



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0043571
(43) 공개일자 2015년04월23일

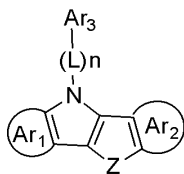
- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 403/04 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2013-0120936
(22) 출원일자 2013년10월11일
심사청구일자 없음
- (71) 출원인
에스에프씨 주식회사
충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89
- (72) 발명자
김수진
강원 춘천시 후석로 270, 1층 (후평동)
박상우
서울 종로구 창신8길 31, (창신동)
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
특허법인충현

전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

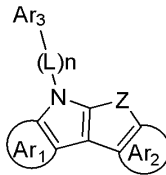
(57) 요약

본 발명은 하기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 이를 채용한 유기전계발광소자는 발광 효율이 우수하면서도 동시에 저전압 구동이 가능하여 향상된 전력효율과 장수명 특성을 갖는다.



[화학식 1-1]

대표도 - 도1



[화학식 1-2]

80
70
60
50
40
30
20
10

(72) 발명자

양병선

전라북도 남원시 주생면 중동리 662번지

오현주

서울 광진구 광나루로44길 6, 201호 (구의동, 트윈
빌라)

유정호

충남 서산시 고북면 고북1로 265,

이세진

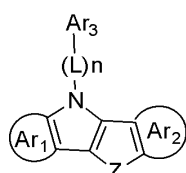
대전 동구 성동로7번길 52-1, (자양동)

명세서

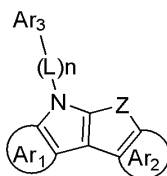
청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



[화학식 1-1]



[화학식 1-2]

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]에서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이고,

상기 Ar₁과 Ar₂는 중 적어도 하나는 방향족 고리 또는 헤테로 방향족 고리가 하나 이상 융합된 탄소수 7 이상의 축합 아릴기 또는 축합 헤테로아릴기이며,

Ar₃는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이고,

L은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 2가의 연결기이며(상기 n은 0 내지 4의 정수임),

Z는 CR₁R₂ 또는 GeR₃R₄이고,

상기 R₁ 내지 R₄는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, -SiR₅R₆R₇ 및 -SiR₈R₉ 중에서 선택되며,

상기 R₅ 내지 R₉는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃, L, R₁ 내지 R₉ 및 이들의 치환기는 각각 인접한 치환기와 연결되어 치환족 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 고리 또는 헤테로 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 Ar₁은 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌 고리이고, 상기 Ar₂는 치환 또는 비치환된 벤젠 고리인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 나프탈렌 고리, 페난트렌 고리 및 벤젠 고리는 각각 독립적으로 적어도 하나 이상의 질소 원자를 함유하는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Ar₃는 적어도 하나 이상의 질소 원자를 함유하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 6

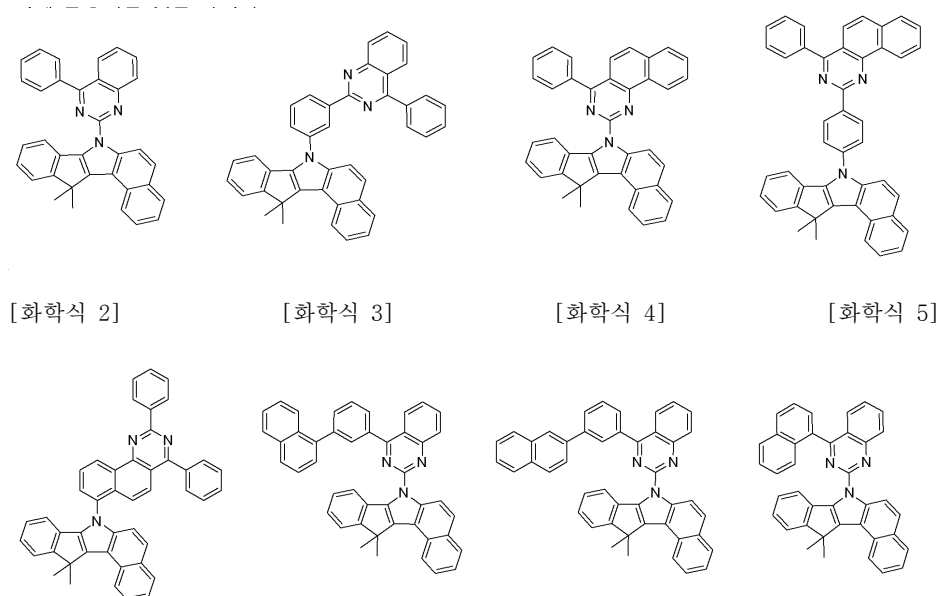
제5항에 있어서,

상기 Ar₃는 치환 또는 비치환된 퀴나졸린, 또는 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸린 고리인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

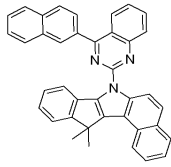
청구항 7

제1항에 있어서,

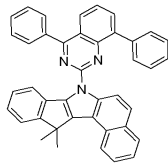
상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]는 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 133]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



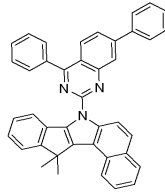
[화학식 6]



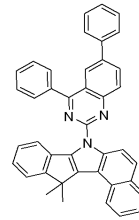
[화학식 7]



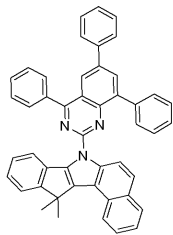
[화학식 8]



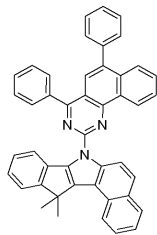
[화학식 9]



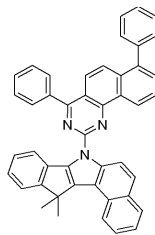
[화학식 10]



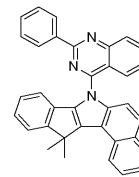
[화학식 11]



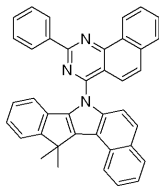
[화학식 12]



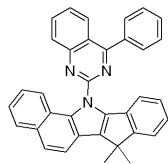
[화학식 13]



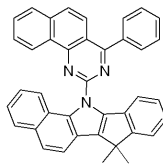
[화학식 14]



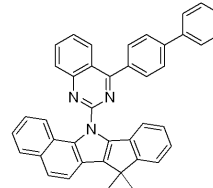
[화학식 15]



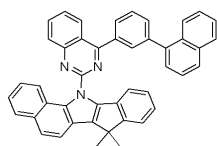
[화학식 16]



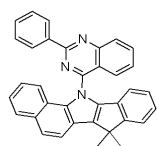
[화학식 17]



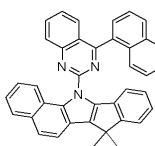
[화학식 18]



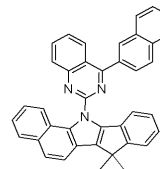
[화학식 19]



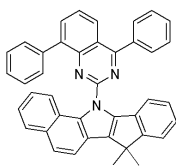
[화학식 20]



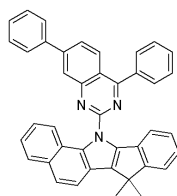
[화학식 21]



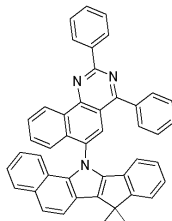
[화학식 22]



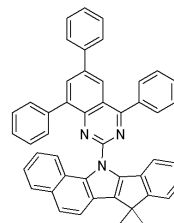
[화학식 23]



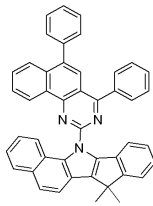
[화학식 24]



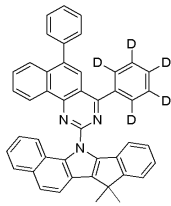
[화학식 25]



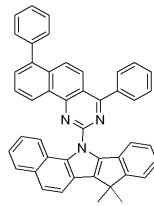
[화학식 26]



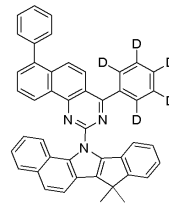
[화학식 27]



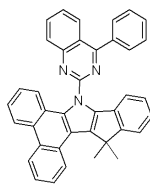
[화학식 28]



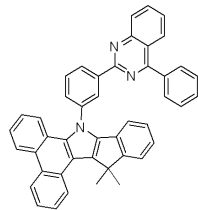
[화학식 29]



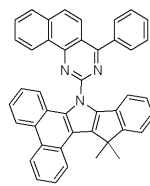
[화학식 30]



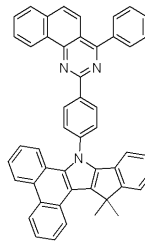
[화학식 31]



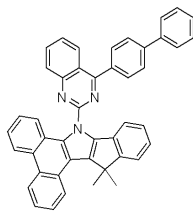
[화학식 32]



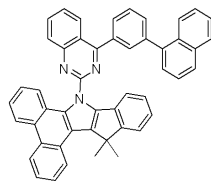
[화학식 33]



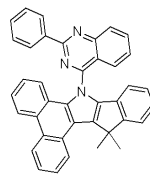
[화학식 34]



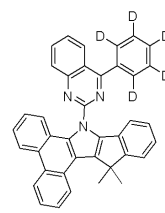
[화학식 35]



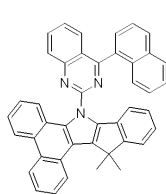
[화학식 36]



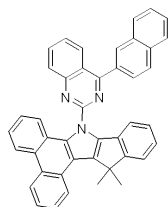
[화학식 37]



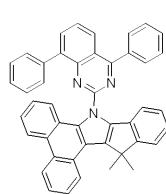
[화학식 38]



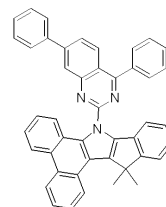
[화학식 39]



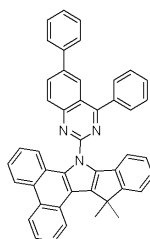
[화학식 40]



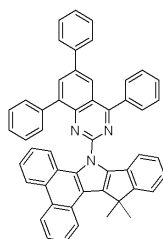
[화학식 41]



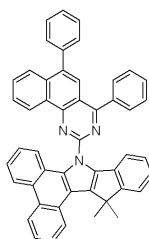
[화학식 42]



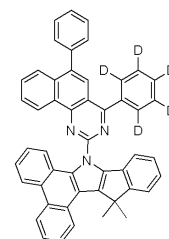
[화학식 43]



