

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2013-0007510 (43) 공개일자 2013년01월18일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)		(71) 출원인 (주)씨에스엘솔라 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
(21) 출원번호 10-2012-0135971(분할)	(22) 출원일자 2012년11월28일 심사청구일자 없음	(72) 발명자 김복영 경기도 용인시 상현동 상현마을 831번지 쌍용2차 218-601호
(62) 원출원 특허 10-2011-0005086 원출원일자 2011년01월18일 심사청구일자 2011년01월18일	(30) 우선권주장 1020100138769 2010년12월30일 대한민국(KR)	안중복 서울특별시 도봉구 창2동 809 금용아파트 101-1301 (뒷면에 계속)
		(74) 대리인 정중원, 최지연, 이명택

전체 청구항 수 : 총 5 항

(54) 발명의 명칭 피리도이미다졸계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자

(57) 요약

본 발명은 유기 광소자 및 이에 사용되는 유기 광화합물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것으로, 특히 피리도이미다졸(pyridoimidazole)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 개발하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있다.

(72) 발명자

진성민

경기도 성남시 분당구 야탑동 215 매화마을 2단지
27-1301

이재성

경기도 수원시 장안구 조원동 한일아파트 126동
303호

안도환

서울시 종로구 창신2동 639-20 창림아파트 501호

강지승

서울시 강서구 화곡1동 352-20

박노길

경기도 용인시 기흥구 동백동 575 호수마을 휴먼시
아아파트 1506-1102

한근희

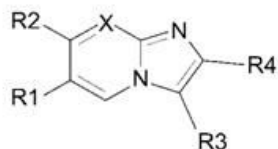
경기도 광명시 광명4동 한진아파트 109-1305

특허청구의 범위

청구항 1

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F>



상기 화학식에서 상기 X는 C 또는 N 이고,

상기 R1, R2, R3 및 R4는 각각 독립적으로

H, D, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

상기 R3 및 R4 중 하나 또는 둘 모두는 항상 C5~C40의 아릴기 또는 C5~C40의 헤테로아릴기이다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 R1, R2, R3 및 R4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는

각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상으로 치환되거나 비치환된 것을 특징으로 하는 유기 광소자.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 A1, A2, B1 및 B2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기 중

에서

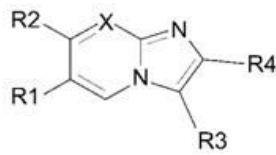
C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기는

각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 제2치환기로 추가적으로 치환되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하거나 스피로 결합을 하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자.

청구항 4

하기 화학식 F로 표시되는 유기 광화합물:

<화학식 F>



상기 화학식에서 상기 X는 C 또는 N 이고,

상기 R1, R2, R3 및 R4는 각각 독립적으로

H, D, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

상기 R3 및 R4 중 하나 또는 둘 모두는 항상 C5~C40의 아릴기 또는 C5~C40의 헤테로아릴기이다.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 R1, R2, R3 및 R4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는

각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상으로 치환되거나 비치환된 것을 특징으로 하는 유기 광화합물.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 피리도이미다졸(pyridoimidazole)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질에 전기에너지를 가했을 때 빛이 나타나는 현상을 말한다. 즉, 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기물층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되고, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0003] 유기 전계 발광 소자에 대한 연구는 1950년대 Bernanose가 유기 색소를 함유한 고분자 박막에 높은 교류 전압을 인가 하여 유기 박막으로부터 발광을 관측하였으며, 1965년 안트라센 단결정에 전류를 인가하여 일중항 여기자를 발생시켜 청색 형광을 얻었다.

[0004] 유기 전계 발광 소자를 효율적으로 만들기 위한 한 방법으로서 소자 내의 유기물층을 단층 대신 다층 구조로 제조하는 연구가 진행되어 왔다. 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시 되었으며, 현재 사용되는 대부분의 유기 전계 발광 소자는 기판, 양극, 양극으로 정공을 받아들이는 정공 주입층, 정공을 전달하는 정공 전달층, 정공과 전자가 재결합하여 빛을 내는 발광층, 전자를

[0005] 전달하는 전자 전달층, 음극으로부터 전자를 받아들이는 전자 주입층 및 음극으로 이루어져 있다. 이렇게 유기 전계 발광 소자를 다층으로 제작하는 이유는 정공과 전자의 이동속도가 상이하며, 따라서 적절한 정공 주입층 및 전달층, 전자 전달층 및 전자 주입층을 만들어 주면 정공과 전자가 효과적으로 전달될 수 있으며, 소자 내 정공과 전자의 균형이 이루어져 발광 효율을 높일 수 있기 때문이다.

- [0006] 전자 수송의 재료에 관한 최초의 보고는 옥사디아졸 유도체(PBD)를 들 수 있다. 이후 트리아졸 유도체(TAZ) 및 페난스로린 유도체(BCP)가 전자 수송성을 나타낸다고 보고 되었다. 전자 수송층은 유기 단분자 물질로는 전자에 대한 안정도와 전자 이동 속도가 상대적으로 우수한 유기 금속착체들이 좋은 후보들이며, 안정성이 우수하고 전자 친화도가 큰 Alq3가 가장 우수한 것으로 보고 되었으며, 현재에도 가장 기본적으로 사용되고 있다. 또한, 종래에 공지된 전자 수송용 물질로는 산요(Sanyo)사에서 발표한 플라본(flavon)유도체 또는 치소(Chisso)사의 게르마늄 및 실리콘시클로펜타디엔 유도체 등이 알려져 있다. (일본공개특허공보 제1998-017860호, 일본공개특허공보 제1999-087067호).
- [0007] 또한, 종래의 전자 주입 및 수송층용 물질로는 이미다졸기, 옥사졸기, 티아졸기를 가진 유기 단분자 물질들이 많이 보고되었다. 그러나 이러한 물질들이 전자수송용 물질로 보고되기 이전에 모토롤라(Motorola)사의 EU0700917 A2에 이러한 물질들의 금속착체 화합물들이 유기 발광 소자의 청색 발광층 또는 청록색 발광층에 적용된 것이 이미 보고되었다.
- [0008] 1996년도에 코닥사에서 발표하고 미국 특허 제5,645,948호에 기재된 TPBI는 이미다졸기를 가진 대표적인 전자수송층용 물질로 알려져 있으며, 그 구조는 벤젠의 1,3,5 치환 위치에 세 개의 N-페닐 벤즈이미다졸기를 함유하고 기능적으로는 전자를 전달하는 능력뿐 아니라 발광층에서 넘어오는 정공을 차단하는 기능도 있으나, 실제 소자에 적용하기에는 열적 안정성이 낮은 문제점을 가지고 있다.
- [0009] 또한, 일본 공개특허공보 평11-345686호에 개시된 전자수송용 물질들은 옥사졸기,티아졸기를 함유하고 있고 발광층에도 적용할 수 있다고 보고하고 있으나, 구동전압, 휘도 및 소자의 수명 측면에서 실용화에 도달하지 못하고 있다.
- [0010] 따라서, 상기와 같은 종래 기술의 문제점을 극복하고 유기 전계 발광 소자의 특성을 더욱 향상시키기 위하여, 유기 전계 발광 소자에서 전자 수송용 물질로 사용될 수 있는 보다 안정적이고 효율적인 재료에 대한 개발이 계속 요구된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

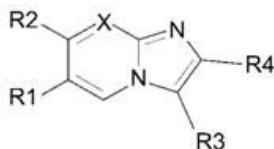
- [0012] 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 유기 광소자, 특히 유기 전계 발광소자에 적용할 수 있는 새로운 유기 광화합물을 제공하는 것이다.
- [0013] 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 신규 화합물을 포함하여 구동전압이 낮고, 발광효율, 휘도, 색순도, 열적 안정성 및 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 유기 광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

- [0014] 본 발명에 따른 유기 광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 F의 유기 광화합물을 기초로 한다:

[0015] <화학식 F>

[0016] <화학식 F>



[0017]

[0018] 상기 화학식에서 상기 X는 C 또는 N 이고,

[0019] 상기 R1, R2, R3 및 R4는 각각 독립적으로

[0020] H, D, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리,

축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

[0021] 상기 R3 및 R4 중 하나 또는 둘 모두는 항상 C5~C40의 아릴기 또는 C5~C40의 헤테로아릴기이다.

발명의 효과

[0022] 본 발명에 따른 유기 광소자는 높은 발광 효율, 높은 발광 휘도, 높은 색순도 및 현저히 향상된 발광 수명을 제공한다,

[0023] 아울러 본 발명은 이를 유기 발광 소자 및 유기 발광 화합물, 또는 태양광 발전을 위한 유기 광소자 및 광화학 물질을 제공한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0024] 이하 본 발명을 상세히 설명하도록 한다.

[0025] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 구현예(態樣, aspect)(또는 실시예)들을 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

[0026] 본 명세서에서 사용한 용어는 단지 특정한 구현예(태양, 態樣, aspect)(또는 실시예)를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, ~포함하다~ 또는 ~이루어진다~ 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0027] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

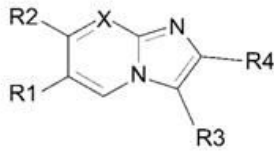
[0028] 본 발명은 피리도이미다졸(pyridoimidazole)계 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 제시하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킨 물질을 개발하고자 한다.

[0029] 본 명세서에서 유기 광화학물은 유기 광소자에 사용되는 화합물이라는 의미로서 반드시 발광이 가능한 화합물로 그 범위가 한정되지 않으며, 그 적용 범위도 유기 발광층에 한정되지 않고, 전하 주입층 및 전하 수송층 등 유기 광소자를 구성하는 어느 층에나 모두 사용될 수 있다.

[0030] 또 본 명세서에서 '광화학물' 및 '광소자'라는 용어는 사전적인 또는 관습적인 정의와 무관하게 본 발명이 유기 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 소자에 모두 적용되는 경우를 고려하여, 이를 포괄하고자 선정한 용어이다.

[0031] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F의 유기 광화학물을 포함한다.

[0032] <화학식 F>



[0033]

[0034] 상기 유도체에서 상기 X는 C 또는 N 이고,

[0035] 상기 R1, R2, R3 및 R4는 각각 독립적으로

[0036] H, D, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

[0037] 상기 R3 및 R4 중 하나 또는 둘 모두는 항상 C5~C40의 아릴기 또는 C5~C40의 헤테로아릴기이다.

[0038] 본 발명의 발명자는 상기 화학식 F의 유기 광화합물의 치환기에서 A1, A2, B1 및 B2와 X를 선택 특정한,

[0039] 다양한 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막으로 사용될 수 있는 유기 광화합물 및

[0040] 이를 이용한 유기 광소자를 개발하고,

[0041] 유기발광소자로 활용될 경우 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있고, 특히 발광 수명이 현저히 향상됨을 발견하였으며,

[0042] 이를 태양광 발전을 위한 광소자 및 광화합물 분야에 응용 적용할 경우 우수한 발전 효율을 얻을 수 있을 것으로 기대된다.

[0043] 이하에서는 화학식 F의 유기 광화합물을 유기 발광 소자와 관련하여 설명할 것이나, 이에 의하여 본 발명이 제한 해석 되어서는 안 된다.

[0044] 상기 화학식 F의 유기 광화합물은 유기 광소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 유기막을 이루는 물질로 적합하다. 상기 화학식 F의 유기 광화합물은 유기 발광 소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하며 호스트 재료뿐만 아니라 도판트 재료로서도 사용된다. 상기 화학식 F의 유기 광화합물은 청색 내지 녹색인 색상을 제공하며 백색 발광 소자에 사용하기에 적합하다.

[0045] 상기 R1, R2, R3 및 R4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는

[0046] 각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상으로 치환되거나 비치환되는 것이 바람직하다.

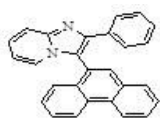
[0047] 또 상기 A1, A2, B1 및 B2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기 중에서

[0048] C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40

의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기는

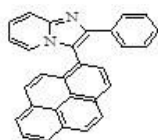
- [0049] 각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 제2치환기로 추가적으로 치환되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하거나 스피로 결합을 하는 것이 바람직하다.
- [0050] 나아가 상기 A1, A2, B1 및 B2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알킬닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기는
- [0051] D, F, 페닐기, 톨일기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 비페닐레닐기, 안트라세닐기, 벤조안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 메틸안트릴기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 플루오레닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 티오펜닐기, 인돌일기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸일기, 퀴놀리닐기, 벤조티오펜닐기, 파라티아지닐기, 피롤일기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 티안트레닐기(thianthrenyl), 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 옥시라닐기, 피롤리디닐기, 피라졸리디닐기, 이미다졸리디닐기, 피페리디닐기, 피페라지닐기, 모르폴리닐기, 디(C6~C50아릴)아미노기, 실레인기 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된 것이 바람직하다.
- [0052] 상기 아릴기는 방향족 고리 시스템을 갖는 1가 그룹으로서, 2 이상의 고리시스템을 포함할 수 있으며, 상기 2이상의 고리 시스템은 서로 결합 또는 축합된 형태로 존재할 수 있다. 상기 헤테로아릴기는 상기 아릴기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.
- [0053] 한편, 사이클로알킬기는 고리 시스템을 갖는 알킬기를 가리키며, 상기 헤테로사이클로알킬기는 상기 사이클로알킬기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.
- [0054] 상기 아릴기 및 헤테로아릴기의 하나 이상의 수소가 치환될 경우, 이들의 치환기는 C1~C50알킬기; C1~C50알콕시기; 비치환 또는 C1~C50알킬기 또는 C1~C50알콕시기로 치환된 C6~C50아릴기; 비치환 또는 C1~C50알킬기 또는 C1~C50알콕시기로 치환된 C2~C50헤테로아릴기; 비치환 또는 C1~C50알킬기 또는 C1~C50알콕시기로 치환된 C5~C50사이클로알킬기 및 비치환 또는 C1~C20알킬기 또는 C1~C20알콕시기로 치환된 C5~C50헤테로사이클로알킬기, 또는 실레인기로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.
- [0055] 보다 상세하게 본 발명의 일 구현예에 따르면, 본 발명의 유기 광소자에 사용되는 유기 광화합물은 하기 화학식 1 내지 200의 구조(본 명세서에서 '화학식'은 생략하고 숫자만 기재함)를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0056] 1



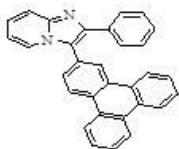
[0057]

[0058] 2



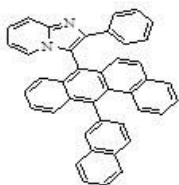
[0059]

[0060] 3



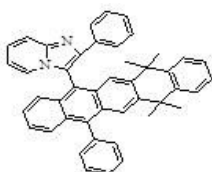
[0061]

[0062] 4



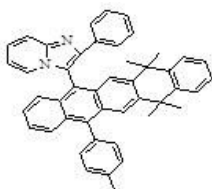
[0063]

[0064] 5



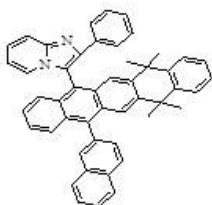
[0065]

