51/m)

[1010] LC/MS: m/z=785[(M+1)⁺]

[1011] 실시예 73 : 화합물 73 합성

[1012]

(1) 제조예 1 : 중간체 73-1의 합성



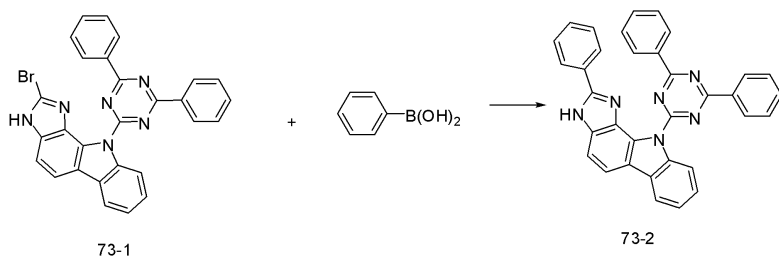
[1013]

[1014]

2-bromo-3,10-dihydroimidazo[4,5-a]carbazole(2.5 g, 0.010 mol)에 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-1> 3.7g (수율 71%)을 얻었다.(m/z=517)

[1015]

(2) 제조예 2 : 중간체 73-2의 합성



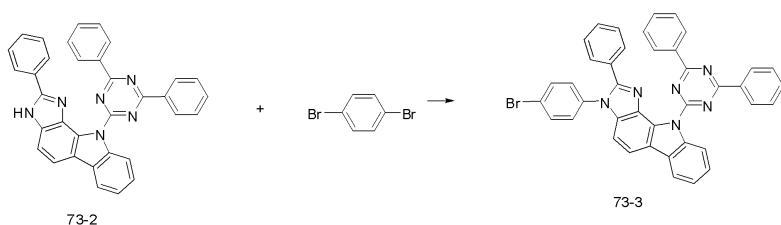
[1016]

[1017]

중간체 73-1(5.2 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(1.4 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-2> 3.7g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=514)

[1018]

(3) 제조예 3 : 중간체 73-3의 합성



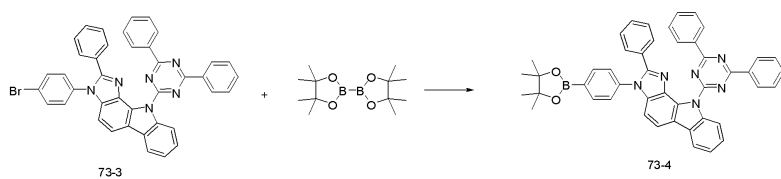
[1019]

[1020]

중간체 73-2(5.1 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-3> 5.2g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=670)

[1021]

(4) 제조예 4 : 중간체 73-4의 합성

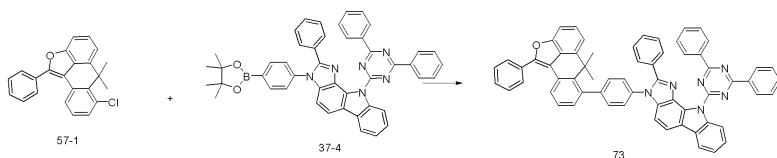


[1022]

[1023]

중간체 73-3(6.7 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-4> 4.5g (수율 63%)을 얻었다.(m/z=716)

(5) 제조예 5 : 화합물 73의 합성



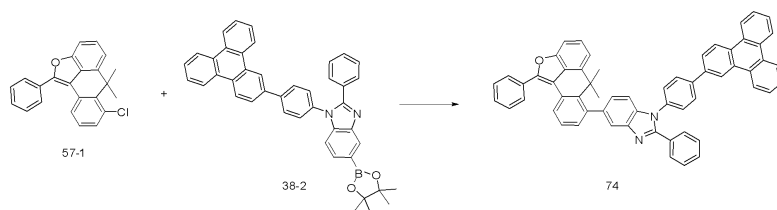
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 73-4(8.6 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 73> 6.7 g (수율 74%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.22/d, 7.94/d, 7.85/d, 7.48/d, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.79/d, 7.68/d, 7.67/d, 1.72/s) 4H(7.41/m) 6H(8.28/d) 8H(7.51/m)

LC/MS: m/z=900[(M+1)⁺]