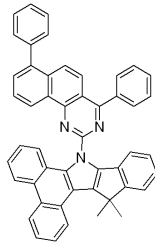
[화학식 44]



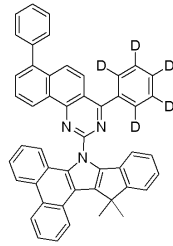
[화학식 45]



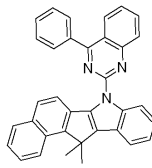
[화학식 46]



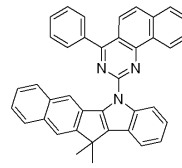
[화학식 47]



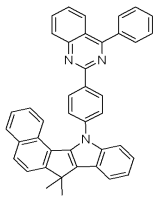
[화학식 48]



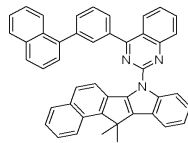
[화학식 49]



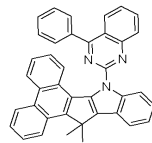
[화학식 50]



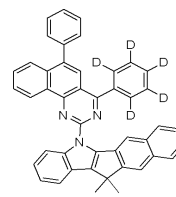
[화학식 51]



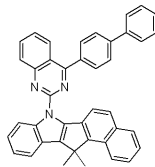
[화학식 52]



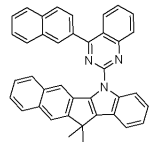
[화학식 53]



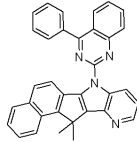
[화학식 54]



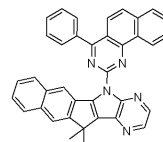
[화학식 55]



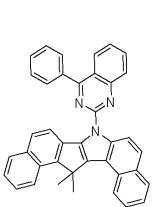
[화학식 56]



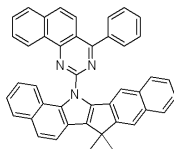
[화학식 57]



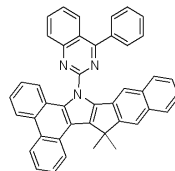
[화학식 58]



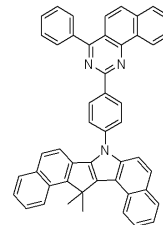
[화학식 59]



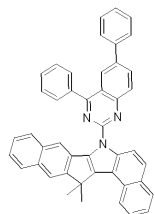
[화학식 60]



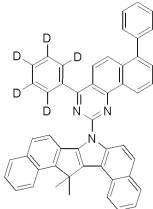
[화학식 61]



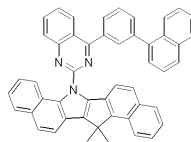
[화학식 62]



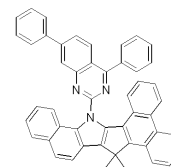
[화학식 63]



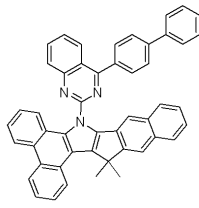
[화학식 64]



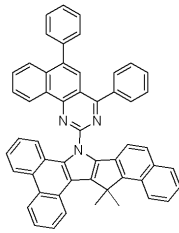
[화학식 65]



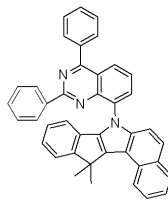
[화학식 66]



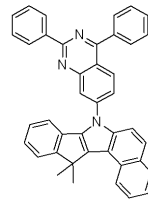
[화학식 67]



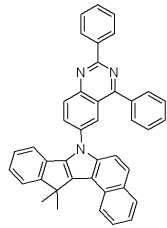
[화학식 68]



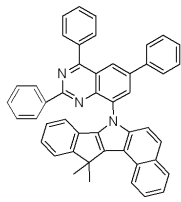
[화학식 69]



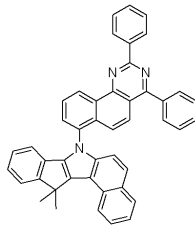
[화학식 70]



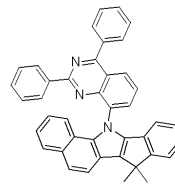
[화학식 71]



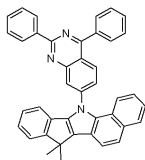
[화학식 72]



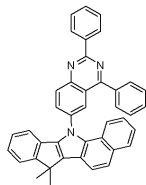
[화학식 73]



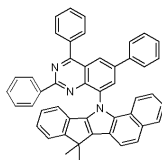
[화학식 74]



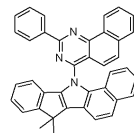
[화학식 75]



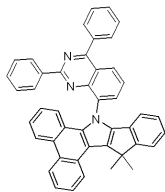
[화학식 76]



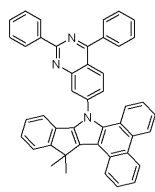
[화학식 77]



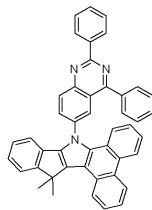
[화학식 78]



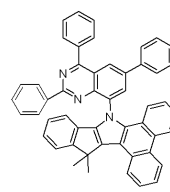
[화학식 79]



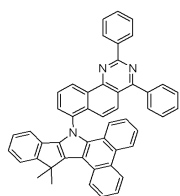
[화학식 80]



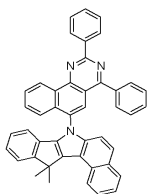
[화학식 81]



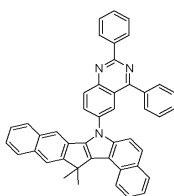
[화학식 82]



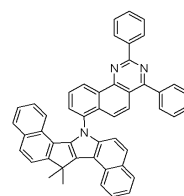
[화학식 83]



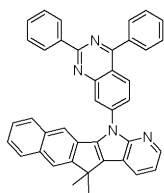
[화학식 84]



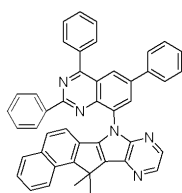
[화학식 85]



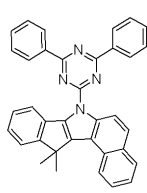
[화학식 86]



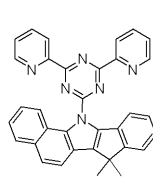
[화학식 87]



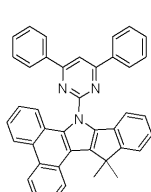
[화학식 88]



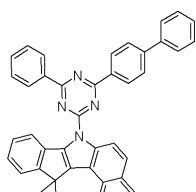
[화학식 89]



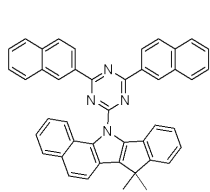
[화학식 90]



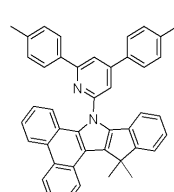
[화학식 91]



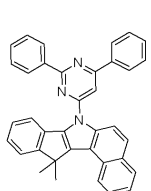
[화학식 92]



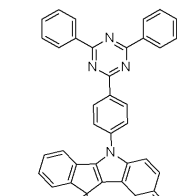
[화학식 93]



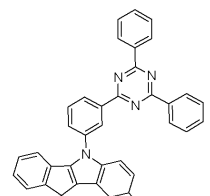
[화학식 94]



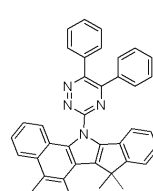
[화학식 95]



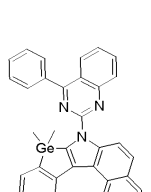
[화학식 96]



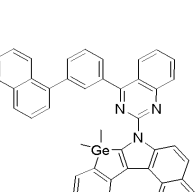
[화학식 97]



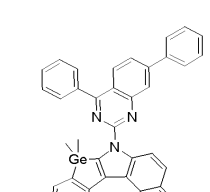
[화학식 98]



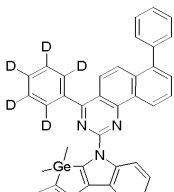
[화학식 99]



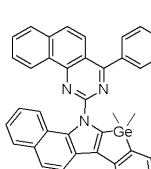
[화학식 100]



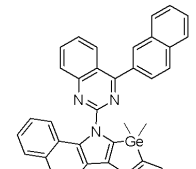
[화학식 101]



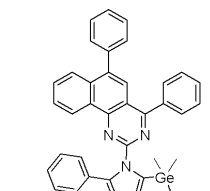
[화학식 102]



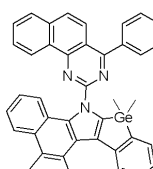
[화학식 103]



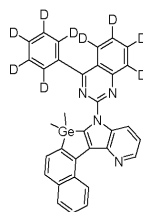
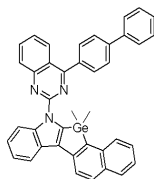
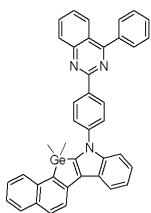
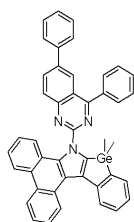
[화학식 104]



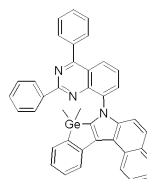
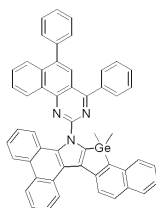
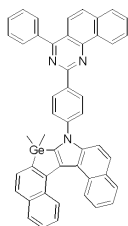
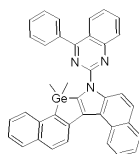
[화학식 105]



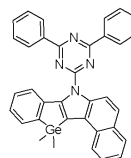
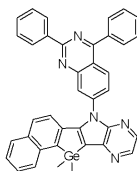
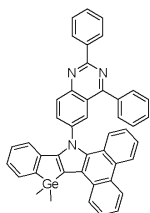
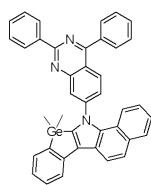
[화학식 106] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109]



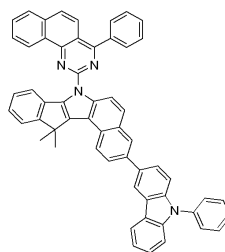
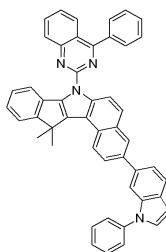
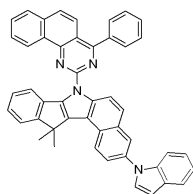
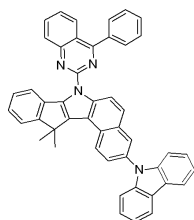
[화학식 110] [화학식 111] [화학식 112] [화학식 113]



