



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2008년08월11일
(11) 등록번호 10-0851739
(24) 등록일자 2008년08월05일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) H05B 33/14 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2007-0003921
(22) 출원일자 2007년01월12일
심사청구일자 2007년01월12일
(65) 공개번호 10-2007-0076471
(43) 공개일자 2007년07월24일
(30) 우선권주장
1020060003883 2006년01월13일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
JP 2004-224723 A
JP 2004-67528 A
US 6534199 B1

(73) 특허권자
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의도동 20

(72) 발명자
김공겸
대전 유성구 전민동 엑스포아파트 107동 703호
여성진
대전 서구 월평동 218번지 주공아파트 203동 130
2호

장혜영
대전 서구 둔산동 1380-1번지 아너스빌 833호

(74) 대리인
한양특허법인

전체 청구항 수 : 총 22 항

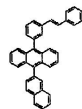
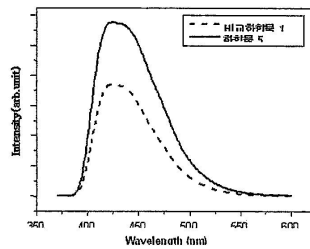
심사관 : 손창호

(54) 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자

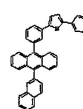
(57) 요약

본 발명은 신규한 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공한다.

대표도 - 도1



비교화합물 1



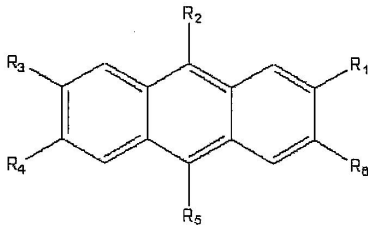
화합물 5

특허청구의 범위

청구항 1

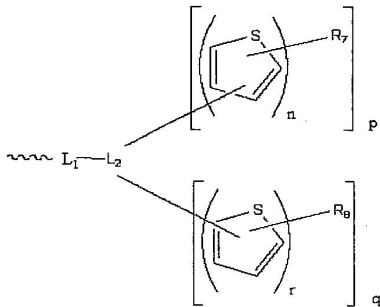
하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₆은 각각 독립적으로 같거나 다를 수 있으며, 하나 이상은 하기 화학식 2로 표시되고,

<화학식 2>



상기 화학식 2에서, n 및 p는 1 내지 10의 정수이고, q 및 r은 0 내지 10의 정수이며,

L₁은 직접 연결되거나, 치환 또는 비치환 C₅~C₂₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환 C₅~C₂₀의 헤테로고리기이며,

L₂는 C₅~C₂₀의 아릴기이고,

상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 수소; 할로; 히드록실; 머캡토; 시아노; 니트로; 카르보닐; 카르복실; 포르밀; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알킬; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐; 치환 또는 비치환 C₆~C₃₂ 아릴; 치환 또는 비치환 헤테로아릴; 고리내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는, 치환 또는 비치환 C₃~C₇ 시클로알킬; 고리 내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는 C₄~C₇ 시클로알케닐; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알콕시; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐옥시; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐옥시; 치환 또는 비치환 아릴옥시; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알킬아민; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐아민; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐아민; 치환 또는 비치환 아릴아민; 치환 또는 비치환 알킬아릴아민; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알킬실릴; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐실릴; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐실릴; 치환 또는 비치환 아릴실릴; 치환 또는 비치환 알킬아릴실릴; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알킬보라닐; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐보라닐; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐보라닐; 치환 또는 비치환 아릴보라닐; 치환 또는 비치환 알킬아릴보라닐; 치환 또는 비치환 C₁~C₂₀ 알킬티오; 치환 또는 비치환 C₂~C₁₀ 알케닐티오; 치환 또는 비치환 C₂~C₇ 알킬닐티오; 및 치환 또는 비치환 아릴티오기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 2

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 수소, 시아노, 니트로, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬, 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐, 치환 또는 비치환 C₃-C₇ 시클로알킬, 치환 또는 비치환 C₄-C₇ 시클로알케닐, 치환 또는 비치환 C₆-C₃₂ 아릴, 치환 또는 비치환 헤테로아릴, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알콕시, 치환 또는 비치환 아릴옥시, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬아민, 치환 또는 비치환 아릴아민, 치환 또는 비치환 알킬아릴아민, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬실릴; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬보라닐, 치환 또는 비치환 아릴보라닐, 치환 또는 비치환 알킬아릴보라닐, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬티오, 및 치환 또는 비치환 아릴티오기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 하기의 군으로부터 선택되는, 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리-치환된 화합물:

할로, 히드록실, 머캡토, 시아노, 니트로, 아미노, 카르보닐, 카르복실, 포르밀, C₁-C₂₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₇ 알킬닐, 아릴, 헤테로아릴, C₃-C₇ 시클로알킬, 3-7 원 헤테로시클릭 포화 또는 불포화 고리, 아크릴, C₁-C₂₀ 알콕시, C₂-C₁₀ 알케닐옥시, C₂-C₇ 알킬닐옥시, C₁-C₂₀ 알킬아민, C₂-C₁₀ 알케닐아민, C₂-C₇ 알킬닐아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C₁-C₂₀ 알킬실릴, C₂-C₁₀ 알케닐실릴, C₂-C₇ 알킬닐실릴, 알콕실실릴, 아릴실릴, 알킬아릴실릴, C₁-C₂₀ 알킬보라닐, C₂-C₁₀ 알케닐보라닐, C₂-C₇ 알킬닐보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C₁-C₂₀ 알킬티오, C₂-C₁₀ 알케닐티오, C₂-C₇ 알킬닐티오 및 아릴티오기.

청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 하기의 군으로부터 선택되는, 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리-치환된 화합물:

시아노, 니트로, 포르밀, 메틸, 에틸, 프로필, 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트라세닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 티오펜릴, 피리딜, 피리미딜, 피롤릴, 시클로부테닐, 시클로펜테닐, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 페녹시, 나프톡시, 메틸아민, 에틸아민, 프로필아민, 페닐아민, 나프틸아민, 메틸페닐아민, 에틸페닐아민, 에틸나프틸아민, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디프로필보라닐, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 페닐나프틸보라닐, 페닐메틸보라닐, 나프틸메틸보라닐, 나프틸에틸보라닐, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디에틸페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 부틸티오, 페닐티오 및 나프틸티오기.

청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 고리내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는, 치환 또는 비치환 C₃-C₇ 시클로알킬, 또는 고리 내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는 C₄-C₇ 시클로알케닐은 5원 또는 6원의 치환 또는 비치환, 포화 또는 불포화 헤테로고리인 화합물.

청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, n-부틸, t-부틸, 이소부틸, n-펜틸, 네오-펜틸, n-헥실, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 2-메틸-에테닐, 2-메틸-프로페닐, 2-메틸-부테닐, 2-메틸-펜테닐, 2-메틸-헥세닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 티오펜릴, 피리딜, 피리미딜, 피롤릴, 2-메틸이미다졸릴, 2-메틸티아졸릴, 2-메틸옥사졸릴, 페닐, 나프틸, 안트라세닐, 비페닐, 터페닐, 이중 스피로, 테트라세닐, 3-메틸-페닐, 4-메틸-나프틸, 9-메틸-안트라세닐, 4-메틸-테트라세닐, 2-메틸-이미다졸릴, 2-메틸-옥사졸릴, 2-메틸-티아졸릴, 2-메틸-푸라닐, 2-메틸-티오펜릴, 2-메틸-피라졸릴, 2-메틸-피리딜, 2-메틸-피리미디닐, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 펜톡시, 헥속시, 이소프로폭시, 이소부톡시, t-부톡시, 네오-펜톡시,

페녹시, 나프톡시, 비페녹시, 3-메틸-페녹시, 4-메틸-나프톡시, 2-메틸-비페녹시, 메틸아민, 에틸아민, 프로필아민, 부틸아민, 펜틸아민, 헥실아민, 헵틸아민, 이소프로필아민, 이소부틸아민, t-부틸아민, 2-펜틸아민, 네오-펜틸아민, 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 페닐메틸아민, 페닐에틸아민, 나프틸메틸아민, 나프틸에틸아민, 비페닐메틸아민, 3-메틸-페닐메틸아민, 페닐이소프로필아민, 나프틸이소프로필아민, 나프틸이소부틸아민, 비페닐이소프로필아민, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리부틸실릴, 트리(이소프로필)실릴, 트리(이소부틸)실릴, 트리(t-부틸)실릴, 트리(2-부틸)실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 트리비페닐실릴, 트리(3-메틸페닐)실릴, 트리(4-메틸나프틸)실릴, 트리(2-메틸비페닐)실릴, 페닐메틸실릴, 페닐에틸실릴, 나프틸메틸실릴, 나프틸에틸실릴, 비페닐메틸실릴, 3-메틸-페닐메틸실릴, 페닐이소프로필실릴, 나프틸이소프로필실릴, 나프틸이소부틸실릴, 비페닐이소프로필실릴, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디프로필아민, 디부틸아민, 디펜틸아민, 디이소프로필보라닐, 디이소부틸보라닐, 디(t-부틸)보라닐, 이소프로필이소부틸아민, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 디비페닐보라닐, 디(3-메틸페닐)보라닐, 디(4-메틸나프틸)보라닐, 디(2-메틸비페닐)보라닐, 페닐메틸보라닐, 페닐에틸보라닐, 나프틸메틸보라닐, 나프틸에틸보라닐, 비페닐메틸보라닐, 3-메틸-페닐메틸보라닐, 페닐이소프로필보라닐, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오, 헥실티오, 트리(이소프로필)티오, 트리(이소부틸)티오, 트리(t-부틸)티오, 트리(2-부틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, 비페닐티오, (3-메틸페닐)티오, (4-메틸나프틸)티오 및 (2-메틸비페닐)티오기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

청구항 7

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 메틸, 에틸, 이소프로필, t-부틸, 에테닐, 프로페닐, 2-메틸-에테닐, 2-메틸-프로페닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 2-메틸이미다졸릴, 2-메틸티아졸릴, 2-메틸옥사졸릴, 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트라세닐, 터페닐, 3-메틸-페닐, 4-메틸-나프틸, 메톡시, 에톡시, 이소프로폭시, 이소부톡시, 페녹시, 나프톡시, 3-메틸-페녹시, 4-메틸-나프톡시, 메틸아민, 에틸아민, 이소프로필아민, 이소부틸아민, t-부틸아민, 페닐아민, 나프틸아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 페닐메틸아민, 페닐에틸아민, 나프틸메틸아민, 3-메틸-페닐메틸아민, 페닐이소프로필아민, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리(이소프로필)실릴, 트리(이소부틸)실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 트리(3-메틸페닐)실릴, 트리(4-메틸나프틸)실릴, 페닐메틸실릴, 페닐에틸실릴, 3-메틸-페닐메틸실릴, 페닐이소프로필실릴, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디이소프로필보라닐, 디이소부틸보라닐, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 디(3-메틸페닐)보라닐, 디(4-메틸나프틸)보라닐, 페닐메틸보라닐, 페닐에틸보라닐, 3-메틸-페닐메틸보라닐, 페닐이소프로필보라닐, 메틸티오, 에틸티오, 트리(이소프로필)티오, 트리(이소부틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, (3-메틸페닐)티오 및 (4-메틸나프틸)티오기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

청구항 8

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환 페닐, 치환 또는 비치환 나프틸, 치환 또는 비치환 비페닐, 치환 또는 비치환 터페닐, 및 치환 또는 비치환 안트라세닐로 구성되는 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

청구항 9

청구항 8에 있어서, 상기 치환된 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐 및 안트라세닐은 시아노, 니트로, 포르밀, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬, 아릴, 헤테로아릴, C₄-C₇ 시클로알케닐, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알콕시, 아릴옥시, C₁-C₂₀ 알킬아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C₁-C₂₀ 실릴, 아릴실릴, 및 알킬아릴실릴, C₁-C₂₀ 알킬보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C₁-C₂₀ 알킬티오 및 아릴티오로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 치환된 것인 화합물.

청구항 10

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 R₂ 및 R₅ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 11

청구항 10에 있어서, 상기 화학식 1에서 R2과 R5이 상기 화학식 2로 표시되는 동일한 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 12

청구항 10에 있어서, 상기 화학식 1에서 R2과 R5이 상기 화학식 2로 표시되는 서로 상이한 치환기이고, R2 와 R5 중 하나는 화학식 2 중 L1이 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸인 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 13

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 R1, R3, R4 및 R6 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 14

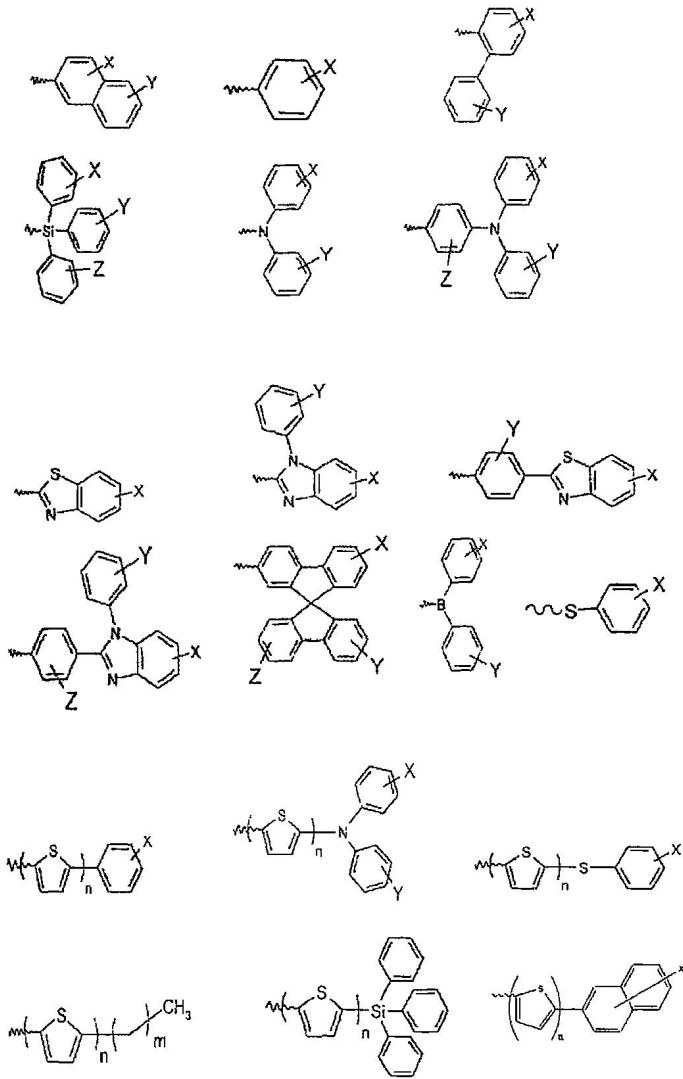
청구항 13에 있어서, 상기 화학식 1에서 R1 및 R6 중 하나와 R3 및 R4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 동일한 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 15

청구항 13에 있어서, 상기 화학식 1에서 R1 및 R6 중 하나와 R3 및 R4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 서로 상이한 치환기이고, 이들 중 하나는 화학식 2 중 L1이 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸인 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 16

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₆ 중 적어도 하나가 화학식 2로 표시되고, 나머지 R₁ 내지 R₆는 하기 구조식으로 구성되는 군으로부터 선택되는 것인 화합물:



여기서, X, Y 및 Z는 각각 독립적으로 동일 또는 상이한 치환기로서, X, Y 또는 Z가 부착될 수 있는 각각의 고리 모이어티는 X, Y 또는 Z와 같은 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 치환될 수 있고,

X, Y 및 Z는 각각 독립적으로 시아노, 니트로, 포르밀, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬, 아릴, 헤테로아릴, C₄-C₇ 시클로알케닐, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알콕시, 아릴옥시, C₁-C₂₀ 알킬아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C₁-C₂₀ 실릴, 아릴실릴, 및 알킬아릴실릴, C₁-C₂₀ 알킬보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C₁-C₂₀ 알킬티오 및 아릴티오로 이루어지는 군으로부터 선택되며,

n은 1이고, m은 0 내지 2의 정수이다.

청구항 17

청구항 16에 있어서, 상기 X, Y 및 Z는 각각 독립적으로 시아노, 니트로, 메틸, 에틸, 이소프로필, t-부틸, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 메틸티오, 이미다졸릴, 피리딜, 티아졸릴, 옥사졸릴, 푸라닐, 티오펜릴, 피롤릴, 피리딜 및 피리미딜로 구성되는 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

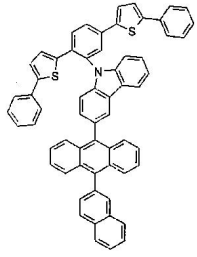
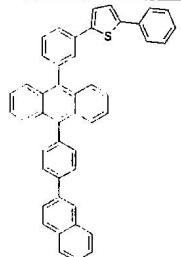
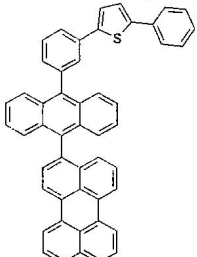
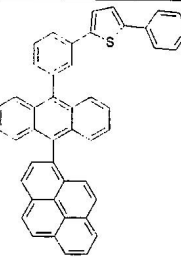
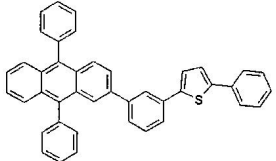
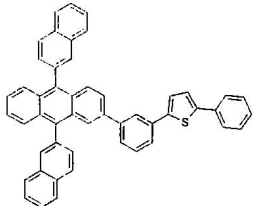
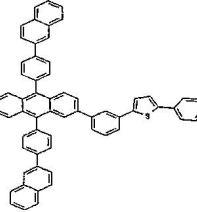
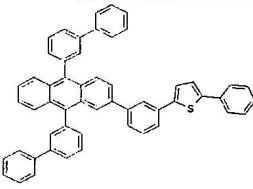
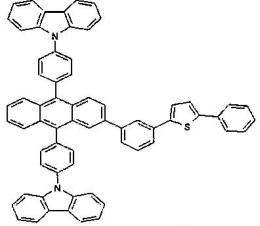
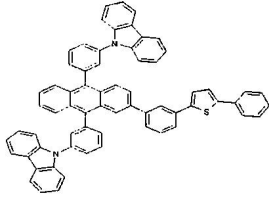
청구항 18

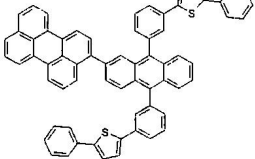
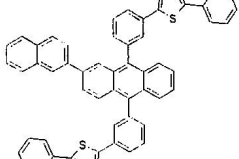
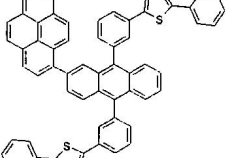
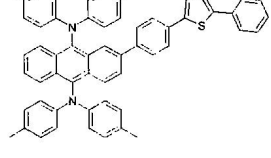
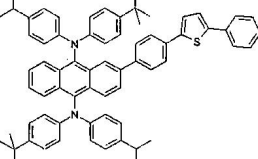
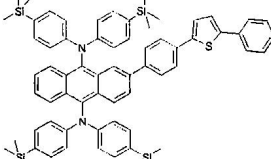
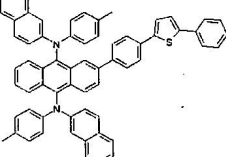
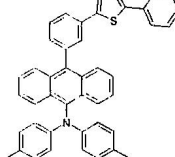
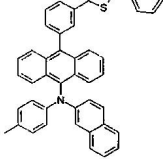
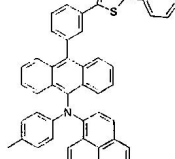
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 2에서 L₁은 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸이고, L₂는 페닐, 나프틸 또는 안트라세닐인 것인 화합물.