[0066] 6



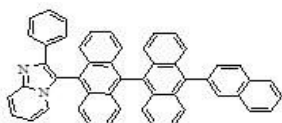
[0067]

[0068] 7



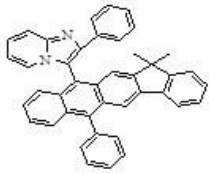
[0069]

[0070] 8



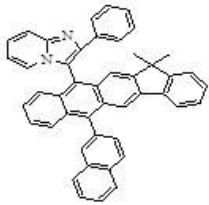
[0071]

[0072] 9



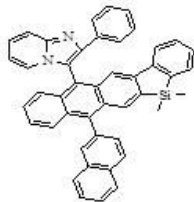
[0073]

[0074] 10



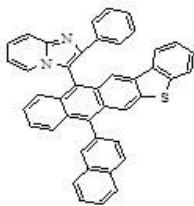
[0075]

[0076] 11



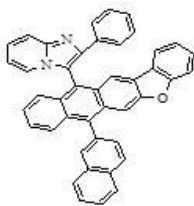
[0077]

[0078] 12



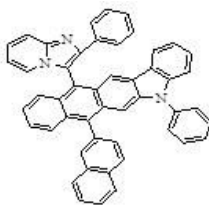
[0079]

[0080] 13



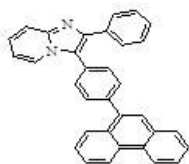
[0081]

[0082] 14



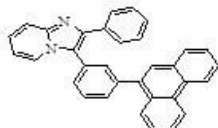
[0083]

[0084] 15



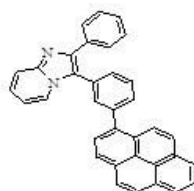
[0085]

[0086] 16



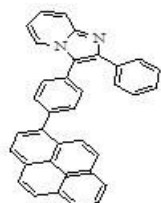
[0087]

[0088] 17



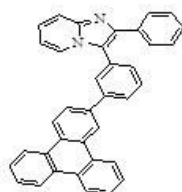
[0089]

[0090] 18



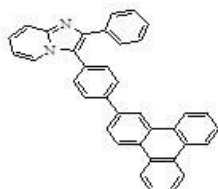
[0091]

[0092] 19



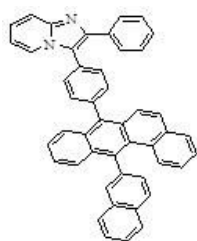
[0093]

[0094] 20



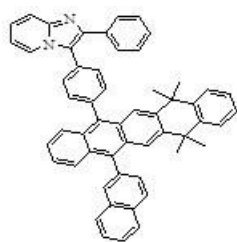
[0095]

[0096] 21



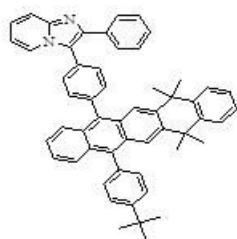
[0097]

[0098] 22



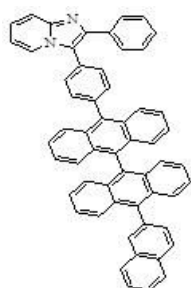
[0099]

[0100] 23



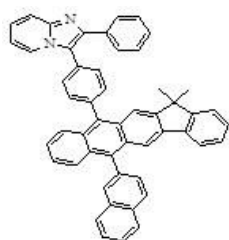
[0101]

[0102] 24



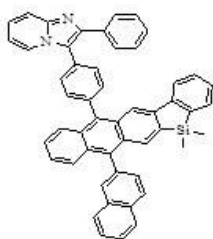
[0103]

[0104] 25



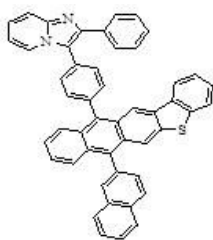
[0105]

[0106] 26



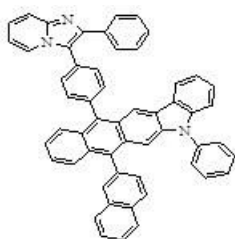
[0107]

[0108] 27



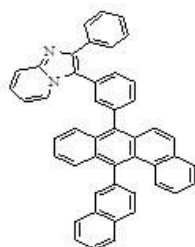
[0109]

[0110] 28



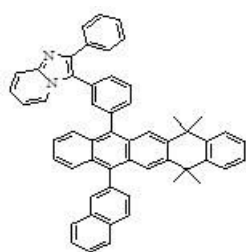
[0111]

[0112] 29



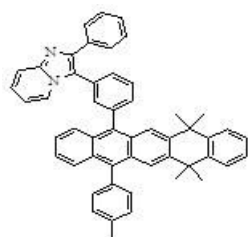
[0113]

[0114] 30



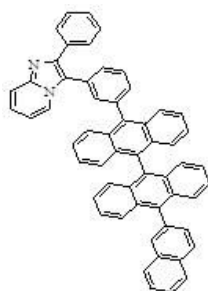
[0115]

[0116] 31



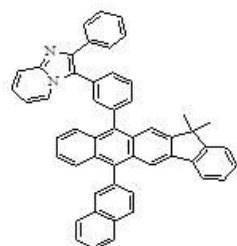
[0117]

[0118] 32



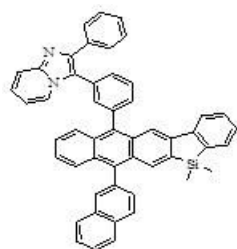
[0119]

[0120] 33



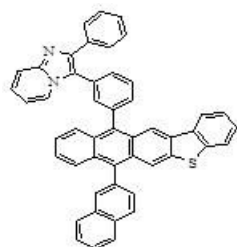
[0121]

[0122] 34



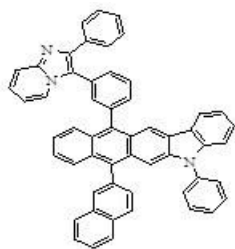
[0123]

[0124] 35



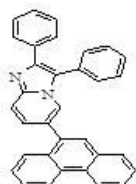
[0125]

[0126] 36



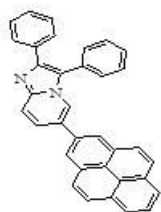
[0127]

[0128] 37



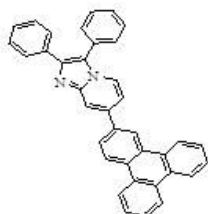
[0129]

[0130] 38



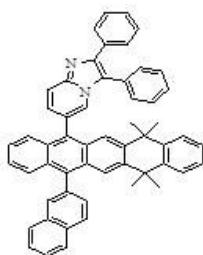
[0131]

[0132] 39



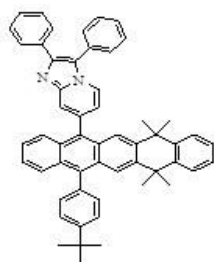
[0133]

[0134] 40



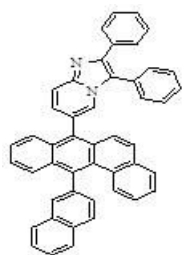
[0135]

[0136] 41



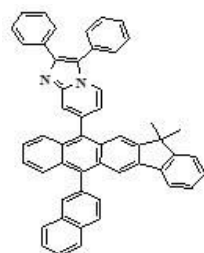
[0137]

[0138] 42



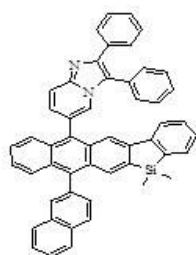
[0139]

[0140] 43



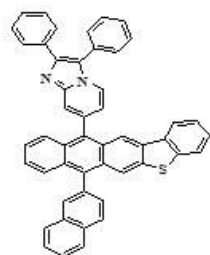
[0141]

[0142] 44



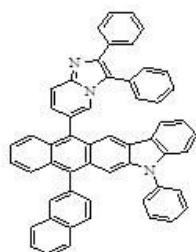
[0143]

[0144] 45



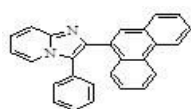
[0145]

[0146] 46



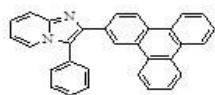
[0147]

[0148] 47



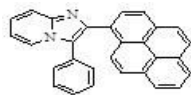
[0149]

[0150] 48



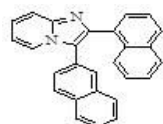
[0151]

[0152] 49



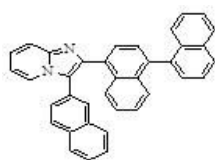
[0153]

[0154] 50



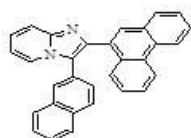
[0155]

[0156] 51



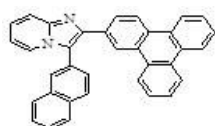
[0157]

[0158] 52



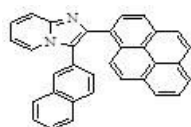
[0159]

[0160] 53



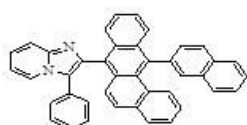
[0161]

[0162] 54



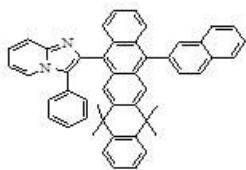
[0163]

[0164] 55



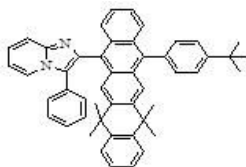
[0165]

[0166] 56



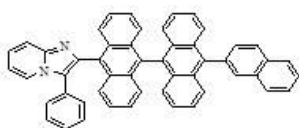
[0167]

[0168] 57



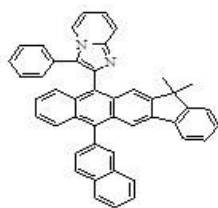
[0169]

[0170] 58



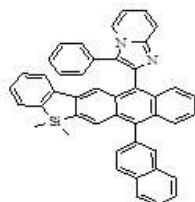
[0171]

[0172] 59



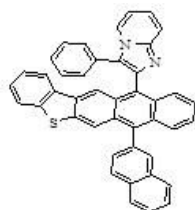
[0173]

[0174] 60



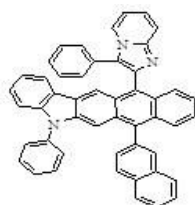
[0175]

[0176] 61



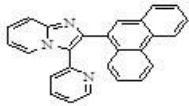
[0177]

[0178] 62



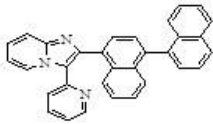
[0179]

[0180] 63



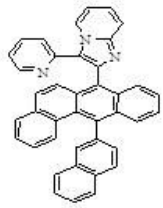
[0181]

[0182] 64



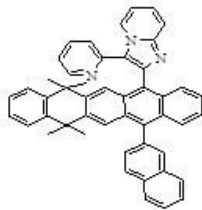
[0183]

[0184] 65



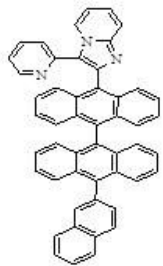
[0185]

[0186] 66



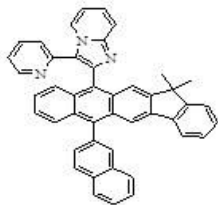
[0187]

[0188] 67



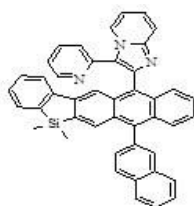
[0189]

[0190] 68



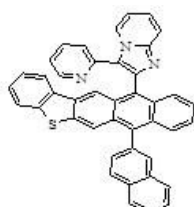
[0191]

[0192] 69



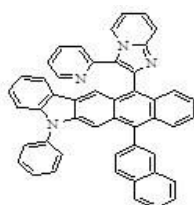
[0193]

[0194] 70



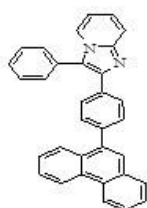
[0195]

[0196] 71



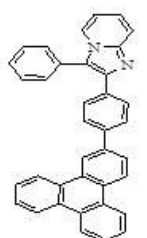
[0197]

[0198] 72



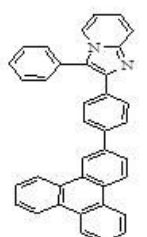
[0199]

[0200] 73



[0201]

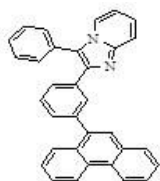
[0202] 74



[0203]

[0204]

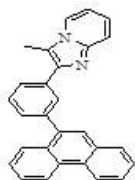
75



[0205]

[0206]

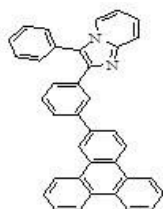
76



[0207]

[0208]

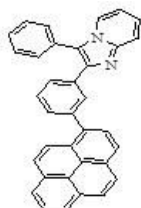
77



[0209]

[0210]

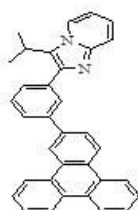
78



[0211]

[0212]

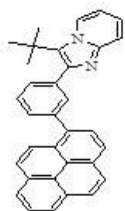
79



[0213]

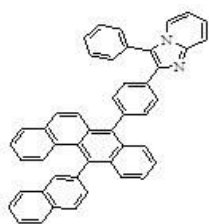
[0214]

80



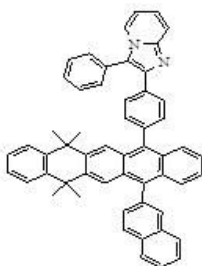
[0215]

[0216] 81



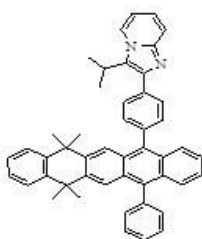
[0217]

[0218] 82



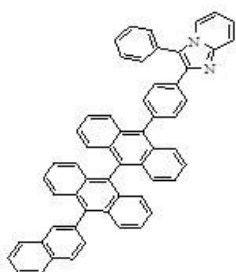
[0219]

[0220] 83



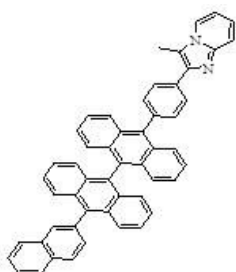
[0221]

[0222] 84



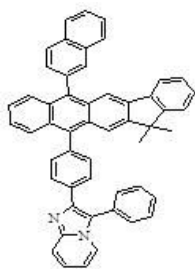
[0223]

[0224] 85



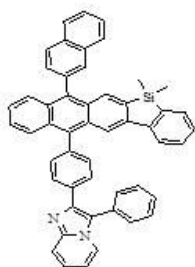
[0225]

[0226] 86



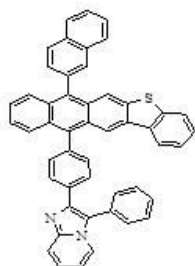
[0227]

[0228] 87



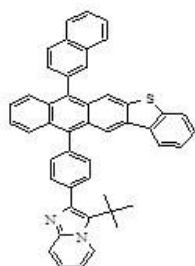
[0229]

[0230] 88



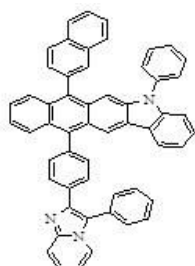
[0231]