실시예 74 : 화합물 74 합성

(1) 제조예 1 : 화합물 74의 합성



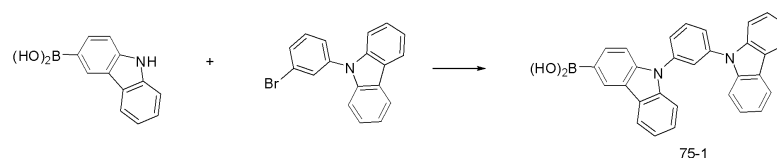
중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 38-2(7.5 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 74> 5.4g (수율 67%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.07/d, 8.04/d, 7.92/d, 7.48/d, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.79/d, 7.68/d, 7.67/d, 7.41/m, 1.72/s) 3H(8.28/d) 4H(7.51/m)

LC/MS: m/z=805[(M+1)⁺]

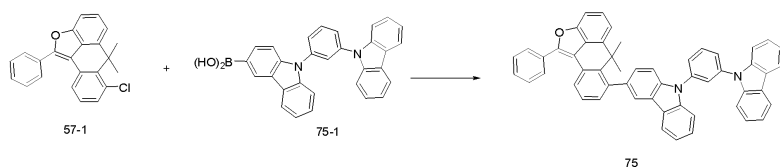
실시예 75 : 화합물 75 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 75-1의 합성



9H-carbazol-3-ylboronic acid(2.1 g, 0.010 mol)에 9-(3-bromophenyl)-9H-carbazole(2.6 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 75-1> 3.5g (수율 77%)을 얻었다.(m/z=452)

[1039] (2) 제조예 2 : 화합물 75의 합성



[1040]

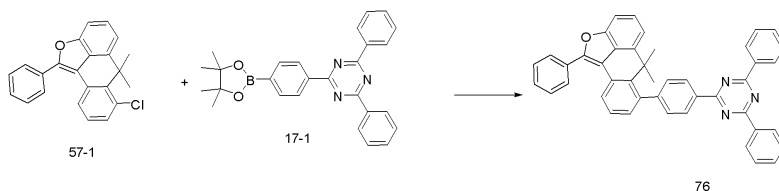
[1041] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 75-1(4.5 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 75> 4.1g (수율 72%)을 얻었다.

[1042] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.55/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.94/d, 7.67/d, 7.63/d, 7.51/m, 7.50/d, 7.50/m, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m, 1.72/s)

[1043] LC/MS: m/z=717[(M+1)⁺]

[1044] 실시예 76 : 화합물 76 합성

[1045] (1) 제조예 1 : 화합물 76의 합성



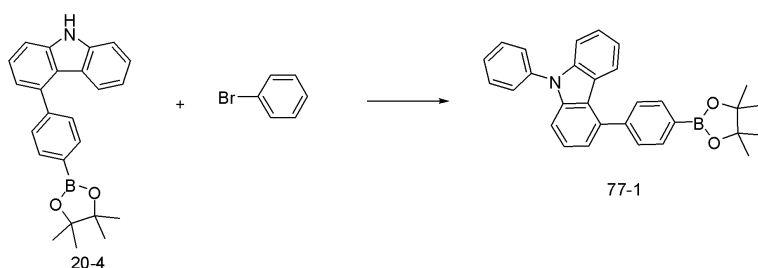
[1046]

[1047] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 77-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 76> 4.8 g (수율 77%)을 얻었다.

[1048] LC/MS: m/z=618[(M+1)⁺]

[1049] 실시예 77 : 화합물 77 합성

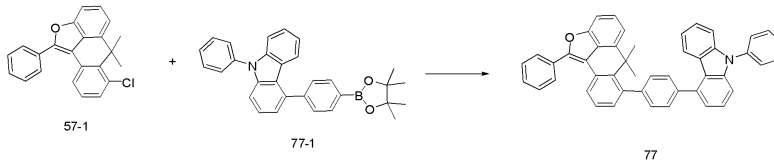
[1050] (1) 제조예 1 : 중간체 77-1의 합성



[1051]

[1052] 중간체 20-4(3.7 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 77-1> 3.1g (수율 71%)을 얻었다.(m/z=445)

[1053] (2) 제조예 2 : 화합물 77의 합성



[1054]

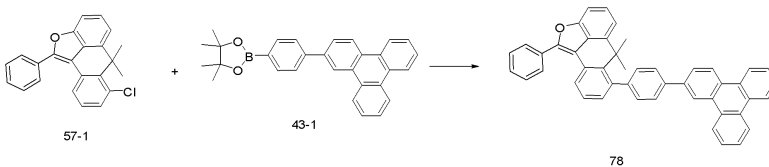
[1055] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 77-1(5.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 77> 4.5g (수율 71%)을 얻었다.

