



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년02월27일

(11) 등록번호 10-2082528

(24) 등록일자 2020년02월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/08 (2006.01)
C07D 209/86 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
H01L 51/54 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-7030961

(22) 출원일자(국제) 2013년04월08일

심사청구일자 2017년11월10일

(85) 번역문제출일자 2014년11월04일

(65) 공개번호 10-2015-0005583

(43) 공개일자 2015년01월14일

(86) 국제출원번호 PCT/JP2013/060582

(87) 국제공개번호 WO 2013/154064

국제공개일자 2013년10월17일

(30) 우선권주장

JP-P-2012-088615 2012년04월09일 일본(JP)

(뒷면에 계속)

(56) 선행기술조사문헌

JP2009094486 A*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

가부시킴가이샤 큐릭스

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1

(72) 발명자

아다치 지하야

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키 6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가쿠 나이

우오야마 히로키

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키 6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가쿠 나이

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인코리아나

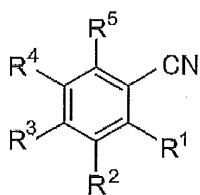
전체 청구항 수 : 총 13 항

심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 유기 발광 소자 그리고 그것에 사용하는 발광 재료 및 화합물

(57) 요약

하기 일반식으로 나타내는 화합물을 발광층에 갖는 유기 발광 소자는 발광 효율이 높다. 하기 일반식에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 9-카르바졸릴기, 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 1-인돌릴기 또는 디아릴아미노기를 나타내며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 는 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.



(72) 발명자

노무라 히로코

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

고우시 겐이치

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

야스다 다쿠마

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

콘도 료스케

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

시즈 가츠유키

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

나카노타니 하지메

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 사와라쿠 모모치하
마 2초메 1방 22고 자이단호정 규슈센단가가쿠기쥬
츠겐큐쇼 나이

니시데 준이치

일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

(30) 우선권주장

JP-P-2012-173277 2012년08월03일 일본(JP)

JP-P-2012-274111 2012년12월14일 일본(JP)

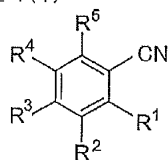
명세서

청구범위

청구항 1

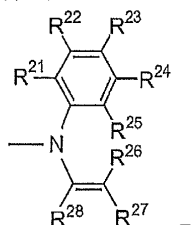
하기 일반식 (1) 로 나타내는 화합물로 이루어진 발광 재료.

일반식 (1)



[일반식 (1) 에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 하이드록시기를 나타내고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 하기 일반식 (11) 로 나타내는 기를 나타내며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 는 수소 원자 또는 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 상기 일반식 (11) 로 나타내는 기가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기일 때, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 2 개가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기이다.]

일반식 (11)



[일반식 (11) 에 있어서, $R^{21} \sim R^{28}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 하기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 하기 <A> 나 중 적어도 일방을 만족한다.

<A> R^{25} 및 R^{26} 은 하나가 되어 단결합을 형성한다.

 R^{27} 및 R^{28} 은 하나가 되어 하기 치환기군 B 중 1 이상의 치환기로 치환되어 있어도 되는 벤젠 고리를 형성하는 데에 필요한 원자단을 나타낸다.]

(치환기군 A) 할로젠 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술포닐기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

(치환기군 B) 하이드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 12 ~ 40 의 디아릴아미노기, 탄소수 12 ~ 40 의 카르바졸릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술포닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 할로알킬기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

청구항 2

제 1 항에 있어서,

지연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

$R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1-인돌릴기, 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노기를 나타내는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

$R^1 \sim R^5$ 중 적어도 2 개가 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1-인돌릴기, 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노기를 나타내는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

$R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하이드록시기이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 할로젠 원자, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1-인돌릴기, 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노기 중 어느 것을 나타내는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

제 1 항에 있어서,

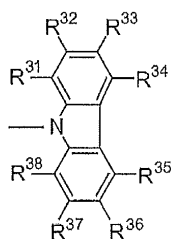
$R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하이드록시기이고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 9

제 1 항에 있어서,

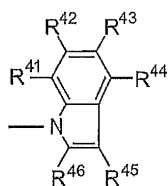
$R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하기 일반식 (12) ~ (15) 중 어느 것으로 나타내는 기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

일반식 (12)



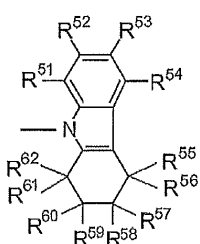
[일반식 (12)에 있어서, $R^{31} \sim R^{38}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다.]

일반식 (13)



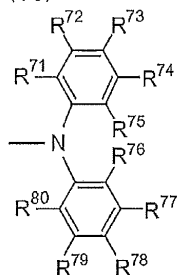
[일반식 (13)에 있어서, $R^{41} \sim R^{46}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다.]

일반식 (14)



[일반식 (14)에 있어서, $R^{51} \sim R^{62}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다.]

일반식 (15)



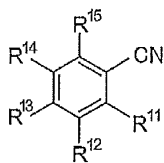
[일반식 (15)에 있어서, $R^{71} \sim R^{80}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다.]

청구항 10

제 1 항에 있어서,

하기 일반식 (2) 로 나타내는 화합물로 이루어진 발광 재료.

일반식 (2)



[일반식 (2) 에 있어서, R¹¹, R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵ 중 1 개는 시아노기를 나타내고, R¹¹ ~ R¹⁵ 중 3 개는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1-인돌릴기, 또는 상기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노기를 나타내며, 나머지 R¹¹ ~ R¹⁵ 는 하이드록시기를 나타낸다.]

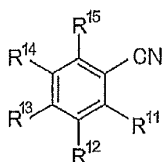
청구항 11

삭제

청구항 12

하기 일반식 (2) 로 나타내는 화합물.

일반식 (2)



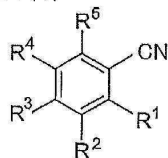
[일반식 (2) 에 있어서, R¹¹, R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵ 중 적어도 1 개는 시아노기이고, R¹¹ ~ R¹⁵ 중 적어도 3 개는 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 9-카르바졸릴기, 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 1-인돌릴기, 또는 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노기이며, 나머지 R¹¹ ~ R¹⁵ 는 하이드록시기를 나타낸다. 단, R¹² 와 R¹⁴ 가 함께 시아노기인 경우는 없다.]

(치환기군 A) 하이드록시기, 할로젠 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술포닐기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

청구항 13

하기 일반식 (1) 로 나타내는 화합물로 이루어진 발광 재료와 호스트 재료를 포함하는 발광층을 기판 상에 갖는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

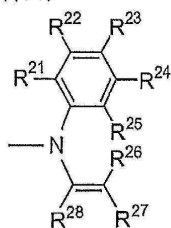
일반식 (1)



[일반식 (1) 에 있어서, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 1 개는 하기 일반

식 (11) 로 나타내는 기를 나타내며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 는 수소 원자 또는 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 상기 일반식 (11) 로 나타내는 기가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기일 때, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 2 개가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기이다.]

일반식 (11)



[일반식 (11) 에 있어서, $R^{21} \sim R^{28}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 하기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 하기 <A> 나 중 적어도 일방을 만족한다.

<A> R^{25} 및 R^{26} 은 하나가 되어 단결합을 형성한다.

 R^{27} 및 R^{28} 은 하나가 되어 하기 치환기군 B 중 1 이상의 치환기로 치환되어 있어도 되는 벤젠 고리를 형성하는 데에 필요한 원자단을 나타낸다.]

(치환기군 A) 하이드록시기, 할로젠 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술폰기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

(치환기군 B) 하이드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 12 ~ 40 의 디아릴아미노기, 탄소수 12 ~ 40 의 카르바졸릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술폰기, 탄소수 1 ~ 10 의 할로알킬기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

청구항 14

제 13 항에 있어서,

자연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 15

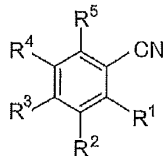
제 13 항에 있어서,

유기 일렉트로루미네선스 소자인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 16

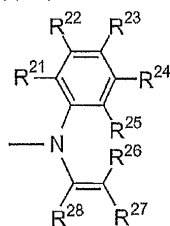
하기 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 지연 형광체.

일반식 (1)



[일반식 (1) 에 있어서, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 1 개는 하이드록시기를 나타내고, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 1 개는 하기 일반식 (11) 로 나타내는 기를 나타내며, 나머지 R¹ ~ R⁵ 는 수소 원자 또는 하기 치환기군 A 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 상기 일반식 (11) 로 나타내는 기가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기일 때, R¹ ~ R⁵ 중 적어도 2 개가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기이다.]

일반식 (11)



[일반식 (11) 에 있어서, R²¹ ~ R²⁸ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 하기 치환기군 B 중 어느 것의 치환기를 나타낸다. 단, 하기 <A> 나 중 적어도 일방을 만족한다.

<A> R²⁵ 및 R²⁶ 은 하나가 되어 단결합을 형성한다.

 R²⁷ 및 R²⁸ 은 하나가 되어 하기 치환기군 B 중 1 이상의 치환기로 치환되어 있어도 되는 벤젠 고리를 형성하는 데에 필요한 원자단을 나타낸다.]

(치환기군 A) 할로젠 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시 카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술폰닐기, 아마이드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

(치환기군 B) 하이드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 15 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 12 ~ 40 의 디아릴아미노기, 탄소수 12 ~ 40 의 카르바졸릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술폰닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 할로알킬기, 아마이드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기, 니트로기, 및 이들의 조합으로 이루어진 치환기

발명의 설명

기술 분야

[0001]

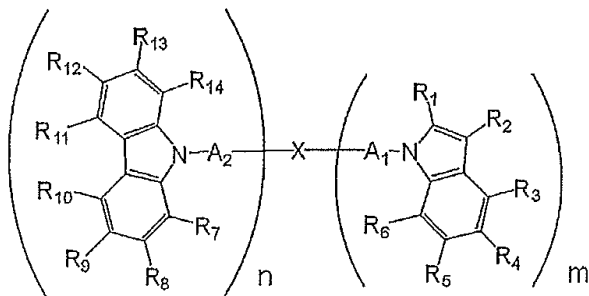
본 발명은 발광 효율이 높은 유기 발광 소자에 관한 것이다. 또, 그 유기 발광 소자에 사용하는 발광 재료와 화합물에도 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로루미네선스 소자 (유기 EL 소자) 등의 유기 발광 소자의 발광 효율을 높이는 연구가 활발히 실시되고 있다. 특히, 유기 일렉트로루미네선스 소자를 구성하는 전자 수송 재료, 정공 수송 재료, 발광 재료를 새롭게 개발하여 조합함으로써, 발광 효율을 높이는 연구가 다양하게 이루어져 오고 있다. 그 중에는, 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물을 이용한 유기 일렉트로루미네선스 소자에 관한 연구도 보이며, 지금까지도 몇 가지 제안이 이루어져 오고 있다.

[0003] 예를 들어, 특허문헌 1 에는, 하기의 일반식으로 나타내는 카르바졸 구조와 인돌 구조를 포함하는 화합물을 유기 발광 소자의 발광층의 호스트 재료로서 사용하는 것이 기재되어 있다. 하기의 일반식에 있어서, m 및 n 은 각각 1 ~ 5 의 정수이고, m 과 n 의 합은 2 ~ 6 의 정수이고, X 는 치환기를 갖고 있어도 되는 $m+n$ 가의 유기기이며, $R_1 \sim R_{14}$ 는 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 아릴기 또는 복소 고리기라고 규정되어 있다.

[0004] [화학식 1]



[0005]

[0006] 또, 특허문헌 2 에는, 카르바졸 구조를 2 개 이상 포함하는 화합물을 유기 발광 소자의 발광층의 호스트 재료로서 사용하는 것이 기재되어 있다. 또한, 특허문헌 3 에는, 인돌 구조를 2 개 이상 포함하는 화합물을 유기 발광 소자의 발광층의 호스트 재료로서 사용하는 것이 기재되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 2005-174917호

(특허문헌 0002) 일본 공개특허공보 2009-94486호

(특허문헌 0003) 일본 공개특허공보 2009-76834호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0008] 이와 같이 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물에 대해서는, 지금까지 각종 검토가 이루어져 있으며, 유기 일렉트로루미네선스 소자로의 응용에 관한 몇가지 제안도 이루어져 있다. 그러나, 종래 제안되어 있는 유기 일렉트로루미네선스 소자에서는, 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물을 발광층의 호스트 재료로서 사용하는 것을 제안하는 것이다. 또, 그 발광 효율은 반드시 높은 것은 아니다. 게다가, 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물은 그 모든 것에 대해 망라적인 연구가 다 이루어져 있다고는 말할 수 없다. 특히, 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물의 발광 재료로서의 유용성이나, 카르바졸 구조 또는 인돌 구조를 포함하고, 또한 시아노기를 복수 포함하는 화합물의 유용성에 대해서는, 거의 검토가 시도되지 않았다. 또, 지금까지의 연구에서는, 카르바졸 구조나 인돌 구조를 포함하는 화합물의 화학 구조와 그 화합물의 발광 재료로서의 유용성의 사이에 명확한 관계가 발견되지 못하고 있어, 화학 구조에 기초하여 발광 재료로서의 유용성을 예측하는 것은 곤란한 상황에 있다. 본 발명자들은 이들 과제를 고려하여, 카르바졸 구조나 인돌 구조 등을 포함하는 시아노벤젠 유도체에 대해, 그 유기 발광 소자의 발광 재료로서의 유용성을 평

가하는 것을 목적으로 하여 검토를 진행하였다. 또, 발광 재료로서 유용한 화합물의 일반식을 이끌어 내어, 발광 효율이 높은 유기 발광 소자의 구성을 일반화하는 것도 목적으로 하여 예의 검토를 진행하였다.

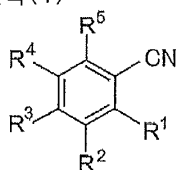
과제의 해결 수단

[0009] 상기 목적을 달성하기 위해서 예의 검토를 진행한 결과, 본 발명자들은 카르바졸 구조나 인돌 구조 등을 포함하는 특정한 시아노벤젠 유도체가 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 재료로서 매우 유용한 것을 분명히 하였다. 특히, 카르바졸 구조나 인돌 구조 등을 포함하는 시아노벤젠 유도체 중에 지연 형광 재료로서 유용한 화합물이 있는 것을 찾아내어, 발광 효율이 높은 유기 발광 소자를 저렴하게 제공할 수 있을 것을 분명히 하였다. 본 발명자들은, 이들 지견에 기초하여, 상기 과제를 해결하는 수단으로서 이하의 본 발명을 제공하기에 이르렀다.

[0010] [1] 하기 일반식 (1) 로 나타내는 화합물로 이루어진 발광 재료.

[0011] [화학식 2]

일반식 (1)

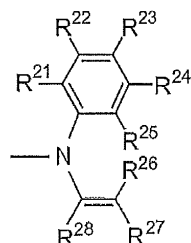


[0012]

[0013] [일반식 (1) 에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 하기 일반식 (11) 로 나타내는 기를 나타내며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 는 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.]

[0014] [화학식 3]

일반식(11)



[0015]

[0016] [일반식 (11) 에 있어서, $R^{21} \sim R^{28}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 단, 하기 <A> > 나 중 적어도 일방을 만족한다.

[0017] <A> R^{25} 및 R^{26} 은 하나가 되어 단결합을 형성한다.

[0018] R^{27} 및 R^{28} 은 하나가 되어 치환 혹은 무치환의 벤젠 고리를 형성하는 데에 필요한 원자단을 나타낸다.]

[0019] [2] 지연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 [1] 에 기재된 발광 재료.

[0020] [3] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기를 나타내는 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

[0021] [4] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 2 개가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기를 나타내는 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

[0022] [5] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 하이드록시기, 할로젠 원자, 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은

무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기 중 어느 것을 나타내는 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

[0023] [6] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기 중 어느 것을 나타내는 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

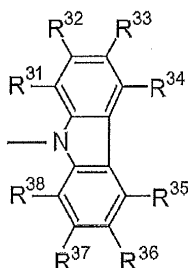
[0024] [7] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기인 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

[0025] [8] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하이드록시기이고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기인 것을 특징으로 하는 [1] 또는 [2] 에 기재된 발광 재료.

[0026] [9] $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하기 일반식 (12) ~ (15) 중 어느 것으로 나타내는 기인 것을 특징으로 하는 [1] ~ [8] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0027] [화학식 4]

일반식(12)

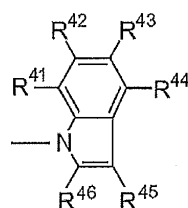


[0028]

[일반식 (12) 에 있어서, $R^{31} \sim R^{38}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.]

[0030] [화학식 5]

일반식(13)

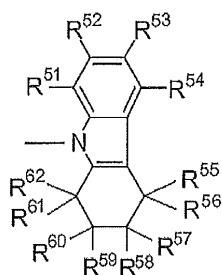


[0031]

[일반식 (13) 에 있어서, $R^{41} \sim R^{46}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.]

[0033] [화학식 6]

일반식(14)

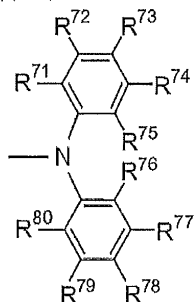


[0034]

[0035] [일반식 (14) 에 있어서, $R^{51} \sim R^{62}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.]

[0036] [화학식 7]

일반식 (15)



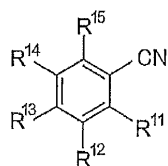
[0037]

[0038] [일반식 (15) 에 있어서, $R^{71} \sim R^{80}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.]

[0039] [10] 하기 일반식 (2) 로 나타내는 화합물로 이루어진 [1] ~ [9] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0040] [화학식 8]

일반식 (2)



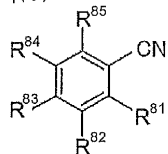
[0041]

[0042] [일반식 (2) 에 있어서, R^{11} , R^{12} , R^{14} 및 R^{15} 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, $R^{11} \sim R^{15}$ 중 적어도 3 개는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기를 나타내며, 나머지 $R^{11} \sim R^{15}$ 는 하이드록시기를 나타낸다.]

[0043] [11] 하기 일반식 (3) 으로 나타내는 화합물로 이루어진 [1] ~ [9] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0044] [화학식 9]

일반식 (3)



[0045]

[0046] [일반식 (3) 에 있어서, $R^{81} \sim R^{85}$ 중 1 개는 시아노기이고, $R^{81} \sim R^{85}$ 중 2 개는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기이며, 그 밖의 2 개는 수소 원자를 나타낸다.]

[0047] [12] 상기 일반식 (2) 로 나타내는 화합물.

[0048] [13] [1] ~ [11] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료를 포함하는 발광층을 기판 상에 갖는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[0049] [14] 자연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 [13] 에 기재된 유기 발광 소자.

[0050] [15] 유기 전극로루미네선스 소자인 것을 특징으로 하는 [13] 또는 [14] 에 기재된 유기 발광 소자.

[0051] [16] 상기 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 자연 형광체.

발명의 효과

[0052] 본 발명의 유기 발광 소자는 발광 효율이 높다는 특징을 갖는다. 또, 본 발명의 지연 형광 재료는 유기 발광 소자의 발광층으로서 이용했을 때에 유기 발광 소자에 지연 형광을 방사시켜, 발광 효율을 비약적으로 높일 수 있다는 특징을 갖는다. 또한, 본 발명의 화합물은 이들 유기 발광 소자의 발광 재료로서 매우 유용하다.

도면의 간단한 설명

[0053] 도 1 은 유기 일렉트로루미네선스 소자의 층 구성예를 나타내는 개략 단면도이다.

도 2 은 실시예 1 의 화합물 1 의 톨루엔 용액의 시간 분해 스펙트럼이다.

도 3 은 실시예 2 의 화합물 1 을 사용한 유기 포토 루미네선스 소자의 온도에 의한 발광 수명의 변화를 나타내는 그래프이다.

도 4 는 실시예 3 의 화합물 1 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전류 밀도-전압 특성을 나타내는 그래프이다.

도 5 는 실시예 3 의 화합물 1 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 6 은 실시예 4 의 화합물 6 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 7 은 실시예 5 의 화합물 301 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 8 은 실시예 6 의 화합물 501 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전류 밀도-전압 특성을 나타내는 그래프이다.

도 9 는 실시예 6 의 화합물 501 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 10 은 실시예 7 의 화합물 252 를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.

도 11 은 실시예 7 의 화합물 252 를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전류 밀도-전압 특성을 나타내는 그래프이다.

도 12 는 실시예 7 의 화합물 252 를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 13 은 실시예 8 의 화합물 523 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.

도 14 는 실시예 8 의 화합물 523 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전류 밀도-전압 특성을 나타내는 그래프이다.

도 15 는 실시예 8 의 화합물 523 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 16 은 실시예 9 의 화합물 31 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.

도 17 은 실시예 9 의 화합물 31 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전류 밀도-전압 특성을 나타내는 그래프이다.

도 18 은 실시예 9 의 화합물 31 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율-전류 밀도 특성을 나타내는 그래프이다.

도 19 는 실시예 10 의 화합물 301 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 휘도-발광 효율 특성을 나타내는 그래프이다.

도 20 은 실시예 10 의 화합물 301 을 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 휘도 열화 특성을 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

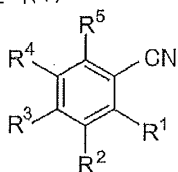
[0054] 이하에 있어서, 본 발명의 내용에 대하여 상세하게 설명한다. 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은 본 발명의 대표적인 실시양태나 구체예에 기초하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그와 같은 실시양태나 구체예에 한정되는 것은 아니다. 또한, 본 명세서에 있어서 「~」를 사용하여 나타내는 수치 범위는 「~」의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다.

[0055] [일반식 (1)로 나타내는 화합물]

[0056] 본 발명의 발광 재료는 하기 일반식 (1)로 나타내는 화합물로 이루어진 것을 특징으로 한다. 또, 본 발명의 유기 발광 소자는 하기 일반식 (1)로 나타내는 화합물을 발광층의 발광 재료로서 포함하는 것을 특징으로 한다. 그래서, 일반식 (1)로 나타내는 화합물에 대하여 먼저 설명한다.

[0057] [화학식 10]

일반식(1)



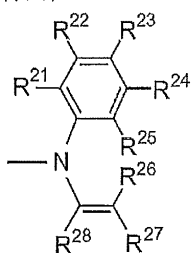
[0058]

[0059] 일반식 (1)에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타낸다. 어느 1 개가 시아노기인 경우는, $R^1 \sim R^5$ 중 어느 것이어도 된다. 어느 2 개가 시아노기인 경우는, R^1 과 R^3 의 조합이나, R^2 와 R^4 의 조합을 예시할 수 있다. 어느 3 개가 시아노기인 경우는, R^1 과 R^3 과 R^4 의 조합을 예시할 수 있다.

[0060] 일반식 (1)에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 하기 일반식 (11)로 나타내는 기를 나타낸다. 2 개 이상이 일반식 (11)로 나타내는 기를 나타낼 때, 그들은 동일해도 되고 상이해도 되지만, 동일한 것이 보다 바람직하다.