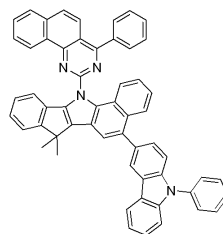
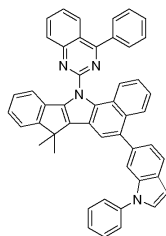
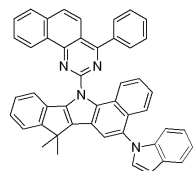
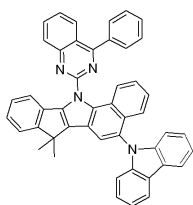
[화학식 114] [화학식 115] [화학식 116] [화학식 117]



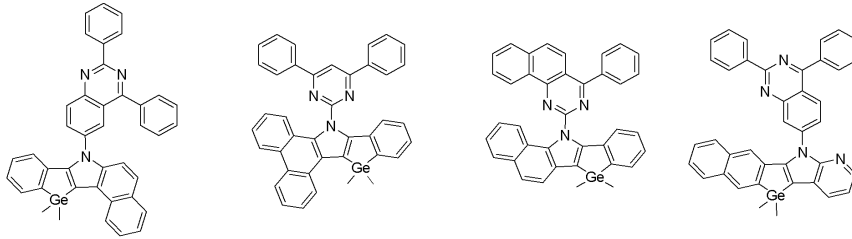
[화학식 118] [화학식 119] [화학식 120] [화학식 121]



[화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



[화학식 126] [화학식 127] [화학식 128] [화학식 129]



[화학식 130] [화학식 131] [화학식 132] [화학식 133]

청구항 8

제1 전극; 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층;으로 이루어지고,
상기 유기층은 제1항에 따른 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택되는 1층 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제8항에 있어서,

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 화합물과 도판트 화합물로 이루어지고, 상기 제1항에 따른 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 유기발광 화합물이 호스트로 사용되며,

상기 발광층은 도판트 화합물을 하나 이상을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 12

제8항에 있어서,

상기 유기층에 적색, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 최근 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기전계발광소자는 평판 표시 소자의 주류인 액정디스플레이에 비해, 시야각, 대조비 등이 우수하고 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하고 소비전력 측면에서도 유리하며 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목받고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하

면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자로서, 플라스틱 같이 휘 수 있는 투명 기관 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널이나 무기전계 발광 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3 가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0004]

유기전계발광소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP(4,4'-N,N'-dicarbazolbiphenyl)가 가장 널리 알려져 있고, 카바졸에 다양한 치환기가 도입된 물질들이 (일본 특허공개 2008-214244, 일본 특허공개 2003-133075) 또는 BALq 유도체를 호스트로 이용한 유기전계발광소자가 공지되어 있다.

[0005]

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

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006]

따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 상기 문제점을 해결하고자 하는 것으로서, 종래 재료보다 발광 효율이 우수하면서도 동시에 향상된 전력효율과 장수명 특성을 갖는 유기발광 화합물을 제공하는 것이다.

[0007]

또한, 본 발명은 상기 유기발광 화합물을 발광 재료로 채용하여 저전압 구동, 고효율 및 장수명의 유기전계발광 소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0008]

본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공한다.



[0009]

[화학식 1-1]

[화학식 1-2]

[0011]

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 각 치환기에 대해서는 후술한다.

[0012]

또한, 상기 유기전계발광소자는 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어져 있으며, 상기 유기층은 상기 유기발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함할 수 있다.

[0013]

또한, 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택되는 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0014]

또한, 상기 유기발광 화합물은 호스트로 사용되고, 상기 유기층은 도펀트 화합물을 하나 이상 더 포함할 수 있다.

[0015]

또한, 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 더 이상 포함하여 백색 발광을 하는 유기전계발광 소자일 수 있다.

발명의 효과

[0016] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 인광 발광 호스트 재료를 채용한 소자에 비하여 보다 낮은 구동 전압이 가능하여 전력효율이 우수함과 동시에 발광 효율 및 장수명을 갖는다.

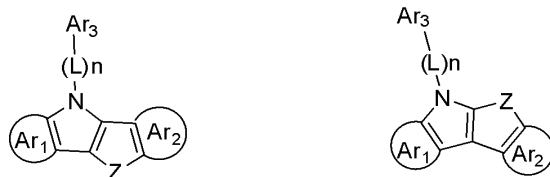
도면의 간단한 설명

[0017] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 다층 구조의 유기전계발광소자를 나타낸 개념도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0019] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학적식 1-1] 내지 [화학적식 1-2]로 표시되는 유기발광 화합물에 관한 것이다.



[0020]

[0021]

[화학적식 1-1] [화학적식 1-2]

[0022]

상기 [화학적식 1-1] 내지 [화학적식 1-2]에서,

[0023]

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0024]

상기 Ar₁과 Ar₂는 중 적어도 하나는 방향족 고리 또는 헤테로 방향족 고리가 하나 이상 융합된 탄소수 7 이상의 축합 아릴기 또는 축합 헤테로아릴기일 수 있다.

[0025]

Ar₃는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0026]

L은 단일결합 또는 2가의 연결기로서 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기일 수 있으며, 상기 n은 0 내지 4의 정수이다.

[0027]

Z는 CR₁R₂ 또는 GeR₃R₄이고, 상기 R₁ 내지 R₄는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, -SiR₅R₆R₇ 및 -SiR₈R₉ 중에서 선택된다.

[0028]

또한, 상기 R₅ 내지 R₉는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택된다.

[0029]

또한, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃, L, R₁ 내지 R₉ 및 이들의 치환기는 각각 인접한 치환기와 연결되어 치환족 고리, 단일 환 또는 다환의 방향족 고리 또는 헤테로 방향족 고리를 형성할 수 있다.

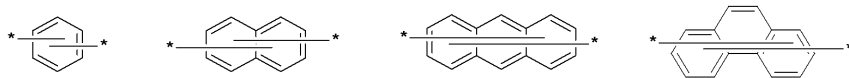
[0030]

또한, 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 알킬닐기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠

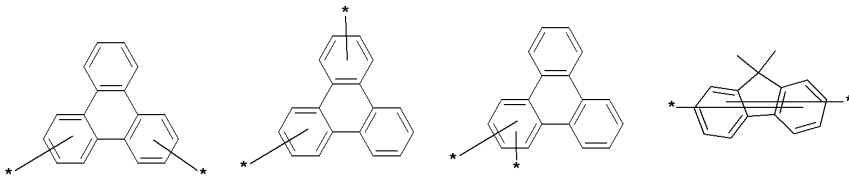
화 알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 탄소수 5 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 탄소수 5 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 1 내지 20의 알킬아민기, 탄소수 6 내지 24의 아릴아민기 등에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환되는 것을 의미하며, 상기 '치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기', '치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기' 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라 위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것을 의미한다.

본 발명의 바람직한 일 구현예에 의하면, 상기 L은 단일결합이거나 하기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A25] 중에서 선택되는 어느 하나의 연결기일 수 있다.

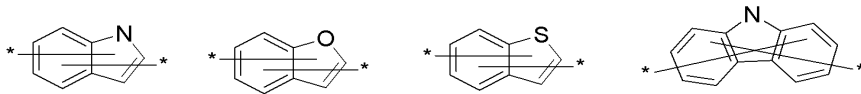
[구조식 A1] [구조식 A2] [구조식 A3] [구조식 A4]



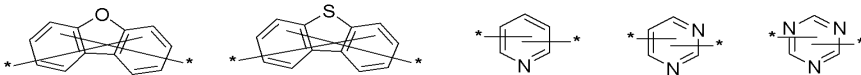
[구조식 A5] [구조식 A6] [구조식 A7] [구조식 A8]



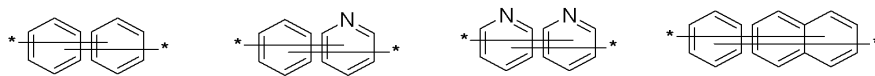
[구조식 A9] [구조식 A10] [구조식 A11] [구조식 A12]



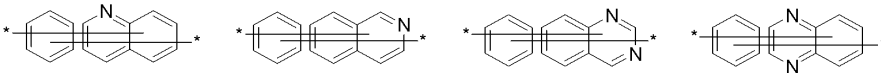
[구조식 A13] [구조식 A14] [구조식 A15] [구조식 A16] [구조식 A17]



[구조식 A18] [구조식 A19] [구조식 A20] [구조식 A21]



[구조식 A22] [구조식 A23] [구조식 A24] [구조식 A25]



상기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A25]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있고, 각 구조식 내의 질소 자리에는 R이 결합될 수 있으며, 상기 R은 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]에서의 R₁ 내지 R₄의 정의와 동일하다.

또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로서, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합 고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.

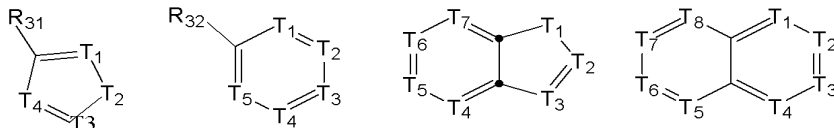
[0046] 한편, 본 발명에서 사용되는 치환기인 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.

[0047] 상기 아릴의 구체적인 예로 페닐기, 2-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 4-메틸페닐기, 4-에틸페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, 4-메틸비페닐기, 4-에틸비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-메틸나프틸기, 2-메틸나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.

[0048] 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 ($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$), R'과 R''은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기 등으로 치환될 수 있다.