[1056] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.48/d, 7.45/m, 7.43/m, 7.41/m, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[1057] LC/MS: $m/z=628[(M+1)^+]$

[1058] 실시예 78 : 화합물 78 합성

[1059] (1) 제조예 1 : 화합물 78의 합성



[1060]

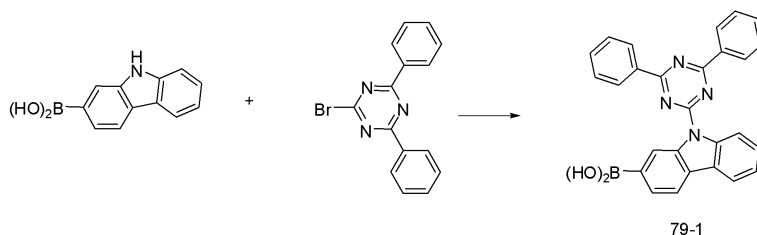
[1061] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 43-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 78> 4.1g (수율 66%)을 얻었다.

[1062] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d, 7.48/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.30/m, 7.00/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.67/d, 7.51/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[1063] LC/MS: $m/z=626[(M+1)^+]$

[1064] 실시예 79 : 화합물 79 합성

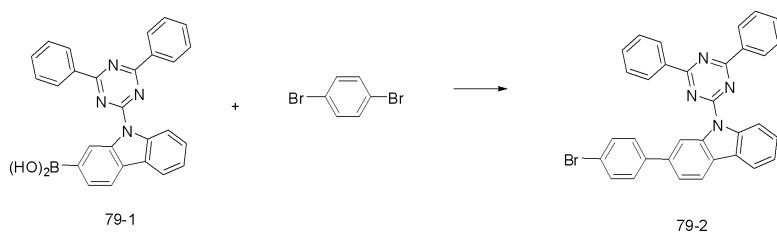
[1065] (1) 제조예 1 : 중간체 79-1의 합성



[1066]

[1067] 9H-carbazol-2-ylboronic acid(2.1 g, 0.010 mol)에 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 79-1> 3.4g (수율 77%)을 얻었다.($m/z=442$)

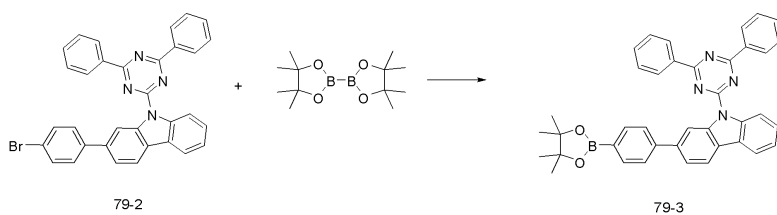
[1068] (2) 제조예 2 : 중간체 79-2의 합성



[1069]

[1070] 중간체 79-1(4.4 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromobenzene(1.9 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 79-2> 3.2g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=553)

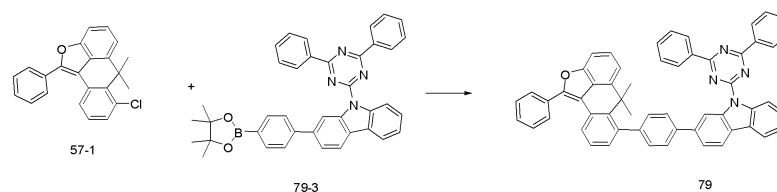
[1071] (3) 제조예 3 : 중간체 79-3의 합성



[1072]

[1073] 중간체 79-2(5.5 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 79-3> 4.3g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=600)

[1074] (4) 제조예 4 : 화합물 79의 합성



[1075]

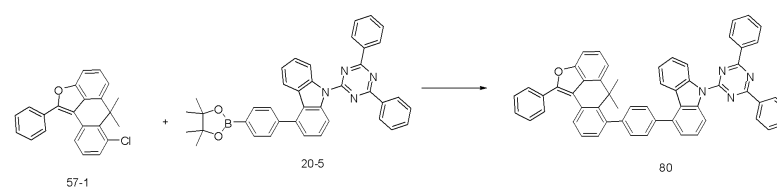
[1076] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 79-3(7.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 79> 5.5g (수율 70%)을 얻었다.

