



등록특허 10-2463815



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년11월04일

(11) 등록번호 10-2463815

(24) 등록일자 2022년11월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 491/06 (2006.01) C07D 495/06 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 491/06 (2013.01)

C07D 495/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-0102763

(22) 출원일자 2020년08월14일

심사청구일자 2020년08월14일

(65) 공개번호 10-2021-0020842

(43) 공개일자 2021년02월24일

(30) 우선권주장

1020190100473 2019년08월16일 대한민국(KR)

(56) 선행기술조사문헌

KR1020200103524 A*

KR1020150121337 A

KR1020180099547 A

CN107880056 A

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

주식회사 엘지화학

서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)

(72) 발명자

김민준

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
이동훈

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
(뒷면에 계속)

(74) 대리인

유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 8 항

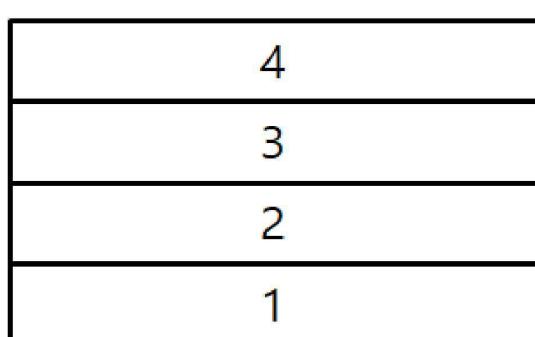
심사관 : 김상인

(54) 발명의 명칭 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자

(57) 요 약

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자를 제공한다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

(72) 발명자

서상덕

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

송종수

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

박성주

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

이다정

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

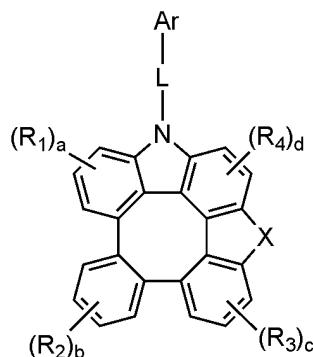
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]

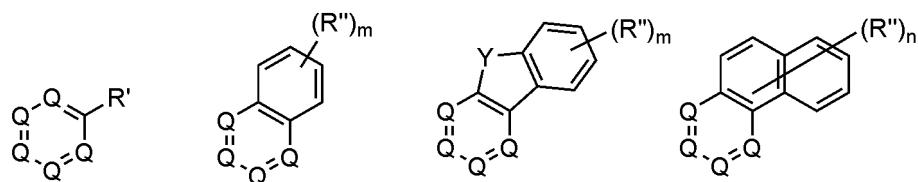


상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

L은 단일결합; 또는 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 C₆₋₂₀ 아릴렌이고,

Ar은 하기 화학식 2A 내지 2D로 표시되는 치환기 중 어느 하나이고,



2A

2B

2C

2D

상기 화학식 2A 내지 2D에서,

Y는 O 또는 S이고,

Q 중 하나는 L과 결합되는 C이고, 나머지는 각각 독립적으로, N 또는 CR이고, 단, 나머지 중 적어도 하나는 N이고,

R, R' 및 R"는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤테로아릴이고,

여기서, 상기 R, R' 및 R"는 비치환되거나, 또는 중수소, C₁₋₁₀ 알킬 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

m은 0 내지 4의 정수이고,

n은 0 내지 6의 정수이고,

R₁ 내지 R₄는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로겐; 시아노; 니트로; 아미노; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 알킬; 치환 또는 비치환된 C₃₋₆₀ 사이클로알킬; 치환 또는 비치환된 C₂₋₆₀ 알케닐; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는

치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

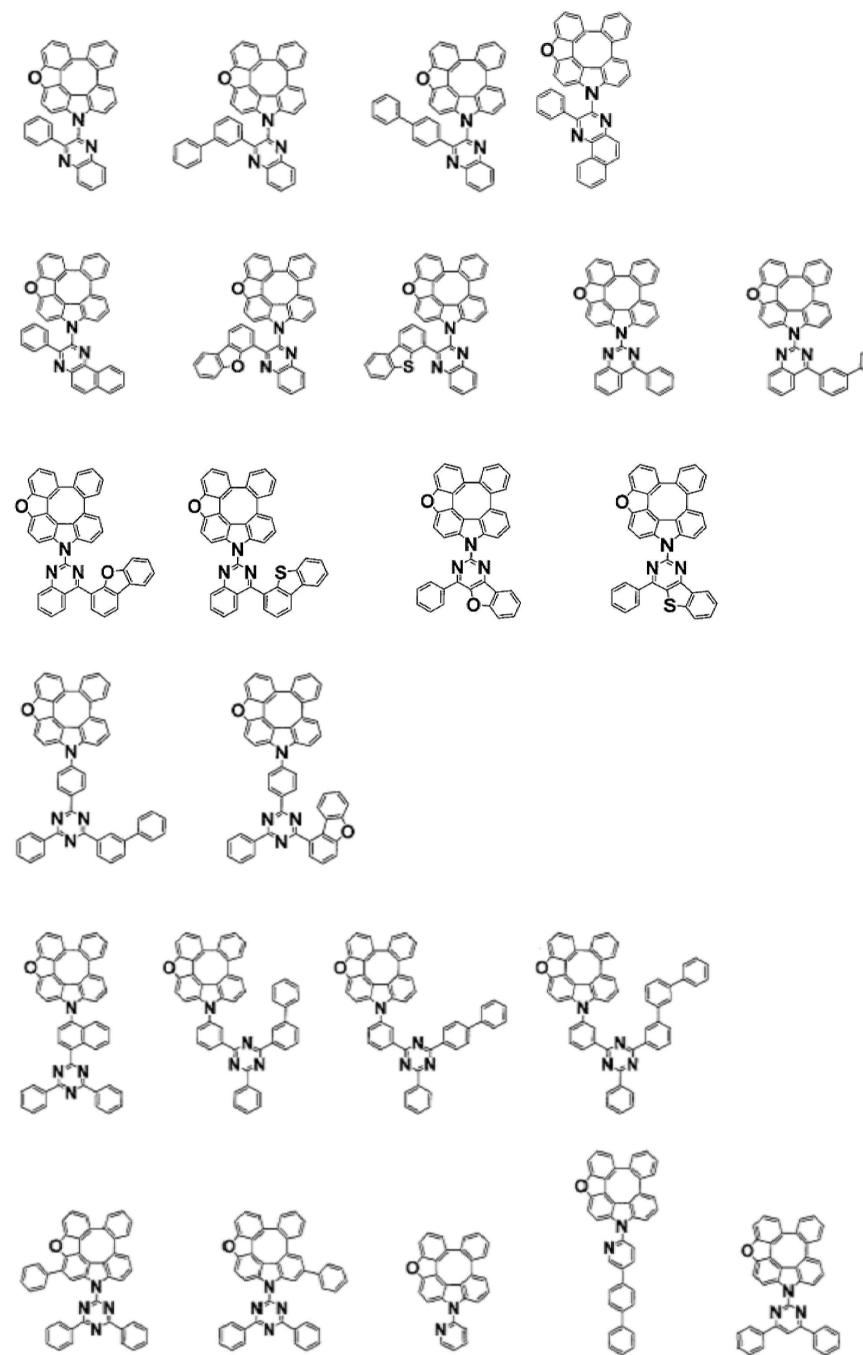
a는 0 내지 3의 정수이고,

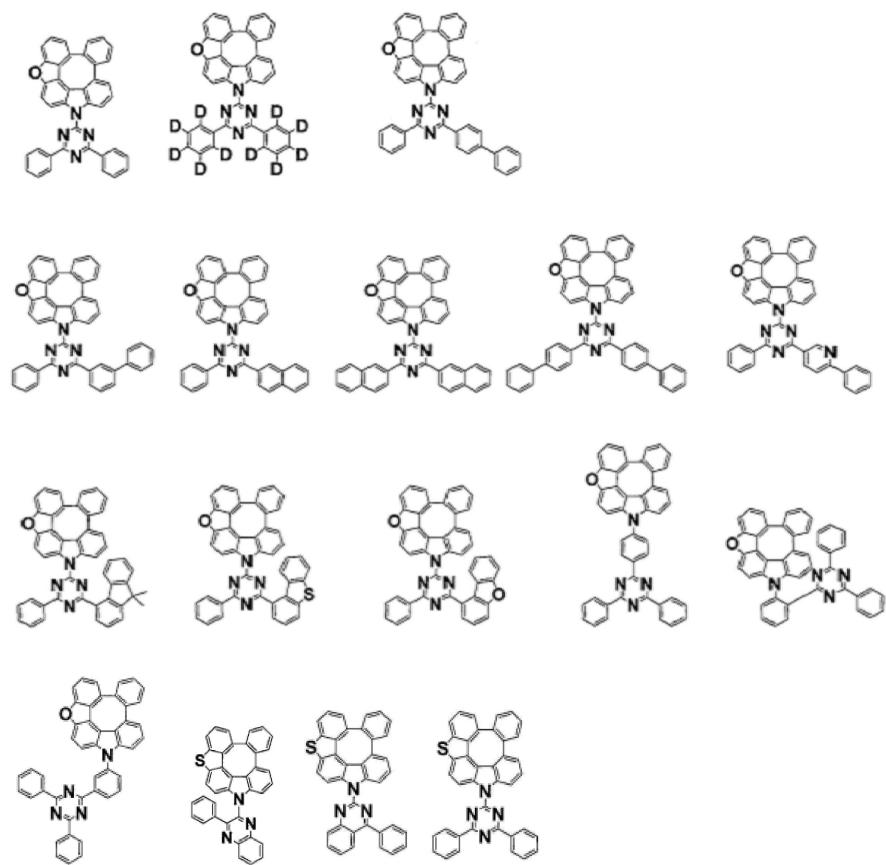
b는 0 내지 4의 정수이고,

c는 0 내지 3의 정수이고,

d는 0 내지 2의 정수이고,

단, 하기 화합물들은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서 제외한다,





청구항 2

제1항에 있어서,

L은 단일결합, 페닐렌, 또는 나프ти렌인,

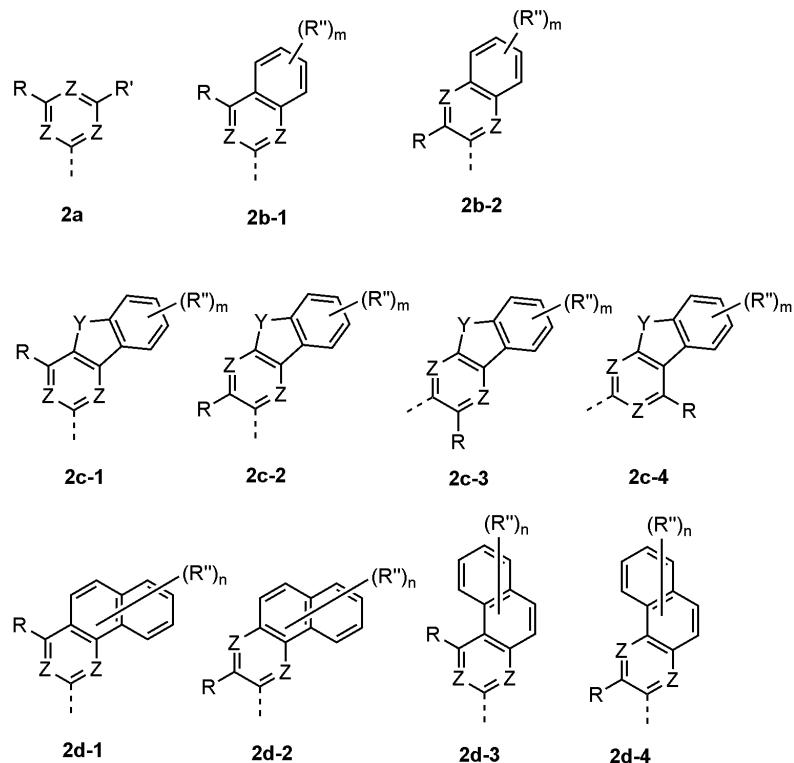
화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

Ar은 하기 화학식으로 표시되는 치환기 중 어느 하나인,

화합물:



상기에서,

Z는 모두 N이고,

R 및 R'는 각각 독립적으로, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤테로아릴이고,

여기서, R 및 R'는 비치환되거나, 또는 중수소, 메틸, 폐닐 및 나프틸로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 또는 2개의 치환기로 치환되고,

R''는 수소 또는 중수소이고,

Y, m 및 n은 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 4

제1항에 있어서,

R 및 R'는 각각 독립적으로, 폐닐, 나프틸페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 폐닐나프틸, 폐난쓰레닐, 9,9-디메틸플루오레닐, 카바졸일, 9-페닐카바졸일, 디벤조퓨라닐, 또는 디벤조티오페닐이고,

R''는 수소, 또는 중수소인,

화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₄는 각각 독립적으로, 수소, 또는 중수소인,

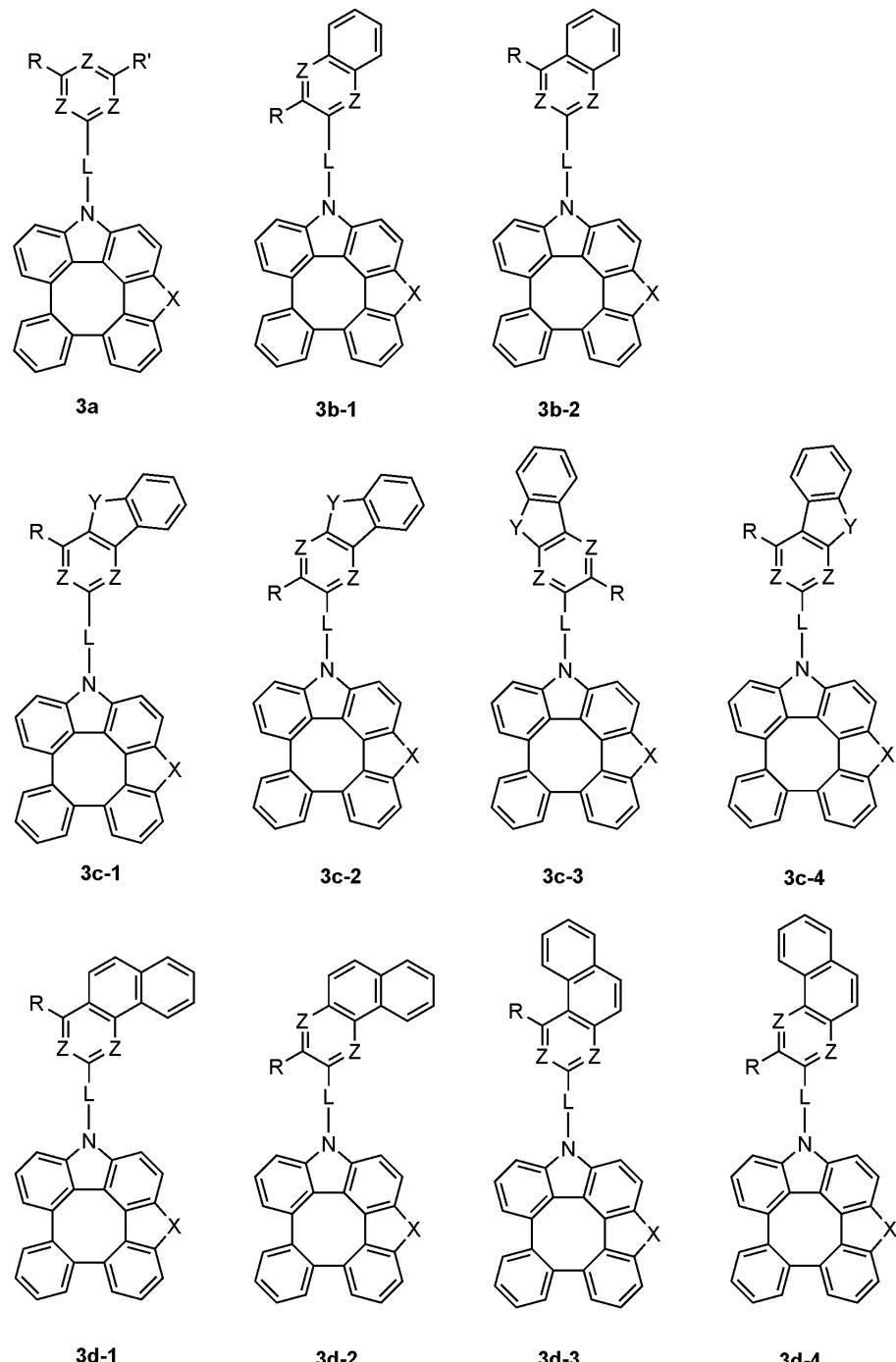
화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 3a, 3b-1, 3b-2, 3c-1 내지 3c-4 및 3d-1 내지 3d-4 중 어느 하나로 표시되는,

화합물:



상기 화학식 3a, 3b-1, 3b-2, 3c-1 내지 3c-4 및 3d-1 내지 3d-4 에서,

Y는 O 또는 S이고,

Z는 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, 단, Z 중 적어도 하나는 N이고,

R 및 R'는 각각 독립적으로, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤테로아릴이고,

여기서, 상기 R 및 R'는 비치환되거나, 또는 중수소, C₁₋₁₀ 알킬 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

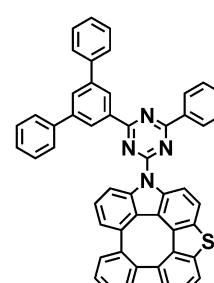
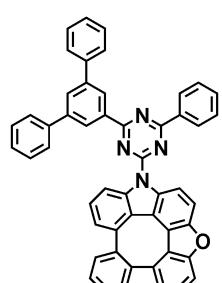
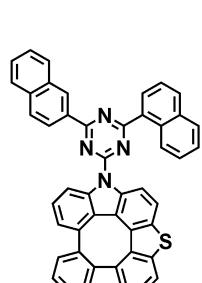
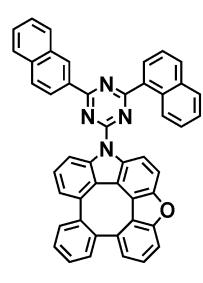
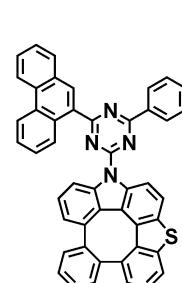
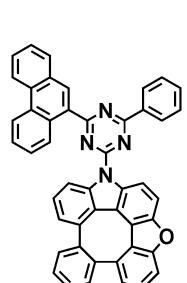
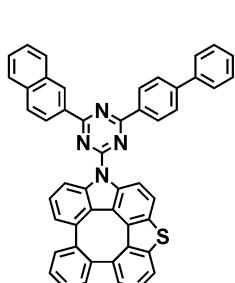
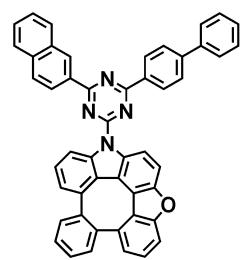
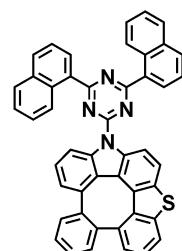
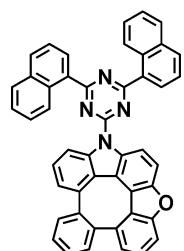
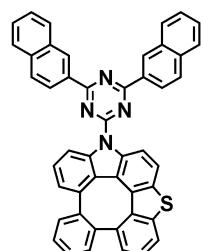
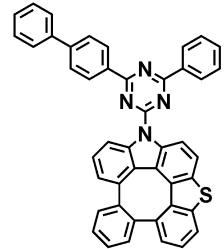
X 및 L은 제1항에서 정의한 바와 같다.

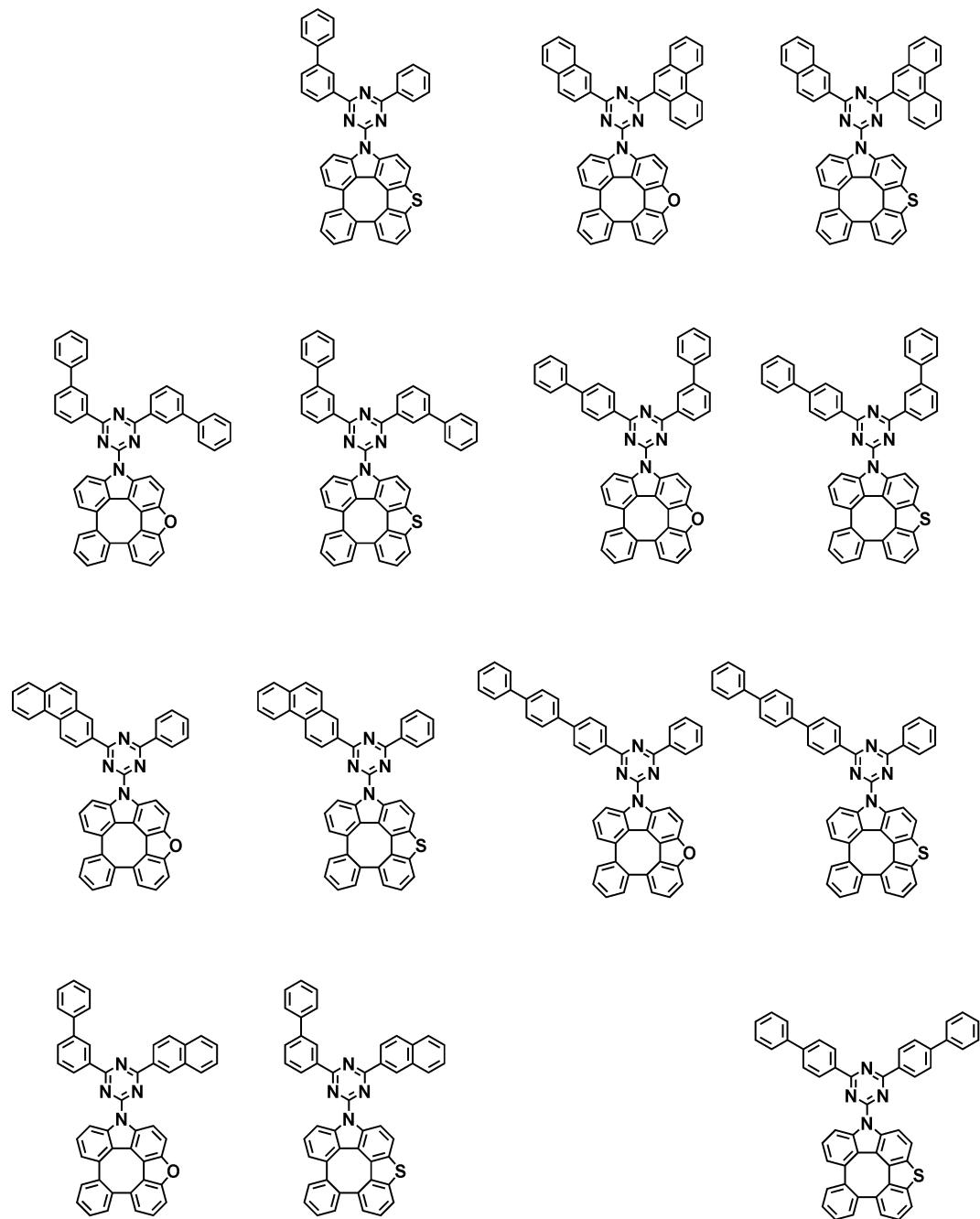
청구항 7

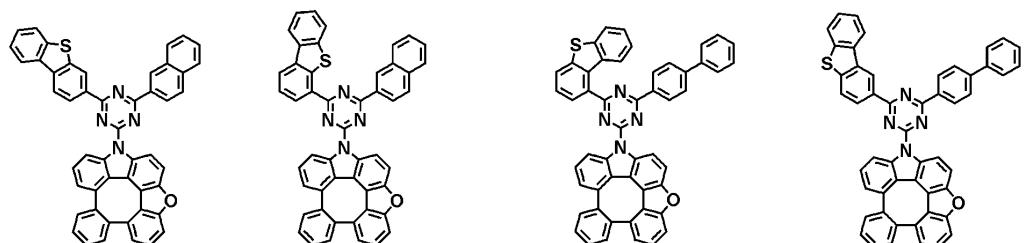
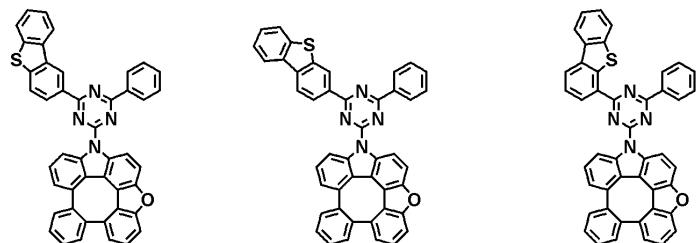
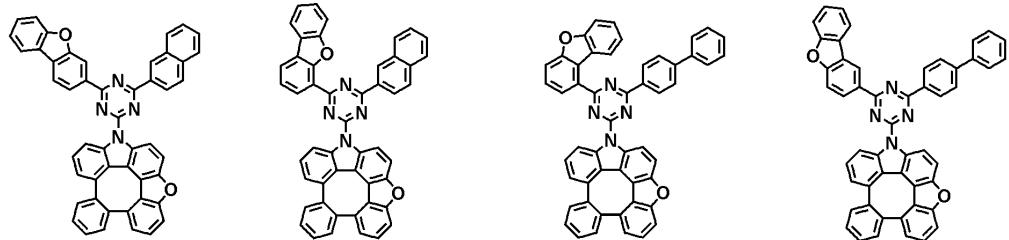
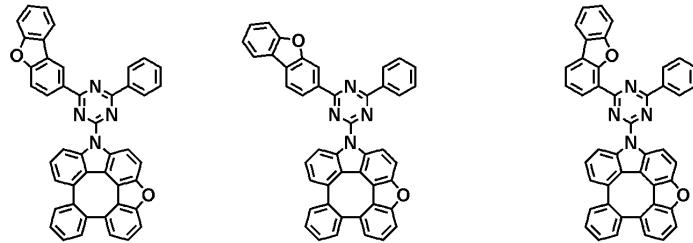
제1항에 있어서,

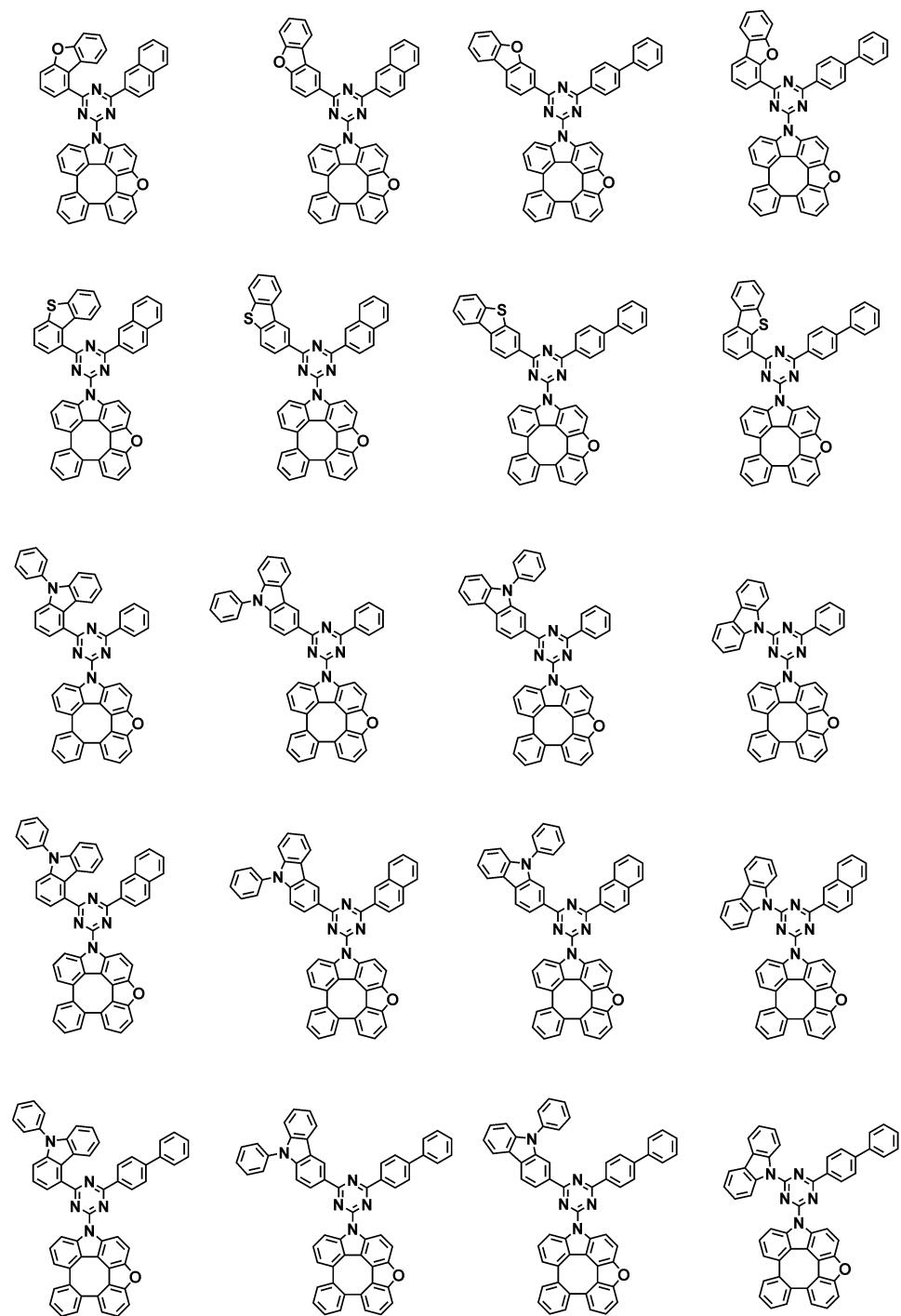
상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

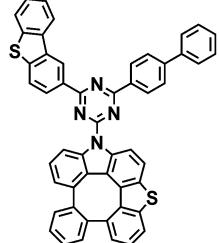
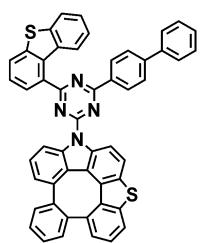
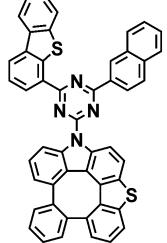
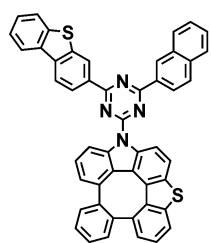
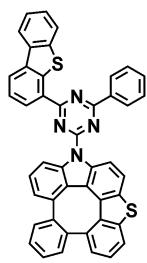
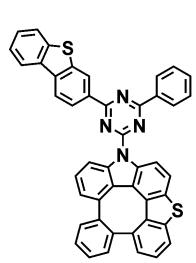
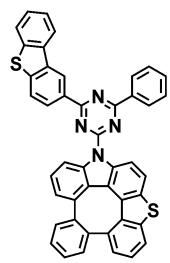
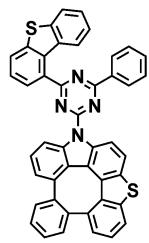
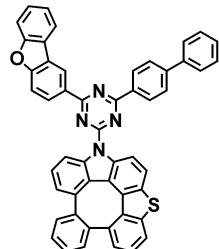
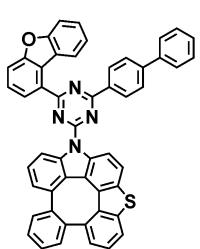
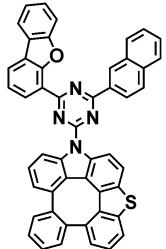
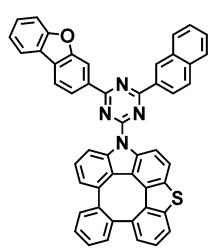
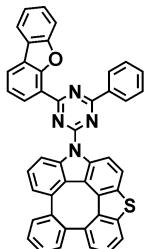
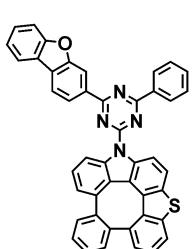
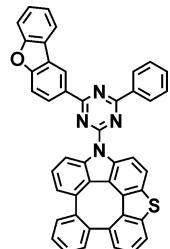
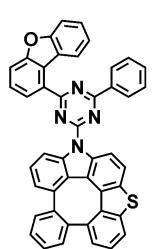
화합물 :

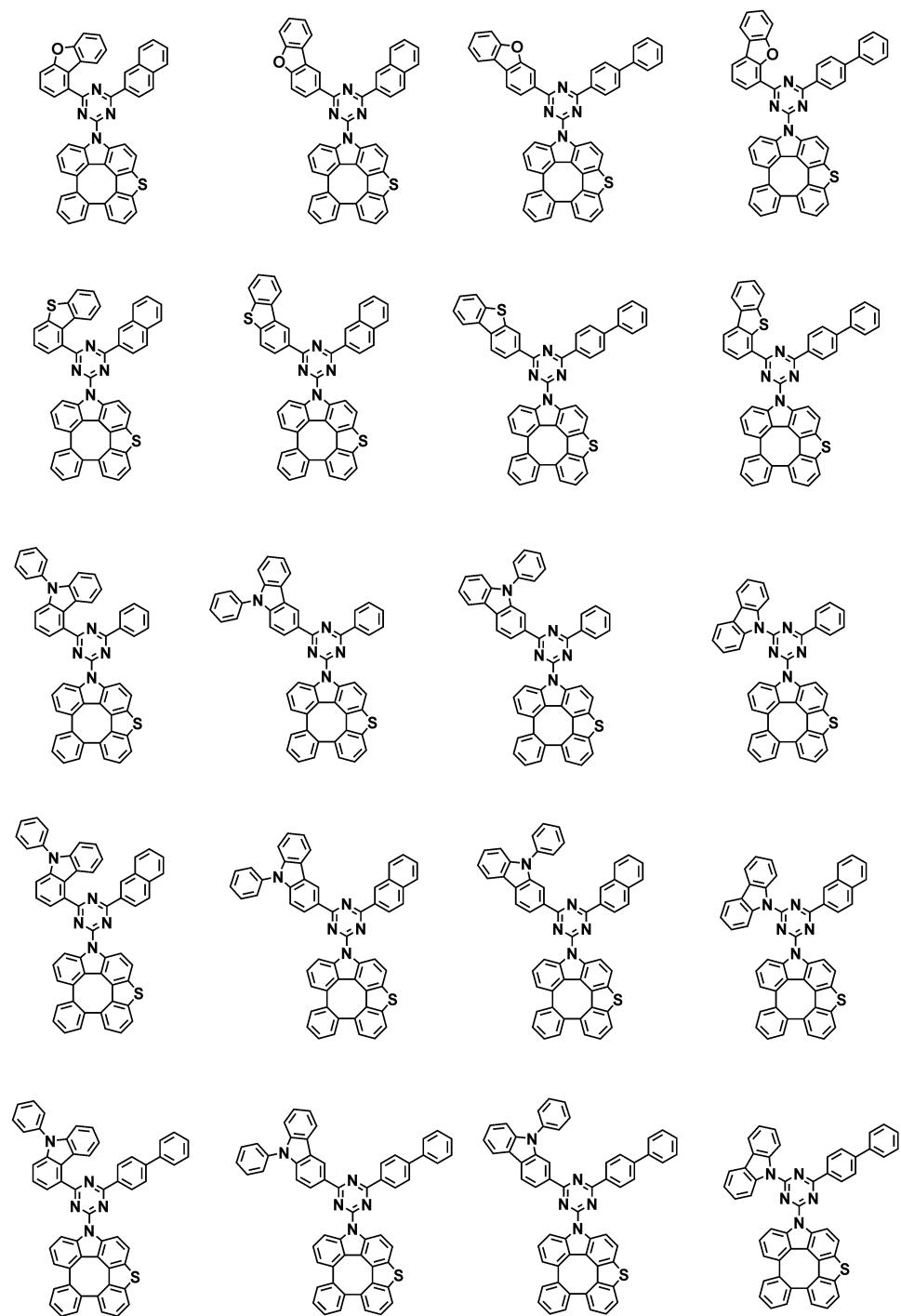


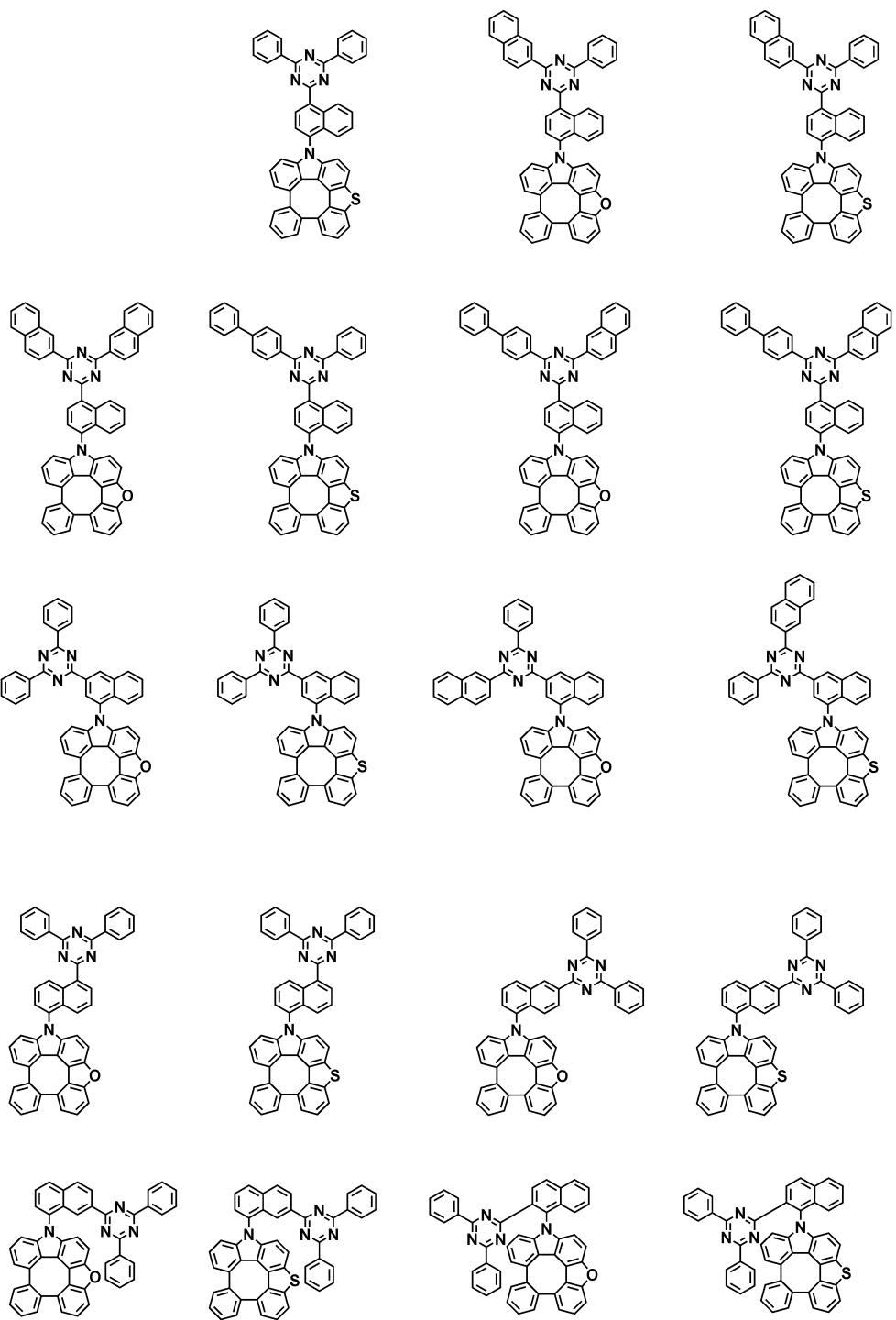


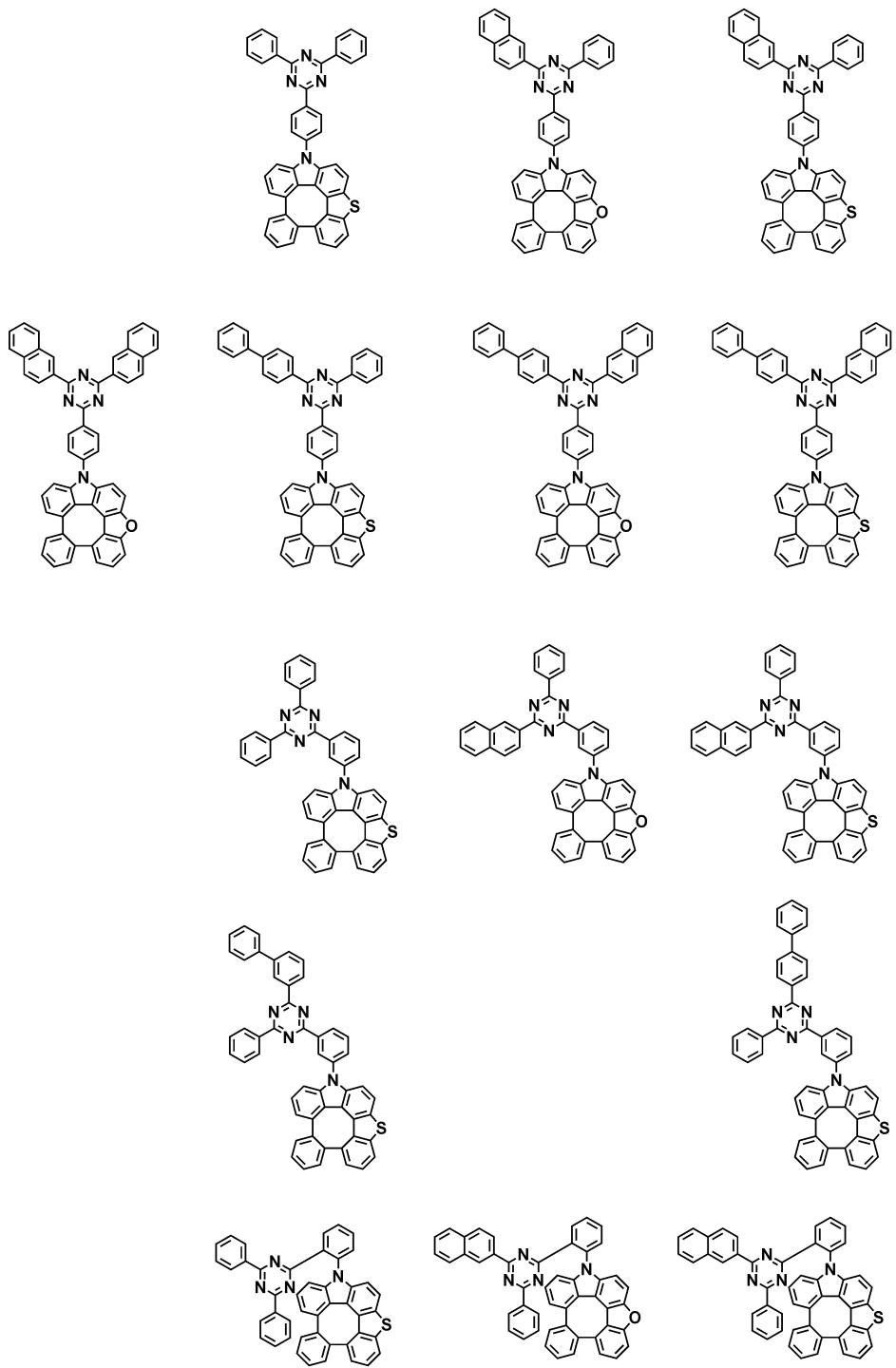


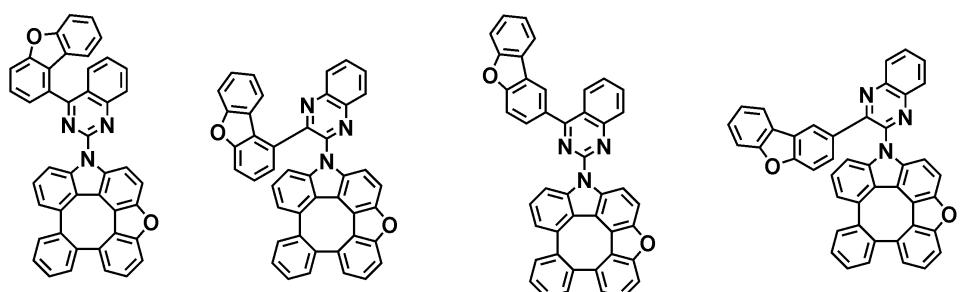
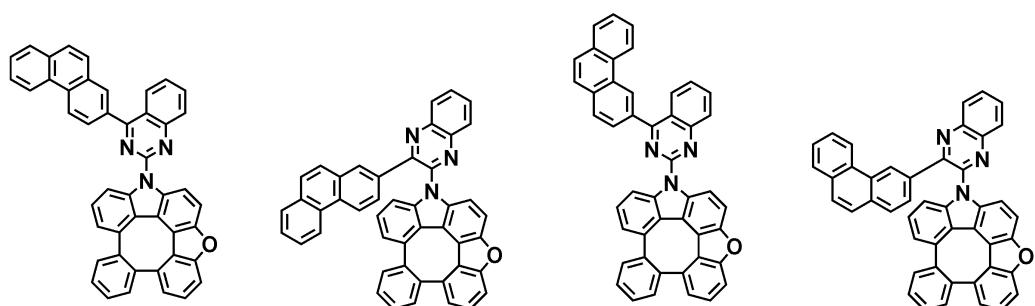
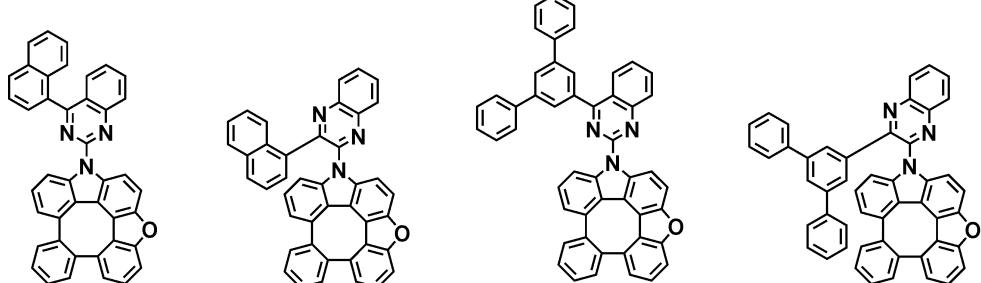
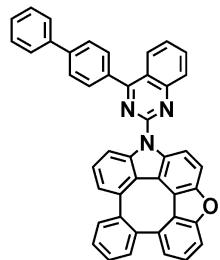


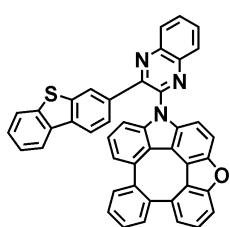
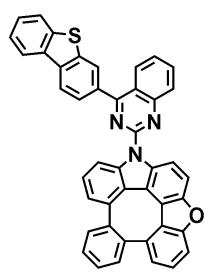
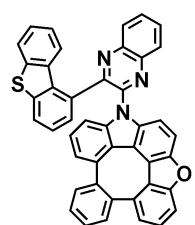
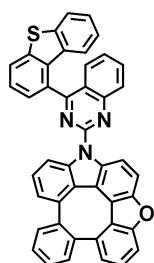
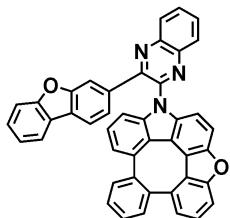
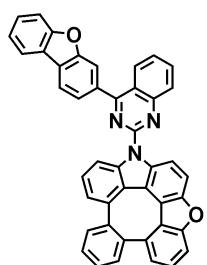
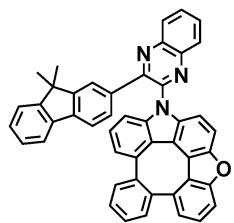
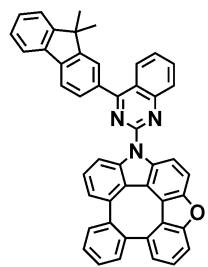
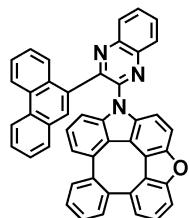
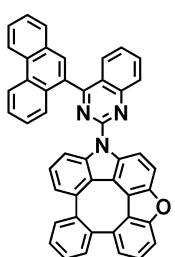
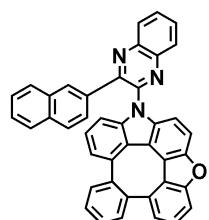
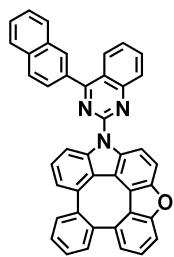


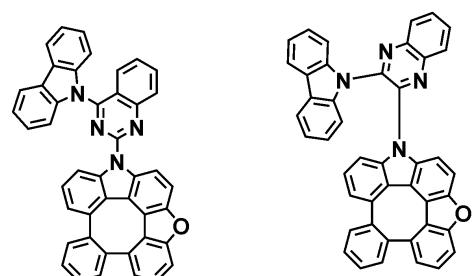
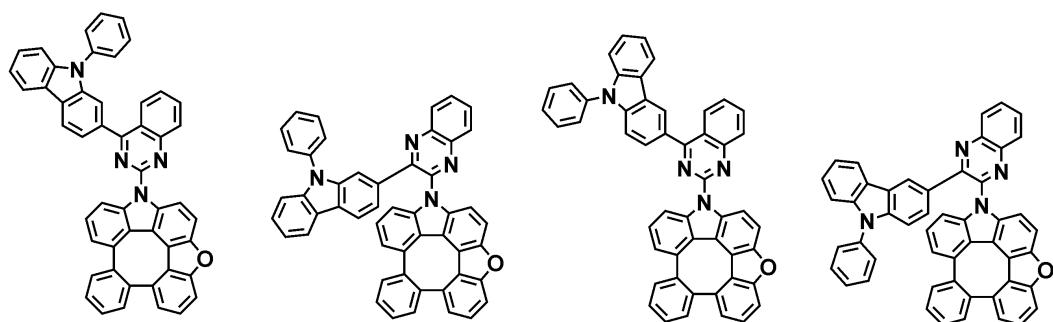
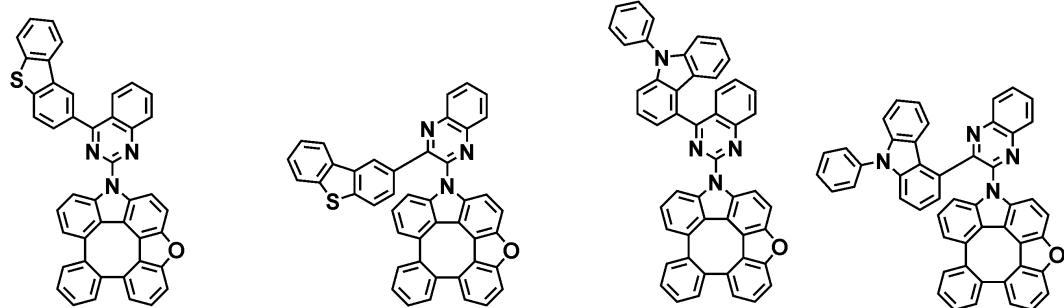