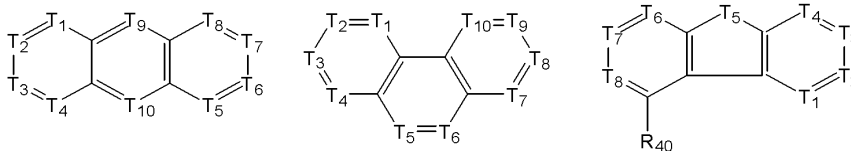
[0049] 본 발명에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0050] [구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]



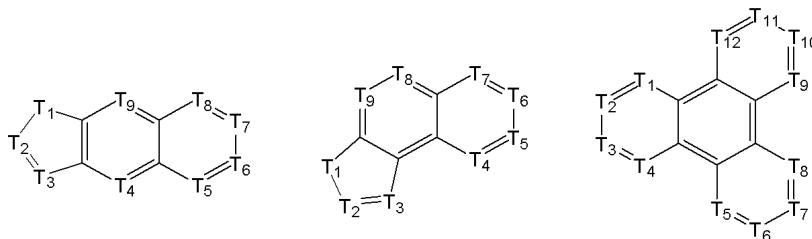
[0051]

[0052] [구조식 5] [구조식 6] [구조식 7]



[0053]

[0054] [구조식 8] [구조식 9] [구조식 10]



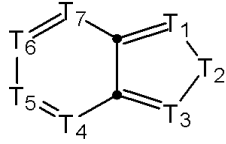
[0055]

[0056] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

[0057] T_1 내지 T_{12} 은 서로 동일하거나 상이하며 각각 독립적으로, $C(R_{41})$, $C(R_{42})(R_{43})$, N, $N(R_{44})$, O 및 S 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, T_1 내지 T_{12} 이 동시에 모두 탄소 원자인 경우는 없으며, 상기 R_{31} 내지 R_{44} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있으며, 상기 각각의 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서 상기 R_{31} 내지 R_{44} 중 하나는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2] 내의 치환기와 단일결합을 이룰 수 있다.

[0058] 또한, 상기 [구조식 3]은 전자의 이동에 따른 공명구조에 의해 하기 [구조식 3-1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0059] [구조식 3-1]



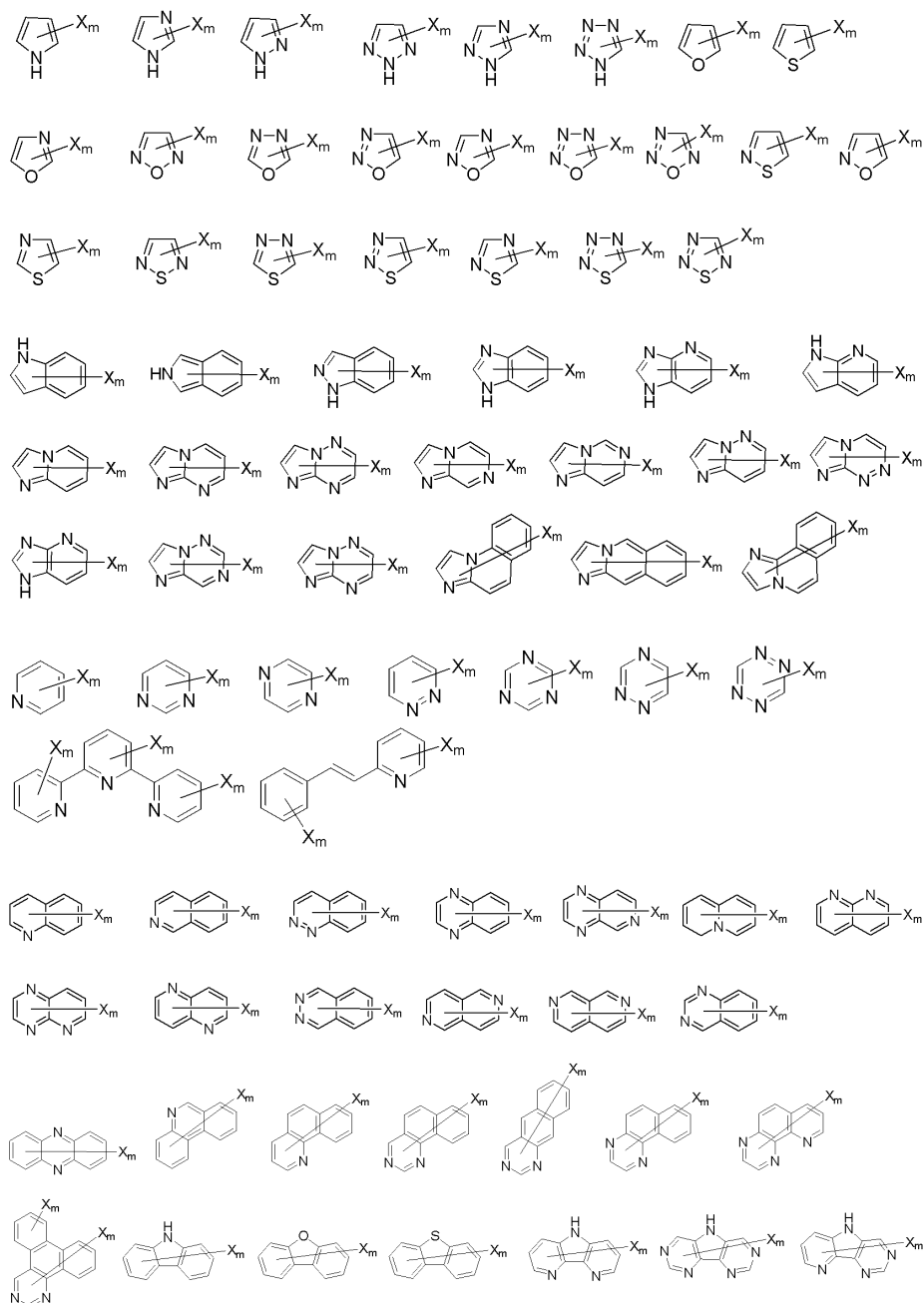
[0060]

[0061] 상기 [구조식 3-1]에서, T₁ 내지 T₇ 는 앞서 정의한 바와 동일하다.

[0062] 또한, 본 발명의 바람직한 실시예에 의하면, 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택될 수 있다.

[0063]

[구조식 11]



[0064]

[0065]

상기 [구조식 11]에서,

[0066]

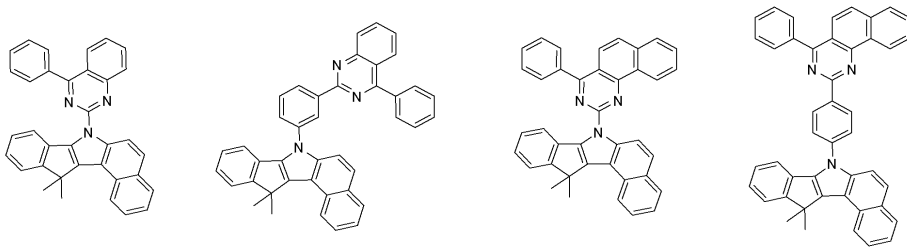
X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 대의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기로 이루어진 군 중에서 선택되는 어느 하나이고, m은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 하나 이상의 X 중 어느 하나는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2] 내의 치

환기와 단일결합을 이룰 수 있다.

[0067] 본 발명의 바람직한 일 구현예에 의하면, 상기 Ar₁은 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌 고리일 수 있으며, 상기 Ar₂는 치환 또는 비치환된 벤젠 고리일 수 있다. 또한, 상기 나프탈렌 고리, 페난트렌 고리 및 벤젠 고리는 각각 독립적으로 적어도 하나 이상의 질소 원자를 더 함유할 수 있다.

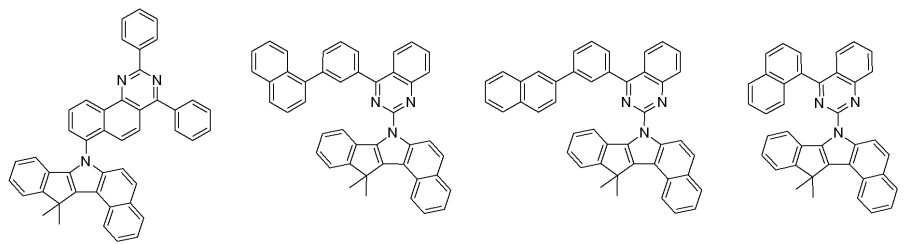
[0068] 본 발명의 바람직한 일 구현예에 의하면, 상기 Ar₃는 적어도 하나 이상의 질소 원자를 함유하는 치환 또는 비치환된 헥테로 고리일 수 있고, 보다 구체적으로는 치환 또는 비치환된 퀴나졸린, 또는 치환 또는 비치환된 벤조 퀴나졸린 고리일 수 있다.

[0069] 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]에 따른 본 발명의 유기발광 화합물은 보다 구체적으로 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 133]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 것일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.



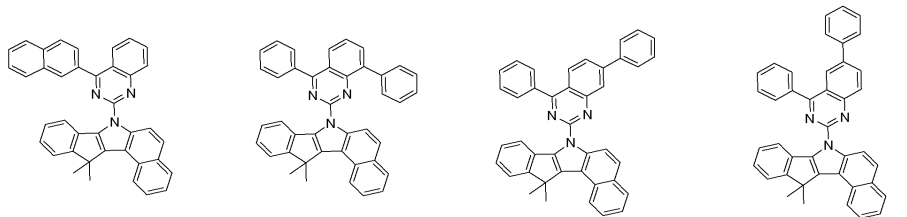
[0070]

[0071] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5]



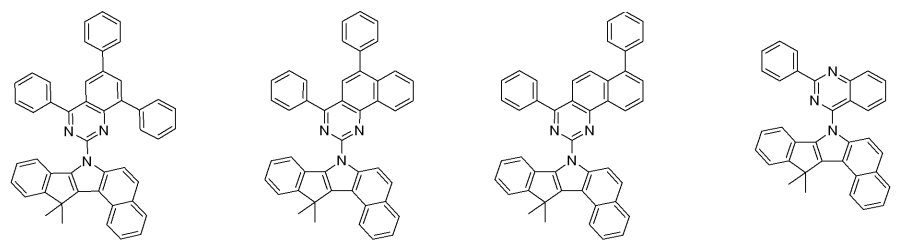
[0072]

[0073] [화학식 6] [화학식 7] [화학식 8] [화학식 9]



[0074]

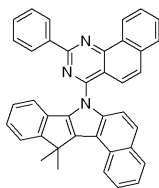
[0075] [화학식 10] [화학식 11] [화학식 12] [화학식 13]



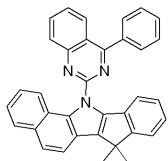
[0076]

[0077]

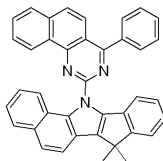
[화학식 14]



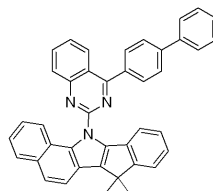
[화학식 15]



[화학식 16]



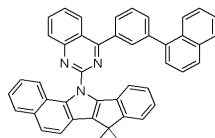
[화학식 17]



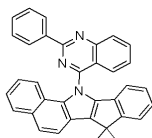
[0078]

[0079]