[1077] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.18/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.62/d, 7.48/d, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d, 7.25/d) 6H(7.51/m)

[1078] LC/MS: m/z=783[(M+1)⁺]

[1079] 실시예 80 : 화합물 80 합성

[1080] (1) 제조예 1 : 화합물 80의 합성



[1081]

[1082] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 20-5(7.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (5)에서 사용된 동

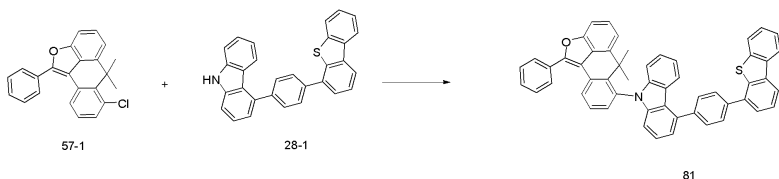
일한 방법으로 합성하여 <화합물 80> 5.7g (수율 72%)을 얻었다.

[1083] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.59/d, 7.48/d, 7.43/m, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.10/d, 7.67/d, 1.72/s) 3H(7.41/m) 4H(8.28/d, 7.25/d) 6H(7.51/m)

[1084] LC/MS: $m/z=796[(M+1)^+]$

[1085] 실시예 81 : 화합물 81 합성

[1086] (1) 제조예 1 : 화합물 81의 합성



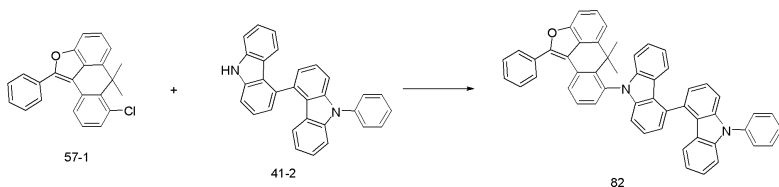
[1087] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 28-1(4.3 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 81> 5.7 g (수율 77%)을 얻었다.

[1088] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.94/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.59/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m, 7.48/d, 7.43/m, 7.41/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.22/m) 2H(8.10/d, 7.51/m, 7.33/m, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[1089] LC/MS: $m/z=734[(M+1)^+]$

[1090] 실시예 82 : 화합물 82 합성

[1091] (1) 제조예 1 : 화합물 82의 합성



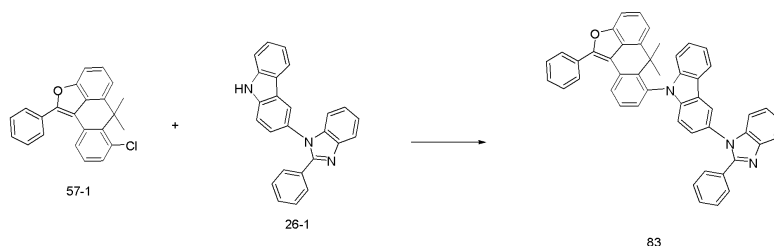
[1092] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 41-2(4.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 82> 5.7g (수율 80%)을 얻었다.

[1093] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.94/d, 7.90/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.63/d, 7.59/d, 7.50/m, 7.45/m, 7.43/m, 7.41/m, 7.39/m, 7.29/m, 7.22/d) 2H(8.10/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.33/m, 1.72/s)

[1094] LC/MS: $m/z=717[(M+1)^+]$

[1095] 실시예 83 : 화합물 83 합성

[1098] (1) 제조예 1 : 화합물 83의 합성



[1099]

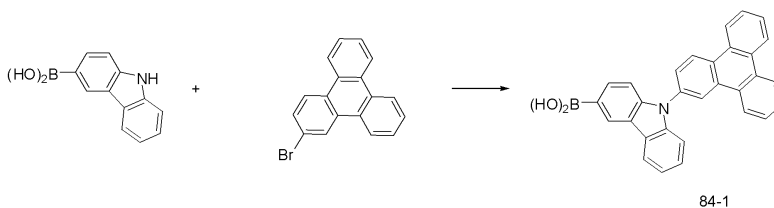
[1100] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 26-1(3.6 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 83> 4.9g (수율 73%)을 얻었다.