[0061] [화학식 11]

일반식(11)



[0062]

[0063] 일반식 (11)에 있어서, $R^{21} \sim R^{28}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 단, 하기 <A>나 중 적어도 일방을 만족한다. 양방 모두 만족하고 있는 경우가 보다 바람직하다.

[0064] <A> R^{25} 및 R^{26} 은 하나가 되어 단결합을 형성한다.

[0065] R^{27} 및 R^{28} 은 하나가 되어 치환 혹은 무치환의 벤젠 고리를 형성하는 데에 필요한 원자단을 나타낸다.

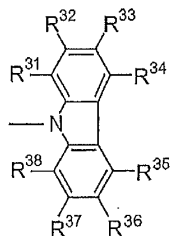
[0066] 일반식 (11)로 나타내는 기는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기인 것이 바람직하다. 즉, 일반식 (1)의 $R^1 \sim R^5$ 중 어느 1 개는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기인 것이 바람직하다. 일반식 (1)의 $R^1 \sim R^5$ 중 어느 2 개 이상이 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은

무치환의 디아릴아미노기인 것이 보다 바람직하다.

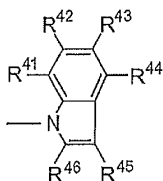
[0067] 일반식 (11) 로 나타내는 기는 예를 들어 하기 일반식 (12) ~ (15) 중 어느 것으로 나타내는 구조를 갖는 것이 바람직하다. 특히 하기 일반식 (12) 로 나타내는 구조를 갖는 것이 바람직하다.

[0068] [화학식 12]

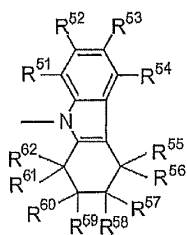
일반식 (12)



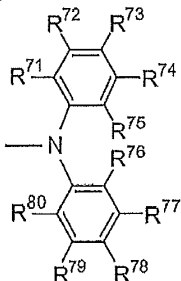
일반식 (13)



일반식 (14)



일반식 (15)



[0069]

[0070] 일반식 (12) ~ (15) 에 있어서, R³¹ ~ R³⁸, R⁴¹ ~ R⁴⁶, R⁵¹ ~ R⁶² 및 R⁷¹ ~ R⁸⁰ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 일반식 (12) ~ (15) 로 나타내는 기가 치환기를 가질 때의 치환 위치나 치환수는 특별히 제한되지 않는다. 각 기의 치환수는 0 ~ 6 개가 바람직하고, 0 ~ 4 개가 보다 바람직하며, 예를 들어 0 ~ 2 개로 하는 것도 바람직하다. 복수의 치환기를 가질 때, 그들은 서로 동일해도 되고 상이해도 되지만, 동일한 것이 보다 바람직하다.

[0071] 일반식 (12) 로 나타내는 기가 치환기를 갖는 경우에는, R³² ~ R³⁷ 중 어느 것이 치환기인 것이 바람직하다.

예를 들어, R³² 와 R³⁷ 이 치환기인 경우, R³³ 과 R³⁶ 이 치환기인 경우, R³⁴ 와 R³⁵ 가 치환기인 경우를 바람직하게 예시할 수 있다.

[0072] 일반식 (13) 으로 나타내는 기가 치환기를 갖는 경우에는, R⁴² ~ R⁴⁶ 중 어느 것이 치환기인 것이 바람직하다.

예를 들어, R⁴² 가 치환기인 경우와 R⁴³ 이 치환기인 경우를 바람직하게 예시할 수 있다.

[0073] 일반식 (14) 로 나타내는 기가 치환기를 갖는 경우에는, R⁵² ~ R⁶⁰ 중 어느 것이 치환기인 것이 바람직하다.

예를 들어, $R^{52} \sim R^{54}$ 중 어느 것이 치환기인 경우, $R^{55} \sim R^{60}$ 중 어느 것이 치환기인 경우를 바람직하게 예시할 수 있다.

[0074] 일반식 (15) 로 나타내는 기가 치환기를 갖는 경우에는, $R^{72} \sim R^{74}$ 및 $R^{77} \sim R^{79}$ 중 어느 것이 치환기인 것이 바람직하다. 예를 들어, R^{72} 와 R^{79} 가 치환기인 경우, R^{73} 과 R^{78} 이 치환기인 경우, R^{74} 와 R^{77} 이 치환기인 경우, R^{72} , R^{74} , R^{77} 및 R^{79} 가 치환기인 경우를 바람직하게 예시할 수 있다. 특히, R^{74} 와 R^{77} 이 치환기인 경우, R^{72} , R^{74} , R^{77} 및 R^{79} 가 치환기인 경우를 보다 바람직하게 예시할 수 있다. 이 때의 치환기는 각각 독립적으로 탄소수 1 ~ 20 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 또는 탄소수 6 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 아릴기인 것이 특히 바람직하고, 탄소수 1 ~ 6 의 무치환의 알킬기, 탄소수 6 ~ 10 의 무치환의 아릴기, 또는 탄소수 6 ~ 10 의 아릴기로 치환된 탄소수 6 ~ 10 의 아릴기인 것이 보다 더 바람직하다.

[0075] 일반식 (11) 의 $R^{21} \sim R^{28}$, 일반식 (12) 의 $R^{31} \sim R^{38}$, 일반식 (13) 의 $R^{41} \sim R^{46}$, 일반식 (14) 의 $R^{51} \sim R^{62}$ 및, 일반식 (15) 의 $R^{71} \sim R^{80}$ 이 취할 수 있는 치환기로서, 예를 들어 하이드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 40 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 12 ~ 40 의 디아릴아미노기, 탄소수 12 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 카르바졸릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술포닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 할로알킬기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기 및 니트로기 등을 들 수 있다. 이들 구체예 중, 또한 치환기에 의해 치환 가능한 것은 치환되어 있어도 된다. 보다 바람직한 치환기는 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 20 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 6 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기, 탄소수 12 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기, 탄소수 12 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 카르바졸릴기이다. 더욱 바람직한 치환기는 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 디알킬아미노기, 탄소수 6 ~ 15 의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3 ~ 12 의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기이다.

[0076] 본 명세서에서 말하는 알킬기는 직사슬형, 분지형, 고리형 중 어느 것이어도 되고, 보다 바람직하게는 탄소수 1 ~ 6 이며, 구체예로서 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 이소프로필기를 들 수 있다. 아릴기는 단고리이어도 되고 융합 고리이어도 되며, 구체예로서 페닐기, 나프틸기를 들 수 있다. 알콕시기는 직사슬형, 분지형, 고리형 중 어느 것이어도 되고, 보다 바람직하게는 탄소수 1 ~ 6 이며, 구체예로서 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, t-부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 이소프로폭시기를 들 수 있다. 디알킬아미노기의 2 개의 알킬기는 서로 동일해도 되고 상이해도 되지만, 동일한 것이 바람직하다. 디알킬아미노기의 2 개의 알킬기는 각각 독립적으로 직사슬형, 분지형, 고리형 중 어느 것이어도 되고, 보다 바람직하게는 탄소수 1 ~ 6 이며, 구체예로서 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 이소프로필기를 들 수 있다. 아릴기는 단고리이어도 되고 융합 고리이어도 되고, 구체예로서 페닐기, 나프틸기를 들 수 있다. 헤테로아릴기도 단고리이어도 되고 융합 고리이어도 되며, 구체예로서 피리딜기, 피리다질기, 피리미딜기, 트리아질기, 트리아졸릴기, 벤조트리아졸릴기를 들 수 있다. 이들 헤테로아릴기는 헤테로 원자를 개재하여 결합하는 기이어도 되고, 헤테로아릴 고리를 구성하는 탄소 원자를 개재하여 결합하는 기이어도 된다.

[0077] 일반식 (1) 에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 어느 1 개가 일반식 (11) 로 나타내는 기인 경우는, $R^1 \sim R^3$ 중 어느 것이어도 된다. 어느 2 개가 일반식 (11) 로 나타내는 기인 경우는, R^1 과 R^3 의 조합이나, R^2 와 R^4 의 조합을 예시할 수 있다. 어느 3 개가 일반식 (11) 로 나타내는 기인 경우는, R^1 과 R^3 과 R^4 의 조합을 예시할 수 있다.

[0078] 일반식 (11) 로 나타내는 기가 결합하고 있는 벤젠 고리의 2 개의 오르토 위치 중 어느 일방은 시아노기인 것이 바람직하다. 2 개의 오르토 위치의 양방이 시아노기이어도 된다. 또, 벤젠 고리에 일반식 (11) 로 나타내는 기가 2 개 이상 결합하고 있는 경우에는, 그들 중 적어도 2 개가 일반식 (11) 로 나타내는 기가 결합하고 있는 벤젠 고리의 2 개의 오르토 위치 중 어느 일방은 시아노기라는 조건을 만족하고 있는 것이 바람직하다.

- [0079] 일반식 (1) 에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 시아노기를 나타내고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개는 상기 일반식 (11) 로 나타내는 기를 나타내지만, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 는 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0080] $R^1 \sim R^5$ 가 취할 수 있는 바람직한 치환기로서, 예를 들어 하이드록시기, 할로겐 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬티오기, 탄소수 1 ~ 20 의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2 ~ 20 의 아실기, 탄소수 6 ~ 40 의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 헤테로아릴기, 탄소수 2 ~ 10 의 알케닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알키닐기, 탄소수 2 ~ 10 의 알콕시카르보닐기, 탄소수 1 ~ 10 의 알킬술폰닐기, 아미드기, 탄소수 2 ~ 10 의 알킬아미드기, 탄소수 3 ~ 20 의 트리알킬실릴기, 탄소수 4 ~ 20 의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5 ~ 20 의 트리알킬실릴알키닐기 및 니트로기 등을 들 수 있다. 이들 구체예 중, 또한 치환기에 의해 치환 가능한 것은 치환되어 있어도 된다. 보다 바람직한 치환기는 하이드록시기, 할로겐 원자, 탄소수 1 ~ 20 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 20 의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 20 의 치환 혹은 무치환의 디알킬아미노기, 탄소수 6 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3 ~ 40 의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기이다. 더욱 바람직한 치환기는 하이드록시기, 불소 원자, 염소 원자, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 디알킬아미노기, 탄소수 6 ~ 15 의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3 ~ 12 의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기이다. 나아가 또한 바람직하게는 하이드록시기, 불소 원자, 염소 원자이다.
- [0081] 일반식 (1) 에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 중 수소 원자인 것은 3 개 이하인 것이 바람직하고, 2 개 이하인 것이 보다 바람직하고, 1 개 이하인 것이 더욱 바람직하며, 0 인 것도 바람직하다.
- [0082] 바람직한 조합으로서, 예를 들어, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 하이드록시기, 할로겐 원자, 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기 중 어느 것인 경우를 들 수 있다. 다른 바람직한 조합으로서, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기 중 어느 것인 경우를 들 수도 있다. 다른 바람직한 조합으로서, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 각각 독립적으로 하이드록시기, 할로겐 원자, 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기 중 어느 것인 경우를 들 수도 있다. 다른 바람직한 조합으로서, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 하이드록시기이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기인 경우를 들 수도 있다. 다른 바람직한 조합으로서, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 시아노기이고, $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개가 할로겐 원자이며, 나머지 $R^1 \sim R^5$ 가 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기인 경우를 들 수도 있다.
- [0083] 이하에 있어서, 일반식 (1) 로 나타내는 화합물의 구체예를 예시하지만, 본 발명에 있어서 사용할 수 있는 일반식 (1) 로 나타내는 화합물은 이들 구체예에 의해 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다. 또한, 이하의 예시 화합물에 있어서, 일반식 (12) ~ (15) 중 어느 것으로 나타내는 기가 분자 내에 2 개 이상 존재하고 있는 경우, 그들 기는 모두 동일한 구조를 갖는다. 예를 들어, 표 1 의 화합물 1 에서는, 일반식 (1) 의 R^1 , R^2 , R^4 및 R^5 가 일반식 (12) 로 나타내는 기이지만, 그들 기는 모두 무치환의 9-카르바졸릴기이다.

[0084] [표 1-1]

화합물 번호	일반식 (1)					일반식 (12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ , R ³⁸	R ³² , R ³⁷	R ³³ , R ³⁶	R ³⁴ , R ³⁵
1	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
2	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	CH ₃	H	H
3	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	CH ₃ O	H	H
4	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
5	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
6	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
7	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
8	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	F	H
9	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃
10	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O
11	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	H
12	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H	H
13	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H	H
14	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
15	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
16	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
17	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	Cl	H
18	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	F	H
19	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃
20	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O
21	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	H	H
22	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	CH ₃	H	H
23	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	CH ₃ O	H	H
24	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	CH ₃	H
25	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	CH ₃ O	H
26	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
27	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	Cl	H
28	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	F	H
29	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	H	CH ₃
30	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	H	H	H	H	H	CH ₃ O
31	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	H
32	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H	H
33	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H	H
34	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
35	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
36	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
37	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	Cl	H
38	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	F	H
39	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃
40	일반식 (12)	H	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O
41	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	H	H
42	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	CH ₃	H	H
43	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	CH ₃ O	H	H
44	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
45	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
46	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
47	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	Cl	H
48	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	F	H
49	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃
50	일반식 (12)	H	ON	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O
51	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	H	H
52	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	CH ₃	H	H
53	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	CH ₃ O	H	H
54	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	CH ₃	H
55	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	CH ₃ O	H
56	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
57	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	Cl	H
58	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	F	H
59	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	H	CH ₃
60	일반식 (12)	H	ON	H	H	H	H	H	CH ₃ O
61	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	H	H
62	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	CH ₃	H	H
63	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	CH ₃ O	H	H
64	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃	H
65	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃ O	H
66	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
67	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	Cl	H
68	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	F	H
69	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	H	CH ₃
70	일반식 (12)	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	H	H	H	CH ₃ O

[0085]

[0086] [표 1-2]

71	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	H	H
72	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	CH ₃	H	H
73	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	CH ₃ O	H	H
74	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	CH ₃	H
75	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	CH ₃ O	H
76	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
77	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	Cl	H
78	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	F	H
79	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	H	CH ₃
80	일반식(12)	일반식(12)	ON	F	F	H	H	H	CH ₃ O
81	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	H	H
82	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	CH ₃	H	H
83	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
84	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	CH ₃	H
85	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
86	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
87	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	Cl	H
88	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	F	H
89	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	H	CH ₃
90	일반식(12)	F	ON	일반식(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
91	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	H	H
92	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	CH ₃	H	H
93	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	CH ₃ O	H	H
94	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
95	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
96	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
97	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	Cl	H
98	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	F	H
99	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	H	CH ₃
100	일반식(12)	F	ON	F	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O
101	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	H	H
102	일반식(12)	F	ON	F	F	H	CH ₃	H	H
103	일반식(12)	F	ON	F	F	H	CH ₃ O	H	H
104	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	CH ₃	H
105	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	CH ₃ O	H
106	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
107	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	Cl	H
108	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	F	H
109	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	H	CH ₃
110	일반식(12)	F	ON	F	F	H	H	H	CH ₃ O
111	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	H
112	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	CH ₃	H	H
113	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	CH ₃ O	H	H
114	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃	H
115	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
116	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
117	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	Cl	H
118	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	F	H
119	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	CH ₃
120	일반식(12)	일반식(12)	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	CH ₃ O
121	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	H	H
122	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	CH ₃	H	H
123	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	CH ₃ O	H	H
124	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	CH ₃	H
125	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
126	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
127	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	Cl	H
128	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	F	H
129	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	H	CH ₃
130	일반식(12)	일반식(12)	ON	OH	OH	H	H	H	CH ₃ O
131	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	H
132	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	CH ₃	H	H
133	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	CH ₃ O	H	H
134	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃	H
135	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
136	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
137	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	Cl	H
138	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	F	H
139	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	CH ₃
140	일반식(12)	OH	ON	일반식(12)	OH	H	H	H	CH ₃ O

[0087]

[0088] [표 1-3]

141	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	H	H
142	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	CH ₃	H	H
143	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	CH ₃ O	H	H
144	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
145	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
146	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
147	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	Cl	H
148	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	F	H
149	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	H	CH ₃
150	일반식(12)	OH	CN	OH	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O
151	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H
152	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃	H	H
153	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃ O	H	H
154	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃	H
155	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
156	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
157	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	Cl	H
158	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	F	H
159	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃
160	일반식(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃ O
161	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	H	H
162	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	CH ₃	H	H
163	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	CH ₃ O	H	H
164	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	CH ₃	H
165	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	CH ₃ O	H
166	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	t-C ₄ H ₉	H
167	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	Cl	H
168	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	F	H
169	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	H	CH ₃
170	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	Cl	H	H	H	CH ₃ O
171	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	H	H
172	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	CH ₃	H	H
173	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
174	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	CH ₃	H
175	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
176	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
177	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	Cl	H
178	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	F	H
179	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	H	CH ₃
180	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
181	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	H	H
182	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	CH ₃	H	H
183	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H	H
184	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃	H
185	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O	H
186	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
187	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	Cl	H
188	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	CH ₃ O	H	H	F	H
189	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
190	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
191	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	H
192	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
193	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
194	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
195	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
196	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
197	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	Cl	H
198	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	F	H
199	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
200	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
201	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	H
202	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
203	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
204	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
205	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
206	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
207	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	Cl	H
208	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	F	H
209	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
210	일반식(12)	일반식(12)	CN	일반식(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O

[0089]

[0094] [표 2-1]

화합물 번호	일반식 (1)					일반식(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
301	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
302	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	CH ₃	H	H
303	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	CH ₃ O	H	H
304	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
305	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
306	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	t-C ₆ H ₉	H
307	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
308	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	F	H
309	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃
310	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O
311	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H	H
312	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
313	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
314	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	H	H
315	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
316	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
317	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
318	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
319	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
320	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
321	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
322	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
323	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	H	H
324	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃	H
325	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
326	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	H	H
327	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
328	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
329	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H	H
330	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
331	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
332	일반식 (12)	CN	H	H	일반식 (12)	H	H	H	H
333	일반식 (12)	CN	H	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
334	일반식 (12)	CN	H	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
335	H	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	H	H
336	H	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
337	H	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
338	H	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
339	H	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
340	H	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
341	일반식 (12)	CN	H	H	H	H	H	H	H
342	일반식 (12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃	H
343	일반식 (12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
344	H	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	H	H
345	H	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃	H
346	H	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
347	H	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	H	H
348	H	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃	H
349	H	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
350	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	H	H
351	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃	H
352	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃ O	H
353	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	H	H
354	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
355	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
356	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
357	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
358	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
359	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
360	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
361	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
362	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	F	H	H	H	H
363	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	F	H	H	CH ₃	H
364	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
365	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	F	H	H	H	H
366	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃	H
367	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃ O	H
368	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	H	H
369	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃	H
370	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃ O	H

[0095]

[0096] [표 2-2]

371	일반식 (12)	ON	F	F	일반식 (12)	H	H	H	H
372	일반식 (12)	ON	F	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
373	일반식 (12)	ON	F	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
374	F	ON	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	H	H
375	F	ON	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
376	F	ON	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
377	F	ON	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
378	F	ON	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
379	F	ON	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
380	일반식 (12)	ON	F	F	F	H	H	H	H
381	일반식 (12)	ON	F	F	F	H	H	CH ₃	H
382	일반식 (12)	ON	F	F	F	H	H	CH ₃ O	H
383	F	ON	일반식 (12)	F	F	H	H	H	H
384	F	ON	일반식 (12)	F	F	H	H	CH ₃	H
385	F	ON	일반식 (12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
386	F	ON	F	일반식 (12)	F	H	H	H	H
387	F	ON	F	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃	H
388	F	ON	F	일반식 (12)	F	H	H	CH ₃ O	H
389	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	H	H
390	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
391	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
392	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	H	H
393	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
394	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
395	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
396	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	Cl	H
397	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	F	H
398	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
399	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
400	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
401	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
402	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
403	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
404	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	H	H
405	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
406	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
407	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	H	H
408	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
409	일반식 (12)	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
410	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	H	H
411	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
412	OH	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
413	일반식 (12)	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	H	H
414	일반식 (12)	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
415	일반식 (12)	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
416	OH	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	H	H
417	OH	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
418	OH	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
419	OH	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H
420	OH	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
421	OH	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
422	일반식 (12)	ON	OH	OH	OH	H	H	H	H
423	일반식 (12)	ON	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
424	일반식 (12)	ON	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
425	OH	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	H	H
426	OH	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
427	OH	ON	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
428	OH	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	H	H
429	OH	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
430	OH	ON	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
431	OH	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	H	H
432	OH	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
433	OH	ON	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
434	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	H	H
435	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
436	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
437	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
438	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	Cl	H
439	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	F	H
440	일반식 (12)	ON	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	H	H

[0097]

[0098] [표 2-3]

441	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
442	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
443	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
444	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	Cl	H
445	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	F	H
446	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH ₂ O	일반식 (12)	H	H	H	H
447	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH ₂ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
448	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
449	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH ₂ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
450	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH ₂ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
451	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	F	H
452	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	H	H
453	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
454	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	OH ₂ O	H
455	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
456	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
457	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	F	H
458	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	H	H
459	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
460	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
461	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
462	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
463	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	F	H
464	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	H	H
465	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
466	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
467	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
468	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
469	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	F	H
470	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	H	H
471	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
472	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
473	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
474	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
475	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	F	H
476	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	H	H
477	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
478	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	OH ₂ O	H
479	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
480	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
481	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	F	H
482	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	H	H
483	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
484	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
485	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
486	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
487	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	F	H
488	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
489	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H
490	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H	H
491	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H
492	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
493	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H
494	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
495	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H
496	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
497	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H
498	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	H	H	C ₂ H ₅	H	H
499	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	C ₂ H ₅	H
500-1	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H	H
500-2	일반식 (12)	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	C ₂ H ₅	H
500-3	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H	H
500-4	H	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	C ₂ H ₅	H
500-5	일반식 (12)	CN	H	H	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
500-6	일반식 (12)	CN	H	H	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H
500-7	H	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
500-8	H	CN	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H
500-9	H	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₂ H ₅	H	H
500-10	H	CN	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₂ H ₅	H

[0099]

[0100] [표 2-4]

500-11	일반식 (12)	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₆	H	H
500-12	일반식 (12)	CN	H	H	H	H	H	C ₆ H ₆	H
500-13	H	CN	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-14	H	CN	일반식 (12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-15	H	CN	H	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-16	H	CN	H	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-17	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-18	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-19	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-20	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-21	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-22	일반식 (12)	CN	F	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-23	F	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-24	일반식 (12)	CN	F	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-25	F	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-26	F	CN	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-27	일반식 (12)	CN	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-28	F	CN	일반식 (12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-29	F	CN	F	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-30	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-31	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-32	일반식 (12)	CN	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-33	OH	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-34	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-35	일반식 (12)	CN	OH	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-36	OH	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-37	일반식 (12)	CN	OH	OH	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-38	OH	CN	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-39	OH	CN	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-40	일반식 (12)	CN	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-41	OH	CN	일반식 (12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-42	OH	CN	OH	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-43	OH	CN	OH	OH	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-44	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-45	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-46	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-47	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₆ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-48	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	C ₆ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-49	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-50	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-51	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-52	일반식 (12)	CN	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H