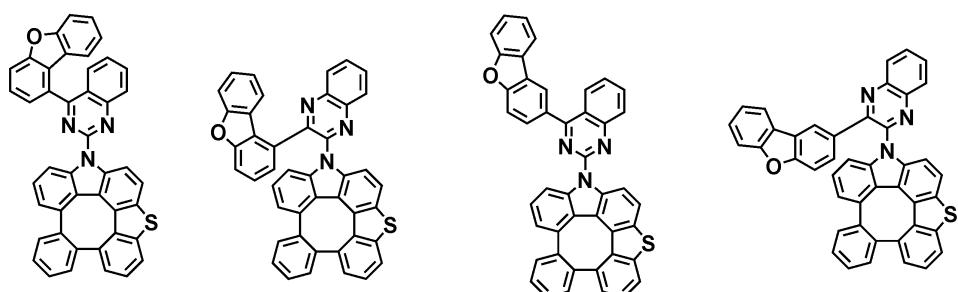
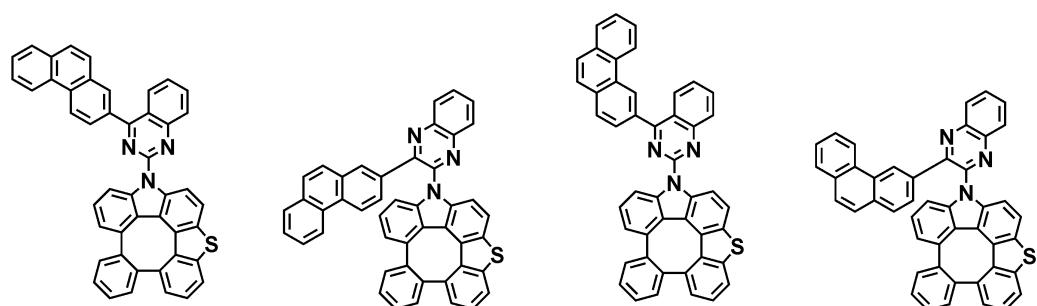
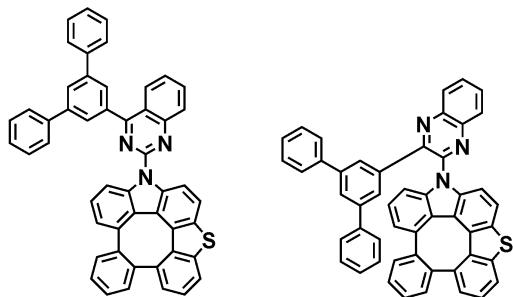
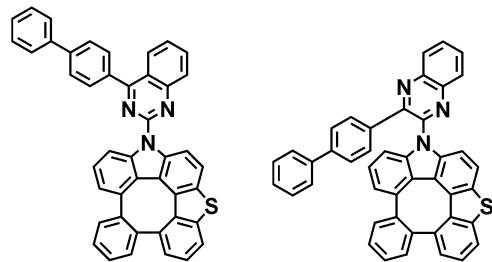


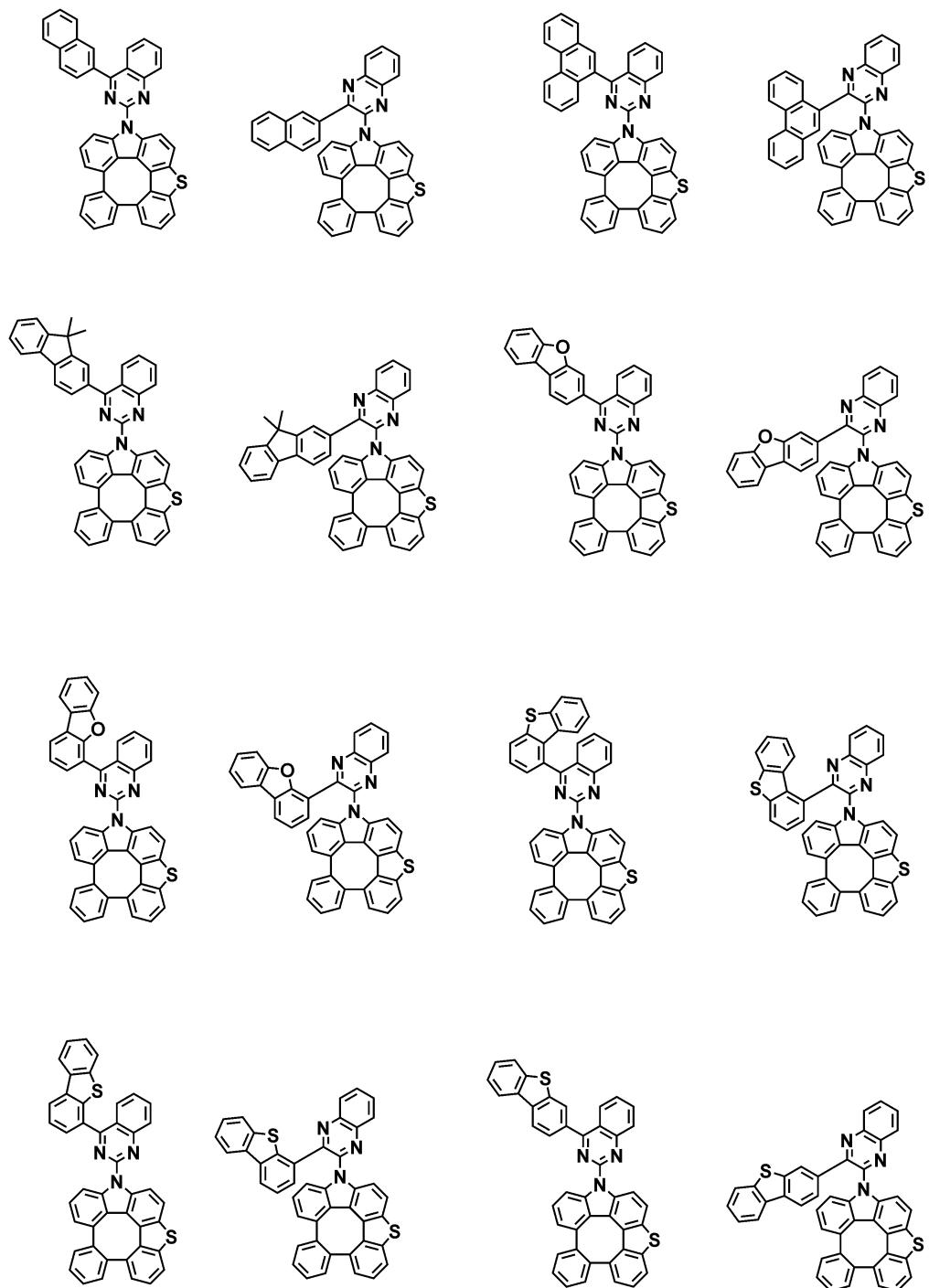


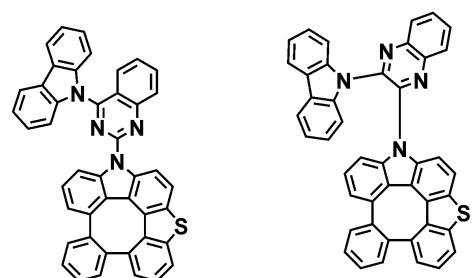
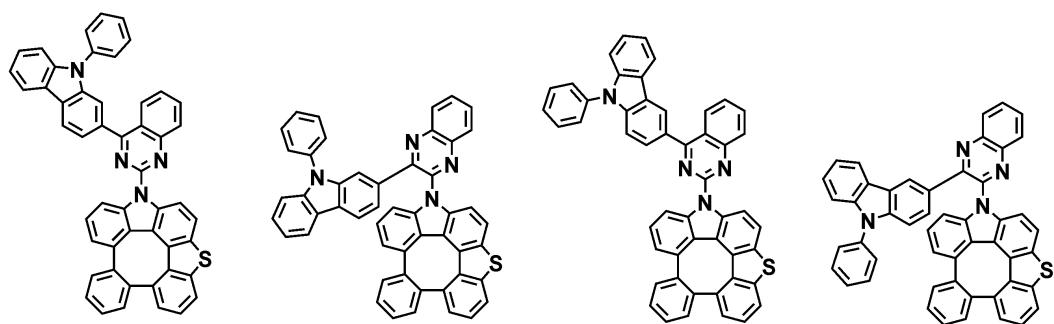
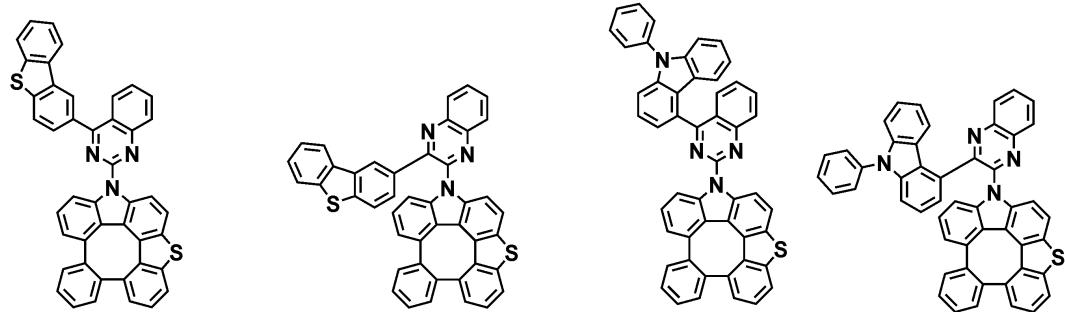


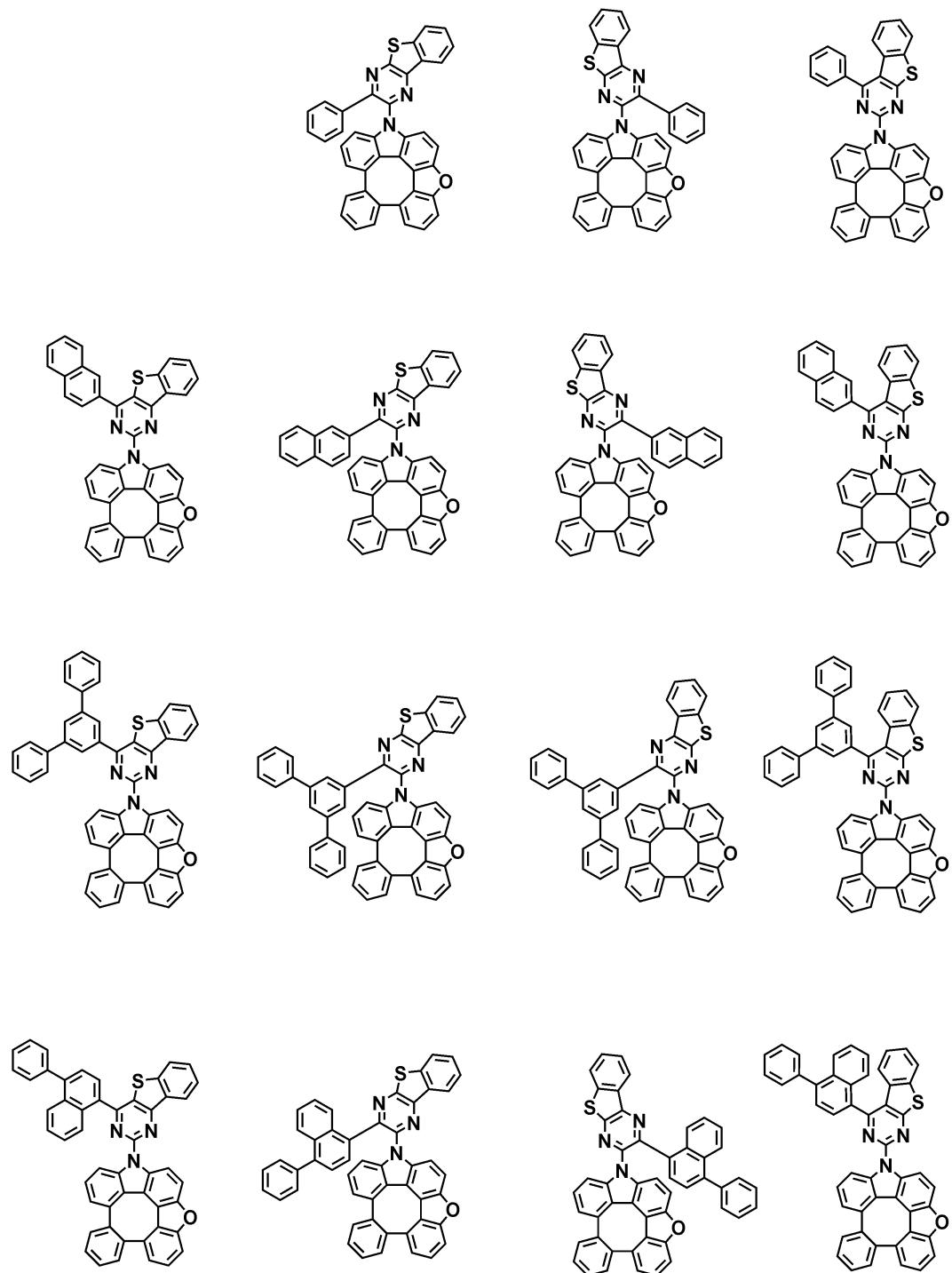


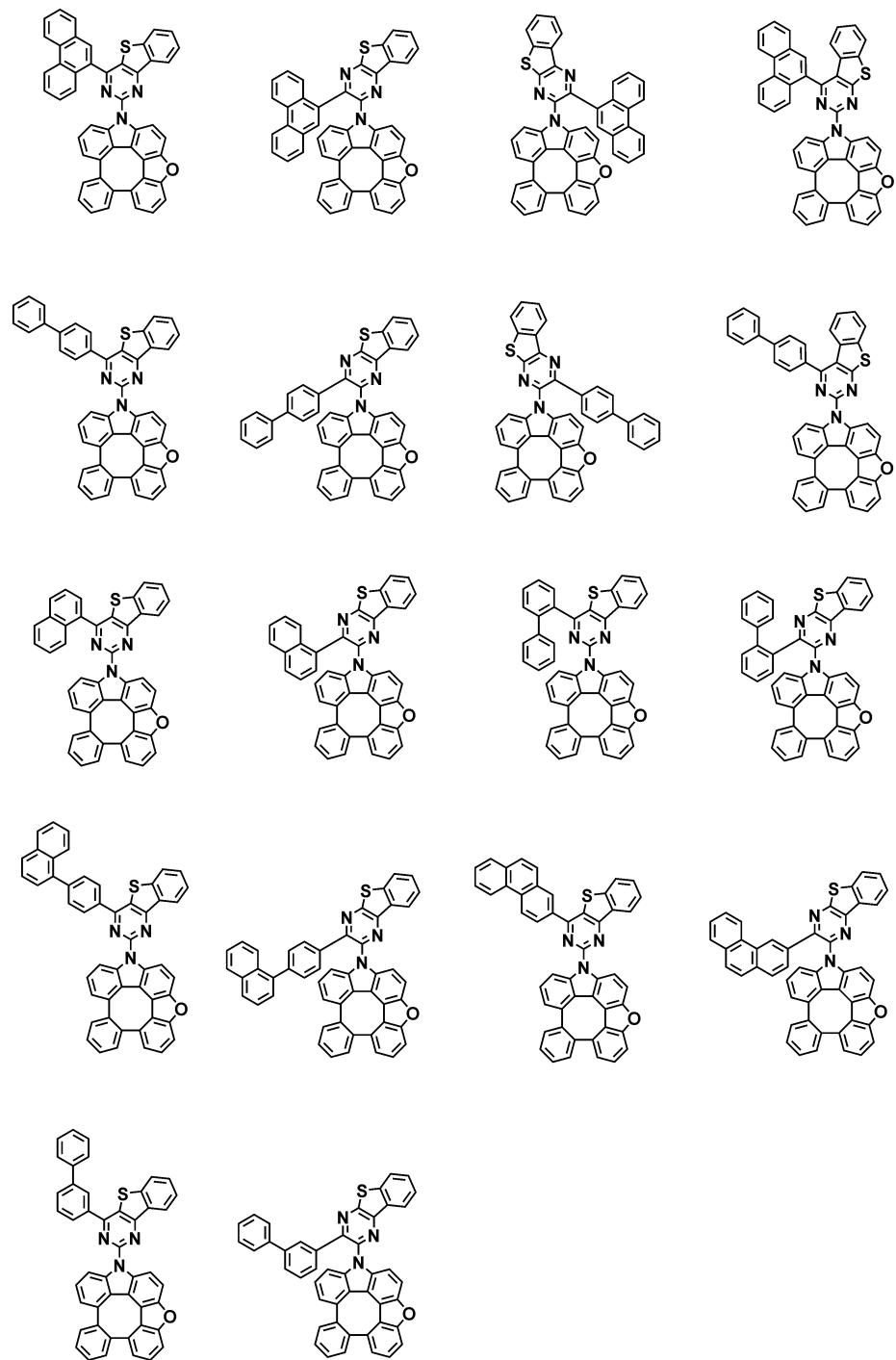


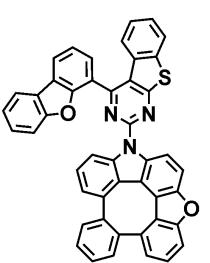
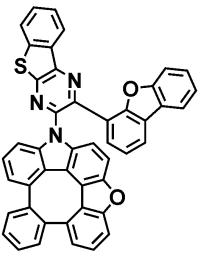
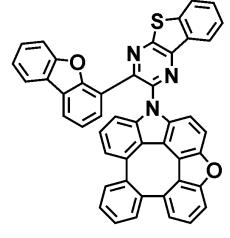
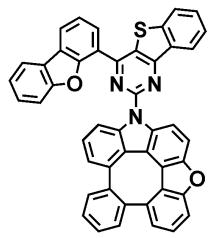
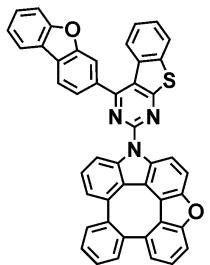
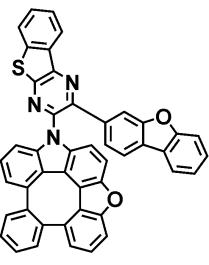
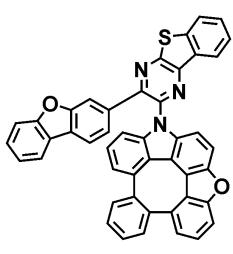
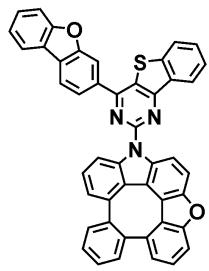
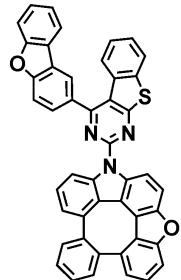
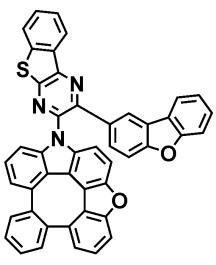
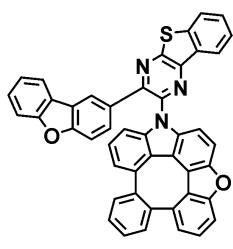
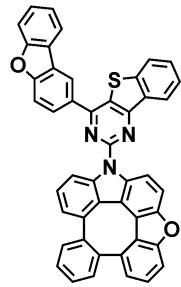
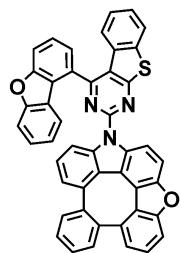
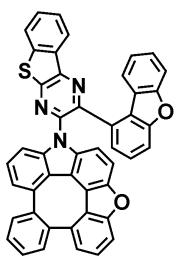
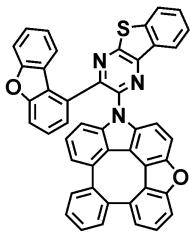
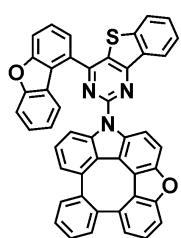


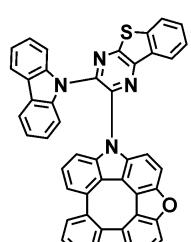
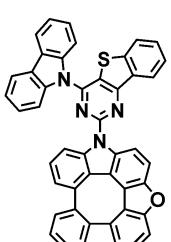
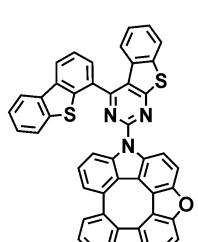
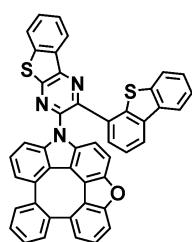
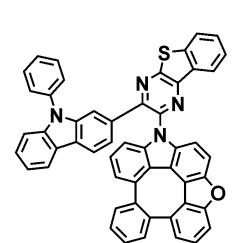
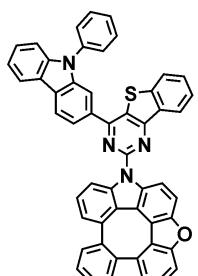
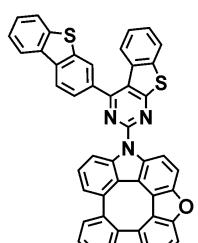
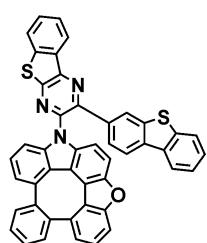
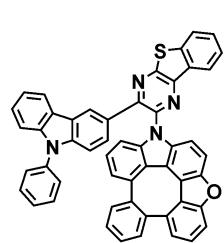
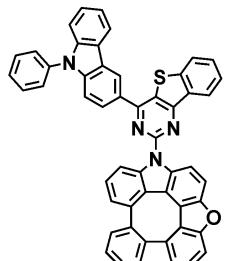
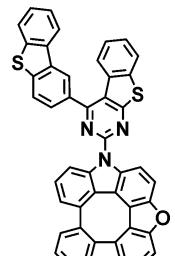
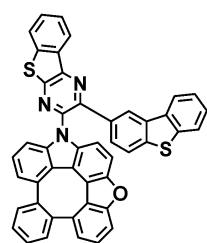
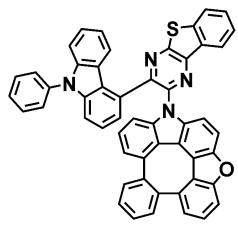
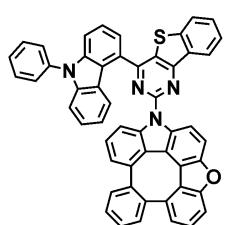
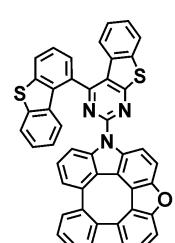
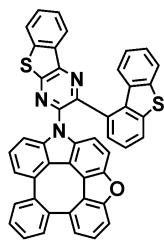


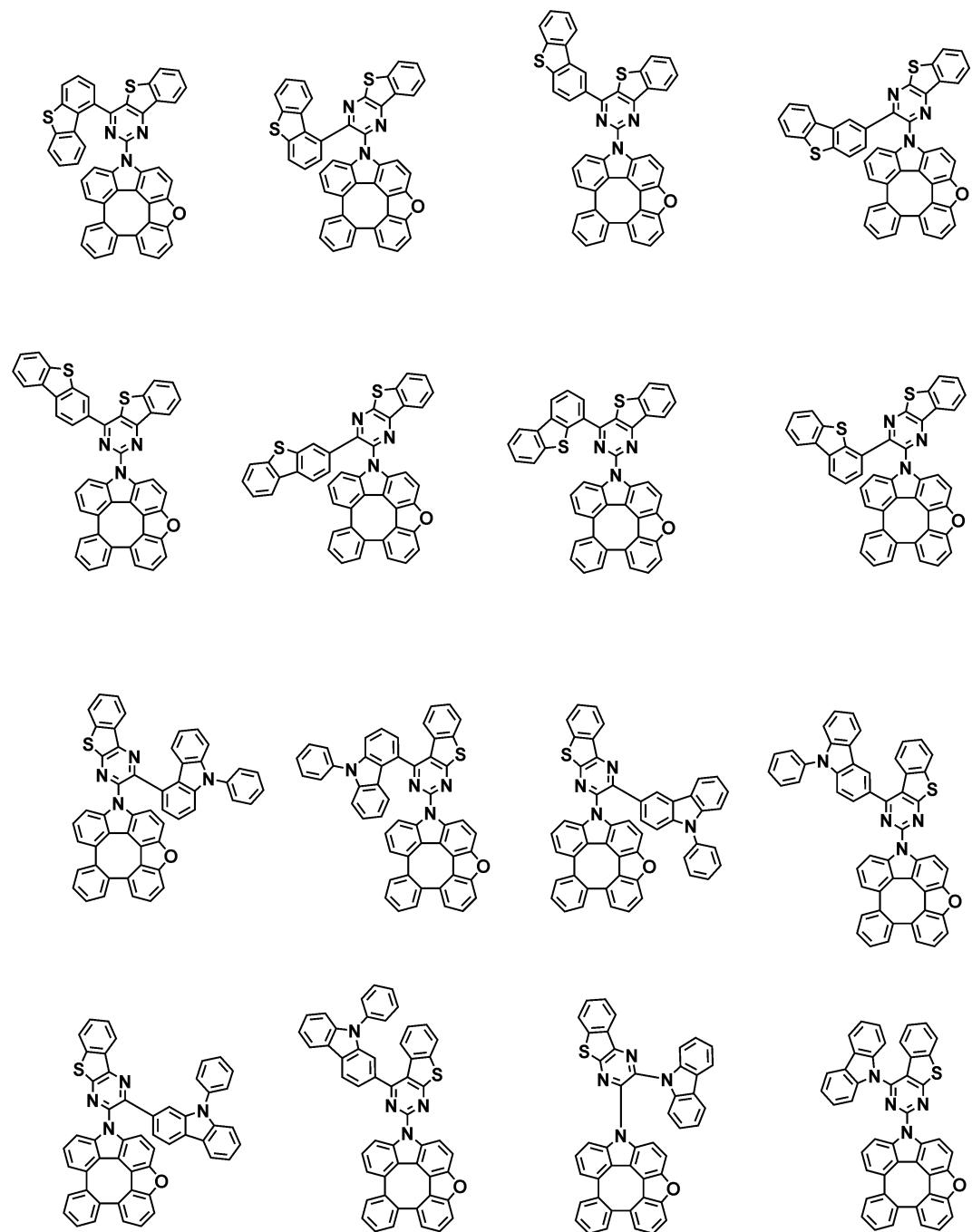


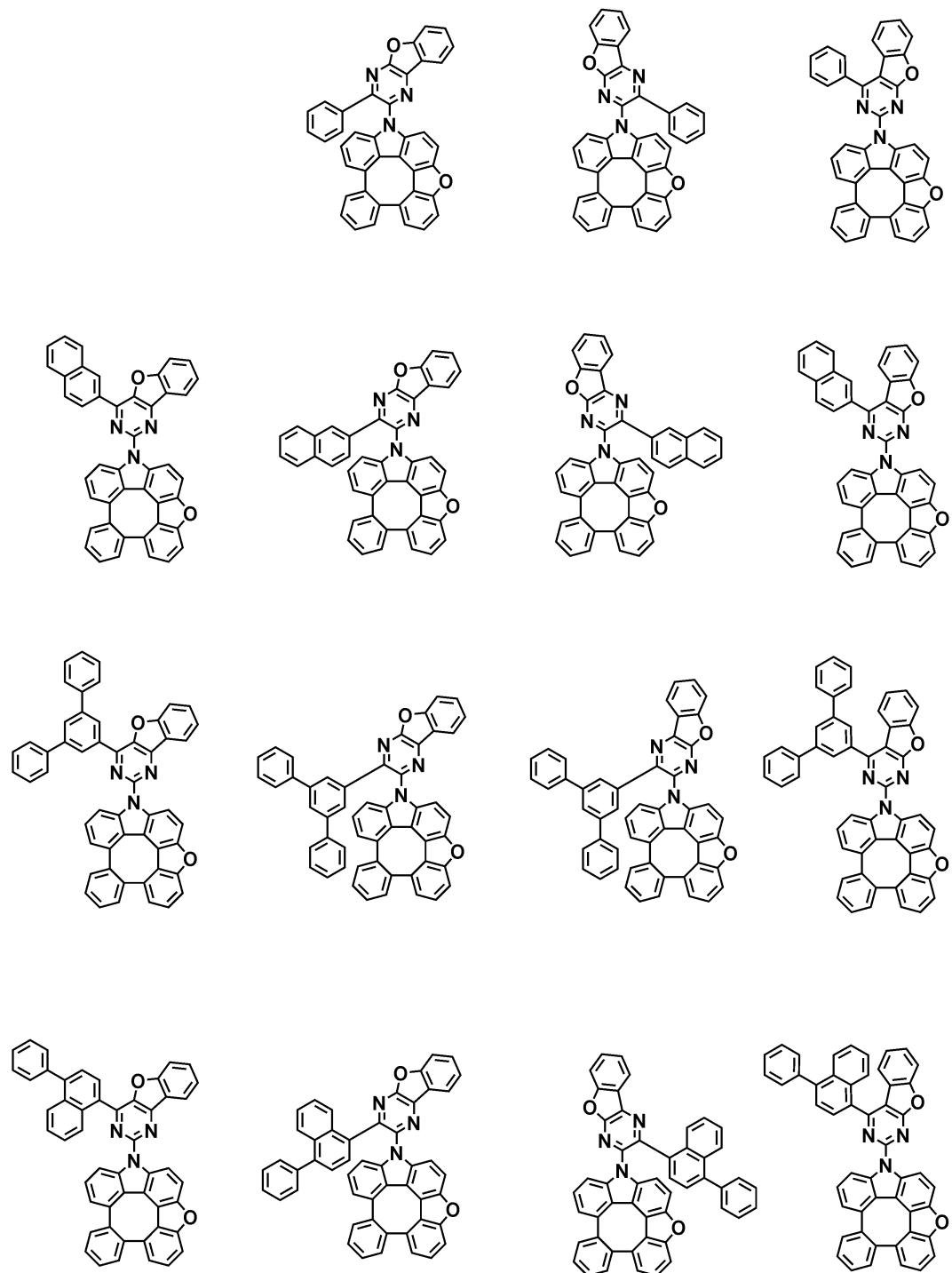


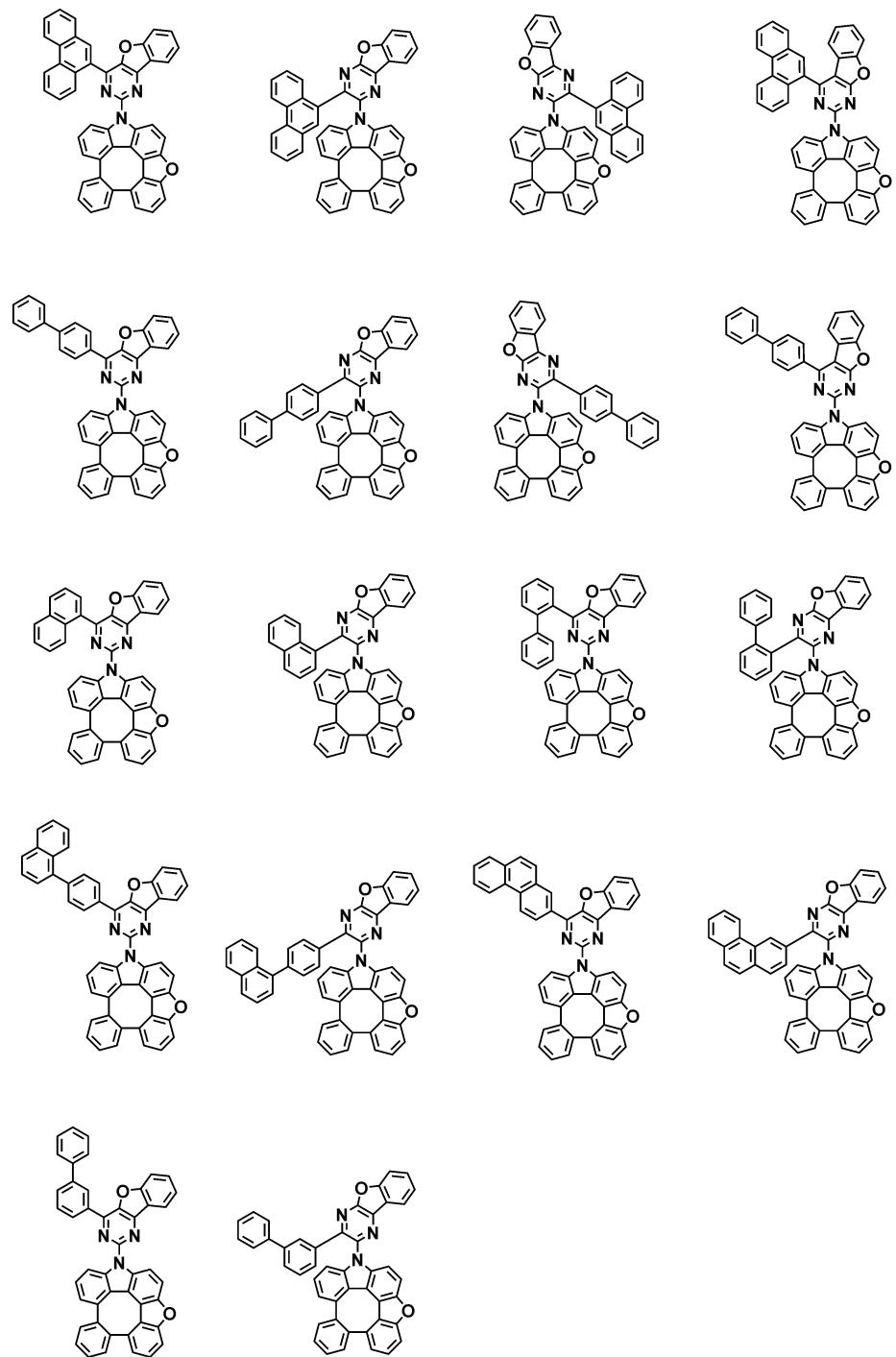


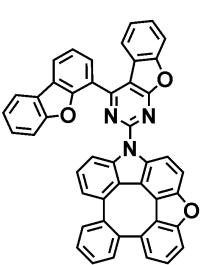
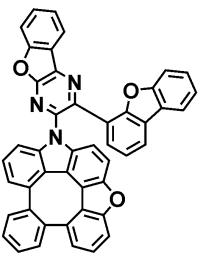
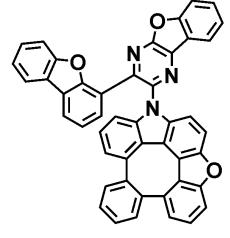
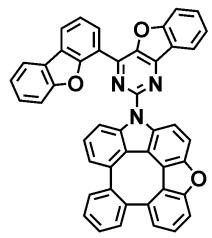
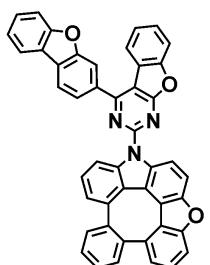
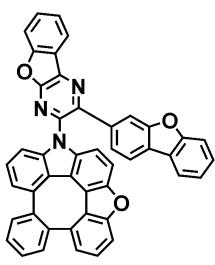
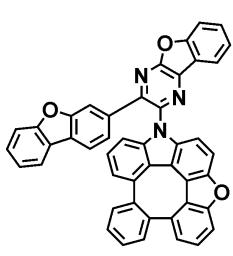
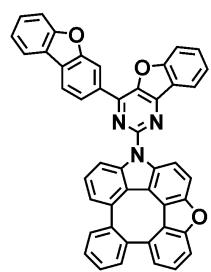
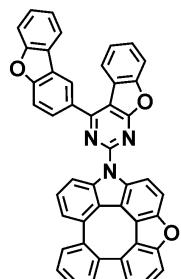
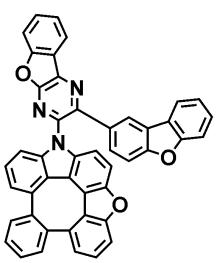
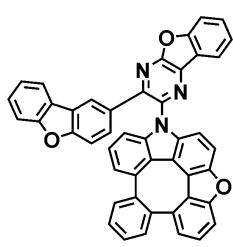
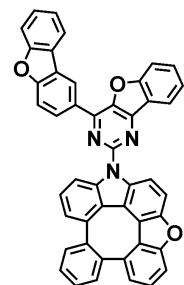
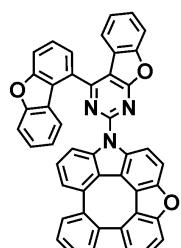
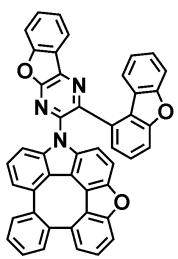
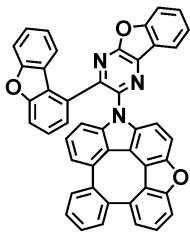
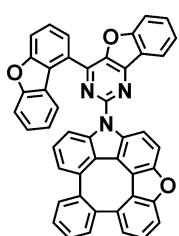


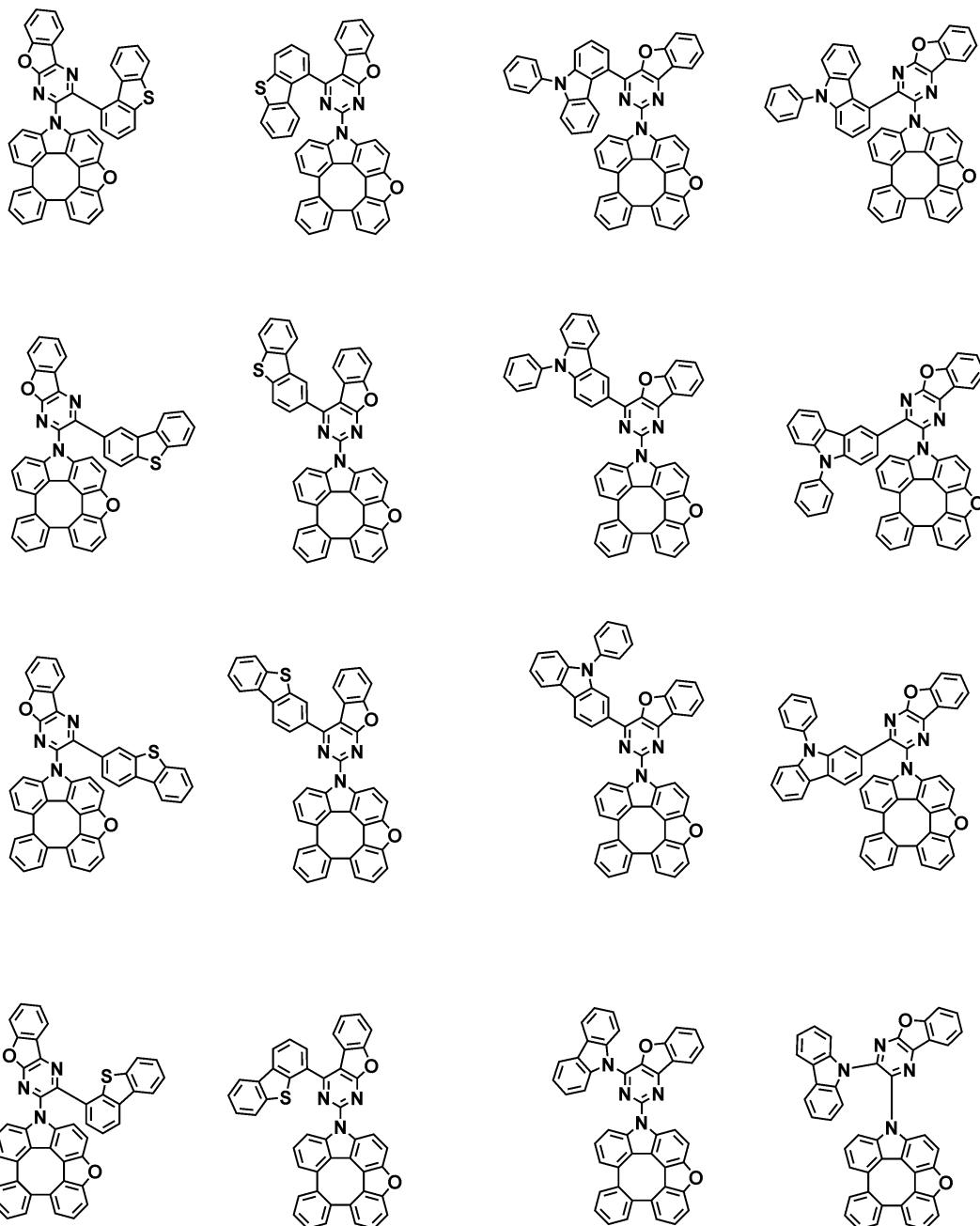


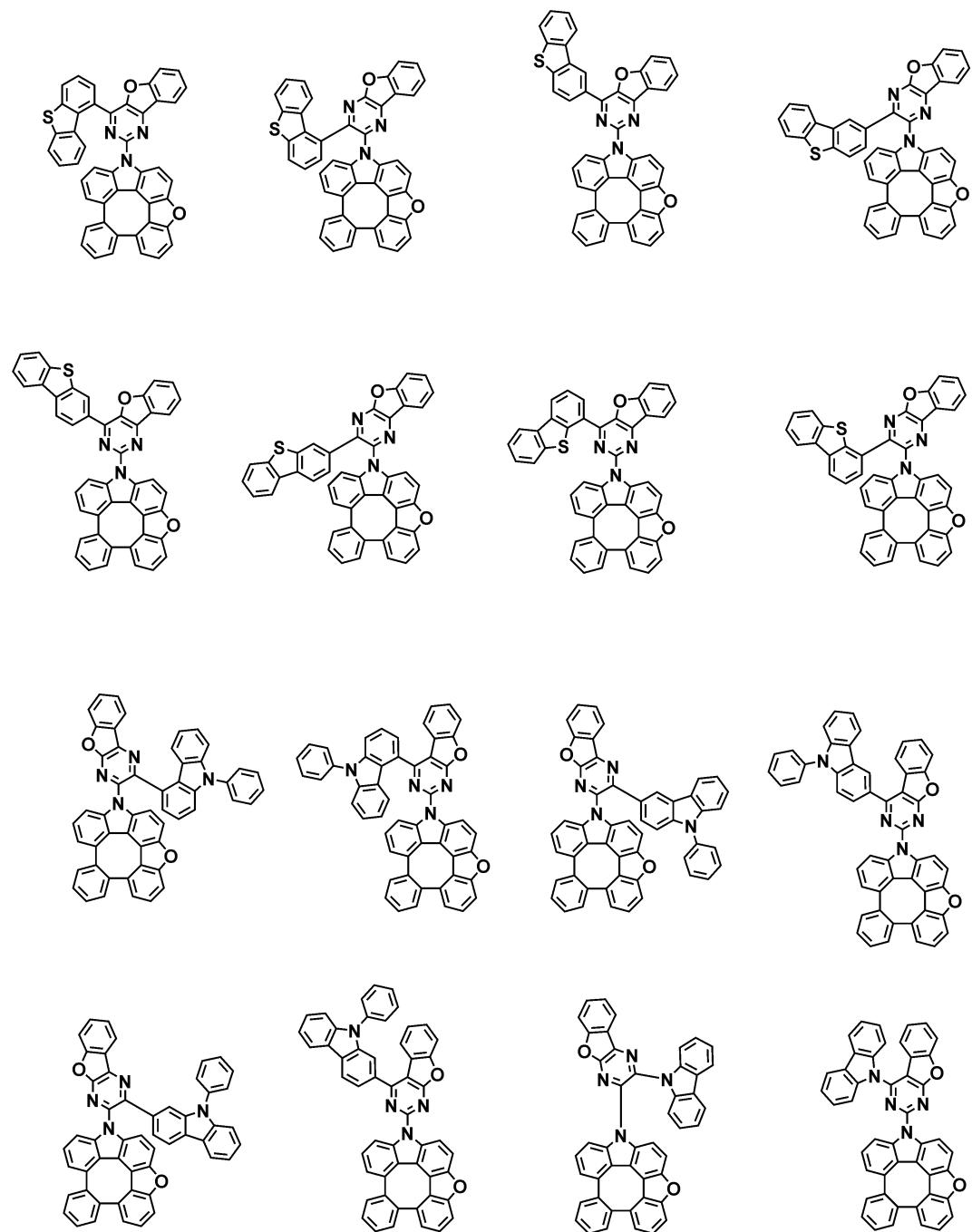


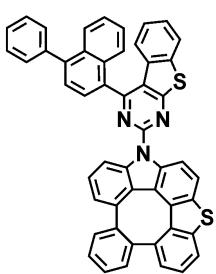
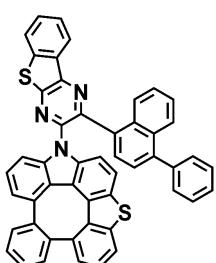
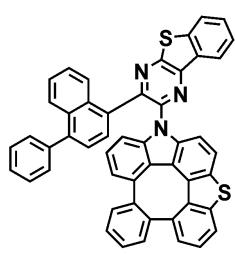
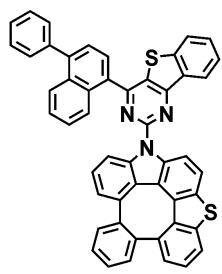
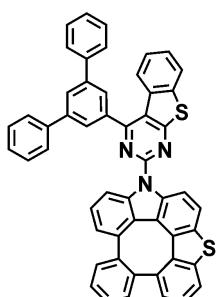
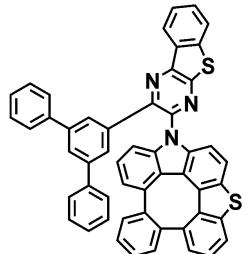
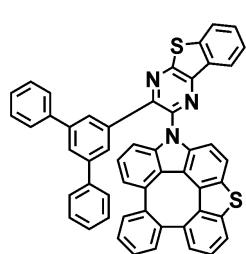
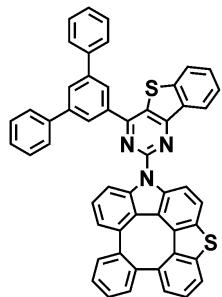
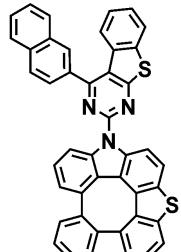
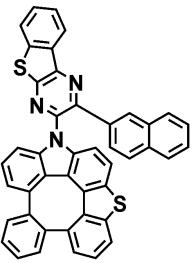
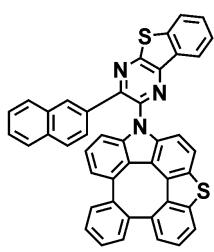
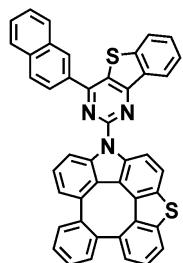
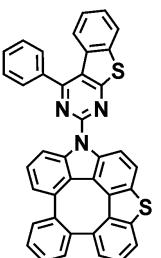
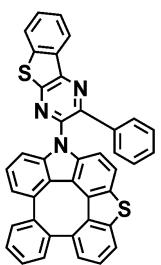
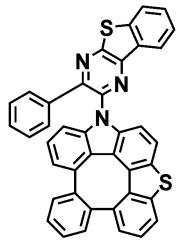


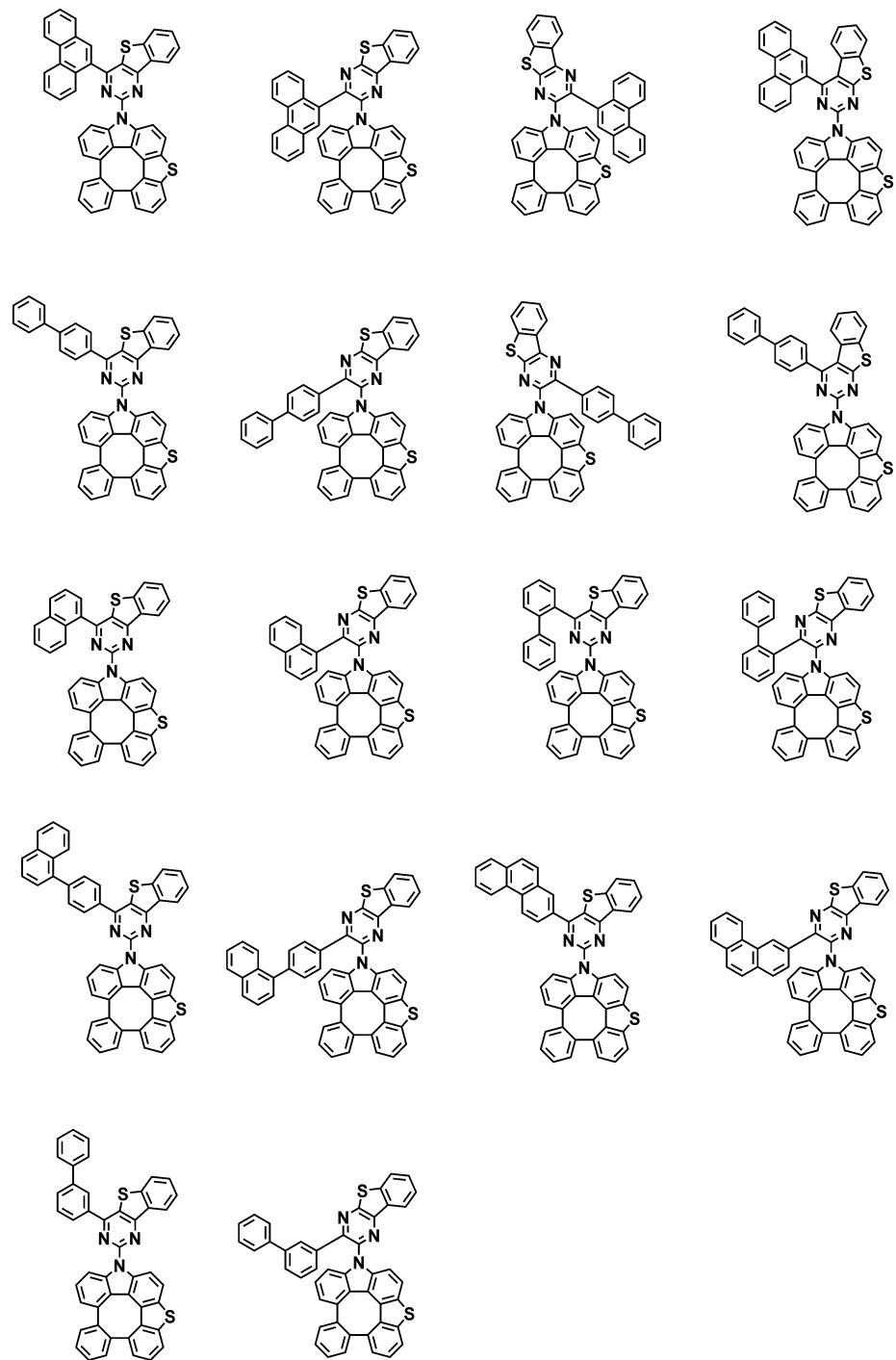


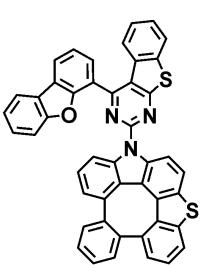
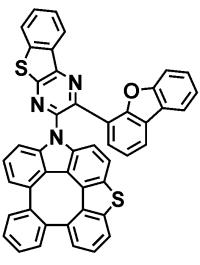
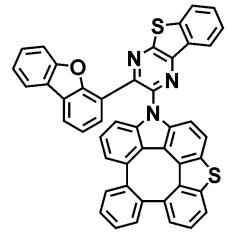
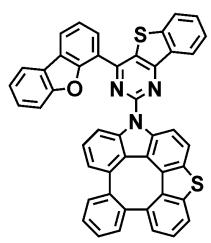
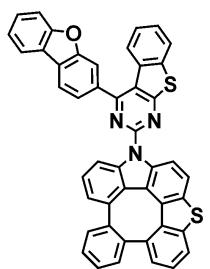
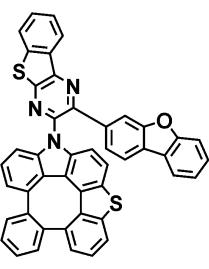
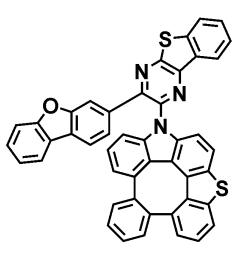
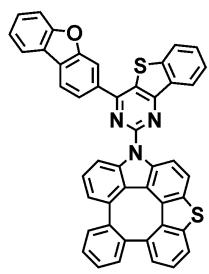
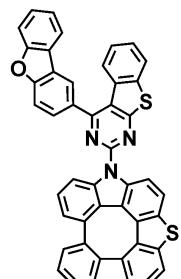
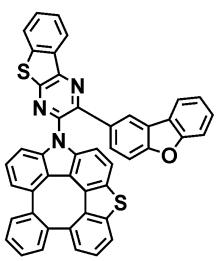
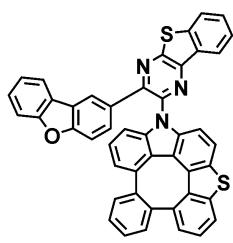
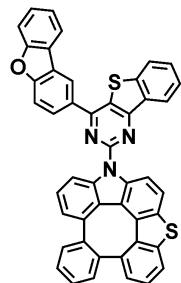
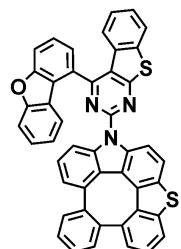
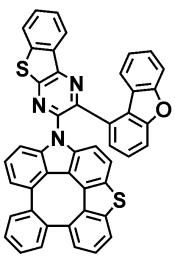
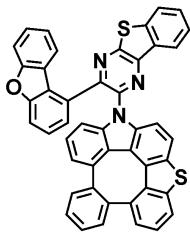
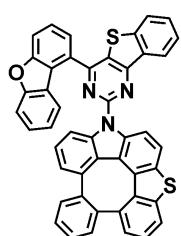