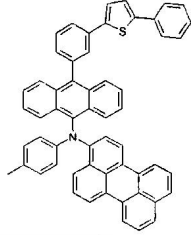
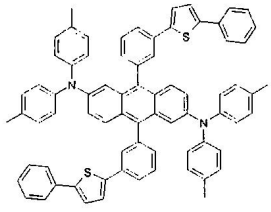
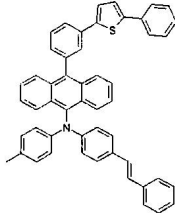
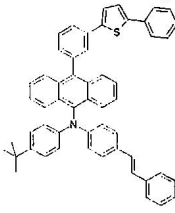
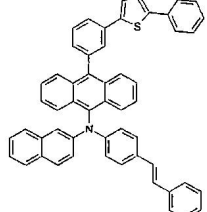
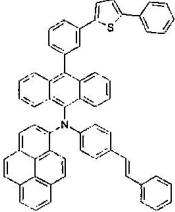
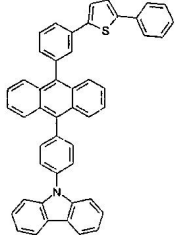
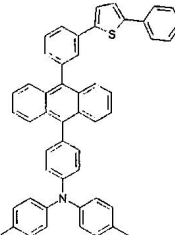
청구항 19

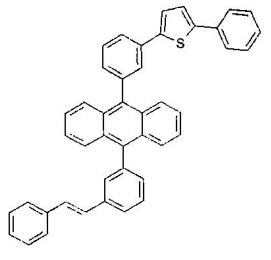
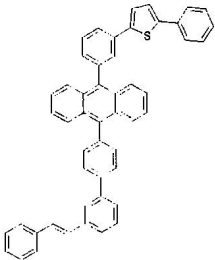
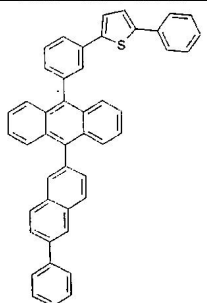
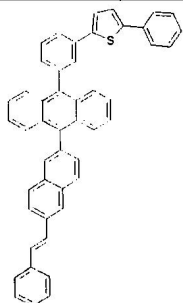
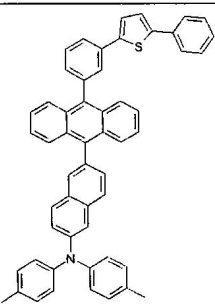
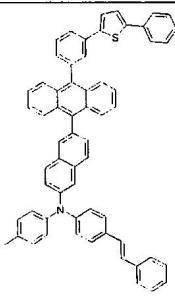
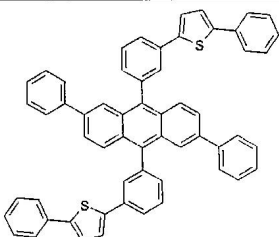
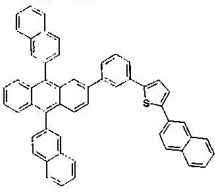
청구항 1에 있어서, 상기 화합물은 하기 표의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 것임을 특징으로 하는 화합물:

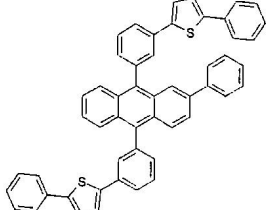
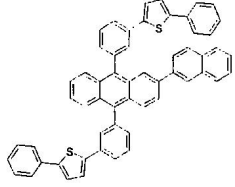
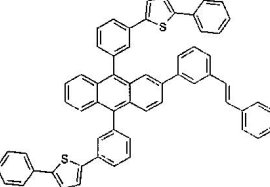
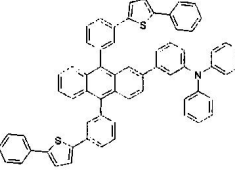
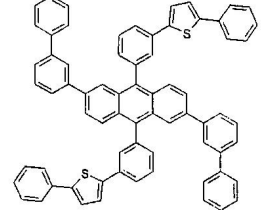
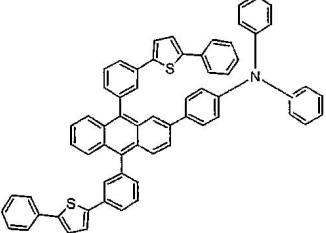
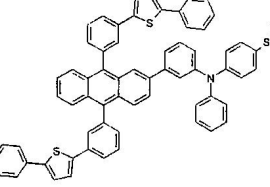
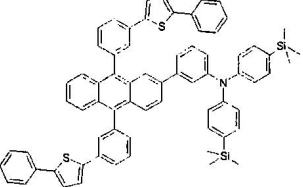
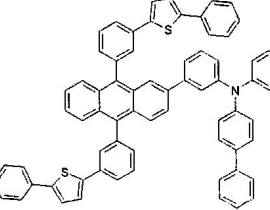
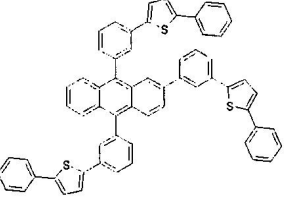
화합물	구조식	화합물	구조식
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	

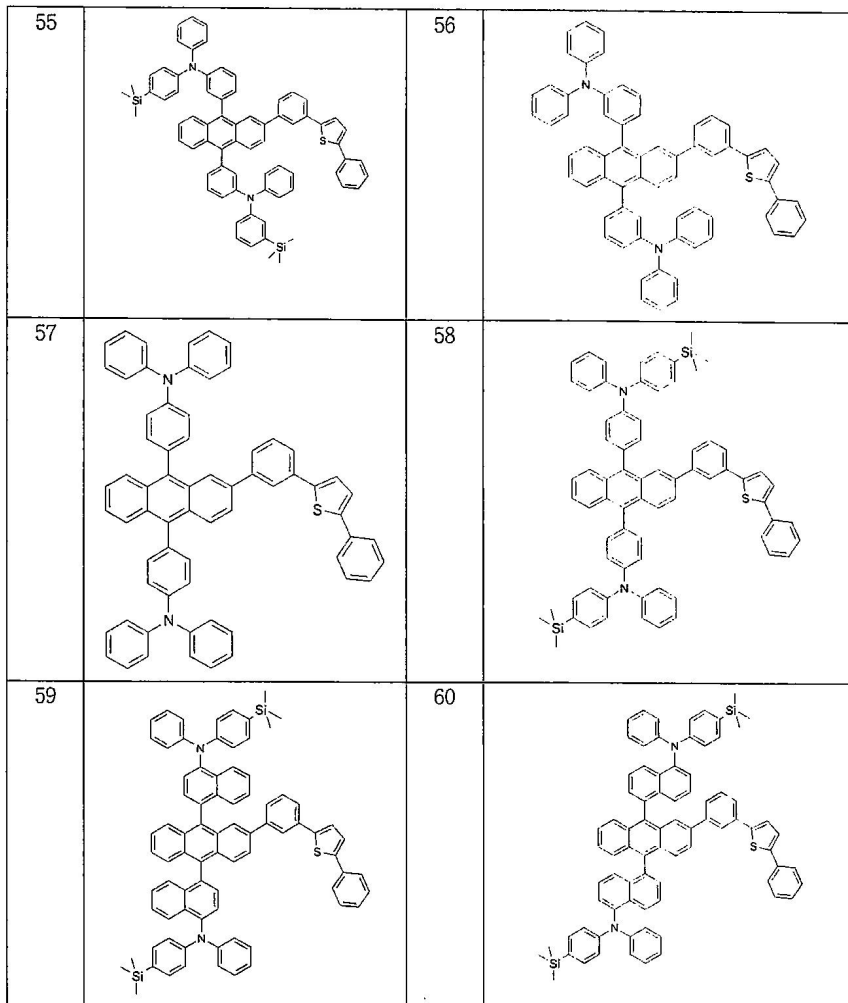
9		10	
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	

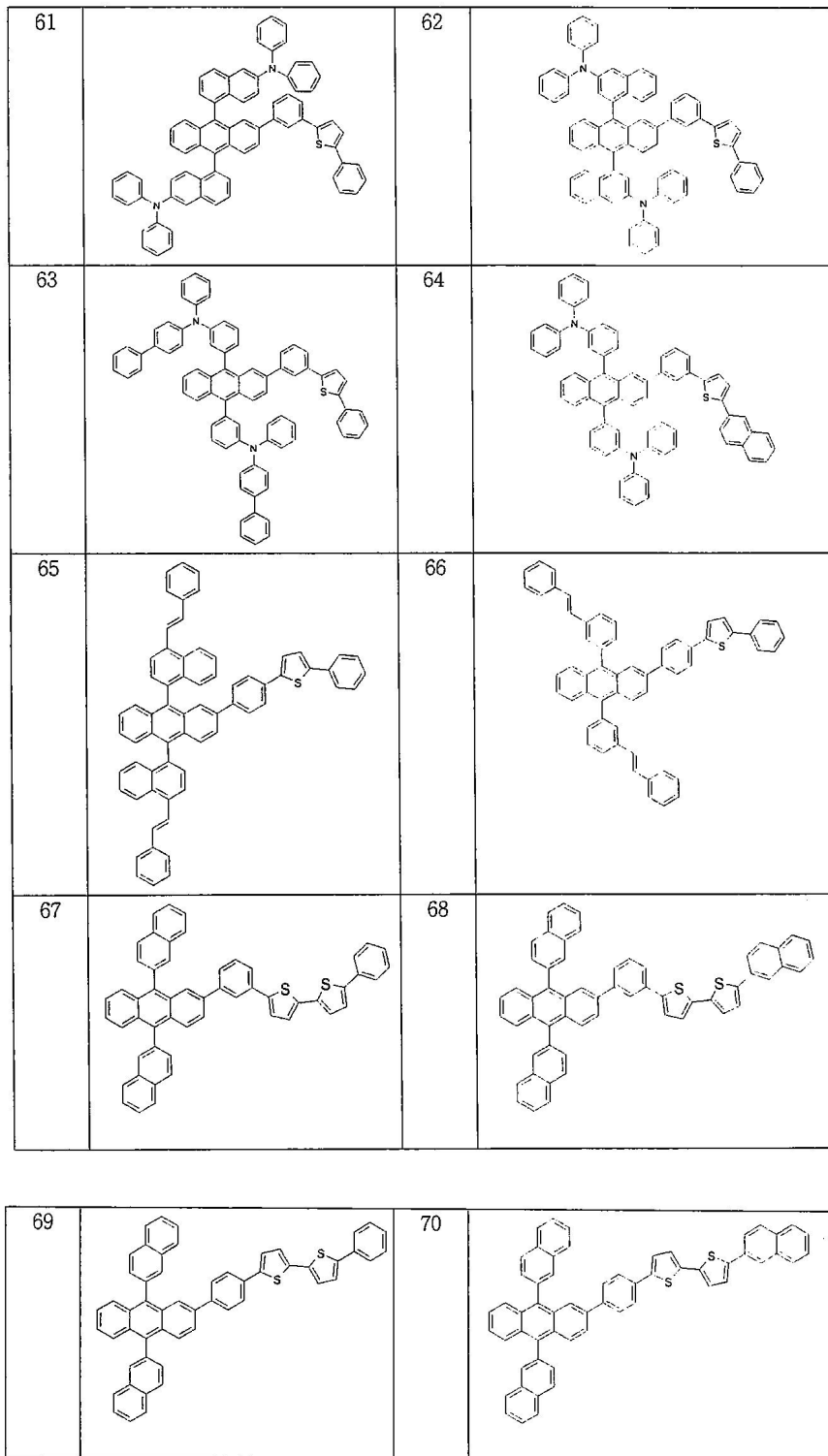
19		20	
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	

29		30	
31		32	
33		34	
35		36	

37		38	
39		40	
41		42	
43		44	

45		46	
47		48	
49		50	
51		52	
53		54	





청구항 20

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 청구항 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 21

청구항 20에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 청구항 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 22

청구항 20에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 및 전자수송층 중 1 이상을 포함하는 것인 유기 발광소자.

명세서

발명의 상세한 설명

발명의 목적

발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술

- <4> 본 발명은 신규한 구조의 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자에 관한 것이다. 본 출원은 2006년 1월 13일에 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2006-0003883호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- <5> 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.
- <6> 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광 색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- <7> 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트 보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- <8> 전술한 유기 발광 소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 발광 소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

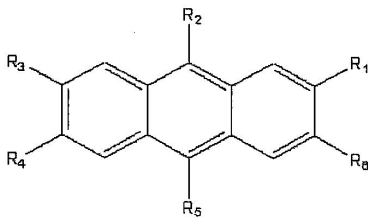
발명이 이루고자 하는 기술적 과제

- <9> 본 발명자들은 신규한 구조의 발광 물질을 밝혀내었으며, 또한 이 발광 물질이 유기발광소자에서 발광 물질로서 효율적으로 역할을 할 수 있다는 사실을 밝혀내었다.
- <10> 이에 본 발명은 신규한 구조의 발광 물질 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

발명의 구성 및 작용

- <11> 본 발명은 하기 화학식 1의 화합물을 제공한다:

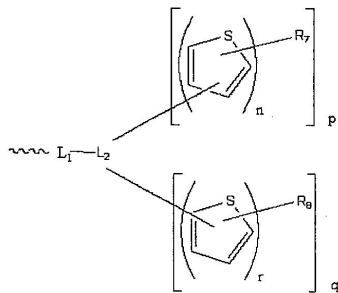
화학식 1



<12>

<13> 상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₆은 각각 독립적으로 같거나 다를 수 있으며, 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

화학식 2



<14>

<15> 상기 화학식 2에서, n 및 p는 1 내지 10의 정수이고, q 및 r은 0 내지 10의 정수이며,

<16> L₁은 직접 연결되거나, 치환 또는 비치환 C₅-C₂₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환 C₅-C₂₀의 헤테로고리기이며,

<17> L₂는 C₅-C₂₀의 아릴기이고,

<18> 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 수소; 할로; 히드록실; 머캡토; 시아노; 니트로; 카르보닐; 카르복실; 포르 밀; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐; 치환 또는 비치환 C₆-C₃₂ 아릴; 치환 또는 비치환 헤테로아릴; 고리내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는, 치환 또는 비치환 C₃-C₇ 시클로알킬; 고리 내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는 C₄-C₇ 시클로알케닐; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알콕시; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐옥시; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐옥시; 치환 또는 비치환 아릴옥시; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬아민; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐아민; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐아민; 치환 또는 비치환 아릴아민; 치환 또는 비치환 알킬아릴아민; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬실릴; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐실릴; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐실릴; 치환 또는 비치환 아릴실릴; 치환 또는 비치환 알킬아릴실릴; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬보라닐; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐보라닐; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐보라닐; 치환 또는 비치환 아릴보라닐; 치환 또는 비치환 알킬아릴보라닐; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬티오; 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐티오; 치환 또는 비치환 C₂-C₇ 알킬닐티오; 및 치환 또는 비치환 아릴티오기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

<19> 바람직하게는, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 수소, 시아노, 니트로, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬, 치환 또는 비치환 C₂-C₁₀ 알케닐, 치환 또는 비치환 C₃-C₇ 시클로알킬, 치환 또는 비치환 C₄-C₇ 시클로알케닐, 치환 또는 비치환 C₆-C₃₂ 아릴, 치환 또는 비치환 헤테로아릴, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알콕시, 치환 또는 비치환 아릴옥시, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬아민, 치환 또는 비치환 아릴아민, 치환 또는 비치환 알킬아릴아민, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀

알킬실릴; 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬보라닐, 치환 또는 비치환 아릴보라닐, 치환 또는 비치환 알킬아릴보라닐, 치환 또는 비치환 C₁-C₂₀ 알킬티오, 및 치환 또는 비치환 아릴티오기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

<20> 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 하기의 군으로부터 선택되는, 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리-치환될 수 있다:

<21> 할로, 히드록실, 머캅토, 시아노, 니트로, 아미노, 카르보닐, 카르복실, 포르밀, C₁-C₂₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₇ 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, C₃-C₇ 시클로알킬, 3-7 원 헤테로시클릭 포화 또는 불포화 고리, 아크릴, C₁-C₂₀ 알콕시, C₂-C₁₀ 알케닐옥시, C₂-C₇ 알키닐옥시, C₁-C₂₀ 알킬아민, C₂-C₁₀ 알케닐아민, C₂-C₇ 알키닐아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C₁-C₂₀ 알킬실릴, C₂-C₁₀ 알케닐실릴, C₂-C₇ 알키닐실릴, 알콕실실릴, 아릴실릴, 알킬아릴실릴, C₁-C₂₀ 알킬보라닐, C₂-C₁₀ 알케닐보라닐, C₂-C₇ 알키닐보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C₁-C₂₀ 알킬티오, C₂-C₁₀ 알케닐티오, C₂-C₇ 알키닐티오 및 아릴티오기.

<22> 바람직하게는, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 하기의 군으로부터 선택되는, 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리-치환될 수 있다:

<23> 시아노, 니트로, 포르밀, 메틸, 에틸, 프로필, 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트라세닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 티오펜릴, 피리딜, 피리미딜, 피롤릴, 시클로부테닐, 시클로펜테닐, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 페녹시, 나프톡시, 메틸아민, 에틸아민, 프로필아민, 페닐아민, 나프틸아민, 메틸페닐아민, 에틸페닐아민, 에틸나프틸아민, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디프로필보라닐, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 페닐나프틸보라닐, 페닐메틸보라닐, 나프틸메틸보라닐, 나프틸에틸보라닐, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디에틸페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 부틸티오, 페닐티오 및 나프틸티오기.

<24> 상기 고리내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는, 치환 또는 비치환 C₃-C₇ 시클로알킬, 또는 고리 내 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 치환될 수 있는 C₄-C₇ 시클로알케닐은 5원 또는 6원의 치환 또는 비치환, 포화 또는 불포화 고리이다.