[1101] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.56/d, 8.55/d, 7.94/d, 7.71/d, 7.63/d, 7.59/d, 7.50/s, 7.48/d, 7.31/d, 7.30/m, 7.25/m, 7.22/d, 7.00/d) 2H(8.28/d, 8.10/d, 7.41/m, 7.33/m, 7.22/m, 1.72/s) 4H(7.51/m)

[1102] LC/MS: $m/z=668[(M+1)^+]$

[1103] 실시예 84 : 화합물 84 합성

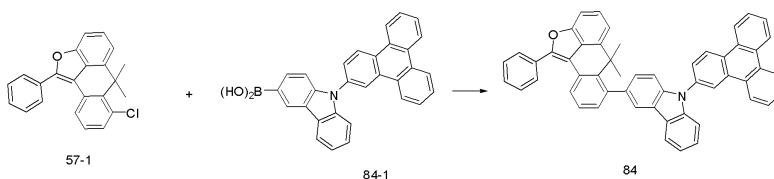
[1104] (1) 제조예 1 : 중간체 84-1의 합성



[1105]

[1106] 9H-carbazol-3-ylboronic acid(2.1 g, 0.010 mol)에 2-bromotriphenylene(3.1 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 84-1> 3.1 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=437$)

[1107] (2) 제조예 2 : 화합물 84의 합성



[1108]

[1109] 중간체 57-1(3.4 g, 0.010 mol)에 중간체 84-1(5.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 2-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 84> 4.4g (수율 63%)을 얻었다.

[1110] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.55/d, 8.18/d, 8.04/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.48/d, 7.41/m, 7.39/m, 7.33/m, 7.30/m, 7.25/m, 7.00/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 8.10/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.67/d, 7.51/m, 1.72/s)

[1111] LC/MS: $m/z=702[(M+1)^+]$

[1112] 소자 실시예 1 : 화합물 1을 정공수송재료로 하여 유기전계발광소자 제조

[1113] ITO로 코팅된 유리기판 위에 <화합물 1>을 증착하여 120 nm의 정공수송층을 형성하였으며, 이어서 도펀트로

Ir(ppy)₃을 사용하여 증착속도를 0.009 nm/sec로 증착하고, 호스트로 CBP를 사용하여 증착속도를 0.1 nm/sec로 증착하고, 증착속도 비율이 9%가 되도록 Ir(ppy)₃을 도핑하여 정공수송층 상에 발광층을 30 nm 두께로 형성하였다.

[1114] 그 위에 Balq를 10 nm 두께로 증착하여 정공이 발광층을 지나 전자수송층으로 이동하는 것을 방지하는 정공차단층을 형성하고, 그 위에 Alq₃를 증착하여 40 nm의 전자수송층을 형성하였으며, 그 위에 불화리튬을 증착하여 1 nm의 전자주입층을 형성하였다. 전자주입층 상에 알루미늄을 증착하여 120 nm의 음극을 형성하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

[1115] 이때, 각 물질의 증착속도는 유기물질인, CBP, 화합물 1, Alq₃, Balq는 0.1 nm/sec, 불화리튬은 0.01 nm/sec, 알루미늄은 0.5 nm/sec로 하였다.

[1116] 소자 실시예 2 내지 15

[1117] 상기 화합물 1 대신 하기 [표 1]에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 소자 실시예 2 내지 15의 유기전계발광소자를 제조하였다.

[1118] 소자 비교예 1

[1119] 비교예1을 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 1 대신 일반적으로 정공수송물질로 많이 사용되고 있는 NPB를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다.

[1120] 소자 실시예 16: 화합물 16을 발광층의 호스트 재료로 하여 유기전계발광소자 제조

[1121] ITO로 코팅된 유리기판 위에 NPB를 증착하여 120 nm의 정공수송층을 형성하였으며, 이어서 도펀트로 Ir(ppy)₃을 사용하여 증착속도를 0.009 nm/sec로 증착하고, 호스트로 <화합물 16>을 사용하여 증착속도를 0.1 nm/sec로 증착하고, 증착속도 비율이 9%가 되도록 Ir(ppy)₃을 도핑하여 정공수송층 상에 발광층을 30 nm 두께로 형성하였다.

[1122] 그 위에 Balq를 10 nm 두께로 증착하여 정공이 발광층을 지나 전자수송층으로 이동하는 것을 방지하는 정공차단층을 형성하고, 그 위에 Alq₃를 증착하여 40 nm의 전자수송층을 형성하였으며, 그 위에 불화리튬을 증착하여 1 nm의 전자주입층을 형성하였다. 전자주입층 상에 알루미늄을 증착하여 120 nm의 음극을 형성하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

[1123] 이때, 각 물질의 증착속도는 유기물질인, 화합물 16, NPB, Alq₃, Balq는 0.1 nm/sec, 불화리튬은 0.01 nm/sec, 알루미늄은 0.5 nm/sec로 하였다.