[0232] 89



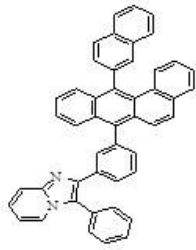
[0233]

[0234] 90



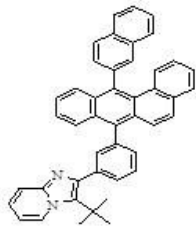
[0235]

[0236] 91



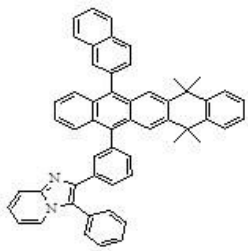
[0237]

[0238] 92



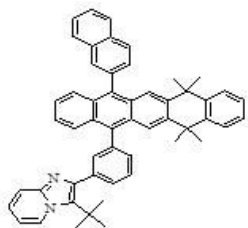
[0239]

[0240] 93



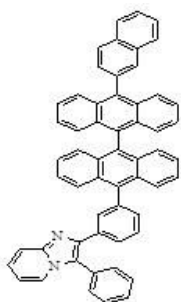
[0241]

[0242] 94



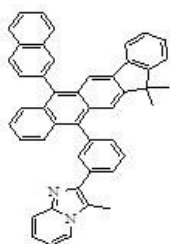
[0243]

[0244] 95



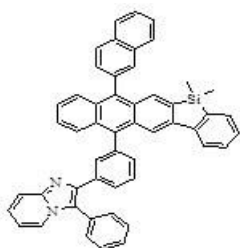
[0245]

[0246] 96



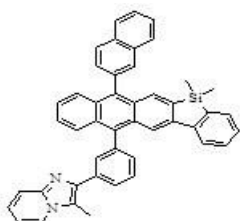
[0247]

[0248] 97



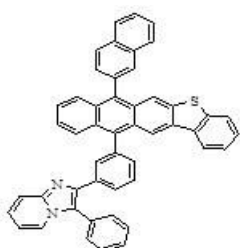
[0249]

[0250] 98



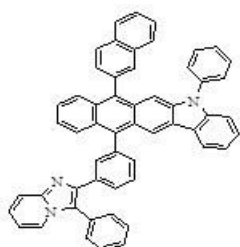
[0251]

[0252] 99



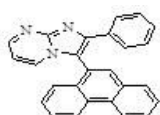
[0253]

[0254] 100



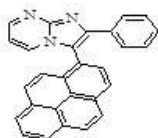
[0255]

[0256] 101



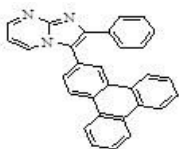
[0257]

[0258] 102



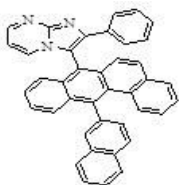
[0259]

[0260] 103



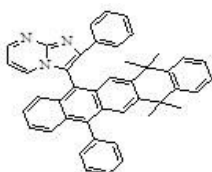
[0261]

[0262] 104



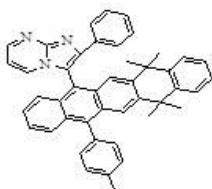
[0263]

[0264] 105



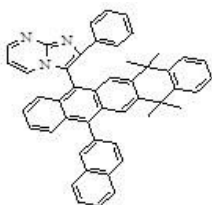
[0265]

[0266] 106



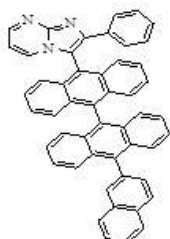
[0267]

[0268] 107



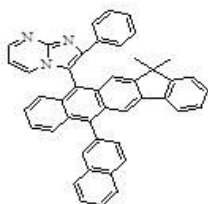
[0269]

[0270] 108



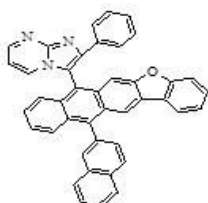
[0271]

[0272] 109



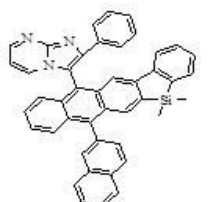
[0273]

[0274] 110



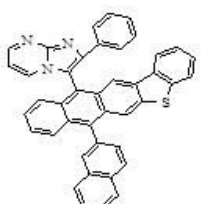
[0275]

[0276] 111



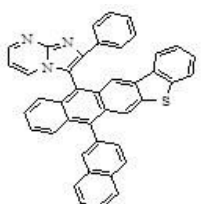
[0277]

[0278] 112



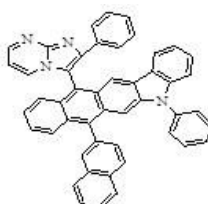
[0279]

[0280] 113



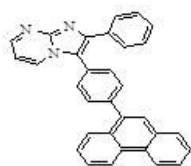
[0281]

[0282] 114



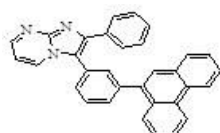
[0283]

[0284] 115



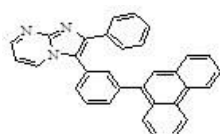
[0285]

[0286] 116



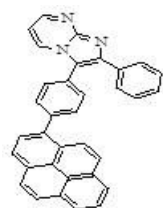
[0287]

[0288] 117



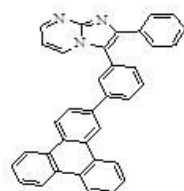
[0289]

[0290] 118



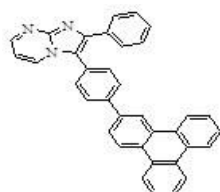
[0291]

[0292] 119



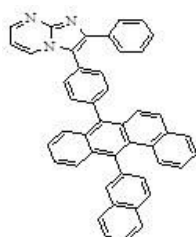
[0293]

[0294] 120



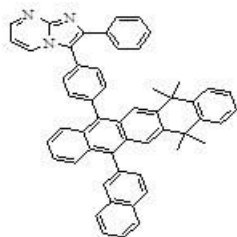
[0295]

[0296] 121



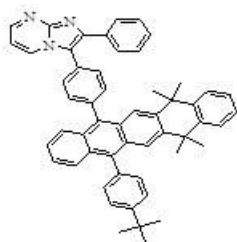
[0297]

[0298] 122



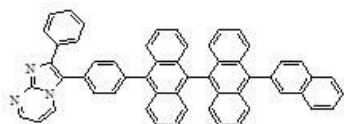
[0299]

[0300] 123



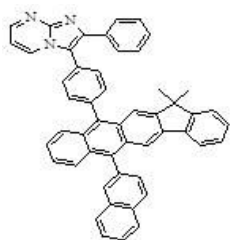
[0301]

[0302] 124



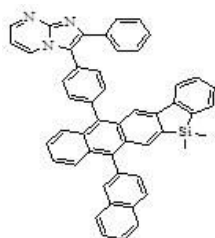
[0303]

[0304] 125



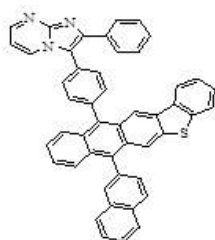
[0305]

[0306] 126



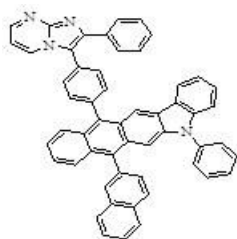
[0307]

[0308] 127



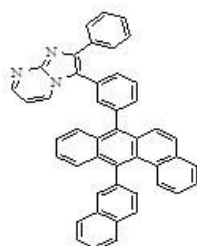
[0309]

[0310] 128



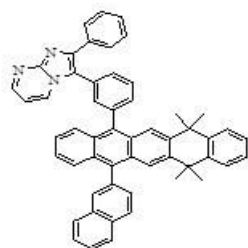
[0311]

[0312] 129



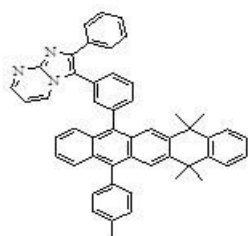
[0313]

[0314] 130



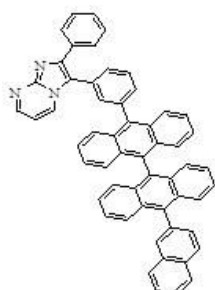
[0315]

[0316] 131



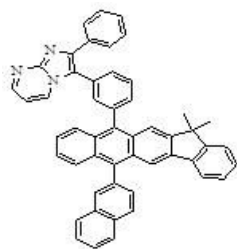
[0317]

[0318] 132



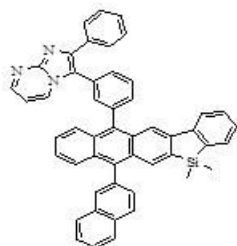
[0319]

[0320] 133



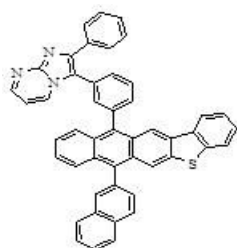
[0321]

[0322] 134



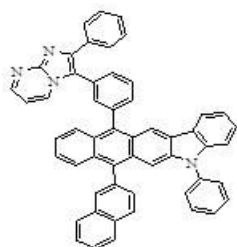
[0323]

[0324] 135



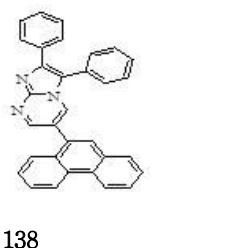
[0325]

[0326] 136



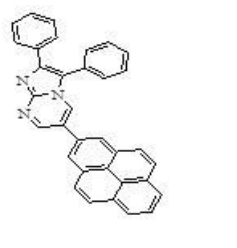
[0327]

[0328] 137



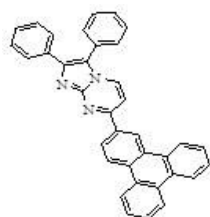
[0329]

[0330] 138



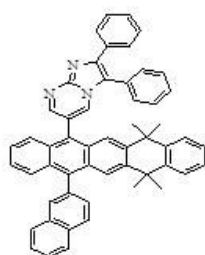
[0331]

[0332] 139



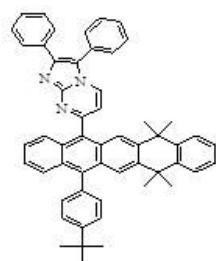
[0333]

[0334] 140



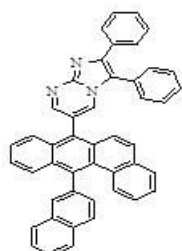
[0335]

[0336] 141



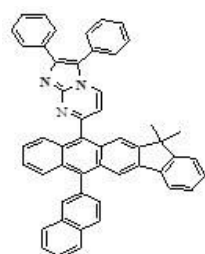
[0337]

[0338] 142



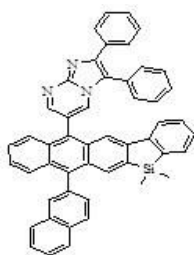
[0339]

[0340] 143



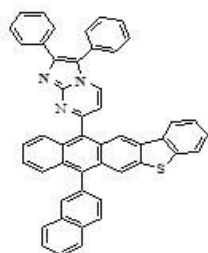
[0341]

[0342] 144



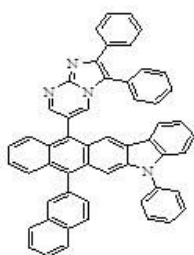
[0343]

[0344] 145



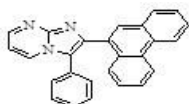
[0345]

[0346] 146



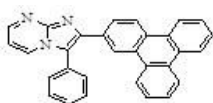
[0347]

[0348] 147



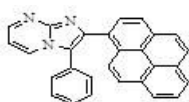
[0349]

[0350] 148



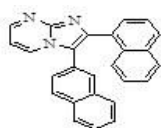
[0351]

[0352] 149



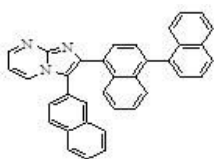
[0353]

[0354] 150



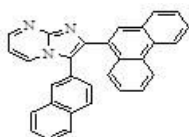
[0355]

[0356] 151



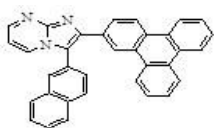
[0357]

[0358] 152



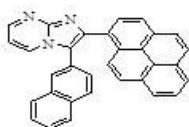
[0359]

[0360] 153



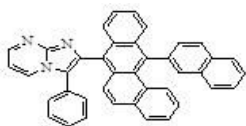
[0361]

[0362] 154



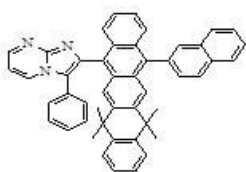
[0363]

[0364] 155



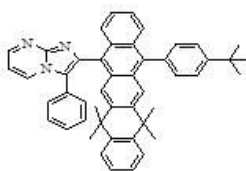
[0365]

[0366] 156



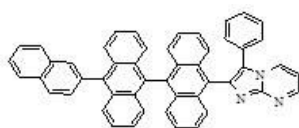
[0367]

[0368] 157



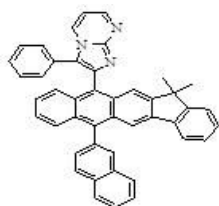
[0369]

[0370] 158



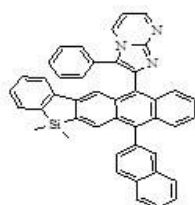
[0371]

[0372] 159



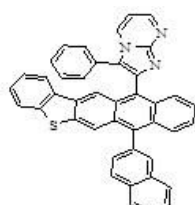
[0373]

[0374] 160



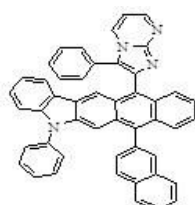
[0375]

[0376] 161



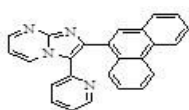
[0377]

[0378] 162



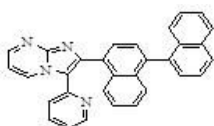
[0379]

[0380] 163



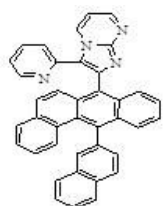
[0381]

[0382] 164



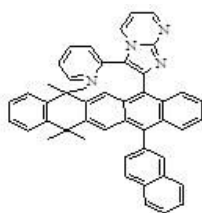
[0383]

[0384] 165



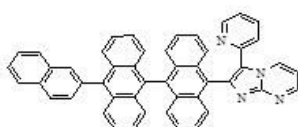
[0385]

[0386] 166



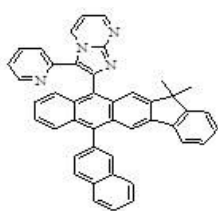
[0387]

[0388] 167



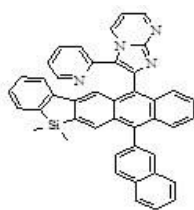
[0389]

[0390] 168



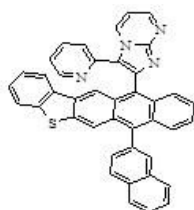
[0391]