<25> 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R₁ 내지 R₆, 및 화학식 2에서 R₇ 및 R₈은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, n-부틸, t-부틸, 이소부틸, n-펜틸, 네오-펜틸, n-헥실, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 2-메틸-에테닐, 2-메틸-프로페닐, 2-메틸-부테닐, 2-메틸-펜테닐, 2-메틸-헥세닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 티오펜릴, 피리딜, 피리미딜, 피롤릴, 2-메틸이미다졸릴, 2-메틸티아졸릴, 2-메틸옥사졸릴, 페닐, 나프틸, 안트라세닐, 비페닐, 터페닐, 테트라세닐, 3-메틸-페닐, 4-메틸-나프틸, 9-메틸-안트라세닐, 4-메틸-테트라세닐, 2-메틸-이미다졸릴, 2-메틸-옥사졸릴, 2-메틸-티아졸릴, 2-메틸-푸라닐, 2-메틸-티오펜릴, 2-메틸-피라졸릴, 2-메틸-피리딜, 2-메틸-피리미디닐, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 펜톡시, 헥소키, 이소프로폭시, 이소부톡시, t-부톡시, 네오-펜톡시, 페녹시, 나프톡시, 비페녹시, 3-메틸-페녹시, 4-메틸-나프톡시, 2-메틸-비페녹시, 메틸아민, 에틸아민, 프로필아민, 부틸아민, 펜틸아민, 헥실아민, 헵틸아민, 이소프로필아민, 이소부틸아민, t-부틸아민, 2-펜틸아민, 네오-펜틸아민, 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 페닐메틸아민, 페닐에틸아민, 나프틸메틸아민, 나프틸에틸아민, 비페닐메틸아민, 3-메틸-페닐메틸아민, 페닐이소프로필아민, 나프틸이소프로필아민, 나프틸이소부틸아민, 비페닐이소프로필아민, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리부틸실릴, 트리(이소프로필)실릴, 트리(이소부틸)실릴, 트리(t-부틸)실릴, 트리(2-부틸)실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 트리비페닐실릴, 트리(3-메틸페닐)실릴, 트리(4-메틸나프틸)실릴, 트리(2-메틸비페닐)실릴, 페닐메틸실릴, 페닐에틸실릴, 나프틸메틸실릴, 나프틸에틸실릴, 비페닐메틸실릴, 3-메틸-페닐메틸실릴, 페닐이소프로필실릴, 나프틸이소프로필실릴, 나프틸이소부틸실릴, 비페닐이소프로필실릴, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디프로필아민, 디부틸아민, 디펜틸아민, 디이소프로필보라닐, 디이소부틸보라닐, 디(t-부틸)보라닐, 이소프로필이소부틸아민, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 디비페닐보라닐, 디(3-메틸페닐)보라닐, 디(4-메틸나프틸)보라닐, 디(2-메틸비페닐)보라닐, 페닐메틸보라닐, 페닐에틸보라닐, 나프틸메틸보라닐, 나프틸에틸보라닐, 비페닐메틸보라닐, 3-메틸-페닐메틸보라닐, 페닐이소프로필보라닐, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오, 헥실티오, 트리(이소프로필)티오, 트리(이소부틸)티오, 트리(t-부틸)티오,

트리(2-부틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, 비페닐티오, (3-메틸페닐)티오, (4-메틸나프틸)티오 및 (2-메틸비페닐)티오기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

<26> 바람직하게는, 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R_1 내지 R_6 , 및 화학식 2에서 R_7 및 R_8 은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서 메틸, 에틸, 이소프로필, t-부틸, 에테닐, 프로페닐, 2-메틸-에테닐, 2-메틸-프로페닐, 이미다졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 2-메틸이미다졸릴, 2-메틸티아졸릴, 2-메틸옥사졸릴, 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐, 안트라세닐, 3-메틸-페닐, 4-메틸-나프틸, 메톡시, 에톡시, 이소프로폭시, 이소부톡시, 페녹시, 나프톡시, 3-메틸-페녹시, 4-메틸-나프톡시, 메틸아민, 에틸아민, 이소프로필아민, 이소부틸아민, t-부틸아민, 페닐아민, 나프틸아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 페닐메틸아민, 페닐에틸아민, 나프틸메틸아민, 3-메틸-페닐메틸아민, 페닐이소프로필아민, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리(이소프로필)실릴, 트리(이소부틸)실릴, 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴, 트리(3-메틸페닐)실릴, 트리(4-메틸나프틸)실릴, 페닐메틸실릴, 페닐에틸실릴, 3-메틸-페닐메틸실릴, 페닐이소프로필실릴, 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디이소프로필보라닐, 디이소부틸보라닐, 디페닐보라닐, 디나프틸보라닐, 디(3-메틸페닐)보라닐, 디(4-메틸나프틸)보라닐, 페닐메틸보라닐, 페닐에틸보라닐, 3-메틸-페닐메틸보라닐, 페닐이소프로필보라닐, 메틸티오, 에틸티오, 트리(이소프로필)티오, 트리(이소부틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, (3-메틸페닐)티오 및 (4-메틸나프틸)티오기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

<27> 상기 화학식 1에서 화학식 2가 아닌 R_1 내지 R_6 , 및 화학식 2에서 R_7 및 R_8 은 각각 독립적으로 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환 페닐, 치환 또는 비치환 나프틸, 치환 또는 비치환 비페닐, 치환 또는 비치환 터페닐 및 치환 또는 비치환 안트라세닐로 구성되는 군으로부터 선택될 수 있다.

<28> 상기 치환된 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐 및 안트라세닐은 시아노, 니트로, 포르밀, 치환 또는 비치환 C_1 - C_{20} 알킬, 아릴, 헤테로아릴, C_4 - C_7 시클로알케닐, 치환 또는 비치환 C_1 - C_{20} 알콕시, 아릴옥시, C_1 - C_{20} 알킬아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C_1 - C_{20} 실릴, 아릴실릴, 알킬아릴실릴, C_1 - C_{20} 알킬보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C_1 - C_{20} 알킬티오 및 아릴티오로 구성되는 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 치환될 수 있다.

<29> 바람직하게, R_1 내지 R_6 중 적어도 하나가 화학식 2로 표시되고, 나머지 R_1 내지 R_6 는 하기 구조식으로 구성되는 군으로부터 선택될 수 있다.

치환기이고, R2 와 R5 중 하나는 화학식 2 중 L1이 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸인 치환기인 화합물을 제공한다.

- <37> 본 발명의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에서 R1, R3, R4 및 R6 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 기인 화합물을 제공한다.
- <38> 본 발명의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에서 R1 및 R6 중 하나와 R3 및 R4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 동일한 치환기인 화합물을 제공한다.
- <39> 본 발명의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에서 R1 및 R6 중 하나와 R3 및 R4 중 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 서로 상이한 치환기이고, 이들 중 하나는 화학식 2 중 L1이 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸인 치환기인 화합물을 제공한다.
- <40> 바람직하게, 상기 화학식 2에서, L₁은 직접 연결되거나, 페닐, 나프틸 또는 카바졸이며, L₂는 페닐, 나프틸 또는 안트라세닐이다.
- <41> 본 발명에 따른 화학식 1 및 화학식 2의 R₁ 내지 R₈에서 사용하는 용어는 하기와 같다.
- <42> 용어 "C₁-C₂₀ 알킬" 또는 "비치환 C₁-C₂₀ 알킬"은 다른 용어의 일부이든 아니든, 메틸, 에틸, n-프로필, n-부틸, n-펜틸, n-헥실, n-데카닐, n-에이코사닐 등과 같은 직쇄 또는 분지쇄의 포화 탄화수소를 가리킨다. 용어 "치환된 C₁-C₂₀ 알킬"은 동일 또는 상이한 치환기, 예컨대 할로, 히드록실, 머캡토, 시아노, 니트로, 아미노, 카르보닐, 카르복실, 포르밀, C₁-C₂₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₇ 알킬닐, 아릴, 헤테로아릴, C₃-C₇ 시클로알킬, 3-7 원 헤테로시클릭 포화 또는 불포화 고리, 아크릴, C₁-C₂₀ 알콕시, C₂-C₁₀ 알케닐옥시, C₂-C₇ 알킬닐옥시, C₁-C₂₀ 알킬아민, C₂-C₁₀ 알케닐아민, C₂-C₇ 알킬닐아민, 아릴아민, 알킬아릴아민, C₁-C₂₀ 알킬실릴, C₂-C₁₀ 알케닐실릴, C₂-C₇ 알킬닐실릴, 아릴실릴, 알킬아릴실릴, C₁-C₂₀ 알킬보라닐, C₂-C₁₀ 알케닐보라닐, C₂-C₇ 알킬닐보라닐, 아릴보라닐, 알킬아릴보라닐, C₁-C₂₀ 알킬티오, C₂-C₁₀ 알케닐티오, C₂-C₇ 알킬닐티오 또는 아릴티오 (이하, 본 발명에서 집약적으로 "열거된 치환기"로서 언급된다) 로 모노- 또는 폴리- 치환된 C₁-C₂₀ 알킬을 가리킨다. 용어 "헤테로시클릭"은 하나 이상의 골격 탄소가 산소, 질소 또는 황 원자로 대체된 고리 구조를 가리킨다.
- <43> 용어 "C₂-C₁₀ 알케닐" 또는 "비치환 C₂-C₁₀ 알케닐"은, 다른 용어의 일부이든 아니든, 두 인접 탄소 원자 간에 하나 이상의 이중 결합을 가지는 직쇄 또는 분지쇄의 탄화수소 라디칼을 가리킨다. C₂-C₁₀ 알케닐기의 예는 비닐, 알릴, 부트-2-에닐, 펜트-2-에닐, 헵트-3-에닐, 테크-1,3-디엔-일 등이다. 용어 "치환된 C₂-C₁₀ 알케닐"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐기를 가리킨다. 상기 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐기의 예는 이소프로프-2-에닐, 이소부테닐, t-부테닐, 2-메틸-2-데세닐 등이다.
- <44> 용어 "C₂-C₇ 알킬닐" 또는 "비치환 C₂-C₇ 알킬닐"은, 다른 용어의 일부이든 아니든, 두개의 인접 탄소 사이에 하나 이상의 삼중 결합을 가지는 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소 라디칼을 가리킨다. C₂-C₇ 알킬닐기의 예는 에티닐, 프로프-1-이닐, 헥스-2-이닐, 헵트-3-이닐 등이다. 용어 "치환된 C₂-C₇ 알킬닐"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₇ 알킬닐기를 가리킨다. 상기 치환된 C₂-C₇ 알킬닐기의 예는 2-메틸에티닐, 2-메틸프로피닐, 2-메틸부티닐, 3-메톡시헵티닐 등이다.
- <45> 용어 "아릴" 또는 "비치환 아릴"은 다른 용어의 일부이든 아니든, 단일 또는 다중 방향족 탄화수소 고리를 가리킨다. 다중 고리의 경우, 두개 이상의 고리가 지방족 체인이 개재되지 않고 융합 또는 연결되어 있다. 예를 들면, 상기 아릴기는 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 안트라세닐, 루브레닐, 페릴렌 등을 가리킨다. 용어 "치환된 아릴"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 비-아릴 치환기로 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴기를 가리킨다. 상기 치환된 아릴기의 예는 메틸페닐, 메톡시페닐, 메틸비페닐, 메틸터페닐, 메틸나프틸, 메톡시나프틸, 메틸안트라세닐 등이다.
- <46> 용어 "헤테로아릴" 또는 "비치환 헤테로아릴"은 다른 용어의 일부이든 아니든, 적어도 하나의 골격 탄소원자가 산소, 질소 또는 황 원자로 대체되어 있는 단일 또는 다중 방향족 탄화수소 고리를 가리킨다. 다중 고리의

경우, 두 개 이상의 고리가 지방쇄가 개재되지 않고 융합 (벤조-융합을 포함) 또는 연결되어 있다. 용어 "치환된 헥테로아릴"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 비-헥테로아릴 치환기로 모노- 또는 폴리- 치환된 헥테로아릴기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 아릴기는 2-메틸-옥사졸릴, 2-메틸-이미다졸릴, 2-메틸-티아졸릴, 3,4-디메틸-티오펜릴, 2-메틸-푸라닐, 2-메틸-피리디닐, 2-메틸-피리미디닐, 2-메틸-피롤릴 등이다.

<47> 용어 " C_3-C_7 시클로알킬" 또는 "비치환 C_3-C_7 시클로알킬"은 고리 내 3-7 탄소 원자를 가지는 포화 폐쇄 고리 구조를 가리킨다. 상기 고리 내 하나 이상의 탄소 원자가 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 대체될 수 있으며, 이들 또한 "포화 헥테로시클릭 고리"로 언급된다. 상기 C_3-C_7 시클로알킬기의 예는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸 등이다. 용어 "치환된 C_3-C_7 시클로알킬"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기를 가지며 탄소 또는 비-탄소 고리 원에서 하나 이상의 치환기를 가지는 C_3-C_7 시클로알킬기를 가리킨다. 상기 치환된 C_3-C_7 시클로알킬기의 예는 메틸시클로프로필, 메틸시클로부틸, 메틸시클로펜틸, 메틸시클로헥실, 메틸시클로헵틸 등이다.

<48> 용어 " C_4-C_7 시클로알케닐" 또는 "비치환 C_4-C_7 시클로알케닐"은 적어도 하나의 이중 결합을 가지는 4-7 탄소 원자로 이루어진 고리 구조를 가리킨다. 상기 고리 내 하나 이상의 탄소 원자는 산소, 질소 또는 황 원자에 의해 임의로 대체될 수 있으며, 이 또한 "불포화 헥테로시클릭 고리"로 언급된다. 예를 들면, 상기 C_4-C_7 시클로알케닐기는 3-시클로펜테닐, 4-시클로헥세닐, 5-시클로헵테닐 등을 가리킨다. 용어 "치환된 C_4-C_7 시클로알케닐"은 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기를 가지며 탄소 또는 비-탄소 원에서 하나 이상의 치환을 가지는 C_4-C_7 시클로알케닐기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환 C_4-C_7 시클로알케닐기는 3-메틸-3-시클로펜테닐, 2-메틸-4-시클로헥세닐, 2-메틸-시클로헵테닐 등을 가리킨다.

<49> 용어 " C_1-C_{20} 알콕시" 또는 "비치환 C_1-C_{20} 알콕시"는 C_1-C_{20} 알킬기로 치환된 산소 라디칼을 가리킨다. C_1-C_{20} 알콕시기의 예는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, n-부톡시, n-데카녹시, n-도데카녹시, n-에이코사녹시 등이다. 용어 "치환된 C_1-C_{20} 알콕시"는 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_1-C_{20} 알콕시기를 가리킨다. 상기 치환된 C_1-C_{20} 알콕시기의 예는 1-메틸에톡시, 1-메틸-n-프로폭시, 1-메틸-n-부톡시, 5-메톡시데카녹시, 3-메틸-도데카녹시, 3-페닐아이코사녹시 등이다.

<50> 용어 " C_2-C_{10} 알케닐옥시" 또는 "비치환 C_2-C_{10} 알케닐옥시"는 C_2-C_{10} 알케닐기로 치환된 산소 라디칼을 가리킨다. 예를 들면, C_2-C_{10} 알케닐옥시기는 에테닐옥시, 프로프-1-에닐옥시, 부트-1-에닐옥시, 헵트-3-에닐옥시, 데크-2-에닐옥시 등을 가리킨다. 용어 "치환된 C_2-C_{10} 알케닐옥시"는 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알케닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_2-C_{10} 알케닐옥시기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 C_2-C_{10} 알케닐옥시기는 1-메틸에테닐옥시, 1-메틸-1-프로페닐옥시, 1-메틸-1-부테닐옥시, 2-메틸-1-헵틸옥시, 2-메틸-1-데세닐옥시 등이다.

<51> 용어 " C_2-C_7 알킬닐옥시" 또는 "비치환 C_2-C_7 알킬닐옥시"는 C_2-C_7 알킬닐기로 치환된 산소 라디칼을 가리킨다. 상기 C_2-C_7 알킬닐옥시기의 예는 에틸닐옥시, 1-프로피닐옥시, 1-부티닐옥시, 1,3-헵트-다이닐옥시 등이다. 용어 "치환된 C_2-C_7 알킬닐옥시"는 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_2-C_7 알킬닐옥시기를 가리킨다. 상기 치환된 C_2-C_7 의 예는 2-메틸-에틸닐옥시, 2-메틸-1-프로피닐옥시, 2-메틸-1-부티닐옥시, 3-메톡시-1-헵티닐옥시 등이다.

<52> 용어 "아릴옥시" 또는 "비치환 아릴옥시"는 아릴기로 치환된 산소 라디칼을 가지는 기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 아릴옥시기는 페닐옥시, 나프틸옥시, 안트라세닐옥시, 비페닐옥시, 루브레닐옥시, 페릴레닐옥시 등이다. 용어 "치환된 아릴옥시"는 상기 열거된 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 아릴 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴옥시기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 아릴옥시기는 2-메틸-페닐옥시, 4-메틸-나프틸-2-옥시, 9-메틸-안트라세닐-1-옥시, 2-메틸-비페닐옥시, 2-메틸-루브레닐옥시, 2-메틸-페릴레닐옥시 등을 가리킨다.