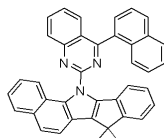
[화학식 18]



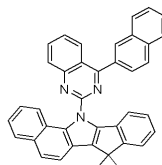
[화학식 19]



[화학식 20]



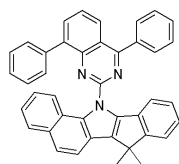
[화학식 21]



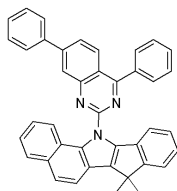
[0080]

[0081]

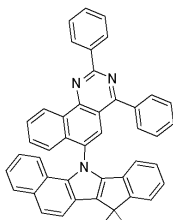
[화학식 22]



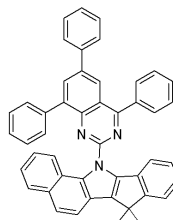
[화학식 23]



[화학식 24]



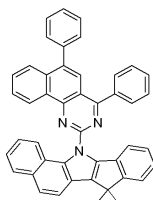
[화학식 25]



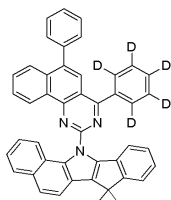
[0082]

[0083]

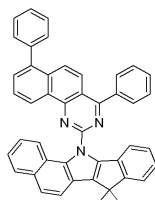
[화학식 26]



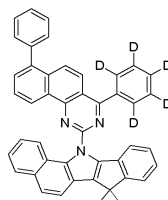
[화학식 27]



[화학식 28]



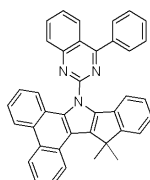
[화학식 29]



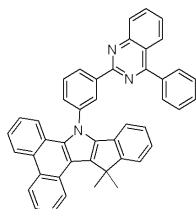
[0084]

[0085]

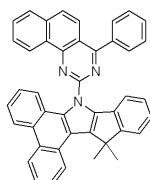
[화학식 30]



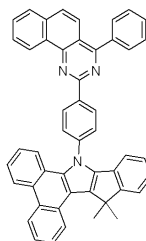
[화학식 31]



[화학식 32]



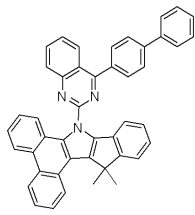
[화학식 33]



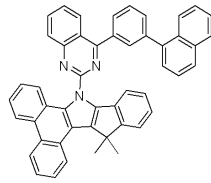
[0086]

[0087]

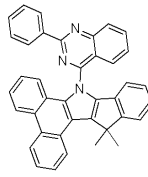
[화학식 34]



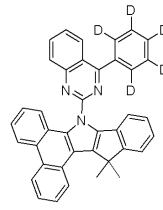
[화학식 35]



[화학식 36]



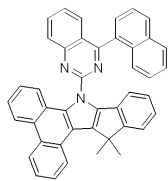
[화학식 37]



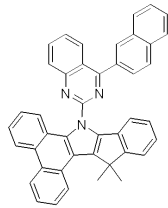
[0088]

[0089]

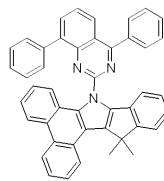
[화학식 38]



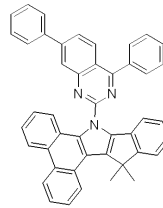
[화학식 39]



[화학식 40]



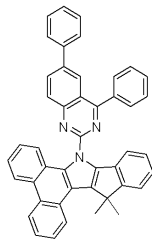
[화학식 41]



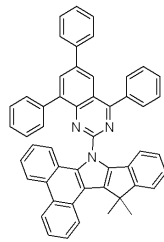
[0090]

[0091]

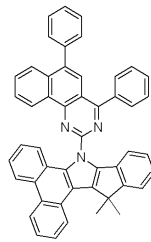
[화학식 42]



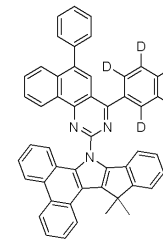
[화학식 43]



[화학식 44]



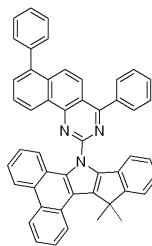
[화학식 45]



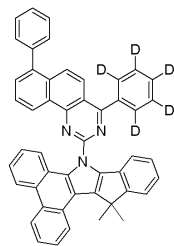
[0092]

[0093]

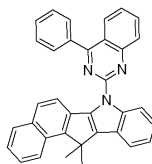
[화학식 46]



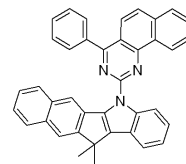
[화학식 47]



[화학식 48]



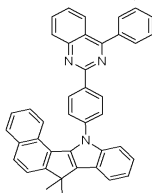
[화학식 49]



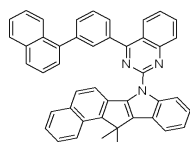
[0094]

[0095]

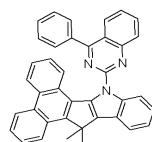
[화학식 50]



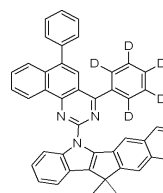
[화학식 51]



[화학식 52]



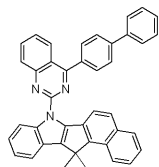
[화학식 53]



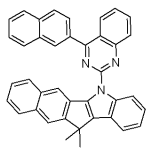
[0096]

[0097]

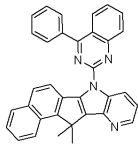
[화학식 54]



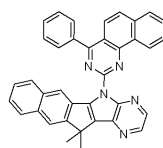
[화학식 55]



[화학식 56]



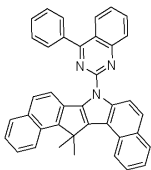
[화학식 57]



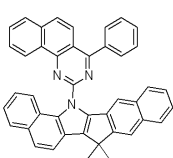
[0098]

[0099]

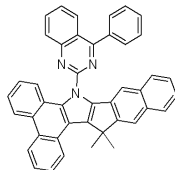
[화학식 58]



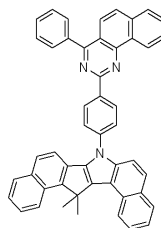
[화학식 59]



[화학식 60]



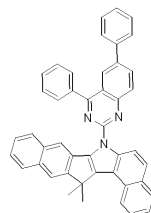
[화학식 61]



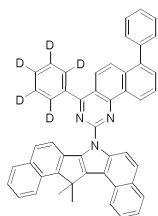
[0100]

[0101]

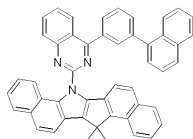
[화학식 62]



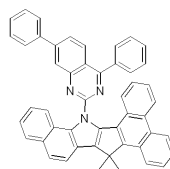
[화학식 63]



[화학식 64]



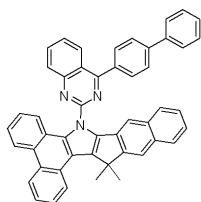
[화학식 65]



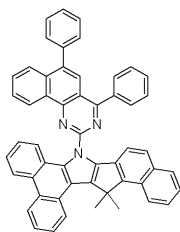
[0102]

[0103]

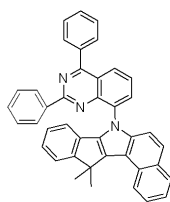
[화학식 66]



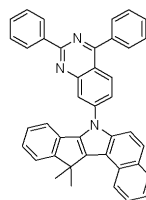
[화학식 67]



[화학식 68]



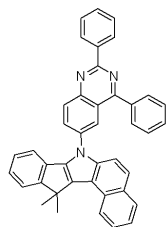
[화학식 69]



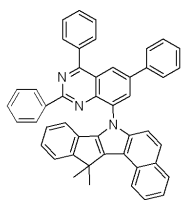
[0104]

[0105]

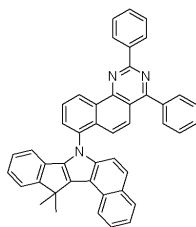
[화학식 70]



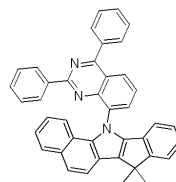
[화학식 71]



[화학식 72]



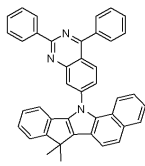
[화학식 73]



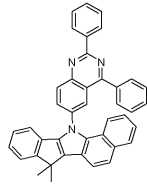
[0106]

[0107]

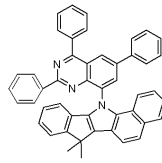
[화학식 74]



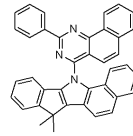
[화학식 75]



[화학식 76]



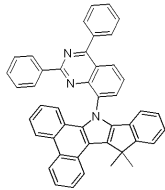
[화학식 77]



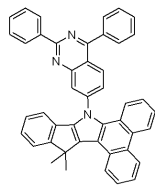
[0108]

[0109]

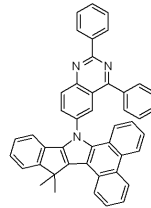
[화학식 78]



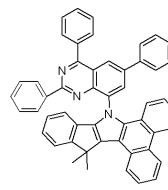
[화학식 79]



[화학식 80]



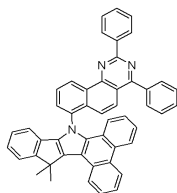
[화학식 81]



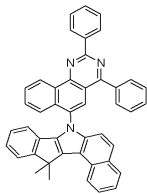
[0110]

[0111]

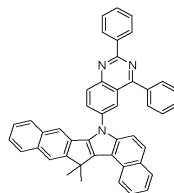
[화학식 82]



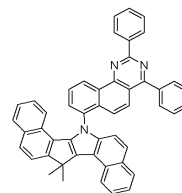
[화학식 83]



[화학식 84]



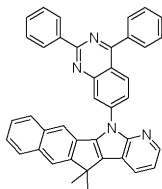
[화학식 85]



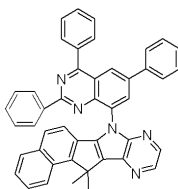
[0112]

[0113]

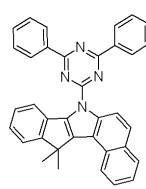
[화학식 86]



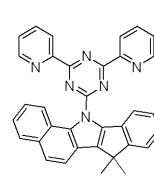
[화학식 87]



[화학식 88]



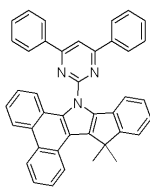
[화학식 89]