[0392] 169



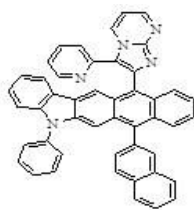
[0393]

[0394] 170



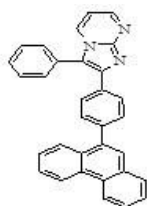
[0395]

[0396] 171



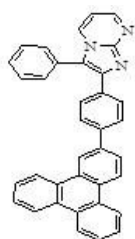
[0397]

[0398] 172



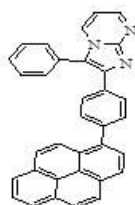
[0399]

[0400] 173



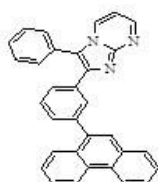
[0401]

[0402] 174



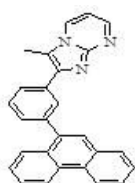
[0403]

[0404] 175



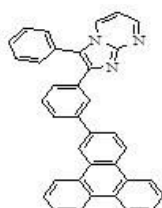
[0405]

[0406] 176



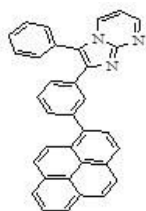
[0407]

[0408] 177



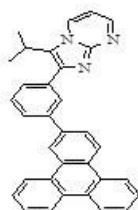
[0409]

[0410] 178



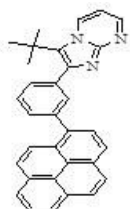
[0411]

[0412] 179



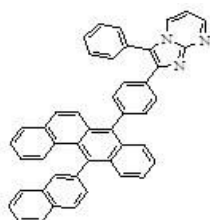
[0413]

[0414] 180



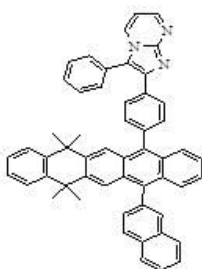
[0415]

[0416] 181



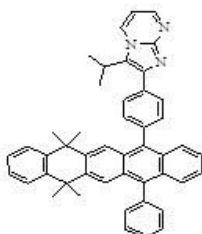
[0417]

[0418] 182



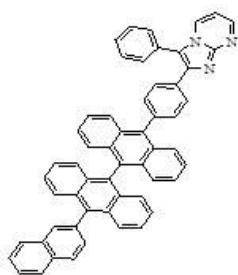
[0419]

[0420] 183



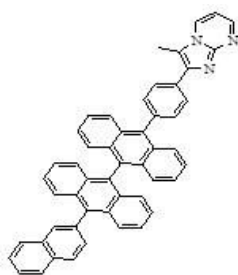
[0421]

[0422] 184



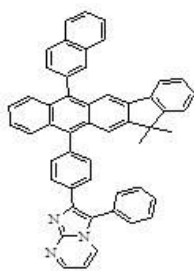
[0423]

[0424] 185



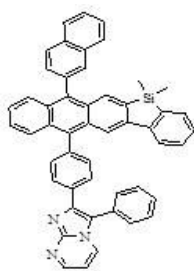
[0425]

[0426] 186



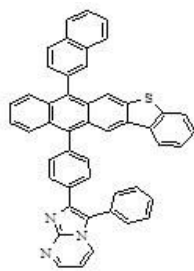
[0427]

[0428] 187



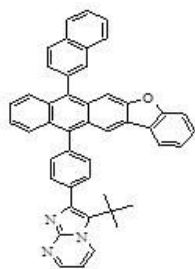
[0429]

[0430] 188



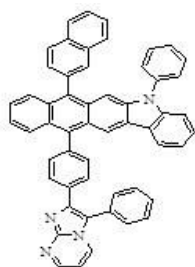
[0431]

[0432] 189



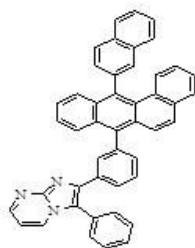
[0433]

[0434] 190



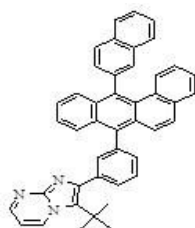
[0435]

[0436] 191



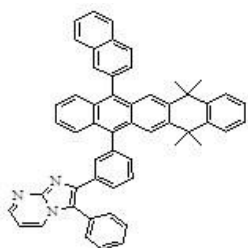
[0437]

[0438] 192



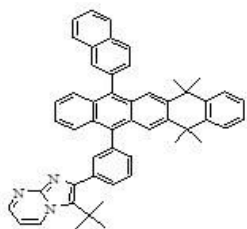
[0439]

[0440] 193



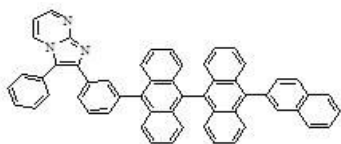
[0441]

[0442] 194



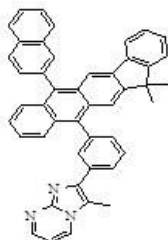
[0443]

[0444] 195



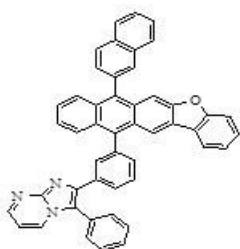
[0445]

[0446] 196



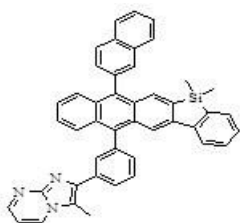
[0447]

[0448] 197



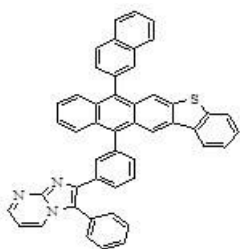
[0449]

[0450] 198



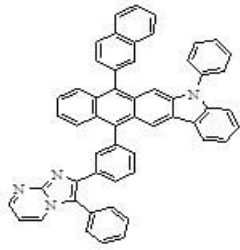
[0451]

[0452] 199



[0453]

[0454] 200



[0455]

[0456] 상기 화학식 F의 화합물로 표시되는 본 발명에 따른 유기 광화합물은 통상의 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있으며, 상기 화합물의 보다 상세한 합성 경로는 하기 합성예의 반응식들을 참조한다. 상기 화학식 F의 화합물은 유기 광소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하다. 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구조는 매우 다양하다. 상기 제1전극과 제2전극 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

[0457] 보다 구체적으로, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구현에는

[0458] 먼저, 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있고,

[0459] 또 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있으며,

[0460] 나아가 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있다.

[0461] 이때, 상기 정공수송층, 정공주입층 및 발광층 중 하나 이상은 본 발명을 따르는 화합물을 포함할 수 있다.

[0462] 본 발명을 따르는 유기 광소자의 발광층은 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함할 수 있다. 이 중, 상기 인광 도펀트는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb 및 Tm으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다. 또한, 본 발명에 따르는 화합물은 발광층에서 형광 도펀트로도 사용될 수 있다.

[0463] 이하, 본 발명을 따르는 유기 광소자의 제조 방법을 유기 광소자를 참조하여, 살펴보기로 한다. 먼저 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 형성하여 제1전극을 형성한다. 상기 제1전극은 애노드(Anode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기 광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0464] 다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

[0465] 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500℃, 진공도 10⁻⁵ 내지 10⁻³ torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec, 막 두께는 통상 100Å 내지 1μm 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0466] 스펀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0467] 상기 정공주입층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a를 갖는 화합물일 수 있다.

[0468] 또는, 예를 들어, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 2-

TNATA(4,4',4"-tris(N-(2-naphtyl)-N-phenylamino)triphenylamine:4,4',4"-트리스(N-(나프틸)-N-페닐아미노)트리페닐아민), 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS

- [0469] (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등과 같은 공지된 정공주입 물질을 사용할 수 있다.
- [0470] 상기 정공주입층의 두께는 약 100Å 내지 10000Å, 바람직하게는 100Å 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 100Å 미만인 경우, 정공주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공주입층의 두께가 10000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0471] 다르게는, 상기 정공주입층은 진공기상증착법에 의해 형성할 수 있다. 구체적인 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적인 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 예를 들어 DNTPD(N,N-bis-[4-(di-m-tolylamino)phenyl]-N,N'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine) 등이 사용될 수 있다.
- [0472] 다음으로 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의하여 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0473] 상기 정공수송층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 또는, 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 통상적인 아민 유도체 등과 같은 공지된 정공수송 물질을 사용할 수 있다. 상기 정공수송층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 정공수송층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0474] 다음으로 상기 정공수송층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0475] 상기 발광층은 전술한 바와 같이 본 발명을 따르는 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 화학식 a의 화합물은 적합한 공지의 호스트 재료와 함께 사용될 수 있거나, 공지의 도펀트 재료와 함께 사용될 수 있다.
- [0476] 상기 화학식 a의 화합물을 단독으로 사용하는 것도 가능하다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq3(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminum) 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), 또는 PVK(폴리(n-비닐카르바졸)) 등을 사용할 수 있다.
- [0477] 도펀트 재료의 경우, 형광 도펀트로서는 이데미츠사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 하야시바라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD61, 녹색 인광 도펀트 Ir(PPy)3(PPy=2-phenylpyridine), 청색 인광 도펀트인 F2Irpic, UDC사의 적색 인광 도펀트 RD 61 등을 사용할 수 있다. MQD(N-methylquinacridone), 쿠마린(Coumarine)유도체 등도 사용할 수 있다.
- [0478] 도핑 농도는 특별히 제한 되지 않으나 통상적으로 호스트100 중량부를 기준으로 하여 상기 도펀트의 함량은 0.01 ~ 15 중량부이다. 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 600Å일 수 있다.
- [0479] 상기 발광층의 두께가 100Å 미만인 경우, 발광 특성이 저하될 수 있으며, 상기 발광층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0480] 발광층에 발광 화합물이 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 발광층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 정공저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

택된다. 사용가능한 공지의 정공저지재료, 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP 등을 들 수 있다.

[0481] 상기 정공저지층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공저지층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공저지 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공저지층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다. 상기 정공저지층이 생략될 경우 도 1b에 도시된 구조를 가지는 유기발광 소자가 얻어진다.

[0482] 다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스퍼코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다.

[0483] 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 상기 전자수송층 재료는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, PBD등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있다.

[0484] 상기 전자수송층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자수송층의 두께가 100Å 미만인 경우, 전자수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0485] 또한 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0486] 전자 주입층으로서 LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0487] 상기 전자주입층의 두께는 약 1Å 내지 100Å, 바람직하게는 5Å 내지 50Å일 수 있다. 상기 전자주입층의 두께가 1Å 미만인 경우, 전자주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자주입층의 두께가 100Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

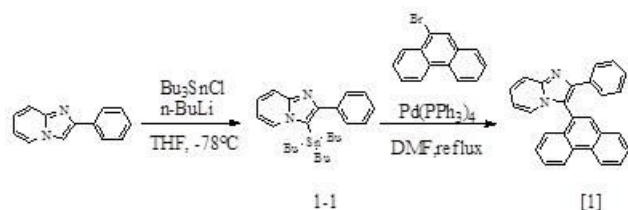
[0488] 마지막으로 전자주입층 상부에 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다.

[0489] 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성을 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.

[0490] 본 발명의 다른 구현예에 따르는 유기 전계 발광 화합물은 상기 화학식 a로 표현될 수 있으며, 보다 구체적으로는 상기 화학식 1 내지 161로 표현될 수 있다. 상기 화합물들에 대한 구체적인 내용은 상술한 유기 발광 소자에 대하여 설명한 부분과 동일하다.

[0491] 이하에서, 본 발명의 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 이하의 반응예에서 중간체 화합물은 최종 생성물의 번호에 일련번호를 추가하는 방식으로 표기한다. 예를 들어, 화합물 1은 화합물 [1] 로 상기 화합물의 중간체 화합물은 [1-1] 등으로 표기한다. 본 명세서에서 화합물의 번호는 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0492] [반응 예 1] 화합물 [1]의 합성



[0493]

[0494] 중간체 화합물 [1-1]의 제조

[0495] 2L 반응플라스크에 질소기류 하에서 테트라히드로퓨란 1.2L에 2-페닐이미다조[1,2-a]피리딘 30g(154.4mmol)를 녹이고, -78℃에서 부틸리튬 67.9mL(169.9mmol)을 적가하였다. 동일 온도에서 10분동안 교반한 후 트리부틸틴클로라이드 45.8mL(169.9mmol)를 첨가하였다. 반응종료 후 에틸아세테이트/증류수로 증분리하여 얻은 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 수분을 제거하고 감압증류한다. 농축액을 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 연한 노란색 오일의 중간체화합물 [1-1] 32.1g(43%)을 수득하였다.

[0497] 화합물 [1]의 제조

[0498] 500mL반응플라스크에 중간체 화합물 [1-1] 10.3g(21.38mmol), 9-브로모페난트렌 5g (19.44mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.1g(0.97mmol)을 투입하고 질소기류 하에서 다이메틸폼아마이드 250mL을 사용하여12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응종결 후 실온까지 천천히 냉각한 다음 반응액을 여과한다. 여과된 고체는 메탄올로 세척하고 테트라히드로퓨란과 메탄올로 재결정화하여 노란색 고체의 목적화합물 [1] 5.1g(72%)를 수득 하였다.

[0499] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.83(m, 2H), 8.38(m, 1H), 8.02(m, 2H), 7.83~7.72(m, 5H), 7.44~7.37(m, 6H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)

[0500] MS/FAB : 370(M^+)

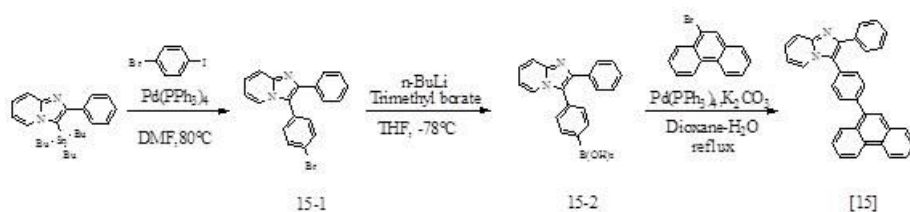
[0501] 상기 반응예 1의 방법에따라 1내지 14의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제1 표]에 그 결과를 나타내었다.