- <53> 용어 " C_1-C_{20} 알킬아민" 또는 "비치환 C_1-C_{20} 알킬아민"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C_1-C_{20} 알킬기로 치환된 질소 라디칼을 가리킨다. 예를 들면, 상기 C_1-C_{20} 알킬아민기는 메틸아민, 에틸아민, 프로필아민, 부틸아민, 펜틸아민, 헥틸아민, 헥타데카닐아민 및 에이코사닐아민을 포함한다. 용어 "치환된 C_1-C_{20} 알킬아민"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_1-C_{20} 알킬아민기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 C_1-C_{20} 알킬아민기는 이소프로필아민, N-프로필-N-(2-메톡시)부틸아민, 2-메틸부틸아민, N-부틸-N-(2-메틸)헥틸아민 및 N-2-부틸-N-(2-메틸)헥타데카닐아민이다.
- <54> 용어 " C_2-C_{10} 알케닐아민" 또는 "비치환 C_2-C_{10} 알케닐아민"은 하나 또는 두 개의 동일 또는 상이한 C_2-C_{10} 알케닐기로 치환된 질소 라디칼을 가리키며, 여기서 하나의 C_2-C_{10} 알케닐기만이 질소 원자에 부착되어 있는 경우 C_1-C_{20} 알킬 또한 질소 원자에 부착될 수 있다. C_2-C_{10} 알케닐아민의 예는 에테닐아민, 1-프로페닐아민, 1-부테닐아민, 1-헥테닐아민, 1-데세닐아민 등이다. 용어 "치환된 C_2-C_{10} 알케닐아민"은 상기 열거한 기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알케닐 또는 알킬 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_2-C_{10} 알케닐아민기를 가리킨다. 상기 치환된 C_2-C_{10} 알케닐아민기의 예는 1-메틸-에테닐아민, 1-메틸-1-프로페닐아민 및 1-메틸-1-부테닐아민, 1-메틸-1-헥테닐아민, 2-메틸-1-데세닐아민 등이다.
- <55> 용어 " C_2-C_7 알킬닐아민" 또는 "비치환 C_2-C_7 알킬닐아민"은 하나 또는 두개의 동일 또는 상이한 C_2-C_7 알킬닐기로 치환된 질소 라디칼을 가리키며, 여기서 하나의 C_2-C_{10} 알케닐기만이 질소 원자에 부착되어 있는 경우, C_1-C_{20} 알킬 또는 C_2-C_{10} 알케닐 또한 질소 원자에 부착될 수 있다. 상기 C_2-C_{10} 알킬닐아민기의 예는 에틸닐아민, 1-프로피닐아민, 1-부티닐아민, 2-헥티닐아민, 1-데시닐아민 등이다. 용어 "치환된 C_2-C_7 알킬닐아민"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬, 알케닐 및 알킬닐 부분 중 하나 이상에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_2-C_7 알킬닐아민기이다. 상기 치환된 C_2-C_7 알킬닐아민기의 예는 이소프로피닐아민, 2-메틸-1-부티닐아민, 3-메틸-2-헥티닐아민, 2-메틸-1-데시닐아민 등이다.
- <56> 용어 "아릴아민" 또는 "비치환 아릴아민"은 하나 또는 두개의 동일 또는 상이한 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환된 질소 라디칼을 가리킨다. 상기 아릴아민기의 예는 페닐아민, 1-나프틸아민, 9-안트라세닐아민, 비페닐아민, 루브레닐아민, 페릴레닐아민 등이다. 용어 "치환된 아릴아민"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 고리 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴아민기를 가리킨다. 상기 치환된 아릴아민기의 예는 3-메틸페닐아민, 9-메톡시안트라세닐아민 등이다.
- <57> 용어 "알킬아릴아민", "아릴알킬아민", "비치환 아릴알킬아민" 또는 "비치환 알킬아릴아민"은 아릴 또는 헤테로아릴기, 및 C_1-C_{20} 알킬, C_2-C_{10} 알케닐, C_2-C_7 알킬닐, C_1-C_{20} 알콕시, C_2-C_{10} 알케닐옥시 및 C_2-C_7 알킬닐옥시기 중 하나로 치환된 질소 라디칼을 가리킨다. 상기 알킬아릴아민기의 예는 N-메틸-N-페닐아민, N-에틸-N-페닐아민, N-에틸-N-(1-나프틸)아민, N-메틸-N-(9-안트라세닐)아민, N-에테닐-N-페닐아민, N-에테닐-N-(1-나프틸)아민, N-에티닐-N-페닐아민, N-에티닐-N-(1-나프틸)아민 등이다. 용어 "치환된 알킬아릴아민" 또는 "치환된 아릴알킬아민"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 고리 부분, 비-고리 부분 또는 이들 모두에 모노- 또는 폴리- 치환된 알킬아릴아민기를 가리킨다. 상기 치환된 알킬아릴아민기의 예는 N-이소프로필-N-페닐아민, N-페닐-N-(4-프로필-1-나프틸)아민 등이다.
- <58> 용어 " C_1-C_{20} 알킬실릴" 또는 "비치환 C_1-C_{20} 알킬실릴"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C_1-C_{20} 알킬기로 치환된 실리콘 라디칼을 가리킨다. 예를 들면, 상기 알킬실릴기는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리데카닐실릴 및 트리에이코사닐실릴을 포함한다. 용어 "치환된 C_1-C_{20} 알킬실릴"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 C_1-C_{20} 알킬 부분 중 하나 이상에 모노- 또는 폴리- 치환된 C_1-C_{20} 알킬실릴기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 알킬실릴기는 디이소프로필메틸실릴, 디(이소부틸)메틸실릴, 디(데카닐)이소프로필실릴 및 디(에이코사닐)메틸실릴을 포함한다.
- <59> 용어 " C_2-C_{10} 알케닐실릴" 또는 "비치환 C_2-C_{10} 알케닐실릴"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C_2-C_{10} 알케닐기로 치환된 실리콘 라디칼을 가리키며, 여기서 하나 이상의 C_1-C_{20} 알킬기는 또한 실리콘에 부착될 수 있다. 예를 들면, 상기 알케닐실릴기는 트리에테닐실릴, 트리프로페닐실릴, 트리부테닐실릴, 트리헥테닐실릴, 및 트리데세닐

실릴을 포함한다. 용어 "치환 C₁-C₂₀ 알케닐실릴"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬 또는 알케닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐실릴기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐실릴기는 트리(2-메틸에테닐)실릴, 트리(2-메틸프로페닐)실릴, 트리(2-메틸헵테닐)실릴 및 트리(2-메틸데세닐)실릴을 포함한다.

<60> 용어 "C₂-C₇ 알키닐실릴" 또는 "비치환 C₂-C₇ 알키닐실릴"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C₂-C₁₀ 알키닐기로 치환된 실리콘 라디칼을 가리키며, C₁-C₂₀ 알킬 및 C₂-C₁₀ 알케닐기 중 하나 이상이 실리콘에 부착될 수 있다. 예를 들면, 상기 알키닐실릴기는 트리에틸닐실릴, 트리프로피닐실릴, 트리부틸닐실릴, 트리헵틸닐실릴, 및 트리데세닐실릴을 포함한다. 용어 "치환된 C₂-C₇ 알키닐실릴"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬, 알케닐 또는 알키닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₇ 알키닐실릴기를 가리킨다. 상기 치환된 C₂-C₇ 알키닐실릴기는 예를 들면 트리(2-메틸에틸닐)실릴, 트리(2-메틸프로피닐)실릴, 트리(2-메틸부틸닐)실릴, 트리(2-메틸헵틸닐)실릴 및 트리(2-메틸데세닐)실릴을 포함한다.

<61> 용어 "아릴실릴" 또는 "비치환 아릴실릴"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환된 실리콘 라디칼을 가리킨다. 예를 들면, 상기 아릴실릴기는 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴 및 트리비페닐실릴을 포함한다. 용어 "치환된 아릴실릴"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴실릴기를 가리킨다. 예를 들면, 상기 치환된 아릴실릴기는 트리(2-메틸페닐)실릴, 트리(4-메틸나프틸)실릴 및 트리(2-메틸비페닐)실릴을 포함한다.

<62> 용어 "알킬아릴실릴", "아릴알킬실릴", "비치환 아릴알킬실릴" 또는 "비치환 알킬아릴실릴"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 아릴 또는 헤테로아릴기, 및 동시에 C₁-C₂₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₇ 알키닐, C₁-C₂₀ 알콕시, C₂-C₁₀ 알케닐옥시 및 C₂-C₇ 알키닐옥시기 중 하나로 치환된 실리콘 라디칼을 가리킨다. 상기 알킬아릴실릴기의 예는 디페닐메틸실릴, 디나프틸메틸실릴, 디페닐에틸실릴, 디나프틸에테닐실릴, 디안트라세닐에틸닐실릴 등이다. 용어 "치환된 알킬아릴실릴"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 고리 부분, 비-고리 부분 또는 이들 모두에 모노- 또는 폴리- 치환된 알킬아릴실릴기를 가리킨다. 상기 치환된 알킬아릴실릴기의 예는 디(2-메틸페닐)메틸실릴, 디(4-메틸나프틸)메틸실릴 등이다.

<63> 용어 "C₁-C₂₀ 알킬보라닐" 또는 "비치환 C₁-C₂₀ 알킬보라닐"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C₁-C₂₀ 알킬기로 치환된 보론 라디칼을 의미한다. 예를 들면, 상기 알킬보라닐기는 디메틸보라닐, 디에틸보라닐, 디프로필보라닐, 디헵틸보라닐, 디데카닐보라닐, 및 디(에이코사닐)보라닐을 포함한다. 용어 "치환된 C₁-C₂₀ 알킬보라닐"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 C₁-C₂₀ 알킬 부분 중 하나 이상에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₁-C₂₀ 알킬보라닐기이다. 예를 들면, 상기 치환된 알킬보라닐기는 디(이소프로필)보라닐, 디(이소부틸)보라닐, 디(2-메틸헵틸)보라닐, 디(2-메틸데카닐)보라닐 및 디(2-메틸에이코사닐)보라닐을 포함한다.

<64> 용어 "C₂-C₁₀ 알케닐보라닐" 또는 "비치환 C₂-C₁₀ 알케닐보라닐"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C₂-C₁₀ 알케닐기로 치환된 보론 라디칼을 의미하며, 여기서 하나의 C₂-C₁₀ 알케닐기만이 보론에 부착된 경우, C₁-C₂₀ 알킬기 또한 보론 원자에 부착될 수 있다. 예를 들면, 상기 알케닐보라닐기는 디에틸보라닐, 디프로페닐보라닐, 디부틸보라닐, 디헵틸보라닐 및 디데카닐보라닐을 포함한다. 용어 "치환된 C₂-C₁₀ 알케닐보라닐"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬 또는 알케닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐보라닐기를 의미한다. 상기 치환된 알케닐보라닐기의 예는 디(1-메틸에테닐)보라닐 및 디(1-메틸프로프-1-에닐)보라닐, 디(2-메틸헵테닐)보라닐, 디(2-메틸데카닐)보라닐 등이다.

<65> 용어 "C₂-C₇ 알키닐보라닐" 또는 "비치환 C₂-C₇ 알키닐보라닐"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 C₂-C₇ 알키닐기로 치환된 보론 라디칼을 의미하며, 여기서 하나의 C₂-C₇ 알키닐기만이 보론에 부착된 경우, C₁-C₂₀ 알킬 또는 C₂-C₁₀ 알케닐기 또한 보론 원자에 부착될 수 있다. 예를 들면, 상기 알키닐보라닐기는 디에틸닐보라닐, 디프로피닐보라닐, 디부틸닐보라닐, 디헥시닐보라닐 및 디헵틸닐보라닐을 포함한다. 용어 "치환된 C₂-C₇ 알키닐보라닐"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬, 알케닐 또는 알키닐 부분에 모

노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₇ 알킬닐보라닐기를 의미한다. 상기 치환된 C₂-C₇ 알킬닐보라닐기는, 예를 들면, 디(2-메틸에틸닐)보라닐, 디(2-메틸프로피닐)보라닐, 디(2-메틸부틸닐)보라닐, 디(2-메틸헥시닐)보라닐 및 디(2-메틸헵타닐)보라닐을 포함한다.

<66> 용어 "아릴보라닐" 또는 "비치환 아릴보라닐"은 하나 이상의 동일 또는 상이한 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환된 보론 라디칼을 의미한다. 상기 아릴보라닐기의 예는 디페닐보라닐, 나프틸보라닐, 디나프틸보라닐, 디비페닐보라닐, 루브레닐보라닐, 페릴레닐보라닐 등이다. 용어 "치환된 아릴보라닐"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 아릴 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴보라닐기를 의미한다. 상기 치환된 아릴보라닐기의 예는 디(3-메틸페닐)보라닐, 디(4-메틸나프틸-1-일)보라닐, 디(2-메틸비페닐)보라닐 등이다.

<67> 용어 "알킬아릴보라닐", "아릴알킬보라닐", "비치환 알킬아릴보라닐" 또는 "비치환 알킬아릴보라닐"은 아릴 또는 헤테로아릴기, 및 동시에 C₁-C₂₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₇ 알킬, C₁-C₂₀ 알콕시, C₂-C₁₀ 알케닐옥시 및 C₂-C₇ 알킬닐옥시 중 하나로 치환된 보론 라디칼을 의미한다. 상기 알킬아릴보라닐기의 예는 에틸페닐보라닐, 메틸나프틸보라닐, 메틸비페닐보라닐, 에틸나프틸보라닐, 에틸페닐보라닐 등이다. 용어 "치환된 알킬아릴보라닐"은 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 고리 부분, 비-고리 부분 또는 이들 모두에 모노- 또는 폴리- 치환된 알킬아릴보라닐기를 의미한다. 상기 치환된 알킬아릴보라닐기의 예는 메틸(4-메틸나프틸)보라닐, 에틸(2-메틸페닐)보라닐, 메틸(2-메틸비페닐)보라닐 등이다.

<68> 용어 "C₁-C₂₀ 알킬티오" 또는 "비치환 C₁-C₂₀ 알킬티오"는 C₁-C₂₀ 알킬기로 치환된 황 라디칼을 의미한다. 예를 들면, 상기 알킬티오기는 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, n-부틸티오, n-헵틸티오, n-데카닐티오 및 n-에이코사닐티오를 포함한다. 용어 "치환된 C₁-C₂₀ 알킬티오"는 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 C₁-C₂₀ 알킬 부분 중 하나 이상에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₁-C₂₀ 알킬티오기를 의미한다. 예를 들면, 상기 치환된 알킬티오기는 이소프로필티오, 이소부틸티오, 네오-펜틸티오, 2-메틸헵틸티오, 2-메틸데카닐티오 및 2-메틸에이코사닐티오를 포함한다.

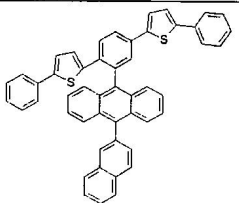
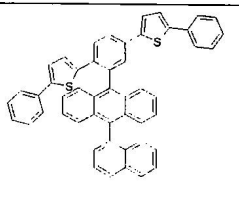
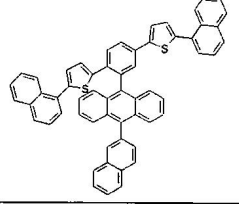
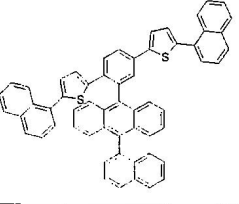
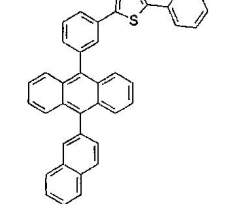
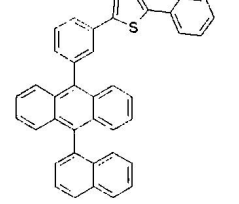
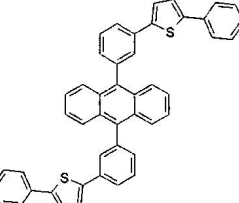
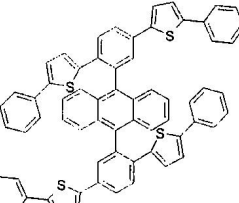
<69> 용어 "C₂-C₁₀ 알케닐티오" 또는 "비치환 C₂-C₁₀ 알케닐티오"는 C₂-C₁₀ 알케닐기로 치환된 황 라디칼을 가지는 기를 의미한다. 예를 들면, 상기 알케닐티오기는 에틸티오, 프로피닐티오, 부틸티오 및 데세닐티오를 포함한다. 용어 "치환된 C₂-C₁₀ 알케닐티오"는 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알케닐 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₁₀ 알케닐티오기를 의미한다. 예를 들면, 상기 치환된 알킬티오기는 1-메틸에틸티오, 1-메틸-2-프로피닐티오 및 1-메틸-2-부틸티오를 포함한다.

<70> 용어 "C₂-C₇ 알킬닐티오" 또는 "비치환 C₂-C₇ 알킬닐티오"는 C₂-C₇ 알킬닐기로 치환된 황 라디칼을 가지는 기를 의미한다. 예를 들면, 상기 알킬닐티오기는 에틸닐티오, 프로피닐티오, 부틸닐티오 및 헵타닐티오를 포함한다. 용어 "치환된 C₂-C₇ 알킬닐 티오"는 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 알킬 부분에서 모노- 또는 폴리- 치환된 C₂-C₇ 알킬닐티오기를 의미한다. 상기 치환된 C₂-C₇ 알킬닐티오기는 예를 들면 2-메틸-에틸닐티오, 2-메틸프로피닐, 2-메틸부틸닐티오 및 2-메틸헵타닐티오를 포함한다.

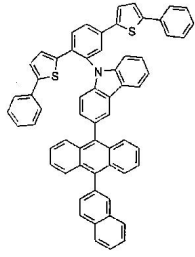
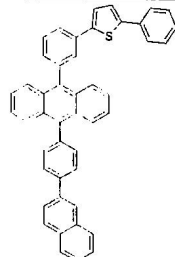
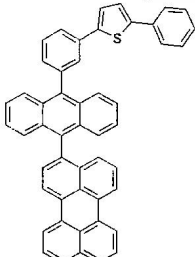
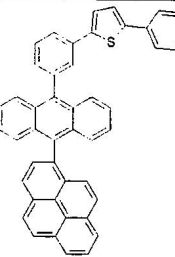
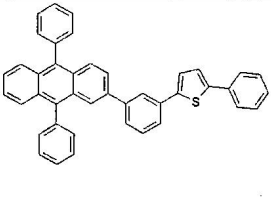
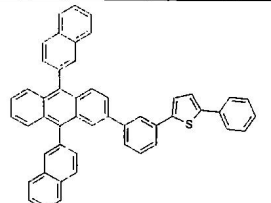
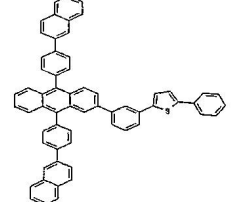
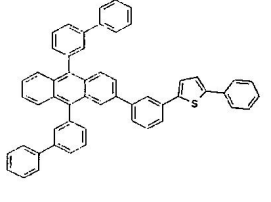
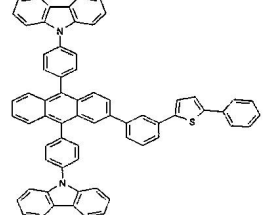
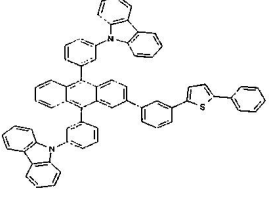
<71> 용어 "아릴티오" 또는 "비치환 아릴티오"는 아릴기로 치환된 황 원자를 가지는 기를 의미한다. 예를 들면, 상기 아릴티오기는 페닐티오, 나프틸티오, 안트라세닐티오 및 비페닐티오를 포함한다. 용어 "치환된 아릴티오"는 상기 열거한 치환기로부터 선택되는 하나 이상의 동일 또는 상이한 치환기로 아릴 부분에 모노- 또는 폴리- 치환된 아릴티오기를 의미한다. 예를 들면, 상기 치환된 아릴티오기는 3-메틸페닐티오, 4-메틸나프틸티오 및 2-메틸비페닐티오를 포함한다.

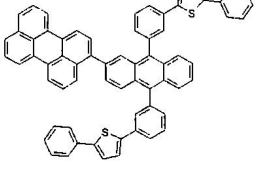
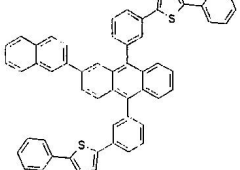
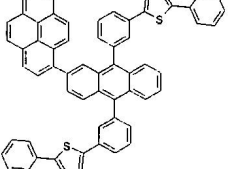
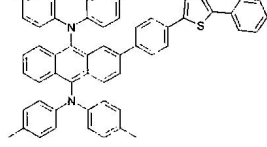
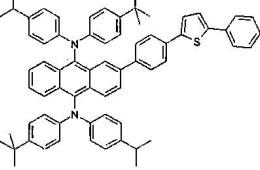
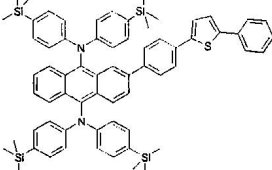
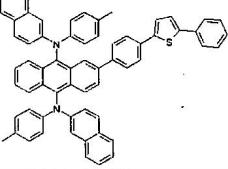
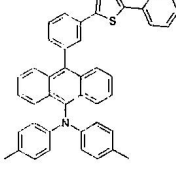
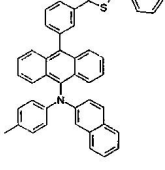
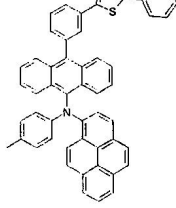
<72> 상기 화학식 1의 화합물의 구체적인 예는 하기 표 1에 나타내었으며, 이에 한정되지는 않는다.