[0101]

[0102] [표 3-1]

화합물 번호	일반식(1)					일반식(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
501	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H
502	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	CH ₃	H	H
503	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	CH ₃ O	H	H
504	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
505	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
506	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
507	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	Cl	H
508	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	F	H
509	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃
510	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O
511	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H	H
512	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃	H
513	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
514	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	H	H
515	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
516	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
517	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H	H	H
518	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
519	CN	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
520	CN	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	H	H	H
521	CN	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	H	CH ₃	H
522	CN	일반식(12)	H	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
523	CN	H	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	H	H
524	CN	H	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃	H
525	CN	H	일반식(12)	일반식(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
526	CN	일반식(12)	H	H	일반식(12)	H	H	H	H
527	CN	일반식(12)	H	H	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
528	CN	일반식(12)	H	H	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
529	CN	일반식(12)	H	H	H	H	H	H	H
530	CN	일반식(12)	H	H	H	H	H	CH ₃	H
531	CN	일반식(12)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
532	CN	H	일반식(12)	H	H	H	H	H	H
533	CN	H	일반식(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
534	CN	H	일반식(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
535	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	H	H
536	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	CH ₃	H
537	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
538	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	일반식(12)	H	H	H	H
539	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
540	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
541	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	F	H	H	H	H
542	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
543	CN	일반식(12)	일반식(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
544	CN	일반식(12)	F	일반식(12)	F	H	H	H	H
545	CN	일반식(12)	F	일반식(12)	F	H	H	CH ₃	H
546	CN	일반식(12)	F	일반식(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
547	CN	F	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	H	H
548	CN	F	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	CH ₃	H
549	CN	F	일반식(12)	일반식(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
550	CN	일반식(12)	F	F	일반식(12)	H	H	H	H
551	CN	일반식(12)	F	F	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
552	CN	일반식(12)	F	F	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
553	CN	일반식(12)	F	F	F	H	H	H	H
554	CN	일반식(12)	F	F	F	H	H	CH ₃	H
555	CN	일반식(12)	F	F	F	H	H	CH ₃ O	H
556	CN	F	일반식(12)	F	F	H	H	H	H
557	CN	F	일반식(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
558	CN	F	일반식(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
559	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	OH	H	H	H	H
560	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃	H
561	CN	일반식(12)	일반식(12)	일반식(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
562	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	일반식(12)	H	H	H	H
563	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	일반식(12)	H	H	CH ₃	H
564	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	일반식(12)	H	H	CH ₃ O	H
565	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	일반식(12)	H	H	Cl	H
566	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	일반식(12)	H	H	F	H
567	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	OH	H	H	H	H
568	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
569	CN	일반식(12)	일반식(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
570	CN	일반식(12)	OH	일반식(12)	OH	H	H	H	H

[0103]

[0104] [표 3-2]

571	CN	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
572	CN	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
573	CN	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	H	H
574	CN	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃	H
575	CN	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
576	CN	일반식 (12)	OH	OH	일반식 (12)	H	H	H	H
577	CN	일반식 (12)	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
578	CN	일반식 (12)	OH	OH	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
579	CN	일반식 (12)	OH	OH	OH	H	H	H	H
580	CN	일반식 (12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
581	CN	일반식 (12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
582	CN	OH	일반식 (12)	OH	OH	H	H	H	H
583	CN	OH	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
584	CN	OH	일반식 (12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
585	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	H	H
586	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
587	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
588	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
589	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	Cl	H
590	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	F	H
591	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	H	H
592	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
593	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
594	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
595	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	Cl	H
596	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	F	H
597	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	H	H
598	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
599	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
600	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
601	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
602	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	F	H
603	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	H	H
604	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
605	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
606	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
607	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
608	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	F	H
609	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	H	H
610	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
611	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
612	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
613	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	Cl	H
614	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₂ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	F	H
615	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	H	H
616	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
617	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
618	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
619	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
620	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	F	H
621	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	H	H
622	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
623	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
624	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
625	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
626	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	F	H
627	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	H	H
628	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
629	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
630	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
631	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
632	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	F	H
633	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	H	H
634	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	CH ₃	H
635	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	CH ₃ O	H
636	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
637	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	Cl	H
638	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	F	H
639	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₆ H ₅	H	H
640	CN	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H

[0105]

[0106] [표 3-3]

641	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
642	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
643	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	C ₆ H ₅	H	H
644	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
645	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
646	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
647	ON	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
648	ON	일반식 (12)	H	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
649	ON	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
650	ON	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
651	ON	H	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	C ₆ H ₅	H	H
652	ON	H	H	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
653	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
654	ON	일반식 (12)	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
655	ON	H	일반식 (12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
656	ON	H	일반식 (12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
657	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
658	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
659	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
660	ON	일반식 (12)	F	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
661	ON	F	일반식 (12)	일반식 (12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
662	ON	F	F	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
663	ON	일반식 (12)	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
664	ON	F	일반식 (12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
665	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
666	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
667	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
668	ON	일반식 (12)	OH	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
669	ON	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
670	ON	OH	OH	일반식 (12)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
671	ON	일반식 (12)	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
672	ON	OH	일반식 (12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
673	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	Cl	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
674	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	F	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
675	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	CH ₃ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
676	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₆ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
677	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	C ₆ H ₅ O	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
678	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (21)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
679	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (22)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
680	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (23)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H
681	ON	일반식 (12)	일반식 (12)	식 (24)	일반식 (12)	H	H	C ₆ H ₅	H

[0107]

[0108] [표 4-1]

화합물 번호	일반식(1)					일반식(13)						
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ¹¹	R ¹²	R ¹³	R ¹⁴	R ¹⁵	R ¹⁶	R ¹⁷
701	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
702	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	CH ₃	H	H	H	H	H
703	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
704	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
705	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
706	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
707	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
708	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
709	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	CH ₃	H	H	H
710	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
711	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	CH ₃	H	H
712	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
713	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
714	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	Cl	H	H
715	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	F	H	H
716	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
717	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ C ₆ H ₄	H	H
718	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	2,4,6-(CH ₃) ₃ C ₆ H ₂	H	H
719	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄	H	H
720	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₃	H	H
721	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	p-FC ₆ H ₄	H	H
722	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄	H	H
723	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	CH ₃	H
724	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
725	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
726	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	Cl	H
727	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	F	H
728	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
729	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	p-CH ₃ O ₂ H ₄	H
730	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	2,4,6-(CH ₃) ₃ C ₆ H ₂	H
731	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄	H
732	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₃	H
733	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	p-FC ₆ H ₄	H
734	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	일반식(13)	H	H	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄	H
735	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H	H
736	일반식(13)	일반식(13)	CN	H	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
737	일반식(13)	일반식(13)	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H
738	일반식(13)	H	CN	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H	H
739	H	일반식(13)	CN	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H	H
740	일반식(13)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H
741	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	F	H	H	H	H	H	H	H
742	일반식(13)	일반식(13)	CN	H	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
743	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H
744	일반식(13)	F	CN	일반식(13)	F	H	H	H	H	H	H	H
745	F	일반식(13)	CN	일반식(13)	F	H	H	H	H	H	H	H
746	일반식(13)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H
747	일반식(13)	일반식(13)	CN	일반식(13)	OH	H	H	H	H	H	H	H
748	일반식(13)	일반식(13)	CN	OH	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
749	일반식(13)	일반식(13)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H
750	일반식(13)	OH	CN	일반식(13)	OH	H	H	H	H	H	H	H
751	OH	일반식(13)	CN	일반식(13)	OH	H	H	H	H	H	H	H
752	일반식(13)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H
753	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
754	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
755	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
756	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
757	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
758	일반식(13)	일반식(13)	CN	Cl	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
759	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
760	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
761	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
762	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
763	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
764	일반식(13)	일반식(13)	CN	F	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
765	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
766	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
767	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
768	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
769	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
770	일반식(13)	일반식(13)	CN	CH ₃ O	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H

[0109]

[0110] [표 4-2]

771	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
772	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
773	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
774	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
775	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
776	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
777	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
778	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
779	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
780	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
781	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
782	일반식(13)	일반식(13)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
783	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
784	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
785	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
786	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
787	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
788	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(21)	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
789	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
790	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
791	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
792	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
793	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
794	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(22)	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
795	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
796	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
797	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
798	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
799	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
800	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(23)	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H
801	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	H	H	H	H	H
802	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	CH ₃	H	H	H	H
803	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
804	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H
805	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	Cl	H	H	H	H
806	일반식(13)	일반식(13)	CN	식(24)	일반식(13)	H	H	F	H	H	H	H

[0111]

$[0112]$ $[\overline{5} \ 5 -1]$

화합물 번호	일반식 (1)					일반식 (14)										
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶²	R ⁶³	R ⁶⁴	R ⁶⁵	R ⁶⁷	R ⁶⁸	R ⁶¹	R ⁶¹ , R ⁶⁶ , R ⁶⁸ , R ⁶⁹			
801	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
802	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H			
803	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H			
804	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
805	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
806	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
807	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
808	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	F	H	H	H	H	H	H	H			
809	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H			
910	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H			
911	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H			
912	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H			
913	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H			
914	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H			
915	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H			
916	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H			
917	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H			
918	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H			
919	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H			
920	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	H	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
921	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H			
922	일반식 (14)	H	CN	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H			
923	H	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H			
924	일반식 (14)	H	ON	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H			
925	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H			
926	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	F	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
927	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H			
928	일반식 (14)	F	CN	일반식 (14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H			
929	F	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H			
930	일반식 (14)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H			
931	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	일반식 (14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H			
932	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	OH	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
933	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H			
934	일반식 (14)	OH	CN	일반식 (14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H			
935	OH	일반식 (14)	ON	일반식 (14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H			
936	일반식 (14)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H			
937	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	Cl	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
938	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	Cl	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
939	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	Cl	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
940	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	Cl	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
941	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	Cl	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
942	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	Cl	일반식 (14)	H	F	H	H	H	H	H	H			
943	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
944	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
945	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
946	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
947	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	F	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
948	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	F	일반식 (14)	H	F	H	H	H	H	H	H			
949	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	CH ₃ O	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
950	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	CH ₃ O	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
951	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	CH ₃ O	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
952	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	CH ₃ O	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
953	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	CH ₃ O	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
954	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	CH ₃ O	일반식 (14)	H	F	H	H	H	H	H	H			
955	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
956	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
957	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
958	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
959	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
960	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	F	H	H	H	H	H	H			
961	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
962	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
963	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
964	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			
965	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H			
966	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	C ₄ H ₉ O	일반식 (14)	H	F	H	H	H	H	H	H			
967	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	식 (21)	일반식 (14)	H	H	H	H	H	H	H	H			
968	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	식 (21)	일반식 (14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H			
969	일반식 (14)	일반식 (14)	ON	식 (21)	일반식 (14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H			
970	일반식 (14)	일반식 (14)	CN	식 (21)	일반식 (14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H			

[0113] [Ⅹ 5-2]

971	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(21)	일반식(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
972	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(21)	일반식(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
973	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
974	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	OH ₂	H	H	H	H	H	H
976	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
976	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	t-O ₂ H ₃	H	H	H	H	H	H
977	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
978	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(22)	일반식(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
989	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
990	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	OH ₂	H	H	H	H	H	H
981	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
982	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	t-O ₂ H ₃	H	H	H	H	H	H
983	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
984	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(23)	일반식(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
985	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
986	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	OH ₂	H	H	H	H	H	H
987	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
988	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	t-O ₂ H ₃	H	H	H	H	H	H
989	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
990	일반식(14)	일반식(14)	CN	식(24)	일반식(14)	H	F	H	H	H	H	H	H

[0115]

[표 6-1]

화합물 번호	일반식 (1)					일반식 (15)				
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ¹¹ R ⁶⁰	R ¹² R ⁷⁰	R ¹³ R ⁷⁸	R ¹⁴ R ⁷⁷	R ¹⁵ R ⁷⁰
1001	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1002	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	CH ₃	H	H	H
1003	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	CH ₃ O	H	H	H
1004	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	C ₆ H ₅	H	H	H
1005	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	CH ₃	H	CH ₃	H
1006	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H
1007	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	C ₆ H ₅	H	C ₆ H ₅	H
1008	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1009	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1010	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1011	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1012	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1013	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
1014	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	일반식 (15)	H	H	p-C ₆ H ₄ -C ₆ H ₄	H	H
1015	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	H	H	H	H	H	H
1016	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	H	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1017	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	H	H	H	H	H	H	H
1018	일반식 (15)	H	CN	일반식 (15)	H	H	H	H	H	H
1019	H	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	H	H	H	H	H	H
1020	일반식 (15)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H
1021	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	F	H	H	H	H	H
1022	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1023	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	F	H	H	H	H	H
1024	일반식 (15)	F	CN	일반식 (15)	F	H	H	H	H	H
1025	F	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	F	H	H	H	H	H
1026	일반식 (15)	F	CN	F	OH	H	H	H	H	H
1027	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	OH	H	H	H	H	H
1028	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	OH	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1029	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1030	일반식 (15)	OH	CN	일반식 (15)	OH	H	H	H	H	H
1031	OH	일반식 (15)	CN	일반식 (15)	OH	H	H	H	H	H
1032	일반식 (15)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1033	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1034	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1035	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1036	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1037	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1038	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	Cl	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1039	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1040	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1041	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1042	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1043	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1044	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	F	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1045	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1046	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1047	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1048	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1049	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1050	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	CH ₃ O	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1051	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1052	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1053	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1054	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1055	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1056	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1057	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1058	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1059	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1060	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1061	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1062	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	C ₆ H ₅ O	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1063	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1064	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1065	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1066	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1067	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1068	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (21)	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1069	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1070	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H

[0117]

[표 6-2]

1071	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1072	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1073	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1074	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (22)	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1075	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1076	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1077	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1078	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1079	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1080	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (23)	일반식 (15)	H	H	F	H	H
1081	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	H	H	H
1082	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	CH ₃	H	H
1083	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1084	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1085	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	Cl	H	H
1086	일반식 (15)	일반식 (15)	CN	식 (24)	일반식 (15)	H	H	F	H	H

[0119]

[0120] 일반식 (1) 로 나타내는 화합물의 분자량은, 예를 들어 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 포함하는 유기층을 증착법에 의해 막제조하여 이용하는 것을 의도하는 경우에는, 1500 이하인 것이 바람직하고, 1200 이하인 것이 보다 바람직하고, 1000 이하인 것이 더욱 바람직하며, 800 이하인 것이 보다 더 바람직하다. 분자량의 하한값은 통상적으로 247 이상이고, 바람직하게는 290 이상이다.

[0121] 일반식 (1) 로 나타내는 화합물은 분자량에 상관없이 도포법으로 막형성해도 된다. 도포법을 이용하면, 분

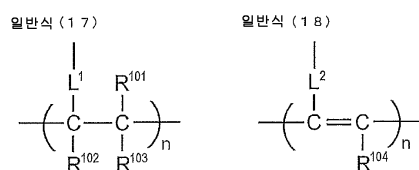
자량이 비교적 큰 화합물이어도 막형성하는 것이 가능하다.

[0122] 본 발명을 응용하여, 분자 내에 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 복수 개 포함하는 화합물을 유기 발광 소자의 발광층에 사용하는 것도 생각할 수 있다.

[0123] 예를 들어, 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 중합성 모노머를 중합시킨 중합체를 유기 발광 소자의 발광층에 사용하는 것을 생각할 수 있다. 구체적으로는, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 어느 것에 중합성 관능기를 갖는 모노머를 준비하여, 이것을 단독으로 중합시키거나, 다른 모노머와 함께 공중합시킴으로써, 반복 단위를 갖는 중합체를 얻어, 그 중합체를 유기 발광 소자의 발광층에 사용하는 것을 생각할 수 있다. 혹은, 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 화합물끼리를 커플링시킴으로써 2 량체나 3 량체를 얻어, 그들을 유기 발광 소자의 발광층에 사용하는 것도 생각할 수 있다.

[0124] 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 포함하는 중합체를 구성하는 반복 단위의 구조예로서, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 어느 것이 하기 일반식 (17) 또는 (18) 로 나타내는 구조인 것을 들 수 있다.

[0125] [화학식 13]



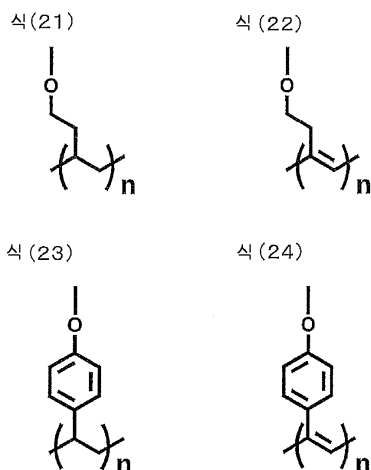
[0126]

[0127] 일반식 (17) 및 (18) 에 있어서, L^1 및 L^2 는 연결기를 나타낸다. 연결기의 탄소수는 바람직하게는 0 ~ 20 이고, 보다 바람직하게는 1 ~ 15 이며, 더욱 바람직하게는 2 ~ 10 이다. 연결기는 $-X^{11}-L^{11}-$ 로 나타내는 구조를 갖는 것인 것이 바람직하다. 여기서, X^{11} 은 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고, 산소 원자인 것이 바람직하다. L^{11} 은 연결기를 나타내고, 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하고, 탄소수 1 ~ 10 의 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것이 보다 바람직하다.

[0128] 일반식 (17) 및 (18) 에 있어서, R^{101} , R^{102} , R^{103} 및 R^{104} 는 각각 독립적으로 치환기를 나타낸다. 바람직하게는, 탄소수 1 ~ 6 의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 6 의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 할로젠 원자이고, 보다 바람직하게는 탄소수 1 ~ 3 의 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 3 의 무치환의 알콕시기, 불소 원자, 염소 원자이며, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 ~ 3 의 무치환의 알킬기, 탄소수 1 ~ 3 의 무치환의 알콕시기이다.

[0129] 반복 단위의 구체적인 구조예로서, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 어느 것이 하기 식 (21) ~ (24) 인 것을 들 수 있다. $R^1 \sim R^5$ 중 2 개 이상이 하기 식 (21) ~ (24) 이어도 되지만, 바람직한 것은 $R^1 \sim R^5$ 중 1 개가 하기 식 (21) ~ (24) 기 중 어느 것인 경우이다.

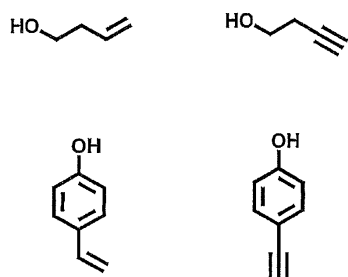
[0130] [화학식 14]



[0131]

[0132] 이들 식 (21) ~ (24) 를 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체는, 일반식 (1) 의 $R^1 \sim R^5$ 중 적어도 1 개를 하이드록시기로 해 두고, 그것을 링커로 하여 하기 화합물을 반응시켜 중합성기를 도입하고, 그 중합성기를 중합시킴으로써 합성할 수 있다.

[0133] [화학식 15]



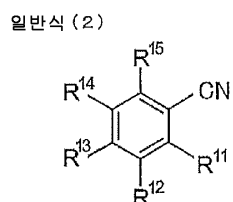
[0134]

[0135] 분자 내에 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 포함하는 중합체는 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 반복 단위만으로 이루어진 중합체이어도 되고, 그 이외의 구조를 갖는 반복 단위를 포함하는 중합체이어도 된다. 또, 중합체 중에 포함되는 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 반복 단위는 단일종이어도 되고, 2 종 이상이어도 된다. 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖지 않는 반복 단위로는, 통상적인 공중합에 사용되는 모노머로부터 유도되는 것을 들 수 있다. 예를 들어, 에틸렌, 스티렌 등의 에틸렌성 불포화 결합을 갖는 모노머로부터 유도되는 반복 단위를 들 수 있다.

[0136] [일반식 (2) 로 나타내는 화합물]

[0137] 일반식 (1) 로 나타내는 화합물 중, 하기의 일반식 (2) 로 나타내는 구조를 갖는 화합물은 신규 화합물이다.

[0138] [화학식 16]



[0139]

[0140] 일반식 (2) 에 있어서, R^{11} , R^{12} , R^{14} 및 R^{15} 중 적어도 1 개는 시아노기이고, $R^{11} \sim R^{15}$ 중 적어도 3 개는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1,2,3,4-테트라하이드로-9-카르바졸릴기, 치환 혹은 무치환의 1-인돌릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노기이고, 나머지 $R^{11} \sim R^{15}$ 는 하이드록시기를 나타낸다.

[0141] 일반식 (2) 에 있어서의 $R^{11} \sim R^{15}$ 중에서는, R^{11} 과 R^{12} 중 어느 일방이 시아노기인 것이 바람직하다. $R^{11} \sim R^{15}$ 중 적어도 3 개는 상기 9-카르바졸릴기 등이지만, 이들 3 개의 치환기는 동일해도 되고 상이해도 된다.

바람직한 것은 모두가 동일한 경우이다. $R^{11} \sim R^{15}$ 중 적어도 3 개는 상기 일반식 (12) ~ (15) 중 어느 것으로 나타내는 구조를 갖는 기인 것이 바람직하다. 일반식 (12) ~ (15) 의 구체예와 바람직한 범위에 대해서는, 상기 일반식 (1) 에 있어서의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 일반식 (2) 의 $R^{11} \sim R^{15}$ 중 하이드록시기인 것은 제로 또는 1 개이다. 1 개가 하이드록시기인 경우, 그것은 R^{14} 인 것이 바람직하다. 예를 들어, R^{12} 가 시아노기이고, R^{14} 가 하이드록시기인 경우를 들 수 있다.

[0142] 일반식 (2) 로 나타내는 화합물의 합성법은 특별히 제한되지 않는다. 일반식 (2) 로 나타내는 화합물의 합성은 이미 알려진 합성법이나 조건을 적절히 조합함으로써 실시할 수 있다.

[0143] 예를 들어, 바람직한 합성법으로서, 테트라플루오로디시아노벤젠을 준비하여, 이것을 카르바졸, 인돌, 디아릴아민 등으로 반응시키는 방법을 들 수 있다. 이에 따라, 일반식 (2) 의 $R^{11} \sim R^{15}$ 중 어느 1 개가 시아노기이고, 나머지가 카르바졸릴기, 인돌릴기 또는 디아릴아미노기인 화합물을 합성할 수 있다. 출발 물질로서 트리플루오로트리시아노벤젠을 사용하면, 일반식 (2) 의 $R^{11} \sim R^{15}$ 중 어느 2 개가 시아노기이고, 나머지가 카르바졸릴기, 인돌릴기 또는 디아릴아미노기인 화합물을 합성할 수 있다. 또, 추가로 물을 첨가하여 초음파 조사하는 등의 공정을 실시함으로써, 벤젠 고리에 하이드록시기를 도입할 수도 있다.