[0502] [제1 표]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
1	72	8.83(m, 2H), 8.38(m, 1H), 8.02(m, 2H), 7.83~7.72(m, 5H), 7.44~7.37(m, 6H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)	370
2	70	8.38(m, 1H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.61(s, 4H), 7.44~7.31(m, 6H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)	394
3	69	9.05(d, 1H), 8.83(m, 2H), 8.38(m, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.72(m, 4H), 7.44~7.31(m, 6H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)	420
4	70	8.83(m, 1H), 8.38(m, 1H), 8.02(m, 1H), 7.90~7.78(m, 8H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.29(m, 12H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)	546
5	72	8.38(d, 1H), 7.81(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.44~7.29(m, 13H), 7.21(m, 2H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	604
6	70	8.38(d, 1H), 7.81(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.44~7.09(m, 17H), 6.76(t, 1H), 2.24(s, 3H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	618
7	69	8.38(d, 1H), 7.90(m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.63(m, 1H), 7.59~7.29(m, 13H), 7.21(m, 2H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	654
8	71	8.38(d, 1H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.29(m, 17H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	672
9	70	8.38(d, 1H), 7.99~7.97(m, 2H), 7.81(m, 2H), 7.66(s, 1H), 7.51~7.29(m, 15H), 7.14~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H)	562
10	71	8.38(d, 1H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.66~7.63(m, 2H), 7.51~7.29(m, 13H), 7.14~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H)	612
11	70	8.38(d, 1H), 8.15~8.13(d, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.63(m, 1H), 7.51~7.29(m, 14H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 0.56(s, 6H)	628
12	72	8.38~8.35(m, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.29(m, 13H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	602
13	68	8.38(m, 1H), 7.90~7.79(m, 8H), 7.56~7.22(m, 15H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	586
14	70	8.38(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.63(m, 1H), 7.53~7.29(m, 18H), 7.19~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H)	661

[0503]

[0504] [반응 예 2] 화합물 [15]의 합성



[0505]

[0506] 중간체 화합물 [15-1]의 제조

[0507] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[1-1], 1-브로모-4-아이오도벤젠, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 다이메틸폼아마이드를 사용하여 80℃에서 반응 후 컬럼크로마토그래프로 분리 정제하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [15-1] 8g(51%)을 합성하였다.

[0508] 중간체화합물 [15-2]의 제조

[0509] 2L 반응플라스크에 질소기류 하에서 테트라히드로푸란 200mL에 [15-1] 10g(28.63mmol)를 녹이고, -78℃에서 부틸리튬 12.6mL(31.49mmol)을 적가하였다. 동일 온도에서 30분동안 교반한 후 트리메틸보레이트 4mL(169.9mmol)를 첨가하였다. 반응종료 후 1N 염산 수용액에 붓고 에틸아세테이트로 추출한다. 유기층 분리 후 디클로로메탄과 노르말헥산으로 재결정화하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [15-2] 6.2g(63%)을 수득하였다.

[0510] 화합물 [15]의 제조

[0511] 250mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [15-2] 5.8g (18.66mmol), 9-브로모페난트렌 4g (15.55mmol), 테트라키스

(트리페닐포스핀)팔라듐 359mg(0.31mmol), 탄산칼륨 (K_2CO_3) 3.2g (23.32mmol) 을 투입하고 질소기류하에서 1,4-디옥산100mL, 정제수 10mL 로 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응종결 후 실온까지 천천히 냉각한 다음 반응액을 여과한다. 여과된 고체는 정제수 와 메탄올로 세척하고 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 노란색 고체의 목적화합물[15] 4.8g(70%)를 수득하였다.

[0512] 1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) : δ 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.72(m, 5H), 7.44~7.37(m, 6H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)

[0513] MS/FAB : 446(M^+)

[0514] 상기 반응예 2의 방법에 따라 15내지 36의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제2표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0515] [제2표군(群)]

화합물 번호	수율 (%)	1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) (δ)	MS/FAB (M^+)
15	70	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.72(m, 5H), 7.44~7.37(m, 6H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)	446
16	68	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.78~7.60(m, 7H), 7.47~7.31(m, 8H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	446
17	72	8.38(d, 1H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.60(m, 8H), 7.44~7.31(m, 8H), 7.11(m, 1H), 6.76(t, 1H)	470
18	71	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.61(s, 4H), 7.44~7.31(m, 6H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)	470
19	69	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.60(m, 6H), 7.44~7.31(m, 6H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	496
20	72	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.72(m, 6H), 7.44~7.31(m, 6H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	496
21	71	8.83(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(m, 1H), 7.90~7.72(m, 6H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.29(m, 12H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(m, 1H)	622
22	70	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 7.90(m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.63(m, 1H), 7.54~7.29(m, 13H), 7.21~7.09(m, 7H), 6.76(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	730
23	69	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 7.81(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.44~7.09(m, 19H), 6.76(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.25(s, 9H)	736
24	72	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.63(m, 1H), 7.48~7.29(m, 17H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(m, 1H)	748
25	70	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.68~7.63(m, 2H), 7.51~7.29(m, 13H), 7.15~7.11(m, 4H), 6.76(m, 1H), 1.68(s, 6H)	688
26	71	8.38(d, 1H), 8.20~8.13(d, 4H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.63(m, 1H), 7.51~7.11(m, 17H), 6.76(m, 1H), 0.56(s, 6H)	704
27	69	8.38~8.35(m, 2H), 8.20(d, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.29(m, 13H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(m, 1H)	678

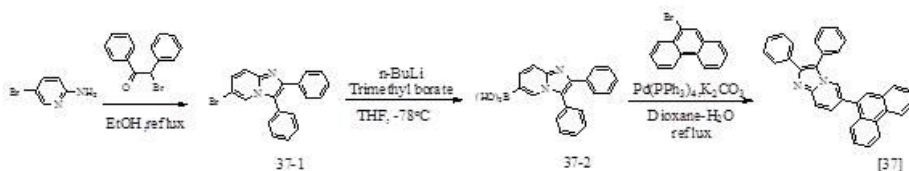
[0516]

28	72	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.63(m, 1H), 7.53~7.29(m, 18H), 7.19~7.11(m, 3H), 6.76(m, 1H)	737
29	70	8.83(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.60(m, 11H), 7.49~7.29(m, 14H), 7.11(m, 1H), 6.76(m, 1H)	622
30	69	8.38(d, 1H), 7.90(d, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.54~7.29(m, 15H), 7.21(m, 2H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.76(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	730
31	72	8.38(d, 1H), 7.81(m, 2H), 7.65~7.60(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.47~7.09(m, 19H), 6.76(m, 1H), 2.24(s, 3H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	694
32	71	8.38(d, 1H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.49~7.29(m, 19H), 7.11(t, 1H), 6.76(m, 1H)	746
33	70	8.38(d, 1H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.66~7.60(m, 4H), 7.51~7.29(m, 15H), 7.14~7.11(m, 2H), 6.76(m, 1H), 1.68(s, 6H)	668
34	71	8.38(d, 1H), 8.15~8.13(d, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.51~7.23(m, 16H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 0.56(s, 6H)	704
35	68	8.38~8.35(m, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.49~7.29(m, 15H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	678
36	72	8.38(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.49~7.29(m, 20H), 7.19~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H)	737

[0517]

[0518]

[반응 예 3] 화합물 [37]의 합성



[0519]

[0520]

중간체 화합물 [37-1]의 제조

[0521]

500mL 반응플라스크에 에탄올 300mL에 5-브로모피리딘-2-아민 10g(57.80mmol)과 2-브로모-1,2-디페닐에탄온 15.9g(57.80mmol)을 녹이고 12시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각하면 흰색 고체가 생성되며 이것을 NaHCO_3 포화 수용액과 메탄올로 세척하였다. 유기층의 잔류 수분을 무수황산마그네슘으로 제거한 후 감압 건조한 다음 디클로로메탄과 노르말헥산으로 재결정하여 노란색 고체의 중간체 화합물[37-1] 15.7g(78%)을 수득하였다.

[0522]

중간체 화합물 [37-2]의 제조

[0523]

합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[37-1], 부틸리튬, 트리메틸보레이트, 테트라히드로푸란을 사용하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [37-2] 7g(60%)을 수득하였다.

[0524]

화합물 [37]의 제조

[0525]

합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [37-2], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [37] 4.2g(71%)을 수득하였다

[0526]

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.83(m, 1H), 8.21(d, 1H), 8.02(m, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.50~7.31(m, 9H), 7.15(m, 1H), 6.76(t, 1H)

[0527]

MS/FAB : 446(M^+)

[0528]

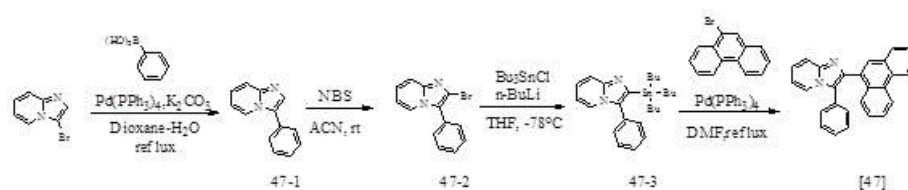
상기 반응예 3의 방법에 따라 37내지 46의 화합물을 제조하였으며, 하기 [표 3]에 그 결과를 나타내었다.

[0529] [표 3]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
37	71	8.83(m, 1H), 8.21(d, 1H), 8.02(m, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.50~7.31(m, 9H), 7.15(m, 1H), 6.76(t, 1H)	446
38	72	8.21(d, 1H), 8.12(s, 2H), 7.90(d, 2H), 7.72~7.61(m, 7H), 7.50~7.31(m, 9H), 7.15(m, 1H)	470
39	70	9.05(d, 1H), 8.83(m, 2H), 8.44(d, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.69(m, 7H), 7.41~7.31(m, 8H), 6.77(m, 1H)	496
40	71	8.21(s, 1H), 7.90(m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.54~7.29(m, 16H), 7.21~7.09(m, 5H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	730
41	72	8.44(d, 1H), 7.81(m, 2H), 7.69(m, 2H), 7.63(s, 1H), 7.54(s, 2H), 7.41~7.21(m, 16H), 7.09(m, 2H), 6.77(d, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.27(s, 9H)	446
42	70	8.83(d, 1H), 8.21(s, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.63(m, 11H), 7.50~7.29(m, 15H), 7.25(d, 11H)	622
43	69	8.44(d, 1H), 7.99~7.97(m, 2H), 7.90~7.81(m, 5H), 7.69~7.63(m, 5H), 7.51~7.29(m, 15H), 7.14(t, 1H), 6.77(d, 1H), 1.68(s, 6H)	688
44	72	8.21(s, 1H), 8.15~8.13(m, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.51~7.15(m, 16H), 0.66(s, 6H)	704
45	70	8.44(d, 1H), 8.35(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 4H), 7.49~7.39(m, 15H), 6.77(d, 1H)	678
46	71	8.21(s, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.53~7.29(m, 21H), 7.19~7.15(m, 2H)	737

[0530]

[0531] [반응 예 4] 화합물 [47]의 합성



[0532]

[0533] 중간체 화합물 [47-1]의 제조

[0534] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 3-브로모이미다조[1,2-a]피리딘, 페닐보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [47-1] 14.3g(78%)을 수득하였다

[0536] 중간체 화합물 [47-2]의 제조

[0537] 1L 반응플라스크에 중간체 화합물 [47-1] 20g(102.97mmol)과 N-브로모숙신이미드 18.3g(102.97mmol)을 아세트 니트릴 용매에 녹여 상온에서 4시간 동안 교반한 후 디클로로메탄 200ml을 가하고 10% 수산화나트륨 수용액으로 씻어 준 다음 티오황산 나트륨 포화 수용액과 물로 세척하였다. 유기층 잔류 수분을 무수황산마그네슘으로 제거한 후 감압 건조한 다음 얻어진 고체를 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 노란색 고체의 중간체 화합물을 [47-2] 22.4g(80%)을 수득하였다.

[0538] 중간체 화합물 [47-3]의 제조

[0539] 합성 예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[47-2], 부틸리튬, 트리부틸틴클로라이드를 사용하여 노란색 오일의 중간체 화합물[47-3] 12.3g(44%)를 수득하였다.

[0540] 화합물[47]의 제조

[0541] 합성 예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[47-3], 9-브로모페난트렌, 테트라키스 (트리페닐포스핀)팔라듐, 다

이메틸폼아마이드를 사용하여 노란색 고체의 목적화합물[47] 4.2g (70%)을 수득하였다.

[0542] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.41~7.31(m, 3H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)

[0543] MS/FAB : 370(M^+)

[0544] 상기 반응예 4의 방법에 따라47내지 71의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제4표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0545] [제4표군(群)]

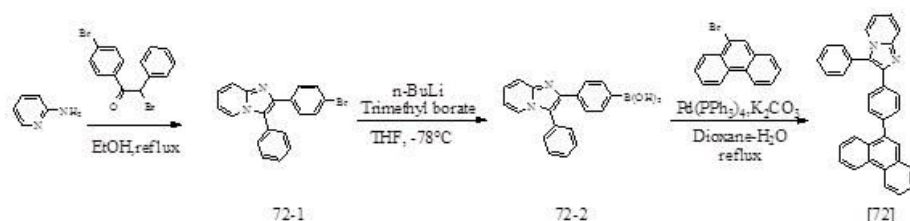
화합물 번호	수율 (%)	^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) (δ)	MS/FAB (M^+)
47	70	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.41~7.31(m, 3H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	370
48	68	9.05(s, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.69(m, 6H), 7.44~7.31(m, 3H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	420
49	71	8.38(d, 1H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.61(m, 8H), 7.41(m, 2H), 7.31(m, 1H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	394
50	69	8.45(m, 1H), 8.38(d, 1H), 8.24(s, 1H), 7.94~7.77(m, 7H), 7.51~7.44(m, 6H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	370
51	70	8.45~8.32(m, 5H), 8.24(s, 1H), 7.98~7.77(m, 6H), 7.51~7.44(m, 8H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	496
52	72	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.24(s, 1H), 8.02(d, 2H), 7.90~7.72(m, 9H), 7.49~7.44(m, 3H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	420
53	70	9.05(s, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.24(s, 1H), 8.08~7.72(m, 12H), 7.49~7.44(m, 3H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	470
54	72	8.38(d, 1H), 8.24(s, 1H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94~7.72(m, 7H), 7.61(d, 4H), 7.49~7.44(m, 3H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	444
55	68	8.83(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.63(m, 11H), 7.49~7.29(m, 10H), 7.21(t, 1H), 6.76(t, 1H)	546
56	70	8.38(d, 1H), 7.90(d, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.56~7.41(m, 8H), 7.31~7.29(m, 3H), 7.21(d, 2H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	654
57	69	8.38(d, 1H), 7.81(d, 2H), 7.69(d, 2H), 7.54(s, 2H), 7.44~7.41(m, 3H), 7.31~7.21(m, 9H), 7.31~7.09(m, 3H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.17(s, 9H)	660
58	71	8.38(d, 1H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.41(m, 6H), 7.31~7.29(m, 9H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	672
59	70	8.38(d, 1H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 4H), 7.41~7.29(m, 11H), 7.14~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H)	612
60	72	8.38(d, 1H), 8.15~8.13(m, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.51~7.41(m, 8H), 7.31~7.23(m, 4H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 0.66(s, 6H)	628

[0546]

61	70	8.38~8.35(m, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.29(m, 11H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	602
62	71	8.38(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.53~7.29(m, 16H), 7.19~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H)	661
63	71	8.83(d, 2H), 8.49(d, 1H), 8.38~8.30(m, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.72(m, 6H), 7.44(d, 1H), 7.26(t, 1H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	371
64	68	8.49~8.30(m, 7H), 7.98~7.91(m, 4H), 7.75(t, 1H), 7.51~7.44(m, 6H), 7.26(t, 1H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	447
65	69	8.83(d, 1H), 8.49(d, 1H), 8.38~8.30(m, 2H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.72(m, 9H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.44(m, 4H), 7.29~7.26(m, 4H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	547
66	72	8.49(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.30(d, 1H), 7.90~7.75(m, 6H), 7.63(d, 1H), 7.54~7.44(m, 6H), 7.29~7.21(m, 5H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	655
67	71	8.49(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.30(d, 1H), 7.90~7.75(m, 12H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.44(m, 4H), 7.29~7.26(m, 9H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	673
68	71	8.49(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.30(d, 1H), 7.99~7.75(m, 8H), 7.66~7.63(m, 2H), 7.51~7.44(m, 5H), 7.34~7.26(m, 4H), 7.14~7.11(m, 2H), 6.76(t, 1H), 1.68(s, 6H)	613
69	70	8.49(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.30(d, 1H), 8.15~8.13(m, 2H), 7.90~7.75(m, 7H), 7.63(d, 1H), 7.51~7.42(m, 6H), 7.29~7.23(m, 4H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 0.56(s, 6H)	629
70	70	8.49(d, 1H), 8.38~8.30(m, 3H), 7.90~7.75(m, 9H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.40(m, 6H), 7.29~7.26(m, 3H), 7.11(t, 1H), 7.76(t, 1H)	603
71	68	8.49(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.30(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.75(m, 8H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.11(m, 16H), 6.76(t, 1H)	662

[0547]

[0548] [반응 예 5] 화합물 [72]의 합성



[0549]

[0550] 중간체 화합물 [72-1]의 제조

[0551] 합성 예 3과 동일한 방법으로 2-아민노피리딘, 2-브로모-1-(4-브로모페닐)-2-페닐에탄온, 에탄올을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [72-1] 20g(81%)을 수득하였다.