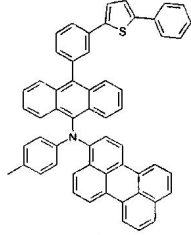
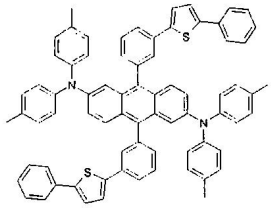
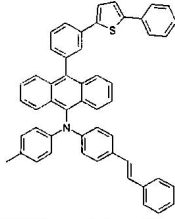
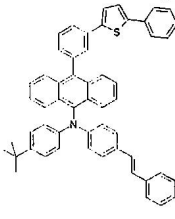
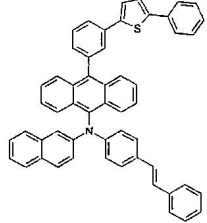
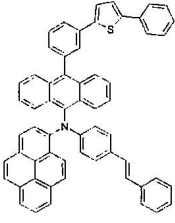
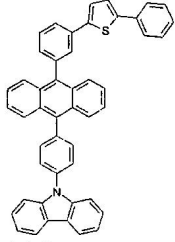
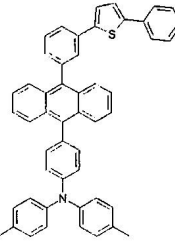
표 1

화합물	구조식	화합물	구조식
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	

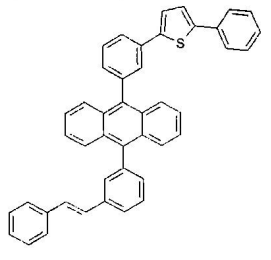
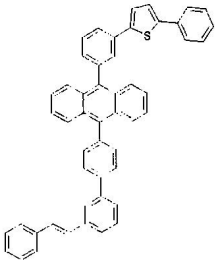
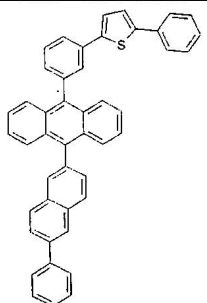
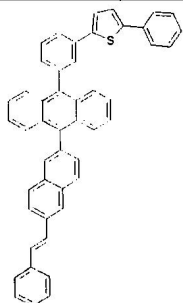
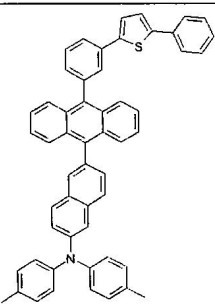
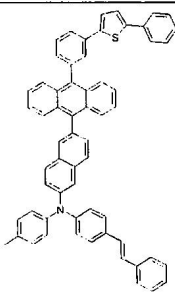
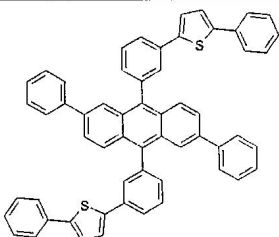
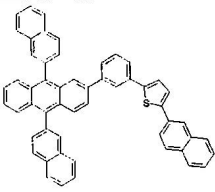
<73>

9		10	
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	

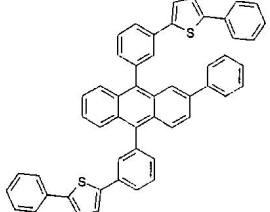
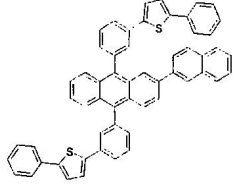
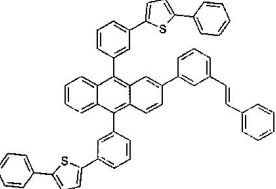
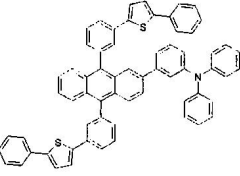
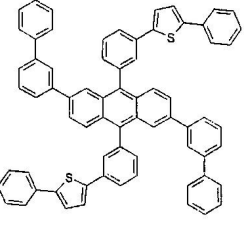
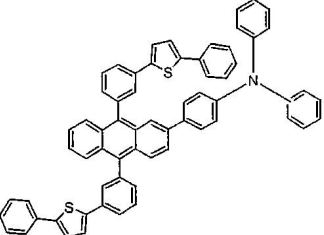
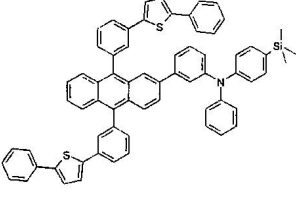
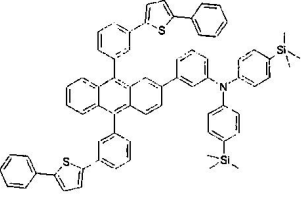
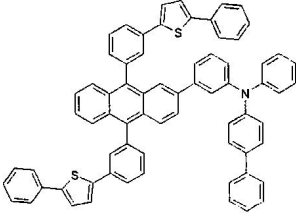
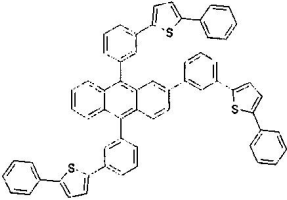
19		20	
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	

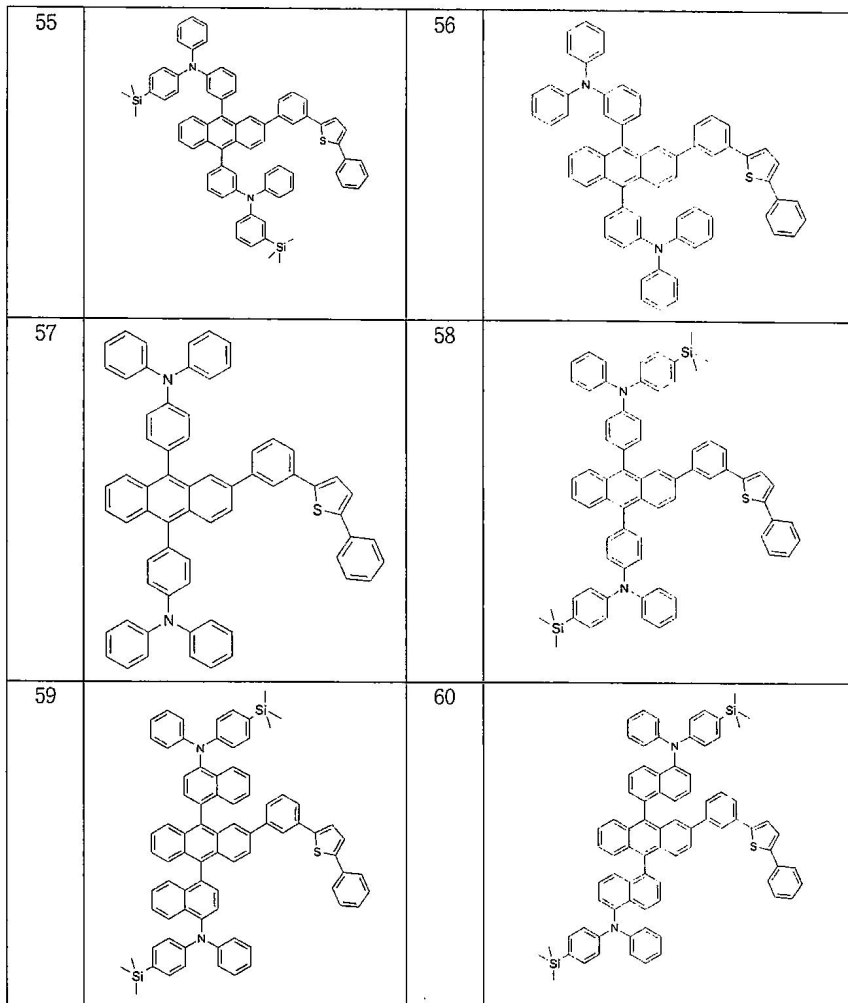
29		30	
31		32	
33		34	
35		36	

<76>

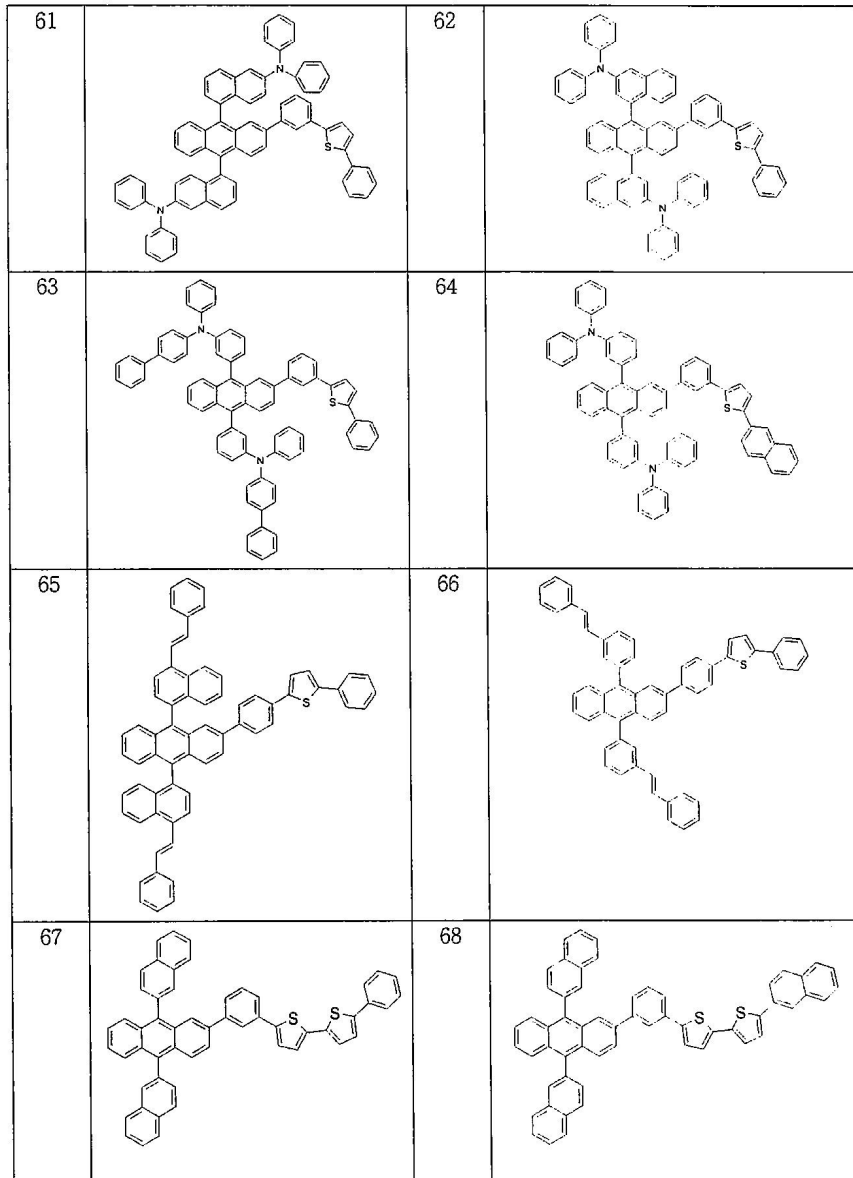
37		38	
39		40	
41		42	
43		44	

<77>

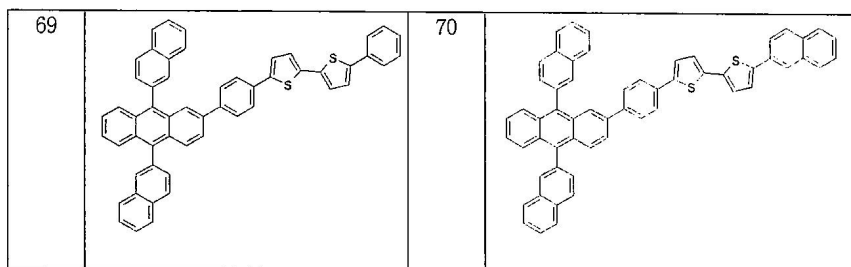
45		46	
47		48	
49		50	
51		52	
53		54	



<79>



<80>



<81>

<82>

상기 화학식 1의 화합물에서, 본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물들은 안트라센 유도체에 티오펜을 포함하는 특징적인 구조를 갖는다. 이와 같은 티오펜을 포함하는 치환체 구조의 화합물은 티오펜이 없는 비슷한 구조의 화합물보다 형광의 발광효율(quantum efficiency)이 크게 상승한다. 이것은 발광층의 호스트와 도펀트 모두에게 요구되는 중요한 특성 중에 하나이다. 따라서 화학식 1로 표시되는 새로운 구조를 통하여 소자의 발광 효율을 크게 향상시킬 수 있다. 특히 도펀트의 절대 발광 효율을 높힐 수 있다. 도 1은 본 발명에 따른 화합물 5와 비교화합물 1의 용액 (농도 : 1×10^{-5} M, 용매 : 톨루엔)의 광발광(photoluminescence; PL)을 여기 파장 360nm에서 측정한 스펙트럼을 나타낸 도이다. 파장 360~600nm에 대해 스펙트럼의 세기(Intensity)를 적분한 면적(에너지)은 각각 1.0×10^{10} , 1.8×10^{10} 이다. 도 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물 5가 비교화합물 1보다 약 2배 정도 강한 발광 특성을 보임을 알 수 있다.

- <83> 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물 1의 구조를 예를 들면, 티오펜이 치환된 페닐과 9-(2-나프틸)안트라센 부분이 서로 약 90도로 틀어져 있어서 서로 화학적으로 결합되어 있으면서도, 서로 컨จู게이션에 크게 영향을 미치지 않아, 각각 독립적으로 같거나 유사한 파장대의 발광스펙트럼을 보일 수 있다.
- <84> 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은, 출발물질로서 이형고리기가 치환된 브로모 벤젠과 안트라센 보론산을 사용하고, 여기에 아릴-아릴 커플링 방법으로 치환기를 도입하여 제조될 수 있다. 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물의 구체적인 제조방법은 실시예에서 나타낸다.
- <85> 또한, 본 발명은 제 1 전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- <86> 진술한 본 발명의 화합물들은 유기발광소자에서 단독으로 발광 물질의 역할을 할 수 있을 뿐만 아니라, 적절한 발광 도판트와 함께 발광 호스트, 또는 적절한 발광 호스트와 함께 발광 도판트 역할을 할 수 있다.
- <87> 본 발명의 유기발광소자는 진술한 본 발명에 따른 화합물을 이용하여 유기발광소자의 유기물층 중 1층 이상, 특히 발광층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기발광소자의 제조 방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- <88> 본 발명의 하나의 실시 상태에 있어서, 유기발광소자는 제 1 전극과 제 2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있다. 본 발명에 따른 유기발광소자의 구조는 도 3에 예시되어 있다.
- <89> 예컨대, 본 발명에 따른 유기발광소자는 스퍼터링(sputtering) 이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기발광소자를 만들 수도 있다(국제특허 출원 공개 제2003/012890호 참조).
- <90> 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- <91> 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <92> 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <93> 상기 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포르피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <94> 상기 정공수송 물질로는 양극이나 정공주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <95> 상기 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물 (Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물;

BAIq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

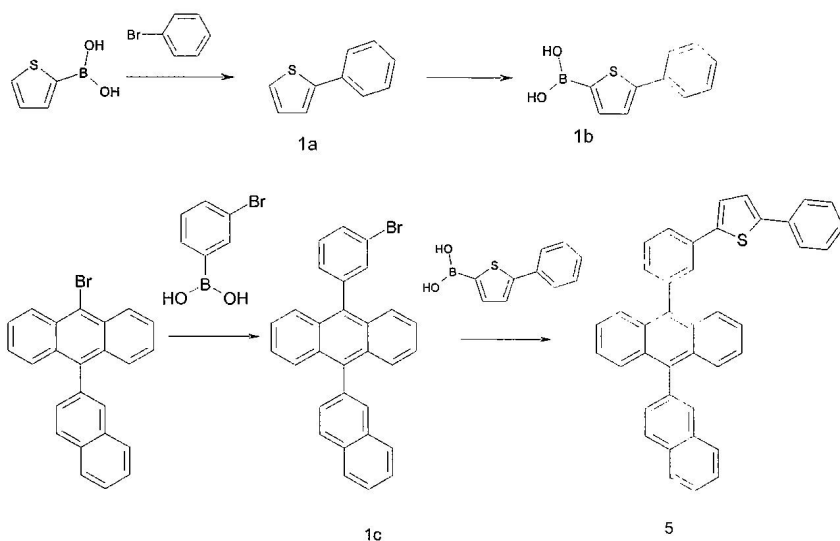
<96> 상기 전자수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

<97> 본 발명에 따른 유기발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

<98> 본 발명에 따른 화합물은 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터 등을 비롯한 유기전기소자에서도 유기발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

<99> 이하, 실시예 및 실험예를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명하지만, 본 발명은 하기 실시예 및 실험예에 의하여 범위가 한정되지는 않는다.

<100> **실시예 1 : 화합물 5의 제조**



<101>

<102> **1-A. 화합물 1a의 제조**

<103> 화합물 2-티오펜 보론산 (10 g, 78.1 mmol)과 브로모 벤젠(7.48 mL, 70.3 mmol)을 무수 THF (300 mL)에 녹인 후, Pd(PPh₃)₄ (4.51 g, 3.91 mmol)과 K₂CO₃ 수용액 (156 mL, 312.4 mmol)을 넣고, 3시간 동안 환류시켰다. 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘으로 수분을 제거하였다. 유기층을 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 흰색 고체 화합물 1a (10g, 80%)를 얻었다. MS [M+H] = 161

<104> **1-B. 화합물 1b의 제조**

<105> 상기 1-A에서 제조한 화합물 1a(5g, 31.3 mmol)을 무수 THF (200 mL)에 녹인 후, -10℃까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(15 mL, 37.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반하고 다시 -78℃까지 온도를 내린후, 보론산 트리메틸에스테르(10.5 mL, 93.75 mmol)를 천천히 넣어주고, 12시간 교반하였다. 0℃까지 온도를 내린후 10 중량%의 황산 수용액 (16 mL)을 넣고 교반하여 흰색 침전을 얻었다. 유기층을 THF로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 여과하였다. 이 여과액을 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹인 후, 과량의 2M NaOH 수용액을 넣고 디메틸클로로 메탄으로 유기층을 분리하였다. 분리된 수용액 층에 염산 수용액을 가하여 침전물을 생성시킨 후 여과하여 화합물 1b (2.7 g, 42%)를 얻었다.