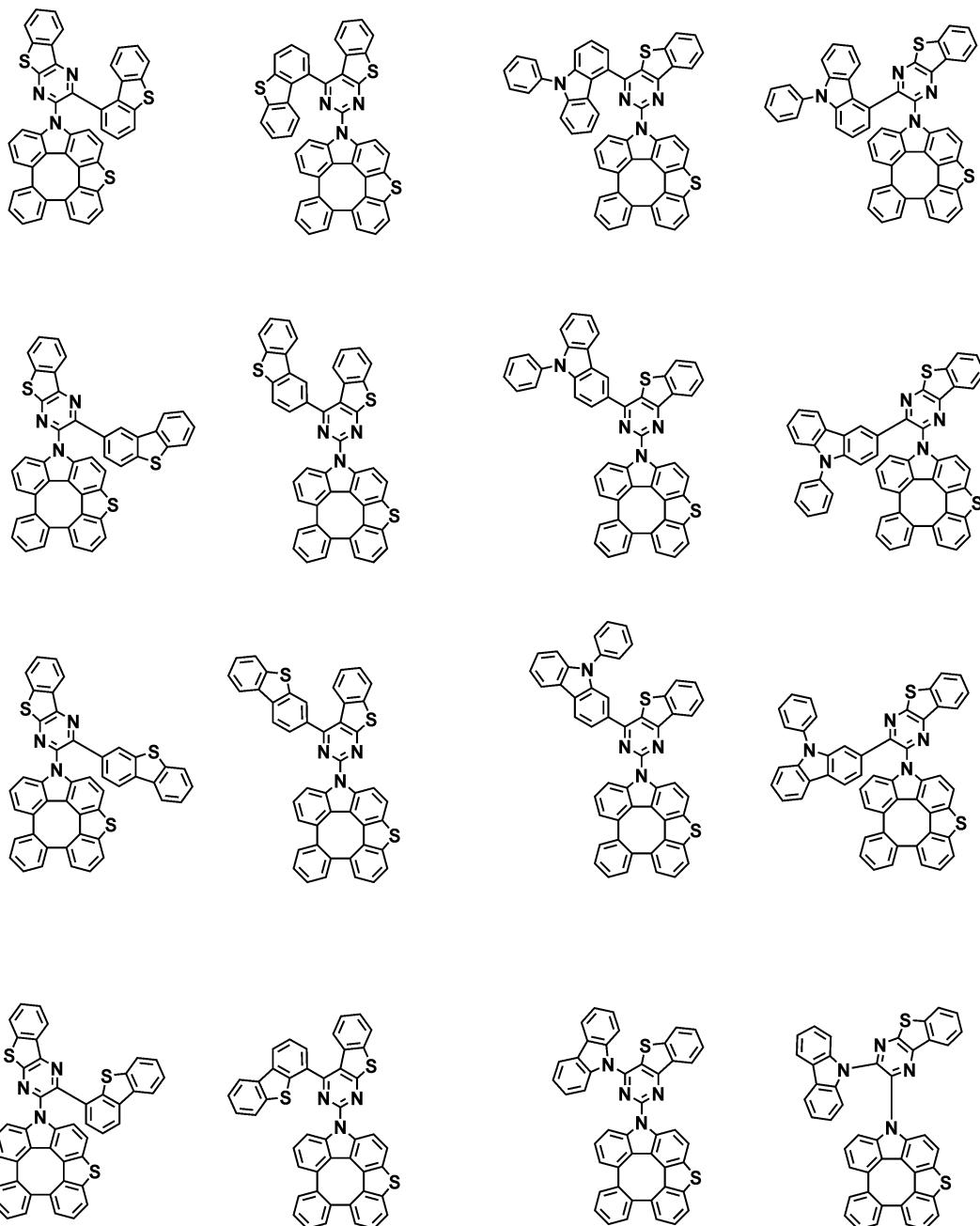


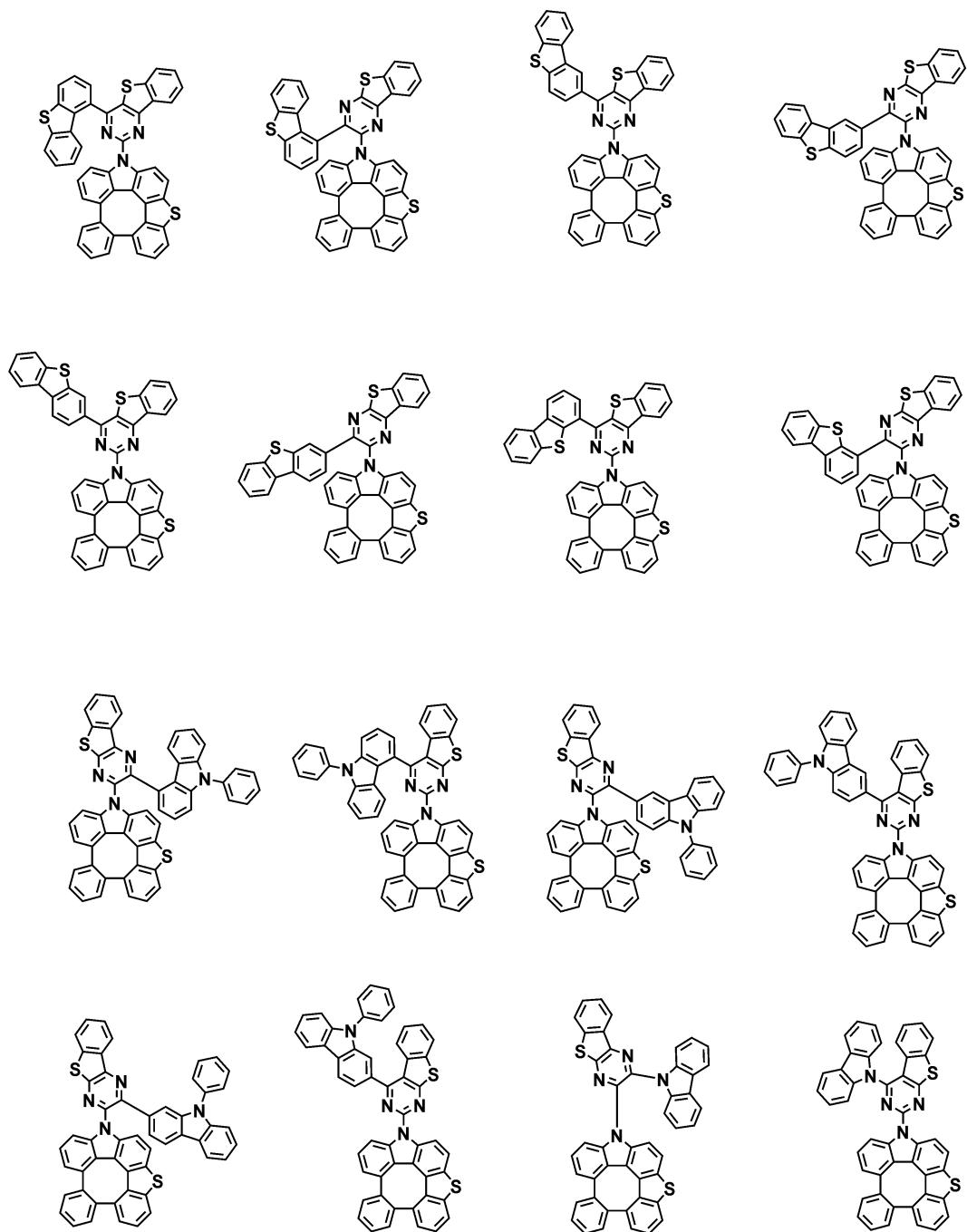


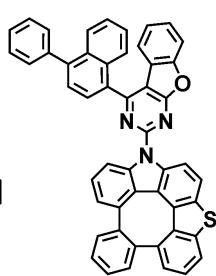
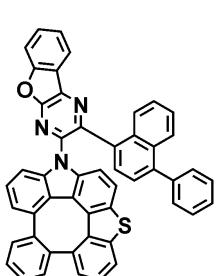
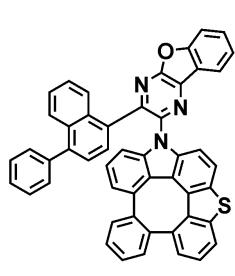
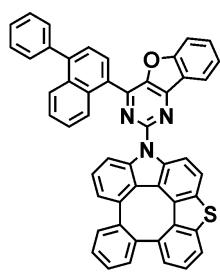
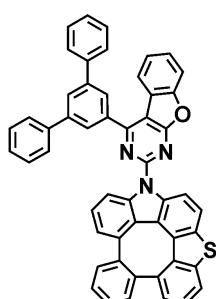
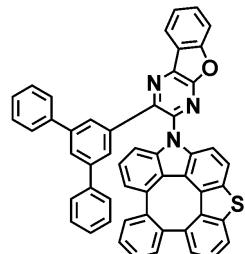
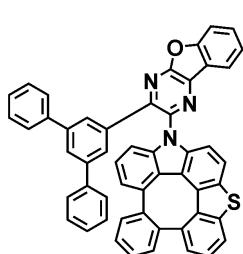
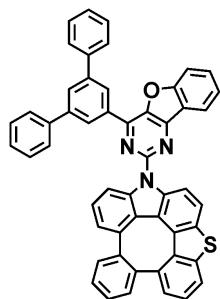
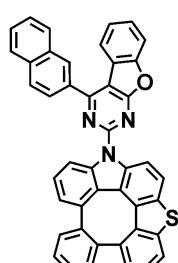
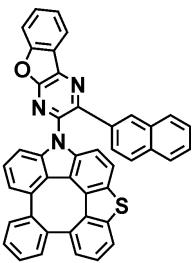
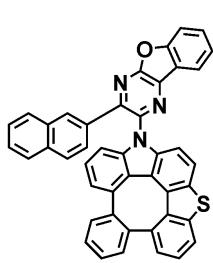
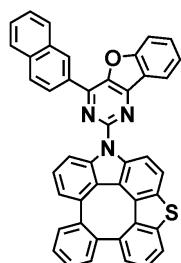
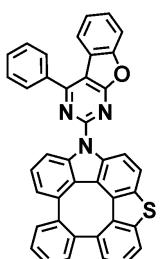
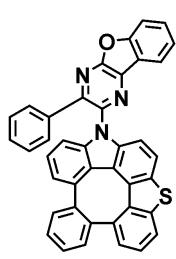


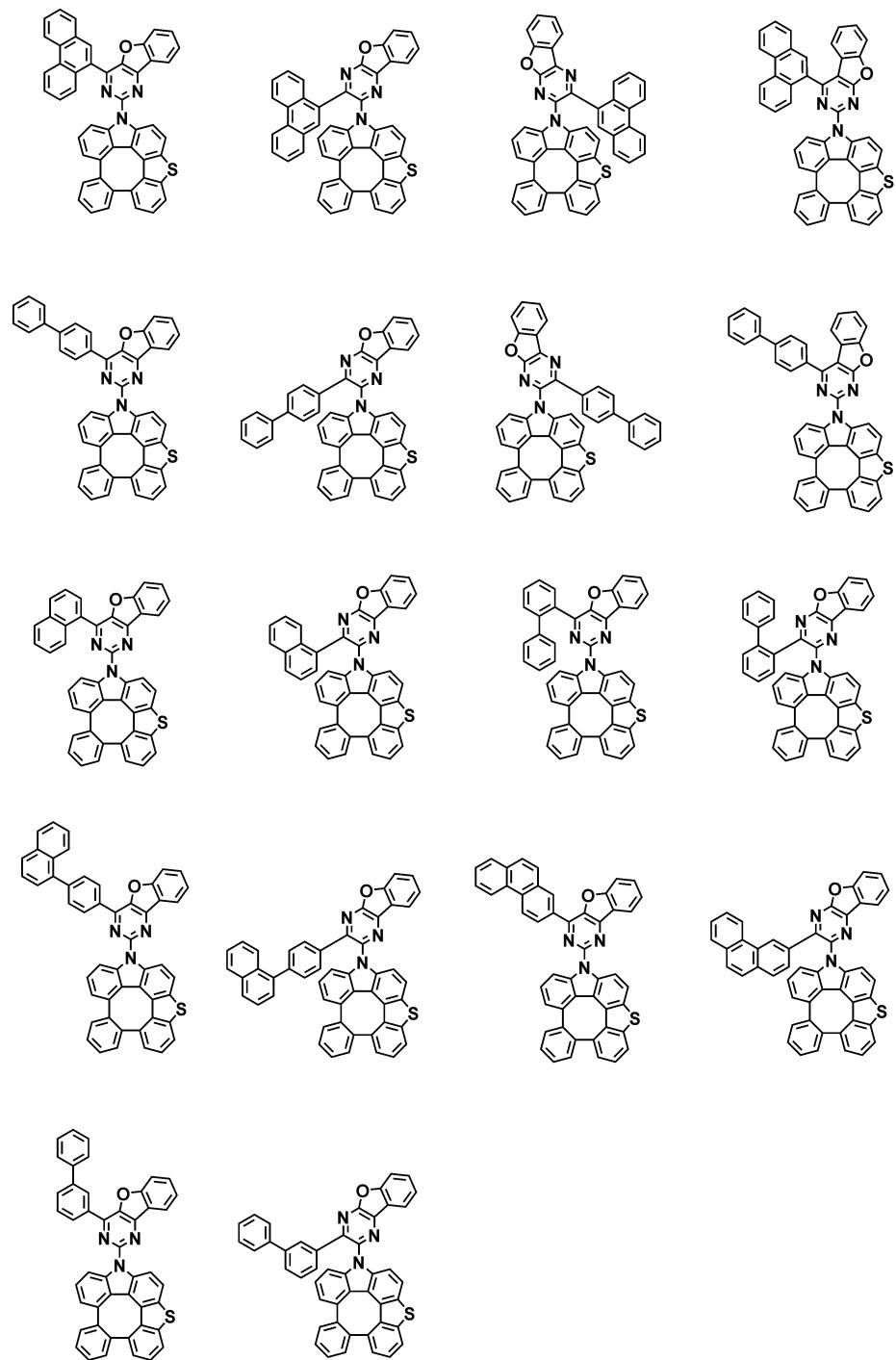


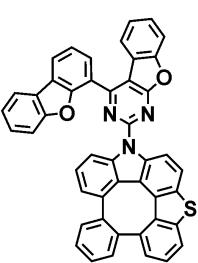
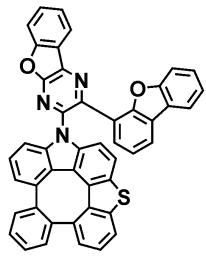
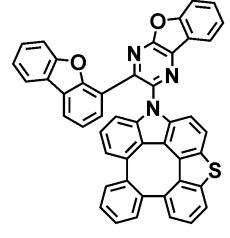
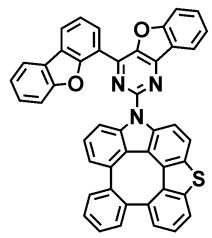
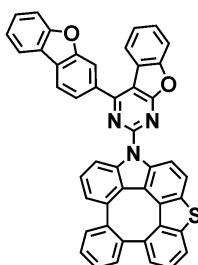
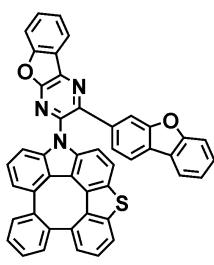
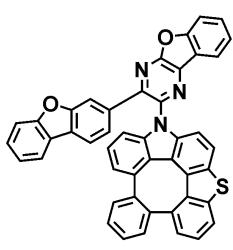
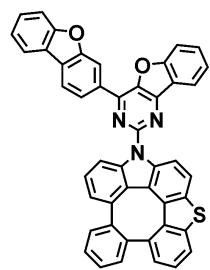
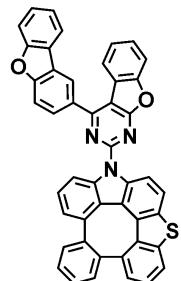
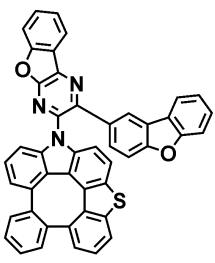
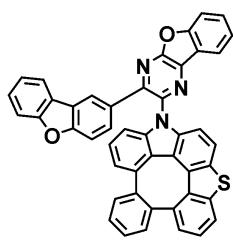
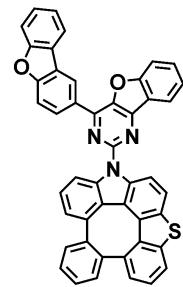
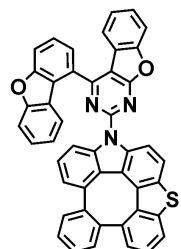
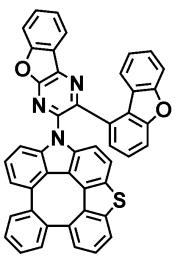
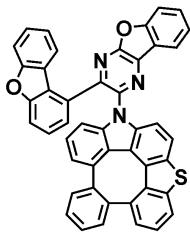
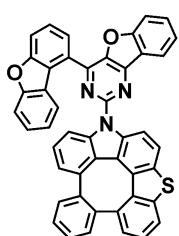


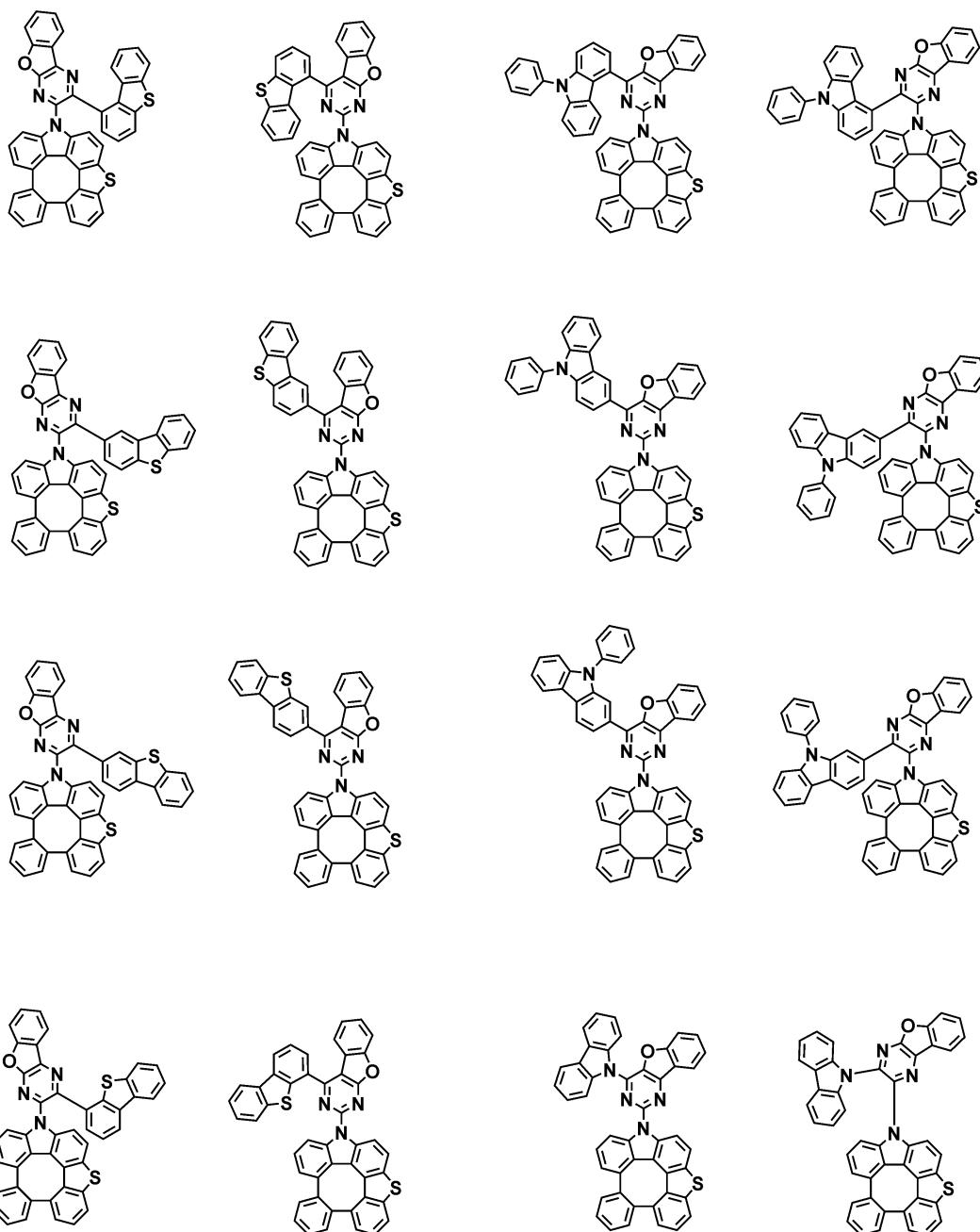


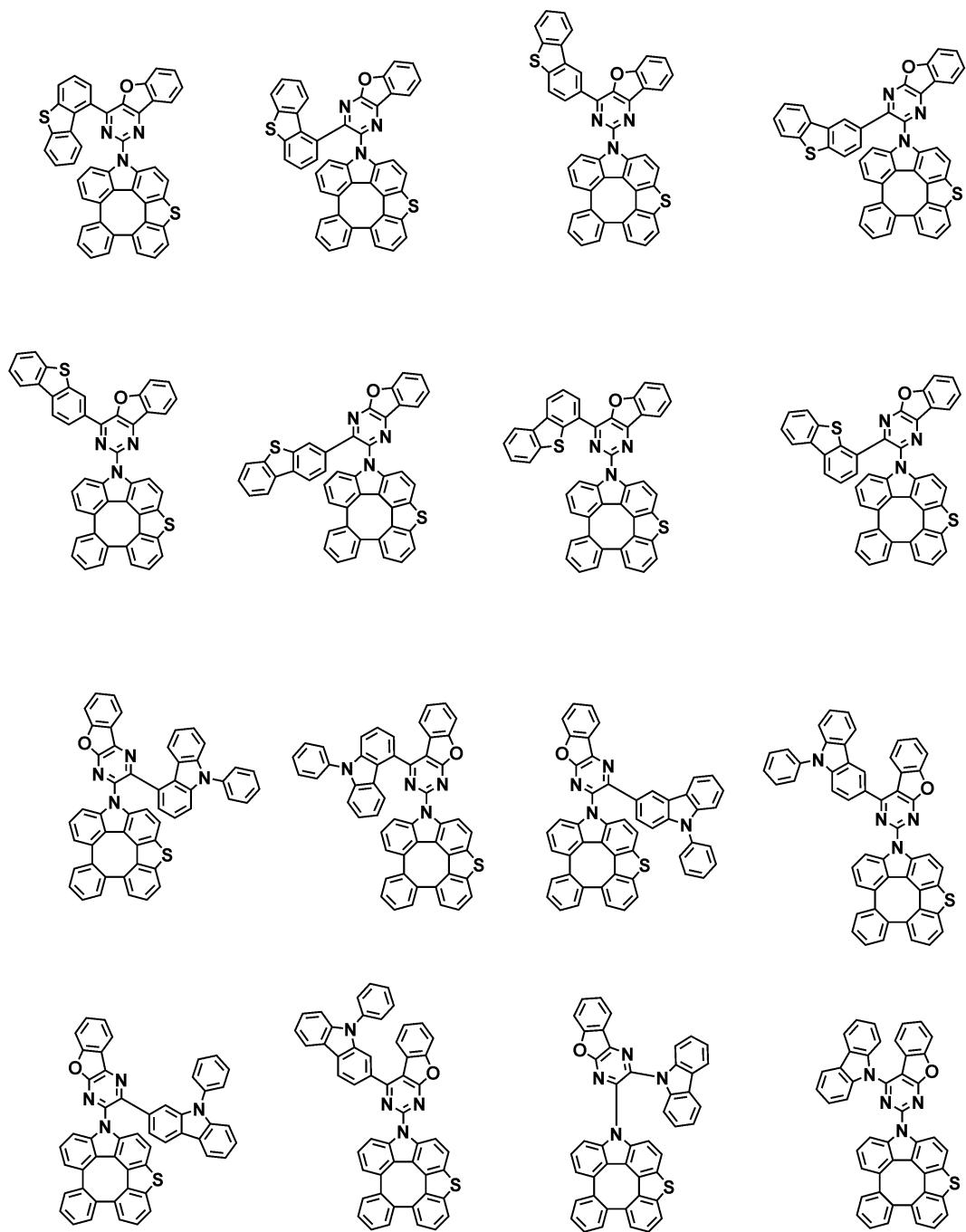


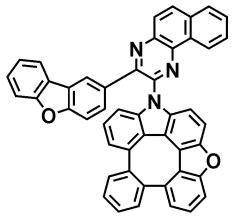
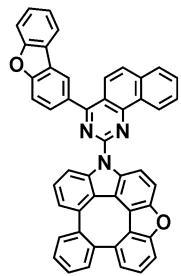
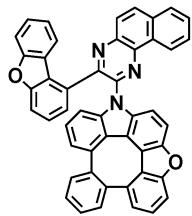
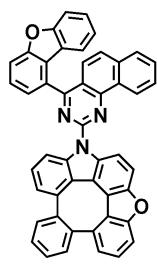
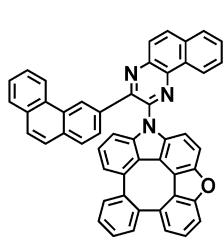
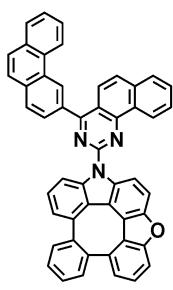
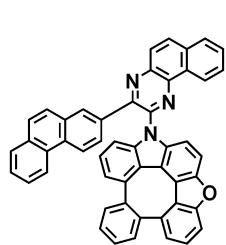
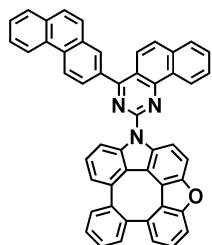
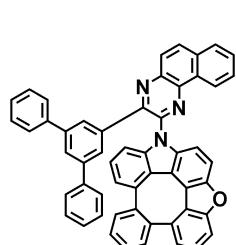
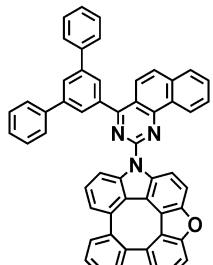
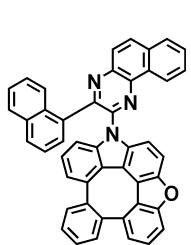
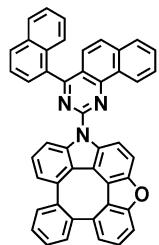
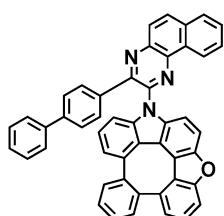
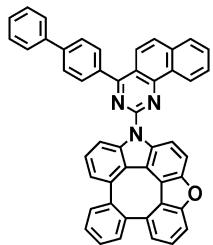
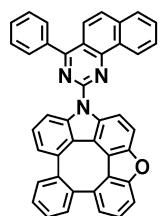


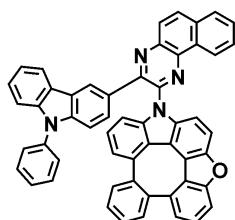
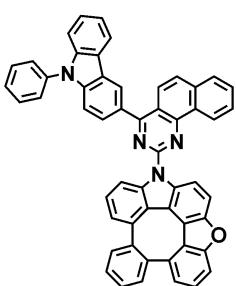
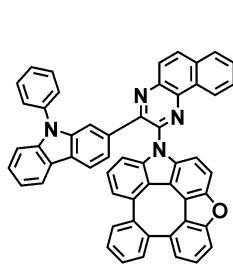
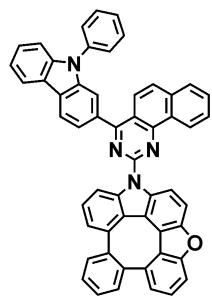
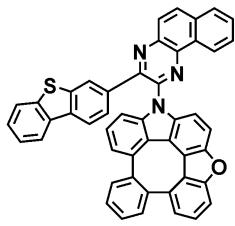
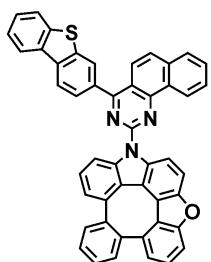
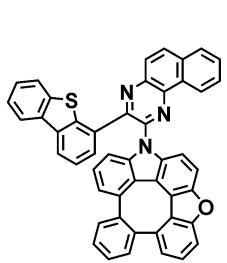
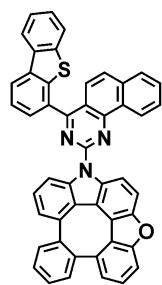
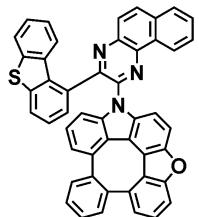
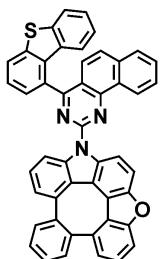
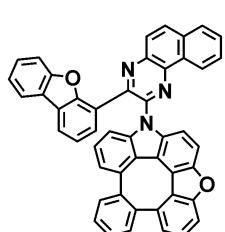
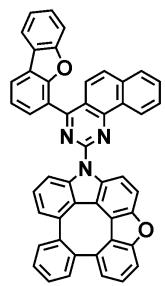


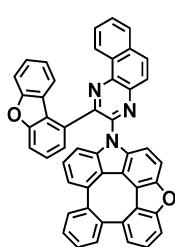
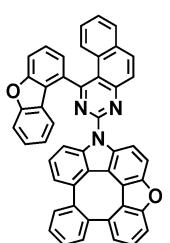
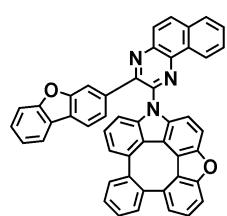
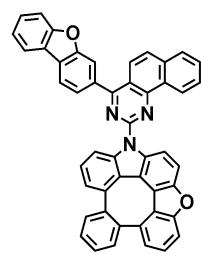
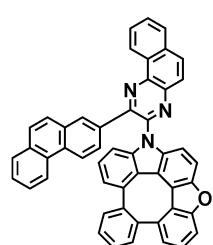
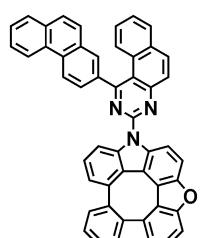
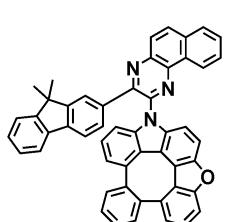
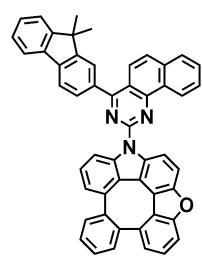
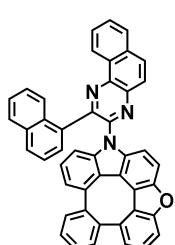
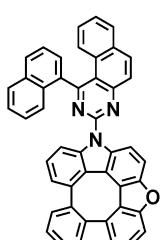
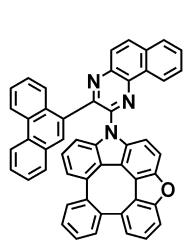
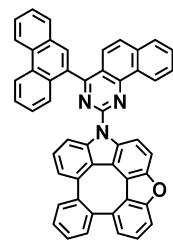
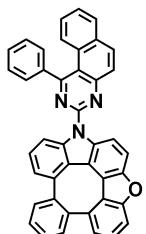
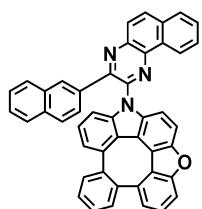
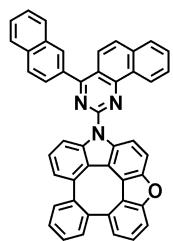


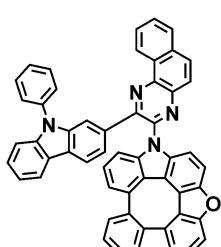
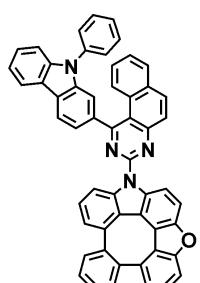
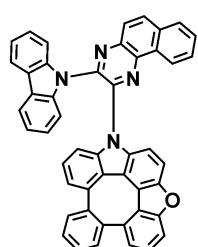
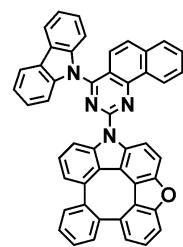
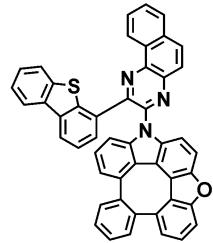
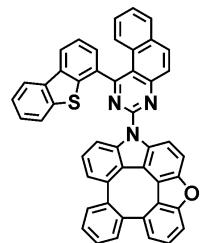
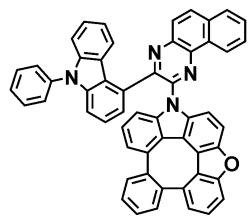
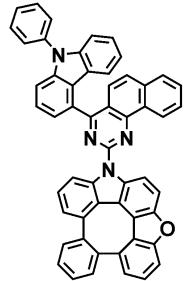
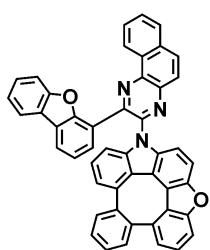
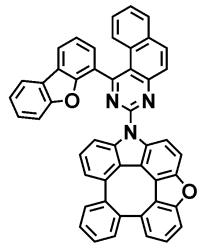
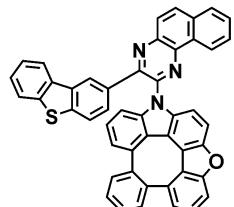
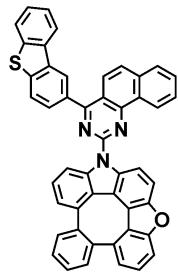


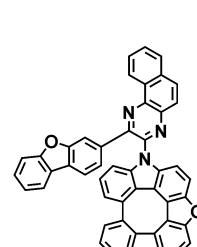
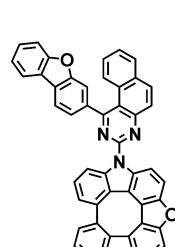
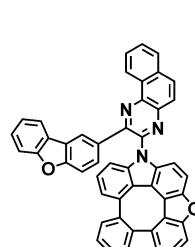
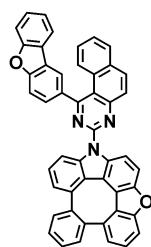
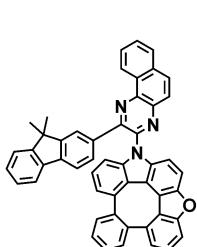
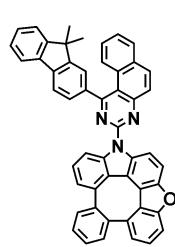
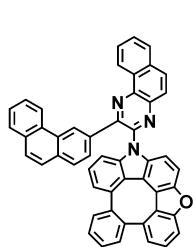
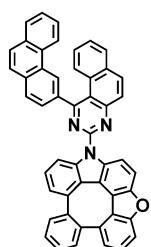
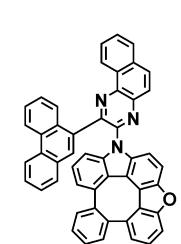
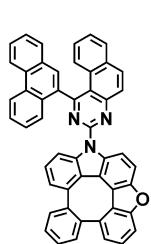
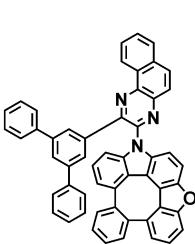
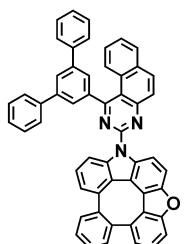
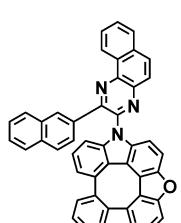
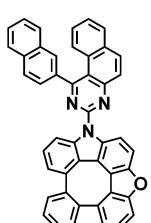
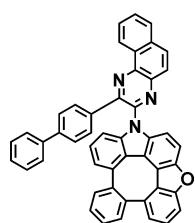
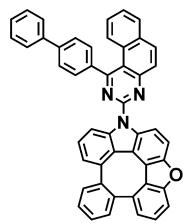


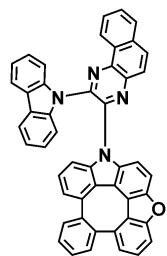
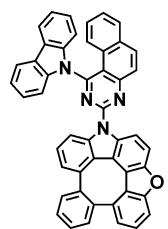
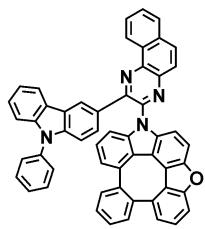
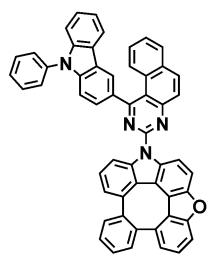
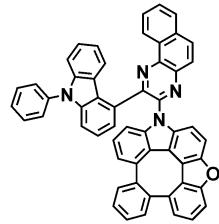
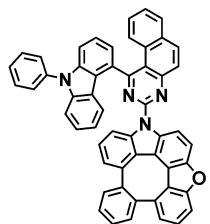
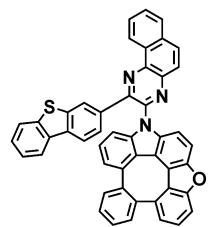
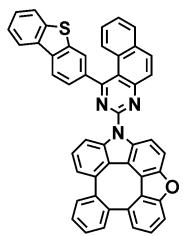
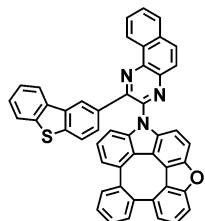
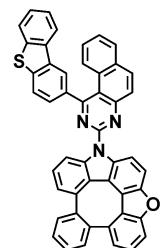
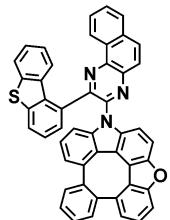
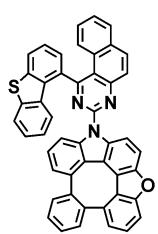


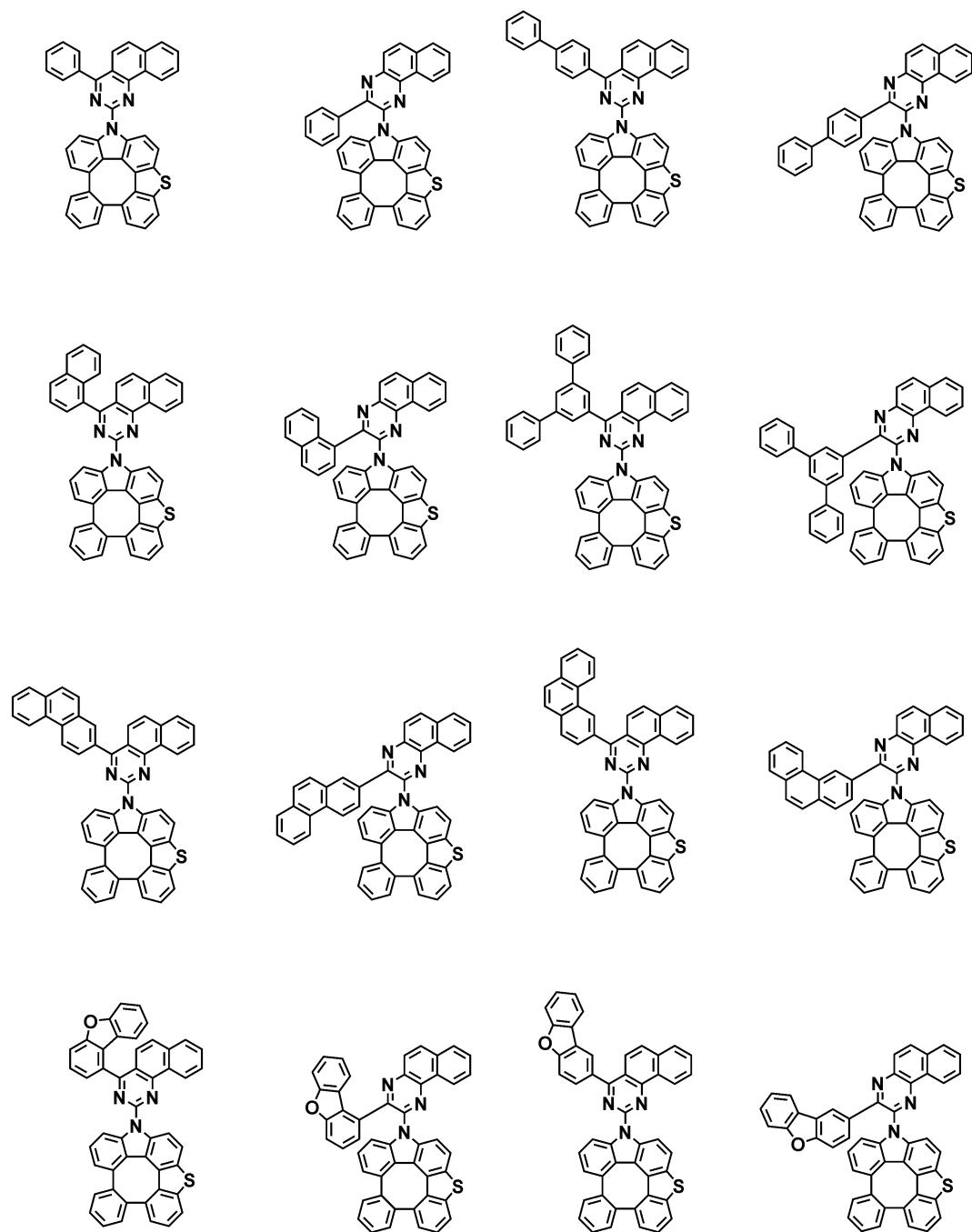


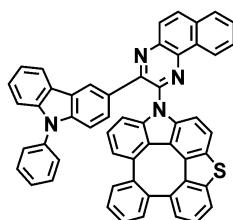
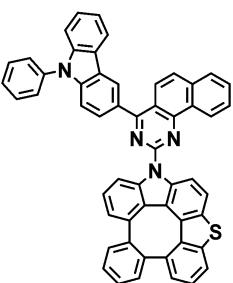
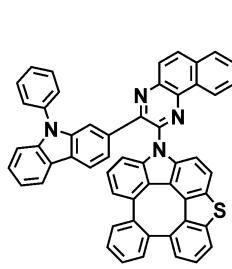
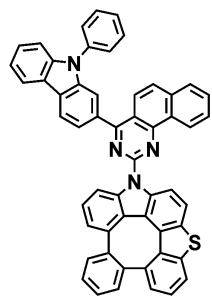
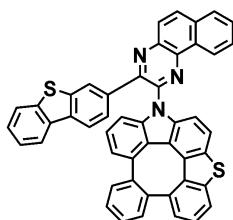
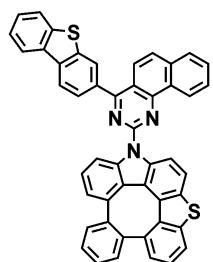
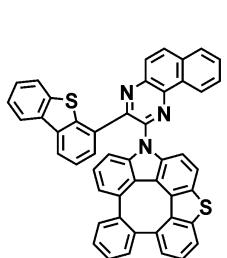
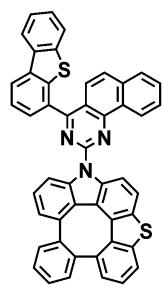
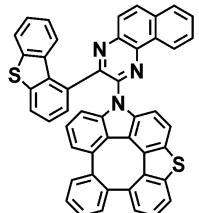
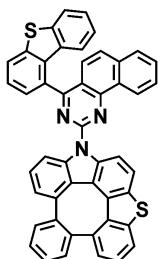
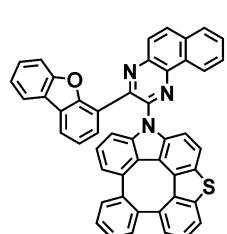
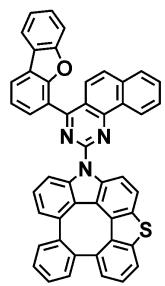


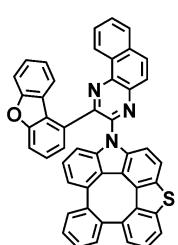
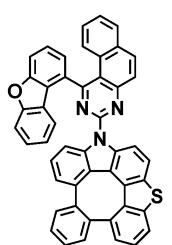
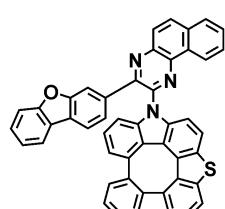
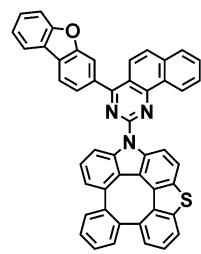
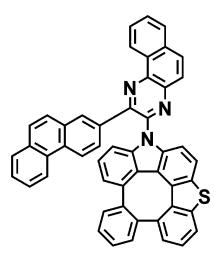
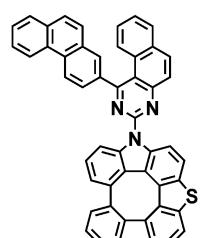
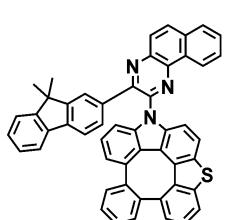
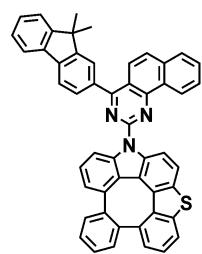
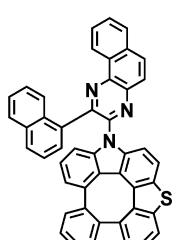
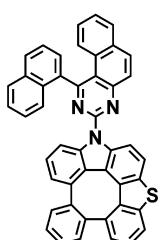
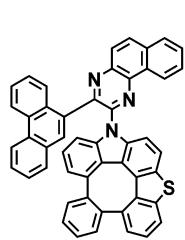
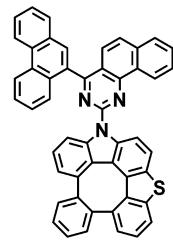
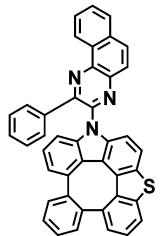
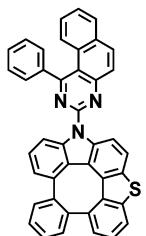
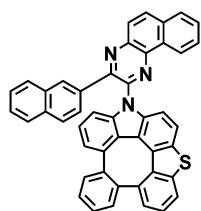
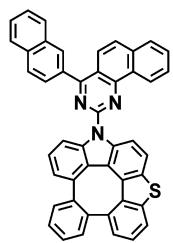


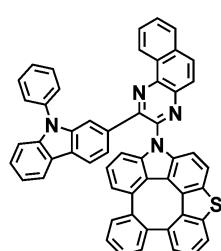
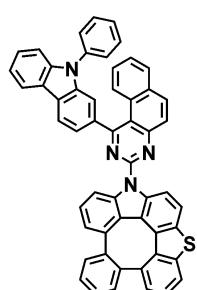
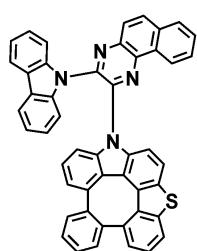
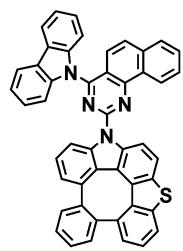
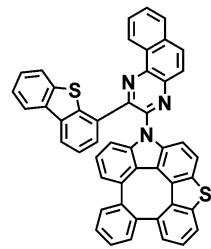
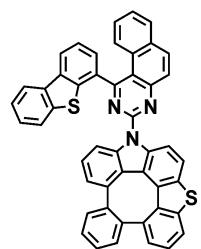
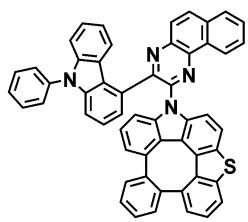
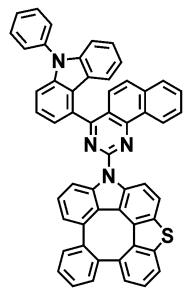
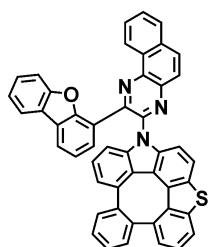
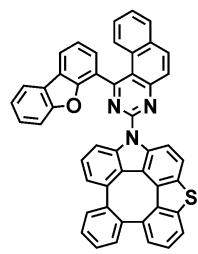
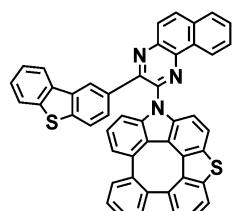
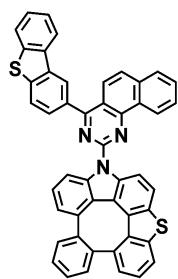


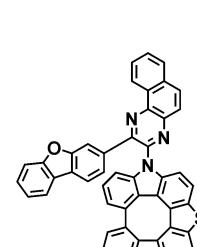
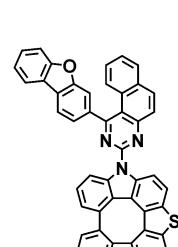
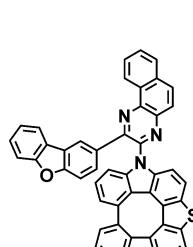
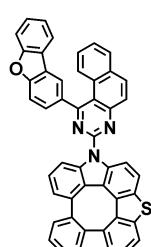
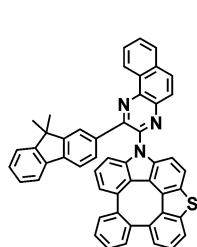
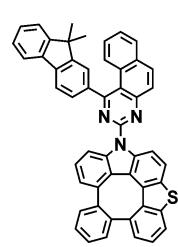
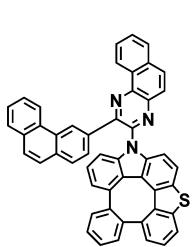
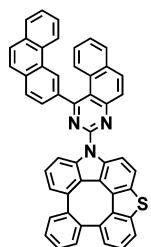
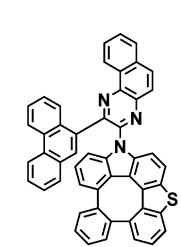
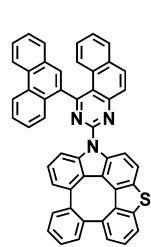
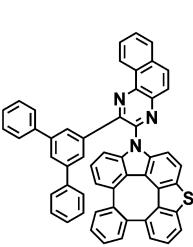
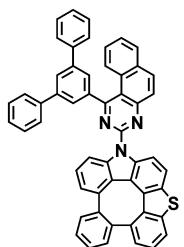
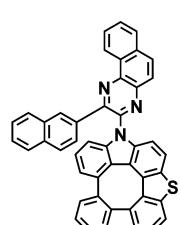
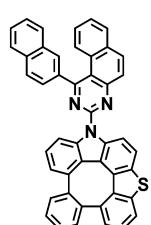
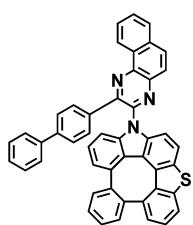
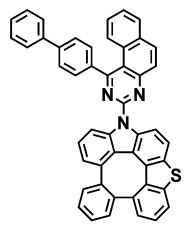


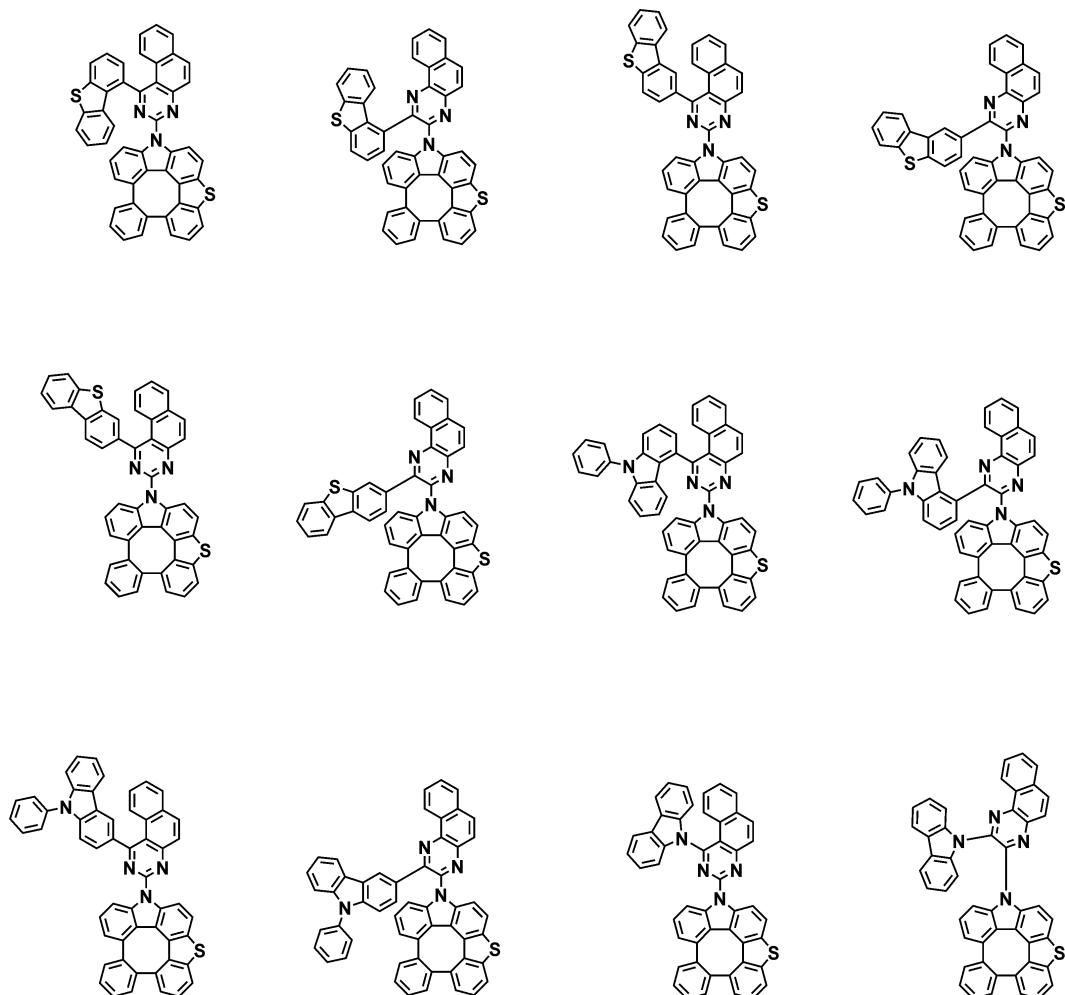












청구항 8

제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 발광 층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 발광층은 제1항 내지 제7항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001]

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002]

일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 넓은 시야각, 우수한 콘트라스트, 빠른 응답 시간을 가지며, 휴도, 구동 전압 및 응답 속도 특성이 우수하여 많은 연구가 진행되고 있다.