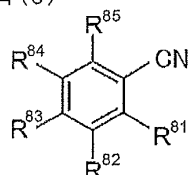
[0144] 상기 반응의 상세한 내용에 대해서는, 후술하는 합성예를 참고로 할 수 있다. 또, 일반식 (2) 로 나타내는 화합물은 그 밖의 공지된 합성 반응을 조합함으로써도 합성할 수 있다.

[0145] [일반식 (3) 으로 나타내는 화합물]

[0146] 일반식 (1) 로 나타내는 화합물 중, 하기의 일반식 (3) 으로 나타내는 구조를 갖는 화합물은 청색 발광 재료로서 유용하다.

[0147] [화학식 17]

일반식 (3)

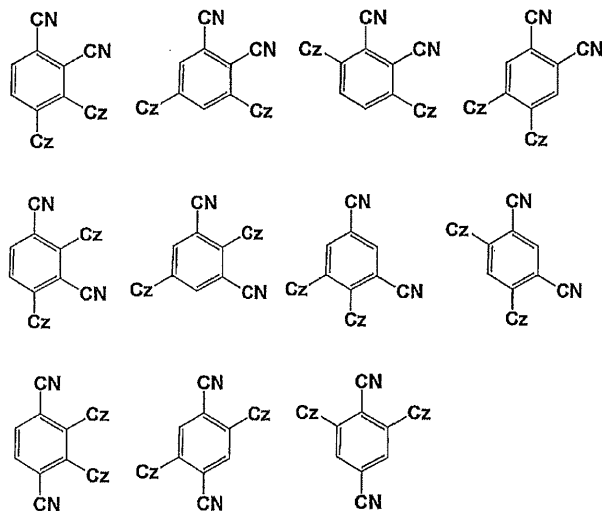


[0148]

[0149] 일반식 (3) 에 있어서, $R^{81} \sim R^{85}$ 중 1 개는 시아노기이고, $R^{81} \sim R^{85}$ 중 2 개는 치환 혹은 무치환의 9-카르바졸릴기이며, 그 밖의 2 개는 수소 원자를 나타낸다.

[0150] 이하에 있어서, 일반식 (3) 으로 나타내는 화합물의 구체예를 예시하지만, 본 발명에 있어서 사용할 수 있는 일반식 (3) 으로 나타내는 화합물은 이들 구체예에 의해 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다. 이하의 구체예에 있어서의 Cz 는 9-카르바졸릴기를 나타낸다. Cz 가 3-메틸카르바졸-9-일기 또는 3,6-디메틸카르바졸-9-일기인 화합물도 예시할 수 있다.

[0151] [화학식 18]



[0152]

[0153] [유기 발광 소자]

[0154] 본 발명의 일반식 (1) 로 나타내는 화합물은 유기 발광 소자의 발광 재료로서 유용하다. 이 때문에, 본 발명의 일반식 (1) 로 나타내는 화합물은 유기 발광 소자의 발광층에 발광 재료로서 효과적으로 사용할 수 있다.

일반식 (1) 로 나타내는 화합물 중에는, 지연 형광을 방사하는 지연 형광 재료 (지연 형광체) 가 포함되어 있다. 즉 본 발명은 일반식 (1) 로 나타내는 구조를 갖는 지연 형광체의 발명과, 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 지연 형광체로서 사용하는 발명과, 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 사용하여 지연 형광을 발광시키는 방법의 발명도 제공한다. 그와 같은 화합물을 발광 재료로서 사용한 유기 발광 소자는 지연 형광을 방사하고, 발광 효율이 높다는 특징을 갖는다. 그 원리를 유기 일렉트로루미네선스 소자를 예로 들어 설명하면, 이하와 같이 된다.

[0155] 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서는, 정부 (正負) 의 양 전극으로부터 발광 재료에 캐리어를 주입하고, 여기 상태의 발광 재료를 생성하여, 발광시킨다. 통상적으로 캐리어 주입형의 유기 일렉트로루미네선스 소자의 경우, 생성한 여기자 중, 여기 일중항 상태로 여기되는 것은 25 % 이고, 나머지 75 % 는 여기 삼중항 상태로 여기된다. 따라서, 여기 삼중항 상태로부터의 발광인 인광을 이용하는 쪽이 에너지의 이용 효율이 높다.

그러나, 여기 삼중항 상태는 수명이 길기 때문에, 여기 상태의 포화나 여기 삼중항 상태의 여기자와의 상호작용에 의한 에너지의 실패가 일어나, 일반적으로 인광의 양자 수율이 높지 않은 경우가 많다. 한편, 지연 형광 재료는, 항간 교차 등에 의해 여기 삼중항 상태로 에너지가 천이한 후, 삼중항-삼중항 소멸 혹은 열에너지의 흡수에 의해, 여기 일중항 상태로 역항간 교차되어 형광을 방사한다. 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서는, 그 중에서도 열에너지의 흡수에 의한 열 활성화형의 지연 형광 재료가 특히 유용한 것으로 생각된다.

유기 일렉트로루미네선스 소자에 지연 형광 재료를 이용한 경우, 여기 일중항 상태의 여기자는 통상과 같이 형광을 방사한다. 한편, 여기 삼중항 상태의 여기자는 디바이스가 발하는 열을 흡수하여 여기 일중항으로 항간 교차되어 형광을 방사한다. 이 때, 여기 일중항으로부터의 발광이기 때문에 형광과 동일 파장에서의 발광이면서, 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차에 의해, 발생하는 광의 수명 (발광 수명) 은 통상적인 형광이나 인광보다 길어지기 때문에, 이들보다 지연된 형광으로서 관찰된다. 이것을 지연 형광으로서 정의할 수 있다. 이와 같은 열 활성화형의 여기자 이동 기구를 이용하면, 캐리어 주입 후에 열 에너지의 흡수를 거침으로써, 통상적으로는 25 % 밖에 생성되지 않았던 여기 일중항 상태의 화합물의 비율을 25 % 이상으로 끌어 올리는 것이 가능해진다. 100 °C 미만의 낮은 온도에서도 강한 형광 및 지연 형광을 발하는 화합물을 사용하면, 디바이스의 열로 충분히 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 항간 교차가 발생하여 지연 형광을 방사하기 때문에, 발광 효율을 비약적으로 향상시킬 수 있다.

[0156] 본 발명의 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 발광층의 발광 재료로서 사용함으로써, 유기 포토 루미네선스 소자 (유기 PL 소자) 나 유기 일렉트로루미네선스 소자 (유기 EL 소자) 등의 우수한 유기 발광 소자를 제공할 수 있다. 유기 포토 루미네선스 소자는 기판 상에 적어도 발광층을 형성한 구조를 갖는다. 또, 유기 일렉트로루미네선스 소자는 적어도 양극, 음극, 및 양극과 음극 사이에 유기층을 형성한 구조를 갖는다. 유기층은 적어도 발광층을 포함하는 것이며, 발광층만으로 이루어지는 것이어도 되고, 발광층 외에 1 층 이상의 유기층을

갖는 것이어도 된다. 그와 같은 다른 유기층으로서, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 저지층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층, 여기자 저지층 등을 들 수 있다. 정공 수송층은 정공 주입 기능을 가진 정공 주입 수송층이어도 되고, 전자 수송층은 전자 주입 기능을 가진 전자 주입 수송층이어도 된다. 구체적인 유기 일렉트로루미네선스 소자의 구조예를 도 1 에 나타낸다. 도 1 에 있어서, 1 은 기판, 2 는 양극, 3 은 정공 주입층, 4 는 정공 수송층, 5 는 발광층, 6 은 전자 수송층, 7 은 음극을 나타낸다.

[0157] 이하에 있어서, 유기 일렉트로루미네선스 소자의 각 부재 및 각 층에 대하여 설명한다. 또한, 기판과 발광층의 설명은 유기 포토 루미네선스 소자의 기판과 발광층에도 해당한다.

[0158] (기판)

[0159] 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는 기판에 지지되고 있는 것이 바람직하다. 이 기판에 대해서는, 특별히 제한은 없고, 종래부터 유기 일렉트로루미네선스 소자에 관용되고 있는 것이면 되며, 예를 들어, 유리, 투명 플라스틱, 석영, 실리콘 등으로 이루어진 것을 사용할 수 있다.

[0160] (양극)

[0161] 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서의 양극으로는, 일함수가 큰 (4 eV 이상) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 바람직하게 이용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로는 Au 등의 금속, CuI, 인듐틴옥사이드 (ITO), SnO_2 , ZnO 등의 도전성 투명 재료를 들 수 있다. 또, IDIXO ($\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$) 등 비정질이고 투명 도전막을 제조 가능한 재료를 사용해도 된다. 양극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의해 박막을 형성시켜, 포토리소그래피법으로 원하는 형상의 패턴을 형성해도 되고, 혹은 패턴 정밀도를 그다지 필요로 하지 않는 경우에는 (100 μm 이상 정도), 상기 전극 재료의 증착이나 스퍼터링시에 원하는 형상의 마스크를 개재하여 패턴을 형성해도 된다. 혹은, 유기 도전성 화합물과 같이 도포 가능한 재료를 사용하는 경우에는, 인쇄 방식, 코팅 방식 등 습식 막형성법을 이용할 수도 있다. 이 양극으로부터 발광을 취출하는 경우에는, 투과율을 10 % 보다 크게 하는 것이 바람직하고, 또 양극으로서의 시트 저항은 수 백 $\Omega/\square$ 이하가 바람직하다. 또한 막두께는 재료에 따라 다르기도 하지만, 통상적으로 10 ~ 1000 nm, 바람직하게는 10 ~ 200 nm 의 범위에서 선택된다.

[0162] (음극)

[0163] 한편, 음극으로는, 일함수가 작은 (4 eV 이하) 금속 (전자 주입성 금속이라고 칭한다), 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 이용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로는, 나트륨, 나트륨-칼륨 합금, 마그네슘, 리튬, 마그네슘/구리 혼합물, 마그네슘/은 혼합물, 마그네슘/알루미늄 혼합물, 마그네슘/인듐 혼합물, 알루미늄/산화알루미늄 (Al_2O_3) 혼합물, 인듐, 리튬/알루미늄 혼합물, 희토류 금속 등을 들 수 있다. 이들 중에서, 전자 주입성 및 산화 등에 대한 내구성의 점에서, 전자 주입성 금속과 이것보다 일함수의 값이 커 안정적인 금속인 제 2 금속의 혼합물, 예를 들어, 마그네슘/은 혼합물, 마그네슘/알루미늄 혼합물, 마그네슘/인듐 혼합물, 알루미늄/산화알루미늄 (Al_2O_3) 혼합물, 리튬/알루미늄 혼합물, 알루미늄 등이 적합하다.

음극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의해 박막을 형성시킴으로써 제조할 수 있다. 또, 음극으로서의 시트 저항은 수 백 $\Omega/\square$ 이하가 바람직하고, 막두께는 통상적으로 10 nm ~ 5 μm , 바람직하게는 50 ~ 200 nm 의 범위에서 선택된다. 또한, 발광한 광을 투과시키기 위해서, 유기 일렉트로루미네선스 소자의 양극 또는 음극 중 어느 일방이 투명 또는 반투명이면 발광 휘도가 향상되어 좋다.

[0164] 또, 양극의 설명에서 예시한 도전성 투명 재료를 음극에 사용함으로써, 투명 또는 반투명의 음극을 제조할 수 있고, 이것을 응용함으로써 양극과 음극의 양방이 투과성을 갖는 소자를 제조할 수 있다.

[0165] (발광층)

[0166] 발광층은, 양극 및 음극의 각각으로부터 주입된 정공 및 전자가 재결합함으로써 여기자가 생성된 후, 발광하는 층이며, 발광 재료를 단독으로 발광층에 사용해도 되지만, 바람직하게는 발광 재료와 호스트 재료를 포함한다.

발광 재료로는, 일반식 (1) 로 나타내는 본 발명의 화합물 군에서 선택되는 1 종 또는 2 종 이상을 사용할 수 있다. 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자 및 유기 포토 루미네선스 소자가 높은 발광 효율을 발현하기 위해서는, 발광 재료에 생성된 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 발광 재료 중에 가두는 것이 중요하다.

따라서, 발광층 중에 발광 재료에 더하여 호스트 재료를 사용하는 것이 바람직하다. 호스트 재료로는, 여기 일중항 에너지, 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 일방이 본 발명의 발광 재료보다 높은 값을 갖는 유기 화합물을 사용할 수 있다. 그 결과, 본 발명의 발광 재료에 생성된 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 본

발명의 발광 재료의 분자 중에 가두는 것이 가능해져, 그 발광 효율을 충분히 꺼내는 것이 가능해진다. 무엇보다도, 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 충분히 가둘 수는 없어도, 높은 발광 효율을 얻는 것이 가능한 경우도 있기 때문에, 높은 발광 효율을 실현할 수 있는 호스트 재료이면 특별히 제약없이 본 발명에 사용할 수 있다. 본 발명의 유기 발광 소자 또는 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서, 발광은 발광층에 포함되는 본 발명의 발광 재료로부터 발생한다. 이 발광은 형광 발광 및 지연 형광 발광의 양방을 포함한다. 단, 발광의 일부 혹은 부분적으로 호스트 재료로부터의 발광이 있어도 상관없다.

[0167] 호스트 재료를 사용하는 경우, 발광 재료인 본 발명의 화합물이 발광층 중에 함유되는 양은 0.1 중량% 이상인 것이 바람직하고, 1 중량% 이상인 것이 보다 바람직하며, 또, 50 중량% 이하인 것이 바람직하고, 20 중량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 10 중량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.

[0168] 발광층에 있어서의 호스트 재료로는, 정공 수송능, 전자 수송능을 갖고, 또한 발광의 장파장화를 막고, 게다가 높은 유리 전이 온도를 갖는 유기 화합물인 것이 바람직하다.

[0169] (주입층)

[0170] 주입층이란, 구동 전압 저하나 발광 휘도 향상을 위해서 전극과 유기층간에 형성되는 층으로, 정공 주입층과 전자 주입층이 있으며, 양극과 발광층 또는 정공 수송층 사이, 및 음극과 발광층 또는 전자 수송층 사이에 존재시켜도 된다. 주입층은 필요에 따라 형성할 수 있다.

[0171] (저지층)

[0172] 저지층은 발광층 중에 존재하는 전하 (전자 혹은 정공) 및/또는 여기자의 발광층 외로의 확산을 저지할 수 있는 층이다. 전자 저지층은, 발광층 및 정공 수송층 사이에 배치될 수 있어, 전자가 정공 수송층 쪽을 향해 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 마찬가지로, 정공 저지층은 발광층 및 전자 수송층 사이에 배치될 수 있어, 정공이 전자 수송층 쪽을 향해 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 저지층은 또 여기자가 발광층의 외측으로 확산하는 것을 저지하기 위해서 사용할 수 있다. 즉 전자 저지층, 정공 저지층은 각각 여기자 저지층으로서의 기능도 겸비할 수 있다. 본 명세서에서 말하는 전자 저지층 또는 여기자 저지층은 하나의 층에서 전자 저지층 및 여기자 저지층의 기능을 갖는 층을 포함하는 의미로 사용된다.

[0173] (정공 저지층)

[0174] 정공 저지층이란, 넓은 의미에서는 전자 수송층의 기능을 갖는다. 정공 저지층은 전자를 수송하면서, 정공이 전자 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있으며, 이에 따라 발광층 중에서의 전자와 정공의 재결합 확률을 향상시킬 수 있다. 정공 저지층의 재료로는, 후술하는 전자 수송층의 재료를 필요에 따라 사용할 수 있다.

[0175] (전자 저지층)

[0176] 전자 저지층이란, 넓은 의미에서는 정공을 수송하는 기능을 갖는다. 전자 저지층은 정공을 수송하면서, 전자가 정공 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있으며, 이에 따라 발광층 중에서의 전자와 정공이 재결합하는 확률을 향상시킬 수 있다.

[0177] (여기자 저지층)

[0178] 여기자 저지층이란, 발광층 내에서 정공과 전자가 재결합함으로써 발생한 여기자가 전하 수송층으로 확산하는 것을 저지하기 위한 층이며, 본 층의 삽입에 의해 여기자를 효율적으로 발광층 내에 가두는 것이 가능해져, 소자의 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 여기자 저지층은 발광층에 인접하여 양극측, 음극측 중 어느 것에도 삽입할 수 있고, 양방 동시에 삽입하는 것도 가능하다. 즉, 여기자 저지층을 양극측에 갖는 경우, 정공 수송층과 발광층 사이에 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있으며, 음극측에 삽입하는 경우, 발광층과 음극 사이에 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있다. 또, 양극과, 발광층의 양극측에 인접하는 여기자 저지층 사이에는, 정공 주입층이나 전자 저지층 등을 가질 수 있으며, 음극과, 발광층의 음극측에 인접하는 여기자 저지층 사이에는, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 저지층 등을 가질 수 있다. 저지층을 배치하는 경우, 저지층으로서 사용하는 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 일방은 발광 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지보다 높은 것이 바람직하다.

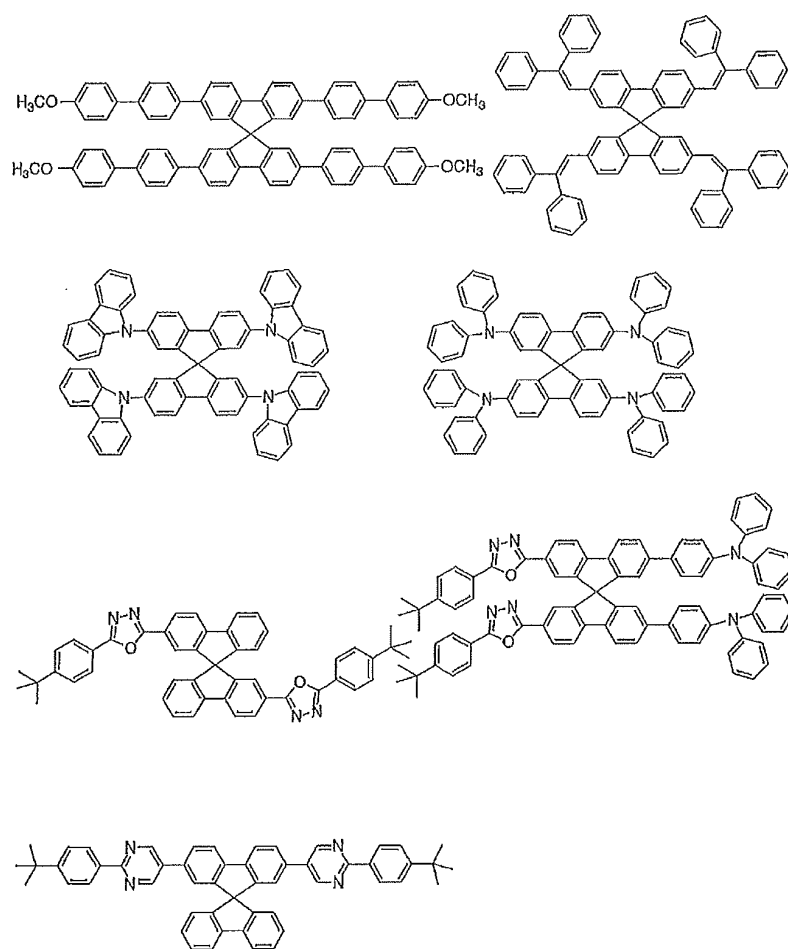
[0179] (정공 수송층)

[0180] 정공 수송층이란, 정공을 수송하는 기능을 갖는 정공 수송 재료로 이루어지고, 정공 수송층은 단층 또는 복수층

형성할 수 있다.

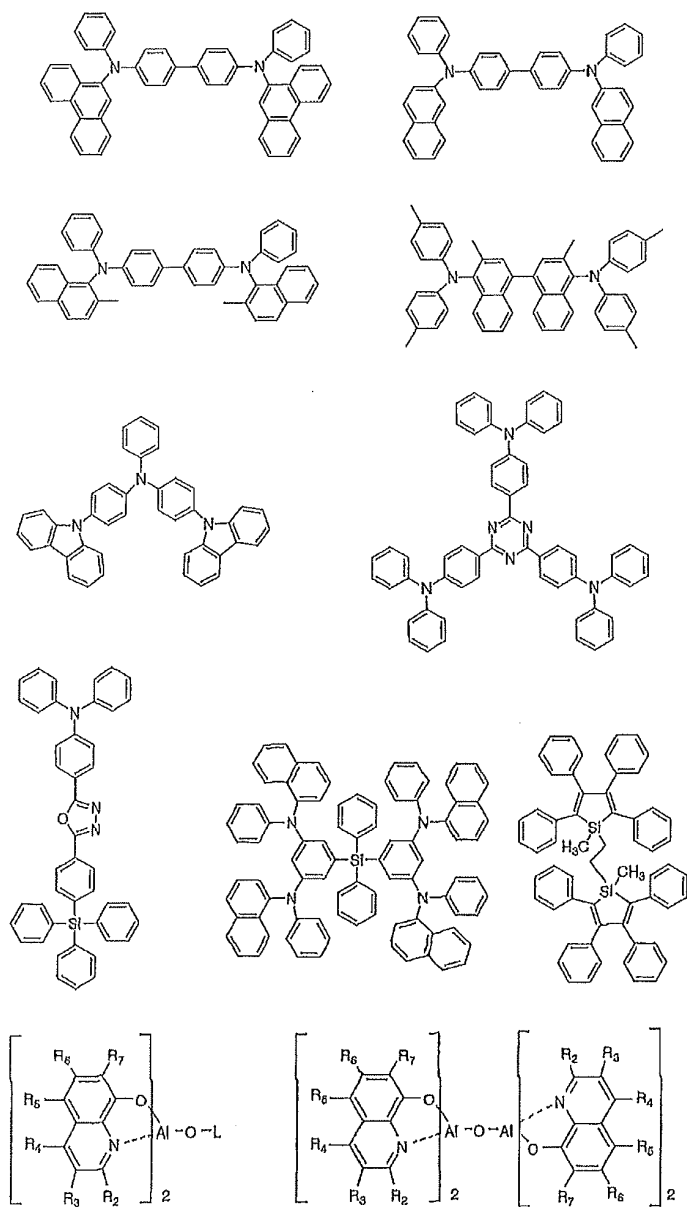
- [0181] 정공 수송 재료로는, 정공의 주입 또는 수송, 전자의 장벽성 중 어느 것을 갖는 것이며, 유기물, 무기물 중 어느 것이어도 된다. 사용할 수 있는 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, 트리아졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 카르바졸 유도체, 인돌로카르바졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체 및 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 옥사졸 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 하이드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 아닐린계 공중합체, 또 도전성 고분자 올리고머, 특히 티오펜 올리고머 등을 들 수 있지만, 포르피린 화합물, 방향족 제 3 급 아민 화합물 및 스티릴아민 화합물을 사용하는 것이 바람직하고, 방향족 제 3 급 아민 화합물을 사용하는 것이 보다 바람직하다.
- [0182] (전자 수송층)
- [0183] 전자 수송층이란, 전자를 수송하는 기능을 갖는 재료로 이루어지고, 전자 수송층은 단층 또는 복수층 형성할 수 있다.
- [0184] 전자 수송 재료 (정공 저지 재료를 겸하는 경우도 있다) 로는, 음극으로부터 주입된 전자를 발광층으로 전달하는 기능을 갖고 있으면 된다. 사용할 수 있는 전자 수송층으로는, 예를 들어, 니트로 치환 플루오렌 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란디옥사이드 유도체, 카르보디이미드, 플루오레닐리덴메탄 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 안트론 유도체, 옥사디아졸 유도체 등을 들 수 있다. 또한, 상기 옥사디아졸 유도체에 있어서, 옥사디아졸 고리의 산소 원자를 황 원자로 치환한 티아디아졸 유도체, 전자 흡인기로서 알려져 있는 퀴녹살린 고리를 갖는 퀴녹살린 유도체도 전자 수송 재료로서 사용할 수 있다. 또한 이들 재료를 고분자 사슬에 도입한, 또는 이들 재료를 고분자의 주사슬로 한 고분자 재료를 사용할 수도 있다.
- [0185] 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조할 때에는, 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 발광층에 사용할 뿐만 아니라, 발광층 이외의 층에도 사용해도 된다. 그 때, 발광층에 사용하는 일반식 (1) 로 나타내는 화합물과, 발광층 이외의 층에 사용하는 일반식 (1) 로 나타내는 화합물은 동일해도 되고 상이해도 된다. 예를 들어, 상기의 주입층, 저지층, 정공 저지층, 전자 저지층, 여기자 저지층, 정공 수송층, 전자 수송층 등에도 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 사용해도 된다. 이들 층의 막제조 방법은 특별히 한정되지 않고, 드라이 프로세스, 웨트 프로세스 중 어느 것으로 제조해도 된다.
- [0186] 이하에, 유기 일렉트로루미네선스 소자에 사용할 수 있는 바람직한 재료를 구체적으로 예시한다. 단, 본 발명에 있어서 사용할 수 있는 재료는 이하의 예시 화합물에 의해 한정적으로 해석되는 일은 없다. 또, 특정한 기능을 갖는 재료로서 예시한 화합물이어도 되고, 그 밖의 기능을 갖는 재료로서 전용하는 것도 가능하다. 또한, 이하의 예시 화합물의 구조식에 있어서의 R, R', R₁ ~ R₁₀ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. X 는 고리 골격을 형성하는 탄소 원자 또는 복소 원자를 나타내고, n 은 3 ~ 5 의 정수를 나타내고, Y 는 치환기를 나타내며, m 은 0 이상의 정수를 나타낸다.
- [0187] 먼저, 발광층의 호스트 재료로서도 사용할 수 있는 바람직한 화합물을 예시한다.