<106> **1-C. 화합물 1c의 제조**

<107> 상기 1-B에서 제조한 화합물 1b (2 g, 5.2 mmol)와 3-브로모 페닐 보론산(1.04 g, 5.2 mmol)을 무수 THF (60 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.3 g, 0.26 mmol)을 넣고, K₂CO₃ (1.0 g, 7.8 mmol)을 H₂O (60 mL)에 녹여 넣어준 후

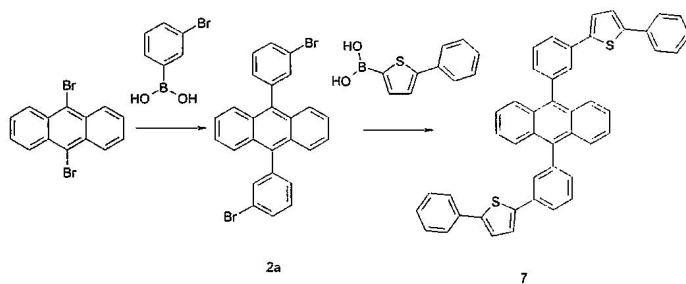
교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1c (1.2 g, 50%)를 얻었다. MS [M] = 459

<108> **1-D. 화합물 5의 제조**

<109> 상기 1-C에서 제조한 화합물 1c (1 g, 2.18 mmol), 상기 1-B에서 제조한 화합물 1b(0.53 g, 2.6 mmol), 및 Pd(PPh₃)₄ (0.13 g, 0.11 mmol)을 무수 THF (50mL)에 녹인 후, 2M K₂CO₃ 수용액 (50 mL)을 넣어준 후 3시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 반응 용액의 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5 (0.9 g, 80%)를 얻었다. MS [M] = 538

<110> 화합물 5의 용액 (농도 : 1*10⁻⁵ M, 용매 : 톨루엔)의 광발광(photoluminescence; PL)을 여기파장 360nm에서 측정한 스펙트럼을 도 1에 나타내었다.

<111> **실시예 2 : 화합물 7의 제조**



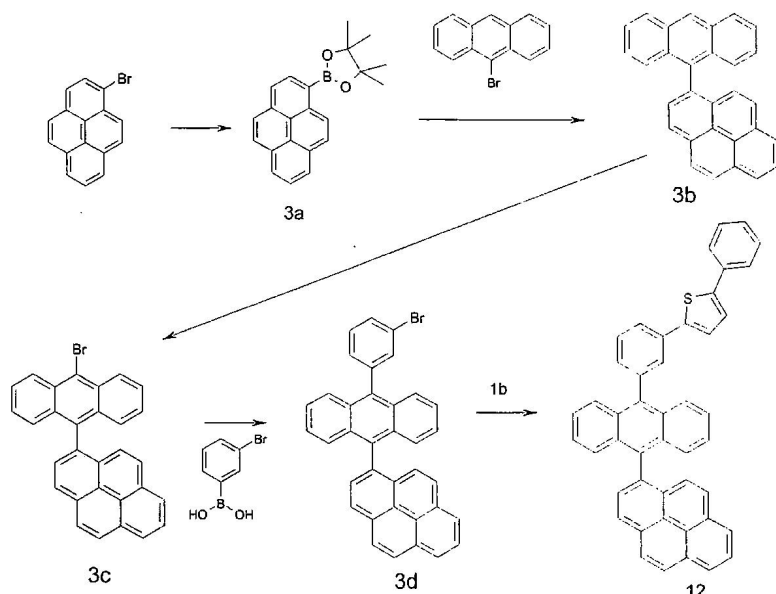
<112>
<113> **2-A. 화합물 2a의 제조**

<114> 9,10-디브로모 안트라센 (2 g, 5.95 mmol)과 3-브로모 페닐 보론산(2.4 g, 11.9 mmol)을 무수 THF (60 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.34 g, 0.30 mmol)을 넣고, K₂CO₃ (1.8 g, 13.09 mmol)을 H₂O (60 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 2a (1.5 g, 50%)를 얻었다. MS [M] = 488

<115> **2-B. 화합물 7의 제조**

<116> 상기 2-A에서 제조한 화합물 2a (1.5 g, 3.07 mmol), 상기 실시예 1의 1-B에서 제조한 화합물 1b (1.36 g, 6.76 mmol), 및 Pd(PPh₃)₄ (0.18 g, 0.15 mmol)을 무수 THF (50mL)에 녹인 후, 2M K₂CO₃ 수용액 (50 mL)을 넣어준 후 3시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 반응 용액의 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7 (1.7 g, 85%)을 얻었다. MS [M] = 646

<117> 실시예 3 : 화합물 12의 제조



<118>

<119> 3-A. 화합물 3a의 제조

<120> 1-브로모-파이렌 (5 g, 17.8 mmol)을 무수 THF (60 mL)에 녹인 후, -78℃까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(9.7 mL, 23.2 mmol)을 천천히 적가하였다. 30분 동안 교반하고 2-이소프로필-4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2]디옥사보론 (4.8 mL, 23.1 mmol)을 천천히 적가하고 12시간 교반하였다. 염화암모늄 용액으로 반응 혼합물을 씻어주고, 증류수로 2회 더 씻은 후, 황산 마그네슘으로 물을 제거하였다. THF에 녹이고 EtOH로 재결정하여 화합물 3a (3.27 g, 56%)를 얻었다.

<121> 3-B. 화합물 3b의 제조

<122> 상기 3-A에서 제조한 화합물 3a(1.34 g, 4.08 mmol)와 9-브로모안트라센 (1.05 g, 4.08 mmol)을 THF(30mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.24 g, 0.20 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (8.2 mL, 16.3 mmol)을 넣어준 후 3시간 동안 환류 교반하였다. 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹이고 에테르로 재결정하여 화합물 3b(1.08 g, 70%)를 얻었다. MS [M+H] = 379

<123> 3-C. 화합물 3c의 제조

<124> 상기 3-B에서 제조한 화합물 3b (1.08 g, 2.86 mmol)를 DMF에 녹이고 N-브로모숙신이미드 (0.6 g, 3.43 mmol)를 넣어준 후, 3시간 동안 교반하였다. 용액에 H₂O를 넣어 침전을 형성하고 감압여과한 후, 다시 THF에 녹이고 에테르로 재결정하여 화합물 3c(0.54 g, 41%)를 얻었다. MS [M+H] = 458

<125> 3-D. 화합물 3d의 제조

<126> 상기 3-C에서 제조한 화합물 3c (0.54 g, 1.18 mmol)와 3-브로모페닐보론산 (0.24 g, 1.18 mmol)을 무수 THF (10 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (68 mg, 0.059 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (2.4 mL, 4.72 mmol)을 넣어준 후 3시간 환류 교반하였다. 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3d(0.24g, 38%)를 얻었다. MS [M] = 533

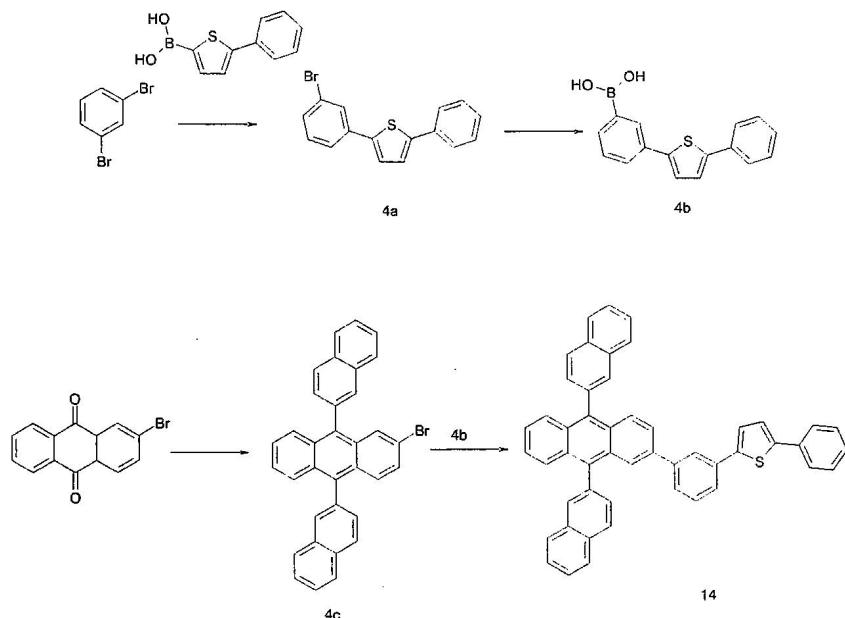
<127> 3-E. 화합물 12의 제조

<128> 상기 3-D에서 제조한 화합물 3d (0.24 g, 0.45 mmol)와 상기 실시예 1의 1-B에서 제조한 화합물 1b (0.11 g, 0.54 mmol)를 무수 THF(10 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (26 mg, 0.03 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (0.9 mL, 1.8 mmol)을 넣어준 후 3시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 12(0.12

g, 43%)를 얻었다. MS [M+H] =613

<129> 화합물 12의 용액 (농도 : 1×10^{-5} M, 용매 : 톨루엔)의 광발광(photoluminescence; PL)을 여기파장 434nm에서 측정된 스펙트럼을 도 2에 나타내었다.

<130> **실시예 4 : 화합물 14의 제조**



<131>

<132> **4-A. 화합물 4a의 제조**

<133> 1,3-디브로모페닐(5 g, 21.2 mmol)과 상기 1-B에서 제조한 화합물 1b(4.3 g, 21.2 mmol)를 무수 THF (100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (1.2 g, 1.06 mmol)을 넣고, K₂CO₃ (3.2 g, 23.3 mmol)을 H₂O (50 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4a (3.7 g, 55%)를 얻었다. MS [M] = 315

<134> **4-B. 화합물 4b의 제조**

<135> 상기 4-A에서 제조한 화합물 4a(3.7 g, 11.7 mmol)를 무수 THF (70 mL)에 녹인 후, -10℃까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(3.2 mL, 2.5 헥산 용액)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반하고 다시 -78℃까지 온도를 내린 후, 보론산트리메틸에스테르(2.4 mL, 21.1 mmol)를 천천히 넣어주고, 12시간 교반하였다. 0℃까지 온도를 내린 후 10 중량%의 황산 수용액 (10 mL)을 넣고 교반하여 흰색 침전을 얻었다. 유기층을 THF로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 여과하였다. 이 여과액을 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹인 후, 과량의 2M NaOH 수용액을 넣고 디메틸클로로메탄으로 유기층을 분리하였다. 분리된 수용액 층에 염산 수용액을 가하여 침전물을 생성시킨 후 여과하여 화합물 4b (1.8 g, 55%)를 얻었다.

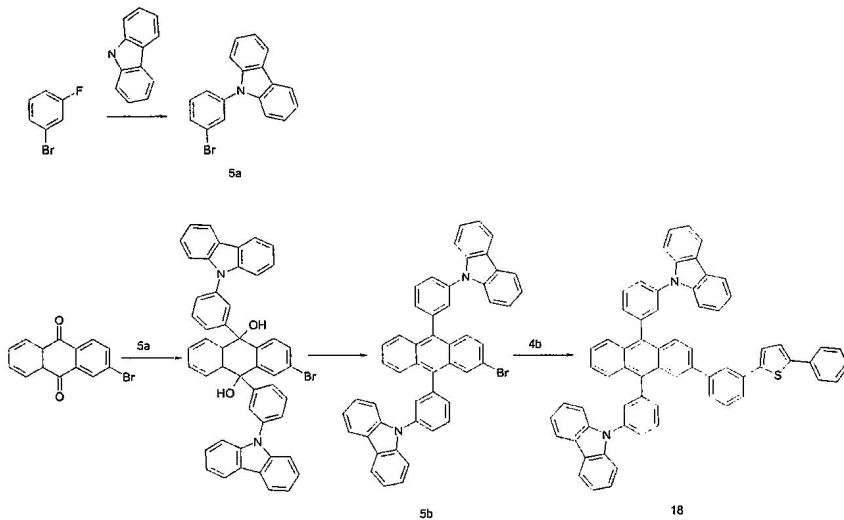
<136> **4-C. 화합물 4c의 제조**

<137> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 2-브로모나프탈렌(11.0 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 2-브로모 안트라퀴논(6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 디나프틸디알콜(11.2 g, 93%)을 얻었다. 질소 분위기하에서 디나프틸디알콜(11.2 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 4c (7.2 g, 64%)를 얻었다. MS [M] =

<138> 4-D. 화합물 14의 제조

<139> 상기 4-C에서 제조한 화합물 4c (2.7 g, 5.4 mmol)와 상기 4-B에서 제조한 화합물 4b (1.8 g, 6.4 mmol)를 무수 THF(70 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.3 g, 0.27 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (20 mL)을 넣어준 후 12시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹여 에탄올로 결정화하여 화합물 14 (2.9 g, 82%)를 얻었다. MS [M+H] = 665

<140> 실시예 5 : 화합물 18의 제조



<141>

<142> 5-A. 화합물 5a의 제조

<143> 질소 분위기하에서 1-브로모-3-플루오로벤젠(6.3 g, 35.9 mmol), 카바졸 (5 g, 29.9 mmol), 칼륨플루오라이드-알루미나(40 중량%, 8.65 g, 59.8 mmol), 및 18-크라운-6 (0.8 g, 2.99 mmol)을 디메틸설폭사이드(DMSO, 75 mL)에 녹이고, 150 °C 이상의 온도에서 12시간 교반하였다. 반응액을 식힌 후 황산 마그네슘위에서 알루미늄을 여과하였다. 여과액을 메틸 t-부틸 에테르 (Methyl tertiary-butyl ether, 300mL)로 층분리한 후 물로 씻어주었다. 유기층을 감압 증류 후 컬럼 크로마토그래피(용매 : 헥산 용액)로 분리하여 화합물 5a (3 g, 26%)를 얻었다. MS [M] = 322

<144> 5-B. 화합물 5b의 제조

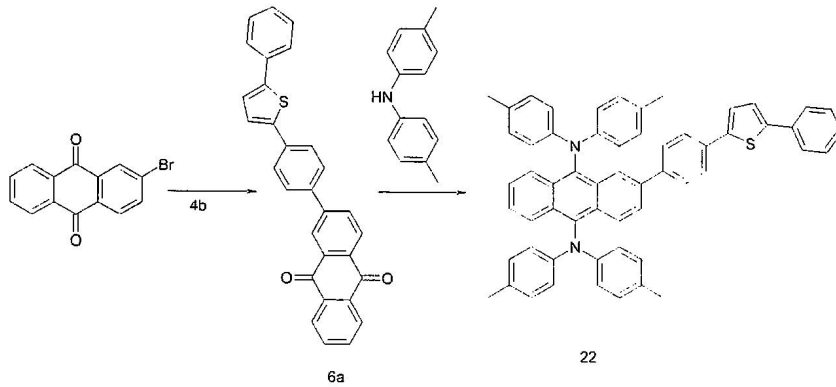
<145> 질소 분위기하에서, 건조된 THF(100 mL)에 상기 5-A에서 제조한 화합물 5a(3.0 g, 9.3 mmol)를 녹이고, -78°C 에서 t-부틸리튬(8 mL, 1.7 M 펜탄용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 2-브로모 안트라퀴논(1.22 g, 4.2 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 여과한 후 진공 건조하여 디카바졸페닐디알콜(2.9 g, 90%)을 얻었다.

<146> 질소 분위기하에서, 디카바졸페닐디알콜(2.9 g, 3.8 mmol)을 아세트산 (50 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(6.5 g, 39 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(6.87 g, 78 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 화합물 5b (1.9 g, 67%)를 얻었다. MS [M] = 739

<147> 5-C. 화합물 18의 제조

<148> 상기 5-B에서 제조한 화합물 5b (1.9 g, 2.6 mmol)와 상기 실시예 4의 4-B에서 제조한 화합물 4b (0.87 g, 3.1 mmol)를 무수 THF(70 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.15 g, 0.13 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (20 mL)을 넣어준 후 12시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 18(1.9 g, 85%)을 얻었다. MS [M+H] = 895

<149> 실시예 6 : 화합물 22의 제조



<150>

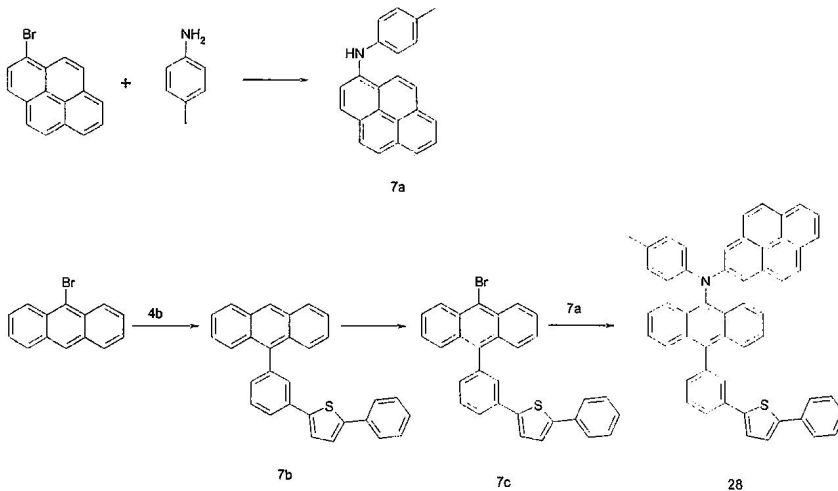
<151> 6-A. 화합물 6a의 제조

<152> 2-브로모 안트라퀴논(3 g, 10.4 mmol)과 상기 실시예 4의 4-B에서 제조한 화합물 4b (4.4 g, 15.7 mmol)를 무수 THF(100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.36 g, 0.31 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (70 mL)을 넣어준 후 12시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 6a(3.8 g, 83%)을 얻었다. MS [M] = 442

<153> 6-A. 화합물 22의 제조

<154> 상기 6-A에서 제조한 화합물 6a(3 g, 7.1 mmol), p-톨릴아민(5.6 g, 28.4 mmol), 및 피리딘(2.3 mL, 28.4 mmol)을 벤젠(100 mL)에 녹인 후, 10°C에서 사염화티탄(5.4 g, 28.4 mmol)을 적하하고 20시간 실온으로 교반하였다. 그 다음 물(100 mL)로 희석하고 산화나트륨 수용액으로 중화한 뒤 에틸아세테이트로 추출하여 농축하였다. 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 화합물 22(1.7 g, 30%)를 얻었다. MS [M] = 802

<155> 실시예 7 : 화합물 28의 제조



<156>

<157> 7-A. 화합물 7a의 제조

<158> 질소 분위기하에서, 1-브로모 파이렌(2 g, 7.1 mmol)과 p-톨리딘(1 g, 9.2 mmol)을 톨루엔 (80 mL)에 녹인 후, NaOtBu (1.7 g, 17.8 mmol)을 넣고 약 10분간 교반한 후, Pd(dba)₂ (81 mg, 0.14 mmol)과 트리-t-부틸포스핀 (0.07 mL, 0.14 mmol)을 넣고, 승온시켜 30분 동안 환류시켰다. 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 7a(1.9 g, 91%)를 얻었다. MS [M+H] = 294

<159> 7-B. 화합물 7b의 제조

<160> 9-브로모안트라센(3 g, 11.7 mmol)과 상기 4-B에서 제조한 화합물 4b (3.9 g, 14 mmol)를 무수 THF(100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.68 g, 0.59 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (70 mL)을 넣어준 후 12시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹여 에탄올로 결정화하여 화합물 7b (4.1 g, 85%)를 얻었다. MS [M] = 412