[0004]

유기 발광 소자는 일반적으로 양극과 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 상기 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이

다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0006] 상기와 같은 유기 발광 소자에 사용되는 유기물에 대하여 새로운 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호

발명의 내용

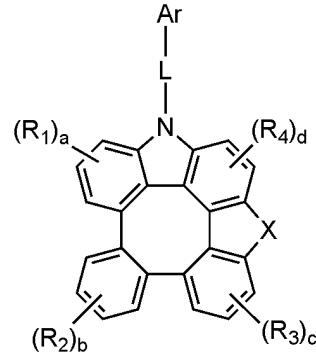
해결하려는 과제

[0009] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[화학식 1]



[0013] [0014]

상기 화학식 1에서,

[0015] X는 O 또는 S이고,

[0016] L은 단일결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,

[0017] Ar은 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤�테로아릴이고,

[0018] R₁ 내지 R₄는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로겐; 시아노; 니트로; 아미노; 치환 또는 비치환된 C₁₋₆₀ 알킬; 치환 또는 비치환된 C₃₋₆₀ 사이클로알킬; 치환 또는 비치환된 C₂₋₆₀ 알케닐; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상을 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

[0019] a는 0 내지 3의 정수이고,

[0020] b는 0 내지 4의 정수이고,

[0021] c는 0 내지 3의 정수이고,

[0022] d는 0 내지 2의 정수이고,

[0023] a, b, c 및 d가 각각 2 이상인 경우, 괄호 안의 치환기들은 서로 동일하거나 상이하다.

[0025] 또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 발광층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하

는, 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0026] 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용되어, 유기 발광 소자의 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

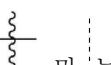
[0028] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자억제층(7), 정공저지층(8), 전자주입 및 수송층(9) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

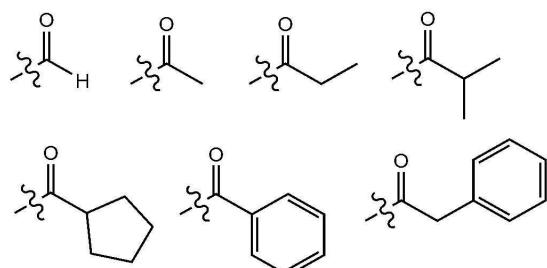
[0029] 이하, 본 발명의 이해를 돋기 위하여 보다 상세히 설명한다.

(용어의 정의)

[0032] 본 명세서에서,  및 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

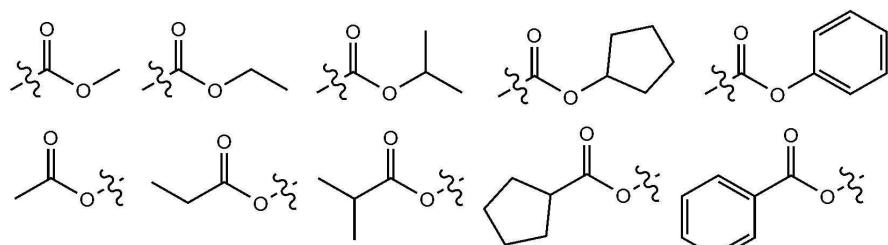
본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로겐기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬슬록시기; 아릴슬록시기; 실릴기; 봉소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐이기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.

[0036] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



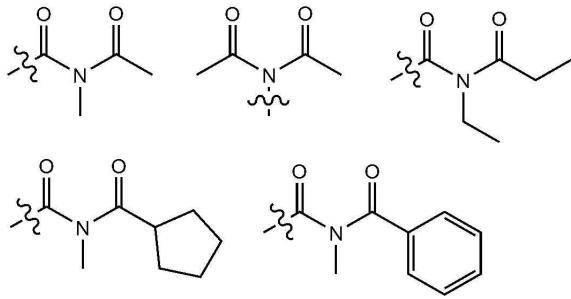
[0037]

[0039] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0040]

[0042] 본 명세서에 있어서, 이미드기는 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0043]

본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0047]

본 명세서에 있어서, 봉소기는 구체적으로 트리메틸봉소기, 트리에틸봉소기, t-부틸디메틸봉소기, 트리페닐봉소기, 페닐봉소기 등이 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0049]

본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0051]

본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 사이클로펜틸메틸, 사이클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0053]

본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0055]

본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

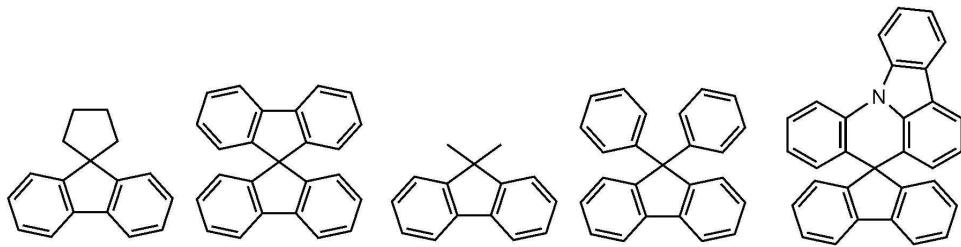
[0057]

본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐이기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0059]

본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스페로 구조를 형성할 수 있다.

상기	플루오레닐기가	치환되는	경우,
----	---------	------	-----



등이 될 수 있다. 다만,

이에 한정되는 것은 아니다.

[0061]

본 명세서에 있어서, 헤테로아릴은 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로아릴의 예로는 잔텐(xanthene), 티오잔텐(thioxanthene), 티오펜기, 퓨란기, 퍼롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 퍼리딜기, 비퍼리딜기, 퍼리미딜기, 트리아진기, 아크리딜기, 퍼리다진기, 퍼라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 퍼리도 퍼리미디닐기, 퍼리도 퍼라지닐기, 퍼라지노 퍼라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 폐난쓰를린기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 폐노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063]

본 명세서에 있어서, 방향족 고리는 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하면서 분자 전체가 방향족성(aromaticity)을 갖는 축합단환 또는 축합다환 고리를 의미한다. 상기 방향족 고리의 탄소수는 6 내지 60, 또는 6 내지 30, 또는 6 내지 20이나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 상기 방향족 고리로는 벤젠 고리, 나프탈렌 고리, 안트라센 고리, 폐난쓰렌 고리, 파이렌 고리 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0065]

본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴실릴기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0067]

(화합물)

[0068]

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 벤조퓨로[2,3-c]카바졸의 1번 및 12번 위치가 1,2-페닐렌 링커에 의해 연결된 8각형 코어 및 상기 코어에 포함된 N 원자가 헤테로아릴 치환기로 치환된 구조를 갖는다. 이러한 화합물은 상기 8각형 코어 구조를 포함하지 않는 화합물 및 상기 코어에 포함된 N 원자에 헤테로아릴이 아닌 다른 치환기가 치환된 화합물에 비하여, 도편트로의 에너지 전달율이 높고, 전자 및 정공에 대한 안정도가 향상될 수 있다. 이에 따라, 이러한 화합물을 채용한 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 동시에 향상될 수 있다.

[0070]

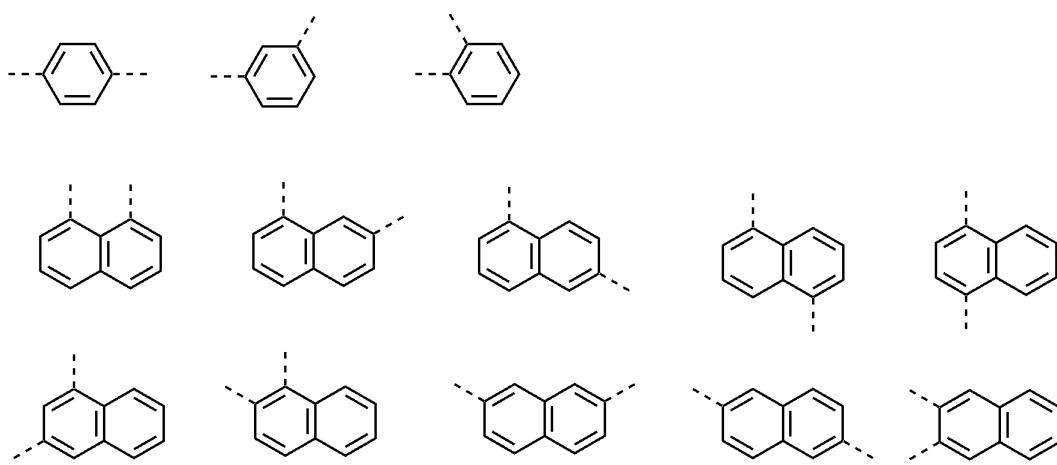
바람직하게는, L은 단일결합; 또는 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 C₆₋₂₀ 아릴렌일 수 있다. 구체적으로, 상기 중수소로 치환된 C₆₋₂₀ 아릴렌은 모든 수소가 중수소로 치환되어 있을 수 있다.

[0072]

보다 바람직하게는, L은 단일결합; 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 폐닐렌; 또는 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 나프틸렌일 수 있다. 구체적으로, L은 단일결합, 폐닐렌, 또는 나프틸렌일 수 있다.

[0074]

예를 들어, L은 단일결합 또는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0075]

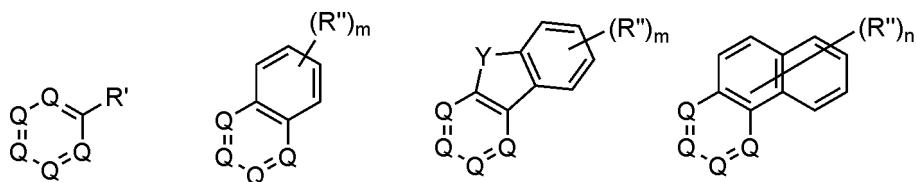
[0078] 바람직하게는, Ar은 비치환되거나, 또는 중수소 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된, N, O 및 S 중 1개 이상의 혼테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 혼테로아릴일 수 있다.

[0080]

보다 바람직하게는, Ar은 비치환되거나, 또는 중수소 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된, 적어도 1개의 N 원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 혼테로아릴; 비치환되거나, 또는 중수소 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된, 적어도 1개의 N 원자 및 적어도 1개의 O 원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 혼테로아릴; 또는 비치환되거나, 또는 중수소 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된, 적어도 1개의 N 원자 및 적어도 1개의 S 원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 혼테로아릴일 수 있다.

[0082]

구체적으로, Ar은 하기 화학식 2A 내지 2D로 표시되는 치환기 중 어느 하나일 수 있다:



[0083]

2A**2B****2C****2D**

[0084]

상기 화학식 2A 내지 2D에서,

[0085]

Y는 O 또는 S이고,

[0086]

Q 중 하나는 상기 화학식 1의 L과 결합되는 C이고, 나머지는 각각 독립적으로, N 또는 CR이고, 단, 나머지 중 적어도 하나는 N이고,

[0087]

R, R' 및 R"는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 혼테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 혼테로아릴이고,

[0088]

여기서, 상기 R, R' 및 R"는 비치환되거나, 또는 중수소, C₁₋₁₀ 알킬 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

[0089]

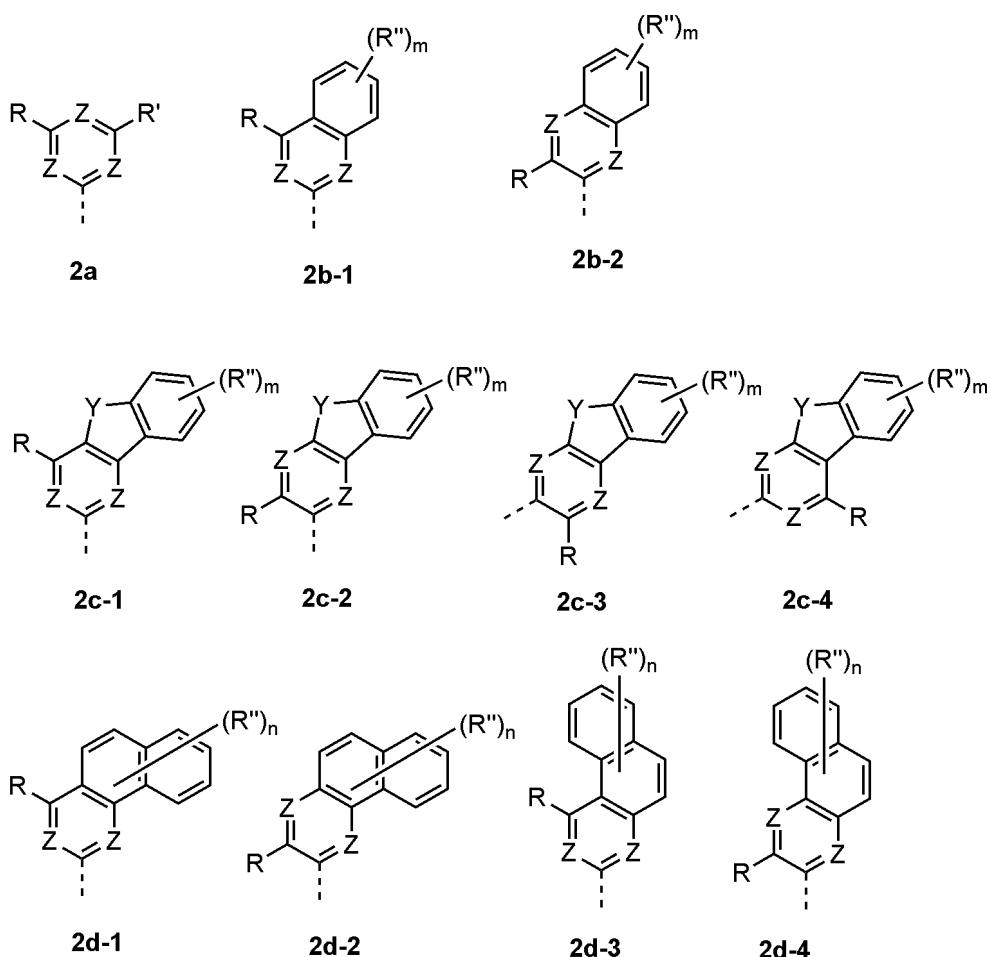
m은 0 내지 4의 정수이고,

[0090]

n은 0 내지 6의 정수이다.

[0092]

보다 구체적으로, Ar은 하기 화학식으로 표시되는 치환기 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0093]

[0094] 상기에서,

[0095] Y는 O 또는 S이고,

[0096] Z는 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, 단, Z 중 적어도 하나는 N이고,

[0097] R, R' 및 R''는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤테로아릴이고,

[0098] 여기서, 상기 R, R' 및 R''는 비치환되거나, 또는 중수소, C₁₋₁₀ 알킬 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

[0099] m은 0 내지 4의 정수이고,

[0100] n은 0 내지 6의 정수이다.

[0102] 바람직하게는, 상기에서,

[0103] Z는 모두 N이고,

[0104] R 및 R'는 각각 독립적으로, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤테로아릴이고,

[0105] 여기서, R 및 R'는 비치환되거나, 또는 중수소, 메틸, 페닐 및 나프틸로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 또는 2개의 치환기로 치환되고,

[0106] R''는 수소 또는 중수소일 수 있다.

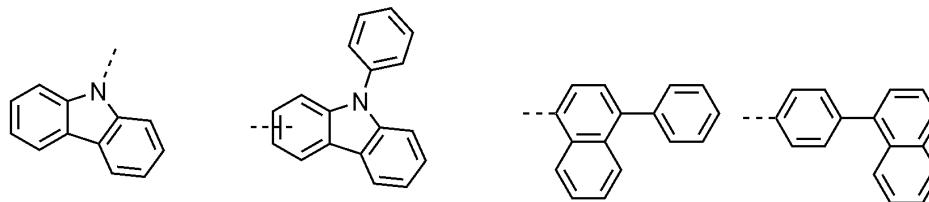
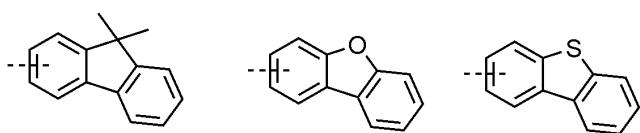
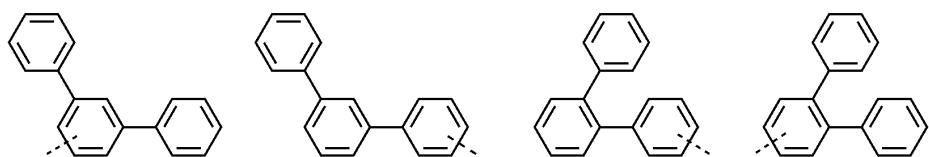
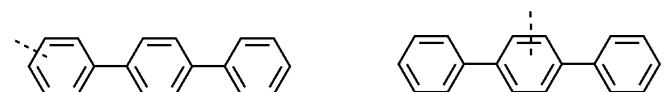
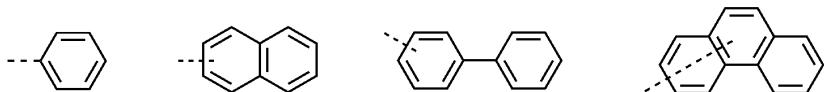
[0108] 보다 바람직하게는,

[0109] R 및 R'는 각각 독립적으로, 페닐, 나프틸페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페닐나프틸, 페난쓰레닐, 9,9-디

메틸플루오레닐, 카바졸일, 9-페닐카바졸일, 디벤조퓨라닐, 또는 디벤조티오페닐이고,

[0110] R"는 수소, 또는 중수소일 수 있다.

[0112] 예를 들어, R 및 R'는 각각 독립적으로, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0113]

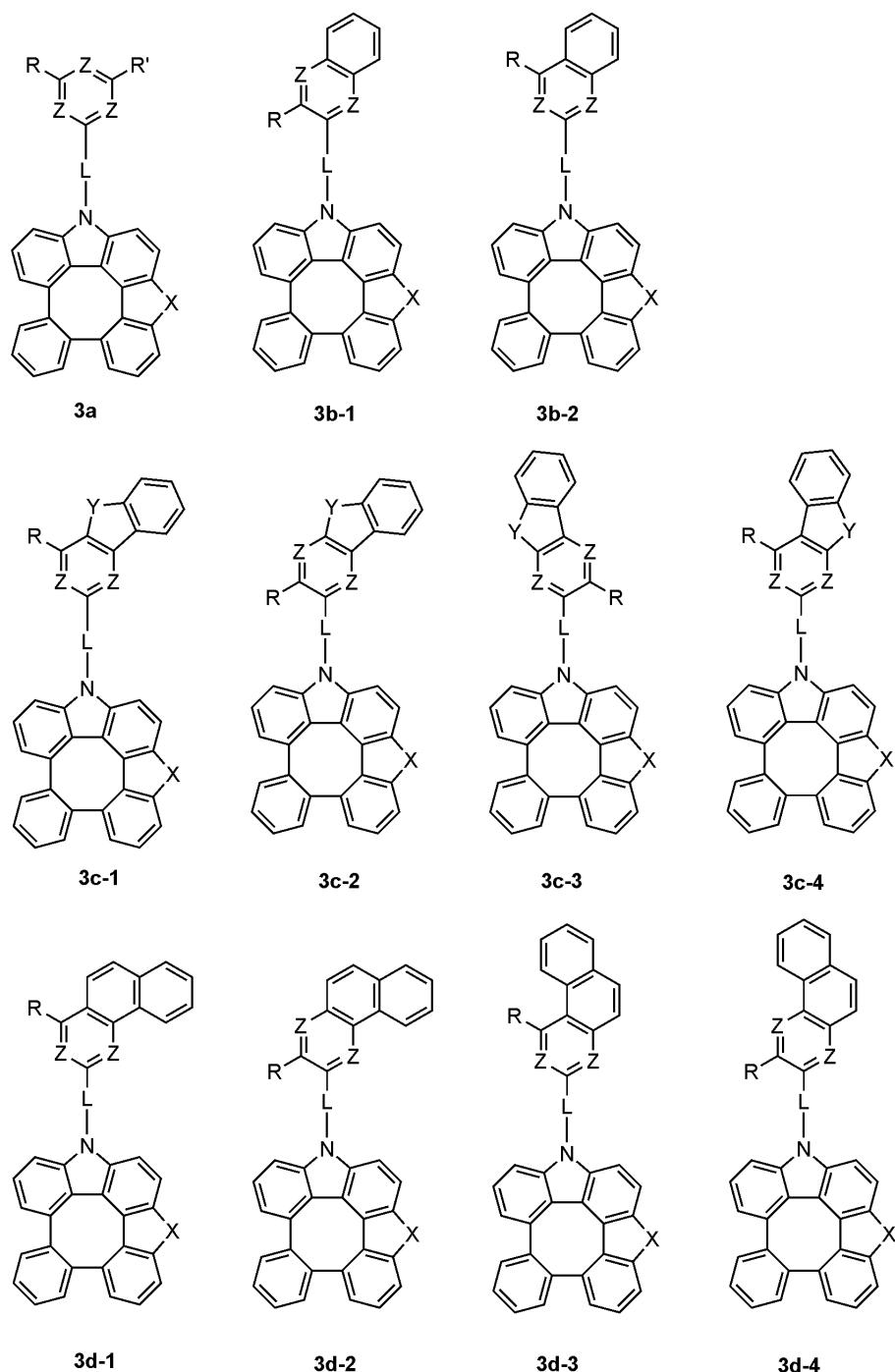
또한, m은 0, 1, 2, 3, 또는 4이고, n은 0, 1, 2, 3, 4, 5, 또한 6일 수 있다.

[0117]

바람직하게는, R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로, 수소, 또는 중수소이다. 이때, R_1 의 치환기의 개수를 나타내는 a는 0, 1, 2, 또는 3이고, R_2 의 치환기의 개수를 나타내는 b는 0, 1, 2, 3, 또는 4이고, R_3 의 치환기의 개수를 나타내는 c는 0, 1, 2, 또는 3이고, R_4 의 치환기의 개수를 나타내는 d는 0, 1, 또는 2이다. 예를 들어, a, b, c 및 d는 각각 독립적으로, 0 또는 1이다.

[0119]

구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 상기 화합물을 하기 화학식 3a, 3b-1, 3b-2, 3c-1 내지 3c-4 및 3d-1 내지 3d-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



[0121]

[0122] 상기 화학식 3a, 3b-1, 3b-2, 3c-1 내지 3c-4 및 3d-1 내지 3d-4에서,

[0123] Y는 O 또는 S이고,

[0124] Z는 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, 단, Z 중 적어도 하나는 N이고,

[0125] R 및 R'는 각각 독립적으로, C₆₋₂₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₂₀ 헤�테로아릴이고,

[0126] 여기서, 상기 R 및 R'는 비치환되거나, 또는 중수소, C₁₋₁₀ 알킬 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

[0127] X 및 L은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

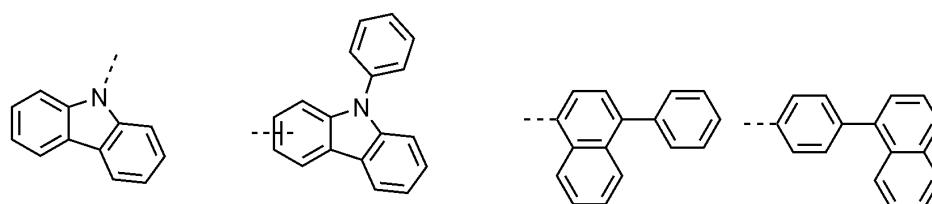
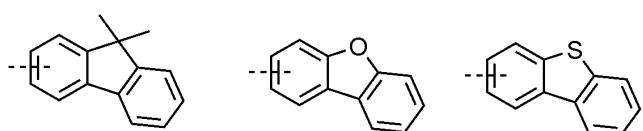
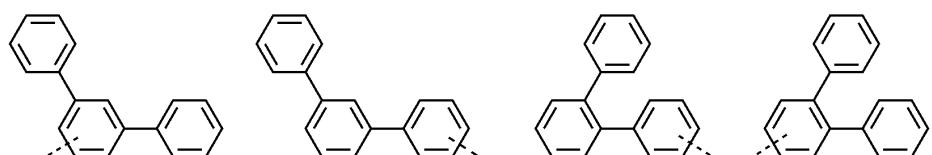
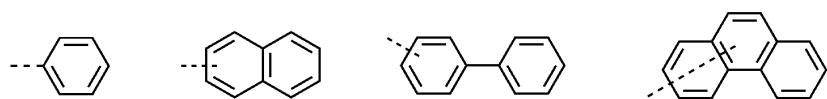
[0129] 상기 화학식 3a, 3b-1, 3b-2, 3c-1 내지 3c-4 및 3d-1 내지 3d-4에서,

[0130]

Z는 모두 N일 수 있고,

[0131]

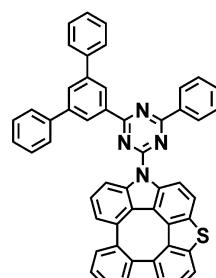
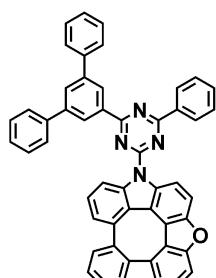
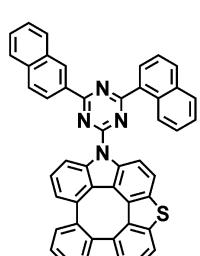
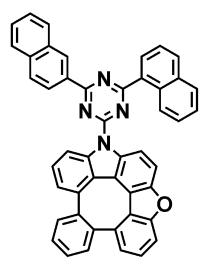
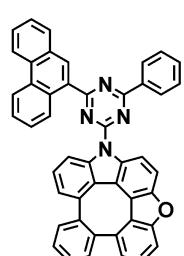
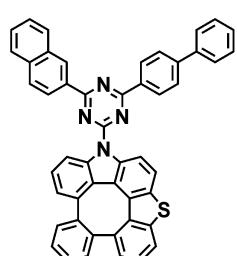
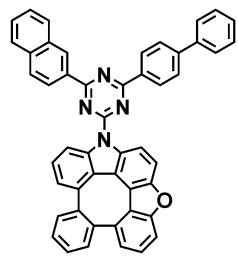
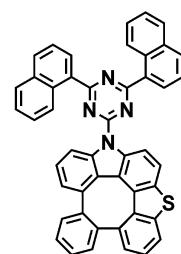
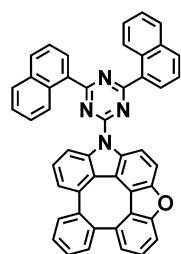
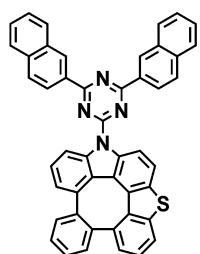
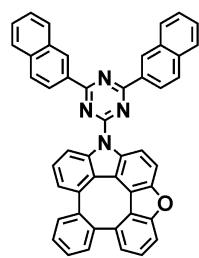
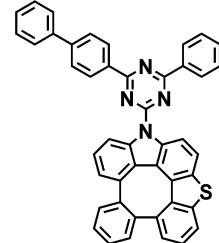
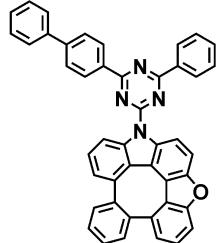
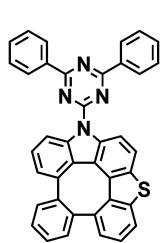
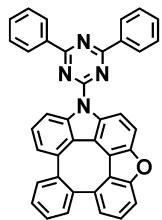
R 및 R'는 각각 독립적으로, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다::



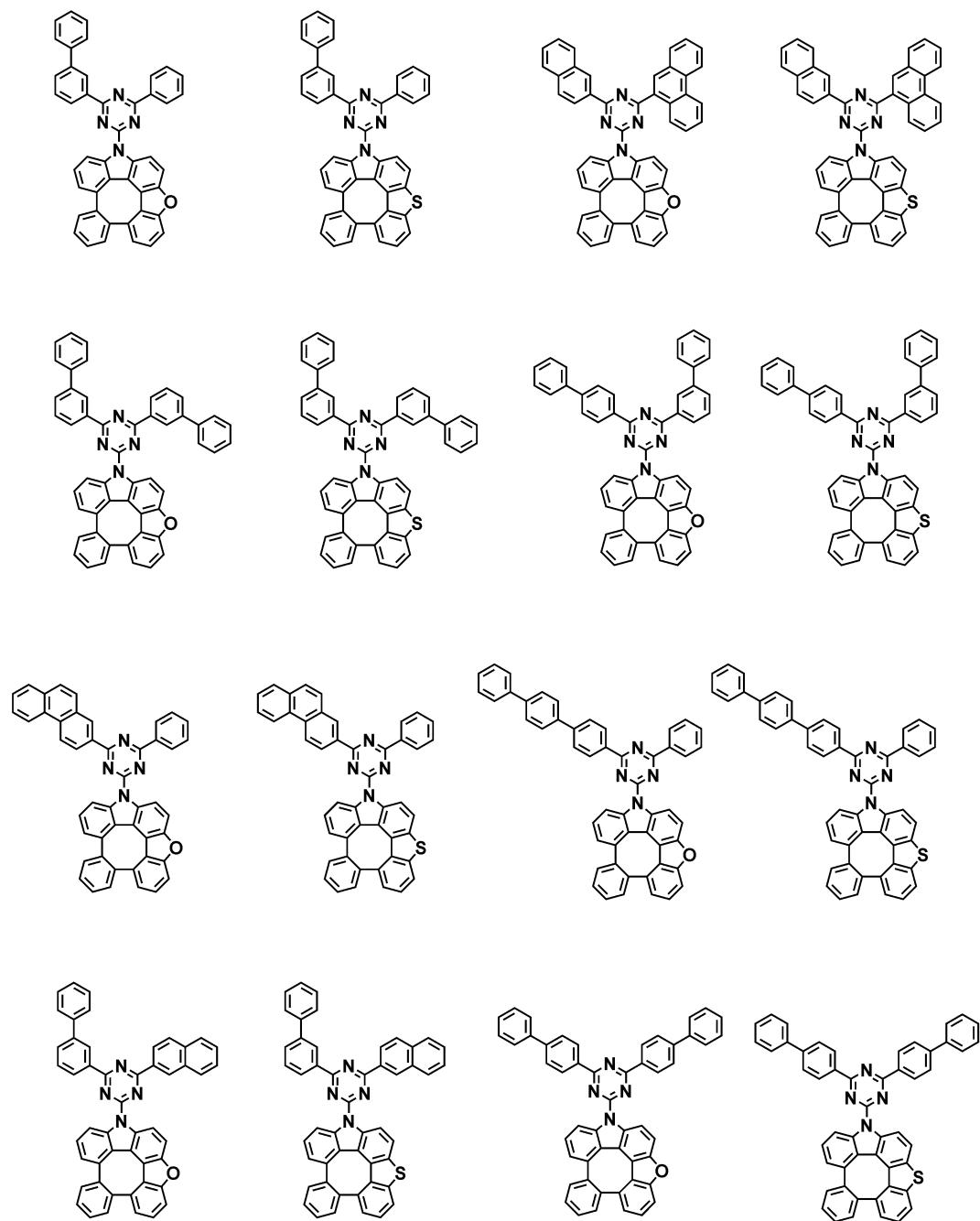
[0132]

[0134]

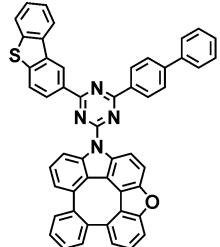
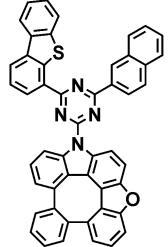
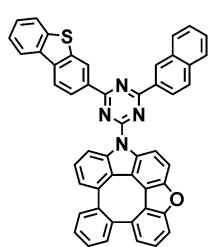
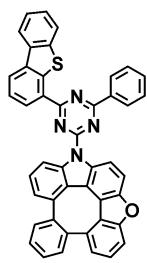
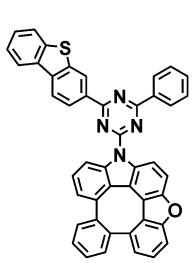
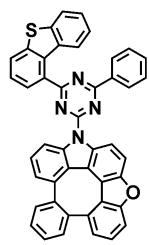
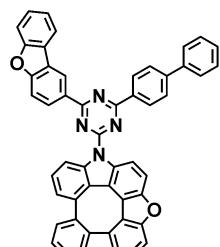
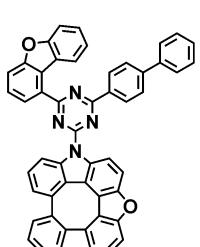
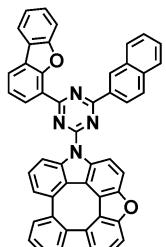
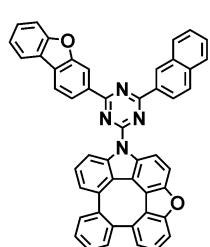
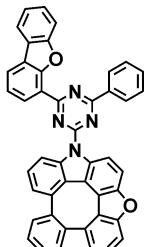
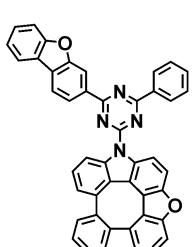
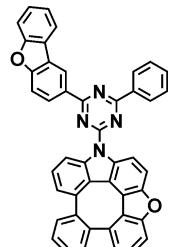
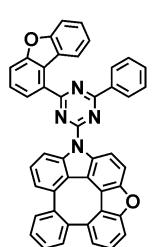
예를 들어, 상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나이다:



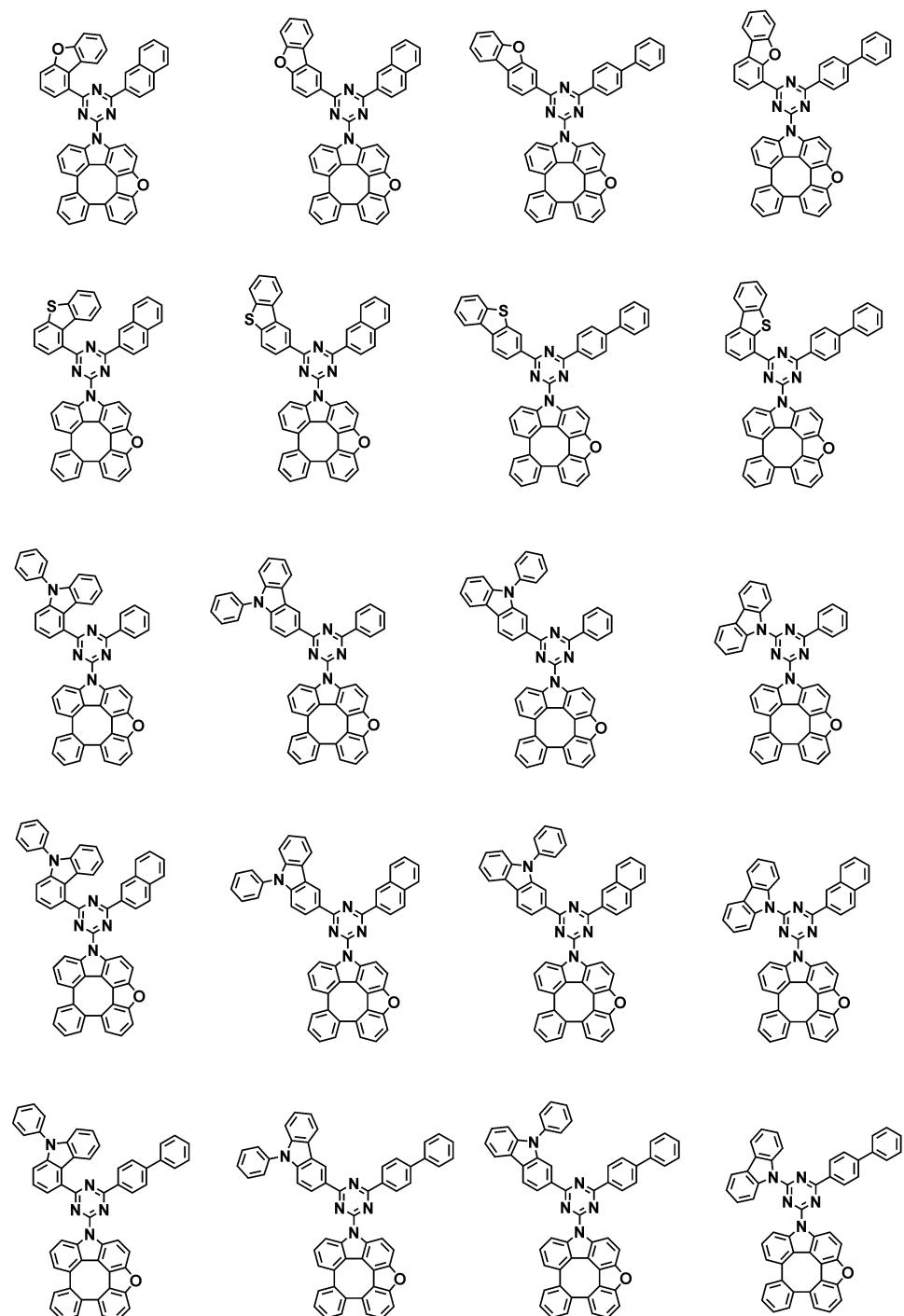
[0136]



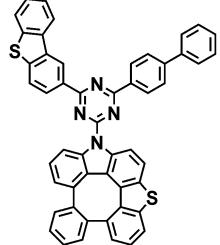
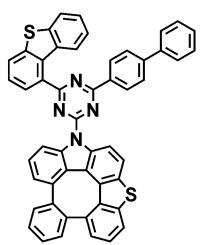
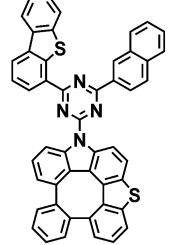
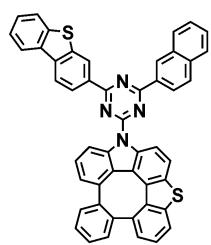
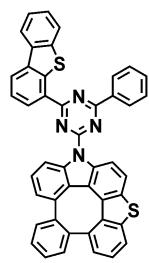
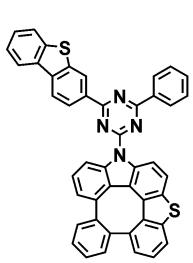
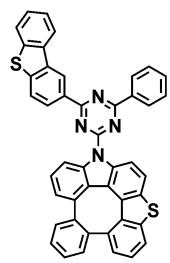
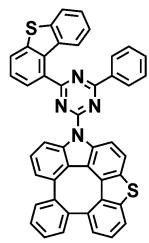
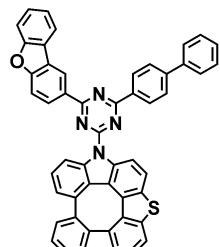
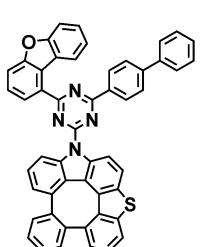
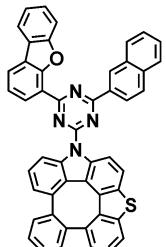
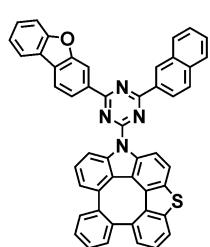
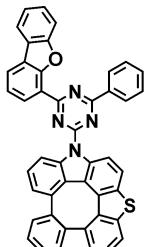
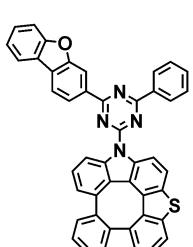
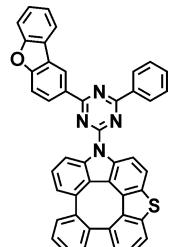
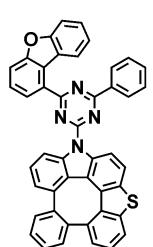
[0137]



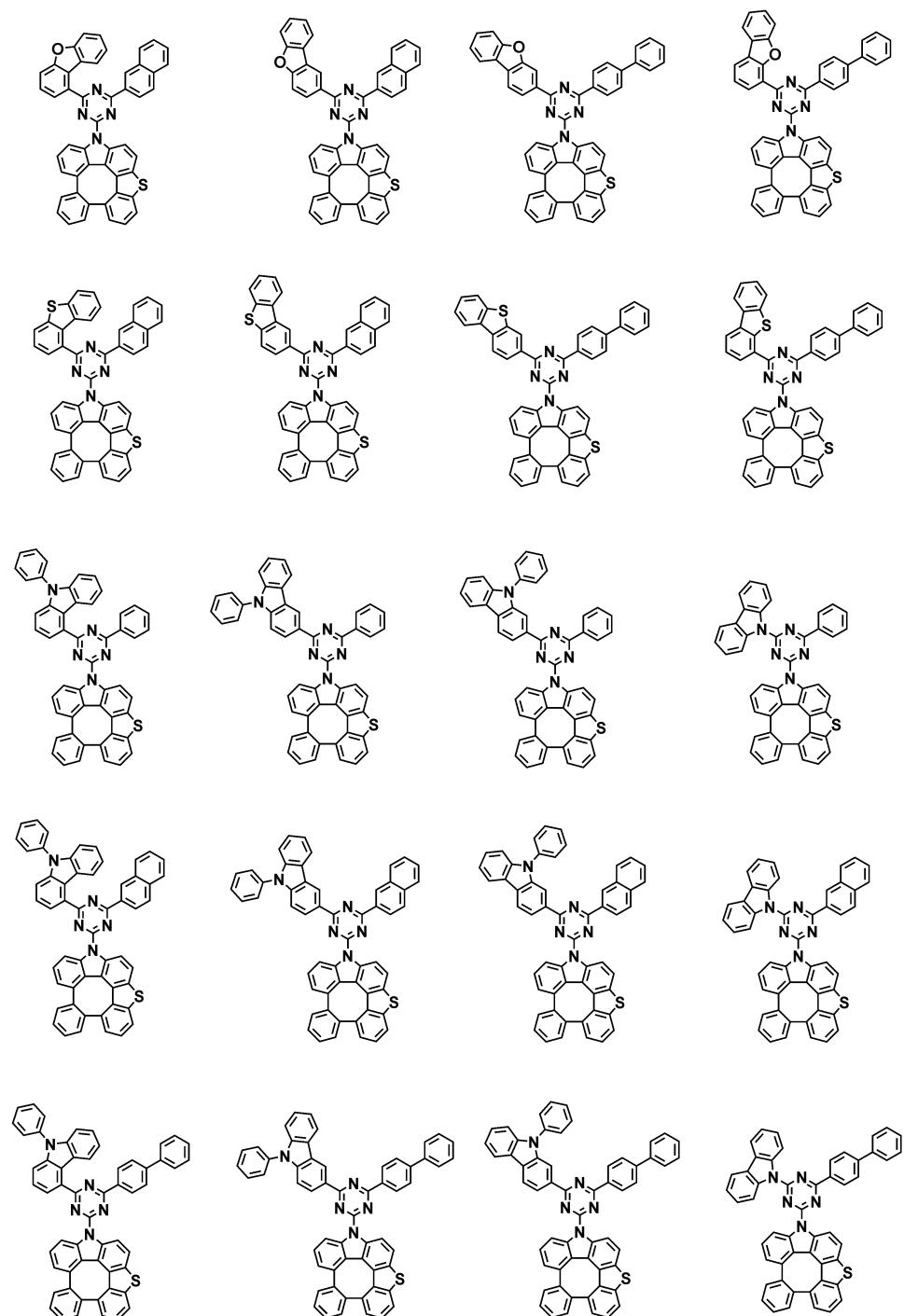
[0138]



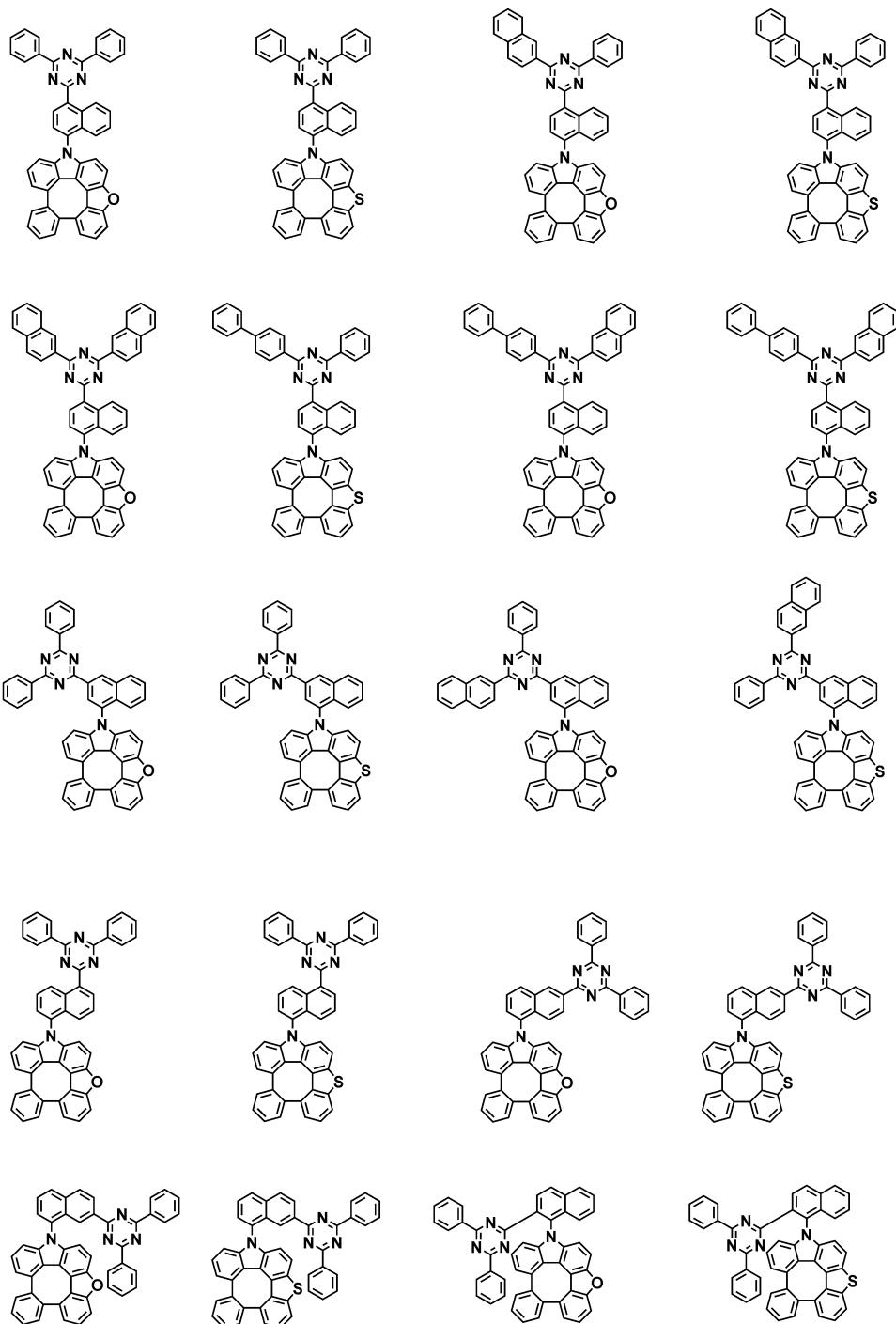
[0139]