[0553] 중간체 화합물 [72-2]의 제조

[0554] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [72-1], 부틸리튬, 트리메틸보레이트, 테트라히드로퓨란을 사용하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [72-2] 10.8g(60%)을 수득하였다.

[0555] 화합물 [72]의 제조

[0556] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [72-2], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [72] 3.8g(74%)을 수득하였다

[0557] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.44~7.31(m, 4H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)

[0558] MS/FAB : 446(M⁺)

[0559] 상기 반응예 5의 방법에 따라 72내지 100의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제5표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0560] [제5표군(群)]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (s)	MS/FAB (M ⁺)
72	74	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.44~7.31(m, 4H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)	446
73	72	9.05(s, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.69(m, 8H), 7.44~7.31(m, 4H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	496
74	70	8.38(d, 1H), 8.20(d, 2H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.61(m, 8H), 7.44~7.31(m, 4H), 7.15~7.11(m, 3H), 6.76(t, 1H)	470
75	71	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.60(m, 9H), 7.47~7.31(m, 6H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	446
76	70	8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.60(m, 7H), 7.47~7.38(m, 3H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 2.15(s, 3H)	384
77	72	9.05(s, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.60(m, 8H), 7.67~7.31(m, 6H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	496
78	69	8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 3H), 7.78~7.60(m, 10H), 7.47~7.31(m, 6H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H)	470
79	72	9.05(s, 1H), 8.83(d, 2H), 8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.60(m, 6H), 7.47~7.38(m, 3H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 3.34(m, 1H), 1.21(d, 6H)	462
80	70	8.38(d, 1H), 8.08~7.94(m, 3H), 7.78~7.60(m, 8H), 7.47~7.38(m, 3H), 7.11(t, 1H), 6.76(t, 1H), 1.25(s, 9H)	450
81	72	8.23(d, 1H), 8.18(d, 1H), 7.90(d, 2H), 7.82(d, 1H), 7.80~7.69(m, 11H), 7.49~7.29(m, 10H), 7.11~7.15(m, 3H), 7.00(m, 1H)	622
82	71	8.18(d, 1H), 8.10(d, 2H), 7.90~7.81(m, 5H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.54~7.41(m, 8H), 7.31~7.29(m, 3H), 7.21~7.09(m, 7H), 7.06(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	730
83	70	8.18(d, 1H), 8.10(d, 2H), 7.81(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.44~7.41(m, 5H), 7.31~7.29(m, 3H), 7.21~7.09(m, 7H), 7.06(m, 1H), 2.77(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.10(d, 6H)	646
84	69	8.18(d, 1H), 8.10(d, 2H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.69~7.636(m, 3H), 7.49~7.41(m, 6H), 7.31~7.29(m, 9H), 7.15~7.11(m, 3H), 7.06(m, 1H)	748

[0561]

85	68	8.18(d, 1H), 8.10(d, 2H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.44(m, 4H), 7.29(m, 8H), 7.15~7.11(m, 3H), 7.06(m, 1H), 2.15(s, 3H)	686
86	71	8.18(d, 1H), 8.10(d, 2H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 4H), 7.51~7.29(m, 11H), 7.15~7.11(m, 4H), 7.06(m, 1H), 1.68(s, 6H)	688
87	72	8.18(d, 1H), 8.20~8.13(m, 4H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.51~7.41(m, 8H), 7.31~7.11(m, 7H), 7.06(m, 1H), 0.56(s, 6H)	704
88	70	8.18~8.15(m, 2H), 8.10(d, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.29(m, 11H), 7.15~7.11(m, 3H), 7.06(m, 1H)	678
89	69	8.18~8.15(m, 2H), 8.10(d, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.40(m, 6H), 7.29~7.11(m, 5H), 7.06(m, 1H), 1.27(s, 9H)	658
90	72	8.18 (d, 1H), 8.10(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.53~7.29(m, 15H), 7.19~7.11(m, 4H), 7.06(m, 1H)	737
91	69	8.33(d, 1H), 8.18 (d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.60(m, 13H), 7.49~7.29(m, 12H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H)	622
92	70	8.33(d, 1H), 8.18 (d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.60(m, 11H), 7.49~7.38(m, 6H), 7.29(m, 3H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H), 1.27(s, 9H)	602
93	68	8.18(d, 1H), 7.90 (m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.69~7.60(m, 5H), 7.54~7.29(m, 13H), 7.21~7.09(m, 5H), 7.06(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	730
94	69	8.18(d, 1H), 7.90(m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.54~7.38(m, 8H), 7.29~7.21(m, 4H), 7.11~7.09(m, 3H), 7.06(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.27(s, 9H)	710
95	68	8.18(d, 1H), 7.90~7.81(m, 11H), 7.69~7.60(m, 5H), 7.49~7.29(m, 17H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H)	748
96	70	8.18(d, 1H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.66~7.60(m, 4H), 7.51~7.29(m, 10H), 7.14~7.06(m, 3H), 2.15(s, 3H), 1.68(s, 6H)	626
97	72	8.18(d, 1H), 8.15~8.13(m, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.69~7.60(m, 5H), 7.51~7.23(m, 14H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H), 0.56(s, 6H)	704

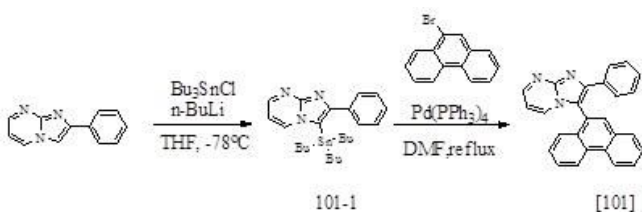
[0562]

98	70	8.18(d, 1H), 8.15~8.13(m, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.65~7.60(m, 3H), 7.51~7.38(m, 8H), 7.29~7.23(m, 3H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H), 2.15(s, 3H), 0.56(s, 6H)	642
99	71	8.18~8.15(m, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.69~7.60(m, 5H), 7.49~7.29(m, 13H), 7.11(t, 1H), 7.06(m, 1H)	678
100	73	8.18(m, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.29(m, 23H), 7.19~7.11(m, 2H), 7.06(m, 1H)	737

[0563]

[0564]

[반응 예 6] 화합물 [101]의 합성



[0565]

[0566]

중간체 화합물 [101-1]의 제조

[0567]

합성 예 1과 동일한 방법으로 2-페닐이미다조[1,2-a]피리미딘, 부틸리튬, 트리부틸 틸클로라이드를 사용하여 노란색 오일의 중간체 화합물[101-1] 6.2g(40%)를 수득하였다.

[0568]

화합물 [101]의 제조

[0569]

반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[101-1], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 다이메틸폼아마이드를 노란색 고체의 목적화합물 [101] 3.7g(68%)을 합성하였다.

[0570] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.84(m, 5H), 7.53~7.49(m, 5H), 7.30(t, 1H)

[0571] MS/FAB : 371(M^+)

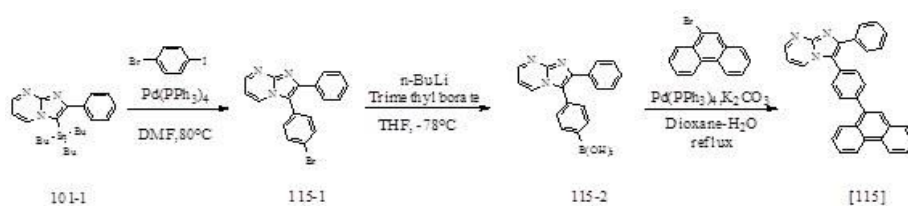
[0572] 상기 반응예 6의 방법에 따라 101내지 114의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제6표]에 그 결과를 나타내었다.

[0573] [제6표]

101	68	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.84(m, 5H), 7.53~7.49(m, 5H), 7.30(t, 1H)	371
102	69	8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.14(m, 2H), 8.06(d, 1H), 7.90~7.84(m, 2H), 7.73(s, 4H), 7.53~7.49(m, 5H), 7.30(t, 1H)	395
103	68	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14~8.06(m, 4H), 7.90~7.84(m, 4H), 7.53~7.43(m, 5H), 7.30(t, 1H)	421
104	70	8.95(d, 1H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(s, 1H), 8.02~7.84(m, 8H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.41(m, 11H), 7.30(t, 1H)	547
105	72	8.85~8.80(m, 2H), 7.93(m, 2H), 7.66(s, 2H), 7.54~7.41(m, 12H), 7.33~7.30(m, 3H), 7.21(m, 2H), 1.80(s, 12H)	605
106	69	8.85~8.80(m, 2H), 7.93(m, 2H), 7.66(s, 2H), 7.53~7.30(m, 14H), 7.21(m, 2H), 2.36(s, 3H), 1.80(s, 12H)	619
107	68	8.85~8.80(m, 2H), 8.02(m, 2H), 7.94~7.93(t, 3H), 7.75(d, 1H), 7.66~7.41(m, 12H), 7.33~7.30(m, 3H), 7.21(m, 2H), 1.80(m, 12H)	655
108	70	8.85~8.80(m, 2H), 8.02~7.93(m, 11H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.41(m, 16H), 7.30(t, 1H)	673
109	68	8.85~8.80(m, 2H), 8.11~7.93(m, 7H), 7.78~7.75(t, 2H), 7.63~7.41(m, 12H), 7.26(m, 2H), 1.80(s, 6H)	613
110	70	8.85~8.80(m, 2H), 8.02~7.93(m, 8H), 7.68~7.30(m, 15H)	587
111	69	8.85~8.80(m, 2H), 8.27~8.25(d, 2H), 8.02~7.91(m, 6H), 7.75(d, 1H), 7.63~7.30(m, 14H), 0.68(s, 6H)	629
112	71	8.85~8.80(m, 2H), 8.47(m, 1H), 8.02~7.93(m, 8H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.41(m, 12H), 7.30(t, 1H)	603
113	72	8.85~8.80(m, 2H), 8.47(m, 1H), 8.02~7.93(m, 8H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.41(m, 12H), 7.30(t, 1H)	603
114	72	8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 1H), 8.02~7.93(m, 7H), 7.75(d, 1H), 7.65~7.41(m, 17H), 7.31~7.30(t, 2H)	662

[0574]

[0575] [반응 예 7] 화합물 [115]의 합성



[0576]

[0577] 중간체 화합물 [115-1]의 제조

[0578] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[101-1], 1-브로모-4-아이오도벤젠, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 다이메틸폼아마이드를 사용하여 80℃에서 반응 후 컬럼크로마토그래프로 분리 정제하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [115-1] 8.3g(52%)을 합성하였다.

[0579] 중간체 화합물 [115-2]의 제조

[0580] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[115-1], 부틸리튬, 트리메틸보레이트, 테트라히드로퓨란을 사용하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [115-2] 9.8g(58%)을 수득하였다.

- [0581] 화합물 [115]의 제조
- [0582] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [15-2], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [115] 3.6g(72%)을 수득하였다
- [0583] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.84(m, 5H), 7.53~7.43(m, 5H), 7.30~7.27(m, 3H)
- [0584] MS/FAB : 447(M^+)
- [0585] 상기 반응예 7의 방법에 따라 115내지 136의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제7표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.
- [0586] [제7표군(群)]

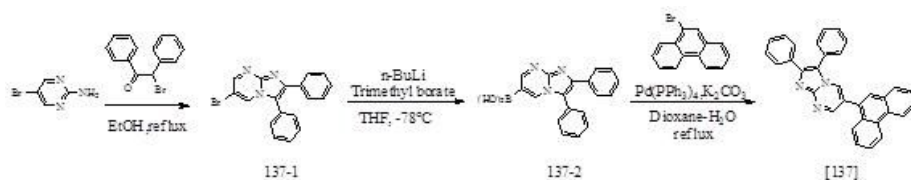
화합물 번호	수율 (%)	^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) (δ)	MS/FAB (M^+)
115	72	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.84(m, 5H), 7.53~7.43(m, 5H), 7.30~7.27(m, 3H)	447
116	70	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.77(m, 7H), 7.59~7.43(m, 7H), 7.30(t, 1H)	447
117	71	8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.14(m, 2H), 8.06(d, 1H), 7.90~7.72(m, 6H), 7.57~7.43(m, 7H), 7.30(t, 1H)	471
118	68	8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.20~8.14(m, 2H), 8.06(d, 1H), 7.90~7.84(m, 2H), 7.73(s, 4H), 7.53~7.43(m, 5H), 7.30~7.27(m, 3H)	542
119	69	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.04(m, 4H), 7.90~7.72(m, 6H), 7.59~7.43(m, 7H), 7.30(t, 1H)	497
120	70	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.20~8.06(m, 4H), 7.90~7.84(m, 6H), 7.53~7.43(m, 5H), 7.30(t, 1H)	497
121	72	8.92(d, 1H), 8.82~8.77(m, 2H), 8.29(d, 2H), 8.11(d, 1H), 7.99~7.87(m, 8H), 7.72(d, 1H), 7.58~7.38(m, 11H), 7.27~7.24(m, 3H)	623
122	70	8.82~8.77(m, 2H), 8.29(d, 2H), 7.99~7.90(m, 5H), 7.72(d, 1H), 7.63~7.38(m, 12H), 7.30~7.18(m, 7H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	731
123	71	8.82~8.77(m, 2H), 8.30(d, 2H), 7.91~7.90(m, 2H), 7.50~7.18(m, 18H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.27(s, 9H)	737
124	72	8.82~8.77(m, 2H), 8.30(d, 2H), 7.99~7.90(m, 11H), 7.72(d, 1H), 7.58~7.38(m, 16H), 7.27~7.24(m, 3H)	749
125	70	8.82~8.77(m, 2H), 8.30(d, 2H), 8.08~7.90(m, 7H), 7.75~7.72(m, 2H), 7.60~7.38(m, 12H), 7.27~7.23(m, 4H), 1.68(s, 6H)	689
126	68	8.82~8.77(m, 2H), 8.29~8.22(m, 4H), 7.99~7.88(m, 6H), 7.72(d, 1H), 7.60~7.24(m, 16H), 0.65(s, 6H)	705
127	68	8.82~8.77(m, 2H), 8.44(d, 2H), 8.30(d, 2H), 7.99~7.90(m, 8H), 7.72(d, 1H), 7.58~7.38(m, 12H), 7.27~7.24(m, 3H)	679
128	70	8.82~8.77(m, 2H), 8.29(d, 2H), 8.11(d, 2H), 7.99~7.90(m, 7H), 7.72(d, 1H), 7.62~7.38(m, 17H), 7.28~7.24(m, 4H)	738
129	69	8.92(d, 1H), 8.82~8.77(m, 2H), 8.11(d, 1H), 7.99~7.69(m, 11H), 7.58~7.38(m, 13H), 7.27 (t, 1H)	623