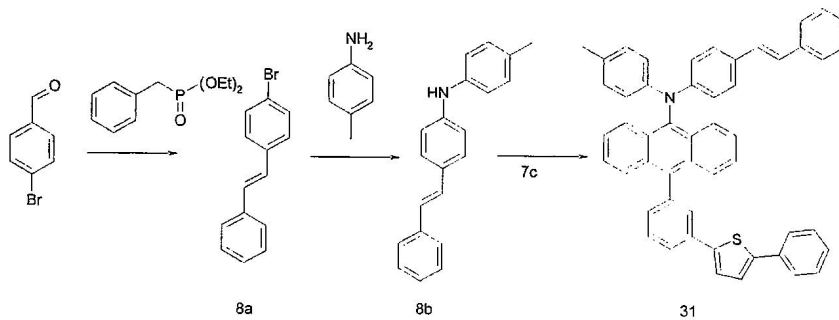
<161> **7-C. 화합물 7c의 제조**

<162> 상기 7-B에서 제조한 화합물 7b (4 g, 9.7 mmol)를 CHCl₃ (100mL)에 녹이고, 아세트산 (100mL)을 첨가한 후, 0 °C 하에서 Br₂ (0.55 mL, 10.7 mmol)을 적가하였다. 온도를 실온으로 올려 5시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 농축시키고 EtOH로 재결정하여 화합물 7c(3.5 g, 71%)를 얻었다. MS [M] = 491

<163> **7-D. 화합물 28의 제조**

<164> 질소 분위기하에서 상기 7-C에서 제조한 화합물 7c(3.5 g, 7.1 mmol)와 상기 7-A에서 제조한 화합물 7a (1 g, 9.2 mmol)를 톨루엔 (80 mL)에 녹인 후, NaOtBu (1.7 g, 17.8 mmol)을 넣고 약 10분간 교반한 후, Pd(dba)₂ (81 mg, 0.14 mmol)과 트리-*t*-부틸포스핀 (0.07 mL, 0.14 mmol)을 넣고, 승온시켜 30분 동안 환류시켰다. 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 28(1.9 g, 91%)을 얻었다. MS [M+H] = 704

<165> **실시예 8 : 화합물 31의 제조**



<166>

<167> **8-A. 화합물 8a의 제조**

<168> 질소 분위기하에서, NaH (3 g, 75 mmol)와 18-크라운-6 (1.43 g, 5.4 mmol)을 THF(100 mL)에 녹이고 벤질 포스 토릭산 디에틸 에스테르(13.5 mL, 65 mmol)를 넣었다. 냉각상태(0°C)에서 4-브로모벤질알데하이드(10 g, 54 mmol)를 천천히 넣었다. 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 반응액에 물을 넣고 에테르로 추출한 후 황산 마그네슘으로 건조하고 감압 증류하였다. 에탄올로 재결정하여 화합물 8a(10 g, 75%)를 얻었다. MS [M] = 295

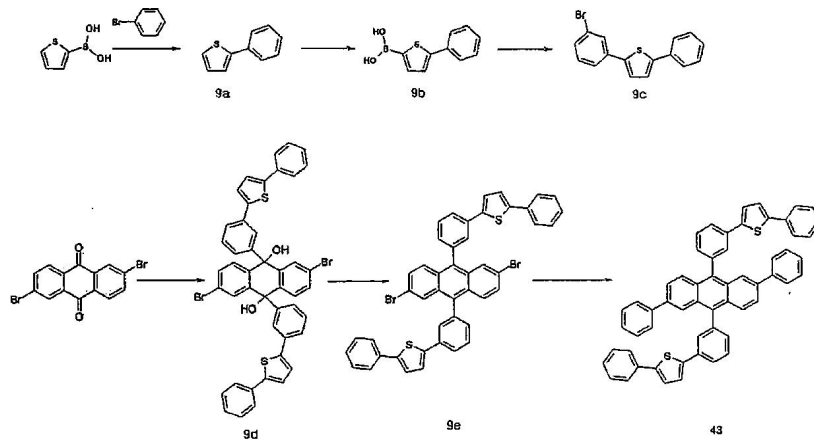
<169> **8-B. 화합물 8b의 제조**

<170> 질소 분위기하에서, 상기 8-A에서 제조한 화합물 8a(5 g, 16.9 mmol)와 p-톨리딘(2.2 g, 20.3 mmol)을 톨루엔 (80 mL)에 녹인 후, NaOtBu (4.8 g, 50.7 mmol)을 넣고 약 10분간 교반한 후, Pd(dba)₂ (0.31 g, 0.34 mmol)과 트리-*t*-부틸포스핀 (0.15 g, 0.5 mmol)을 넣고, 승온시켜 30분 동안 환류시켰다. 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 8b(4.4 g, 92%)를 얻었다. MS [M+H] = 286

<171> **8-C. 화합물 31의 제조**

<172> 질소 분위기하에서, 상기 실시예 7-C에서 제조한 화합물 7c(3.5 g, 7.1 mmol)와 상기 8-B에서 제조한 화합물 8b(2.6 g, 9.2 mmol)를 톨루엔 (80 mL)에 녹인 후, NaOtBu (2.0 g, 21.3 mmol)을 넣고 약 10분간 교반한 후, Pd(dba)₂ (0.13 g, 0.14 mmol)과 트리-*t*-부틸포스핀 (0.07 mL, 0.14 mmol)을 넣고, 승온시켜 30분 동안 환류시켰다. 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감 압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 31(1.9 g, 91%)을 얻었다. MS [M+H] = 696

<173> 실시예 9: 화합물 43의 제조



<174>

<175> 9-A. 화합물 9a의 합성

<176> 화합물 2-싸이오펜 보론산 (10 g, 78.1 mmol)와 브로모 벤젠(7.48 mL, 70.3 mmol)을 무수 THF (300 mL)에 녹인 후, Pd(PPh₃)₄ (4.51 g, 3.91 mmol)과 K₂CO₃ 수용액 (156 mL, 312.4 mmol)을 넣고, 3시간 동안 환류시켰다. 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘으로 수분을 제거하였다. 유기층을 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 흰색 고체 화합물 9a (10g, 80%)을 얻었다. :MS [M+H] 161

<177> 9-B. 화합물 9b의 합성

<178> 상기 9-A에서 제조한 화합물 9a(5g, 31.3 mmol)을 무수 THF (200 mL)에 녹인 후, -10℃까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(15 mL, 37.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반하고 다시 -78℃까지 온도를 내린 후, 보론산트라이메틸에스터(10.5 mL, 93.75 mmol)을 천천히 넣어주고, 12시간 교반하였다. 0℃까지 온도를 내린 후 2N 염산 수용액 (16 mL)을 넣고 교반하여 흰색 침전을 얻었다. 유기층을 THF로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 여과하였다. 이 여과액을 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹인 후, 과량의 수용액을 넣고 디메틸클로로메탄으로 유기층을 분리하였다. 분리된 수용액 층에 염산 수용액을 가하여 침전물을 생성시킨 후 여과하여 화합물 9b (2.7 g, 42%)을 얻었다.

<179> 9-C. 화합물 9c의 합성

<180> 3-브로모요오드벤젠(3.5 g, 12.3 mmol)과 상기 9-B에서 제조한 화합물 9b(2.5 g, 12.3 mmol)을 무수 THF (100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.71 g, 0.61mmol)을 넣고, K₂CO₃ (3.4 g, 24.6 mmol)을 H₂O (50 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 9c (2.9 g, 75%)을 얻었다. MS [M+H]=315

<181> 9-D. 화합물 9d의 제조

<182> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 9-C에서 제조한 화합물 9c (16.7 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 2,6-디틸모아트라퀴논(6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 9d(17 g, 90%)을 얻었다.

<183> 9-E. 화합물 9e의 제조

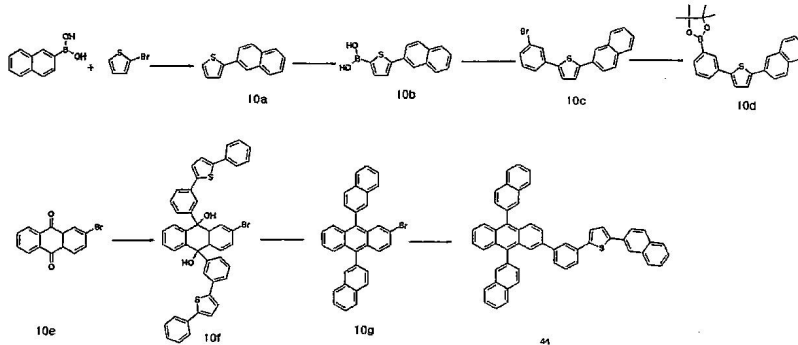
<184> 질소 분위기하에서 상기 9-D에서 제조한 화합물 9d(17 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨 요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 9e (10

g, 64%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 804

<185> **9-F. 화합물 43의 제조**

<186> 질소 분위기하에서 상기 9-E에서 제조한 화합물 9e(10 g, 12.4 mmol)와 페닐 보론산(3.3 g, 27.3 mmol)을 무수 THF (300 mL)에 녹인 후, Pd(PPh₃)₄ (0.7 g, 0.62 mmol)과 K₂CO₃ 수용액 (25 mL, 49.6 mmol)을 넣고, 5시간 동안 환류시켰다. 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘으로 수분을 제거하였다. 유기층을 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 흰색 고체 화합물 43(8g, 82%)을 얻었다. :MS [M+H]⁺ 798

<187> **실시예 10 : 화합물 44의 제조**



<188>

<189> **10-A. 화합물 10a의 합성**

<190> 질소 분위기하에서 2-나프탈렌 보론산 (13.4 g, 78.1 mmol)와 2-브로모 싸이오펜(11.5 g, 70.3 mmol)을 무수 THF (300 mL)에 녹인 후, Pd(PPh₃)₄ (4.06 g, 3.51 mmol)과 K₂CO₃ 수용액 (156 mL, 312.4 mmol)을 넣고, 5시간 동안 환류시켰다. 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘으로 수분을 제거하였다. 유기층을 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후 THF와 에탄올에서 재결정하여 흰색 고체 화합물 10a (12.6g, 85%)을 얻었다. :MS [M+H]⁺ = 210

<191> **10-B. 화합물 10b의 합성**

<192> 상기 10-A에서 제조한 화합물 10a(6.6 g, 31.3 mmol)을 무수 THF (200 mL)에 녹인 후, -10℃까지 온도를 내리고, n-부틸리튬(15 mL, 37.5 mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반하고 다시 -78℃까지 온도를 내린 후, 보론산트라이메틸에스터(10.5 mL, 93.75 mmol)을 천천히 넣어주고, 12시간 교반하였다. 0℃까지 온도를 내린 후 2N 염산 수용액 (16 mL)을 넣고 교반하여 흰색 침전을 얻었다. 유기층을 THF로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조한 후, 감압 여과하였다. 이 여과액을 농축하여 용매를 제거하고 THF에 녹인 후, 과량의 수용액을 넣고 디메틸클로로메탄으로 유기층을 분리하였다. 분리된 수용액층에 염산 수용액을 가하여 침전물을 생성시킨 후 여과하여 화합물 10b (2.7 g, 42%)을 얻었다.

<193> **10-C. 화합물 10c의 합성**

<194> 3-브로모요오드벤젠(3.5 g, 12.3 mmol)과 상기 10-B에서 제조한 화합물 10b(3.0 g, 12.3 mmol)을 무수 THF (100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.71 g, 0.61mmol)을 넣고, K₂CO₃ (3.4 g, 24.6 mmol)을 H₂O (50 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 10c (2.9 g, 75%)을 얻었다. MS [M+H]⁺=365

<195> **10-D. 화합물 10d의 합성**

<196> 질소분위기하에서 상기 10-C에서 제조한 화합물 10c(3.6 g, 9.81 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(2.75 g, 10.9 mmol), 포타슘아세테이트(2.89g, 29.4 mmol), 팔라듐(디페닐포스피노페센)클로라이드(0.24 g, 3 mol%)를 250mL 플라스크에 넣고 디옥산(50 mL)를 가한 후 80℃에서 6시간 동안 환류하였다. 반응 용액을 실온으로 냉각시킨 후, 증류수(50 mL)를 가하고 메틸렌 클로라이드(50 mL×3)로 추출하였다. 감압하에서 메틸렌 클로라이드를 제거하여 옅은 노란색의 고체를 얻었다. 이 옅은 노란색의 고체를 에탄올로 씻어주고 건조하여 화합물 10d(3.84

g, 95%)을 얻었다.

<197> **10-E. 화합물 10e의 합성**

<198> 65℃에서 아세트니트릴(250mL)에 브롬화구리(18 g, 80.0 mmol)과 t-부틸 나이트라이트(12mL, 101 mmol)을 분산시키고 교반한 후 2-아미노 안트라퀴논(15 g, 67.2 mmol)을 5분에 걸쳐 천천히 적가하였다. 기체 발생이 끝나면 반응 용액을 상온으로 냉각하고 반응용액을 20% 염산 수용액(1L)에 가하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 잔류수분을 제거한 후 감압하여 건조하였다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 연한 노란색의 화합물 10e(14.5 g, 75%)을 얻었다.

<199> **10-F. 화합물 10f의 합성**

<200> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 2-브로모나프탈렌(11.0 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 10-E에서 제조한 화합물 10e (6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 10f(11.2 g, 93%)을 얻었다.

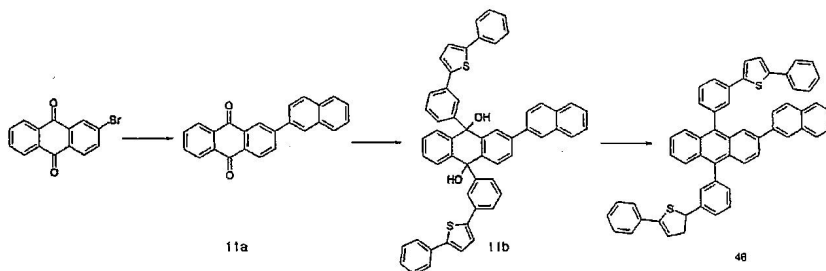
<201> **10-G. 화합물 10g의 합성**

<202> 질소 분위기하에서 상기 10-F에서 제조한 화합물 10f(11.2 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 10g(7.2 g, 64%)를 얻었다. MS [M] = 509

<203> **10-H. 화합물 44의 합성**

<204> 상기 10-G에서 제조한 화합물 10g (1.3 g, 2.6 mmol)와 상기 10-D에서 제조한 화합물 10d (1.28 g, 3.1 mmol)를 무수 THF(70 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.15 g, 0.13 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (20 mL)을 넣어준 후 5시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 44(1.5 g, 83%)을 얻었다. MS [M+H] = 714

<205> **실시예 11: 화합물 46의 제조**



<206> **11-A. 화합물 11a의 합성**

<207> 질소 분위기하에서 상기 10-E에서 제조한 화합물 10e(3.6 g, 12.3 mmol)과 2-나프탈렌 보론산(2.3 g, 13.5 mmol)을 무수 THF (100 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.71 g, 0.61 mmol)을 넣고, K₂CO₃ (3.4 g, 24.6 mmol)을 H₂O (50 mL)에 녹여 넣어준 후 교반하면서 환류시켰다. 3시간 후 소금물로 씻어주고, 유기층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 11a (3.2 g, 78%)을 얻었다. MS [M+H]⁺=334

<209> **11-B. 화합물 11b의 합성**

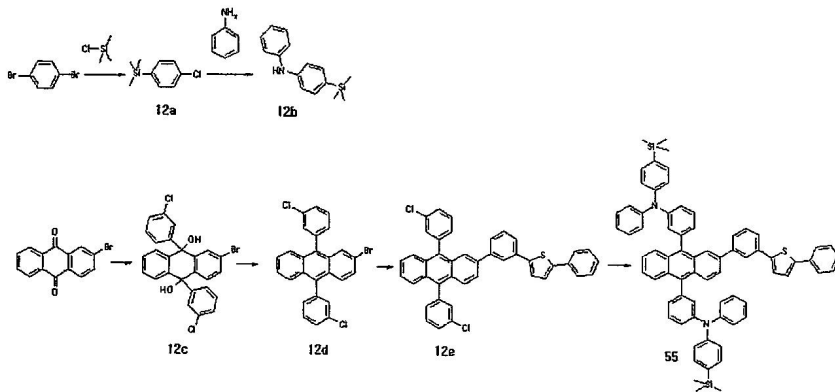
<210> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 상기 9-C에서 제조한 화합물 9c (6.46 g, 17.7 mmol)을 녹이고, -78℃에서 t-부틸리튬(15.6 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 11-A에서 제조한 화합물 11a(2.44 g, 7.3 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화 암모늄 수용액을 가한 후 메틸렌 클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로

로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸 에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 11b(5.1 g, 88%)을 얻었다.

<211> 11-C. 화합물 46의 합성

<212> 질소 분위기하에서 상기 11-B에서 제조한 화합물 11b(4.15 g, 5.13 mmol)을 아세트산 (50 mL)에 분산시킨 후 칼륨요오드(8.5 g, 52.5 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(9.3 g, 105 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 46(2.4 g, 60%)를 얻었다. MS [M+H]⁺ = 788

<213> 실시예 12 : 화합물 55의 제조



<214> 12-A. 화합물 12a의 합성

<215> 디브로모벤젠 (20 g, 84.78 mmol)을 실온에서 질소 분위기 하에 건조 테트라히드로푸란(THF, 200 mL)에 용해시켰다. 상기 용액을 -78°C로 냉각시켰다. n-부틸 리튬(34mL, 2.5 M 펜탄 용액)을 -78°C에서 상기 용액에 서서히 가하고, 혼합물의 온도를 약 1시간동안 0°C로 천천히 올렸다. 여기에 클로로 트리메틸실란(chloro trimethylsilane; 13ml, 101.74mmol)을 넣고 온도를 상온으로 1시간에 걸쳐서 올렸다. 반응이 완결된 것을 확인하고 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 황산 마그네슘 상에서 건조한 다음, 감압 하에 분별 증류하여 화합물 12a(18 g, 93%)를 얻었다. MS (M+) 229

<217> 12-B. 화합물 12b의 합성

<218> 상기 12-A에서 제조한 화합물 12a(15 g, 65.45 mmol), 아닐린 (6.6 ml, 72 mmol), pd(dba)₂ (0.125 g, 0.13 mmol), P(t-Bu)₃ (0.04 g, 0.2. mmol) 및 소듐 t-부톡사이드 (1.80 g, 18.7 mmol)를 톨루엔 (200 mL)에 넣고, 3시간 가량 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액을 THF와 H₂O의 혼합액에 넣었다. 유기층을 증분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼크로마토그래피로 정제한 후 화합물 12b (15 g, 86%)를 얻었다. MS [M] = 143

<219> 12-C. 화합물 12c의 합성

<220> 질소 분위기하에서 건조된 THF(100 mL)에 1-브로모-3-클로로벤젠(10 g, 53.1 mmol)을 녹이고, -78°C에서 t-부틸리튬(46.8 mL, 1.7 M 펜탄 용액)을 천천히 가하고 동일온도에서 1시간 동안 교반 후 상기 실시예 10의 10-E에서 제조한 화합물 10e (6.36 g, 22.0 mmol)을 가하였다. 냉각 용기를 제거한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 얻어진 혼합물을 소량의 에틸에테르로 녹인 후 석유 에테르를 가하여 수시간 동안 교반시켜 고체 화합물을 얻었다. 상기 고체 화합물을 여과한 후 진공 건조하여 화합물 12c(10 g, 90%)을 얻었다.