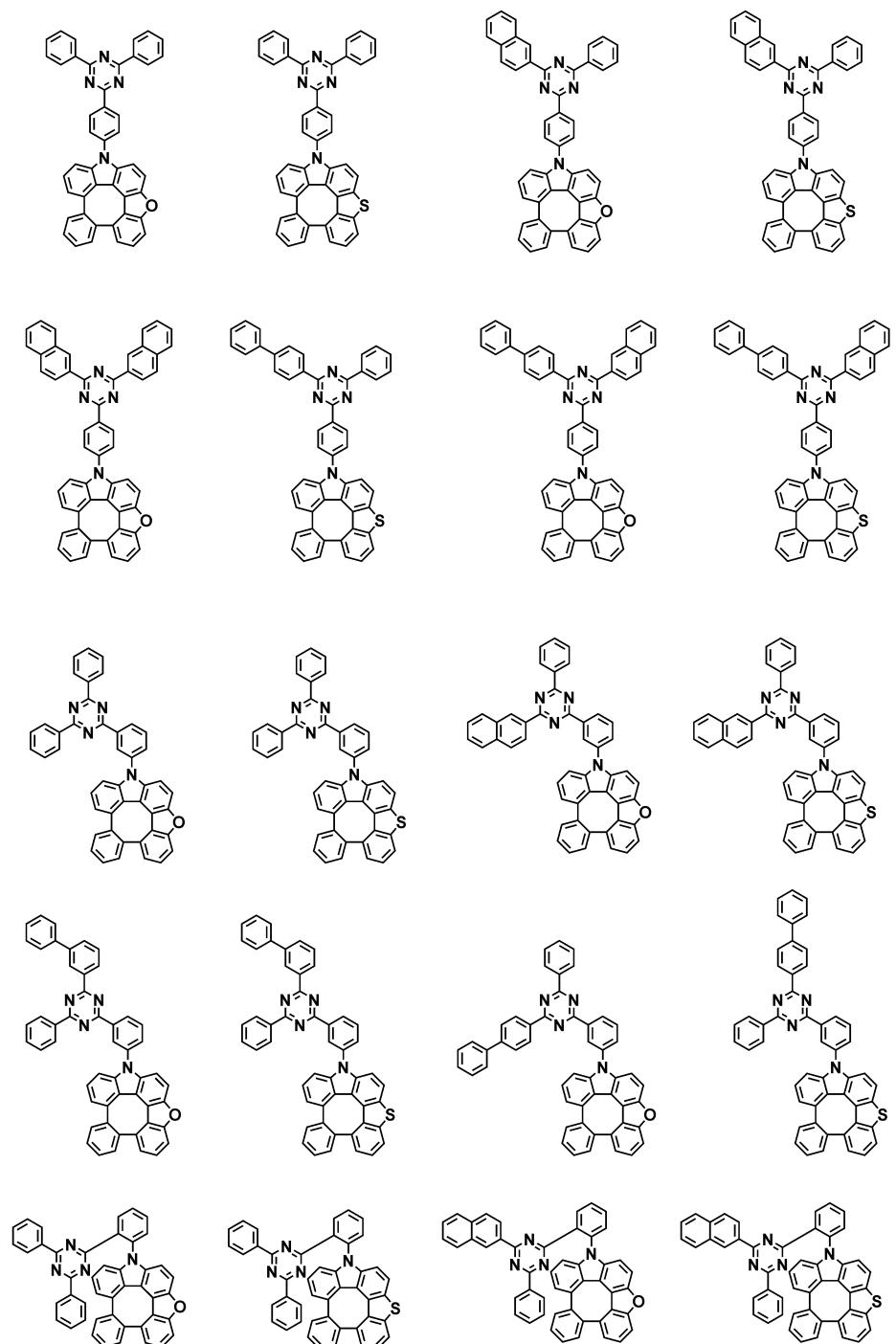
[0140]



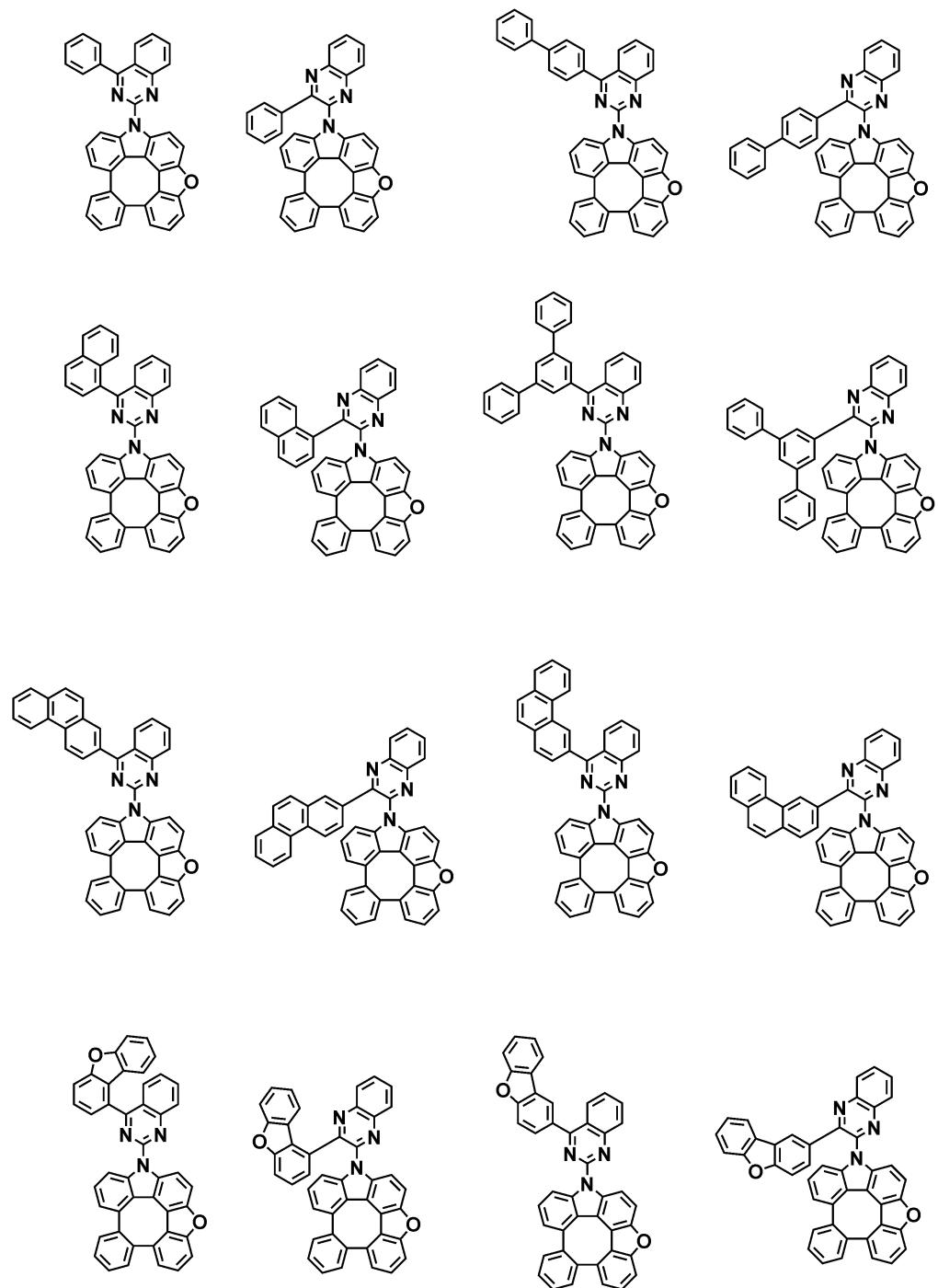
[0141]



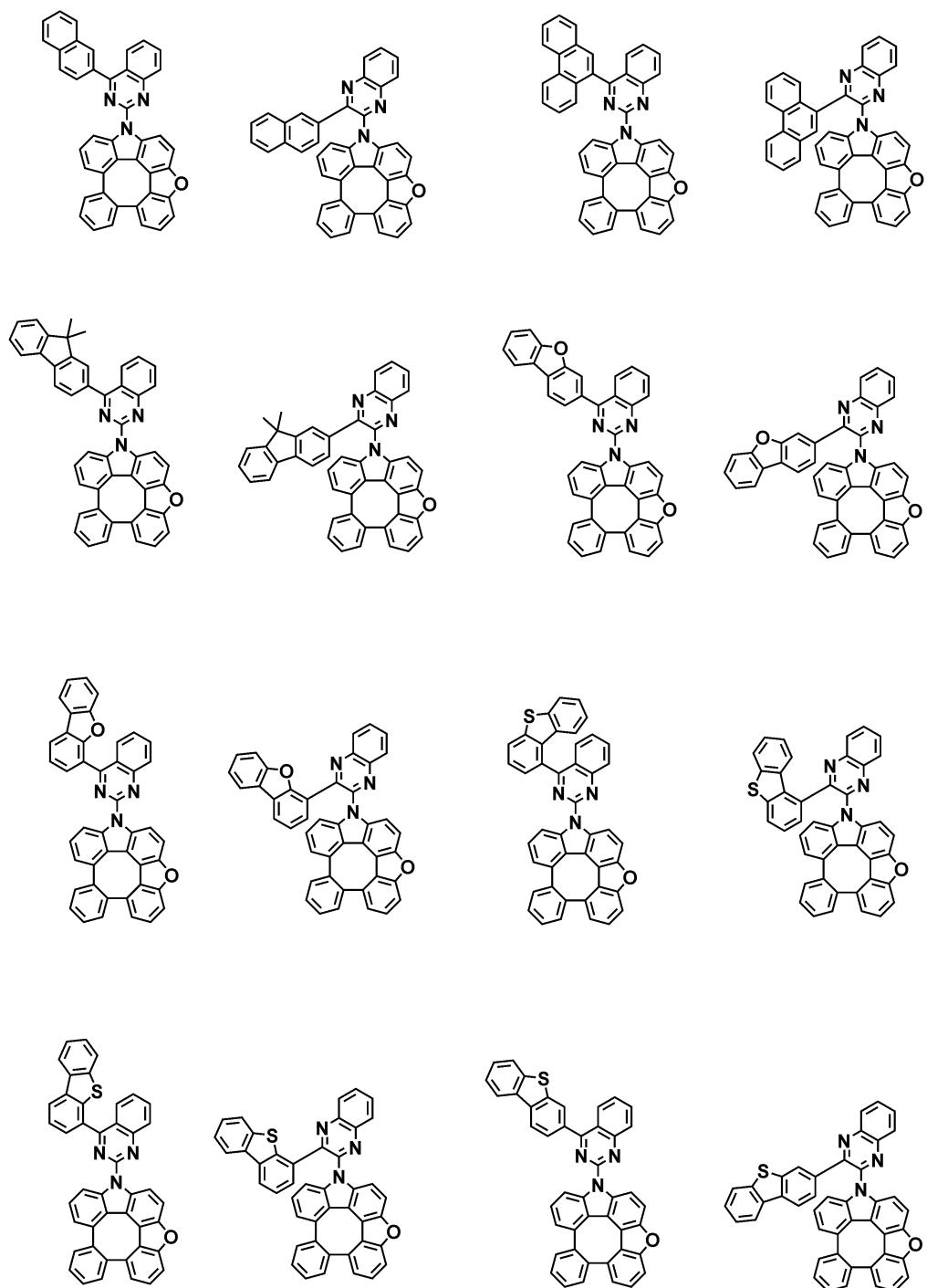
[0142]



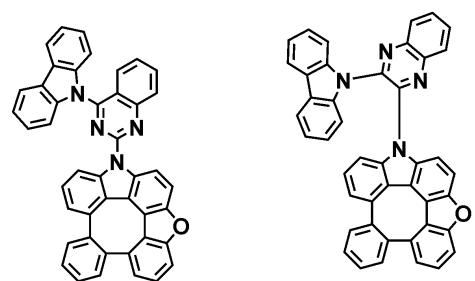
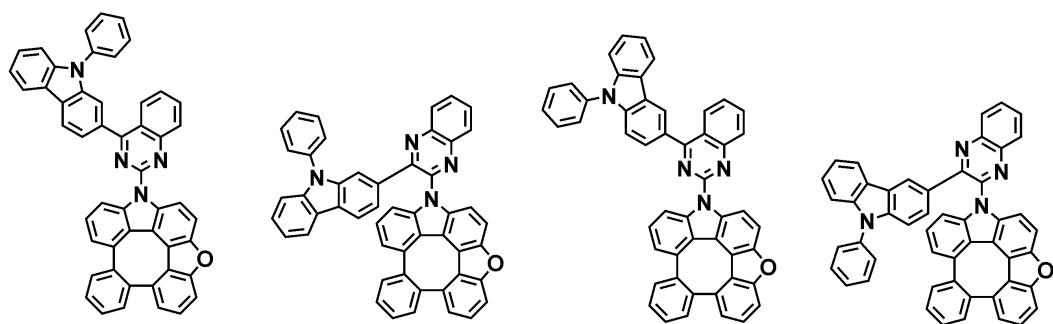
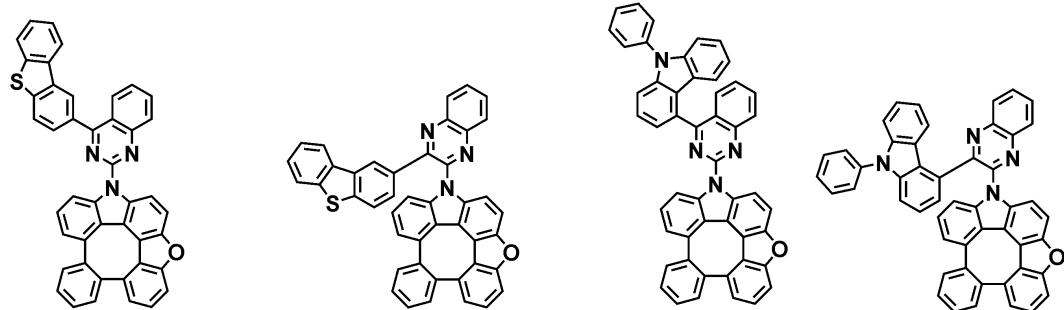
[0143]



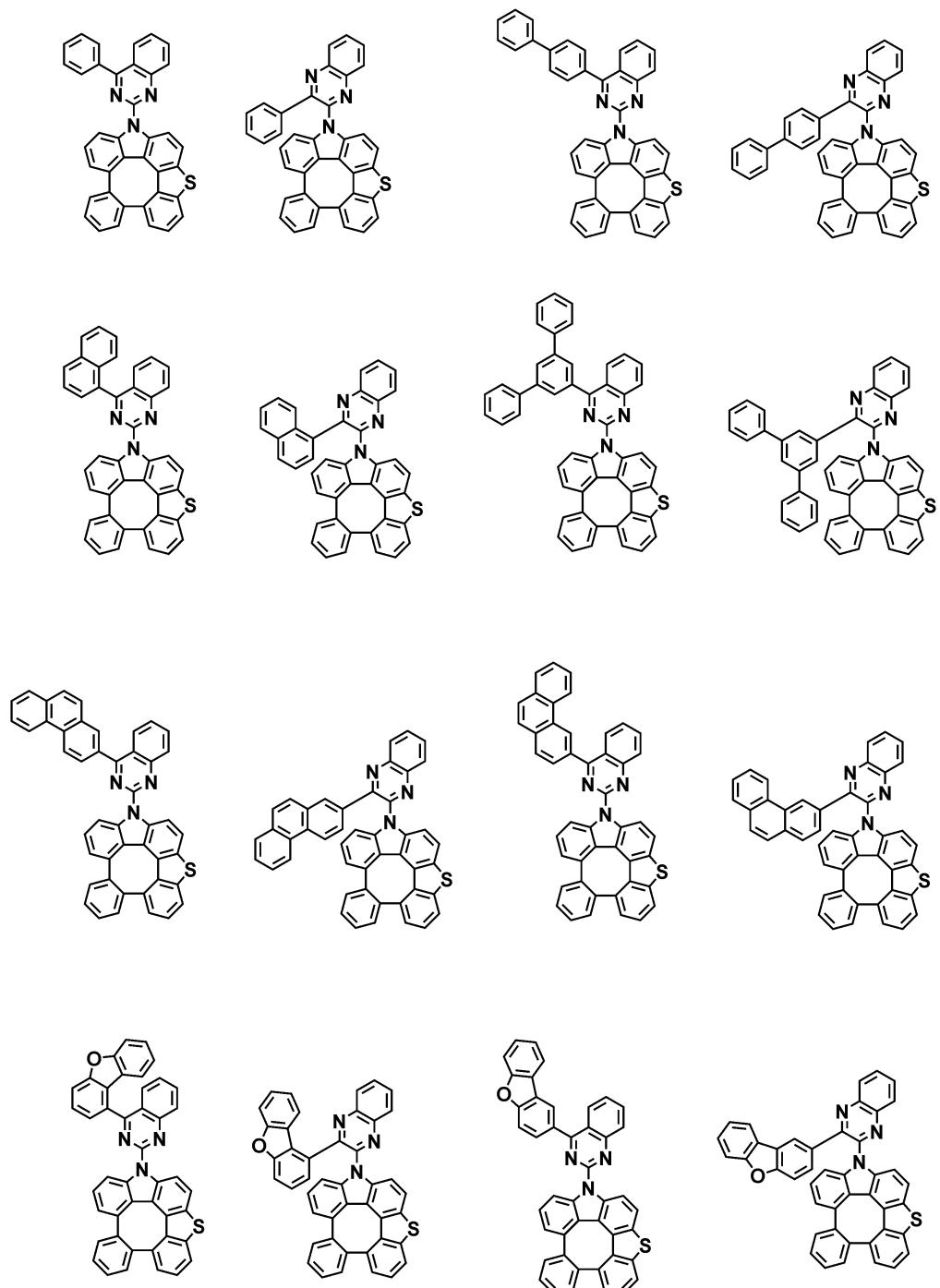
[0144]



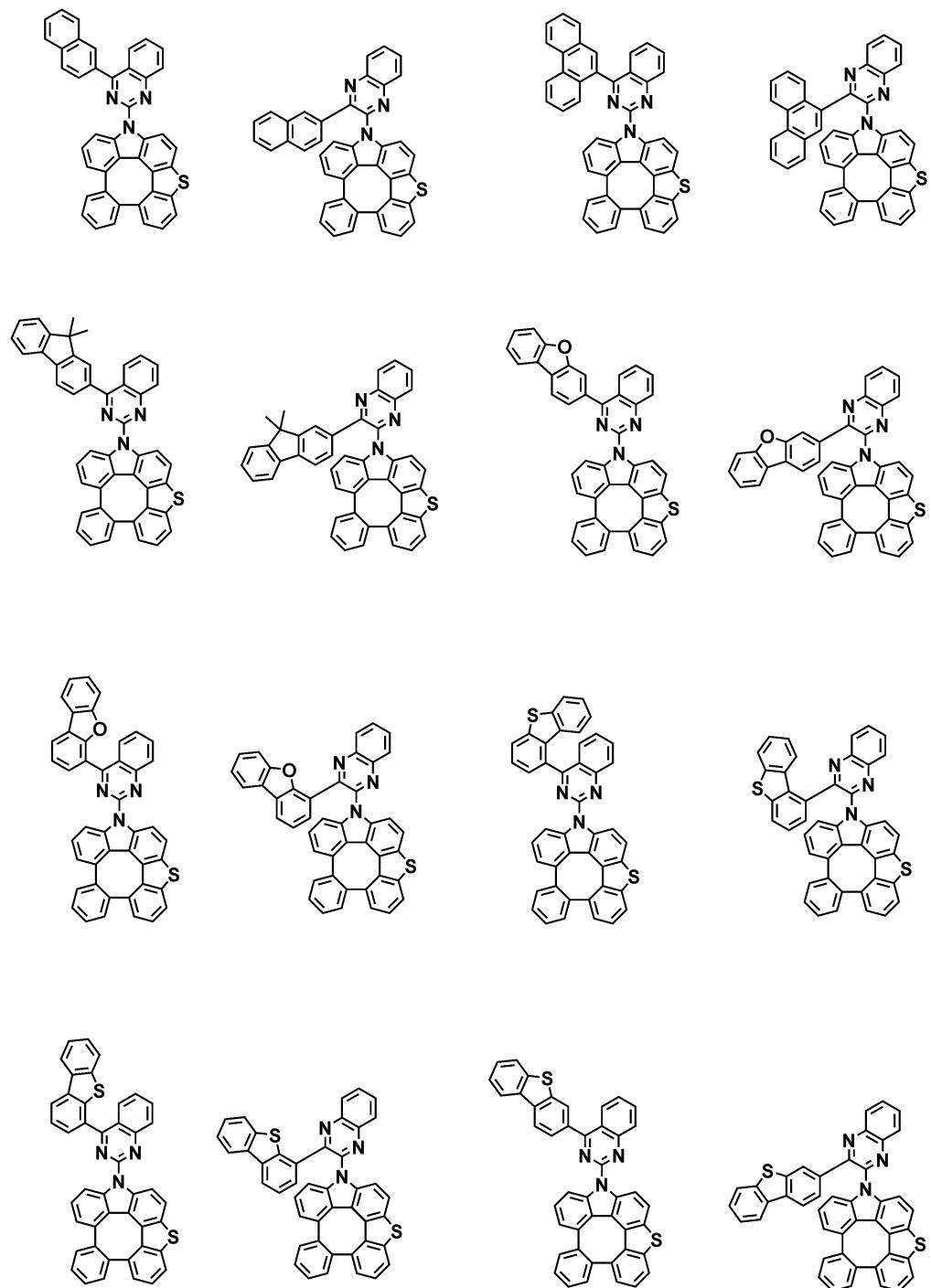
[0145]



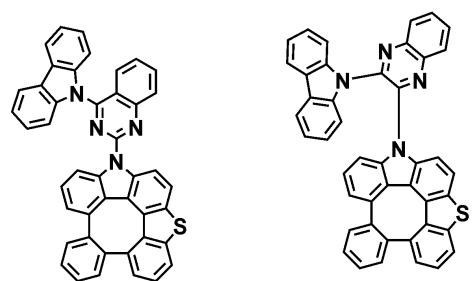
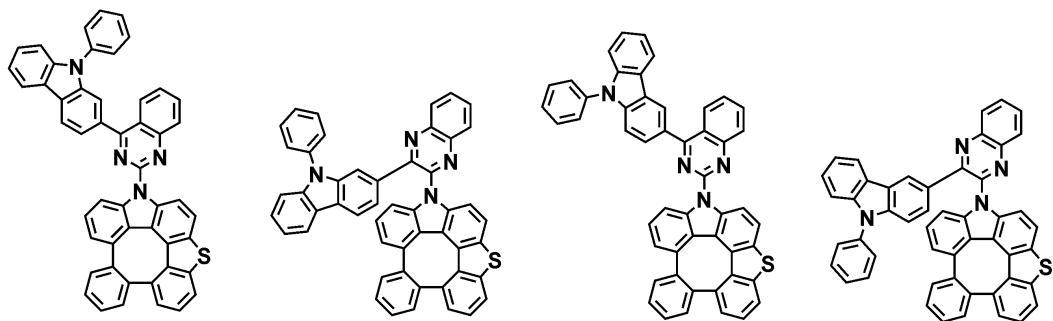
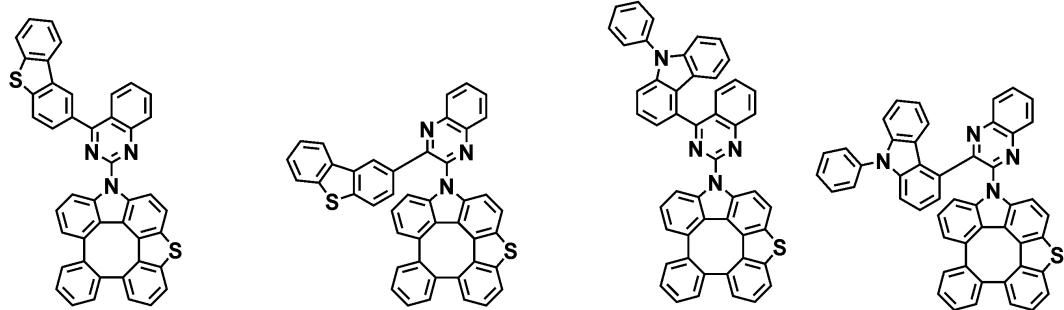
[0146]



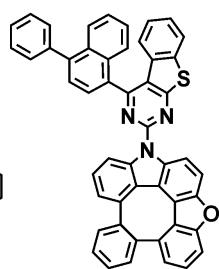
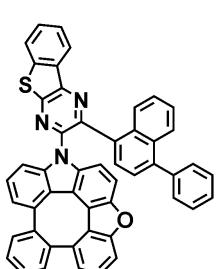
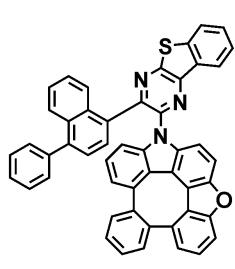
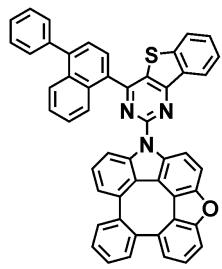
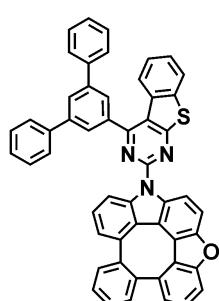
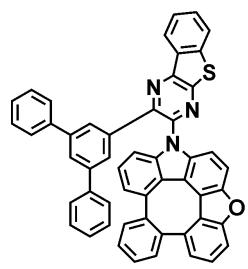
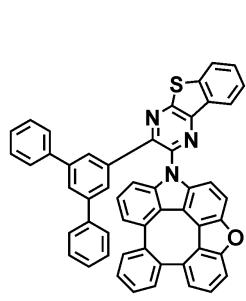
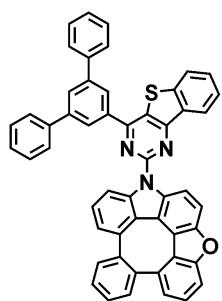
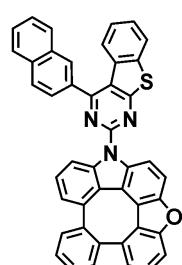
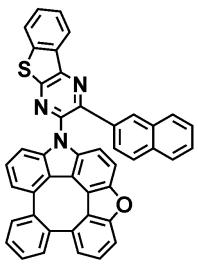
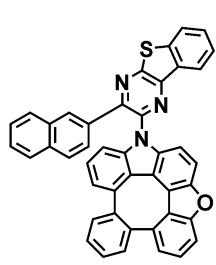
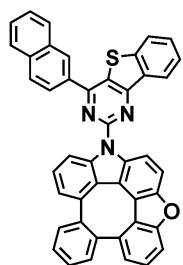
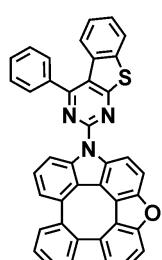
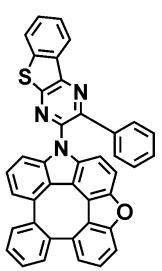
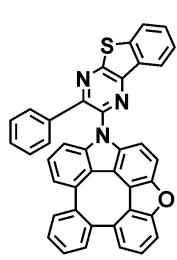
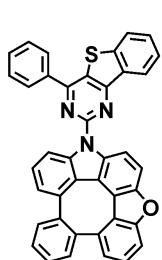
[0147]



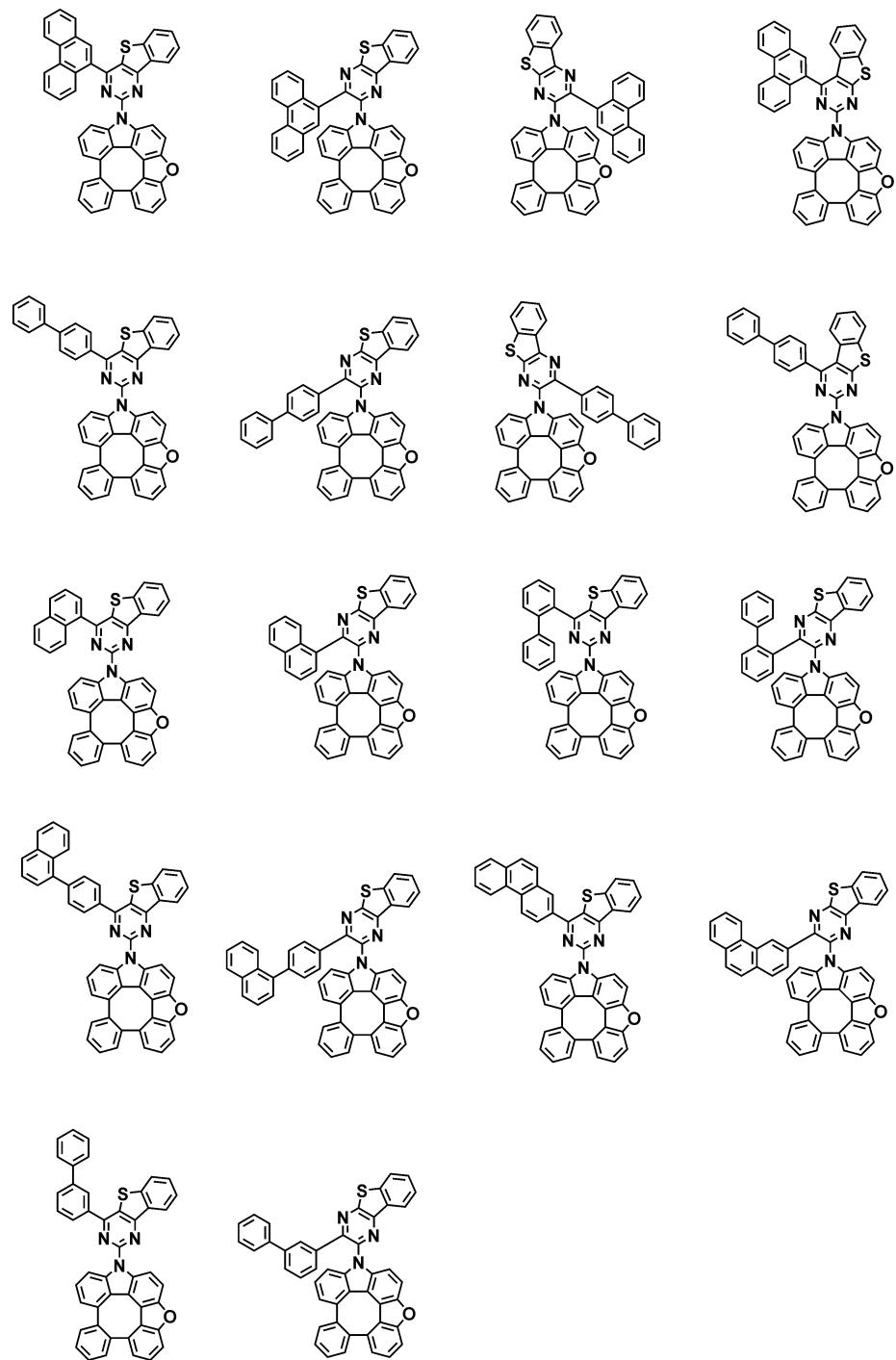
[0148]



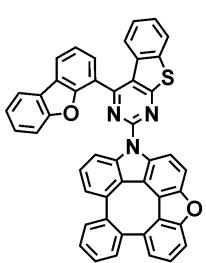
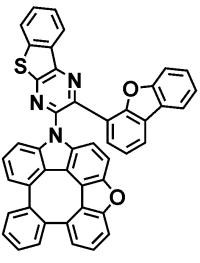
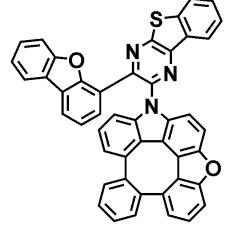
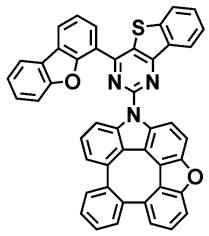
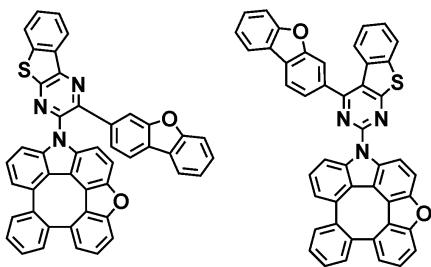
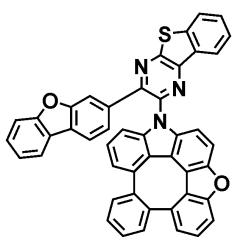
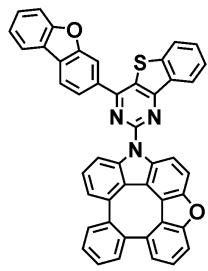
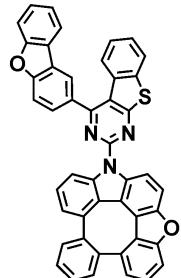
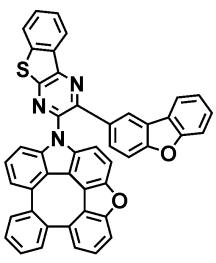
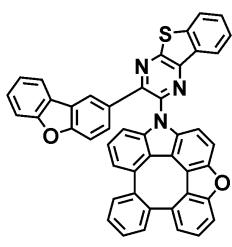
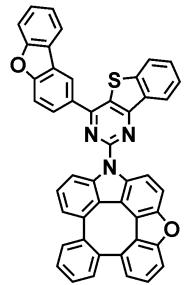
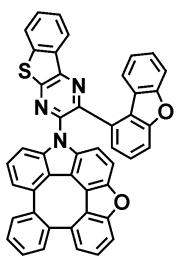
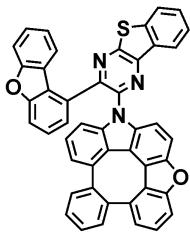
[0149]



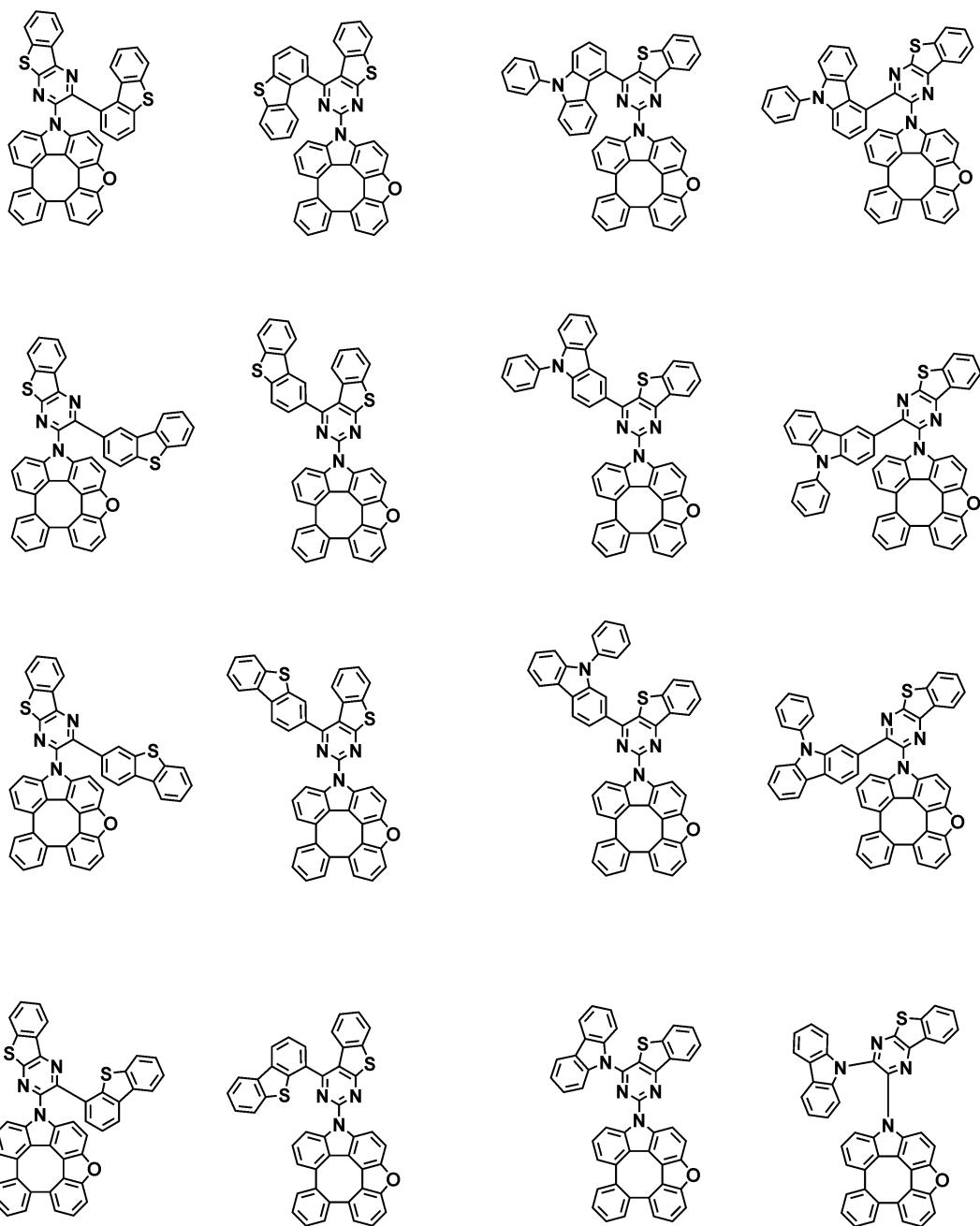
[0150]



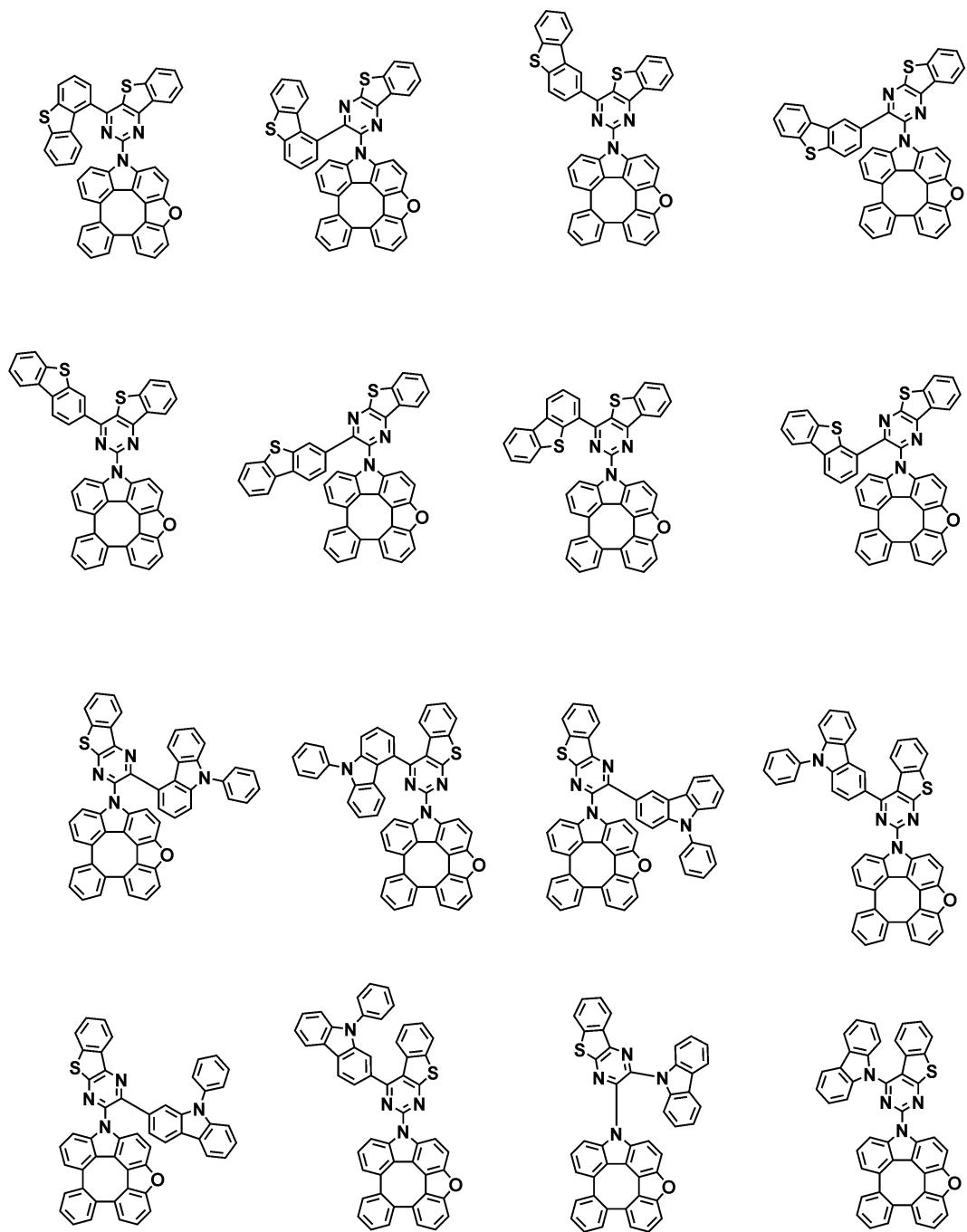
[0151]



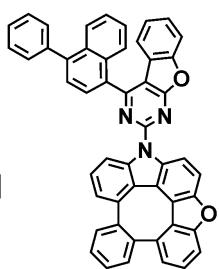
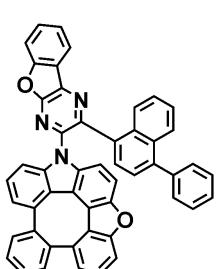
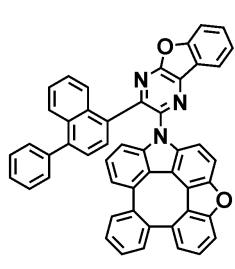
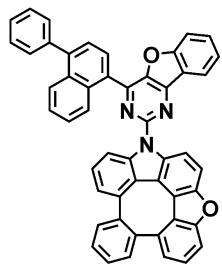
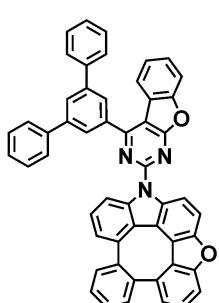
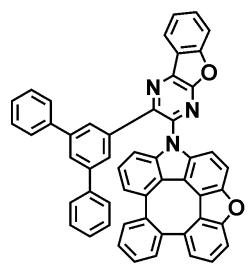
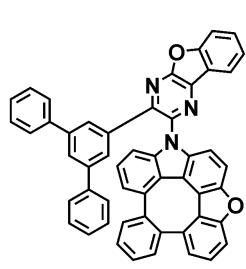
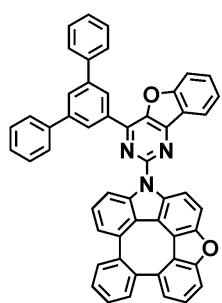
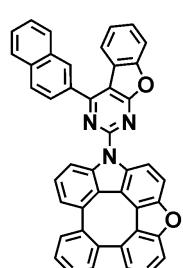
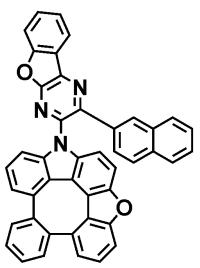
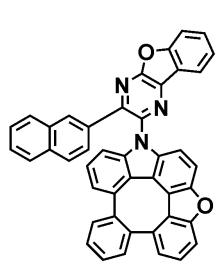
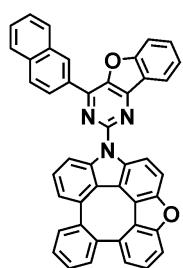
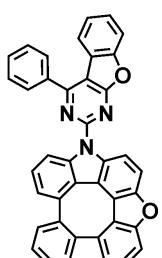
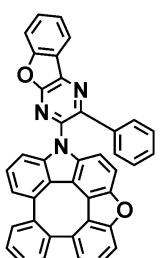
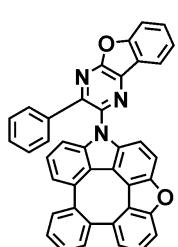
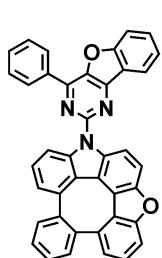
[0152]



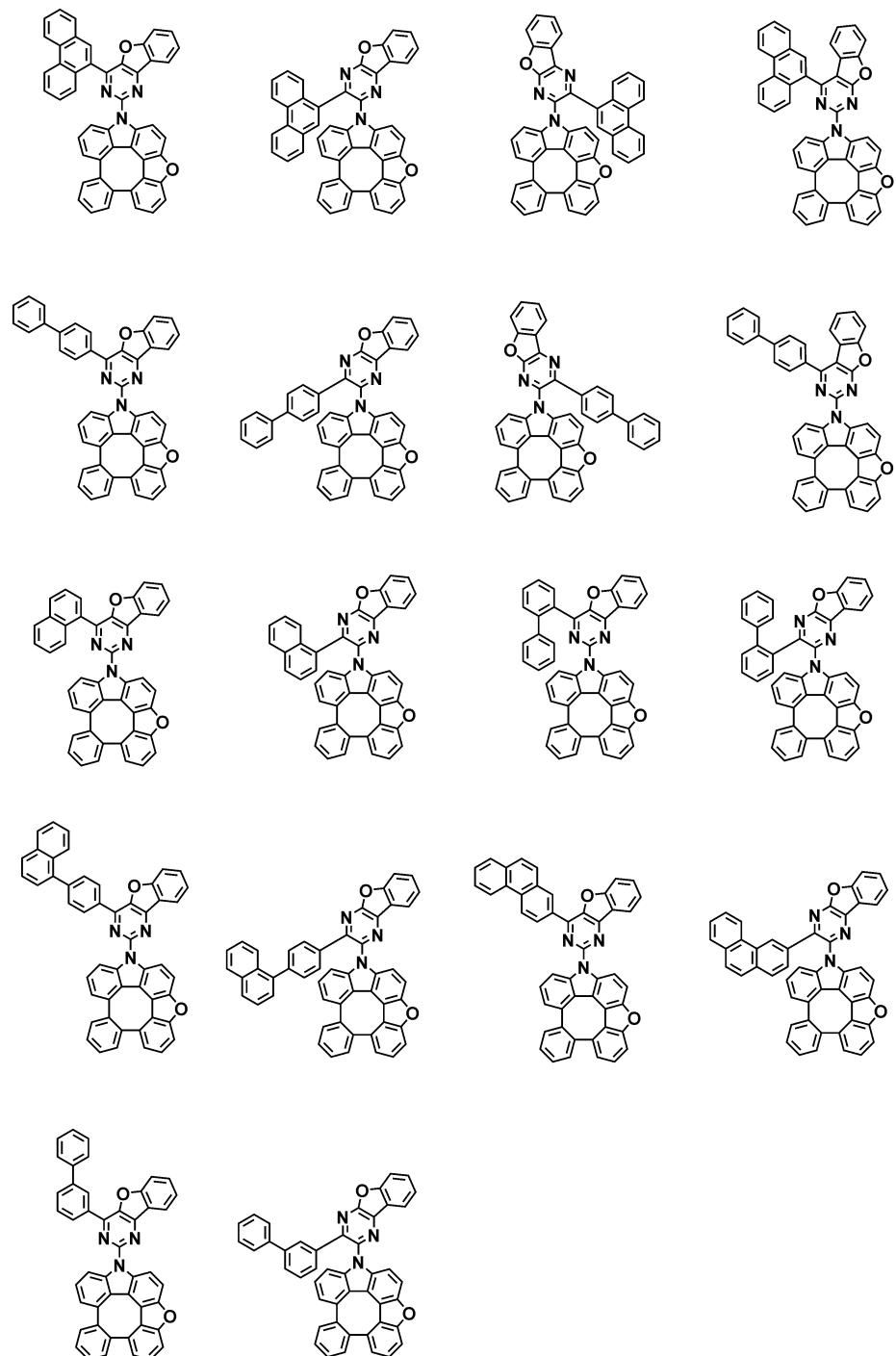
[0153]



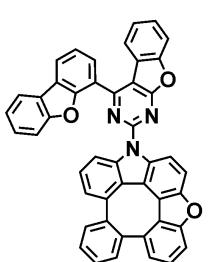
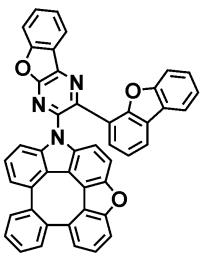
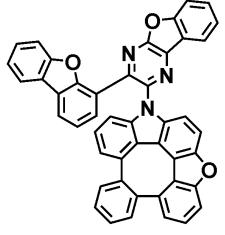
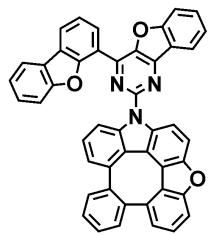
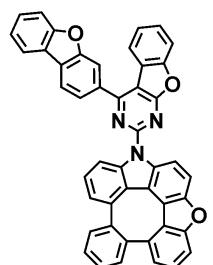
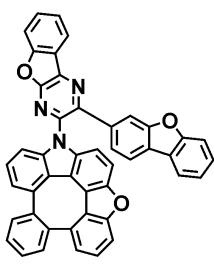
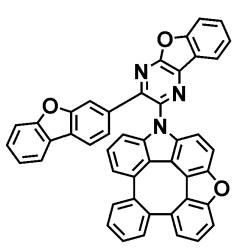
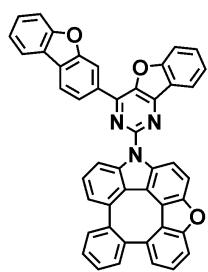
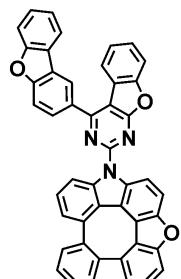
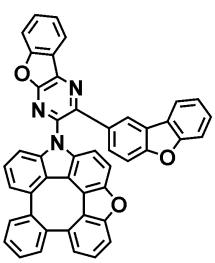
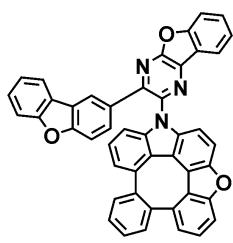
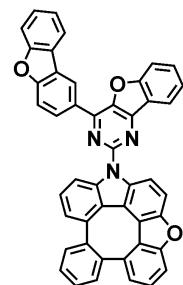
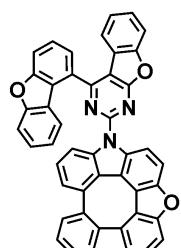
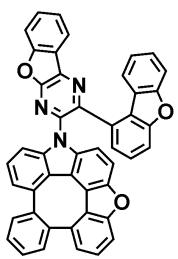
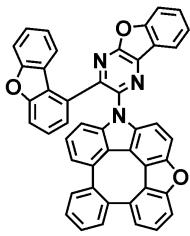
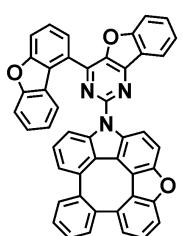
[0154]