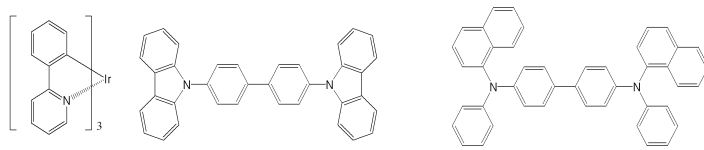
[1124] 소자 실시예 17 내지 84

[1125] 상기 화합물 16 대신 하기 [표 2]에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 소자 실시예 16과 동일한 방법으로 소자 실시예 17 내지 84의 유기전계발광소자를 제조하였다.

[1126] 소자 비교예 2

[1127] 비교예 2를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 16 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다.

[1128] 상기에서 사용된 Ir(ppy)₃, CBP, NPB의 구조는 다음과 같다.



[1129]

[1130] 이하, 상기 소자 실시예 1 내지 84과 소자 비교예 1,2에 따라 제조된 유기전계발광소자의 특성을 비교한 결과를 하기 [표 1], [표 2]에 나타내었다.

[1131] [표 1]

	정공수송재료	구동전압(V) (1000 cd/m ²)	발광효율 (cd/A)	(CIE(x, y))
소자실시예1	화합물1	5.1	58	(0.31 ,0.63)
소자실시예2	화합물2	6.1	46	(0.31 ,0.63)
소자실시예3	화합물3	5.3	47	(0.32 ,0.64)
소자실시예4	화합물4	4.5	61	(0.32 ,0.64)
소자실시예5	화합물5	5.5	47	(0.32 ,0.64)
소자실시예6	화합물6	5.9	47	(0.32 ,0.64)
소자실시예7	화합물7	5.9	45	(0.34 ,0.62)
소자실시예8	화합물8	5.6	46	(0.35 ,0.63)
소자실시예9	화합물9	4.1	61	(0.34 ,0.62)
소자실시예10	화합물10	5.8	47	(0.34 ,0.64)
소자실시예11	화합물11	5.5	45	(0.33 ,0.62)
소자실시예12	화합물12	5.9	48	(0.34 ,0.64)
소자실시예13	화합물13	5.4	48	(0.34 ,0.62)
소자실시예14	화합물14	4.6	54	(0.35 ,0.63)
소자실시예15	화합물15	4.9	51	(0.34 ,0.63)
소자비교예1	NPB	6.8	37	(0.33 ,0.62)

[1132]

[1133] [표 2]

	발광재료	구동전압(V) (1000 cd/m ²)	발광효율 (cd/A)	(CIE(x, y))
소자실시예16	화합물16	4.1	60	(0.32 ,0.64)
소자실시예17	화합물17	5.9	44	(0.34 ,0.64)
소자실시예18	화합물18	5.8	46	(0.33 ,0.63)
소자실시예19	화합물19	5.7	45	(0.33 ,0.61)
소자실시예20	화합물20	5.9	46	(0.34 ,0.62)
소자실시예21	화합물21	4.3	62	(0.34 ,0.64)
소자실시예22	화합물22	4.4	61	(0.33 ,0.62)
소자실시예23	화합물23	5.1	45	(0.34 ,0.64)
소자실시예24	화합물24	5.6	45	(0.34 ,0.62)
소자실시예25	화합물25	5.8	46	(0.35 ,0.63)
소자실시예26	화합물26	5.7	47	(0.34 ,0.64)
소자실시예27	화합물27	5.5	48	(0.33 ,0.62)
소자실시예28	화합물28	5.6	48	(0.34 ,0.64)
소자실시예29	화합물29	5.1	55	(0.34 ,0.62)

[1134]