[0188] [화학식 19]



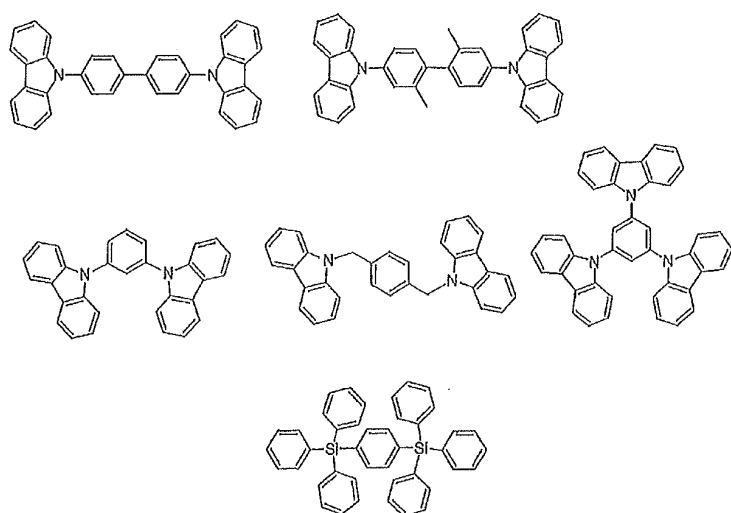
[0189]

[0190] [화학식 20]



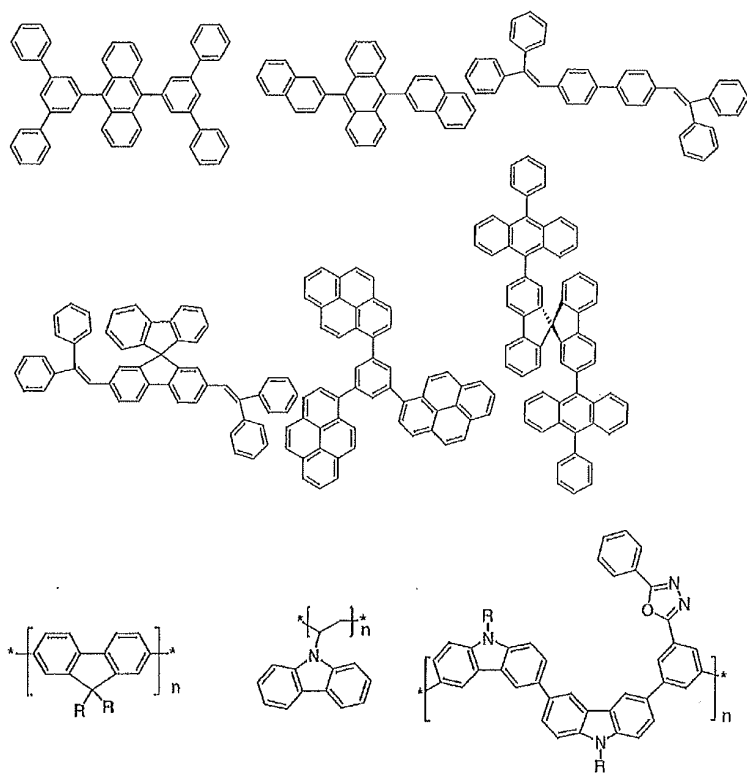
[0191]

[0192] [화학식 21]



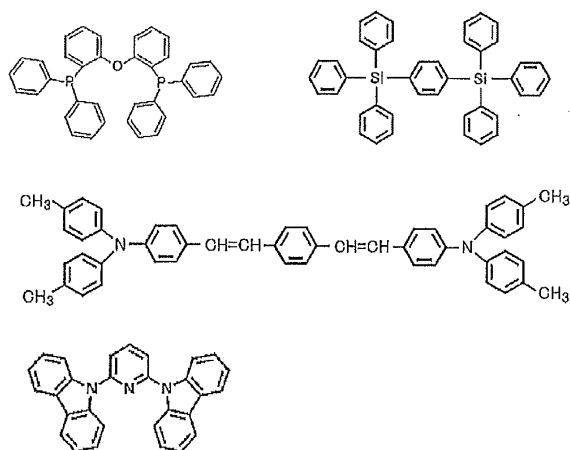
[0193]

[0194] [화학식 22]



[0195]

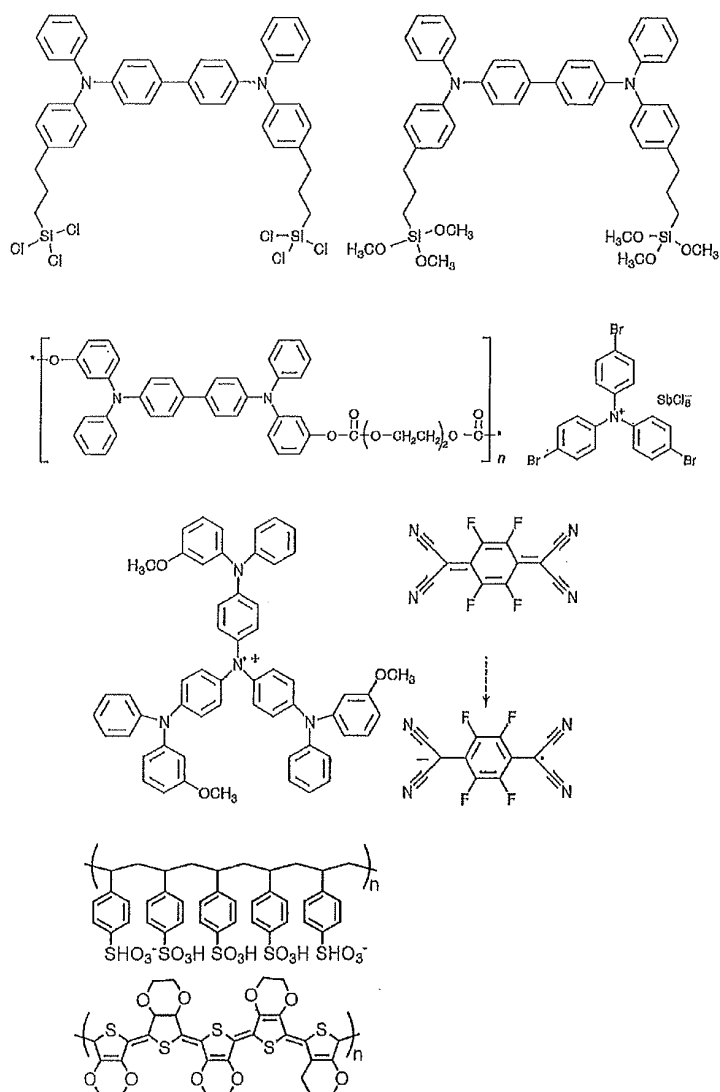
[0196] [화학식 23]



[0197]

[0198] 다음으로, 정공 주입 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

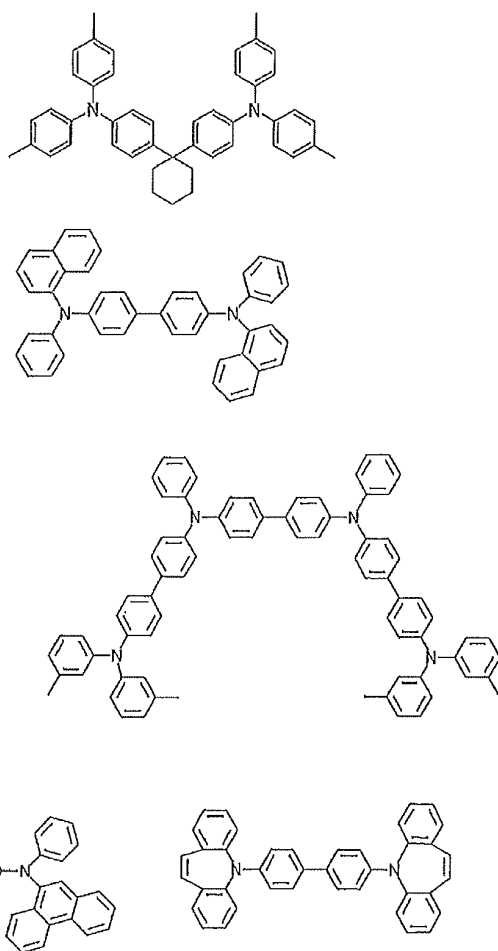
[0199] [화학식 24]



[0200]

[0201] 다음으로, 정공 수송 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

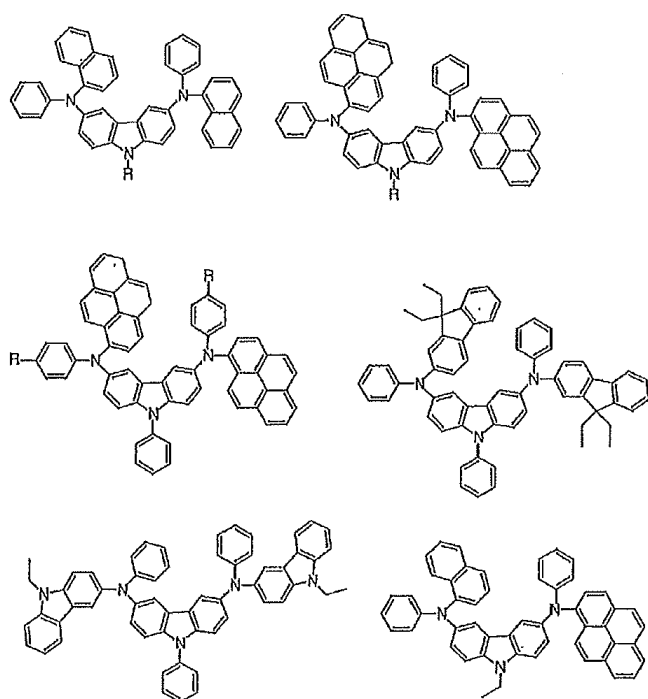
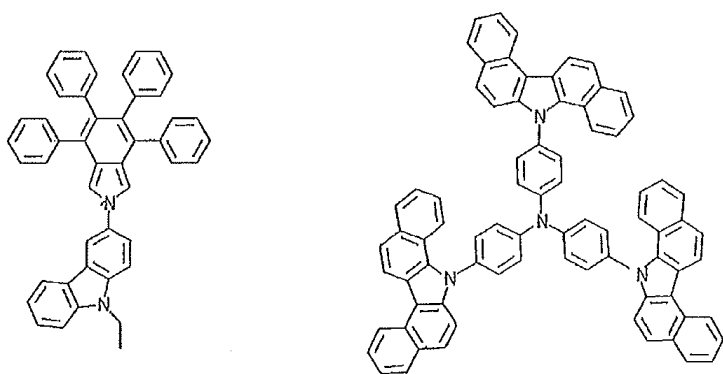
[0202] [화학식 25]



[0203]

[0204]

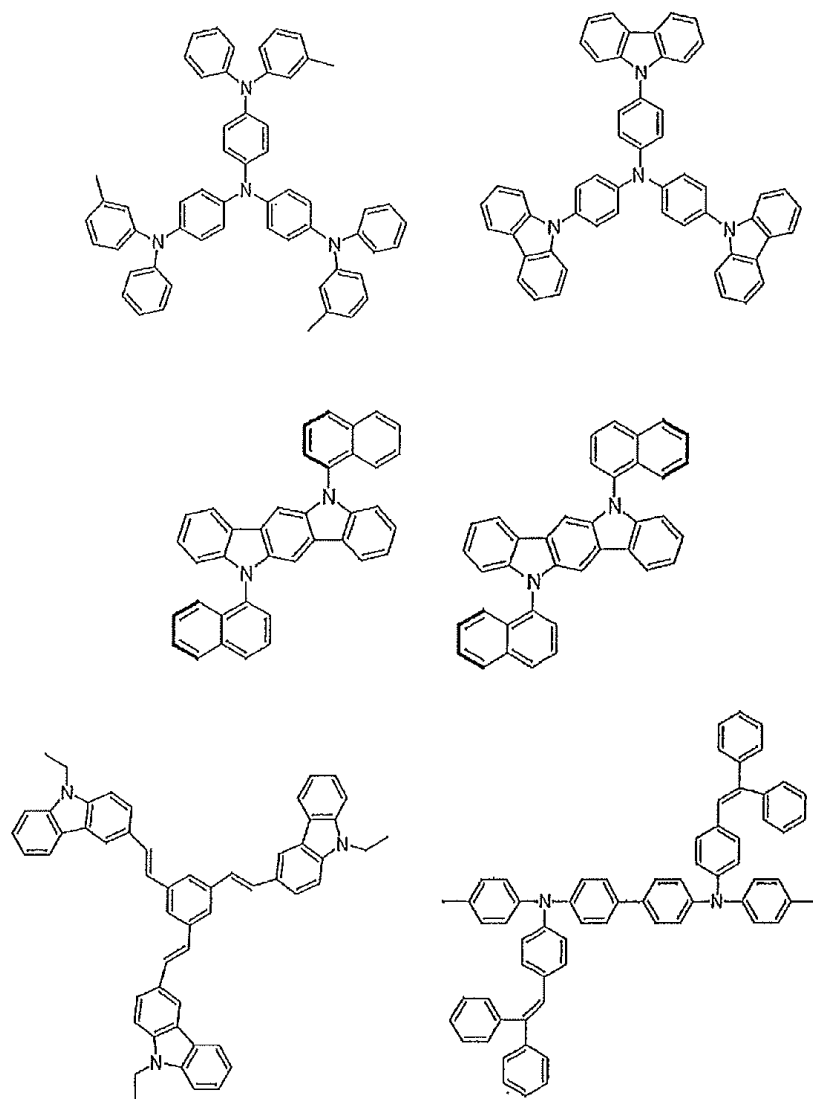
[화학식 26]



[0205]

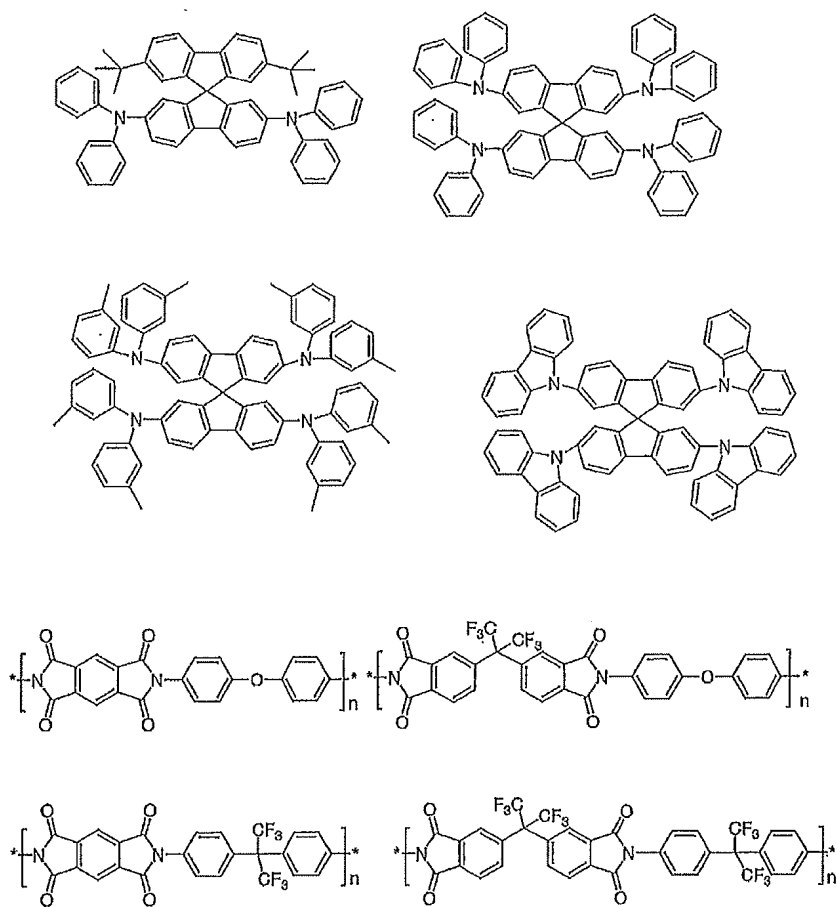
[0206]

[화학식 27]



[0207]

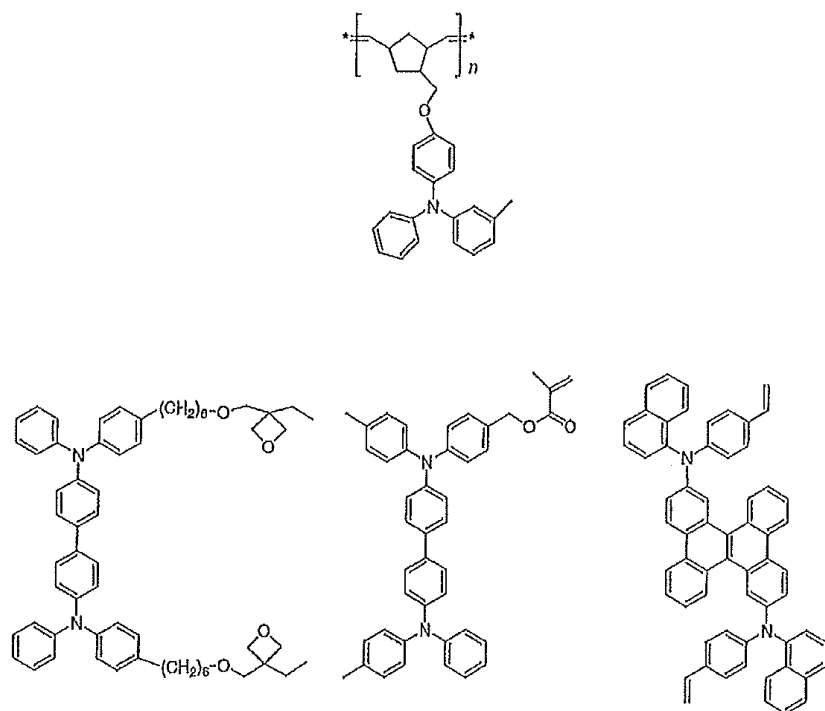
[0208] [화학식 28]



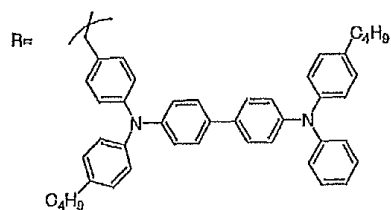
[0209]

[0210]

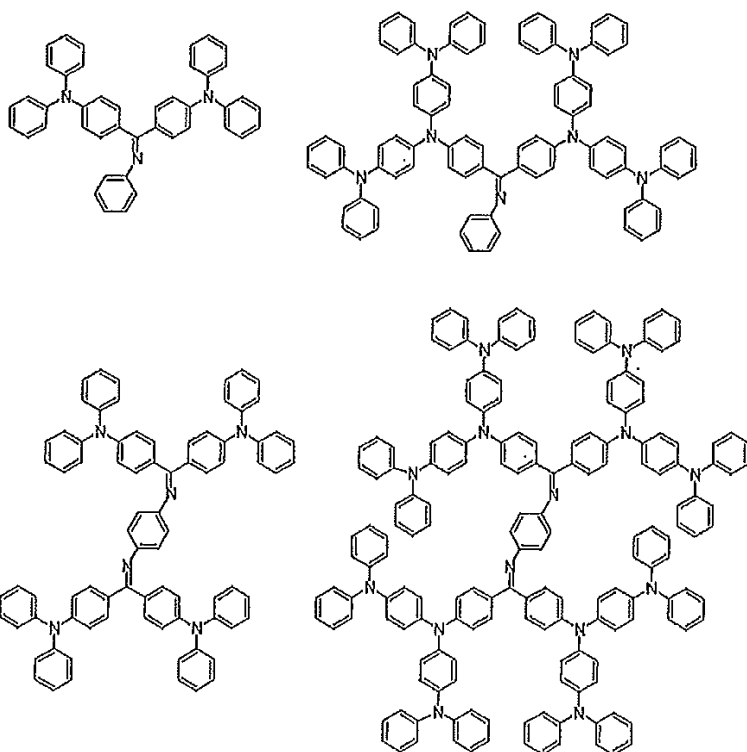
[화학식 29]