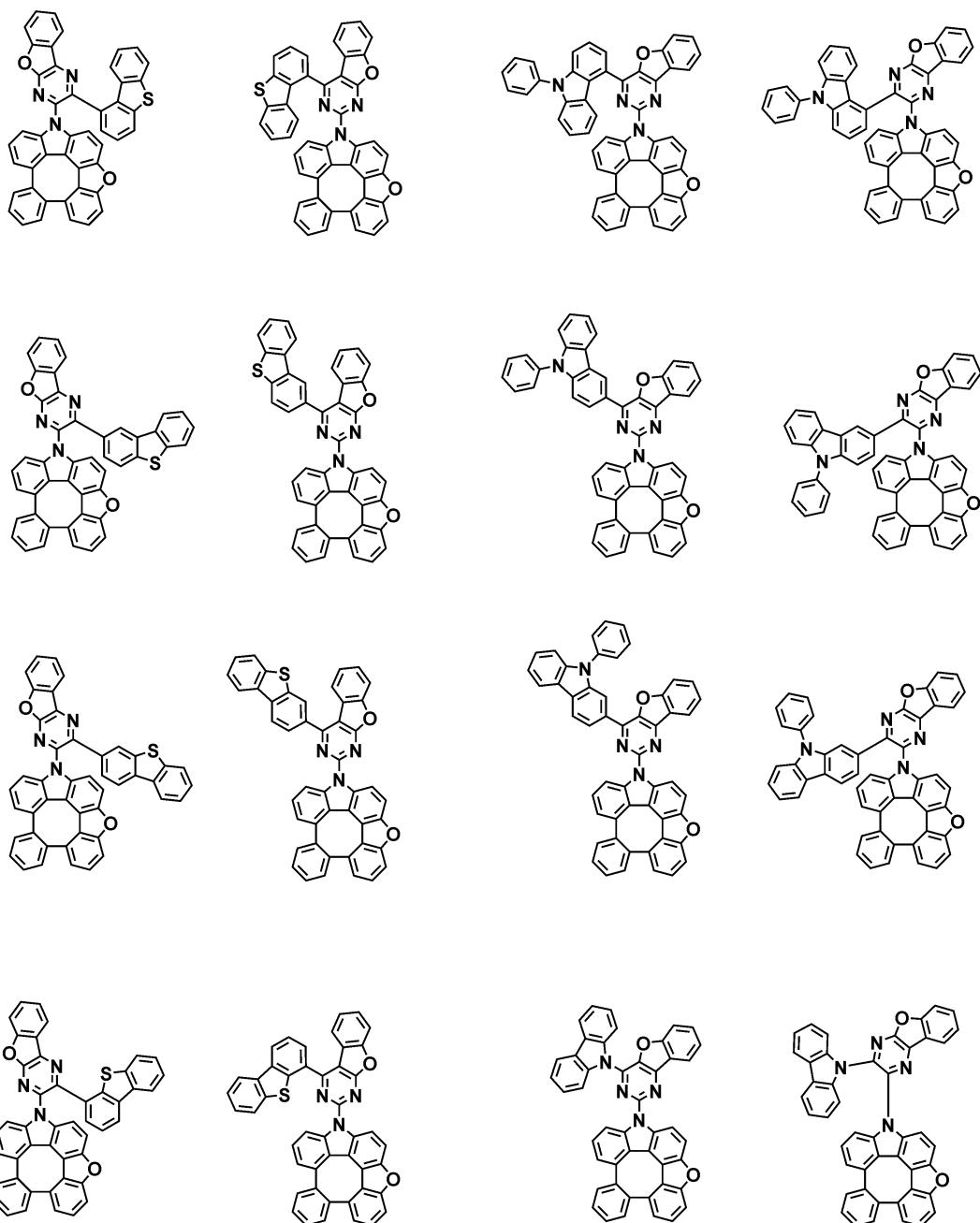
[0155]



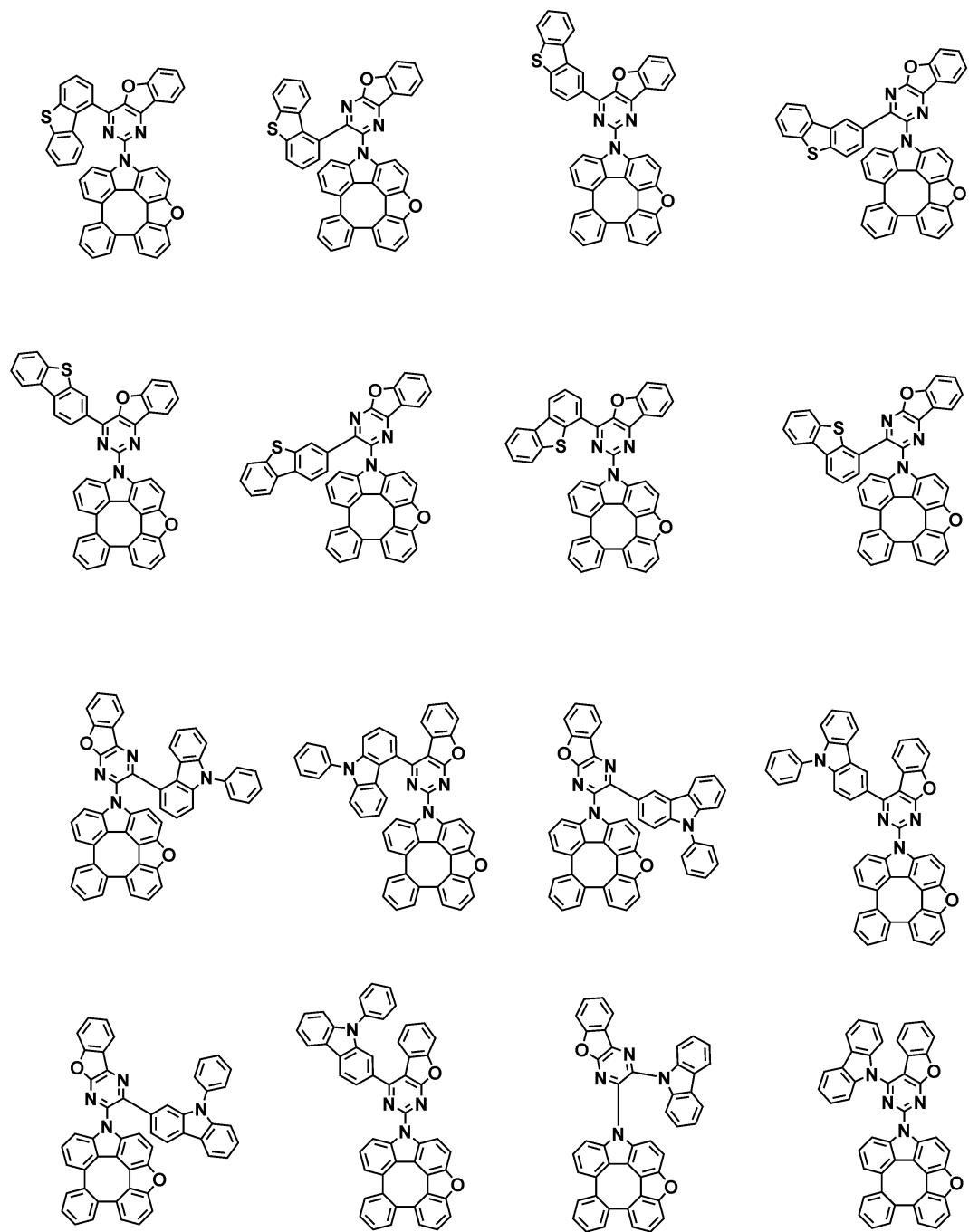
[0156]



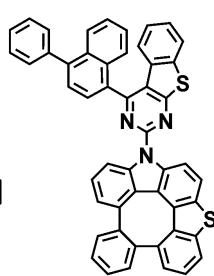
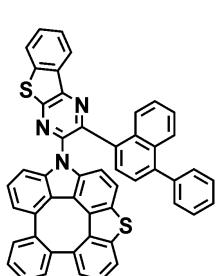
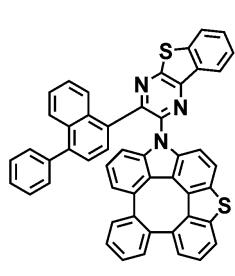
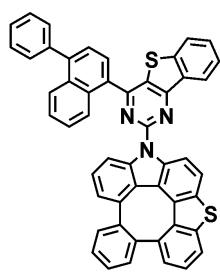
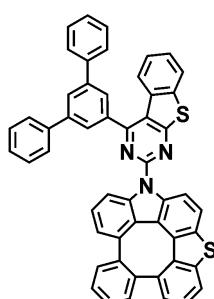
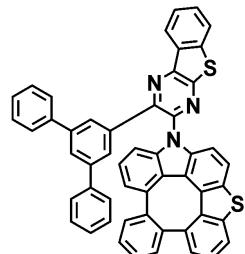
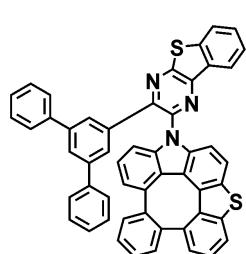
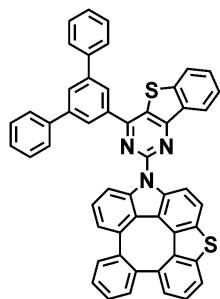
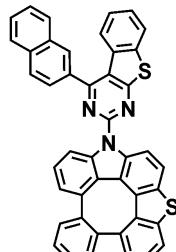
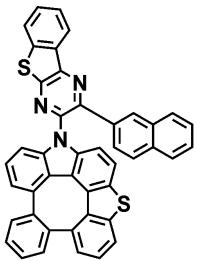
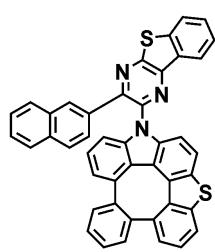
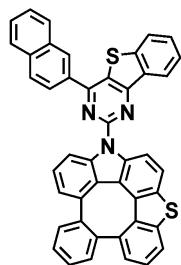
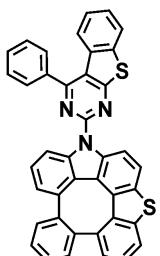
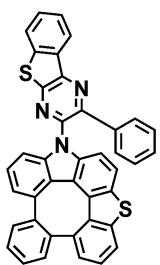
[0157]



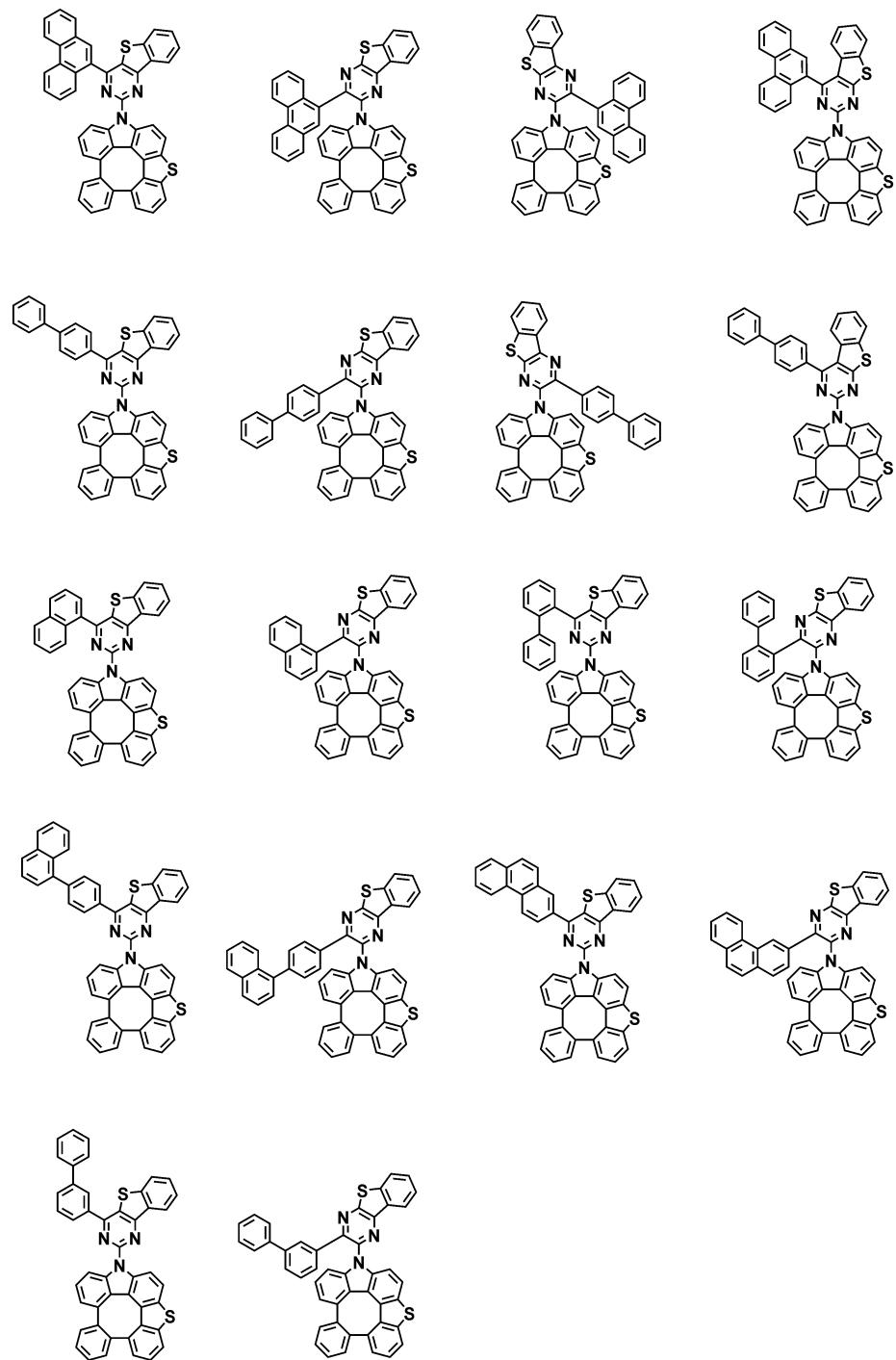
[0158]



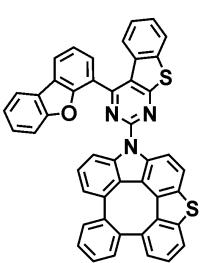
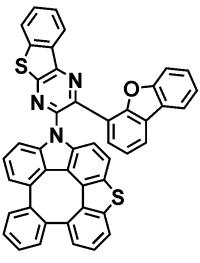
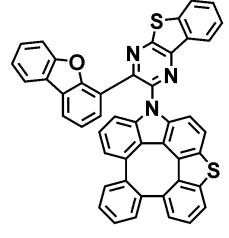
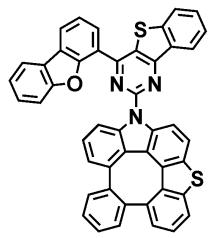
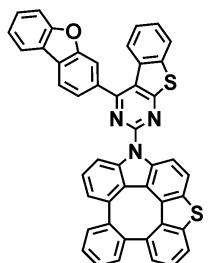
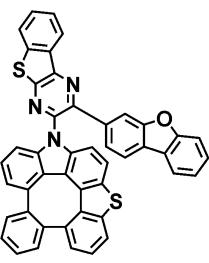
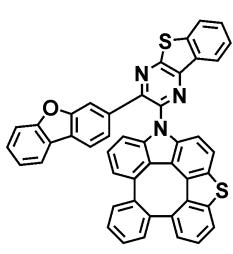
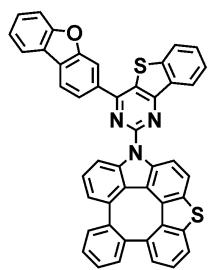
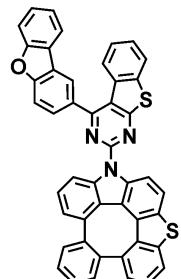
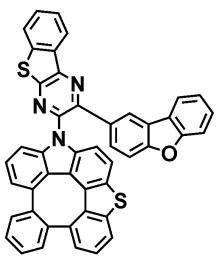
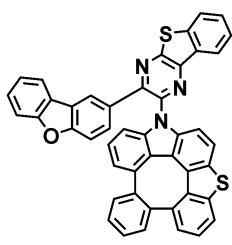
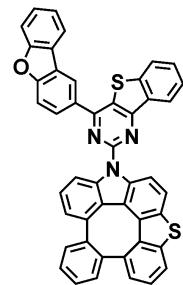
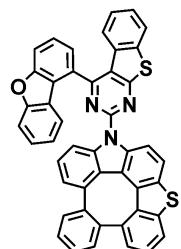
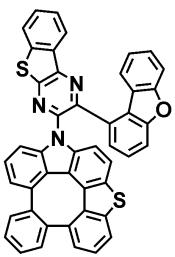
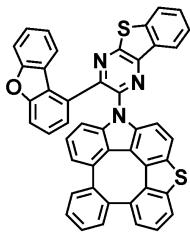
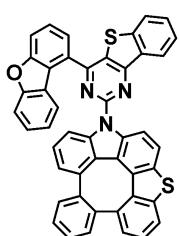
[0159]



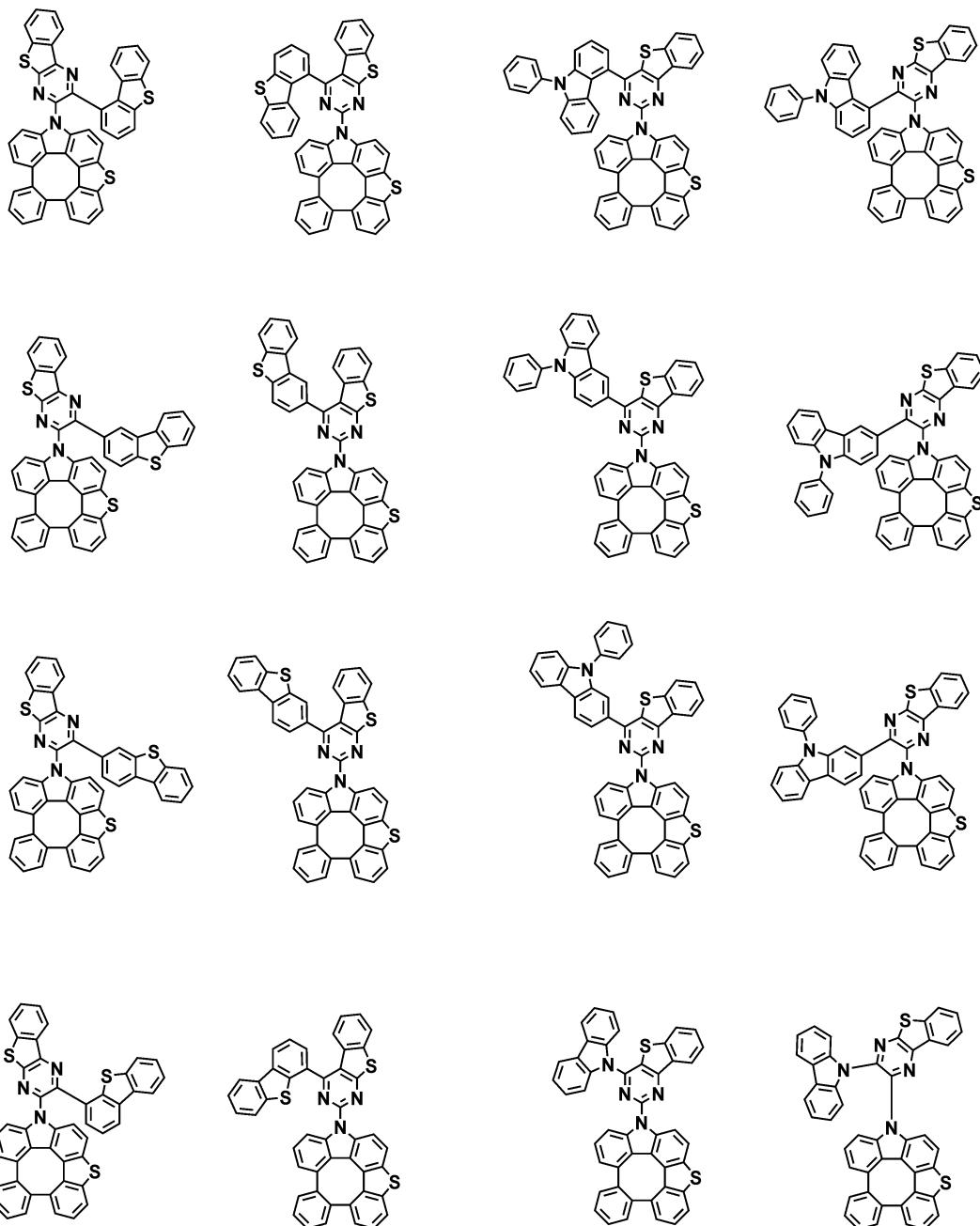
[0160]



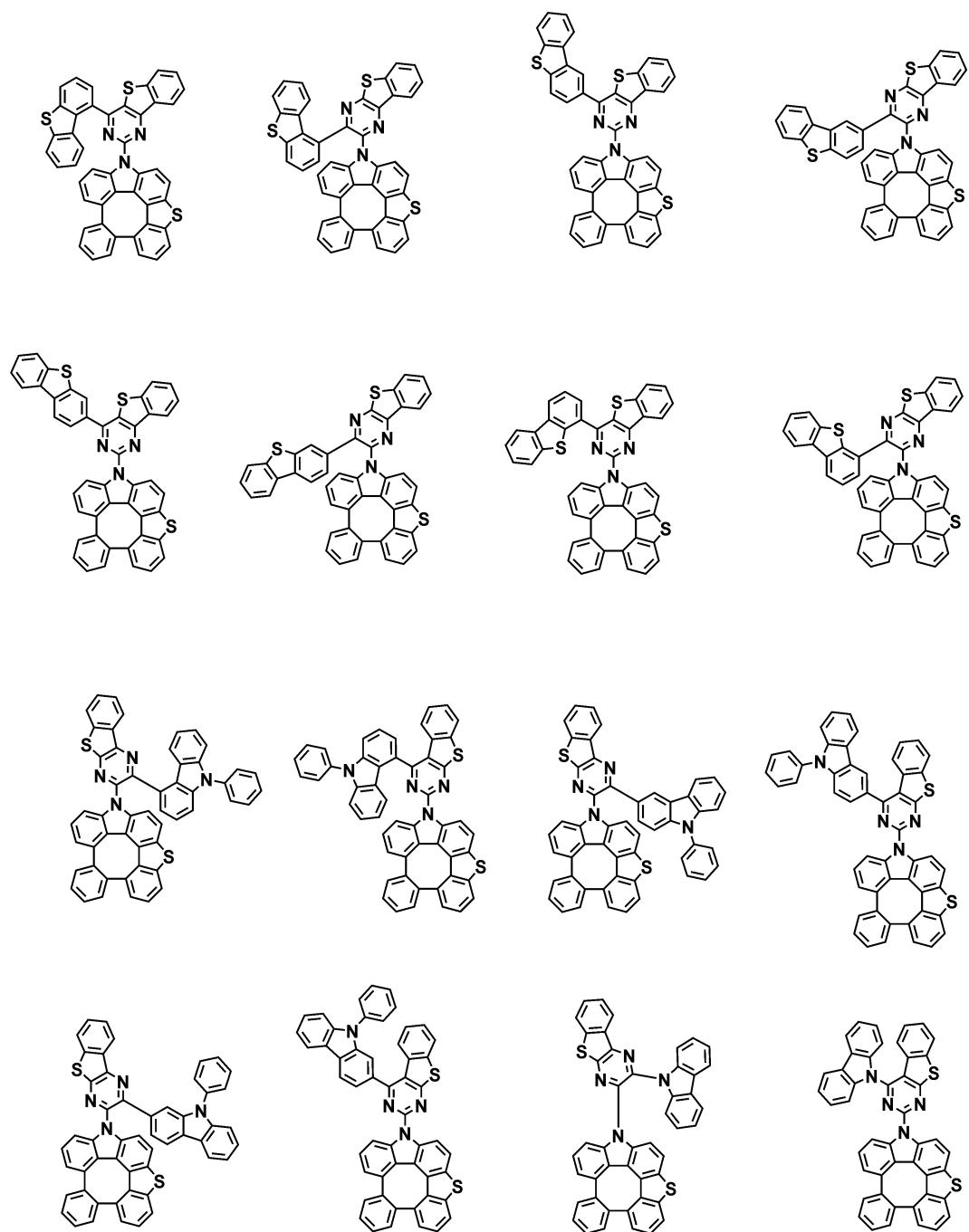
[0161]



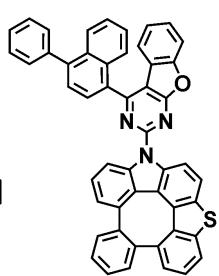
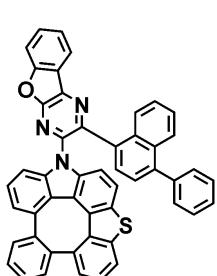
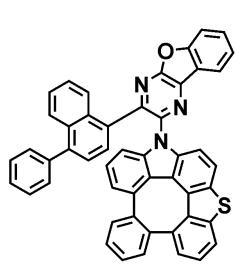
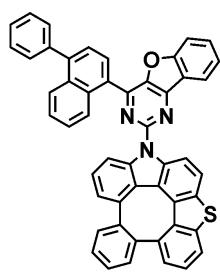
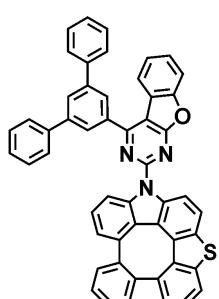
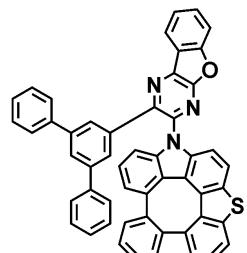
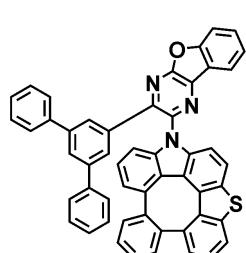
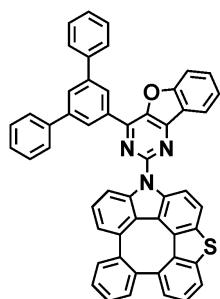
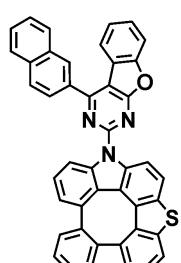
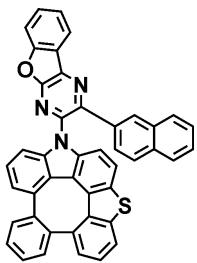
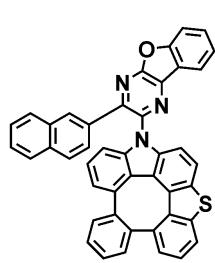
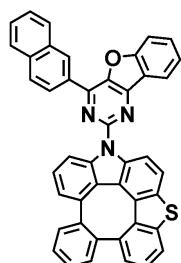
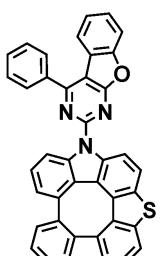
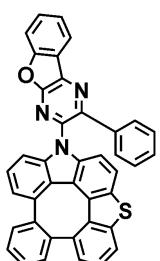
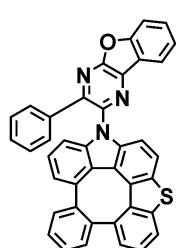
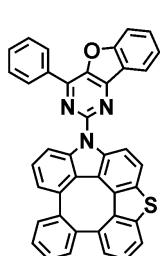
[0162]



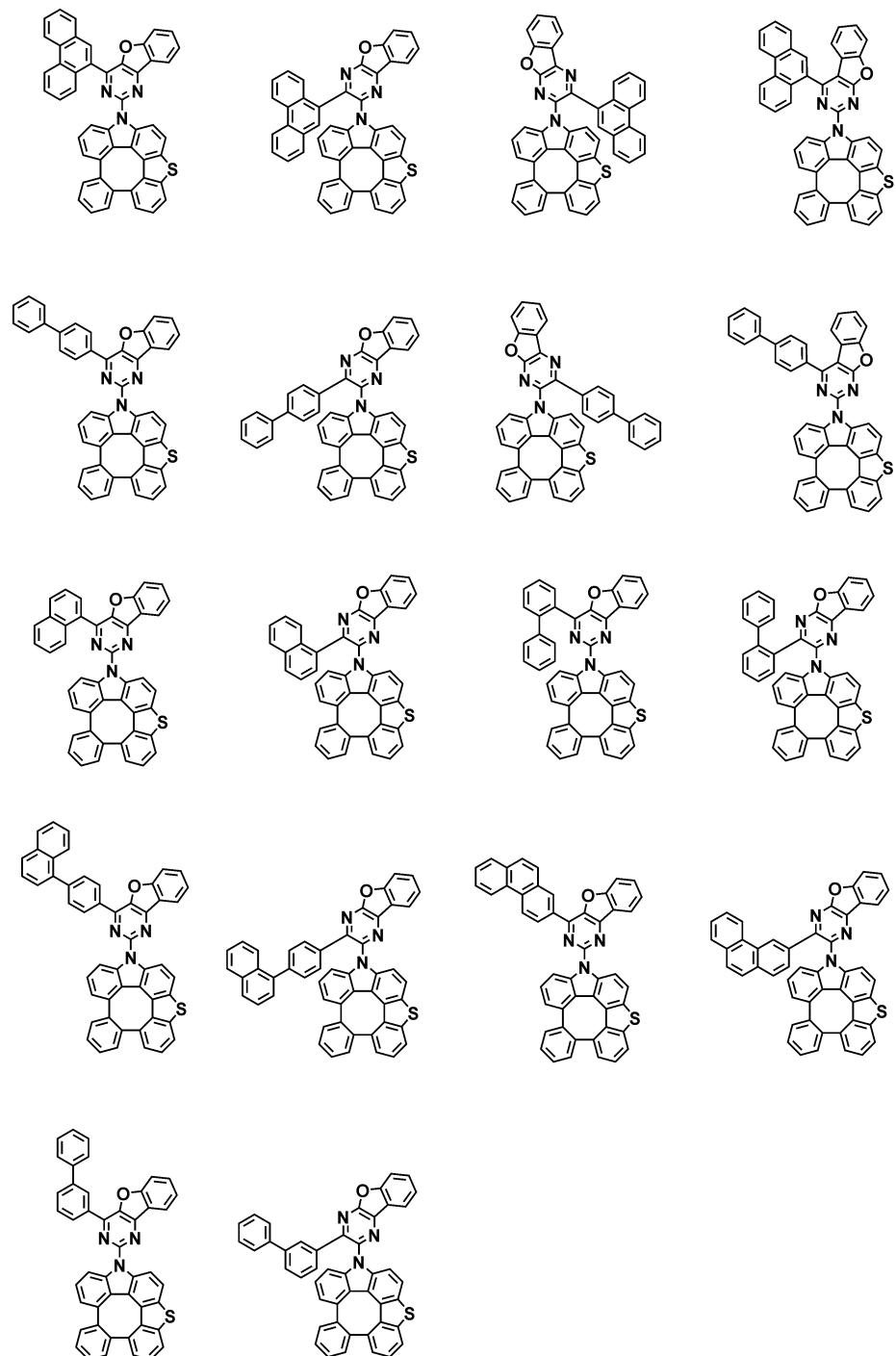
[0163]



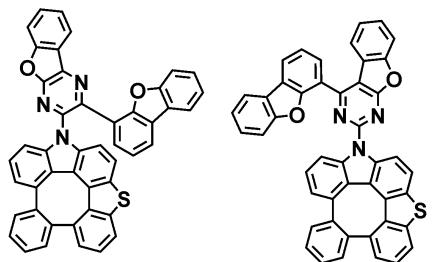
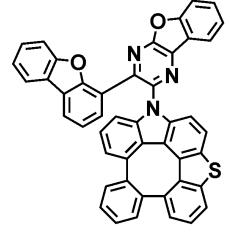
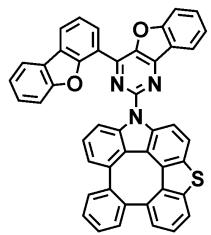
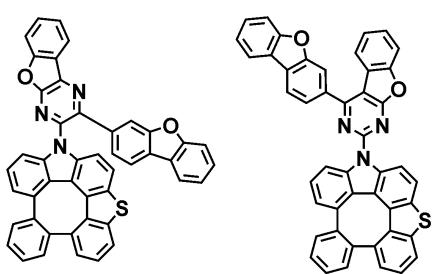
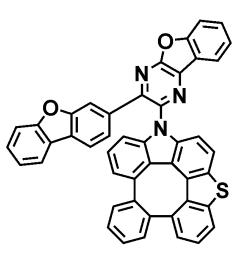
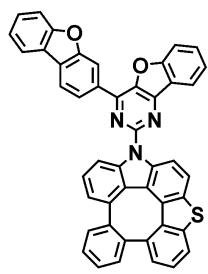
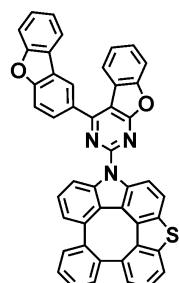
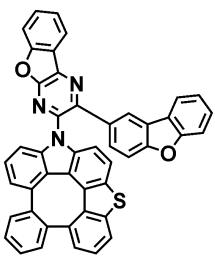
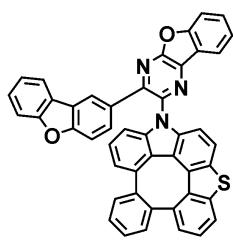
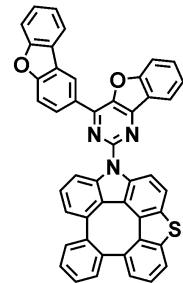
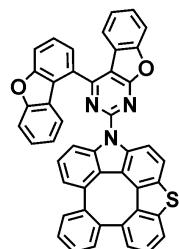
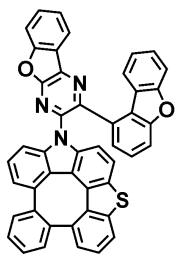
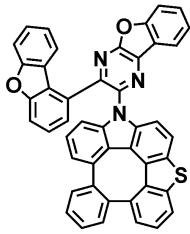
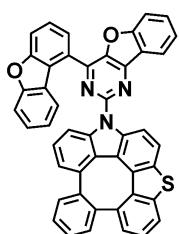
[0164]



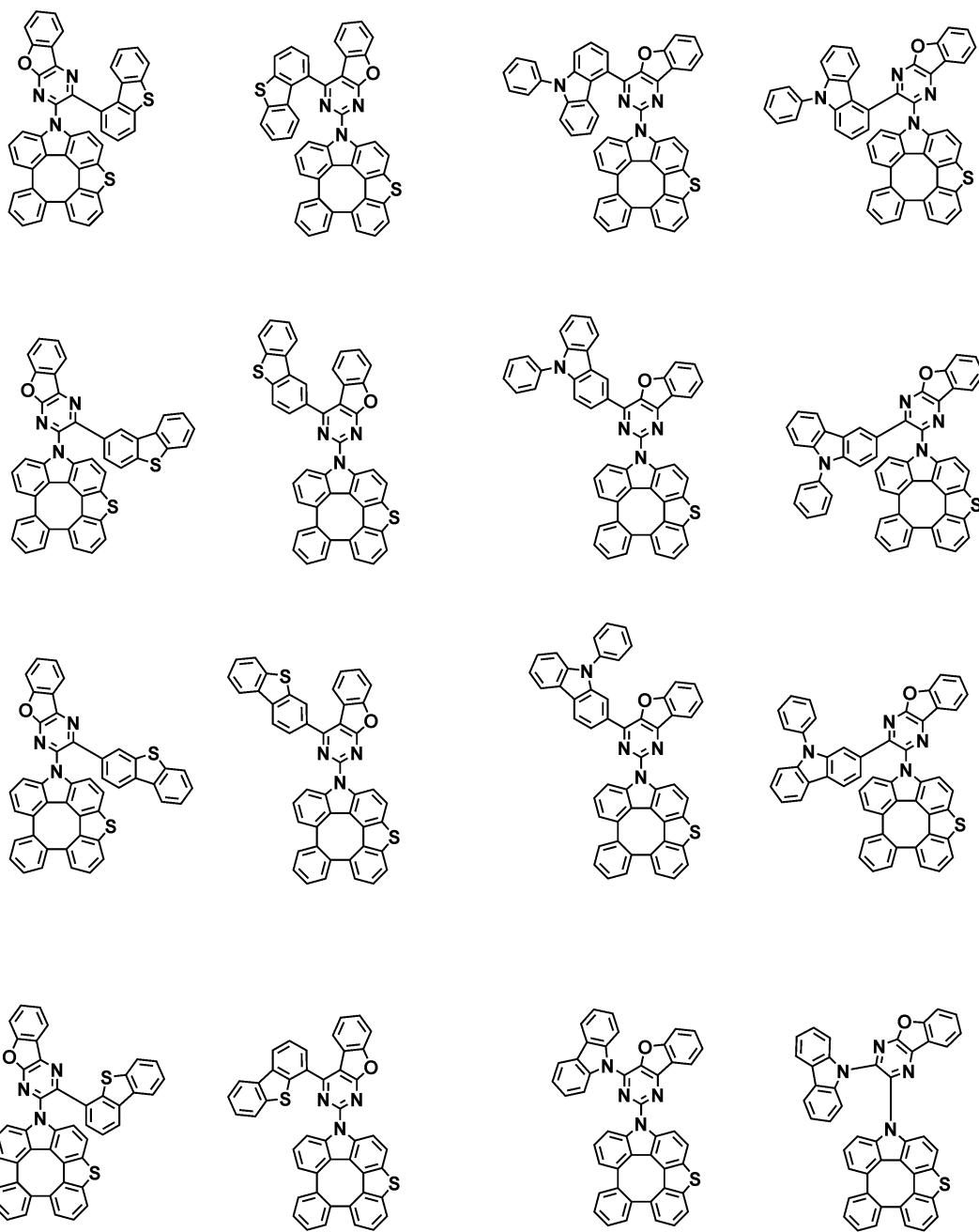
[0165]



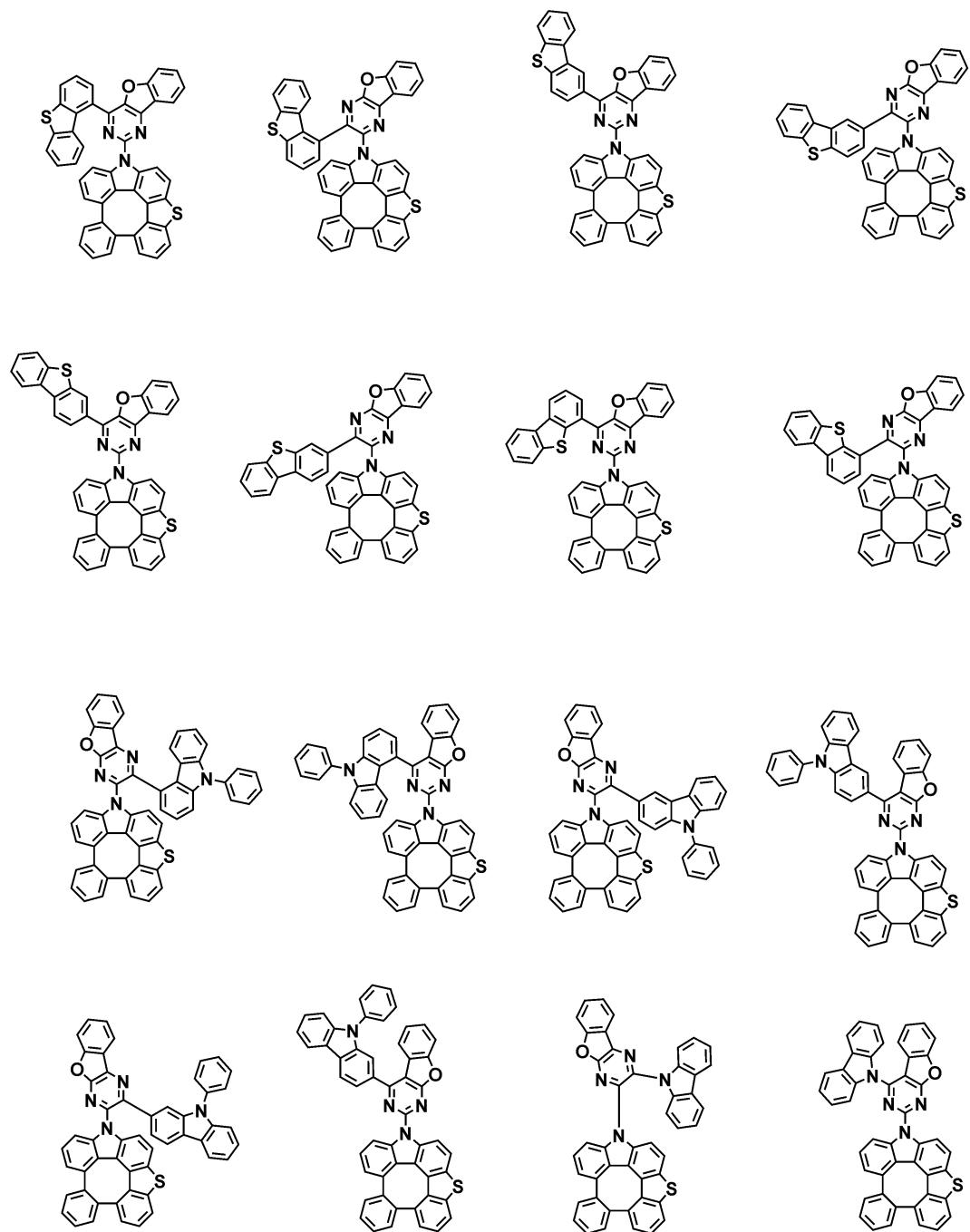
[0166]



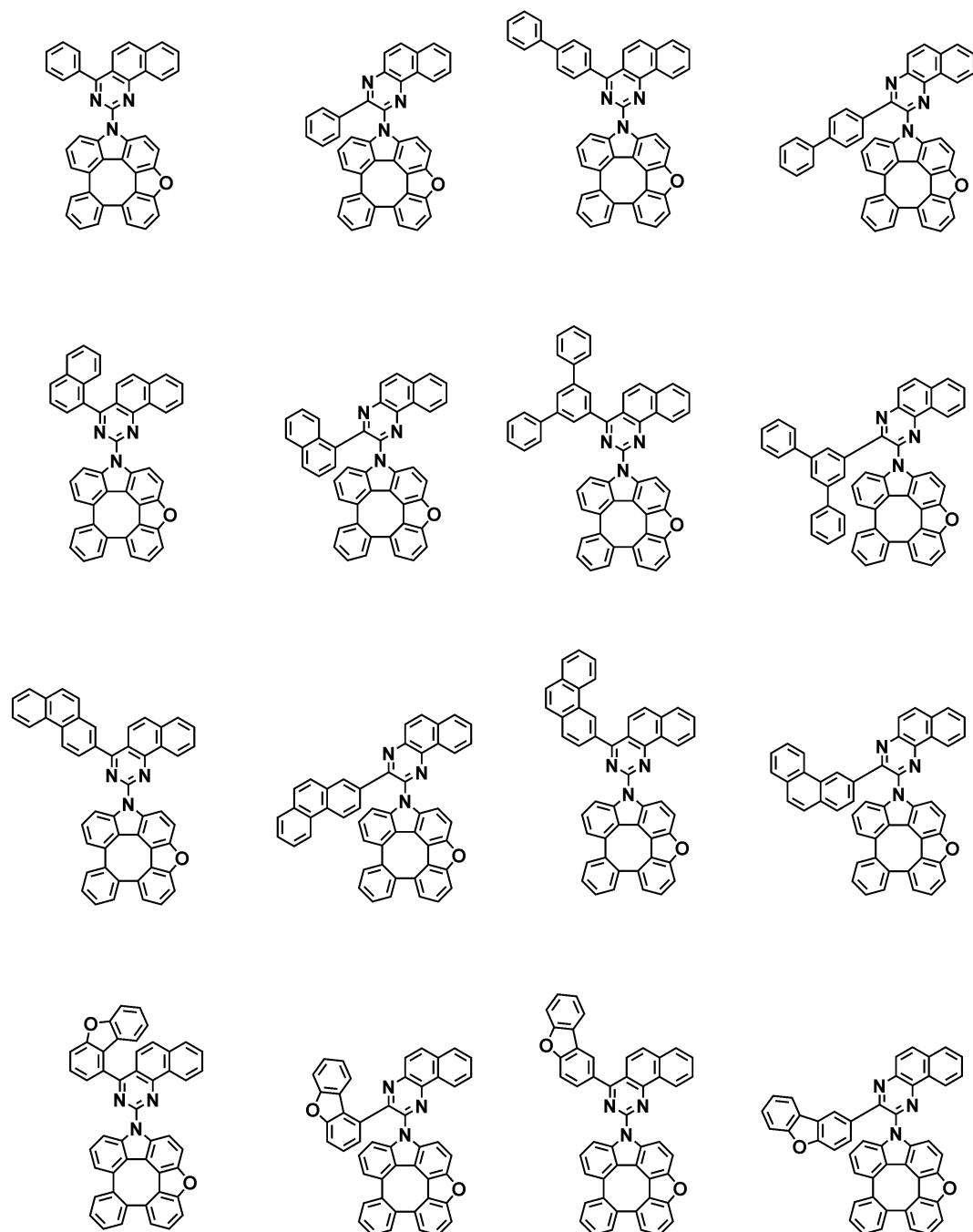
[0167]



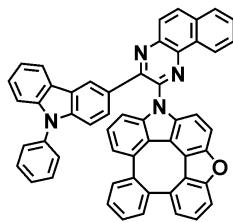
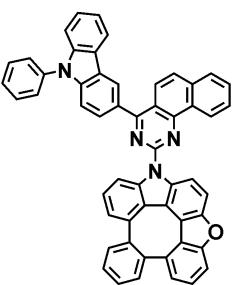
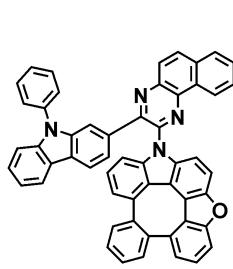
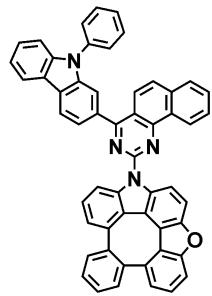
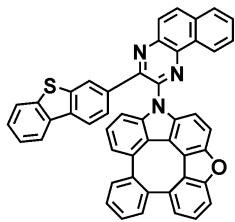
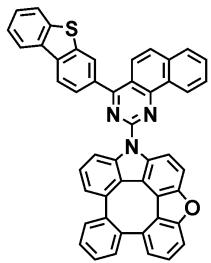
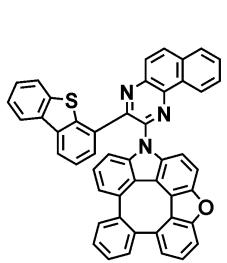
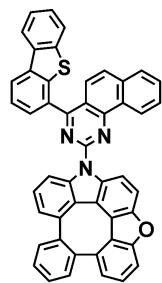
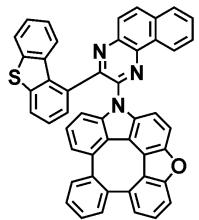
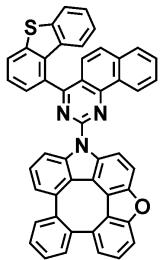
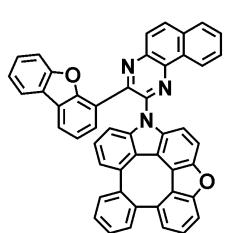
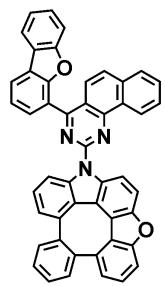
[0168]



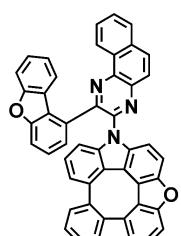
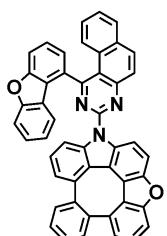
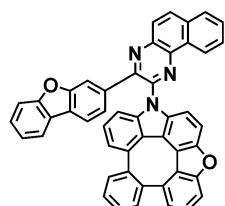
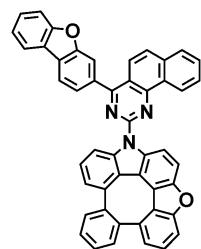
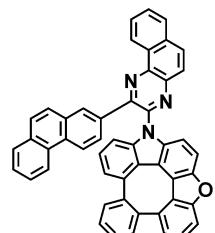
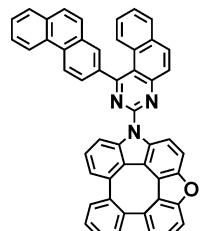
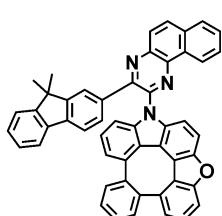
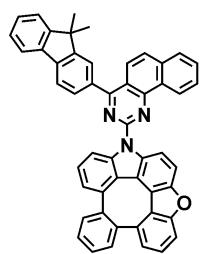
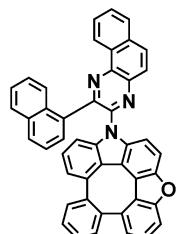
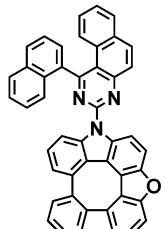
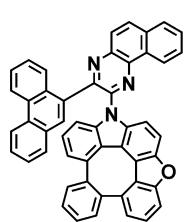
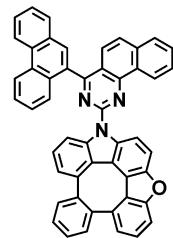
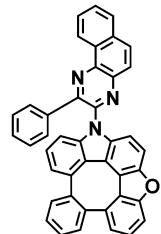
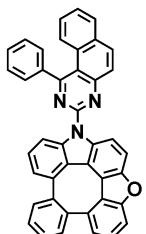
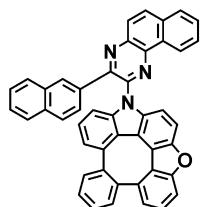
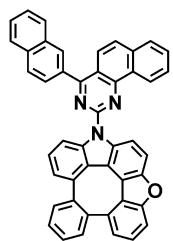
[0169]