[0587]

130	70	8.82~8.77(m,2H), 8.00~7.99(m,2H), 7.91~7.90(m,3H), 7.74~7.69(m, 3H), 7.63~7.38(m,14H), 7.30~7.27(m,3H), 7.19~7.18(m,2H), 1.68(s,6H), 1.65(s,6H)	731
131	67	8.82~8.77(m,2H), 7.91~7.90(m,2H), 7.74~7.69(m,2H), 7.63(s,2H), 7.56~7.27(m,16H), 7.19~7.18(m,2H), 2.33(s,3H), 1.68(s,6H), 1.65(s,6H)	695
132	70	8.82~8.77(m,2H), 7.99~7.90(m,11H), 7.74~7.49(m,3H), 7.57~7.38(m,15H), 7.27(t,1H)	749
133	72	8.82~8.77(m,2H), 8.08~7.90(m,7H), 7.75~7.69(m,4H), 7.60~7.38(m,14H), 7.27~7.23(m,2H), 1.68(s,6H)	689
134	73	8.82~8.77(m,2H), 8.24(s,1H), 8.22(s,1H), 7.99~7.88(m, 6H), 7.74~7.69(m,3H), 7.60~7.27(m,16H), 0.66(s,6H)	623
135	70	8.82~8.77(m,2H), 8.44(d,1H), 7.99~7.90(m,8H), 7.74~7.69(m,3H), 7.58~7.38(m,14H), 7.27(t,1H)	679
	71	8.82~8.77(m,2H), 8.11(d,1H), 7.99~7.90(m,7H), 7.74~7.69(m,3H), 7.62~7.38(m,19H), 7.28(t,2H)	738

[0588]

[0589] [반응 예 8] 화합물 [137]의 합성



[0590]

[0591] 중간체 화합물 [137-1]의 제조

[0592] 합성 예 3과 동일한 방법으로 5-브로모페리미딘-2-아민, 2-브로모-1-(4-브로모페닐)-2-페닐에탄온, 에탄올을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [137-1] 18.4g(79%)을 수득하였다.

[0593]

[0594] 중간체 화합물 [137-2]의 제조

[0595] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[137-1], 부틸리튬, 트리메틸보레이트, 테트라히드로퓨란을 사용하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [137-2] 7.8g(56%)을 수득하였다.

[0596] 화합물 [137]의 제조

[0597] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [137-2], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [115] 3.2g(70%)을 수득하였다.

[0598] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.99~8.92(m, 4H), 8.12(d, 2H), 7.92~7.78(m, 7H), 7.50~7.40(m, 8H)

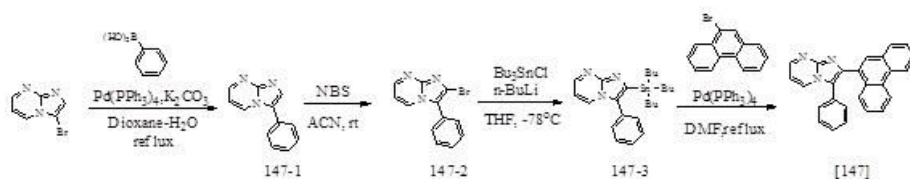
[0599] MS/FAB : 447 (M^+)

[0600] 상기 반응예 8의 방법에 따라 137내지 146의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제8표]에 그 결과를 나타내었다.

[제8표]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
137	70	8.99~8.92(m, 4H), 8.12(d, 2H), 7.92~7.78(m, 7H), 7.50~7.40(m, 8H)	447
138	68	8.99(s, 2H), 8.21(s, 2H), 7.99(d, 2H), 7.81~7.70(m, 7H), 7.50~7.40(m, 8H)	471
139	71	9.14(s, 1H), 8.92(d, 2H), 8.49(d, 1H), 8.17~8.03(m, 5H), 7.78~7.81(m, 6H), 7.50~7.40(m, 8H)	497
140	70	8.99(s, 2H), 8.00~7.99(m, 2H), 7.91~7.90(m, 3H), 7.78~7.72(m, 3H), 7.63~7.38(m, 15H), 7.31~7.30(m, 2H), 7.19~7.18(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	731
141	69	8.10(d, 1H), 7.91(d, 1H), 7.81(m, 2H), 7.69(d, 2H), 7.54(s, 2H), 7.41~7.21(m, 16H), 7.09(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.27(s, 9H)	737
142	70	8.50(s, 2H), 8.43(d, 1H), 8.12(d, 1H), 7.99~7.69(m, 11H), 7.49~7.29(m, 14H)	623
143	68	8.50(d, 1H), 8.11~7.91(m, 6H), 7.69~7.63(m, 4H), 7.49~7.29(m, 15H), 7.14(t, 1H), 1.78(s, 6H)	689
144	71	8.50(s, 2H), 8.15~8.13(d, 2H), 7.99~7.79(m, 6H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.51~7.23(m, 16H), 0.56(s, 6H)	705
145	69	8.40~8.35(m, 2H), 8.01(d, 1H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.48~7.29(m, 15H)	679
146	70	8.50(s, 2H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.29(m, 20H) 7.19(t, 1H)	738

[반응 예 9] 화합물 [147]의 합성



중간체 화합물 [147-1]의 제조

합성 예 2와 동일한 합성방법으로 3-브로모이미다조[1,2-a]피리미딘, 페닐보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [147-1] 12.3g(76%)을 수득하였다

중간체 화합물 [147-2]의 제조

합성 예 4와 동일한 합성방법으로 [147-1]과 N-브로모모숙신이미드, 아세트니트릴을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물을 [147-2] 15.7g(81%)을 수득하였다.

중간체 화합물 [147-3]의 제조

합성 예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[147-2], 부틸리튬, 트리부틸틴클로라이드를 사용하여 노란색 오일의 중간체 화합물[147-3] 10.3g(42%)를 수득하였다.

화합물[147]의 제조

합성 예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[147-3], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 다이메틸폼아마이드를 사용하여 노란색 고체의 목적화합물[147] 3.2g (72%)을 수득하였다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.53(d, 2H), 8.43~8.38(m, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.41~7.31(m, 3H), 7.18(t, 1H)

[0615] MS/FAB : 371(M⁺)

[0616] 상기 반응예 9의 방법에 따라 147내지 171의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제9표 군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0617] [제9표 군(群)]

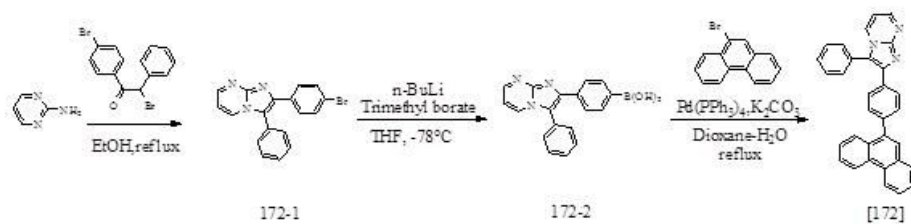
화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
147	72	8.53(d, 2H), 8.43~8.38(m, 2H), 8.02(d, 2H), 7.83~7.69(m, 7H), 7.41~7.31(m, 3H), 7.18(t, 1H)	371
148	70	8.65(s, 1H), 8.43(d, 2H), 8.33~8.28(m, 2H), 8.08~7.94(m, 4H), 7.78~7.69(m, 6H), 7.41~7.31(m, 3H), 7.18(t, 1H)	421
149	72	8.63~8.58(m, 2H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.61(m, 8H), 7.41(t, 2H), 7.31(m, 1H), 7.18(t, 1H)	395
150	71	8.53~8.48(m, 2H), 8.35(m, 1H), 8.14(d, 1H), 7.98~7.77(m, 7H), 7.51~7.49(m, 5H), 7.18(t, 1H)	371
151	69	8.53~8.48(m, 2H), 8.35(m, 3H), 8.32(d, 1H), 8.24(d, 1H), 7.98~7.77(m, 8H), 7.51~7.45(m, 7H), 7.18(t, 1H)	497
152	70	8.63(d, 2H), 8.53~8.48(m, 2H), 8.24(s, 1H), 8.12(d, 2H), 7.90~7.72(m, 9H), 7.49(m, 2H), 7.18(t, 1H)	421
153	68	8.85(s, 1H), 8.63(d, 2H), 8.53~8.48(m, 2H), 8.24(s, 1H), 8.02~7.78(m, 12H), 7.49(m, 2H), 7.18(t, 1H)	471
154	69	8.53~8.48(m, 2H), 8.14(s, 1H), 8.08~8.02(m, 2H), 7.94~7.72(m, 7H), 7.61(m, 4H), 7.49(m, 2H), 7.18(t, 1H)	445
155	72	8.63(d, 1H), 8.53~8.48(m, 2H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.72(m, 11H), 7.49~7.29(m, 9H), 7.18(t, 1H)	547
156	70	8.53~8.48(m, 2H), 7.90(m, 2H), 7.82~7.81(m, 3H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.41(m, 7H), 7.31~7.29(m, 3H), 7.21~7.18(m, 3H), 7.09(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	655
157	71	8.53~8.48(m, 2H), 7.81(m, 2H), 7.69(m, 2H), 7.54(s, 2H), 7.41(t, 2H), 7.31~7.18(m, 10H), 7.09(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.28(s, 9H)	661
158	68	8.53~8.48(m, 2H), 7.90~7.82(m, 11H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.49~7.41(m, 5H), 7.31~7.29(m, 9H), 7.18(t, 1H)	673
159	70	8.53~8.48(m, 2H), 7.99~7.81(m, 7H), 7.69~7.63(m, 4H), 7.51~7.29(m, 10H), 7.18~7.14(m, 2H), 1.68(s, 6H)	613
160	71	8.53~8.48(m, 2H), 8.15~8.13(d, 2H), 7.90~7.79(m, 6H), 7.69~7.63(m, 3H), 7.51~7.41(m, 7H), 7.31~7.23(m, 5H), 0.55(s, 6H)	629
161	69	8.84~8.76(m, 2H), 8.44(d, 1H), 8.04~7.91(m, 8H), 7.80~7.72(m, 3H), 7.61~7.37(m, 10H), 7.28(d, 1H)	603

[0618]

162	70	8.84~8.79(m, 2H), 8.12(d, 1H), 8.02~7.92(m, 7H), 7.80~7.74(m, 3H), 7.65~7.40(m, 15H), 7.30~7.28(m, 2H)	662
163	68	8.95(d, 2H), 8.85~8.79(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.42(d, 1H), 8.14(d, 2H), 7.83~7.79(m, 6H), 7.38~7.29(m, 2H)	372
164	72	8.84~8.80(m, 2H), 8.61~8.57(m, 4H), 8.44~8.42(m, 2H), 8.09~8.02(m, 4H), 7.85(d, 1H), 7.63~7.57(m, 5H), 7.38~7.29(m, 2H)	448
165	70	8.95(d, 1H), 8.85~8.79(m, 2H), 8.60(d, 1H), 8.42(d, 1H), 8.14(d, 1H), 8.02~7.75(m, 10H), 7.61~7.59(m, 3H), 7.41~7.29(m, 5H)	548
166	68	8.85~8.79(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.42(d, 1H), 8.02(d, 2H), 7.94~7.87(m, 4H), 7.75(d, 1H), 7.66~7.59(m, 5H), 7.41~7.30(m, 6H), 7.21(d, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	656
167	70	8.85~8.80(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.42(d, 1H), 8.02~7.87(m, 12H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.58(m, 3H), 7.41~7.30(m, 10H)	674
168	69	8.85~8.80(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.40(d, 1H), 8.12~7.87(m, 8H), 7.78~7.75(d, 2H), 7.63~7.30(m, 4H), 7.46~7.26(m, 6H), 1.68(s, 6H)	614
169	72	8.85~8.80(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.41(d, 1H), 8.27~8.25(m, 2H), 8.02~7.87(m, 7H), 7.75(d, 1H), 7.63~7.54(m, 5H), 7.41~7.29(m, 5H), 0.56(s, 6H)	630
170	70	8.85~8.80(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.47~8.42(m, 2H), 8.02~7.87(m, 9H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.51(m, 5H), 7.41~7.30(m, 4H)	604
171	71	8.85~8.80(m, 2H), 8.61(d, 1H), 8.42(d, 1H), 8.14(d, 1H), 8.02~7.87(m, 8H), 7.75(d, 1H), 7.61~7.29(m, 15H)	663

[0619]

[0620] [반응 예 10] 화합물 [172]의 합성



[0621]

[0622] 중간체 화합물 [172-1]의 제조

[0623] 합성 예 3과 동일한 방법으로 2-아민노피리미딘, 2-브로모-1-(4-브로모페닐)-2-페닐에탄온, 에탄올을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [172-1] 23.4g(80%)을 수득하였다.

[0625] 중간체 화합물 [172-2]의 제조

[0626] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[172-1], 부틸리튬, 트리메틸보레이트, 테트라히드로퓨란을 사용하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [172-2] 7.8g(62%)을 수득하였다.