[0211]



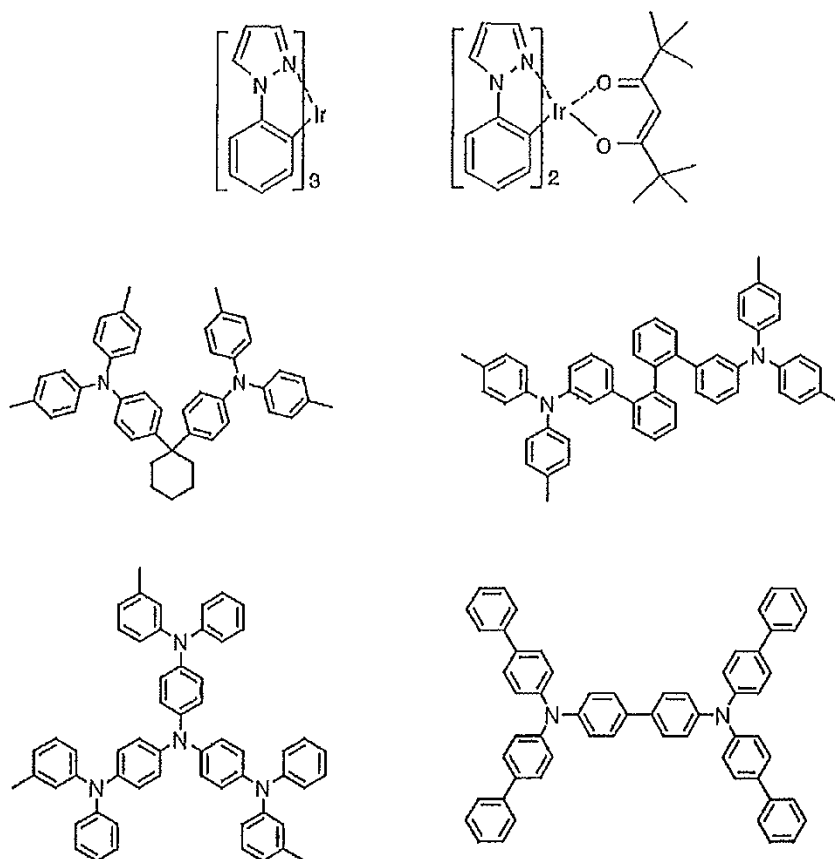
[0212] [화학식 30]



[0213]

[0214] 다음으로, 전자 저지 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

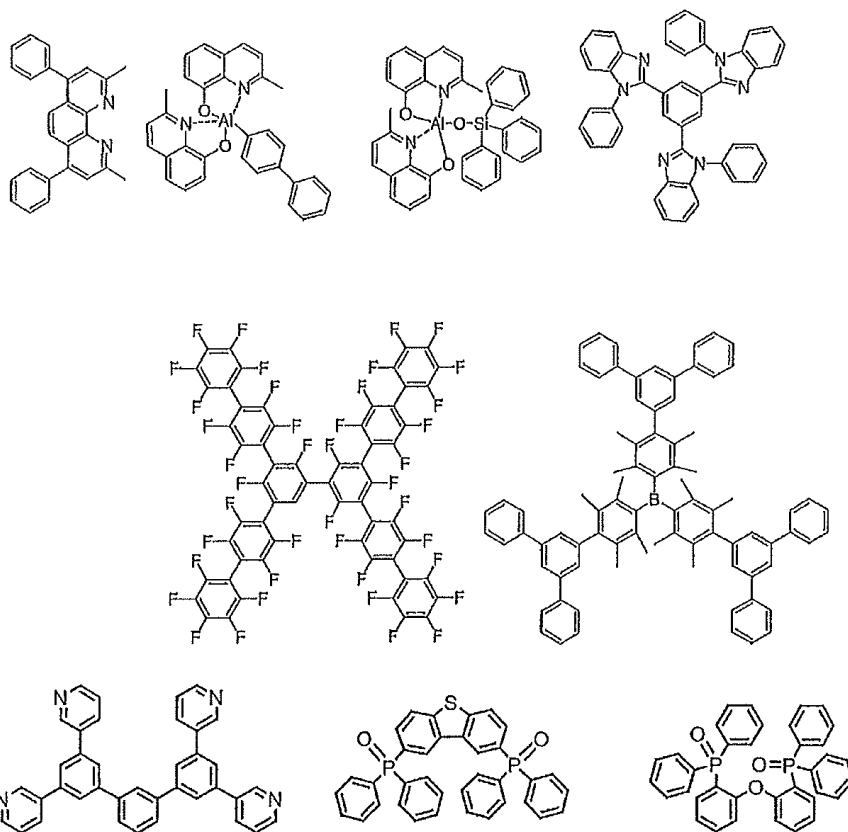
[0215] [화학식 31]



[0216]

[0217] 다음으로, 정공 저지 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

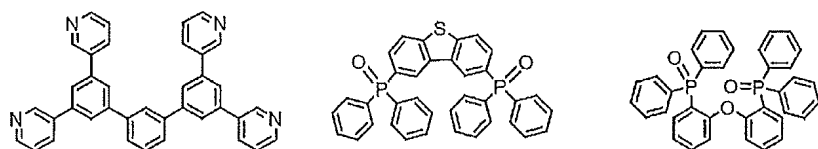
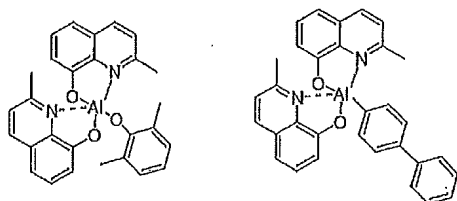
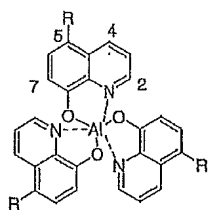
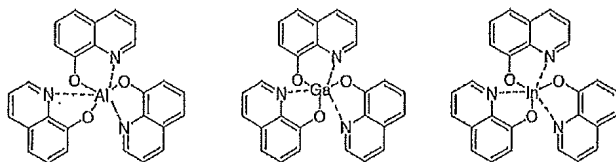
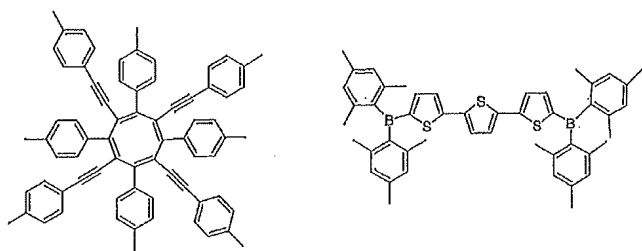
[0218] [화학식 32]



[0219] 다음으로, 전자 수송 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

[0220] 다음으로, 전자 수송 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

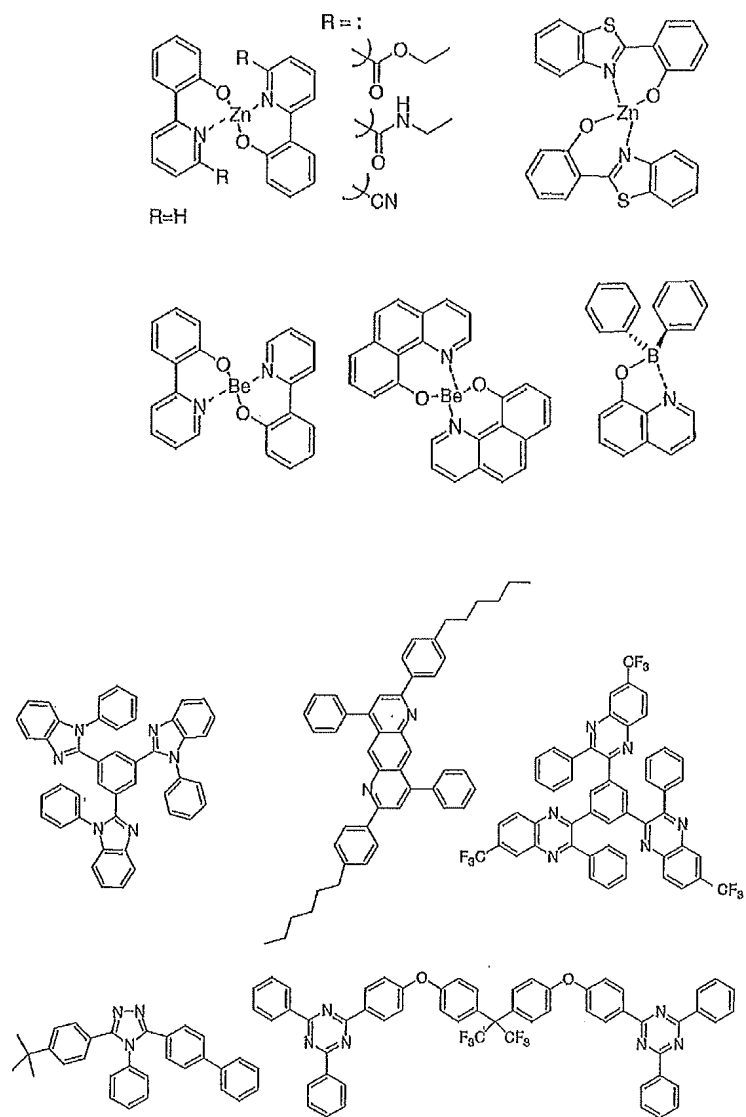
[0221] [화학식 33]



[0222]

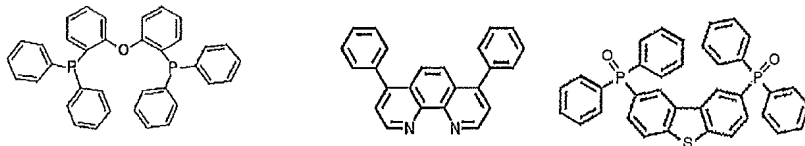
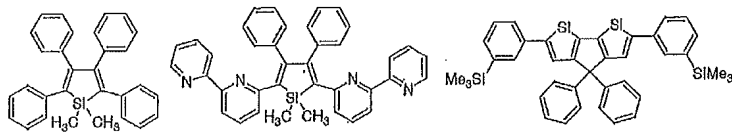
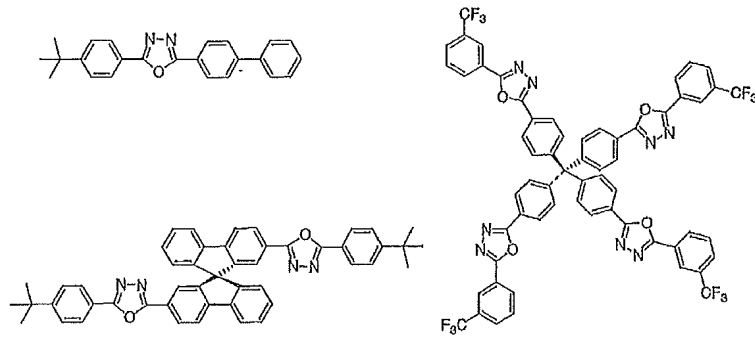
[0223]

[화학식 34]



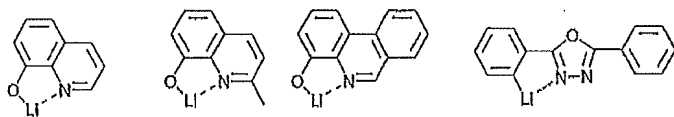
[0224]

[0225] [화학식 35]



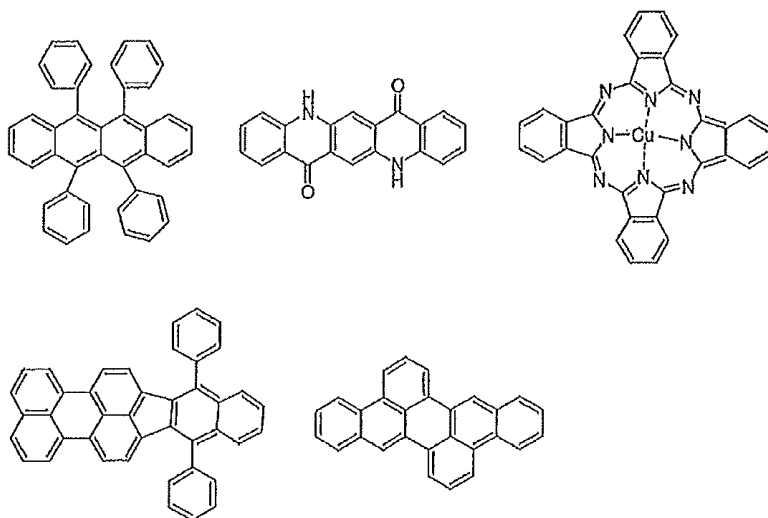
[0226] 다음으로, 전자 주입 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물 예를 예시한다.

[0228] [화학식 36]



[0229] 추가로 첨가 가능한 재료로서 바람직한 화합물 예를 예시한다. 예를 들어, 안정화 재료로서 첨가하는 것 등을 생각할 수 있다.

[0231] [화학식 37]



[0232] 상기 서술한 방법에 의해 제조된 유기 일렉트로루미네선스 소자는 얻어진 소자의 양극과 음극 사이에 전계를 인

가함으로써 발광한다. 이 때, 여기 일중항 에너지에 의한 발광이면, 그 에너지 레벨에 따른 파장의 광이 형광 발광 및 지연 형광 발광으로서 확인된다. 또, 여기 삼중항 에너지에 의한 발광이면, 그 에너지 레벨에 따른 파장이 인광으로서 확인된다. 통상적인 형광은, 지연 형광 발광보다 형광 수명이 짧기 때문에, 발광 수명은 형광과 지연 형광으로 구별할 수 있다.

[0234] 한편, 인광에 대해서는, 본 발명의 화합물과 같은 통상적인 유기 화합물에서는, 여기 삼중항 에너지는 불안정하고 열 등에 변환되어, 수명이 짧고 즉시 실향하기 때문에, 실온에서는 거의 관측할 수 없다. 통상적인 유기 화합물의 여기 삼중항 에너지를 측정하기 위해서는, 극저온의 조건에서의 발광을 관측함으로써 측정 가능하다.

[0235] 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는 단일 소자, 어레이상으로 배치된 구조로 이루어진 소자, 양극과 음극이 X-Y 매트릭스상으로 배치된 구조 중 어느 것에 있어서도 적용할 수 있다. 본 발명에 의하면, 발광층에 일반식 (1) 로 나타내는 화합물을 함유시킴으로써, 발광 효율이 크게 개선된 유기 발광 소자가 얻어진다. 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자 등의 유기 발광 소자는 더욱 다양한 용도로 응용하는 것이 가능하다.

예를 들어, 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자를 사용하여, 유기 일렉트로루미네선스 표시 장치를 제조하는 것이 가능하고, 상세한 내용에 대해서는, 토키토 시즈오, 아다치 치하야, 무라타 히데유키 공저 「유기 EL 디스플레이」 (오오사) 를 참조할 수 있다. 또, 특히 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는 수요가 큰 유기 일렉트로루미네선스 조명이나 백라이트에 응용할 수도 있다.

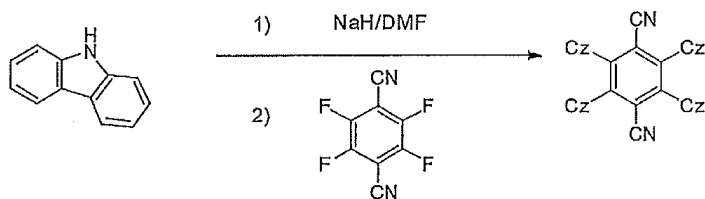
[0236] 실시예

[0237] 이하에 합성에 및 실시예를 들어 본 발명의 특징을 더욱 구체적으로 설명한다. 이하에 나타내는 재료, 처리 내용, 처리 순서 등은 본 발명의 취지를 일탈하지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 구체예에 의해 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다.

[0238] (합성예 1)

[0239] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 1 을 합성하였다. Cz 는 9-카르바졸릴기를 나타낸다.

[0240] [화학식 38]



[0241]

[0242] 60 % 수산화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 80 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 9H-카르바졸 1.67 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로테프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 물 5.0 ml 를 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물 중의 N,N-디메틸포름아미드를 제거하였다. 제거 후, 이 혼합물에 물 200 ml 를 첨가하고, 초음파를 조사하였다. 조사 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름을 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 아세톤을 전개 용매로서 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 클로로포름과 아세톤의 혼합 용매로 세정한 결과, 황색 분말상 고체를 수량 1.05 g, 수율 66.5 % 로 얻었다.

$^1\text{H NMR}$ (500MHz, $\text{DMSO}-d_6$, ppm) : δ 7.93–7.8

9 (m, 16H), 7.26 (t, $J=7.8\text{ Hz}$, 8H), 7.16 (t, $J=7.8\text{ Hz}$, 8H).

원소분석 : 계산치 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

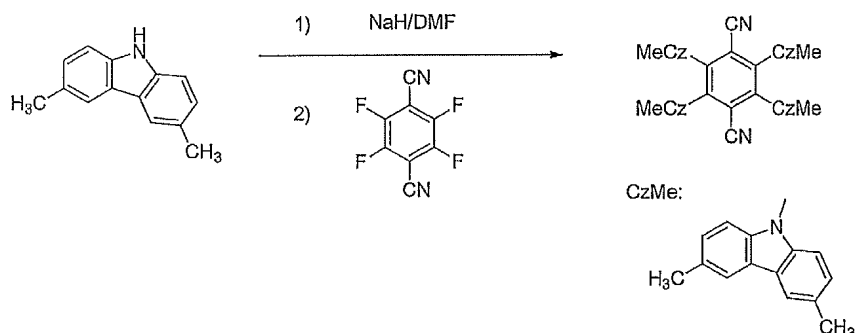
실측치 C, 85.28; H, 4.11; N, 10.61

[0243]

[0244] (합성예 2)

[0245] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 4 를 합성하였다.

[0246] [화학식 39]



[0247]

[0248] 60 % 수소화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 3,6-디메틸-9H-카르바졸 1.95 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로테레프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 ℃ 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 물 400 ml 에 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 메탄올로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 1.68 g, 수율 93.2 % 로 얻었다.

^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.81 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 7.71 (s, 8H), 7.11 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 2.37 (s, 24H).

원소분석 $\text{C}_{64}\text{H}_{48}\text{N}_6$: 계산치 C, 85.30 ; H, 5.37 ; N, 9.33 %

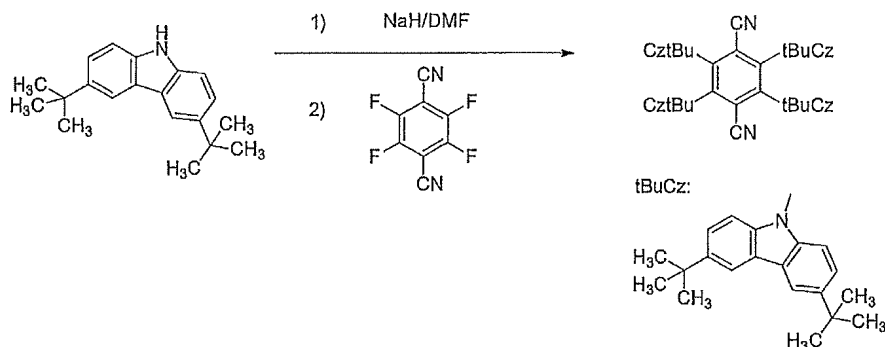
실측치 C 85.39, H 5.36, N 9.35 %.

[0249]

[0250] (합성예 3)

[0251] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 6 을 합성하였다.

[0252] [화학식 40]



[0253]

[0254] 60 % 수소화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 3,6-디tert-부틸-9H-카르바졸 2.79 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로테레프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 ℃ 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 물 400 ml 에 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름을 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 아세톤을 전개 용매로서 사용하였다. 얻

어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 클로로포름과 아세톤의 혼합 용매로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 400 mg, 수율 16.1 % 로 얻었다.

^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.77 (d, J = 1.5 Hz, 8H), 7.43 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 7.08 (dd, J = 8.8 Hz, 1.5 Hz, 8H), 1.35 (s, 72H).

원소분석 $\text{C}_{88}\text{H}_{96}\text{N}_6$: 계산치 C, 85.39; H, 7.82; N, 6.79 %

실측치 C 85.38, H 7.82, N 6.78 %.

[0255]

[0256]

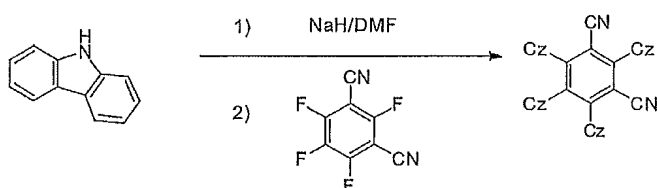
(합성예 4)

[0257]

본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 301 을 합성하였다.

[0258]

[화합식 41]



[0259]

[0260]

60 % 수소화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 9H-카르바졸 1.67 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로이소프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 물 5.0 ml 를 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물 중의 N,N-디메틸포름아미드를 제거하였다. 제거 후, 이 혼합물에 물 200 ml 를 첨가하고, 초음파를 조사하였다. 조사 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름 : 헥산 = 1 : 5 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 클로로포름 : 헥산 = 1 : 2 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤과 헥산의 혼합 용매로 재결정한 결과, 황색 분말상 고체를 수량 311 mg, 수율 19.7 % 로 얻었다.

^1H NMR (500MHz, 아세톤 - d_6 , ppm) : δ 8.33 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 8.06 (d, J = 8.2 Hz, 2H), 7.84 - 7.82 (m, 4H), 7.71 - 7.66 (m, 6H), 7.49 - 7.45 (m, 4H), 7.43 (d, J = 7.6 Hz, 2H), 7.14 - 7.08 (m, 8H), 6.816 (t, J = 7.3 Hz, 2H), 6.71 (t, J = 7.7 Hz, 2H).

원소분석 : 계산치 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

실측치 C, 85.22; H, 4.03; N, 10.62

[0261]

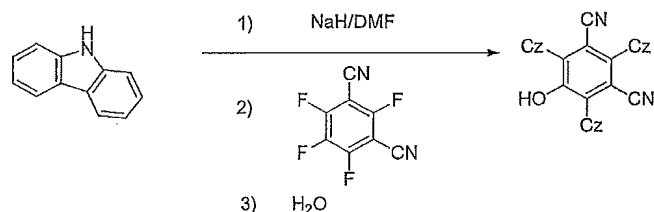
[0262]

(합성예 5)

[0263]

본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 392 를 합성하였다.