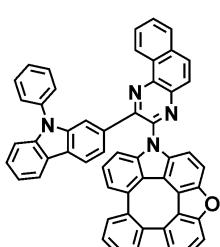
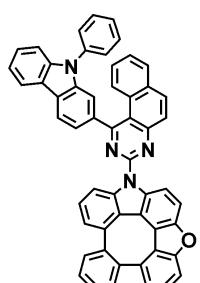
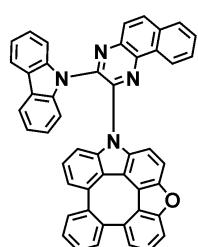
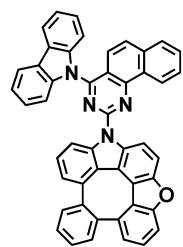
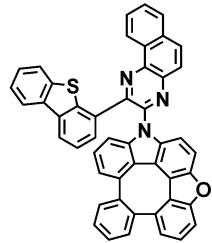
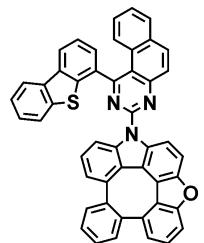
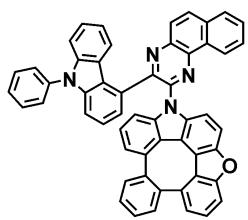
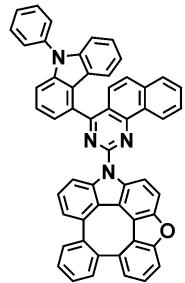
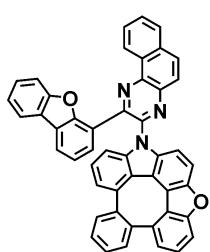
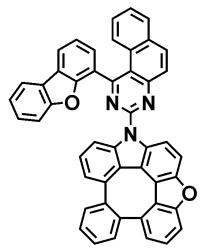
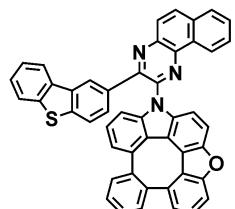
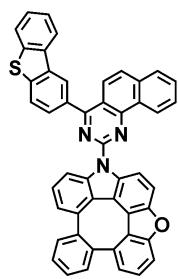
[0171]



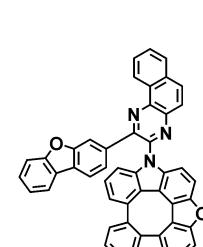
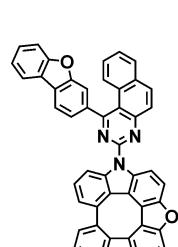
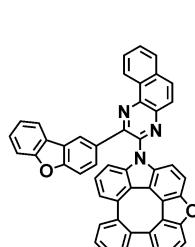
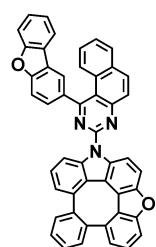
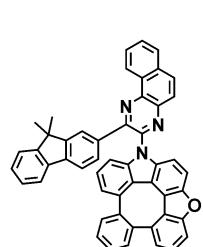
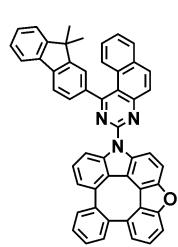
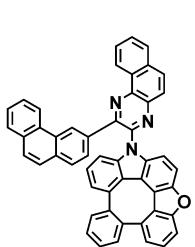
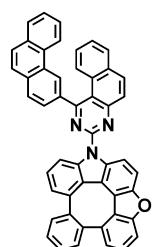
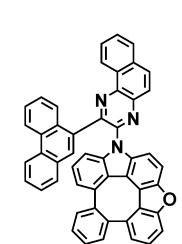
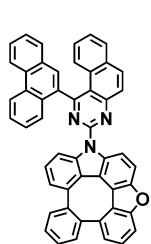
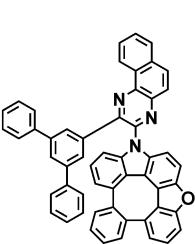
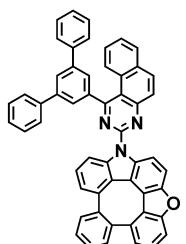
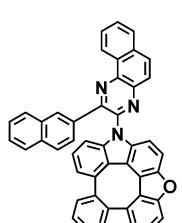
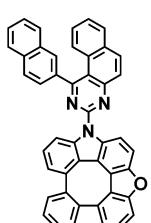
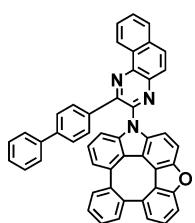
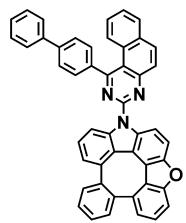
[0172]



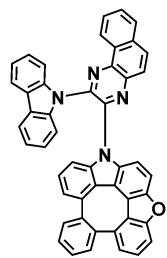
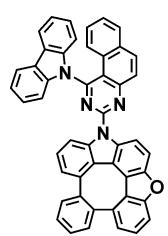
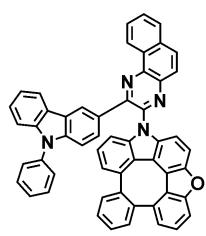
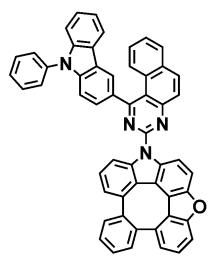
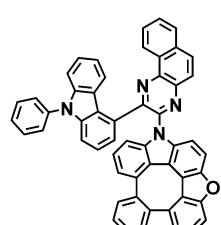
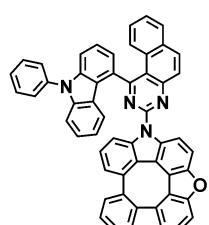
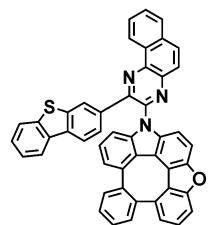
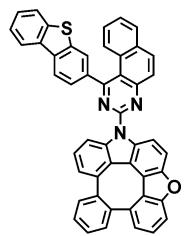
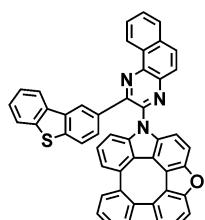
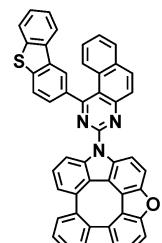
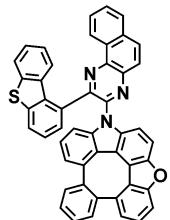
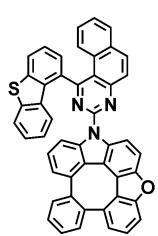
[0173]



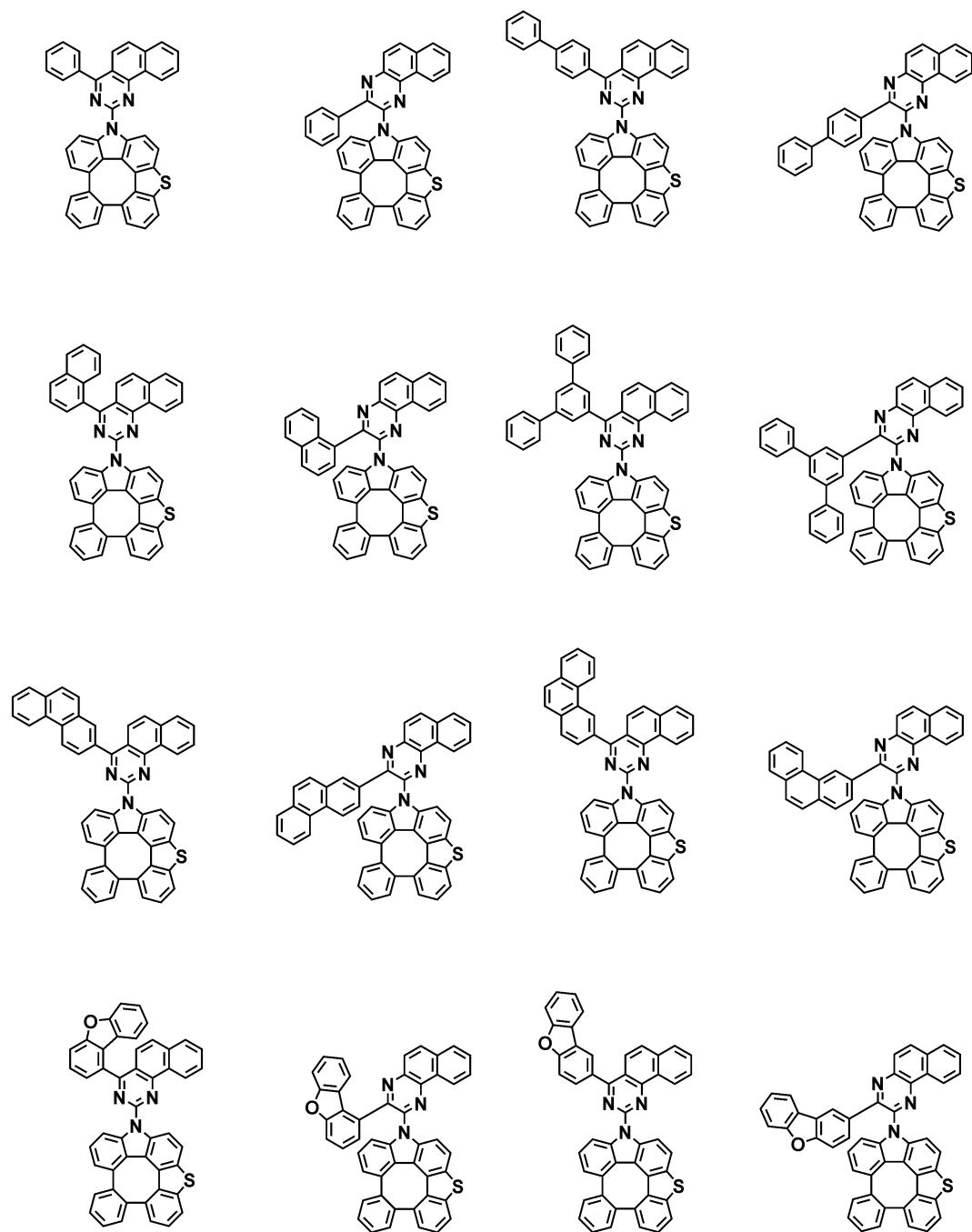
[0174]



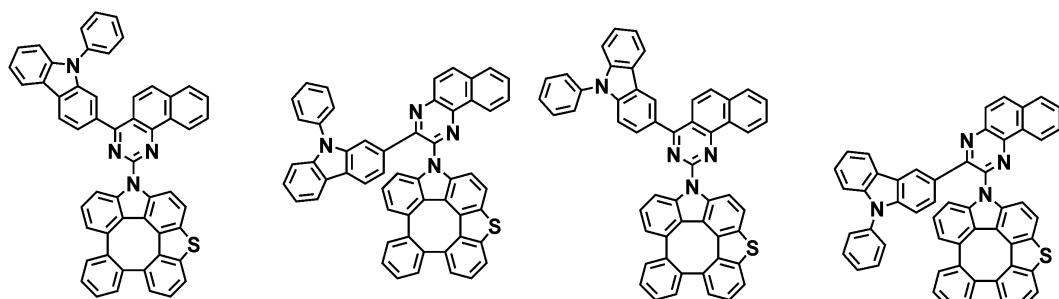
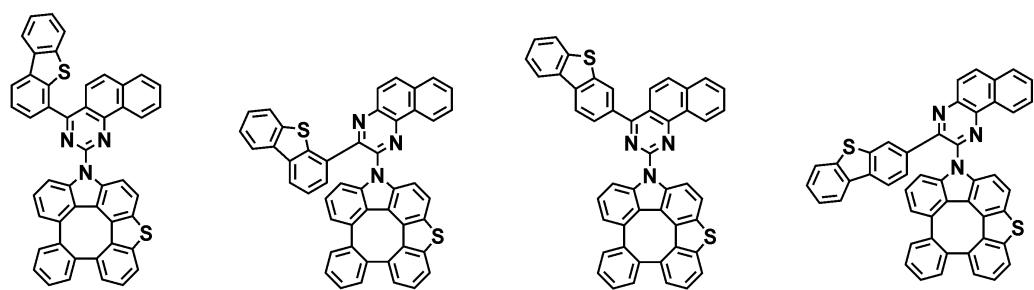
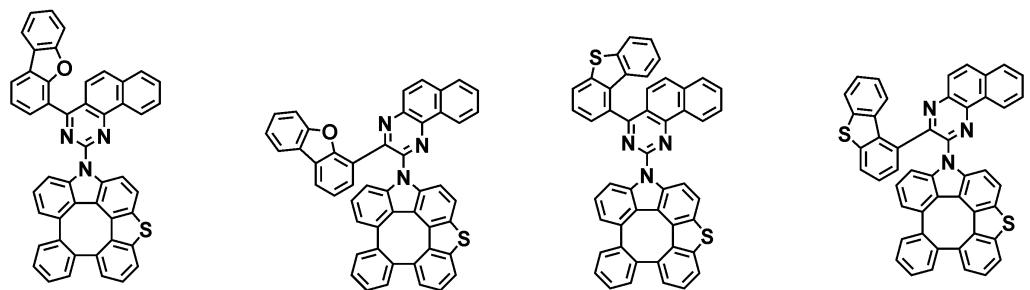
[0175]



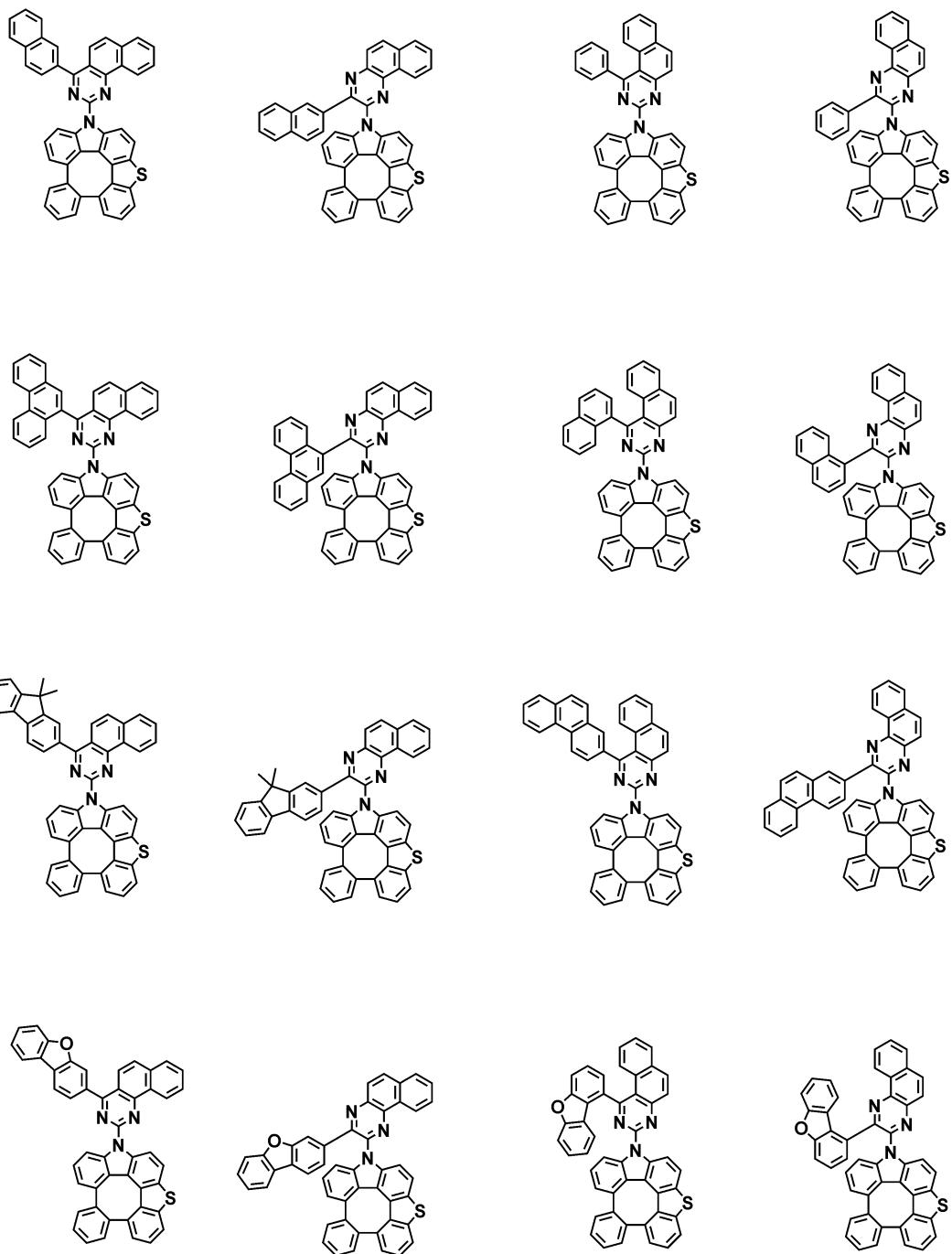
[0176]



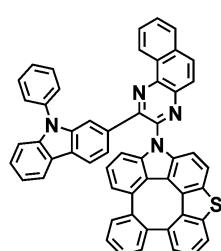
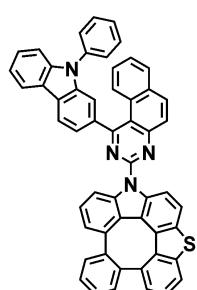
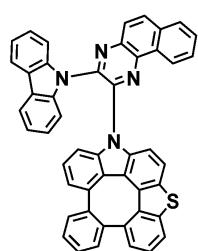
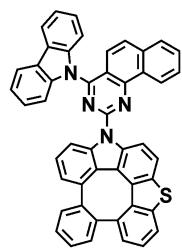
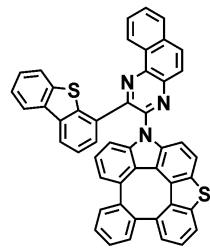
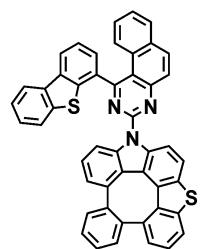
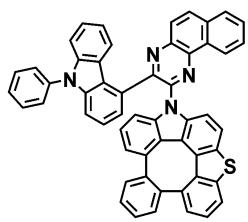
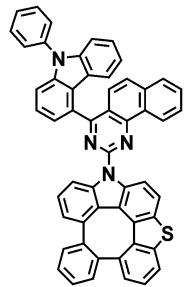
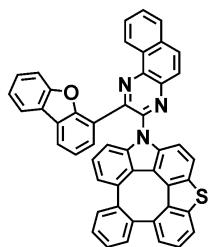
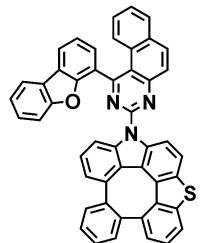
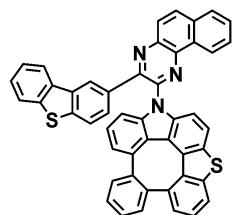
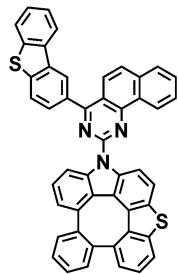
[0177]



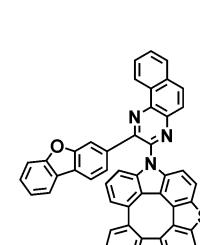
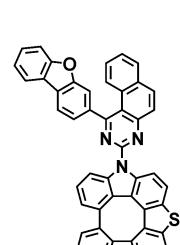
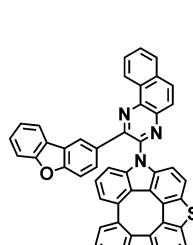
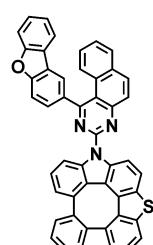
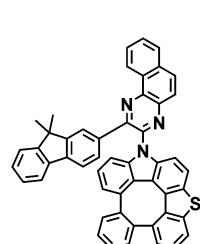
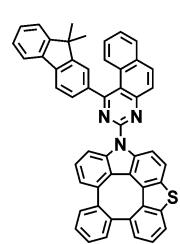
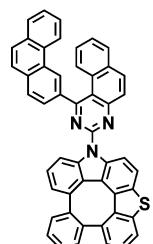
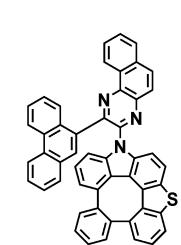
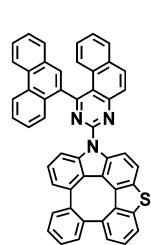
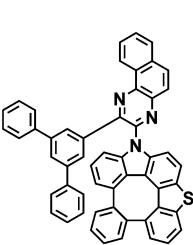
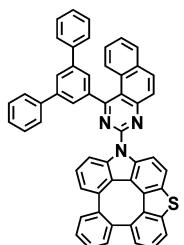
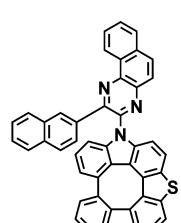
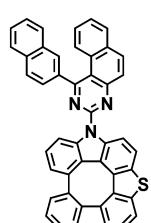
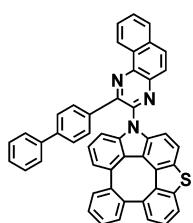
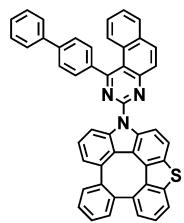
[0178]



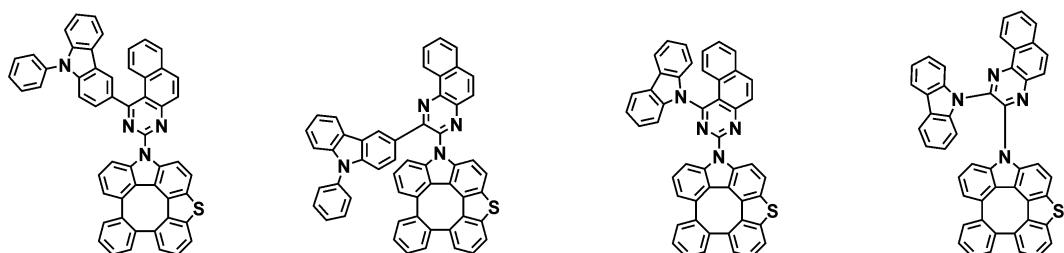
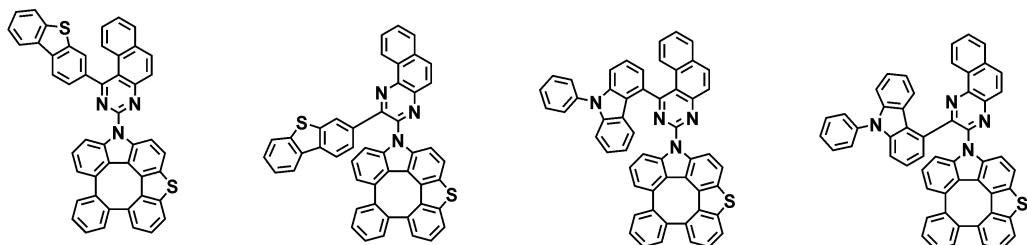
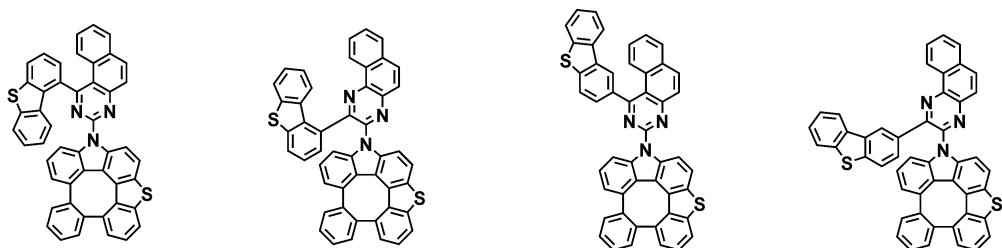
[0179]



[0180]



[0181]

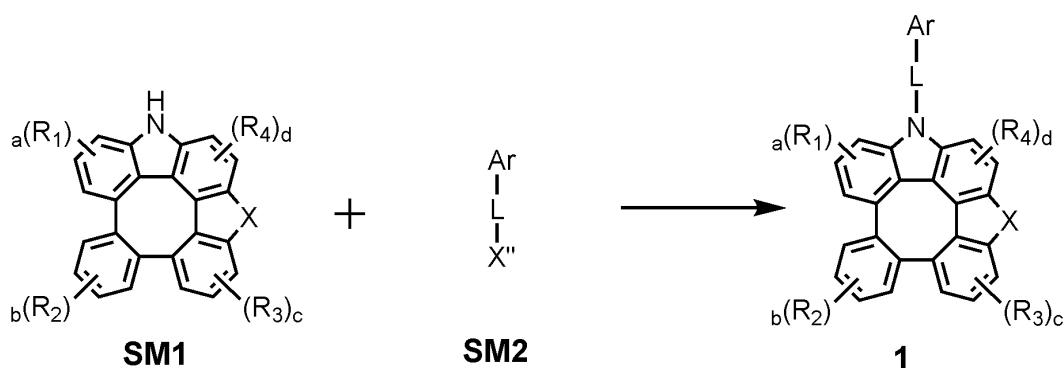


[0182]

[0184] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 일례로 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조할 수 있다.

[0185]

[반응식 1]



[0186]

[0187] 상기 반응식 1에서, X''는 할로겐이고, 바람직하게는 브로모, 또는 클로로이고, 다른 치환기에 대한 정의는 앞서 설명한 바와 같다.

[0188]

구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 아민 치환 반응을 통해 출발물질 SM1 및 SM2가 결합하여 제조된다. 이러한 아민 치환 반응은 팔라듐 촉매와 염기의 존재 하에 수행하는 것이 바람직하다. 또한, 상기 아민 치환 반응을 위한 반응기는 적절히 변경될 수 있고, 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.

[0190]

(유기 발광 소자)

[0191]

또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 일례로, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 발광

층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0193] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 제1 전극이 양극이고, 제2 전극이 음극인, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극이 음극이고, 제2 전극이 양극인, 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.

[0195] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 상기 발광층에 포함될 수 있다.

[0197] 도 2는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자억제층(7), 정공저지층(8), 전자주입 및 수송층(8) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 상기 발광층에 포함될 수 있다.

[0199] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 발광층이 본 발명에 따른 화합물을 포함하고, 상술한 방법과 같이 제조되는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조할 수 있다.

[0201] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 양극, 유기물층 및 음극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물 층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다.

[0203] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0205] 일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.

[0207] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 화합물 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0209] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0211] 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물 층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴 아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페닐렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 화합물 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.

[0213] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 화합물, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0215] 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는 상기 정공수송층 상에 전자억제층을 더 포함할 수 있다. 상기 전자억제층은

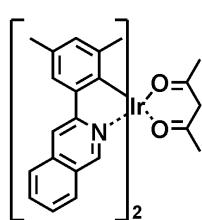
상기 정공수송층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 정공이동도를 조절하고, 전자의 과다한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 전자억제층은 전자억제물질을 포함하고, 이러한 전자억제물질의 예로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하거나, 또는 아릴아민 계열의 유기물 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0217] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도편트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료로는 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물이 사용될 수 있다. 또한, 호스트 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 이외에 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등을 추가로 사용할 수 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 폐난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

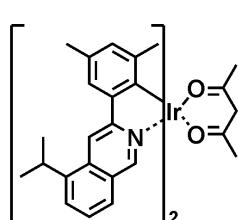
[0219] 또한, 도편트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스트릴아민 화합물, 봉소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 폐리플란텐 등이 있으며, 스트릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 사이클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스트릴아민, 스트릴디아민, 스트릴트리아민, 스트릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0221]

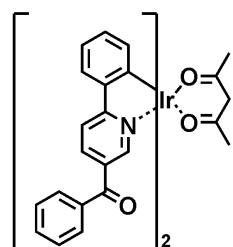
보다 구체적으로는, 상기 도편트 재료로 하기와 같은 화합물이 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



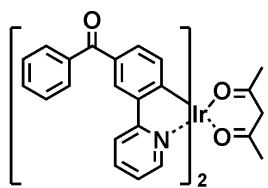
Dp-1



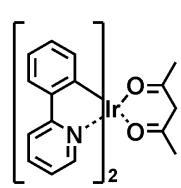
Dp-2



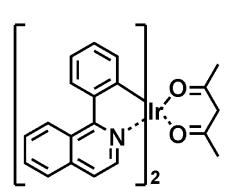
Dp-3



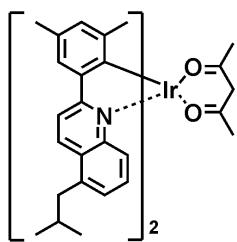
Dp-4



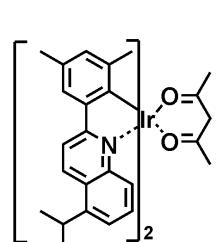
Dp-5



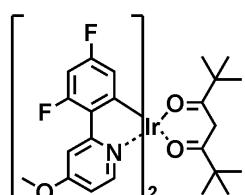
Dp-6



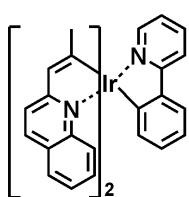
Dp-7



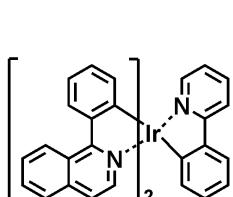
Dp-8



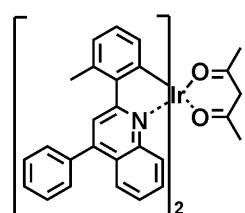
Dp-9



Dp-10

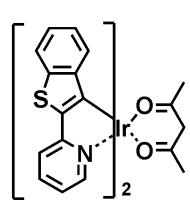


Dp-11

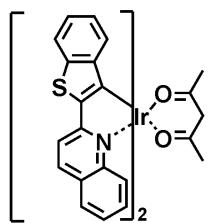


Dp-12

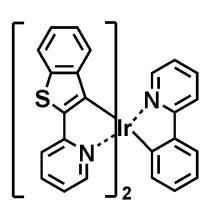
[0223]



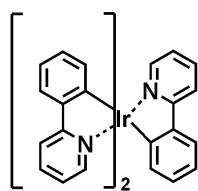
Dp-13



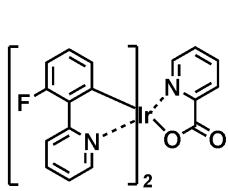
Dp-14



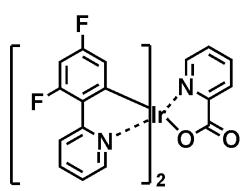
Dp-15



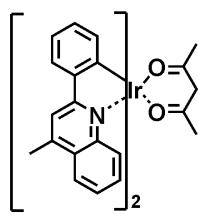
Dp-16



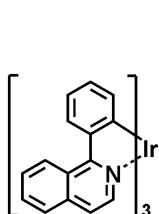
Dp-17



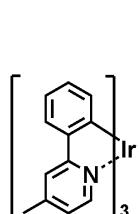
Dp-18



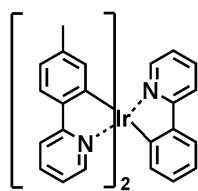
Dp-19



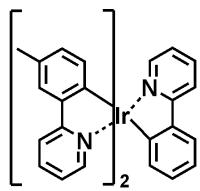
Dp-20



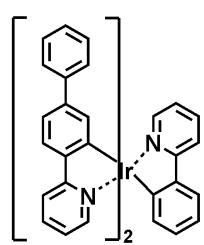
Dp-21



Dp-22

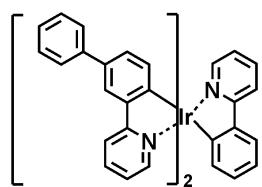


Dp-23

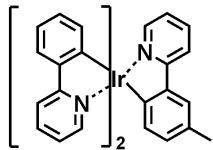


Dp-24

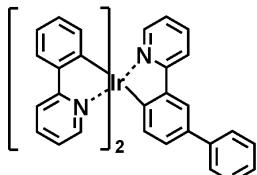
[0224]



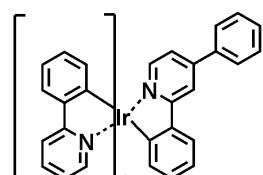
Dp-25



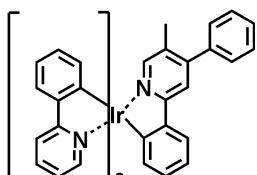
Dp-26



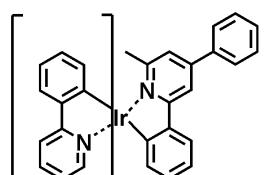
Dp-27



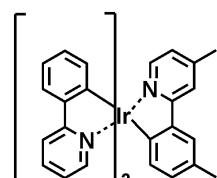
Dp-28



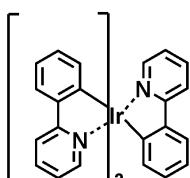
Dp-29



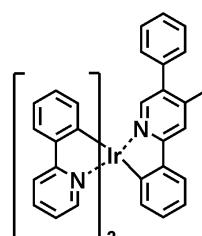
Dp-30



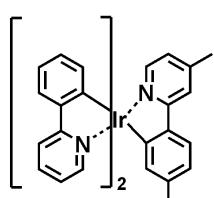
Dp-31



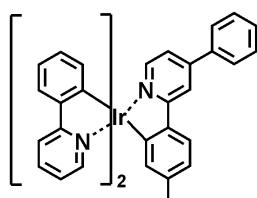
Dp-32



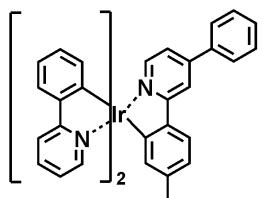
Dp-33



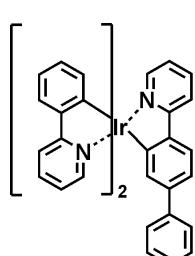
Dp-34



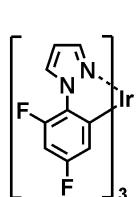
Dp-35



Dp-36



Dp-37



Dp-38

[0225] 또한, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는 상기 발광층 상에 정공저지층을 더 포함할 수 있다. 상기 정공저지층은 발광층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 전자이동도를 조절하고 정공의 과다한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 정공저지층은 정공저지물질을 포함하고, 이러한 정공저지물질의 예로 트리아진을 포함한 아진류 유도체; 트리아졸 유도체; 옥사디아졸 유도체; 페난트롤린 유도체; 포스핀옥사이드 유도체 등의 전자흡인기가 도입된 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0230]

상기 전자 주입 및 수송층은 전극으로부터 전자를 주입하고, 수취된 전자를 발광층까지 수송하는 전자수송층 및 전자주입층의 역할을 동시에 수행하는 층으로, 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성된다. 이러한 전자 주입 및 수송물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 전자 주입 및 수송물질의 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물; 트리아진 유도체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 또는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 플루오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물, 또는 질소 함유 5원환 유도체 등과 함께 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0232]

상기 전자 주입 및 수송층은 전자주입층 및 전자수송층과 같은 별개의 층으로도 형성될 수 있다. 이와 같은 경우, 전자 수송층은 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성되고, 상기 전자 수송층에 포함되는 전자 수송 물질로는 상술한 전자 주입 및 수송 물질이 사용될 수 있다. 또한, 전자 주입층은 상기 전자 수송층 상에 형성되고, 상기 전자 주입층에 포함되는 전자 주입 물질로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO, 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 사용될 수 있다.

[0234]

또한, 본 발명에 따른 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[0236]

상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조는 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0238]

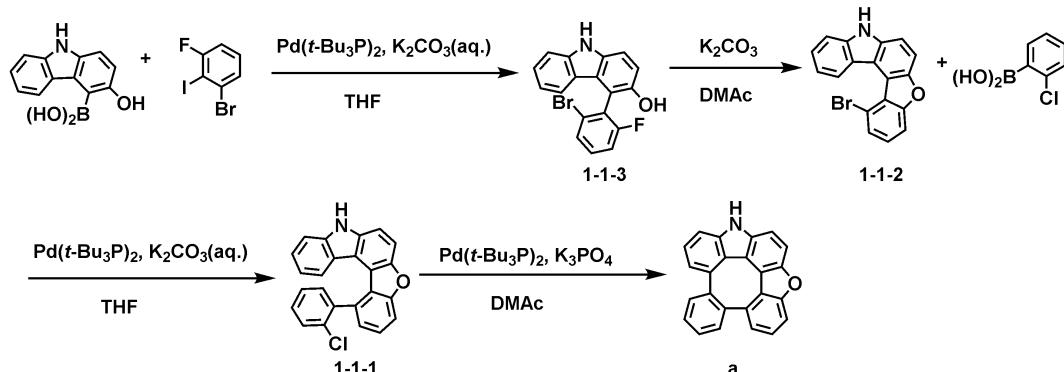
합성 예 및 실시예

[0240]

본 발명의 화합물은 대표적인 반응으로 Buchwald-Hartwig coupling reaction, Heck coupling reaction, Suzuki coupling reaction 등을 이용하여 제조되었다.

[0242]

제조예 A. 화합물 a의 제조



[0243]

1) 화합물 1-1-3의 제조

[0245]

(3-하이드록시-9H-카바졸-4-일)보론산 200.0 g (1.0 eq)와 1-브로모-3-플루오로-2-아이오도벤젠 291.58 g (1.1 eq)을 THF 2 L에 넣고 교반한 다음 포타슘 카보네이트 365.26 g (3.0 eq)를 물에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 환류하였다. 이후, 여기에 Pd(t-Bu₃P)₂ 4.50 g (0.01 eq)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식히고 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1-3 229.06 g 을 얻었다. (수율 73%, MS: [M+H]⁺ = 357)

[0248]

2) 화합물 1-1-2의 제조

[0249]

화합물 1-1-3 229.06 g (1.0 eq) 에 K₂CO₃ 266.64 g (3.00 eq) 을 디이에틸아세트아마이드 (Dimethylacetamide) 1.5 L에 넣고 환류하여 교반하였다. 2시간 후 반응물을 물에 부어서 결정화를 시킨 후

여과하였다. 여과한 고체를 톨루엔에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하여 결정을 떨어트려 식힌 후 여과하였다. 이를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1-2 144.85 g (수율 67 %, MS: $[M+H]^+$ = 337)을 얻었다.

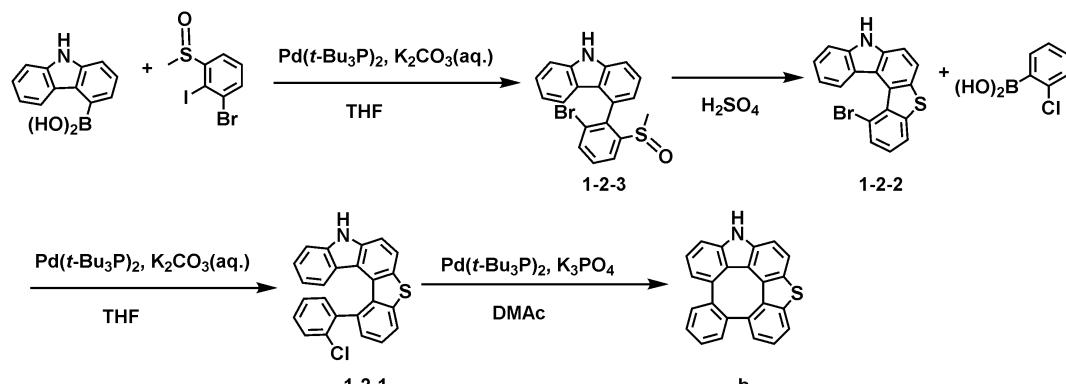
[0251] 3) 화합물 1-1-1의 제조

화합물 1-1-2 144.85 g (1.0 eq)와 (2-클로로페닐)보론산 74.11 g, (1.1 eq)를 THF 1 L에 넣고 교반한 다음 포타슘 카보네이트 178.65 g (3.0 eq)를 물에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 환류하였다. 이후, 여기에 $Pd(t-Bu_3P)_2$ 2.20 g (0.01 eq)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식히고 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 중류하였다. 이를 다시 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1-1 122.03 g 을 얻었다. (수율 77%, MS: $[M+H]^+$ = 369)

[0254] 4) 화합물 a의 제조

화합물 1-1-1 122.03 g (1.0 eq), K_3PO_4 211.27 g (3.0 eq) 을 DMAc 1L 에 녹여 환류하여 교반하였다. 3 시간 후 반응이 종료되면 물에 부어서 결정화를 시킨 후 여과하였다. 이 후 에틸 아세테이트에 완전히 녹여서 물로 씻어주고 다시 감압하여 용매를 70% 정도 제거하였다. 다시 환류 상태에서 혼산을 넣어주며 결정을 떨어트려 식힌 후 여과하였다. 이를 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 a 69.26 g (수율 63 %, MS: $[M+H]^+$ = 332)를 얻었다.

[0257] 제조예 B: 화합물 b의 제조



[0258]

[0260] 1) 화합물 1-2-3의 제조

(9H-카바졸-4-일)보론산 300.0 g (1.0 eq)와 1-브로모-2-아이오도-3-(메틸설피닐)벤젠 539.48 g, (1.1 eq) 를 THF 4 L에 넣고 교반한 다음 포타슘 카보네이트 589.43 g (3.0 eq)를 물에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 환류하였다. 이후, 여기에 $Pd(t-Bu_3P)_2$ 7.26 g (0.01 eq)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식히고 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 중류하였다. 이를 다시 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2-3 387.87 g 을 얻었다. (수율 71%, MS: $[M+H]^+$ = 384)

[0263] 2) 화합물 1-2-2의 제조

화합물 1-2-3 387.87 g (1.0 eq) 에 혼산 1 L에 녹이고 환류하여 교반하였다. 5시간 후 반응물을 물에 부어서 결정화를 시킨 후 여과하였다. 여과한 고체를 톨루엔에 완전히 녹인 후 K_3PO_4 수용액으로 여러번 씻어 주며 중화시켰다. 이후 생성물이 녹아있는 용액에 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 감압 농축하여 결정을 떨어트려 식힌 후 여과하였다. 이를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2-2 184.87 g (수율 52 %, MS: $[M+H]^+$ = 353)을 얻었다.

[0266] 3) 화합물 1-2-1의 제조

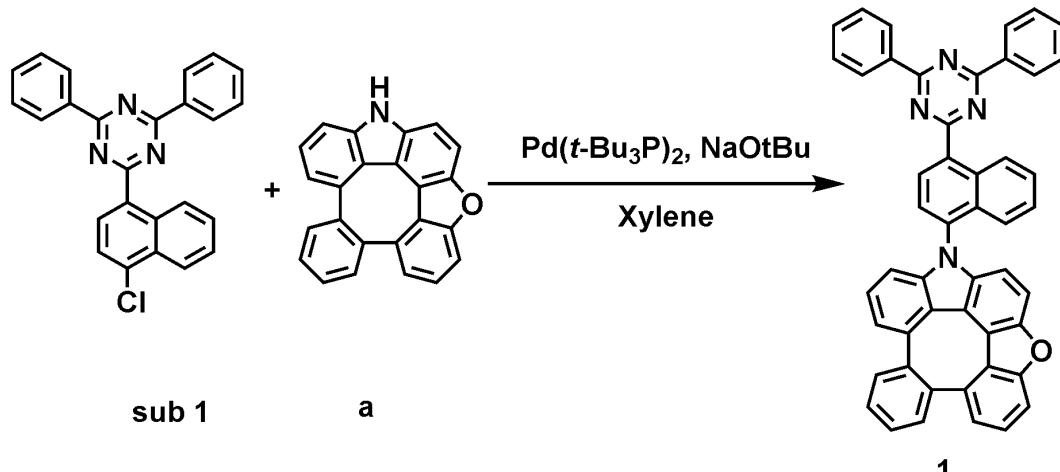
화합물 1-2-2 184.87 g (1.0 eq)와 (2-클로로페닐)보론산 90.27 g, (1.1 eq) 를 THF 1.5 L에 넣고 교반한 다음 포타슘 카보네이트 217.62 g (3.0 eq)를 물에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 환류하였다. 이후, 여기에

Pd(*t*-Bu₃P)₂ 2.68 g (0.01 eq)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식히고 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2-1 149.09 g 을 얻었다. (수율 74%, MS: [M+H]⁺ = 384)

[0269] 4) 화합물 b의 제조

화합물 a-1 149.09 g (1.0 eq), K₃PO₄ 247.33 g (3.0 eq) 을 DMAc 1L 에 녹여 환류하여 교반하였다. 3 시간 후 반응이 종료되면 물에 부어서 결정화를 시킨 후 여과하였다. 이 후 에틸 아세테이트에 완전히 녹여서 물로 씻어 주고 다시 감압하여 용매를 70% 정도 제거하였다. 다시 환류 상태에서 혼산을 넣어주며 결정을 떨어트려 식힌 후 여과하였다. 이를 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 b 82.31 g (수율 61 %, MS: [M+H]⁺ = 348)를 얻었다.