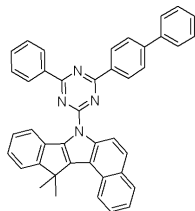
[0114]

[0115]

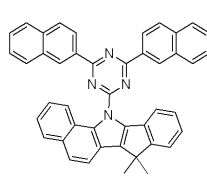
[화학식 90]



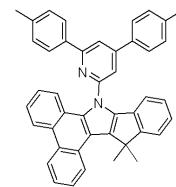
[화학식 91]



[화학식 92]



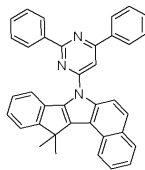
[화학식 93]



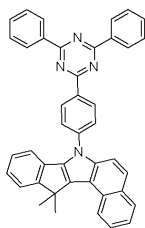
[0116]

[0117]

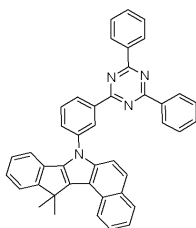
[화학식 94]



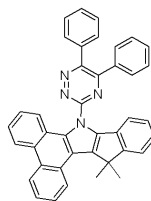
[화학식 95]



[화학식 96]



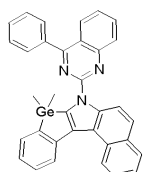
[화학식 97]



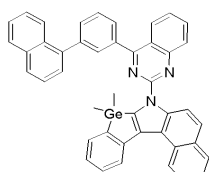
[0118]

[0119]

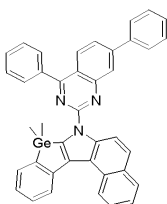
[화학식 98]



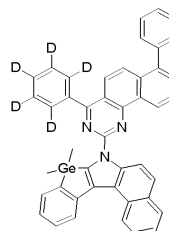
[화학식 99]



[화학식 100]



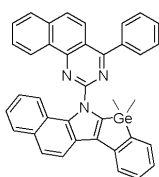
[화학식 101]



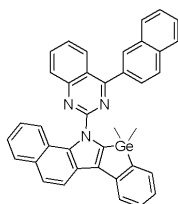
[0120]

[0121]

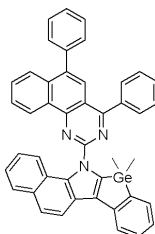
[화학식 102]



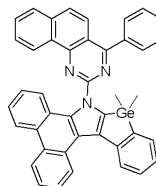
[화학식 103]



[화학식 104]



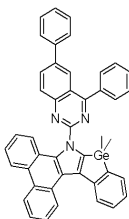
[화학식 105]



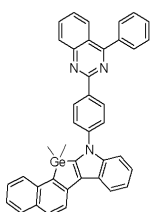
[0122]

[0123]

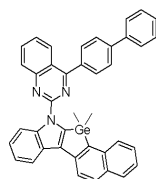
[화학식 106]



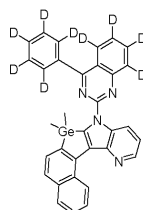
[화학식 107]



[화학식 108]



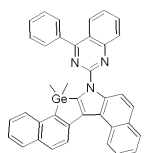
[화학식 109]



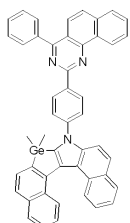
[0124]

[0125]

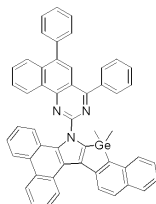
[화학식 110]



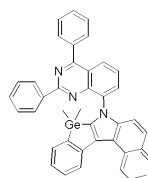
[화학식 111]



[화학식 112]

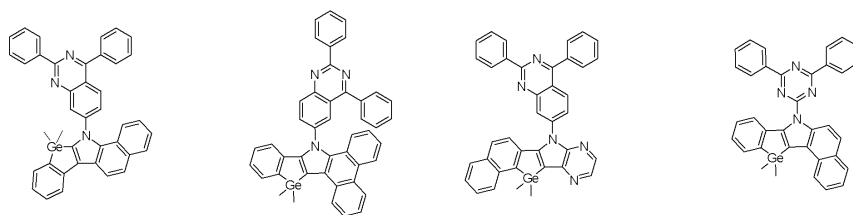


[화학식 113]

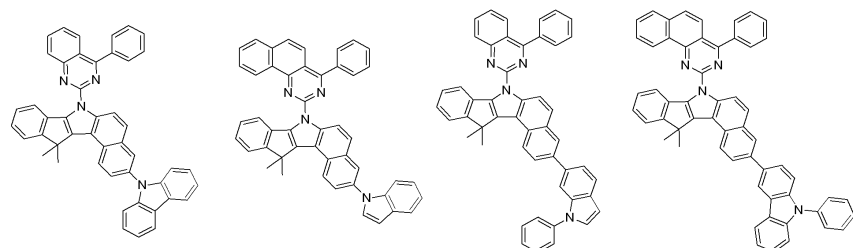


[0126]

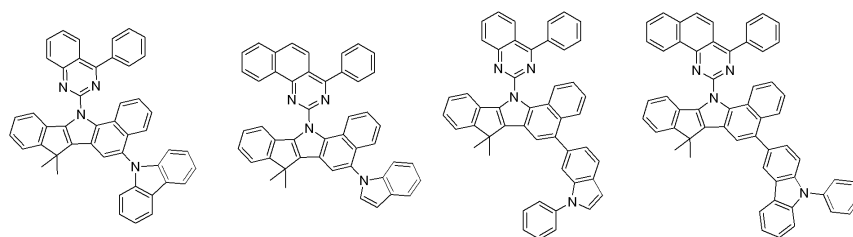
[0127] [화학식 114] [화학식 115] [화학식 116] [화학식 117]



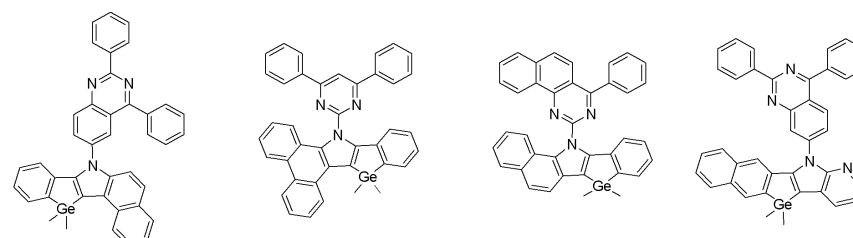
[0128]
[0129] [화학식 118] [화학식 119] [화학식 120] [화학식 121]



[0130]
[0131] [화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



[0132]
[0133] [화학식 126] [화학식 127] [화학식 128] [화학식 129]



[0134]
[0135] [화학식 130] [화학식 131] [화학식 132] [화학식 133]

[0136] 또한, 본 발명의 다른 일 측면은 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어진 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기층에 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 최소한 1 개 이상 포함할 수 있다.

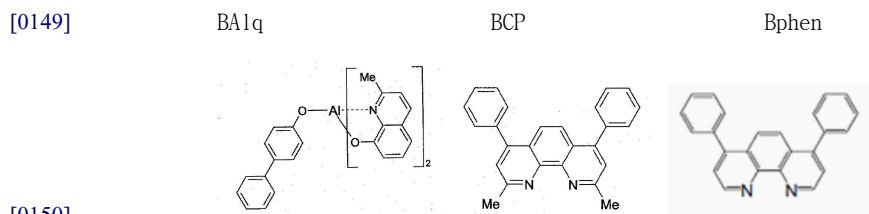
[0137] 또한, 상기 본 발명의 유기발광 화합물이 포함된 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0138] 이때, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함할 수 있으며, 상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 본 발명의 유기발광 화합물은 호스트로서 사용될 수 있다.

[0139] 한편, 본 발명에서 상기 발광층에는 호스트와 더불어 도판트 재료가 사용될 수 있다. 상기 발광층이 호스트 및 도판트를 포함할 경우, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20

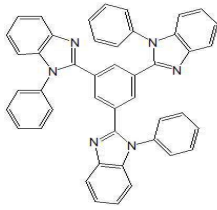
중량부의 범위에서 선택될 수 있다.

- [0140] 이하, 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 일 실시예를 하기 도 1을 통해 보다 상세히 설명하고자 한다.
- [0141] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도로서, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)을 포함하며, 필요에 따라 정공주입층(30)과 전자주입층(70)을 더 포함할 수 있으며, 그 이외에도 1층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하며, 정공저지층 또는 전자저지층을 더 형성시킬 수도 있으며, 소자의 특성에 따라 다양한 기능을 갖는 유기층을 더 포함할 수 있다.
- [0142] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다.
- [0143] 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기전계발광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.
- [0144] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착 또는 스핀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.
- [0145] 상기 정공주입층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것이라면, 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 구체적인 예시로서, 2-TNATA[4,4',4"-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다.
- [0146] 또한, 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것이라면, 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘(α -NPD) 등을 사용할 수 있다.
- [0147] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BA1q, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.
- [0148] 상기 정공저지층에 사용되는 물질로서, BA1q, BCP, Bphen, TPBI, NTAZ, BeBq₂, OXD-7, Liq 및 [화학식 301] 내지 [화학식 307] 중에서 선택되는 어느 하나가 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

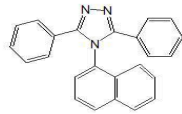


[0151]

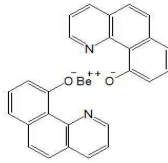
TPBI



NTAZ



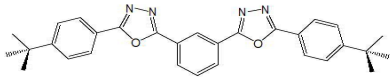
BeBq₂



[0152]

[0153]

OXD-7



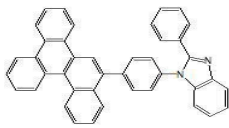
Liq



[0154]

[0155]

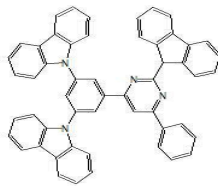
[화학식 301]



[화학식 302]



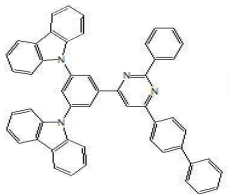
[화학식 303]



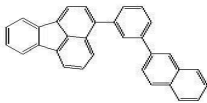
[0156]

[0157]

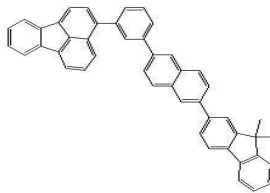
[화학식 304]



[화학식 305]



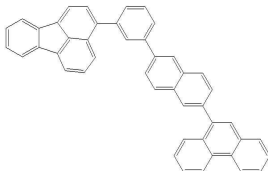
[화학식 306]



[0158]

[0159]

[화학식 307]



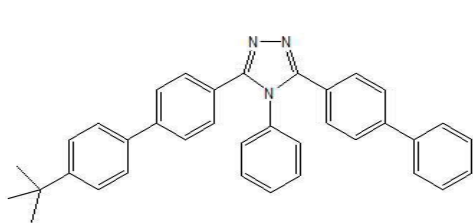
[0160]

[0161]

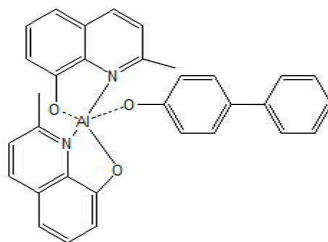
이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

[0162]

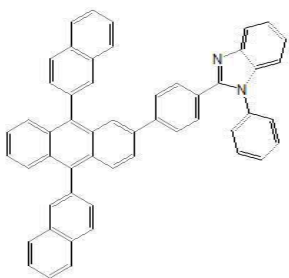
상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀸올린 유도체, 특히 트리스(8-퀸올리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: BeBq2), ADN, [화학식 401], [화학식 402], 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있다.