[0627] 화합물 [172]의 제조

[0628] 합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [172-2], 9-브로모페난트렌, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [172] 3.2g(71%)을 수득하였다

[0629] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.14(d, 2H), 7.91~7.81(m, 7H), 7.53~7.43(m, 3H), 7.31~7.26(m, 3H)

[0630] MS/FAB : 451(M^+)

[0631] 상기 반응예 10의 방법에 따라 172내지 200의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제10표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0632] [제10표군(群)]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
172	71	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.14(d, 2H), 7.91~7.81(m, 7H), 7.53~7.43(m, 3H), 7.31~7.26(m, 3H)	451
173	71	9.17(s, 1H), 8.93(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.20~8.05(m, 4H), 7.89~7.81(m, 8H), 7.53~7.43(m, 3H), 7.30(d, 1H)	497
174	70	8.85~8.80(m, 2H), 8.32(d, 2H), 8.20~8.06(m, 3H), 7.90~7.72(m, 8H), 7.53~7.43(m, 3H), 7.30~7.26(m, 3H)	471
175	72	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 2H), 7.95~7.72(m, 9H), 7.59~7.42(m 5H), 7.30(d, 1H)	447
176	68	8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.14(d, 2H), 7.90~7.72(m, 7H), 7.59(t, 1H), 7.50(d, 1H), 7.30(d, 1H), 2.15(s, 3H)	385
177	70	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.06(m, 4H), 7.90~7.72(m, 8H), 7.59~7.43(m, 5H), 7.30(d, 1H)	454
178	69	8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.14(m, 2H), 8.06(d, 1H) 7.81~7.72(m, 10H), 7.59~7.43(m, 5H), 7.30(d, 1H)	471
179	72	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.14(m, 3H), 8.06(d, 1H), 8.90~7.72(m, 6H), 7.59(d, 1H), 7.50(d, 1H), 7.30(d, 1H), 3.46(m, 1H), 1.21(d, 6H)	463
180	70	δ 8.85~8.80(m, 2H), 8.20~8.14(m, 2H), 8.06(d, 1H), 7.90~7.72(m, 8H), 7.59(d, 1H), 7.50(d, 1H), 7.30(d, 1H), 1.25(s, 9H)	451
181	68	8.93(d, 1H), 8.75~8.84(m, 2H), 8.29~8.32(m, 2H), 7.71~8.15(m, 12H), 7.34~7.59(m, 9H), 7.22~7.29(m, 3H)	623
182	68	8.75~8.82(m, 2H), 8.29~8.31(m, 2H), 7.90~8.04(m, 5H), 7.72~7.81(m, 3H), 7.37~7.66(m, 10H), 7.15~7.33(m, 7H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	731
183	70	8.76~8.81(m, 2H), 8.27~8.30(m, 2H), 7.90~7.92(m, 2H), 7.50~7.64(m, 6H), 7.17~7.43(m, 10H), 3.42~3.43(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) 1.30(d, 6H)	647
184	69	8.78~8.85(m, 2H), 8.29~8.31(m, 2H), 7.75~8.02(m, 14H), 7.50~7.59(m, 5H), 7.34~7.43(m, 9H), 7.25~7.30(m, 3H)	749
185	72	8.78~8.83(m, 2H), 8.29~8.30(m, 2H), 7.91~8.03(m, 11H), 7.73(d, 1H), 7.54~7.59(m, 3H), 7.22~7.39(m, 11H), 2.24(s, 3H)	687

[0633]

186	68	8.77~8.85(m, 2H), 8.27~8.31(m, 2H), 7.90~8.09(m, 7H), 7.72~7.79(m, 4H), 7.38~7.59(m, 10H), 7.24~7.28(m, 4H), 1.76(s, 6H)	689
187	67	8.78~8.85(m, 2H), 8.22~8.32(m, 4H), 7.73~8.00(m, 9H), 7.50~7.61(m, 7H), 7.22~7.41(m, 7H), 0.64(s, 6H)	705
188	69	8.78~8.84(m, 2H), 8.30~8.45(m, 3H), 7.73~8.01(m, 11H), 7.25~7.59(m, 13H)	679
189	70	8.77~8.84(m, 2H), 8.29~8.30(m, 2H), 7.89~8.00(m, 6H), 7.58~7.73(m, 5H), 7.25~7.39(m, 7H), 1.34(s, 9H)	643
190	72	8.78~8.83(m, 2H), 8.12~8.30(m, 3H), 7.71~8.02(m, 10H), 7.39~7.63(m, 15H), 7.23~7.30(m, 4H)	738
191	70	8.78~8.93(m, 3H), 7.70~8.12(m, 14H), 7.28~7.59(m, 12H)	623
192	69	8.77~8.95(m, 3H), 7.73~8.13(m, 12H), 7.48~7.59(m, 5H), 7.28~7.39(m, 4H), 1.34(s, 9H)	603
193	68	8.78~8.83(m, 2H), 7.91~8.01(m, 5H), 7.70~7.79(m, 5H), 7.36~7.67(m, 12H), 7.19~7.31(m, 5H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H)	731
194	72	8.78~8.85(m, 2H), 7.90~8.04(m, 5H), 7.57~7.75(m, 9H), 7.37~7.48(m, 3H), 7.16~7.32(m, 5H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H), 1.34(s, 9H)	711
195	70	8.77~8.83(m, 2H), 7.91~8.00(m, 11H), 7.68~7.82(m, 5H), 7.28~7.59(m, 17H)	749
196	70	8.78~8.83(m, 2H), 7.90~8.09(m, 7H), 7.70~7.76(m, 4H), 7.57~7.64(m, 5H), 7.35~7.48(m, 4H), 7.23~7.28(m, 2H), 2.24(s, 3H), 1.76(s, 6H)	627
197	71	8.78~8.83(m, 2H), 7.76~8.00(m, 8H), 7.24~7.79(m, 19H)	663
198	68	8.78~8.85(m, 2H), 8.22~8.26(m, 2H), 7.86~8.01(m, 6H), 7.70~7.77(m, 3H), 7.45~7.62(m, 7H), 7.28~7.39(m, 4H), 2.24(s, 3H), 0.64(s, 6H)	643
199	69	8.45~8.83(m, 3H), 7.91~8.03(m, 8H), 7.68~7.82(m, 5H), 7.26~7.61(m, 13H)	679
200	68	8.75~8.83(m, 2H), 7.91~8.14(m, 6H), 7.95~7.80(m, 22H), 7.21~7.29(m, 2H)	738

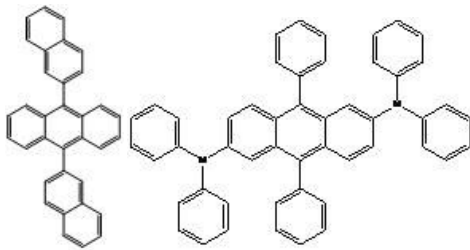
[0634]

[0635] 비교예 1

[0636] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 형광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 형광 녹색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4''-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물 a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm).

[0637] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 화합물 a 및 화학식 b로 표시되는 화합물 b(3% 도핑)를 진공 증착하여 30nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 화학식 c로 표시되는 화합물 c (Alq3) 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 60nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 12에 표시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0638] <화학식 a> <화학식 b>



[0639]

[0640] <화학식 c>

[0642] 실시예 1~200

[0643] 상기 비교예 1 중, 전자수송층 화합물로서 화합물 c(Alq3) 대신 상기 합성예에 개시된 화학식 1~200으로 표시되는 화합물 1~200을 전자수송층 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물a+화합물b(30nm)/전자수송층화합물 1 ~ 200 중 하나/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1 내지 200이라고 한다.

[0644] 평가예 2: 비교샘플 1 및 샘플 1~200의 발광 특성 평가

[0645] 비교샘플 1 및 샘플 1~200에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 [제11표군(群)]에 나타내었다. 상기 샘플들은 516~524nm 범위에서 녹색 발광피크 값을 보여주었다.

[0646] [제11표군(群)]

샘플 No.	전자수송층 화합물 No.	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교샘플 1	d	2032	20.3	516
1	1	2811	28.1	524
2	2	2755	27.6	521
3	3	2774	27.7	521
4	4	2558	25.6	519
5	5	2715	27.2	516
6	6	2711	27.1	522
7	7	2533	25.3	519
8	8	2744	27.4	521
9	9	2877	28.8	516
10	10	2690	26.9	517
11	11	2755	27.6	522
12	12	2638	26.4	524
13	13	2552	25.5	522
14	14	2526	25.3	518
15	15	2727	27.3	521
16	16	2793	27.9	519
17	17	2615	26.2	524
18	18	2882	28.8	517
19	19	2685	26.9	516
20	20	2606	26.1	518
21	21	2895	29.0	516
22	22	2814	28.1	523
23	23	2811	28.1	523
24	24	2502	25.0	520
25	25	2719	27.2	524
26	26	2548	25.5	524

[0647]

27	27	2515	25.2	524
28	28	2792	27.9	522
29	29	2634	26.3	521
30	30	2562	25.6	516
31	31	2732	27.3	520
32	32	2559	25.6	516
33	33	2881	28.8	518
34	34	2660	26.6	519
35	35	2802	28.0	521
36	36	2506	25.1	518
37	37	2709	27.1	521
38	38	2807	28.1	522
39	39	2622	26.2	521
40	40	2505	25.1	518
41	41	2525	25.3	519
42	42	2537	25.4	519
43	43	2783	27.8	523
44	44	2538	25.4	517
45	45	2868	28.7	518
46	46	2896	29.0	519
47	47	2666	26.7	521
48	48	2713	27.1	518
49	49	2820	28.2	524
50	50	2571	25.7	524
51	51	2659	26.6	520
52	52	2802	28.0	523
53	53	2834	28.3	522

[0648]

54	54	2770	27.7	520
55	55	2878	28.8	524
56	56	2868	28.7	524
57	57	2806	28.1	519
58	58	2801	28.0	522
59	59	2520	25.2	517
60	60	2650	26.5	520
61	61	2698	27.0	519
62	62	2514	25.1	516
63	63	2565	25.7	517
64	64	2768	27.7	519
65	65	2831	28.3	516
66	66	2765	27.7	524
67	67	2516	25.2	518
68	68	2674	26.7	524
69	69	2624	26.2	524
70	70	2728	27.3	516
71	71	2529	25.3	524
72	72	2757	27.6	523
73	73	2560	25.6	521
74	74	2722	27.2	521
75	75	2880	28.8	521
76	76	2885	28.9	523
77	77	2509	25.1	519
78	78	2646	26.5	516
79	79	2890	28.9	520
80	80	2803	28.0	524

[0649]

81	81	2671	26.7	517
82	82	2753	27.5	523
83	83	2807	28.1	524
84	84	2898	29.0	519
85	85	2761	27.6	520
86	86	2668	26.7	518
87	87	2631	26.3	520
88	88	2683	26.8	521
89	89	2542	25.4	524
90	90	2508	25.1	516
91	91	2634	26.3	522
92	92	2674	26.7	516
93	93	2674	26.7	516
94	94	2713	27.1	524
95	95	2796	28.0	522
96	96	2649	26.5	516
97	97	2870	28.7	523
98	98	2543	25.4	519
99	99	2806	28.1	517
100	100	2636	26.4	518
101	101	2690	26.9	523
102	102	2725	27.3	518
103	103	2835	28.4	520
104	104	2575	25.8	519
105	105	2593	25.9	516
106	106	2787	27.9	520
107	107	2766	27.7	517

[0650]

108	108	2793	27.9	518
109	109	2520	25.2	522
110	110	2812	28.1	519
111	111	2584	25.8	521
112	112	2694	26.9	523
113	113	2837	28.4	523
114	114	2814	28.1	523
115	115	2854	28.5	523
116	116	2648	26.5	522
117	117	2524	25.2	521
118	118	2865	28.7	524
119	119	2885	28.9	517
120	120	2810	28.1	516
121	121	2868	28.7	517
122	122	2668	26.7	517
123	123	2646	26.5	520
124	124	2647	26.5	517
125	125	2537	25.4	521
126	126	2542	25.4	516
127	127	2586	25.9	524
128	128	2641	26.4	524
129	129	2781	27.8	521
130	130	2725	27.3	519
131	131	2821	28.2	518
132	132	2790	27.9	522
133	133	2604	26.0	517
134	134	2875	28.8	518

[0651]

135	135	2897	29.0	523
136	136	2888	28.9	523
137	137	2861	28.6	523
138	138	2757	27.6	519
139	139	2884	28.8	520
140	140	2836	28.4	524
141	141	2810	28.1	521
142	142	2747	27.5	522
143	143	2562	25.6	519
144	144	2593	25.9	522
145	145	2641	26.4	523
146	146	2649	26.5	521
147	147	2728	27.3	519
148	148	2579	25.8	517
149	149	2793	27.9	523
150	150	2826	28.3	523
151	151	2755	27.6	518
152	152	2552	25.5	518
153	153	2705	27.1	523
154	154	2709	27.1	520
155	155	2734	27.3	519
156	156	2625	26.3	518
157	157	2605	26.1	521
158	158	2656	26.6	520
159	159	2568	25.7	521
160	160	2800	28.0	517
161	161	2538	25.4	524
162	162	2609	26.1	522
163	163	2824	28.2	523
164	164	2628	26.3	521
165	165	2670	26.7	516
166	166	2551	25.5	518
167	167	2783	27.8	518

[0652]

168	168	2714	27.1	519
169	169	2822	28.2	523
170	170	2511	25.1	516
171	171	2648	26.5	520
172	172	2748	27.5	521
173	173	2833	28.3	522
174	174	2884	28.8	524
175	175	2585	25.9	524
176	176	2763	27.6	520
177	177	2572	25.7	517
178	178	2585	25.9	523
179	179	2700	27.0	522
180	180	2618	26.2	524
181	181	2674	26.7	516
182	182	2899	29.0	518
183	183	2705	27.1	517
184	184	2895	27.0	523
185	185	2808	28.1	524
186	186	2516	25.2	516
187	187	2701	27.0	522
188	188	2754	27.5	516
189	189	2745	27.5	524
190	190	2690	26.9	521
191	191	2667	26.7	523
192	192	2633	26.3	519
193	193	2584	25.8	523
194	194	2767	27.7	522
195	195	2878	28.8	517
196	196	2523	25.2	517
197	197	2798	28.0	520
198	198	2857	26.6	516
199	199	2734	27.3	519
200	200	2801	28.0	518

[0653]

[0654]

상기 [제11표군(群)]에 보여지는 바와 같이 샘플 1 내지 200은 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0655]

이상의 설명에서 통상의 공지된 기술을 생략되어 있으나, 당업자라면 용이하게 이를 추측 및 추론하고 재현할 수 있다.

专利名称(译)	标题：吡啶并咪唑衍生物和使用其的有机光子器件		
公开(公告)号	KR1020130007510A	公开(公告)日	2013-01-18
申请号	KR1020120135971	申请日	2012-11-28
申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
当前申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
[标]发明人	KIM BOK YOUNG 김복영 AHN JUNG BOK 안중복 CHIN SUNG MIN 진성민 LEE JEA SUNG 이재성 AHN DO HWAN 안도환 KANG JI SOUNG 강지승 PARK NO GIL 박노길 HAN KEUN HEE 한근희		
发明人	김복영 안중복 진성민 이재성 안도환 강지승 박노길 한근희		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 H01L31/04 H01L51/54		
CPC分类号	Y02E10/50 H01L51/0072		
代理人(译)	李明博泽		
优先权	1020100138769 2010-12-30 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

更具体地，本发明涉及能够实现优异的发光效率，发光亮度，色纯度的有机发光器件，（EML），空穴传输层（HTM）等已经通过使用吡啶并咪唑衍生物开发吡啶并咪唑衍生物和有机光子器件而开发，可以开发可以以各种方式使用的材料，例如第一电极和第二电极之间的各种有机膜，并且可以改善诸如提高效率和降低驱动电压的性能，并使作为OLED材料的能力最大化。