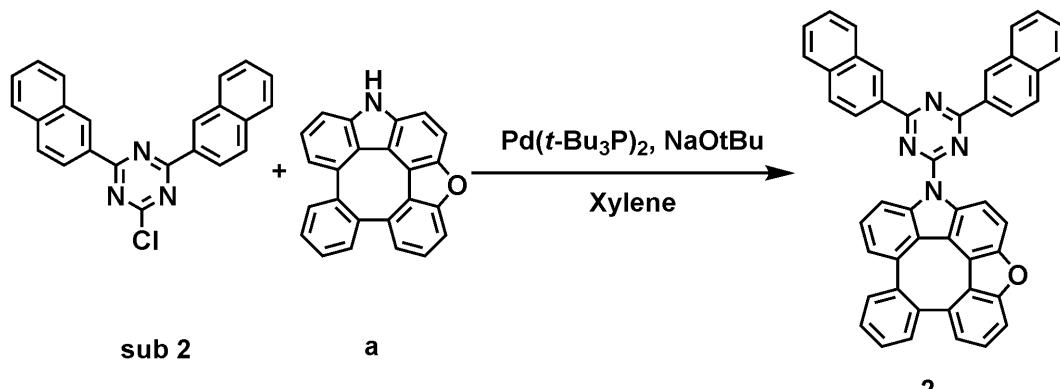
[0272] 합성예 1: 화합물 1의 제조



[0273]

질소 분위기에서 sub 1 (10 g, 25.4mmol), 화합물 a (8.4 g, 25.4 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (4.9 g, 50.8 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-*tert*-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 1 5.6 g 을 얻었다. (수율 32%, MS: [M+H]⁺ = 690)

[0276] 합성예 2: 화합물 2의 제조



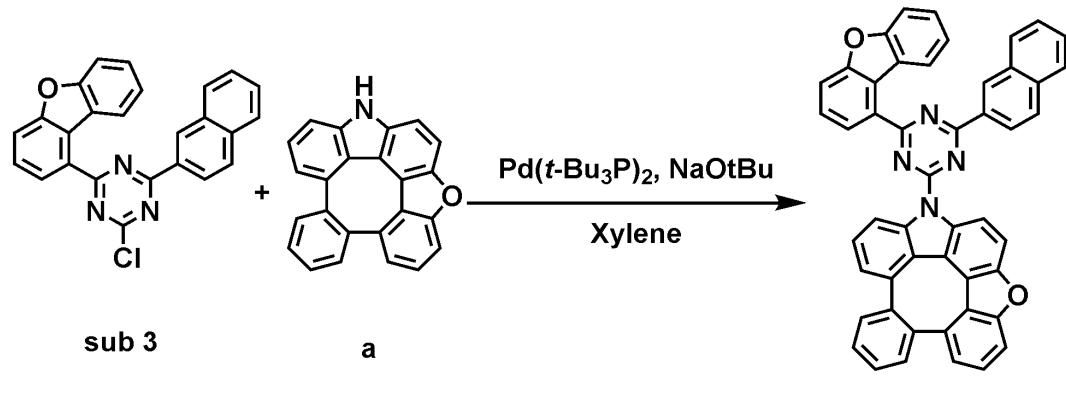
[0277]

질소 분위기에서 sub 2 (10 g, 27.2mmol), 화합물 a (9 g, 27.2 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드 (5.2 g, 54.4 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-*tert*-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 2 10.3 g

을 얻었다. (수율 57%, MS: $[M+H]^+= 664$)

[0280]

합성예 3: 화합물 3의 제조



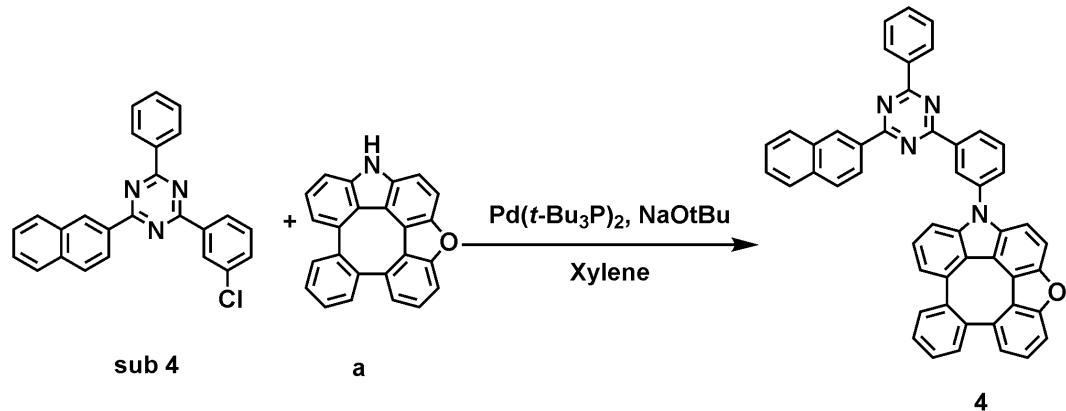
[0281]

[0282]

질소 분위기에서 sub 3 (10 g, 24.5 mmol), 화합물 a (8.1 g, 24.5 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.7 g, 49 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 3 6.7 g 을 얻었다. (수율 39%, MS: $[M+H]^+= 704$)

[0284]

합성예 4: 화합물 4의 제조



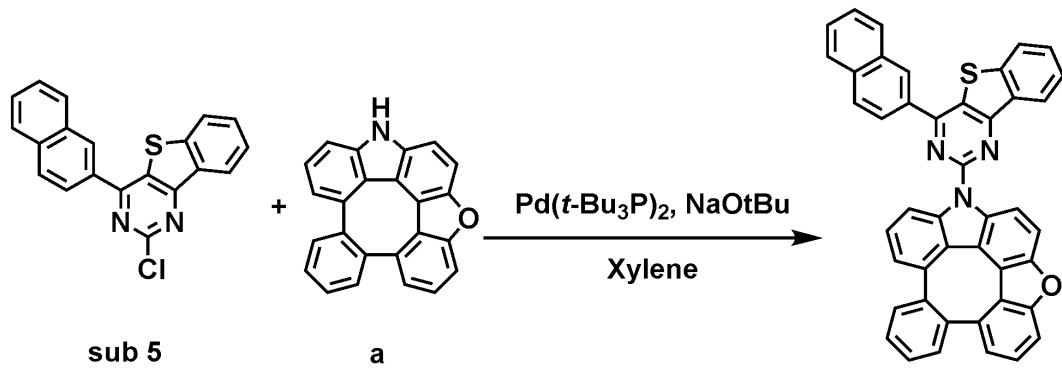
[0285]

[0286]

질소 분위기에서 sub 4 (10 g, 25.4 mmol), 화합물 a (8.4 g, 25.4 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.9 g, 50.8 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 4 6.8 g 을 얻었다. (수율 39%, MS: $[M+H]^+= 690$)

[0288]

합성예 5: 화합물 5의 제조



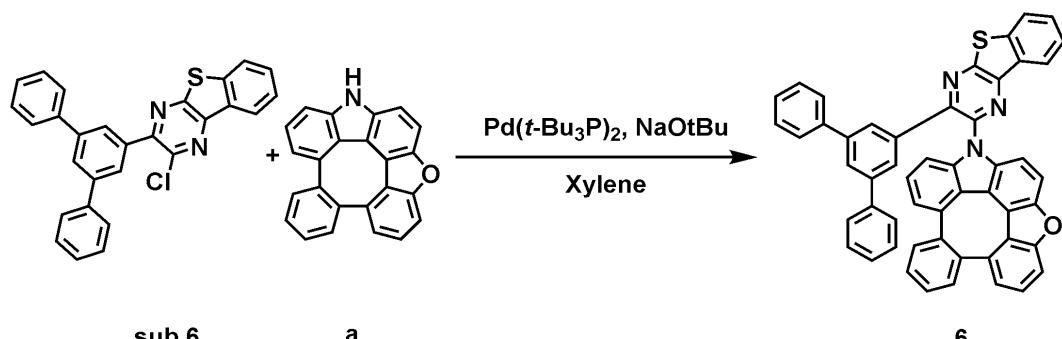
[0289]

[0290]

질소 분위기에서 sub 5 (10 g, 28.8 mmol), 화합물 a (9.6 g, 28.8 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5.5 g, 57.7 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.6 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식하고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 걸 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 5.6.5 g 을 얻었다. (수율 35%. MS: $[M+H]^+$ = 643)

[0292]

합성예 6: 화합물 6의 제조



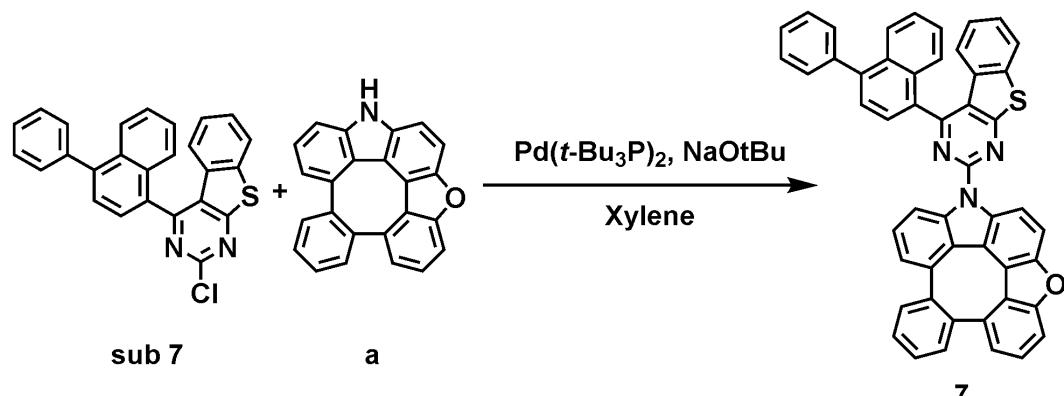
[0293]

[0294]

질소 분위기에서 sub 6 (10 g, 22.3 mmol), 화합물 a (7.4 g, 22.3 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.3 g, 44.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.4 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 6 8.1 g 을 얻었다. (수율 49%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 745$)

[0296]

합성 예 7: 화합물 7의 제조



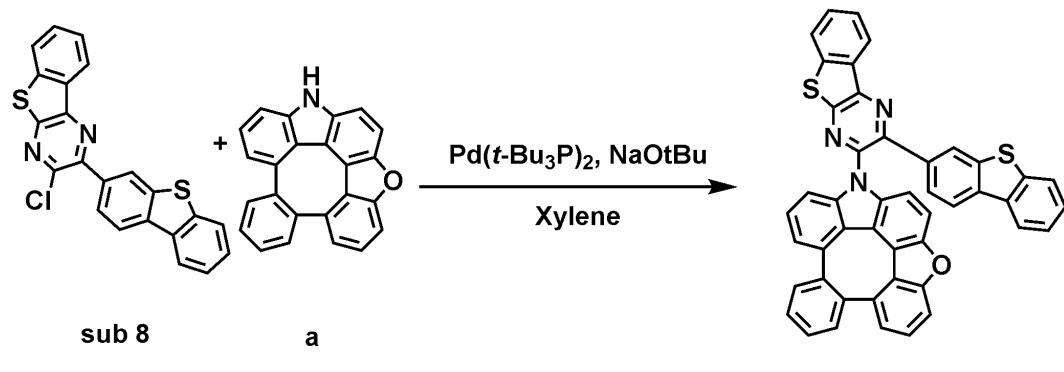
[0297]

[0298]

질소 분위기에서 sub 7 (10 g, 23.6 mmol), 화합물 a (7.8 g, 23.6 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.5 g, 47.3 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 7 g 을 얻었다. (수율 47%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 719$)

[0300]

합성 예 8: 화합물 8의 제조



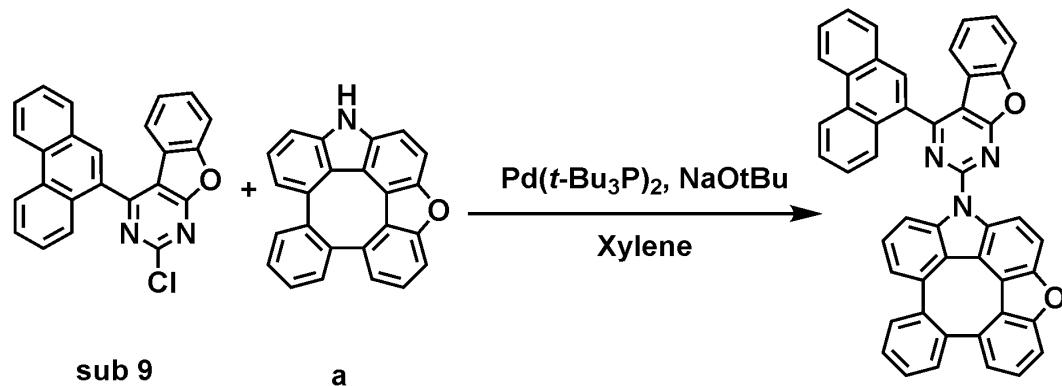
[0301]

[0302]

질소 분위기에서 sub 8 (10 g, 24.8 mmol), 화합물 a (8.2 g, 24.8 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.8 g, 49.6 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 8 9.2 g 을 얻었다. (수율 53%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 699$)

[0304]

합성 예 9: 화합물 9의 제조



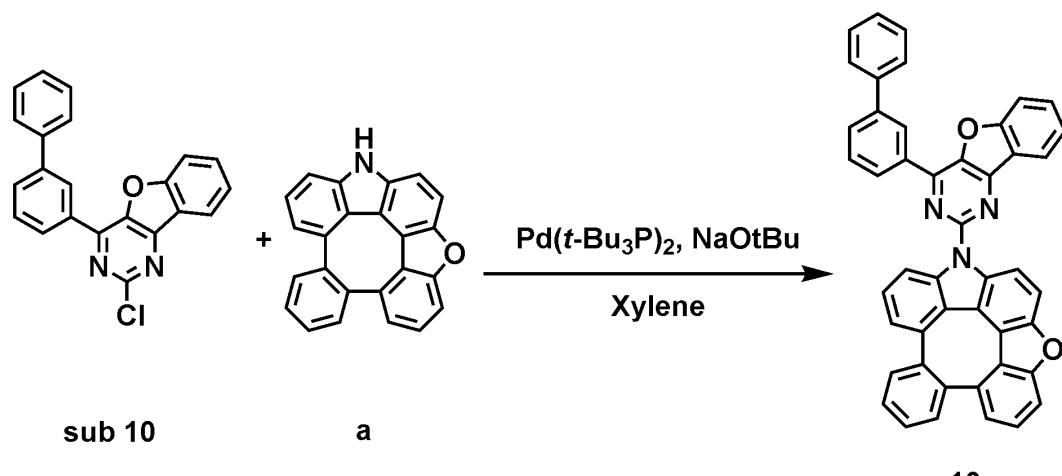
[0305]

[0306]

질소 분위기에서 sub 9 (10 g, 26.3 mmol), 화합물 a (8.7 g, 26.3 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 52.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 9 5.7 g 을 얻었다. (수율 32%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 677$)

[0308]

합성 예 10: 화합물 10의 제조



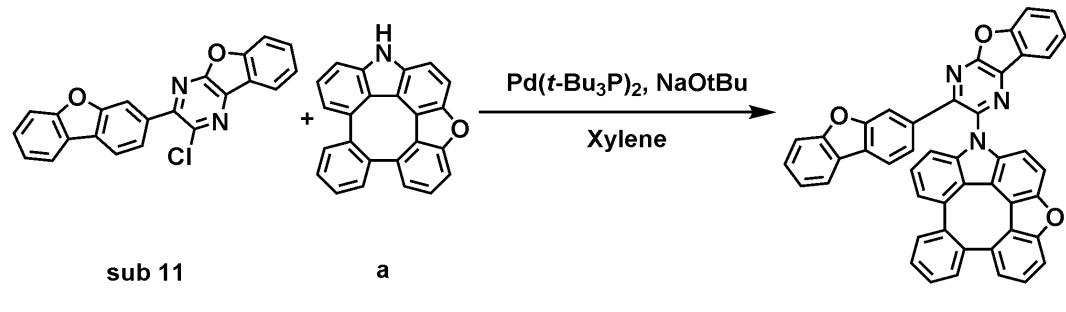
[0309]

[0310]

질소 분위기에서 sub 10 (10 g, 28 mmol), 화합물 a (9.3 g, 28 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5.4 g, 56.1 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.6 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 10 9.3 g 을 얻었다. (수율 51%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 653$)

[0312]

합성예 11: 화합물 11의 제조



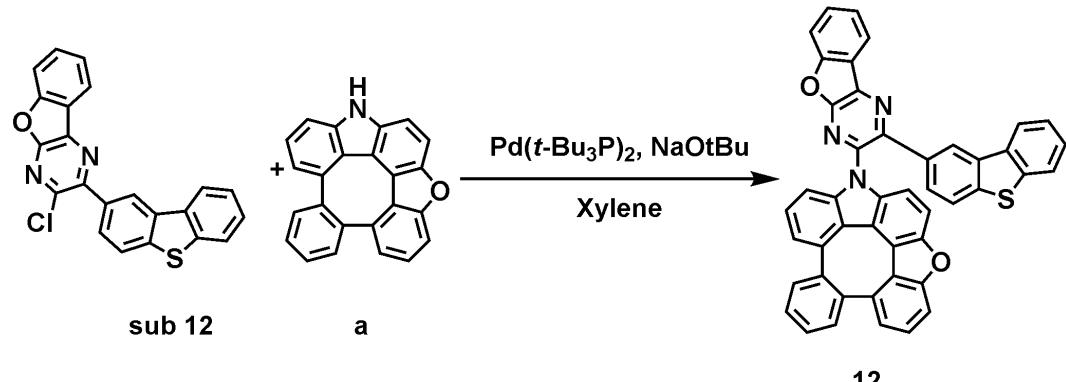
[0313]

[0314]

질소 분위기에서 sub 11 (10 g, 27 mmol), 화합물 a (8.9 g, 27 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5.2 g, 53.9 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 11 6.6 g 을 얻었다. (수율 37%, MS: $[M+H]^+$ = 667)

[0316]

합성예 12: 화합물 12의 제조



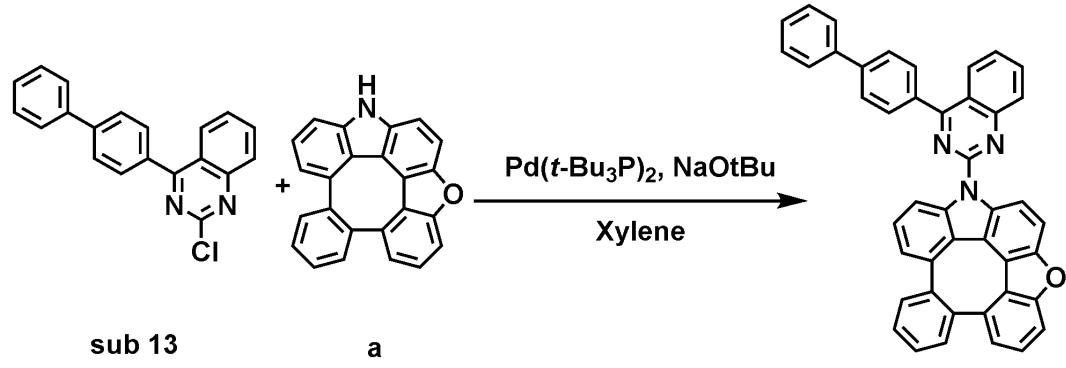
[0317]

[0318]

질소 분위기에서 sub 12 (10 g, 25.8mmol), 화합물 a (8.6 g, 25.8 mmol), 소듐 tert-부록사이드 (5 g, 51.7 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 12 (5.6 g)을 얻었다. (수율 32%, MS: $[M+H]^+$ = 683)

[0320]

합성예 13: 화합물 13의 제조



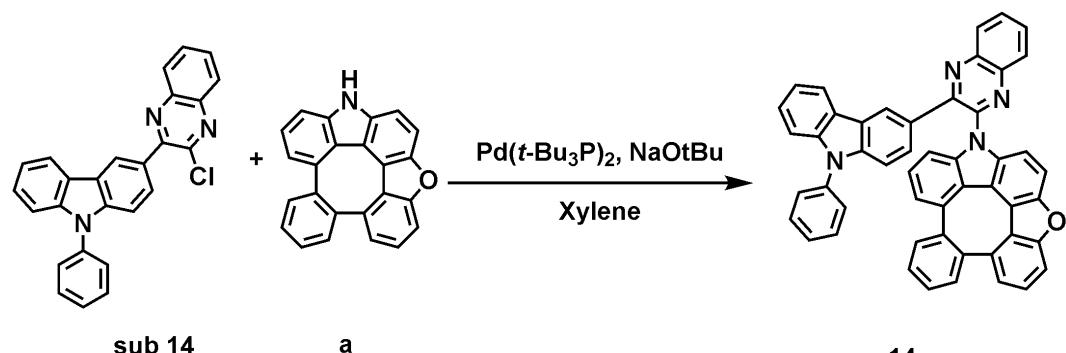
[0321]

[0322]

질소 분위기에서 sub 13 (10 g, 31.6 mmol), 화합물 a (10.5 g, 31.6 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (6.1 g, 63.1 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.6 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 13 9.8 g 을 얻었다. (수율 51%, MS: $[M+H]^+$ = 613)

[0324]

합성예 14: 화합물 14의 제조



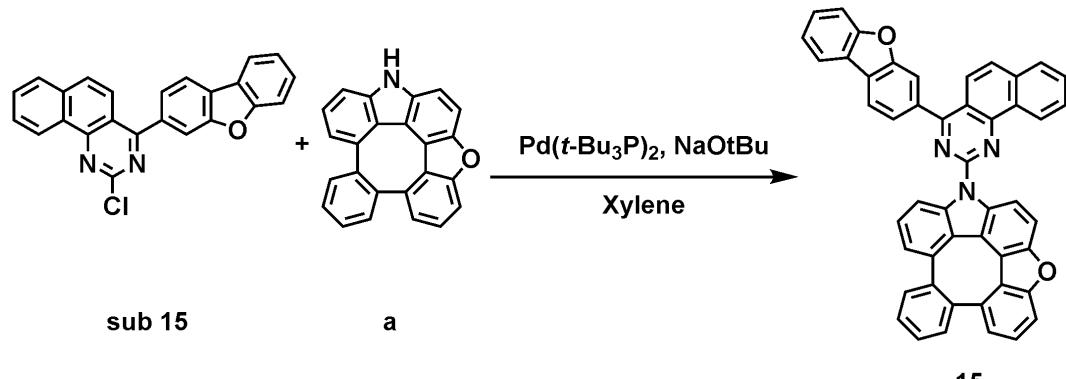
[0325]

[0326]

질소 분위기에서 sub 14 (10 g, 24.6 mmol), 화합물 a (8.2 g, 24.6 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.7 g, 49.3 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 14 5.2 g 을 얻었다. (수율 30%, MS: $[M+H]^+$ = 702)

[0328]

합성예 15: 화합물 15의 제조



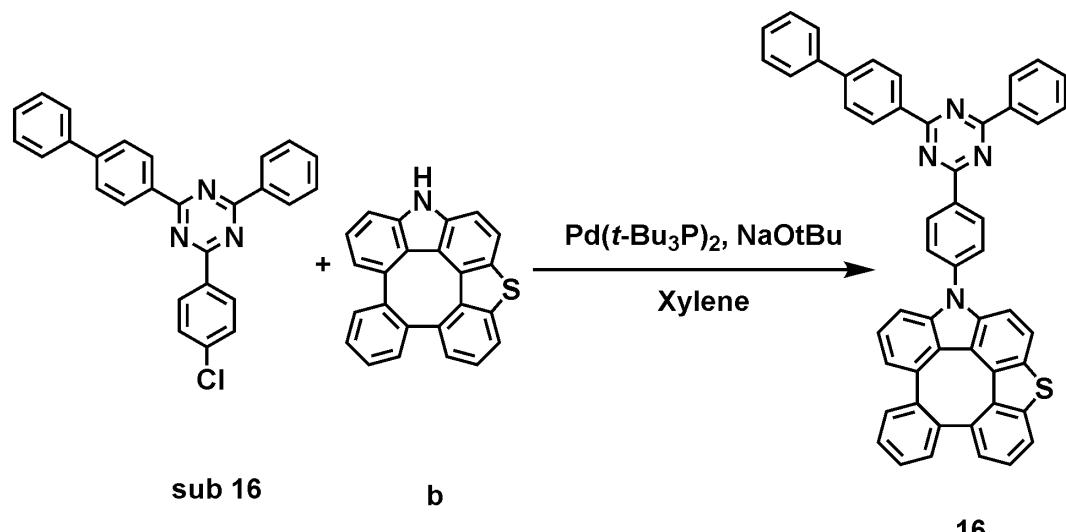
[0329]

[0330]

질소 분위기에서 sub 15 (10 g, 26.3mmol), 화합물 a (8.7 g, 26.3 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 52.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 15 5.9 g 을 얻었다. (수율 33%, MS: $[M+H]^+$ = 677)

[0332]

학설예 16: 화합물 16의 제조



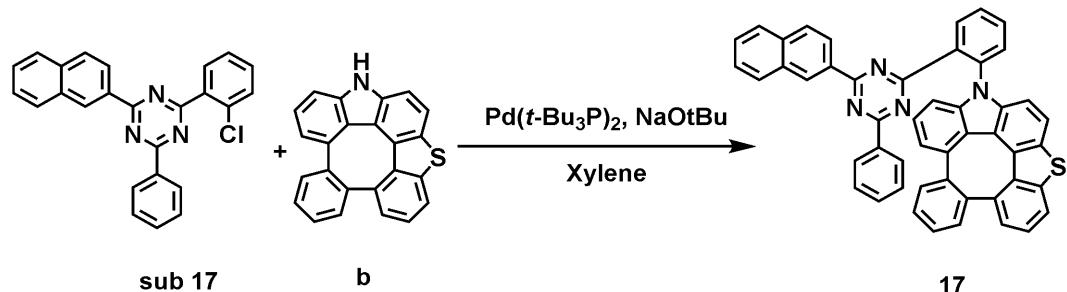
[0333]

[0334]

질소 분위기에서 sub 16 (10 g, 26.3 mmol), 화합물 b (9.1 g, 26.3 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 52.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 16 9.2 g 을 얻었다. (수율 48%, MS: $[M+H]^+$ = 732)

[0336]

합성예 17: 화합물 17의 제조



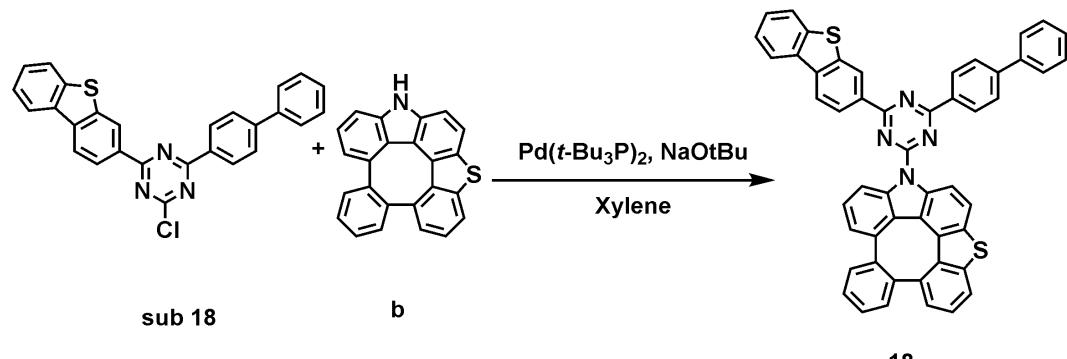
[0337]

[0338]

질소 분위기에서 sub 17 (10 g, 25.4 mmol), 화합물 b (8.8 g, 25.4 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.9 g, 50.8 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 17 5.9 g 을 얻었다. (수율 33%, MS: $[M+H]^+$ = 706)

〔0340〕

합성예 18: 화합물 18의 제조



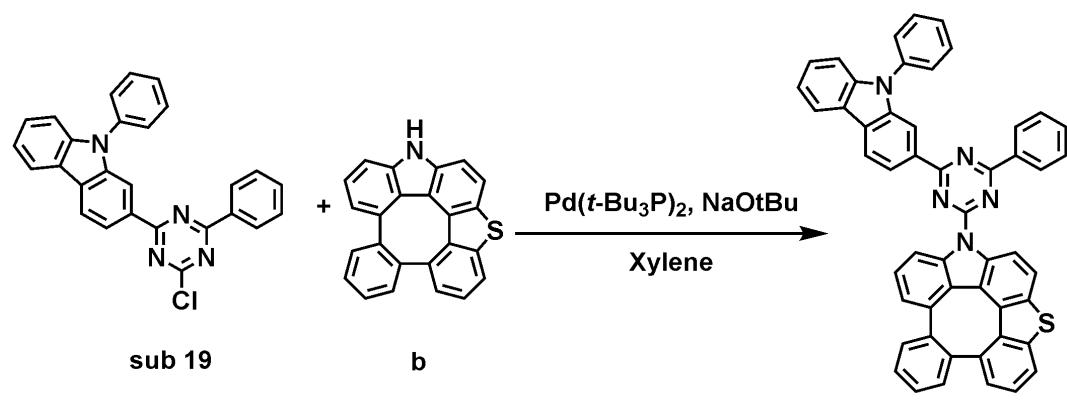
[0341]

[0342]

질소 분위기에서 sub 18 (10 g, 22.2 mmol), 화합물 b (7.7 g, 22.2 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.3 g, 44.4 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.4 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 18 (9.6 g)을 얻었다. (수율 57%, MS: $[M+H]^+$ = 762)

[0344]

학설예 19: 화합물 19의 제조

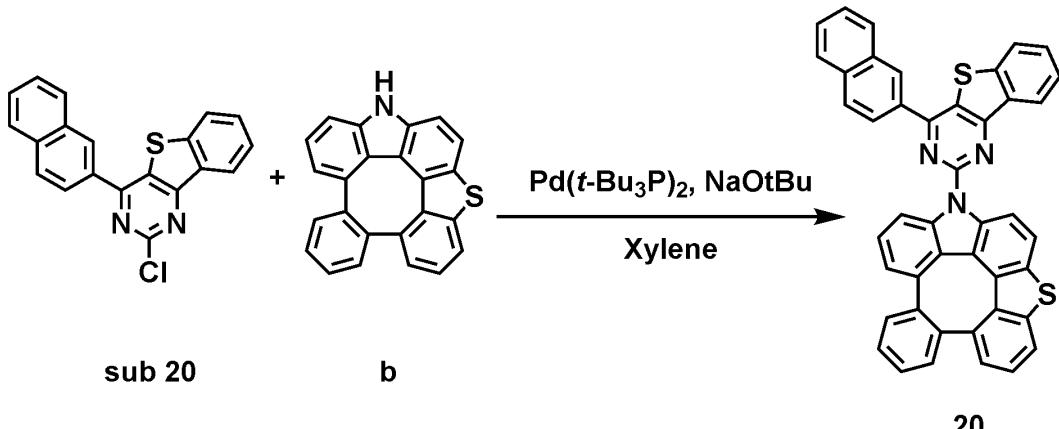


[0345]

[0346]

mmol) 을 차일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 19.7.9 g 을 얻었다. (수율 46%, MS: $[M+H]^+$ = 745)

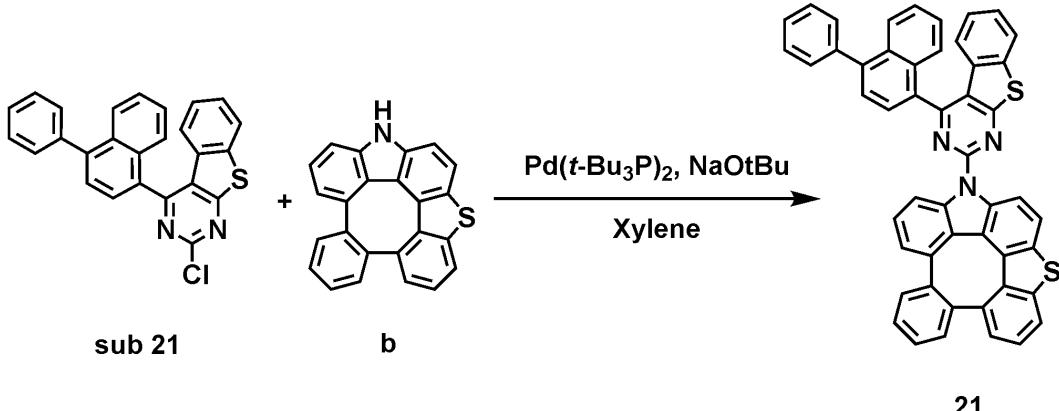
[0348] 합성예 20: 화합물 20의 제조



[0349]

질소 분위기에서 sub 20 (10 g, 28.8mmol), 화합물 b (10 g, 28.8 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5.5 g, 57.7 mmol) 을 차일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.6 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 20 8.3 g 을 얻었다. (수율 44%, MS: $[M+H]^+$ = 659)

[0350] 합성예 21: 화합물 21의 제조

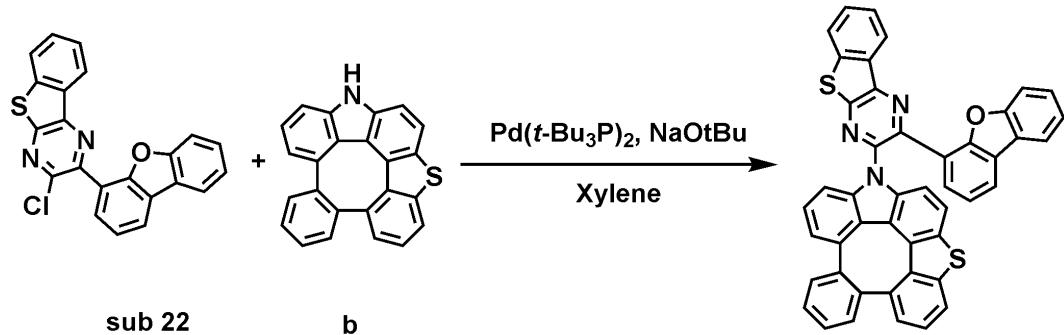


[0353]

질소 분위기에서 sub 21 (10 g, 23.6mmol), 화합물 b (8.2 g, 23.6 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.5 g, 47.3 mmol) 을 차일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 21 9.4 g 을 얻었다. (수율 54%, MS: $[M+H]^+$ = 735)

[0356]

합성 예 22: 화합물 22의 제조



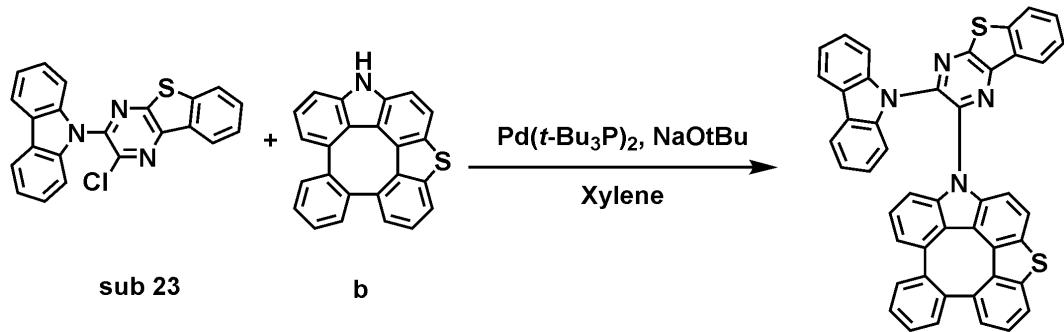
[0357]

[0358]

질소 분위기에서 sub 22 (10 g, 25.8mmol), 화합물 b (9 g, 25.8 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 51.7 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 22 8.8 g 을 얻었다. (수율 49%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 699$)

[0360]

합성 예 23: 화합물 23의 제조



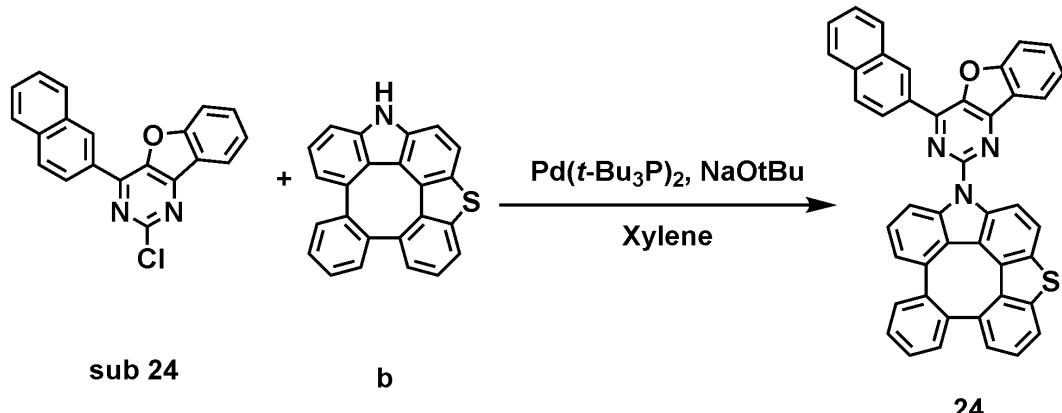
[0361]

[0362]

질소 분위기에서 sub 23 (10 g, 25.9mmol), 화합물 b (9 g, 25.9 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 51.8 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 23 8.8 g 을 얻었다. (수율 49%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 698$)

[0364]

합성예 24: 화합물 24의 제조



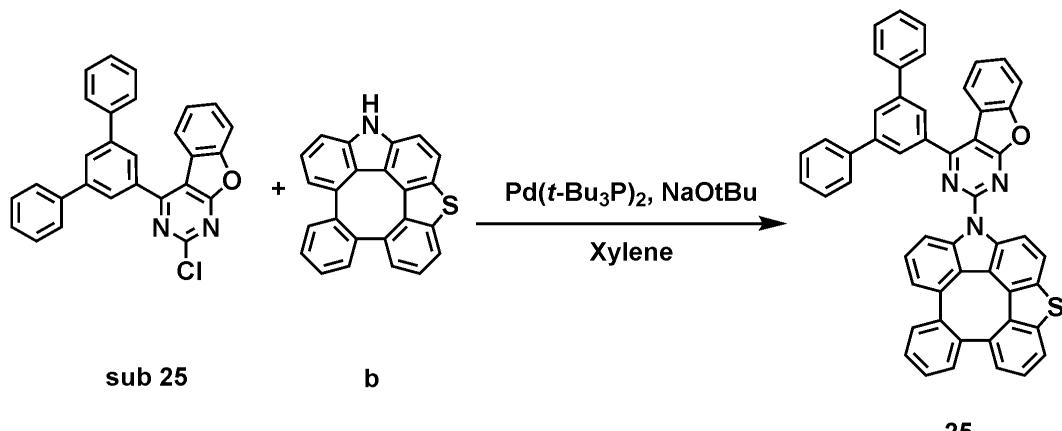
[0365]

[0366]

질소 분위기에서 sub 24 (10 g, 30.2 mmol), 화합물 b (10.5 g, 30.2 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5.8 g, 60.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.6 mmol)을 투입하였다. 3시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 24 11.4 g 을 얻었다. (수율 59%, MS: $[M+H]^+$ = 643)

[0368]

합성예 25: 화합물 25의 제조



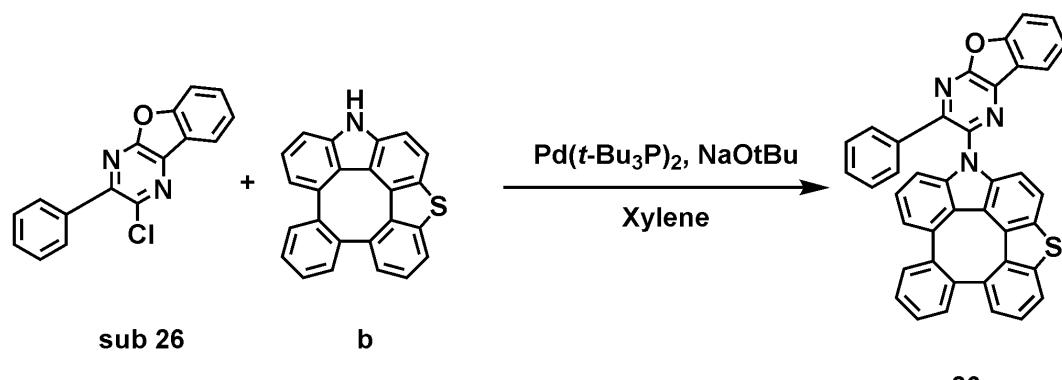
[0369]

[0370]

질소 분위기에서 sub 25 (10 g, 23.1 mmol), 화합물 b (8 g, 23.1 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.4 g, 46.2 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.2 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 25 8.6 g 을 얻었다. (수율 50%, MS: $[M+H]^+$ = 745)

[0372]

합성 예 26: 화합물 26의 제조



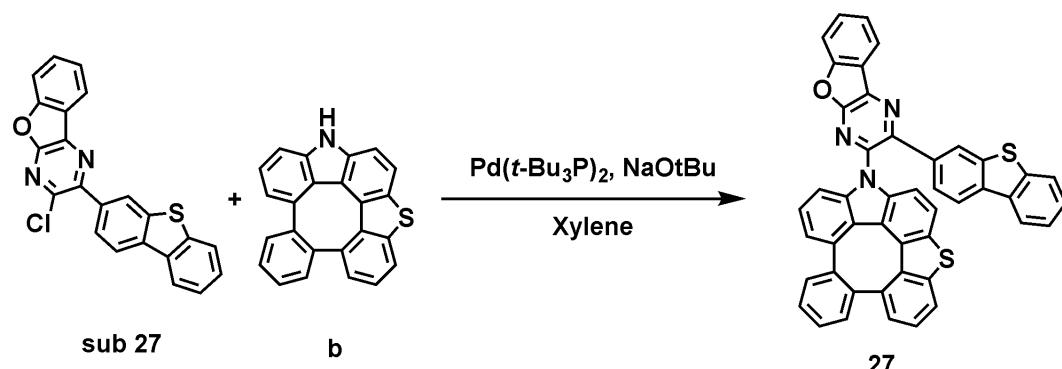
[0373]

[0374]

질소 분위기에서 sub 26 (10 g, 35.6 mmol), 화합물 b (12.4 g, 35.6 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (6.8 g, 71.2 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.4 g, 0.7 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 26 9.9 g 을 얻었다. (수율 47%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 593$)

[0376]

합성 예 27: 화합물 27의 제조



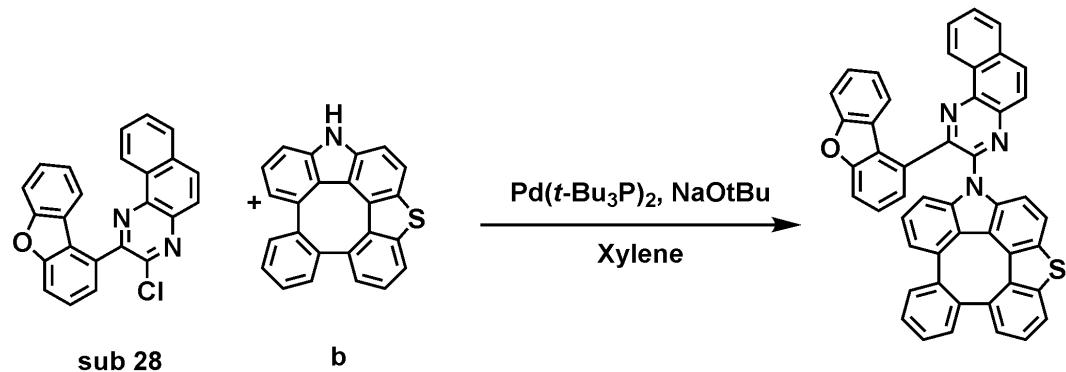
[0377]

[0379]

질소 분위기에서 sub 27 (10 g, 25.8 mmol), 화합물 b (9 g, 25.8 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 51.7 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 27 7.8 g 을 얻었다. (수율 43%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 699$)

[0381]

합성 예 28: 화합물 28의 제조



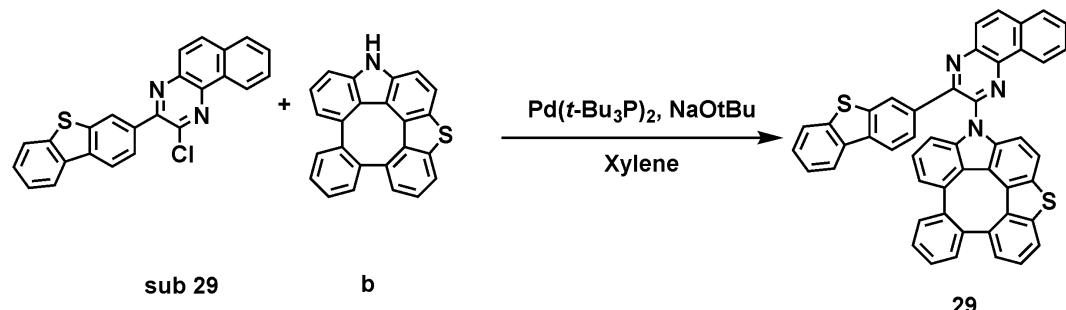
[0382]

[0383]

질소 분위기에서 sub 28 (10 g, 26.3mmol), 화합물 b (9.1 g, 26.3 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (5 g, 52.5 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 28 9.4 g 을 얻었다. (수율 52%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 693$)

[0385]

합성 예 29: 화합물 29의 제조



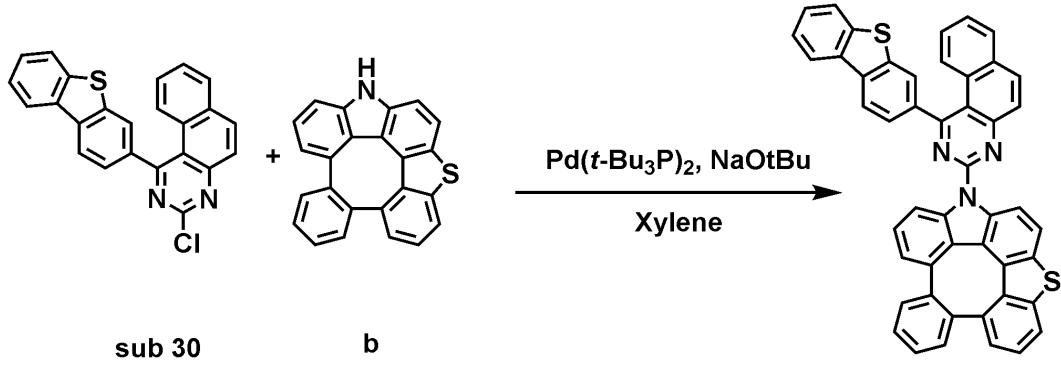
[0386]

[0388]

질소 분위기에서 sub 29 (10 g, 25.2mmol), 화합물 b (8.8 g, 25.2 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.8 g, 50.4 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 2시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 29 8.7 g 을 얻었다. (수율 49%, MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 709$)

[0390]

합성예 30: 화합물 30의 제조



[0391]

[0392]

질소 분위기에서 sub 30 (10 g, 25.2 mmol), 화합물 b (8.8 g, 25.2 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (4.8 g, 50.4 mmol) 을 자일렌 200 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0) (0.3 g, 0.5 mmol)을 투입하였다. 4시간 후 반응이 종결 되어서 상온으로 식히고 감압하여 용매를 제거하였다. 이 후 화합물을 다시 클로로포름에 완전히 녹이고 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여 무수황산마그네슘 처리 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제해서 화합물 30 10 g 을 얻었다. (수율 56%, MS: $[M+H]^+$ = 709)

[0394]

비교예 1: 유기 발광 소자의 제조

[0395]

ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용했다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행했다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[0396]

이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 정공주입층으로 하기 HI-1 화합물을 1150 \AA 의 두께로 형성하되 하기 A-1 화합물을 1.5% 농도로 p-doping 하였다. 상기 정공주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 진공 증착하여 막 두께 800 \AA 의 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 150 \AA 으로 하기 EB-1 화합물을 진공 증착하여 전자억제층을 형성하였다.

[0397]

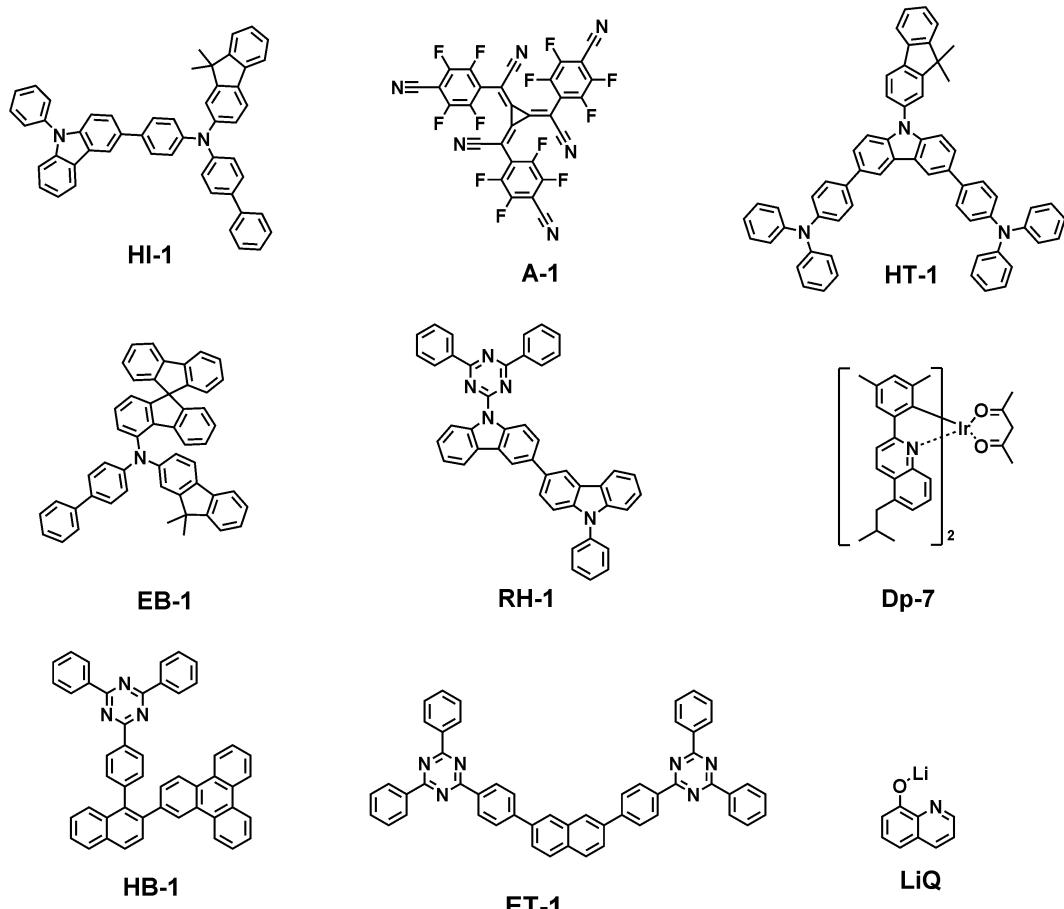
이어서, 상기 EB-1 증착막 위에 호스트 물질로 하기 RH-1 화합물과 도편트 물질로 하기 Dp-7 화합물을 98:2의 중량비로 진공 증착하여 400Å 두께의 적색 발광층을 형성하였다.

[0398]

상기 발광층 위에 막 두께 30Å으로 하기 HB-1 화합물을 진공 증착하여 정공저지층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공저지층 위에 하기 ET-1 화합물과 하기 LiQ 화합물을 2:1의 중량비로 진공 증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다.

[0399]

상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께로 리튬플로라이드(LiF)와 1,000Å 두께로 알루미늄을 층착하여 음극을 형성하였다.



[0400]

상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 $0.4\sim0.7\text{\AA/sec}$ 를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3\AA/sec , 알루미늄은 2\AA/sec 의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $2\times10^{-7}\sim5\times10^{-6}$ torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작했다.

[0404]

실시예 1 내지 실시예 30

[0405]

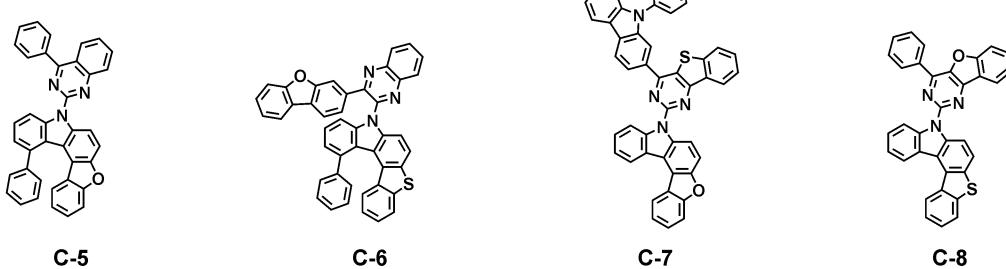
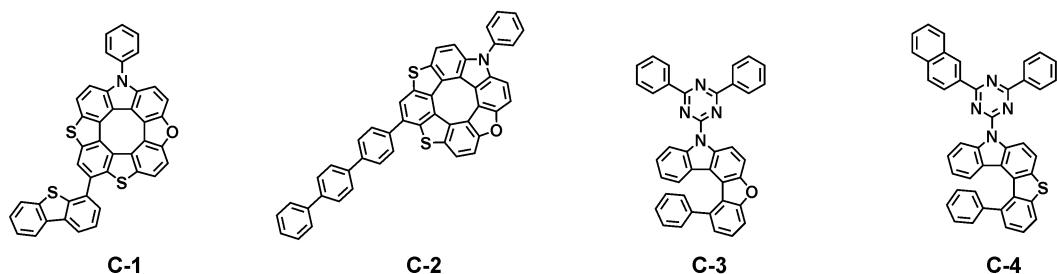
비교예 1의 유기 발광 소자에서 발광층의 호스트 물질로 RH-1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0407]

비교예 2 내지 비교예 9

[0408]

비교예 1의 유기 발광 소자에서 발광층의 호스트 물질로 RH-1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다. 이때, 비교예에 사용된 화합물 C-1 내지 C-8의 구조는 하기와 같다.



[0409]

실험 예 1: 소자 특성 평가

[0412]

상기 실험 예 1 내지 실험 예 30 및 비교 예 1 내지 비교 예 9에서 제조한 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 전압, 효율을 측정($10 \text{ mA}/\text{cm}^2$)하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, 수명 T95는 휘도가 초기 휘도(6000 nit)에서 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

[0414]

구분	물질	구동전압 (V)	효율 (cd/A)	수명 T95 (hr)	발광색
비교 예 1	RH-1	4.04	21.3	120	적색
실시 예 1	화합물 1	3.50	28.4	204	적색
실시 예 2	화합물 2	3.53	28.2	207	적색
실시 예 3	화합물 3	3.54	27.5	183	적색
실시 예 4	화합물 4	3.58	28.7	186	적색
실시 예 5	화합물 5	3.63	26.2	195	적색
실시 예 6	화합물 6	3.69	26.8	180	적색
실시 예 7	화합물 7	3.65	26.3	168	적색
실시 예 8	화합물 8	3.67	26.7	181	적색
실시 예 9	화합물 9	3.63	26.9	174	적색
실시 예 10	화합물 10	3.61	26.8	188	적색
실시 예 11	화합물 11	3.60	26.1	164	적색
실시 예 12	화합물 12	3.61	26.8	161	적색
실시 예 13	화합물 13	3.80	25.0	211	적색
실시 예 14	화합물 14	3.71	26.4	179	적색
실시 예 15	화합물 15	3.69	26.8	183	적색
실시 예 16	화합물 16	3.50	28.9	190	적색
실시 예 17	화합물 17	3.51	28.6	201	적색
실시 예 18	화합물 18	3.48	28.1	205	적색
실시 예 19	화합물 19	3.51	28.2	214	적색
실시 예 20	화합물 20	3.63	27.3	183	적색
실시 예 21	화합물 21	3.60	26.5	170	적색
실시 예 22	화합물 22	3.64	26.4	163	적색
실시 예 23	화합물 23	3.70	26.2	184	적색
실시 예 24	화합물 24	3.69	26.7	185	적색
실시 예 25	화합물 25	3.68	26.3	194	적색
실시 예 26	화합물 26	3.69	26.5	193	적색
실시 예 27	화합물 27	3.65	27.2	181	적색

실시예 28	화합물 28	3.65	26.4	191	적색
실시예 29	화합물 29	3.71	27.3	173	적색
실시예 30	화합물 30	3.77	27.6	179	적색
비교예 2	C-1	4.41	12.3	27	적색
비교예 3	C-2	4.45	13.9	34	적색
비교예 4	C-3	4.03	23.1	84	적색
비교예 5	C-4	4.10	22.0	97	적색
비교예 6	C-5	4.27	18.4	143	적색
비교예 7	C-6	4.02	19.7	73	적색
비교예 8	C-7	4.12	21.5	134	적색
비교예 9	C-8	4.08	20.3	104	적색

[0415]

상기 표에 나타난 바와 같이, 적색 발광층의 호스트 물질로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용한 실시예의 유기 발광 소자는, 비교예의 유기 발광 소자에 비하여, 구동 전압이 낮으면서, 효율이 높고 현저히 긴 수명을 나타내었다. 이는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 비교예에 사용된 본원과 상이한 구조를 갖는 화합물에 비하여, 적색 도편트로의 에너지 전달이 잘 이루어졌기 때문인 것으로 판단된다. 또한, 비교예의 소자에 비해 실시예의 소자가 효율 및 수명이 동시에 향상된 것으로 보아, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자와 정공에 대한 안정도가 높음을 알 수 있다. 따라서, 유기 발광 소자의 호스트 물질로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 채용하는 경우, 유기 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및/또는 수명 특성이 향상됨을 확인할 수 있다.

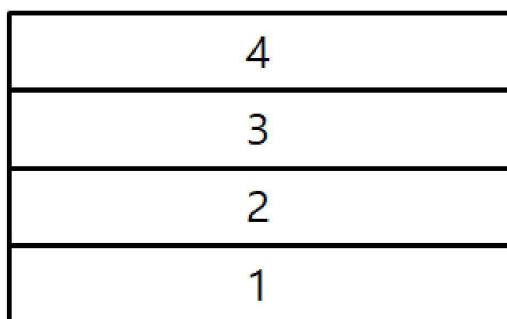
부호의 설명

[0417]

- | | |
|----------------|----------|
| 1: 기판 | 2: 양극 |
| 3: 발광층 | 4: 음극 |
| 5: 정공주입층 | 6: 정공수송층 |
| 7: 전자역제층 | 8: 정공저지층 |
| 9: 전자 주입 및 수송층 | |

도면

도면1



도면2