[0264] [화학식 42]



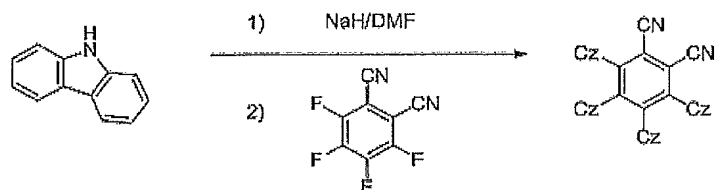
[0265]

[0266] 60 % 수산화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 9H-카르바졸 1.67 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로이소프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 물 5.0 ml 를 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물 중의 N,N-디메틸포름아미드를 제거하였다. 제거 후, 이 혼합물에 물 200 ml 를 첨가하고, 초음파를 조사하였다. 조사 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 클로로포름 : 아세톤 = 1 : 2 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 메탄올로 세정한 결과, 담황색 분말상 고체를 수량 600 mg, 수율 46.9 % 로 얻었다.

[0267] (합성예 6)

[0268] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 501 을 합성하였다. Cz 는 9-카르바졸릴기를 나타낸다.

[0269] [화학식 43]



[0270]

[0271] 60 % 수산화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 9H-카르바졸 1.67 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로이소프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 물 5.0 ml 를 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물 중의 N,N-디메틸포름아미드를 제거하였다. 제거 후, 이 혼합물에 물 200 ml 를 첨가하고, 초음파를 조사하였다. 조사 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름을 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 아세톤 : 클로로포름 = 1 : 2 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 클로로포름과 메탄올의 혼합 용매로 재결정한 결과, 황색 분말상 고체를 수량 450 mg, 수율 28.5 % 로 얻었다.

$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.90–7.87 (m, 4H), 7.72–7.70 (m, 4H), 7.40–7.37 (m, 8H), 7.16–7.10 (m, 8H), 6.74 (t, J = 7.7 Hz, 4H), 6.60 (t, J = 7.7 Hz, 4H).

원소분석 : 계산치 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

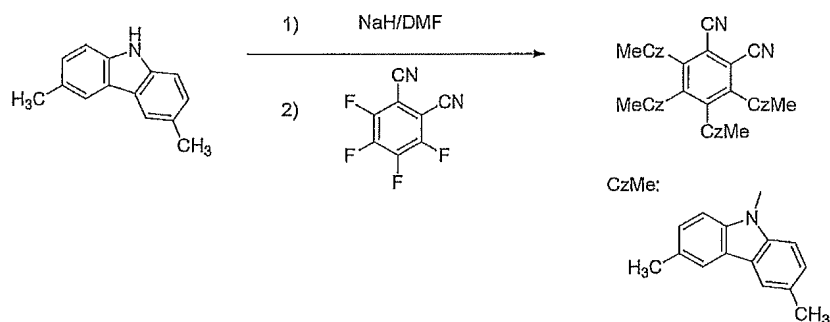
실측치 C, 85.16; H, 4.02; N, 10.55

[0272]

[0273] (합성예 7)

[0274] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 504 를 합성하였다.

[0275] [화학식 44]



[0276]

[0277] 60 % 수소화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 3,6-디메틸-9H-카르바졸 1.95 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 물 400 ml 에 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저 클로로포름을 전개 용매로서 사용하고, 이어서, 클로로포름 : 아세톤 = 1 : 2 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용함으로 실시하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤으로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 515 mg, 수율 28.6 % 로 얻었다.

^1H NMR (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.64 (s, 4 H), 7.54 (d, $J=8.5$ Hz, 4 H), 7.27 (d, $J=8.5$ Hz, 4 H), 7.15 (s, 4 H), 6.95 (dd, $J=8.3$ Hz, 1.5 Hz, 4 H), 6.44 (dd, $J=8.5$ Hz, 1.5 Hz, 4 H), 2.34 (s, 12 H), 2.10 (s, 12 H).

원소분석 : 계산치 C, 85.30 ; H, 5.37 ; N, 9.33

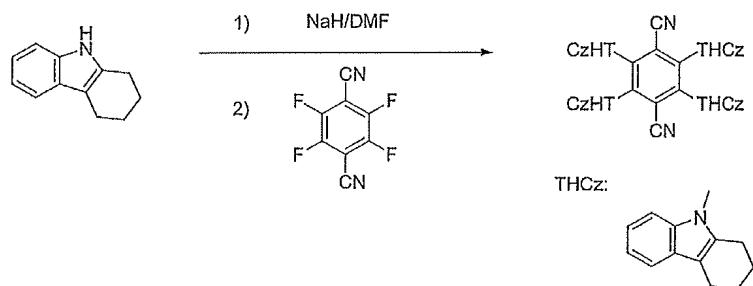
실측치 C, 85.34 ; H, 5.35 ; N, 9.30

[0278]

[0279] (합성예 8)

[0280] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 901 을 합성하였다.

[0281] [화학식 45]



[0282]

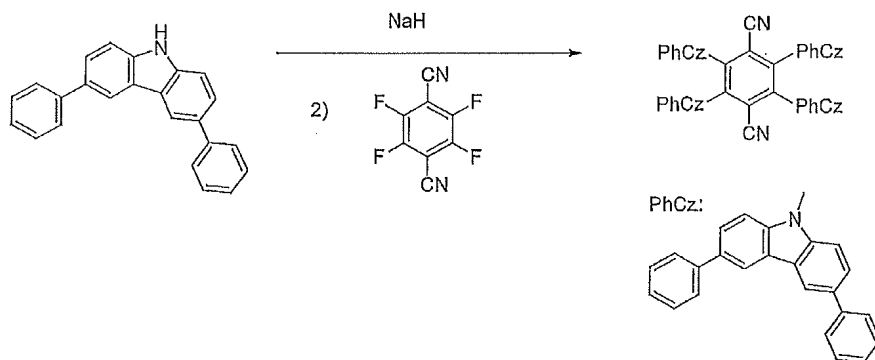
[0283] 60 % 수소화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 100 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, N,N-디메틸포름아미드 40 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 1,2,3,4-테트라하이드로카르바졸 1.71 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라플루오로테레프탈로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 60 °C 에서 10 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 물 400 ml 에 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토

그래피는 먼저 클로로포름을 전개 용매로서 사용하고, 다음으로 아세톤을 전개 용매로서 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 클로로포름과 아세톤의 혼합 용매로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 120 mg, 수율 7.4 % 로 얻었다.

[0284] (합성예 9)

[0285] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 252 를 합성하였다.

[0286] [화학식 46]



[0287] 60 % 수산화나트륨 480 mg (12.0 mmol) 을 헥산으로 세정한 후, 질소 분위기하에서 교반 중의 3,6-디페닐카르바졸 3.20 g (10.0 mmol) 의 건조 THF 용액 중에 실온에서 첨가하였다. 30 분 교반한 후, 이 혼합물에 테트라플루오로테트라플로니트릴 400 mg (2.00 mmol) 을 첨가하고, 질소 분위기하, 실온에서 10 시간 교반하였다. 그 후, 물 5 ml 로 반응을 정지시키고, 혼합물을 감압 농축하여 황색 고체를 얻었다. 얻어진 고체를, 클로로포름을 전개 용매로 하여 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 주황색 분말상 고체를 수량 2.20 g, 수율 79 % 로 얻었다.

^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 8.37 (d, J = 1.5 Hz, 8H), 8.05 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 7.70 (m, 16H), 7.62 (dd, J = 8.5, 1.5 Hz, 8H), 7.45 (m, 16H), 7.36 (m, 8H) ;

IR (KBr, cm^{-1}) : 2236, 2228, 1600, 1476, 1456, 1441, 1290, 1226 ;

MALDI-TOFMS (m/z) : [M] + $\text{C}_{104}\text{H}_{64}\text{N}_6$ 계산치, 1396.52 ; 실측치 1396.66 ;

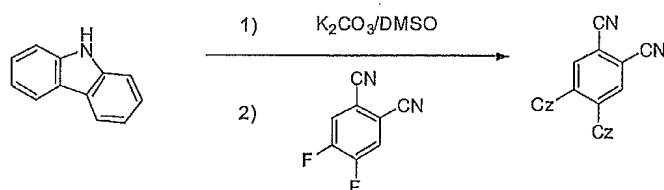
원소분석 : 계산치 C, 89.37 ; H, 4.62 ; N, 6.01

실측치 C, 89.26 ; H, 4.53 ; N, 5.95

[0289] (합성예 10)

[0290] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 523 을 합성하였다.

[0291] [화학식 47]



[0292] 9H-카르바졸 1.52 g (9.14 mmol), 탄산칼륨 1.91 g (13.7 mmol) 을 50 ml 나스 플라스크에 넣고, 당해 플라스크

내를 질소 치환하였다. 이 혼합물에 디메틸술폭사이드 15 ml 를 첨가하여, 질소 기류하, 실온에서 1 시간 교반하였다. 이 혼합물에 4,5-디플루오로프탈로니트릴 0.500 g (3.05 mmol) 을 첨가하였다. 이 혼합물을 질소 기류하, 실온에서 3 시간, 이어서 50 °C 에서 20 시간 교반하였다. 그 후, 이 혼합물에 물을 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 톨루엔을 첨가하여 추출하였다. 추출 후, 추출 용액을 포화 식염수로 세정하였다. 세정 후, 유기층과 수층을 분리하고, 유기층에 황산마그네슘을 첨가하여 건조시켰다. 건조 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 얻은 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 정제는 톨루엔 : 헥산 = 1 : 4 의 혼합 용매를 전개 용매로 사용하고, 이어서, 톨루엔 : 헥산 = 7 : 3 의 혼합 용매를, 이어서 톨루엔을 전개 용매로서 사용함으로써 실시하였다 (서서히 전개 비율을 바꾸어 갔다). 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤과 메탄올의 혼합 용매로 리슬러리 세정한 결과, 목적물의 담황색 분말상 고체를 수량 1.20 g, 수율 85.8 % 로 얻었다.

$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, 아세톤- d_6 , ppm) : δ 8.73 (s, 2 H), 7.91–7.89 (m, 4 H), 7.40–7.38 (m, 4 H), 7.13–7.09 (m, 8 H).

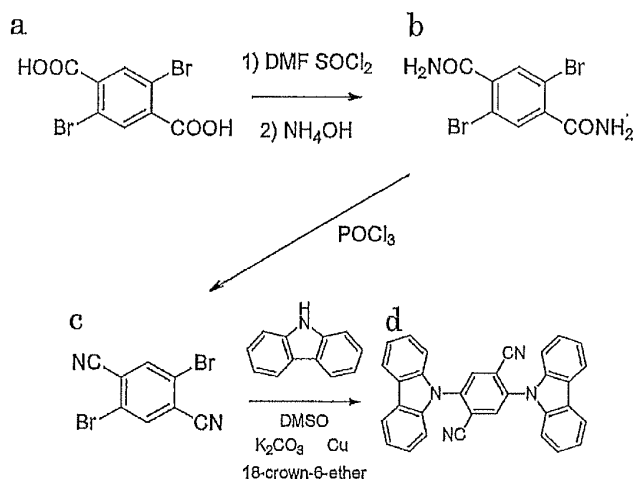
MS (MALDI) : m/z 계산치 : 458.15 [M+H]⁺; 실측치 : 458.12.

[0295]

[0296] (합성예 11)

[0297] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 31 을 합성하였다.

[0298] [화학식 48]



[0299]

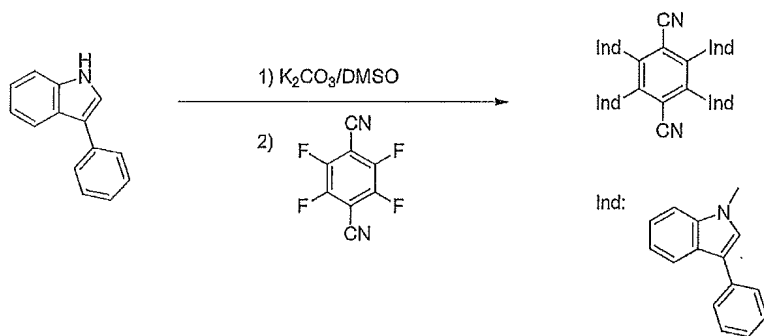
[0300] 화합물 b 및 화합물 c 를 J-Z Cheng et al, tetrahedron. 67 (2011) 734 와 동일한 방법으로 합성하였다.

[0301] 화합물 c 인 2,5-디브로모테레프탈로니트릴 (1.44 g, 5.0 mol), 9H-카르바졸 (1.89 g, 11.3 mol), 구리 분말 (0.64 g, 10 mol), 탄산칼륨 (2.79 g, 20 mol), 18-크라운-6 (0.25 g, 0.94 mol), DMSO (5 ml) 를 질소 분위기하에서 2 구 플라스크에 넣고 140 °C 에서 9 시간 교반하였다. 그 후, 반응물을 클로로포름에 용해시켜 여과에 의해 불순물을 취한 후, 물로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시켰다. 그 후 칼럼 크로마토그래피 (클로로포름)에 의해 정제하고, 황색 분말을 수량 0.53 g, 수율 23 % 로 얻었다.

[0302] (합성예 12)

[0303] 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 716 을 합성하였다.

[0304] [화학식 49]



[0305]

[0306]

3-페닐-1H-인돌 4.01 g (20.8 mmol), 탄산칼륨 5.72 g (41.4 mmol) 을 50 ml 3 구 플라스크에 넣고, 플라스크 내를 질소 치환하였다. 이 혼합물에 디메틸술폭사이드 20 ml 를 첨가하여, 실온에서 1 시간 교반하였다. 이 혼합물을 빙욕한 후, 테트라플루오로테레프탈로니트릴 0.696 g (3.48 mmol) 을 첨가하고, 0 °C 에서부터 서서히 실온으로 되돌려 교반하였다. 이 혼합물을 질소 분위기하, 실온에서 24 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 약 300 ml 의 물에 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 용해하고, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 칼럼 크로마토그래피는 먼저, 톨루엔 : 헥산 = 1 : 5 의 혼합 용매를 전개 용매로서 사용하고, 이어서 톨루엔을 전개 용매로서 사용하여 실시하였다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤과 메탄올의 혼합 용매로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 2.02 g, 수율 65.0 % 로 얻었다.

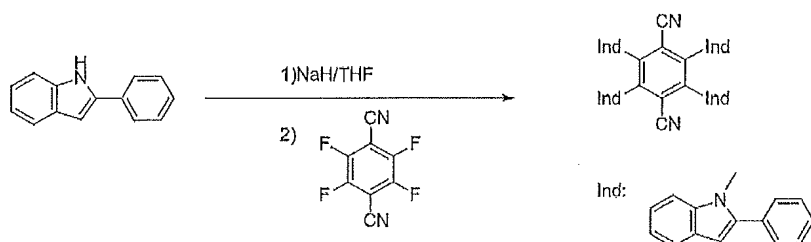
^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.73 (s, 4H), 7.67 (d, $J=8.0$ Hz, 4H), 7.51-7.33 (m, 24H), 7.09 (t, $J=7.8$ Hz, 4H), 7.02 (t, $J=7.5$ Hz, 4H).

[0307]

[0308]

(합성예 13) 본 합성예에 있어서, 이하의 스킴에 따라 화합물 728 을 합성하였다.

[0309] [화학식 50]



[0310]

[0311]

60 % 수소화나트륨 2.40 g (60.0 mmol) 을 200 ml 3 구 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환하고, 테트라하이드로푸란 100 ml 를 첨가하여 교반하였다. 이 혼합물에 2-페닐-1H-인돌 9.65 g (50.0 mmol) 을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 30 분 교반하였다. 이 혼합물에 테트라플루오로테레프탈로니트릴 2.00 g (10.0 mmol) 을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 실온에서 24 시간 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물에 약 50 ml 의 물을 천천히 첨가하여 교반하였다. 교반 후, 유기층과 수층을 분리하고, 수층에 톨루엔을 첨가하여 추출하였다. 유기층과 추출 용액을 합쳐, 포화 식염수로 세정하였다. 세정 후, 유기층에 황산마그네슘을 넣어 건조시켰다. 건조 후, 이 혼합물을 흡인 여과하여 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 얻은 고체를 클로로포름에 용해하고, 셀라이트와 실리카 겔을 통과시켜 흡인 여과하여, 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 얻은 고체를 이소프로판올로 세정하였다. 세정 후, 이 고체를 아세트산에틸로 세정한 결과, 주황색 분말상 고체를 수량 1.70 g, 수율 19.0 % 로 얻었다.

^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm) : δ 7.48 (d, J = 8.0 Hz, 4H), 7.33 (t, J = 7.0 Hz, 4H), 7.26 (t, J = 7.0 Hz, 8H), 7.09 (t, J = 7.0 Hz, 4H), 6.99 (d, J = 8.0 Hz, 4H), 6.81 (t, J = 8.0 Hz, 4H), 6.65 (s, 4H), 6.53 (d, J = 7.0 Hz, 8H).

[0312]

[0313] (실시예 1)

[0314] 본 실시예에 있어서, 합성예 1에서 합성한 화합물 1의 톨루엔 용액을 조제하여, 질소를 버블링하면서 300K로 280 nm의 광을 조사한 결과, 표 7에 나타내는 발광 파장을 관측하였다. 시간 분해 스펙트럼을 하마마츠 포토닉스(주) 제조 C4334형 스트리크 카메라를 사용하여 실시하고, 발광 수명이 짧은 성분을 형광, 발광 수명이 긴 성분을 지연 형광으로 판단하였다(도 2). 형광 성분과 지연 형광 성분의 수명은 표 7에 나타내는 바와 같았다.

[0315] 또, 화합물 1 대신에, 합성예 2 ~ 11에서 합성한 각 화합물을 사용하여 동일한 평가를 실시한 결과도 표 7에 나타낸다. 단, 화합물 392와 화합물 901에 대해서는, 질소로 버블링하지 않고 측정하였다.

[0316] [표 7]

화합물	발광 파장 (nm)	형광 성분 (ns)	지연 형광 성분 (μ s)
화합물 1	537	8.76	1.91
화합물 4	556	9.58	1.53
화합물 6	553	3.53	8.46
화합물 31	480	22.5	65.5
화합물 252	577	9.0	1.10
화합물 301	508	3.77	4.89
화합물 392	488	10.78	3.65
화합물 501	525	12.96	13.45
화합물 504	521	18.81	6.57
화합물 523	473	28.52	129.67
화합물 901	556	10.00	3.54

[0317]

[0318] (실시예 2)

[0319] 본 실시예에 있어서, 화합물 1과 호스트 재료로 이루어진 발광층을 갖는 유기 포토 루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.

[0320] 실리콘 기판 상에 진공 증착법으로, 진공도 5.0×10^{-4} Pa의 조건으로 화합물 1과 mCP를 상이한 증착원으로 부터 증착하고, 화합물 1의 농도가 6.0 중량%인 박막을 0.3 nm/초로 100 nm의 두께로 형성하여 유기 포토 루미네선스 소자로 하였다. 하마마츠 포토닉스(주) 제조 C9920-02형 절대 양자 수율 측정 장치를 사용하여, N_2 레이저에 의해 337 nm의 광을 조사했을 때의 박막으로부터의 발광 스펙트럼을 300K로 특성 평가한 결과, 548 nm의 발광이 확인되고, 그 때의 발광 양자 수율은 47%였다. 다음으로, 20K, 50K, 100K, 150K, 200K, 250K 및 300K의 각 온도에서, 이 소자에 N_2 레이저에 의해 337 nm의 광을 조사했을 때의 시간 분해 스펙트럼의 평가를, 하마마츠 포토닉스(주) 제조 C4334형 스트리크 카메라를 사용하여 실시하고, 발광 수명이 짧은 성분을 형광, 발광 수명이 긴 성분을 지연 형광으로 판단하였다. 그 결과, 50 ~ 500K 사이에서 형광 성분과 지연 형광 성분이 관측되었다(도 3). 형광 성분은 12 ~ 16 ns이고, 지연 형광 성분은 100K에서 11 μ s, 150K에서 8.8 μ s였다.

[0321] 화합물 1 대신에 화합물 501과 화합물 289를 사용하여 유기 포토 루미네선스 소자를 제조하여 동일한 시험을 실시한 결과, 마찬가지로 형광 성분과 지연 형광 성분이 관측되었다.

- [0322] (실시예 3)
- [0323] 본 실시예에 있어서, 화합물 1 과 CBP 로 이루어진 발광층을 갖는 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.
- [0324] 막두께 100 nm 의 인듐·주석 산화물 (ITO) 로 이루어진 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법으로 진공도 5.0×10^{-4} Pa 로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 α -NPD 를 35 nm 의 두께로 형성하였다. 다음으로, 화합물 1 과 CBP 를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 15 nm 의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 하였다. 이 때, 화합물 1 의 농도는 6.0 중량% 로 하였다. 다음으로, TPBi 를 65 nm 의 두께로 형성하고, 또한 불화리튬 (LiF) 을 0.8 nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄 (Al) 을 80 nm 의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하고, 유기 일렉트로루미네선스 소자로 하였다.
- [0325] 제조한 유기 일렉트로루미네선스 소자를, 반도체 파라미터·애널라이저 (아질렌트·테크놀로지사 제조 : E5273A), 광 파워 미터 측정 장치 (뉴포트사 제조 : 1930C), 및 광학 분광기 (오션 옵틱스사 제조 : USB2000) 를 사용하여 측정한 결과, 544 nm 의 발광이 확인되었다. 전류 밀도-전압 (J-V) 특성을 도 4 에 나타내고, 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 5 에 나타낸다. 화합물 1 을 발광 재료로서 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자는 17.06 % 의 높은 외부 양자 효율을 달성하였다.
- [0326] (실시예 4)
- [0327] 실시예 3 의 화합물 1 대신에 화합물 6 을 사용하여 유기 포토 루미네선스 소자를 제조하여 동일한 시험을 실시한 결과, 553 nm 의 발광이 확인되었다. 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 6 에 나타낸다.
- [0328] (실시예 5)
- [0329] 실시예 3 의 화합물 1 대신에 화합물 301 을 사용하여 유기 포토 루미네선스 소자를 제조하여 동일한 시험을 실시한 결과, 513 nm 의 발광이 확인되었다. 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 7 에 나타낸다. 화합물 301 을 발광 재료로서 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자는 19.32 % 의 높은 외부 양자 효율을 달성하였다.
- [0330] (실시예 6)
- [0331] 실시예 3 의 화합물 1 대신에 화합물 501 을 사용하여 유기 포토 루미네선스 소자를 제조하여 동일한 시험을 실시한 결과, 530 nm 의 발광이 확인되었다. 전류 밀도-전압 (J-V) 특성을 도 8 에 나타내고, 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 9 에 나타낸다. 화합물 501 을 발광 재료로서 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자는 17.84 % 의 높은 외부 양자 효율을 달성하였다.
- [0332] (실시예 7)
- [0333] 본 실시예에 있어서, 합성에 9 에서 합성한 화합물 252 를 발광 재료로서 포함하는 발광층을 갖는 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.
- [0334] 막두께 100 nm 의 인듐·주석 산화물 (ITO) 로 이루어진 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법으로 진공도 5.0×10^{-4} Pa 로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 α -NPD 를 35 nm 의 두께로 형성하였다. 또한, 화합물 252 와 CBP 를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 15 nm 의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 하였다. 이 때, 화합물 252 의 농도는 6.0 중량% 로 하였다. 다음으로, TPBi 를 65 nm 의 두께로 형성하고, 또한 불화리튬 (LiF) 을 0.8 nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄 (Al) 을 80 nm 의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하고, 유기 일렉트로루미네선스 소자로 하였다.
- [0335] 제조한 유기 일렉트로루미네선스 소자를, 반도체 파라미터·애널라이저 (아질렌트·테크놀로지사 제조 : E5273A), 광 파워 미터 측정 장치 (뉴포트사 제조 : 1930C), 및 광학 분광기 (오션 옵틱스사 제조 : USB2000) 를 사용하여 측정한 결과, 도 10 에 나타내는 발광 스펙트럼이 관측되었다. 전류 밀도-전압 (J-V) 특성을 도 11 에 나타내고, 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 12 에 나타낸다.
- [0336] (실시예 8)
- [0337] 본 실시예에 있어서, 합성에 10 에서 합성한 화합물 523 을 발광 재료로서 포함하는 발광층을 갖는 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.
- [0338] 막두께 100 nm 의 인듐·주석 산화물 (ITO) 로 이루어진 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법

으로 진공도 5.0×10^{-4} Pa 로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 α -NPD 를 40 nm 의 두께로 형성하고, 이어서 mCP 를 10 nm 의 두께로 형성하였다. 또한, 화합물 523 과 PPT 를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 20 nm 의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 하였다. 이 때, 화합물 523 의 농도는 6.0 중량% 로 하였다. 다음으로, PPT 를 40 nm 의 두께로 형성하고, 또한 불화리튬 (LiF) 을 0.8 nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄 (Al) 을 80 nm 의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하고, 유기 일렉트로루미네선스 소자로 하였다.