<221> 12-D. 화합물 12d의 합성

<222> 질소 분위기하에서 상기 12-C에서 제조한 화합물 12c(10 g, 20.5 mmol)을 아세트산 (200 mL)에 분산시킨 후 칼

륨요오드(34g, 210 mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(37 g, 420 mmol)를 가한 후 3시간 동안 끓이면서 교반하였다. 상온에서 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 화합물 12d(7.2 g, 64%)를 얻었다. MS [M] = 477

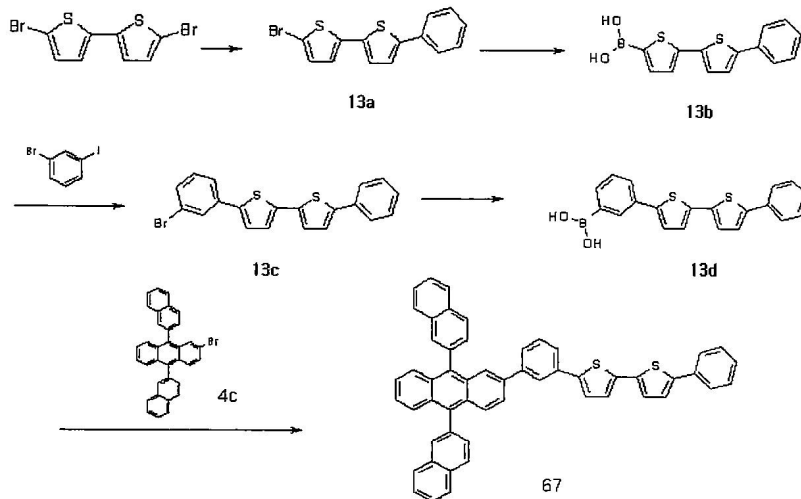
<223> 12-E. 화합물 12e의 합성

<224> 상기 12-D에서 제조한 화합물 12d (1.24 g, 2.6 mmol)와 상기 9-C에서 제조한 화합물 9c (1.28 g, 3.1 mmol)를 무수 THF(70 mL)에 녹이고, Pd(PPh₃)₄ (0.15 g, 0.13 mmol)을 넣고, 2M K₂CO₃ 수용액 (20 mL)을 넣어준 후 5시간 환류 교반하였다. 반응용액의 유기층을 에틸아세테이트로 추출하였다. 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 감압 여과한 후 농축하여 THF와 에탄올로 재결정하여 화합물 12e(1.4 g, 85%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 632

<225> 12-F. 화합물 55의 합성

<226> 질소 분위기 하에서 상기 12-B에서 제조한 화합물 12b(5.4 g, 8.5 mmol), 상기 12-E에서 제조한 화합물 12e(4.9 g, 20.4 mmol), Pd(dba)₂ (0.097 g, 0.17 mmol), P(t-Bu)₃ (0.05 g, 0.255 mmol) 및 소듐 t-부톡사이드 (2.45 g, 25.5 mmol)를 톨루엔 (100 mL)에 넣고, 5시간 가량 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고 반응 혼합액을 THF와 H₂O의 혼합액에 넣었다. 유기층을 증분리하고 MgSO₄로 건조한 후 농축시켰다. 컬럼크로마토그래피로 정제한 후 화합물 55 (7.7 g, 87%)을 얻었다. MS [M+H]⁺ = 1042

<227> 실시예 13 : 화합물 67의 제조



<228> 13-A. 화합물 13a의 합성

<229> 5,5'-디브로모-2,2'-바이티오펜 (15.43 mmol, 5.0 g), 페닐 보론산(phenyl boronic acid)(16.97 mmol, 2.07 g), 2M 칼륨카보네이트(potassium carbonate) 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine) palladium (0))(0.46 mmol, 0.5 g) 및 THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크 (round flask)에 넣고 24시간동안 환류 교반하였다. 반응이 끝난 후에 반응 혼합물은 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻었다. 황산마그네슘(Magnesium sulfate)으로 건조시키고 증발 (evaporation)시켰다. 그리고 조 생성물(crude product)을 컬럼 크로마토그래피(n-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐 에서 건조시켜 화합물 13a (2.8 g, 56.5 %)을 얻었다.

<230> 13-B. 화합물 13b의 합성

<231> 상기 13-A에서 제조한 화합물 13a (6.23 mmol, 2.0 g)을 dry THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78°C 하에서 1.7M 용액인 t-부틸리튬(9.35 mmol, 6.23 ml)을 아주 천천히 넣었다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트(trimethyl borate)(12.46 mmol, 1.4 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸 에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체 (solid)가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과(filtration)한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 13b (1.08 g, 60.6 %)을 얻었다.

<233> 13-C. 화합물 13c의 합성

<234> 1-브로모-3-요오도벤젠(3.77 mmol, 1.06 g), 상기 실시예 13-B에서 제조한 화합물 13b (3.77 mmol, 1.08 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.11 mmol, 0.13 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다(reflux). 반응이 끝난 후에 반응 혼합물(reaction mixture)을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산 마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피(*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 13c(1.2 g, 80 %)을 얻었다.

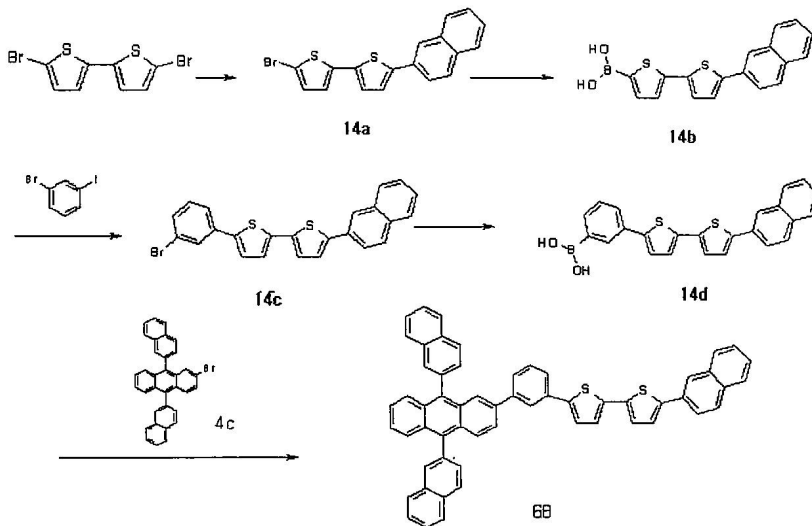
<235> 13-D. 화합물 13d의 합성

<236> 상기 실시예 13-C에서 제조한 화합물 13c (3.01 mmol, 1.2 g)을 무수(dry) THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78 °C 하에서 1.7M 용액인 *t*-부틸리튬(4.5 mmol, 2.65 ml)을 아주 천천히 넣는다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트(trimethyl borate)(6.02 mmol, 7.3 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체(solid)가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 13d (0.76 g, 75 %)을 얻었다.

<237> 13-E. 화합물 67의 합성

<238> 상기 실시예 4 의 4-C에서 합성한 화합물 4c (2.1 mmol, 1.07 g), 상기 실시예 13-d에서 합성한 화합물 13d (2.1 mmol, 0.76 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.06 mmol, 0.07 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류시켰다. 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 67 (1.11 g, 71 %)을 얻었다.

<239> 실시예 14 : 화합물 68의 제조



<240>

<241> 14-A. 화합물 14a의 합성

<242> 5,5'-디브로모-2,2'-바이티오펜 (15.43 mmol, 5.0 g), 2-나프탈렌 보론산(2-naphtalene boronic acid)(16.97 mmol, 2.92 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.46 mmol, 0.5 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다(reflux). 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 14a (4.3 g, 75 %)을 얻었다.

<243> 14-B. 화합물 14b의 합성

<244> 상기 실시예 14-A에서 합성한 화합물 14a (6.23 mmol, 2.3g)을 무수(dry) THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78℃ 하에서 1.7M 용액인 *t*-부틸리튬 (9.35 mmol, 6.23 ml)을 아주 천천히 넣었다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트 (trimethyl borate) (12.46 mmol, 1.4 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸 에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체(solid)가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과(filtration)한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 14b (1.42 g, 68 %)을 얻었다.

<245> **14-C. 화합물 14c의 합성**

<246> 1-브로모-3-요오도벤젠(3.77 mmol, 1.06 g), 상기 실시예 14-B 에서 합성한 화합물 14b (3.77 mmol, 1.27 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.11 mmol, 0.13 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다(reflux). 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어준다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 14c (1.43 g, 85 %)을 얻었다.

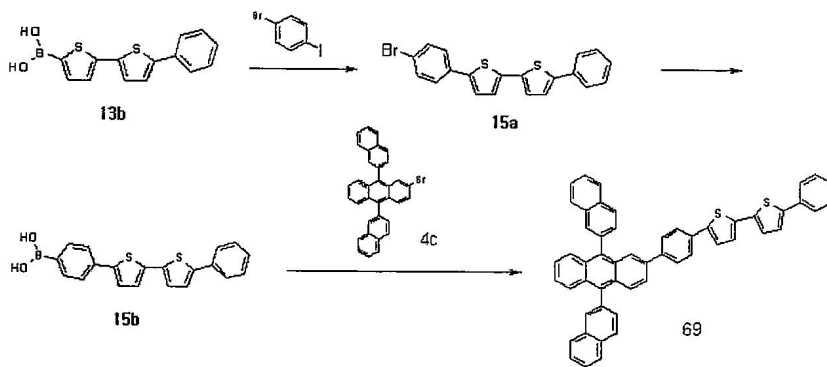
<247> **14-D. 화합물 14d의 합성**

<248> 상기 실시예 14-C 에서 합성한 화합물 14c (3.01 mmol, 1.35 g)을 무수(dry) THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78℃ 하에서 1.7M 용액인 *t*-부틸리튬 (4.5 mmol, 2.65 ml)을 아주 천천히 넣었다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트(trimethyl borate) (6.02 mmol, 7.3 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체(solid)가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 14d (0.98 g, 79 %)을 얻었다.

<249> **14-E. 화합물 68의 합성**

<250> 상기 실시예 4 의 4-C에서 합성한 화합물 4c(2.1 mmol, 1.07 g), 상기 실시예 14-D 에서 합성한 화합물 14d (2.1 mmol, 0.86 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.06 mmol, 0.07 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다(reflux). 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켰다. 생성된 분말(powder)의 수율은 1.26 g (1.58 mmol, 75 %)이었다.

<251> **실시예 15 : 화합물 69의 제조**



<252>

<253> **15-A. 화합물 15a의 합성**

<254> 1-브로모-4-요오도벤젠(3.77 mmol, 1.06 g), 상기 실시예 13의 13-b 에서 합성한 화합물 13b (3.77 mmol, 1.08 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.11 mmol, 0.13 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류시켰다(reflux). 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 15a (1.23 g, 82 %)를 얻었다.

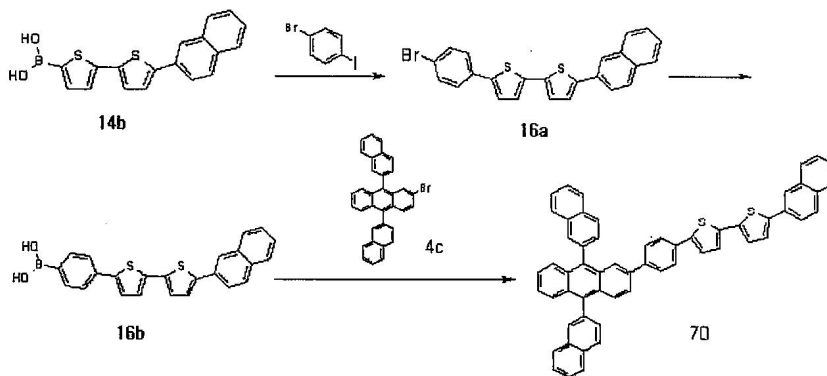
<255> 15-B. 화합물 15b의 합성

<256> 상기 실시예 15-A에서 합성한 화합물 15a (3.01 mmol, 1.2 g)을 무수(dry) THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78 °C 하에서 1.7M 용액인 *t*-부틸리튬 (4.5 mmol, 2.65 ml)을 아주 천천히 넣었다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트 (6.02 mmol, 7.3 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체(solid)가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 15b (0.87 g, 80 %)을 얻었다.

<257> 15-C. 화합물 69의 합성

<258> 상기 실시예 4 의 4-C에서 합성한 화합물 4c (2.1 mmol, 1.07 g), 상기 실시예 15-B 에서 합성한 화합물 15b (2.1 mmol, 0.76 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.06 mmol, 0.07 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류시켰다. 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산 마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 69 (1.23 g, 79 %)을 얻었다.

<259> 실시예 16 : 화합물 70의 제조



<260>

<261> 16-A. 화합물 16a의 합성

<262> 1-브로모-4-요오도벤젠 (3.77 mmol, 1.06 g), 상기 실시예 14의 14-b 에서 합성한 화합물 14b (3.77 mmol, 1.27 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.11 mmol, 0.13 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다. 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어주었다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시킨다. 그리고 조 생성물을 컬럼크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 16a (1.47 g, 87 %)을 얻었다.

<263> 16-B. 화합물 16b의 합성

<264> 상기 실시예 16-A에서 합성한 화합물 16a(3.01 mmol, 1.35 g)을 무수(dry) THF 50 ml에 넣어서 녹이고, -78 °C 하에서 1.7M 용액인 *t*-부틸리튬 (4.5 mmol, 2.65 ml)을 아주 천천히 넣었다. 1시간 후에 트리메틸 보레이트 (6.02 mmol, 7.3 ml)를 넣었다. 30분후에 드라이아이스를 제거하고 상온에서 3시간 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 HCl로 퀀칭(quenching)하고 에틸에테르를 넣어 1시간 가량 교반하였다(stirrer). 그러면 고체가 생성되는데 이것을 pet-ether로 씻어주면서 여과한 후에 진공 오븐에서 건조시켜 화합물 16b (1.01 g, 82 %)을 얻었다.

<265> 16-C. 화합물 70의 합성

<266> 상기 실시예 4 의 4-C에서 합성한 화합물 4c (2.1 mmol, 1.07 g), 상기 실시예 16-b 에서 합성한 화합물 16b (2.1 mmol, 0.86 g), 2M 칼륨 카보네이트 15 ml 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (0.06 mmol, 0.07 g), THF 30 ml를 100 ml 라운드 플라스크에 넣고 24시간동안 환류하였다. 반응이 끝난 후에 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고 클로로포름으로 추출한 후 물로 여러 번 씻어준다. 황산마그네슘으로 건조시키고 증발시켰다. 그리고 조 생성물을 컬럼 크로마토그래피 (*n*-hexane)로 정제하고 증발시킨 후에 진공 오븐에서 건조

시켜 화합물 70 (1.42 g, 85 %)을 얻었다.

실험예 1 내지 4

ITO(인듐주석산화물)가 1000 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판 (corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

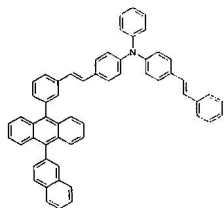
상기 ITO 전극 위에 3,6-비스-2-나프틸페닐아미노-N-[4-(2-나프틸페닐) 아미노 페닐]카바졸 (800 Å), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB) (300 Å, 하기 표 2에 기재된 호스트 물질 (300 Å) 및 9,10-비스-2-나프틸-2-[4-(N-페닐벤조 이미다조일)페닐]안트라센 (300 Å)을 순차적으로 열 진공 증착하여 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 차례로 형성시켰다. 상기 발광층에서 도판트 물질로는 스티릴아민 화합물 (D1) 및 화합물 (D2)을 사용하였다.

상기 전자 수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2000 Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

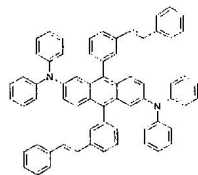
상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4~0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$ torr를 유지하였다.

표 2

실험예 번호	호스트 물질	도판트 물질	도핑농도 (중량%)
1	화합물 5	없음	0
2	화합물 5	D1	8
3	화합물 7	D1	8
4	화합물 14	D2	4



(D1)



(D2)

실험예 1의 경우, 제작된 소자에 6V의 순방향 전계를 가하였을 때, 1700 nit에 해당하는 청색 발광이 관측되었다. 실험예 2 내지 4에서 제작된 소자에 전류를 인가하였을 때, 하기 표 3에 나타난 결과들을 얻었다.

표 3

실험예 번호	호스트 물질	도판트 물질	도핑농도 (중량%)	전압(V)	전류효율 (cd/A)	시감효율 (lm/W)	색좌표(x,y)
2	화합물 5	D1	8	8.2	3.4	1.4	(0.148, 0.133)
3	화합물 7	D1	8	7.9	4.0	1.5	(0.147, 0.120)
4	화합물 14	D2	4	8.0	19.4	7.7	(0.321, 0.631)

발명의 효과

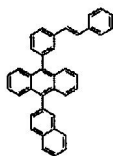
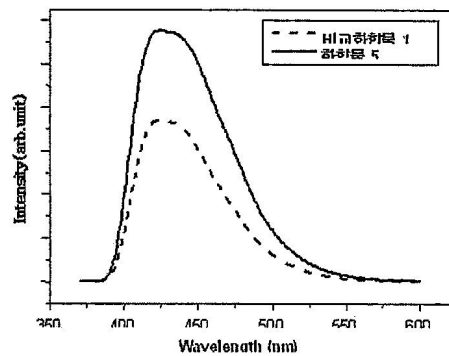
<276> 본 발명의 화합물은 신규한 구조의 안트라센 유도체로서, 유기발광소자에서 단독으로 발광 물질 역할을 할 수 있을 뿐만 아니라, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서 역할을 하거나, 적절한 호스트와 함께 발광 도판트로서 역할을 할 수도 있다.

도면의 간단한 설명

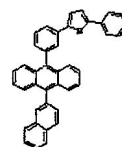
- <1> 도 1은 본 발명에 따른 화합물 5와 비교화합물 1의 용액 (농도 : 1×10^{-5} M, 용매 : 톨루엔)의 광발광 (photoluminescence; PL)을 여기과장 360nm에서 측정된 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- <2> 도 2는 본 발명에 따른 화합물 12의 광발광을 여기과장 434nm에서 측정된 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- <3> 도 3은 본 발명의 하나의 실시 상태에 따른 유기발광소자의 구조를 예시한 도이다.

도면

도면1

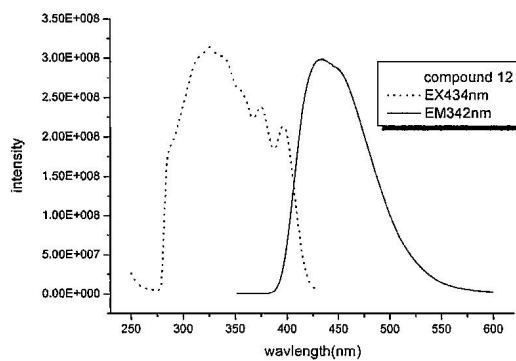


비교화합물 1



화합물 5

도면2



도면3