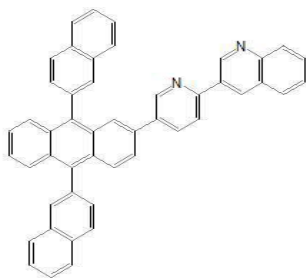
TAZ



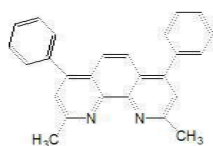
BAlq



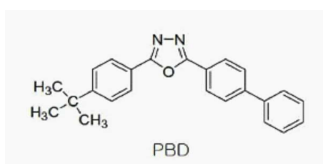
[화합물 401]



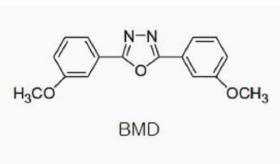
[화합물 402]



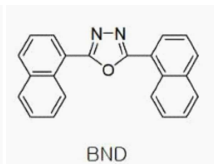
BCP



PBD



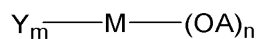
BMD



BND

또한, 본 발명에서 사용되는 전자 수송층은 하기 [화합식 C]로 표시되는 유기 금속 화합물이 단독 또는 상기 전자수송층 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[화합식 C]



상기 [화합식 C]에서,

Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 킬레이트된 리간드이다. M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이다.

OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서, 상기 O는 산소이며, 상기 A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

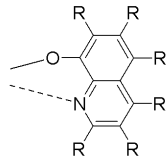
또한, 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=0$ 이고, 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=1$ 이거나, 또는 $m=2$, $n=0$ 이고, 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 $m=1$ 내지 3중 어느 하나이며, n 은 0 내지 2 중 어느 하나로서 $m+n=3$ 을 만족한다.

상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

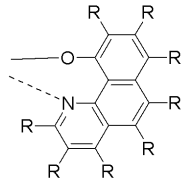
또한, 상기 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]부터 선택되는

어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

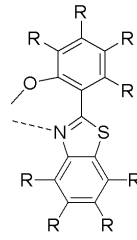
[구조식 C1]



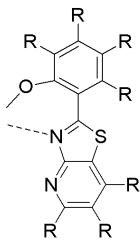
[구조식 C2]



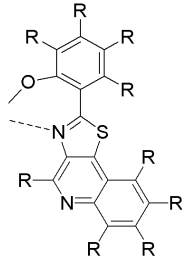
[구조식 C3]



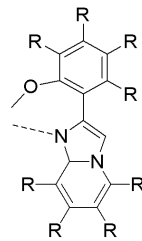
[구조식 C4]



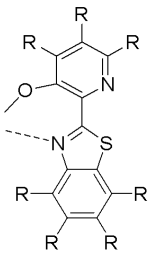
[구조식 C5]



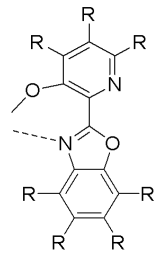
[구조식 C6]



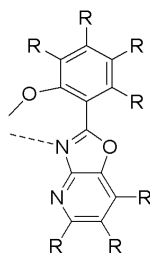
[구조식 C7]



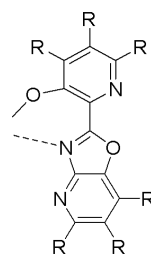
[구조식 C8]



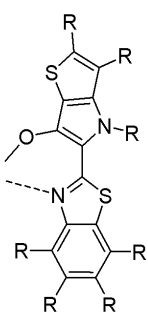
[구조식 C9]



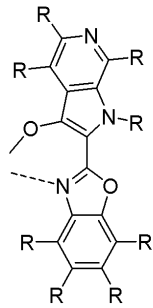
[구조식 C10]



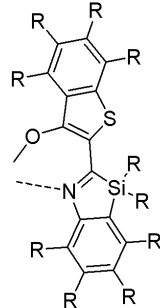
[구조식 C11]



[구조식 C12]

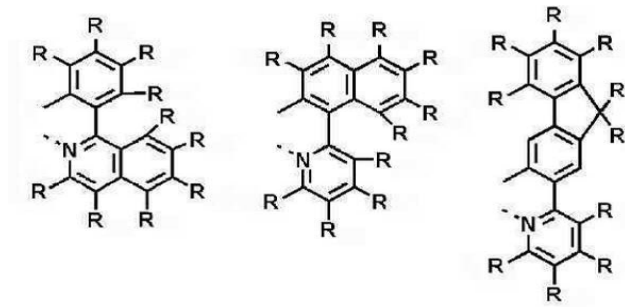


[구조식 C13]



[0185]

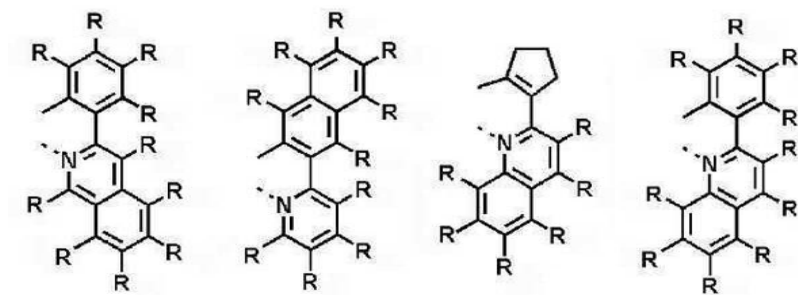
[구조식 C14] [구조식 C15] [구조식 C16]



[0186]

[0187]

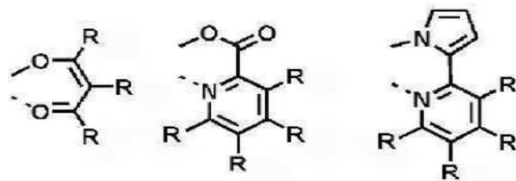
[구조식 C17] [구조식 C18] [구조식 C19] [구조식 C20]



[0188]

[0189]

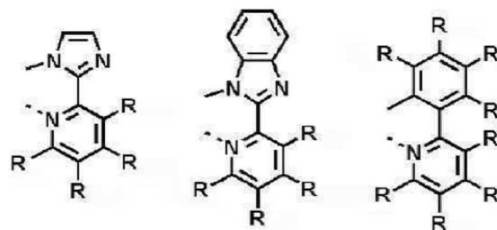
[구조식 C21] [구조식 C22] [구조식 C23]



[0190]

[0191]

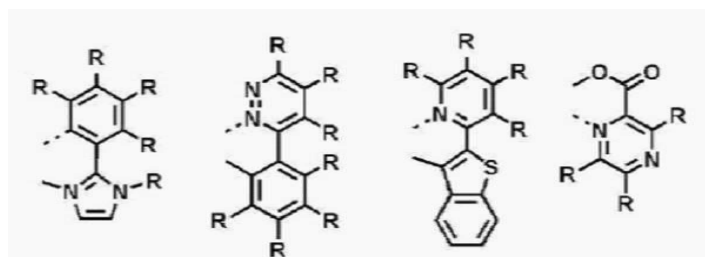
[구조식 C24] [구조식 C25] [구조식 C26]



[0192]

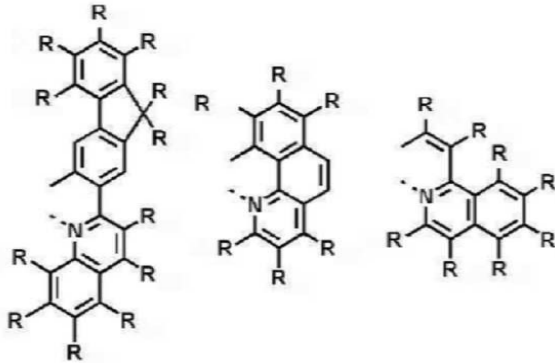
[0193]

[구조식 C27] [구조식 C28] [구조식 C29] [구조식 C30]



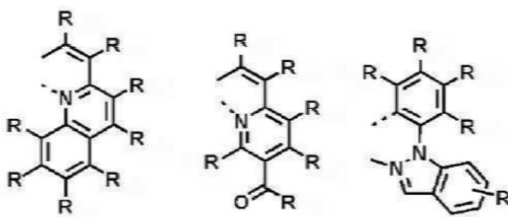
[0194]

[0195] [구조식 C31] [구조식 C32] [구조식 C33]



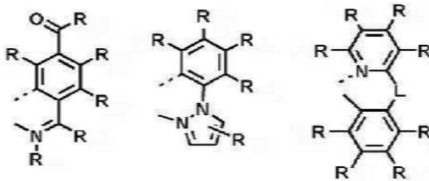
[0196]

[0197] [구조식 C34] [구조식 C35] [구조식 C36]



[0198]

[0199] [구조식 C37] [구조식 C38] [구조식 C39]



[0200]

[0201] 상기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]에서,

[0202] R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0203] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알킬기 중에서 선택되고, 상기 L은 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환되며, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0204] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 유기층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 하나 이상의 유기발광 화합물 이외에 하나 이상의 인광 도펀트를 더 포함하는 것을 특징으로 하며, 본 발명의 유기전계발광소자에 적용되는 발광 도펀트는 특별히 제한되지는 않으나, 하기 [일반식 A-1] 내지 [일반식 J-1]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상의 화합물일 수 있다.