[0339] 제조한 유기 일렉트로루미네선스 소자를, 반도체 파라미터·애널라이저 (아질렌트·테크놀로지사 제조 : E5273A), 광 파워 미터 측정 장치 (뉴포트사 제조 : 1930C), 및 광학 분광기 (오션 옵틱스사 제조 : USB2000) 를 사용하여 측정한 결과, 도 13 에 나타내는 발광 스펙트럼이 관측되었다. 전류 밀도-전압 (J-V) 특성을 도 14 에 나타내고, 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 15 에 나타낸다.

[0340] (실시예 9)

[0341] 본 실시예에 있어서, 합성에 11 에서 합성한 화합물 31 을 발광 재료로서 포함하는 발광층을 갖는 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.

[0342] 막두께 100 nm 의 인듐·주석 산화물 (ITO) 로 이루어진 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법으로 진공도 5.0×10^{-4} Pa 로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 α -NPD 를 35 nm 의 두께로 형성하고, 이어서 mCP 를 10 nm 의 두께로 형성하였다. 또한, 화합물 31 과 mCP 를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 15 nm 두께의 층을 형성하여 발광층으로 하였다. 이 때, 화합물 31 의 농도는 3.0 중량% 로 하였다. 다음으로, PPT 를 10 nm 의 두께로 형성하고, 그 위에 TPBi 를 40 nm 의 두께로 형성하고, 또한 불화리튬 (LiF) 을 0.8 nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄 (Al) 을 100 nm 의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하고, 유기 일렉트로루미네선스 소자로 하였다.

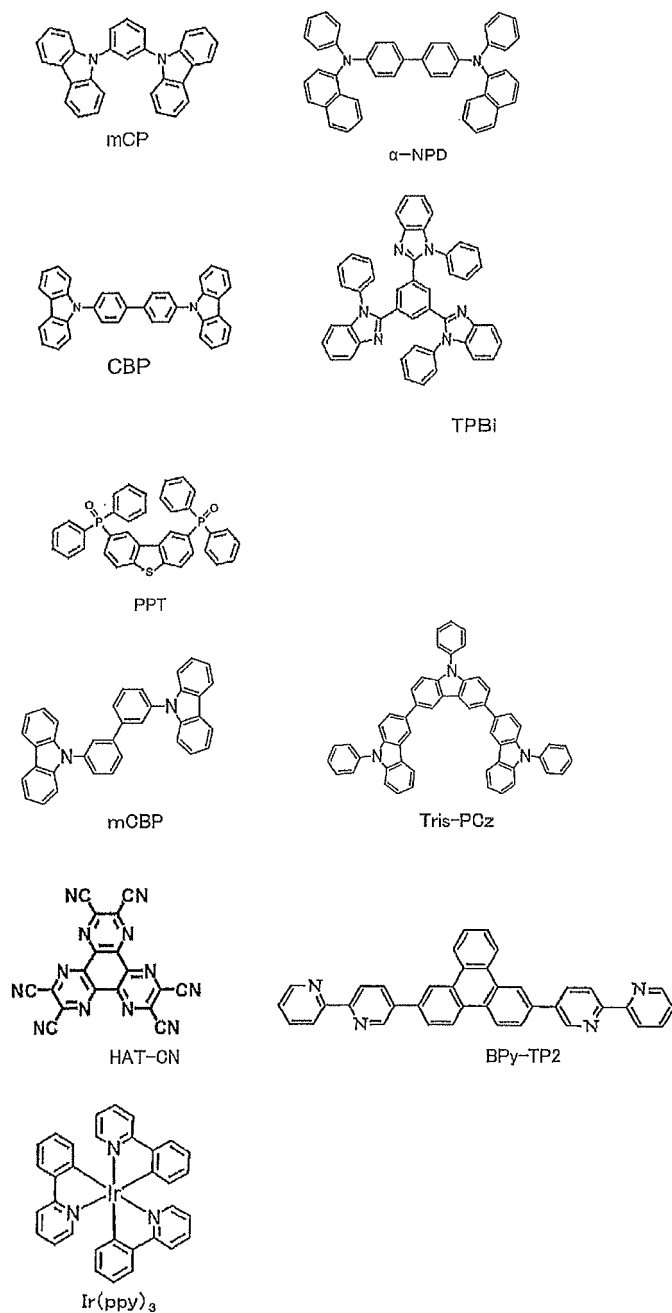
[0343] 제조한 유기 일렉트로루미네선스 소자를, 반도체 파라미터·애널라이저 (아질렌트·테크놀로지사 제조 : E5273A), 광 파워 미터 측정 장치 (뉴포트사 제조 : 1930C), 및 광학 분광기 (오션 옵틱스사 제조 : USB2000) 를 사용하여 측정한 결과, 도 16 에 나타내는 발광 스펙트럼이 관측되었다. 전류 밀도-전압 (J-V) 특성을 도 17 에 나타내고, 전류 밀도-외부 양자 효율 특성을 도 18 에 나타낸다.

[0344] (실시예 10)

[0345] 본 실시예에 있어서, 발광 재료로서 화합물 1 을 각종 농도로 포함하는 발광층을 갖는 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제조하여, 특성을 평가하였다.

[0346] 막두께 100 nm 의 인듐·주석 산화물 (ITO) 로 이루어진 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법으로 진공도 5.0×10^{-4} Pa 로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 HAT-CN 을 10 nm 의 두께로 형성하고, 이어서 Tris-PCz 를 30 nm 의 두께로 형성하였다. 다음으로, 화합물 1 과 mCBP 를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 30 nm 의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 하였다. 이 때, 화합물 1 의 농도는 3 중량%, 6 중량%, 10 중량% 또는 15 중량% 로 하였다. 다음으로, T2T 를 10 nm 의 두께로 형성하고, 이어서 BPy-TP2 를 40 nm 의 두께로 형성하고, 또한 불화리튬 (LiF) 을 0.8 nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄 (Al) 을 100 nm 의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하고, 유기 일렉트로루미네선스 소자로 하였다. 또, 비교를 위해, 발광층의 화합물 1 을 6 중량% 의 Ir(ppy)₃ 으로 변경한 유기 일렉트로루미네선스 소자도 제조하였다. 각 유기 일렉트로루미네선스 소자에 대해, 실시예 3 과 동일한 기기를 사용하여 측정을 실시하였다. 휘도-발광 효율 특성을 도 19 에 나타내고, 휘도 열화 특성을 도 20 에 나타낸다. 화합물 1 의 농도가 3 중량% 인 경우에는 외부 양자 효율 17.0 %, 6 중량% 인 경우에는 외부 양자 효율 15.6 %, 10 중량% 인 경우에는 외부 양자 효율 14.2 %, 15 중량% 인 경우에는 외부 양자 효율 14.0 % 를 달성하였다. 화합물 1 의 농도가 10 중량% 인 경우에는 1000 cd/m² 에 있어서도 높은 외부 양자 효율 (13.8 %) 을 달성하였다.

[0347] [화학식 51]



[0348]

[0349] 산업상 이용가능성

[0350] 본 발명의 유기 발광 소자는 높은 발광 효율을 실현할 수 있는 것이다. 또, 본 발명의 화합물은 그와 같은 유기 발광 소자용의 발광 재료로서 유용하다. 이 때문에, 본 발명은 산업상 이용가능성이 높다.

부호의 설명

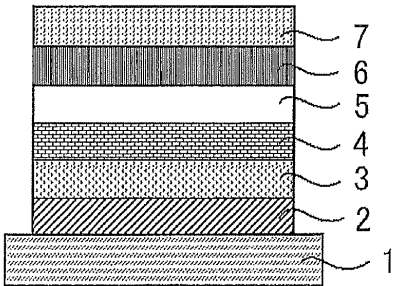
[0351]

- 1 : 기관
- 2 : 양극
- 3 : 정공 주입층
- 4 : 정공 수송층
- 5 : 발광층

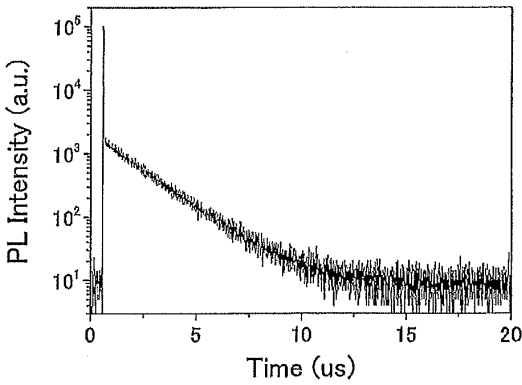
- 6 : 전자 수송층
- 7 : 음극

도면

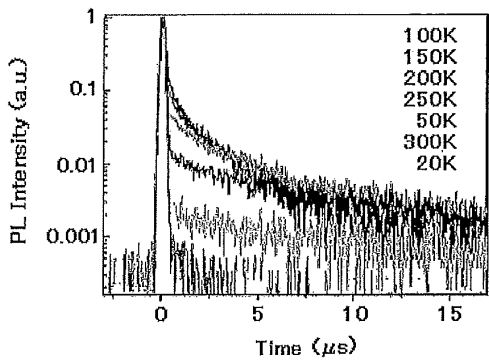
도면1



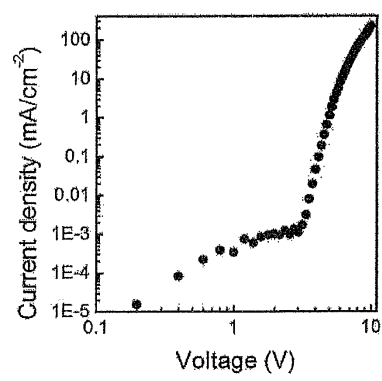
도면2



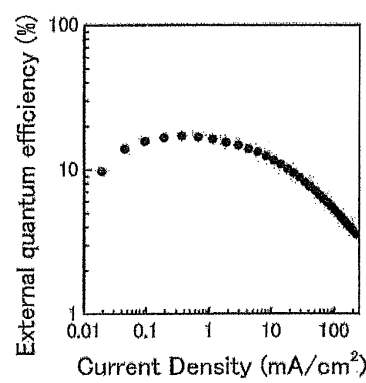
도면3



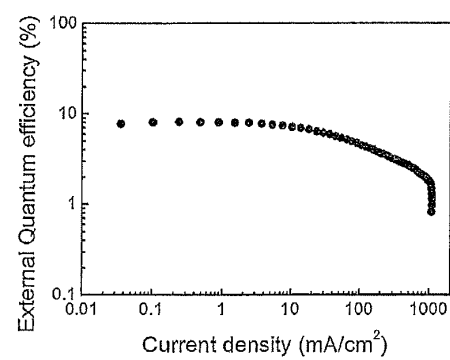
도면4



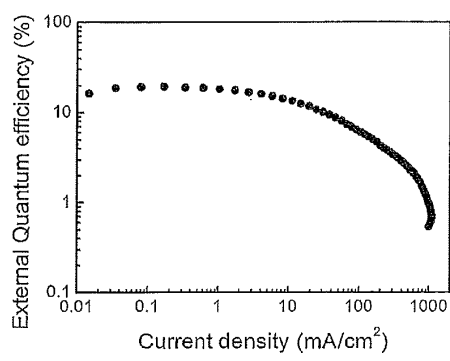
도면5



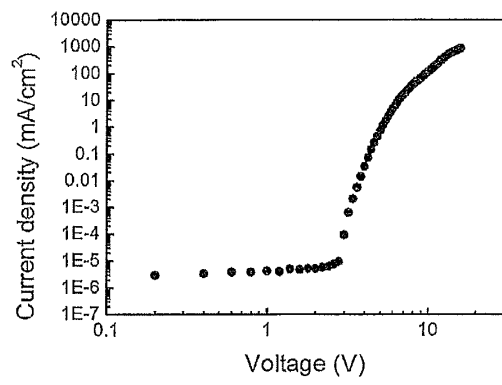
도면6



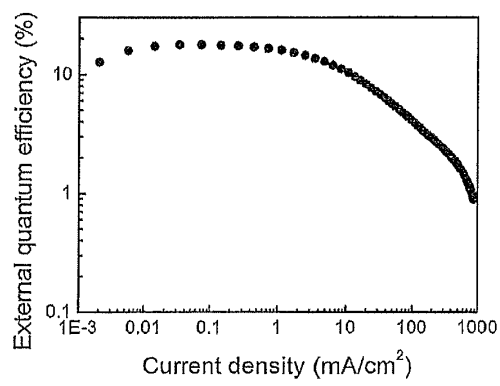
도면7



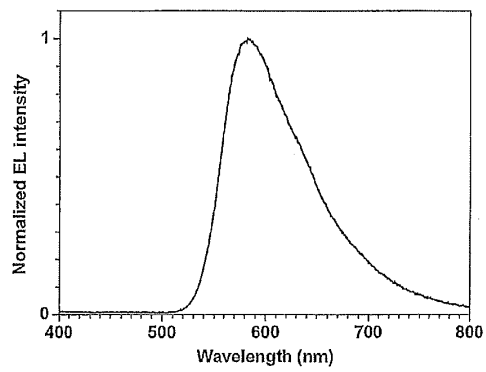
도면8



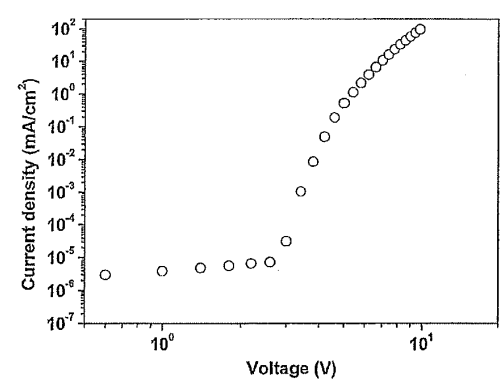
도면9



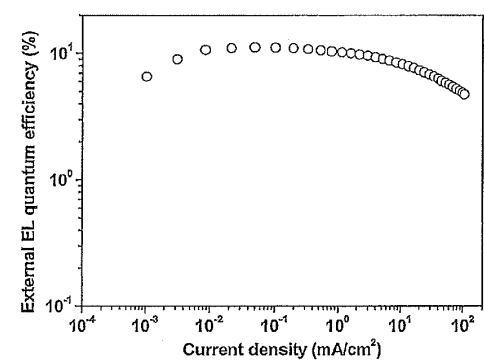
도면10



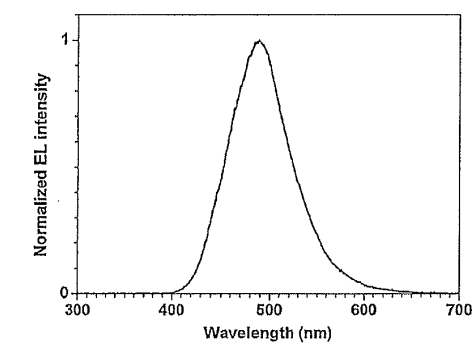
도면11



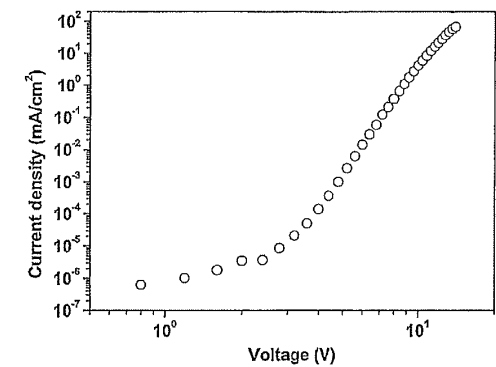
도면12



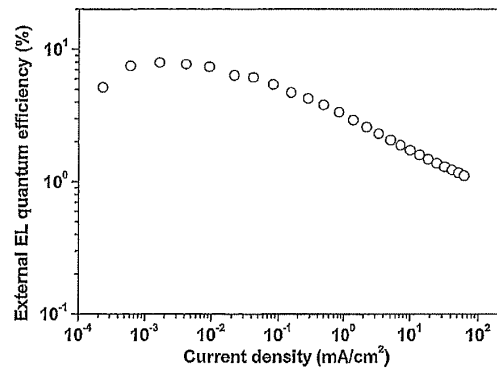
도면13



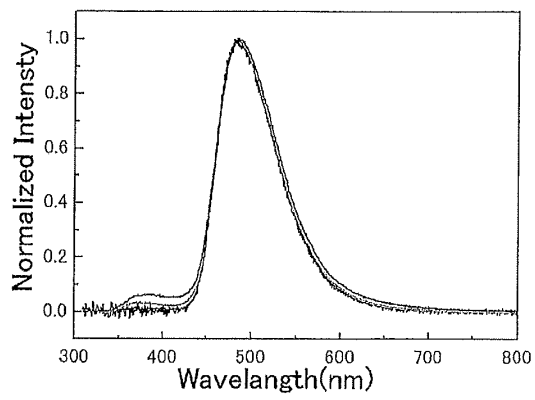
도면14



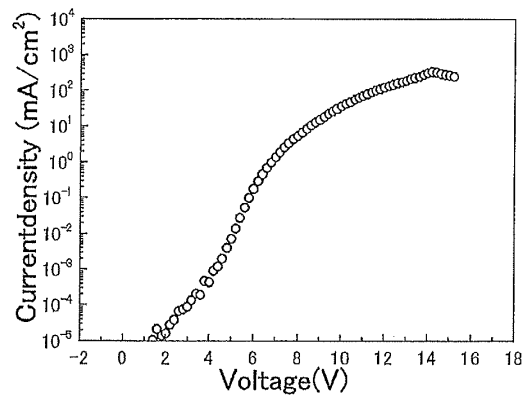
도면15



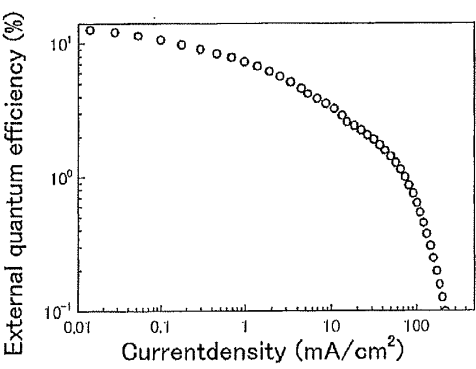
도면16



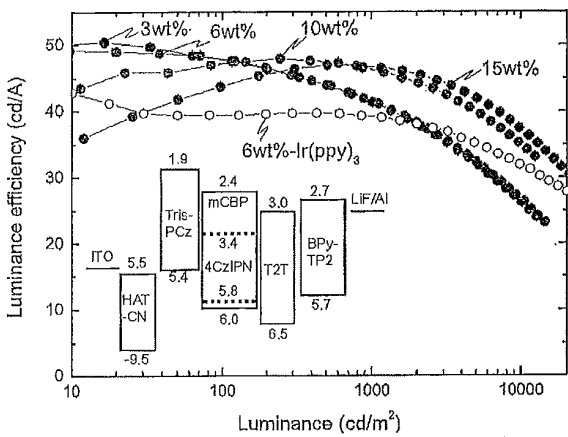
도면17



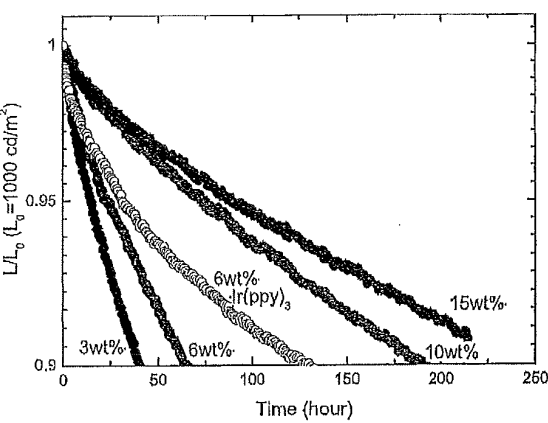
도면18



도면19



도면20



专利名称(译)	有机发光元件及其中使用的发光材料和化合物		
公开(公告)号	KR102082528B1	公开(公告)日	2020-02-27
申请号	KR1020147030961	申请日	2013-04-08
[标]申请(专利权)人(译)	国立大学法人九州大学 让我们用这个库的库号九州钻石恋		
申请(专利权)人(译)	고쿠리쓰다이가쿠호진규슈다이가쿠		
当前申请(专利权)人(译)	가부시키가이사큐릭스		
[标]发明人	노무라히로코		
发明人	아다치 지하야 우오야마 히로키 노무라 히로코 고우시 겐이치 야스다 다쿠마 곤도 료스케 시즈 가츠유키 나카노타니 하지메 니시데 준이치		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/08 C07D209/86 H01L51/50 H01L51/54		
CPC分类号	C07D209/08 C07D209/86 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1029 H01L51/0072 C07D209/18 H01L51/0054 H01L51/0067 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5012 H01L51/5016 H01L51/50		
审查员(译)	周二集群		
优先权	2012088615 2012-04-09 JP 2012173277 2012-08-03 JP 2012274111 2012-12-14 JP		
其他公开文献	KR1020150005583A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

具有包含由以下通式表示的化合物的发光层的有机发光装置具有高发光效率。通式中，R¹至R⁵中的至少一个表示氰基，R¹至R⁵中的至少一个表示9-呋唑基，1,2,3,4-四氢-9-呋唑基 R¹至R³的残基表示氢原子或取代基。