소자실시예30	화합물30	4.4	56	(0.35 ,0.63)
소자실시예31	화합물31	4.5	55	(0.34 ,0.64)
소자실시예32	화합물32	5.5	50	(0.33 ,0.62)
소자실시예33	화합물33	5.7	48	(0.34 ,0.64)
소자실시예34	화합물34	5.8	47	(0.34 ,0.62)
소자실시예35	화합물35	5.8	46	(0.35 ,0.63)
소자실시예36	화합물36	5.5	48	(0.34 ,0.64)
소자실시예37	화합물37	5.5	48	(0.33 ,0.62)
소자실시예38	화합물38	5.1	51	(0.34 ,0.64)
소자실시예39	화합물39	4.6	54	(0.34 ,0.62)
소자실시예40	화합물40	4.5	55	(0.35 ,0.63)
소자실시예41	화합물41	4.1	61	(0.34 ,0.64)
소자실시예42	화합물42	5.5	46	(0.33 ,0.62)
소자실시예43	화합물43	5.8	48	(0.34 ,0.64)
소자실시예44	화합물44	5.8	48	(0.34 ,0.62)
소자실시예45	화합물45	5.0	53	(0.31 ,0.63)
소자실시예46	화합물46	5.1	49	(0.31 ,0.63)
소자실시예47	화합물47	5.0	54	(0.32 ,0.64)
소자실시예48	화합물48	4.4	61	(0.32 ,0.64)
소자실시예49	화합물49	4.5	49	(0.32 ,0.64)
소자실시예50	화합물50	4.9	51	(0.32 ,0.64)
소자실시예51	화합물51	4.9	51	(0.34 ,0.62)
소자실시예52	화합물52	5.1	53	(0.35 ,0.63)
소자실시예53	화합물53	4.9	60	(0.34 ,0.62)
소자실시예54	화합물54	4.5	55	(0.32 ,0.64)
소자실시예55	화합물55	5.1	53	(0.35 ,0.64)
소자실시예56	화합물56	4.5	59	(0.32 ,0.64)
소자실시예57	화합물57	5.0	54	(0.35 ,0.65)
소자실시예58	화합물58	5.0	51	(0.33 ,0.63)
소자실시예59	화합물59	4.9	48	(0.32 ,0.62)
소자실시예60	화합물60	4.8	61	(0.33 ,0.62)
소자실시예61	화합물61	5.0	48	(0.35 ,0.66)
소자실시예62	화합물62	5.1	51	(0.32 ,0.63)
소자실시예63	화합물63	4.7	51	(0.31 ,0.63)
소자실시예64	화합물64	4.4	53	(0.32 ,0.62)
소자실시예65	화합물65	4.8	52	(0.32 ,0.63)
소자실시예66	화합물66	4.8	50	(0.33 , 0.62)
소자실시예67	화합물67	4.8	61	(0.33 ,0.62)
소자실시예68	화합물68	5.0	48	(0.35 ,0.66)
소자실시예69	화합물69	5.1	51	(0.32 ,0.63)

[1135]

소자실시예70	화합물70	4.7	51	(0.31 ,0.63)
소자실시예71	화합물71	4.4	53	(0.32 ,0.62)
소자실시예72	화합물72	4.8	52	(0.32 ,0.63)
소자실시예73	화합물73	4.8	50	(0.33 , 0.62)
소자실시예74	화합물74	4.5	49	(0.32 ,0.64)
소자실시예75	화합물75	4.9	51	(0.32 ,0.64)
소자실시예76	화합물76	4.9	51	(0.34 ,0.62)
소자실시예77	화합물77	5.1	53	(0.35 ,0.63)
소자실시예78	화합물78	4.9	60	(0.34 ,0.62)
소자실시예79	화합물79	4.5	55	(0.32 ,0.64)
소자실시예80	화합물80	5.1	53	(0.35 ,0.64)
소자실시예81	화합물81	4.5	59	(0.34 ,0.62)
소자실시예82	화합물82	5.0	54	(0.35 ,0.63)
소자실시예83	화합물83	5.0	48	(0.34 ,0.62)
소자실시예84	화합물84	4.9	51	(0.32 ,0.64)
소자비교예1	C B P	6.8	37	(0.33 ,0.62)

[1136]

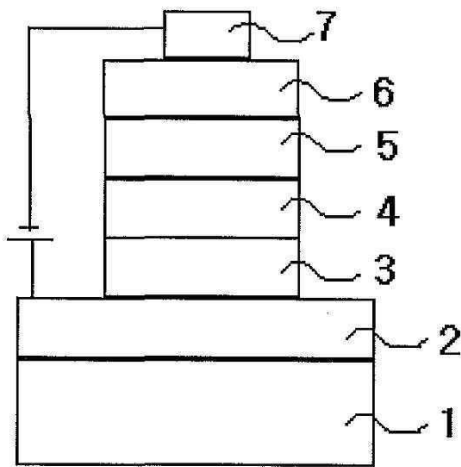
[1137] 구동전압 및 발광효율 측정

[1138] 위에서 만든 유기발광소자(기판크기 : $25 \times 25 \text{ mm}^2$ / 증착면적: $2 \times 2 \text{ mm}^2$)를 IVL 측정셋트(CS-2000+지그+IVL프로그램)에 고정한 후 전류를 1 mA/m^2 씩 상승시키며 증착면의 발광 휘도(cd/m^2), 구동전압(V), 전류밀도(A/m^2), 발광 효율(cd/A)을 측정하여 휘도가 1000 cd/m^2 일 때 구동전압과 발광효율을 상기 [표 1], [표 2]에 나타내었다.

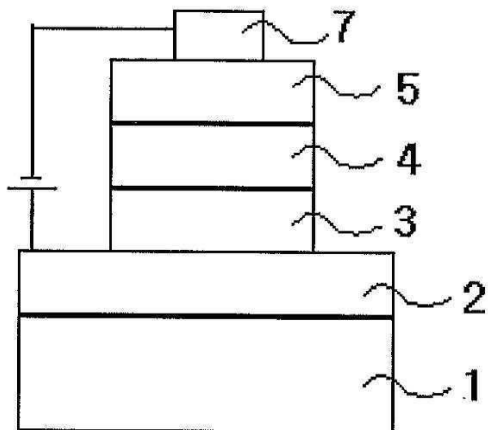
[1139] 상기 [표 1]과 [표 2]에서 보는 바와 같이, 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물이 유기전계발광소자의 발광층의 호스트 물질, 정공수송물질로 사용될 때 종래의 CBP(호스트재료), NPB(정공수송재료)를 사용할 때보다 구동전압은 낮아지고, 발광효율은 증가됨을 볼 수 있다.

도면

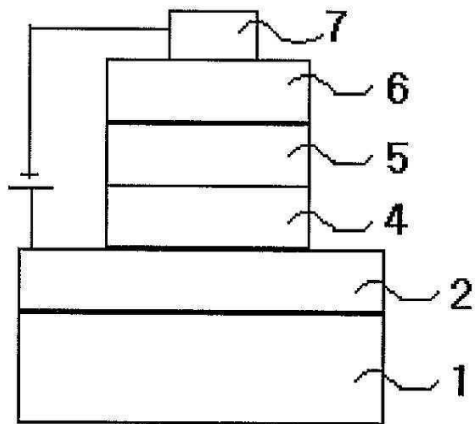
도면1



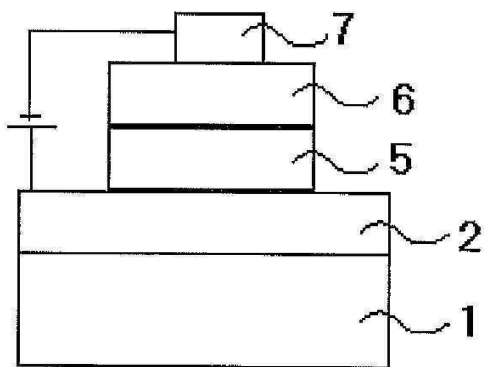
도면2



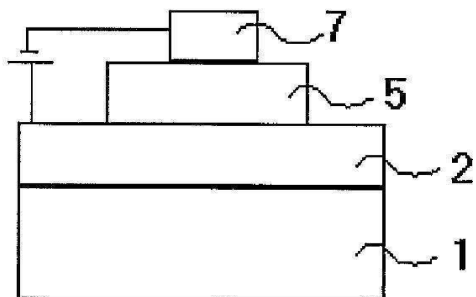
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	一种电致发光化合物和包含该化合物的电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020160006007A	公开(公告)日	2016-01-18
申请号	KR1020140085277	申请日	2014-07-08
[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 PARK SUNG JUN 박성준		
发明人	현서용 정성욱 박성준		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/90 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/90 H01L51/5056 H01L51/5088 Y10S428/917 Y02B20/181		
其他公开文献	KR101913628B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机电致发光器件中的有机发光化合物。有机发光化合物由化学式1或化学式2表示。此外，当使用有机发光化合物时，实现具有优异的发光性质如驱动电压，亮度，长寿命等的有机电致发光器件。作为空穴传输功能层或发光层内的磷光主体化合物。