[일반식 A-1]

[0206]

$$ML_1L_2L_3$$

[0207]

상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L₁, L₂ 및 L₃은 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 *은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

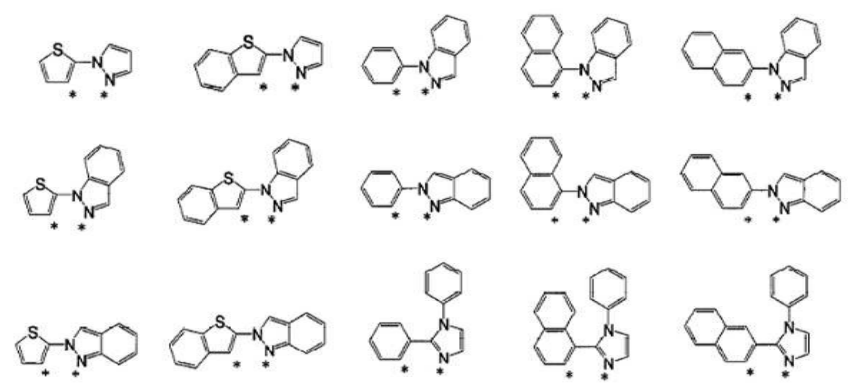
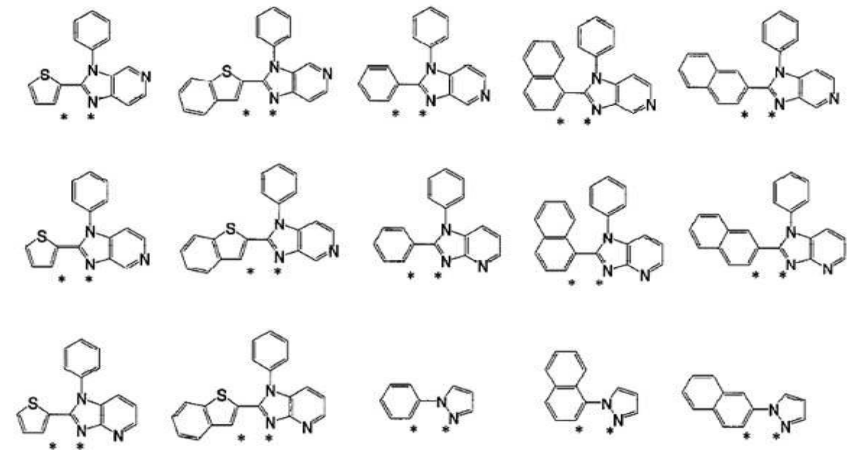
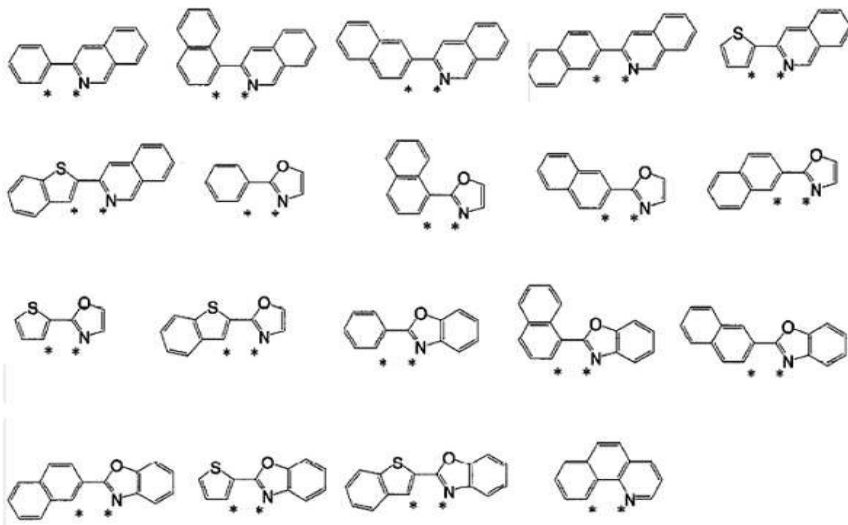
[0208]

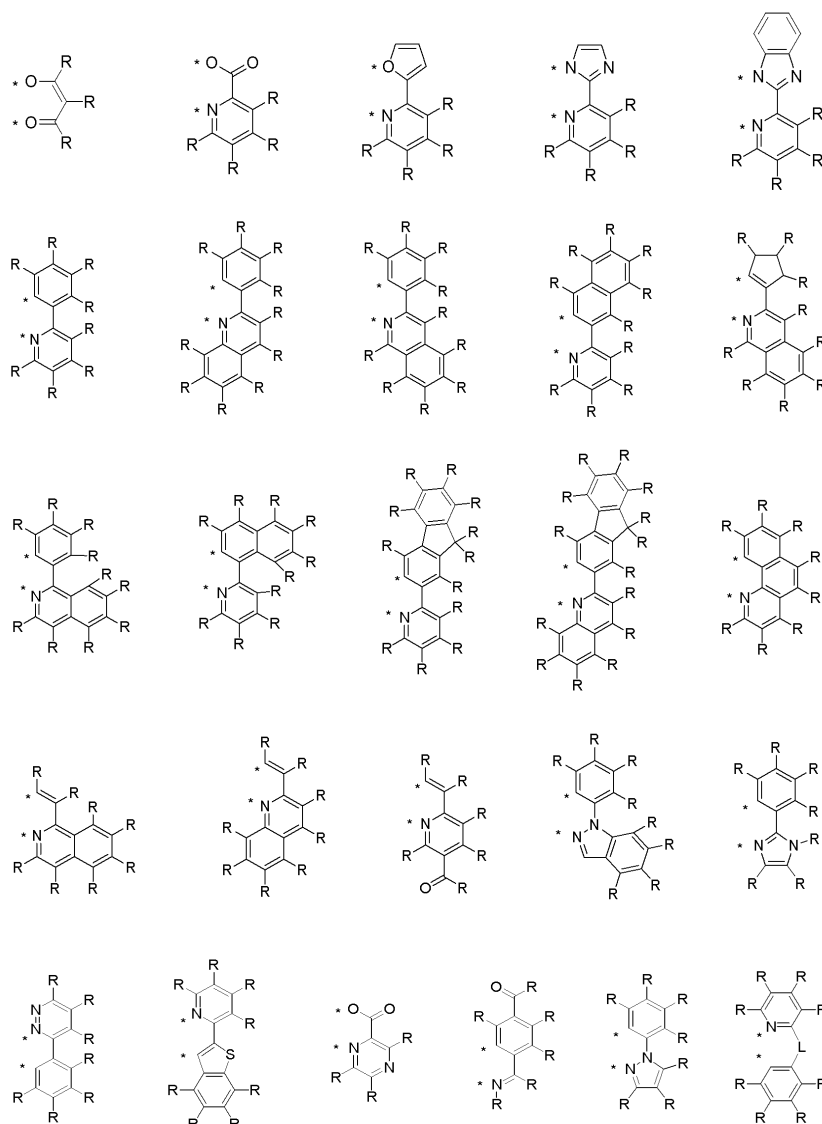
[구조식 D]



[0210]

[0211]





[0217]

[0218]

[0219]

[0220]

상기 [구조식 D]에서,

상기 R은 서로 상이하거나 동일하며 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0221]

상기 R은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0222]

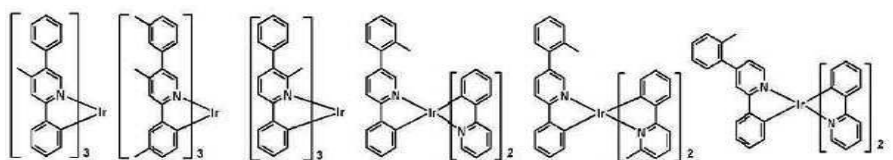
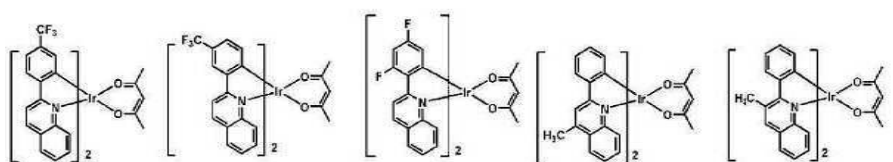
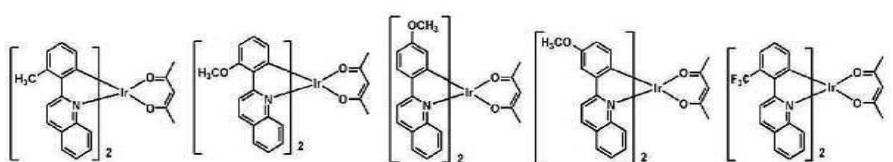
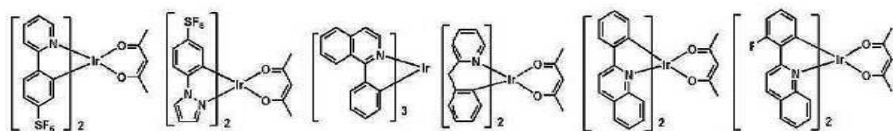
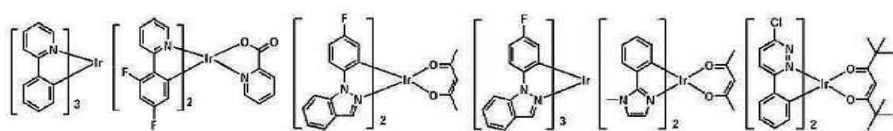
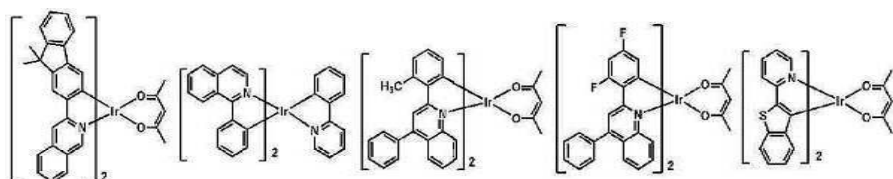
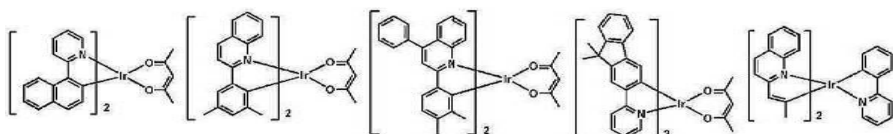
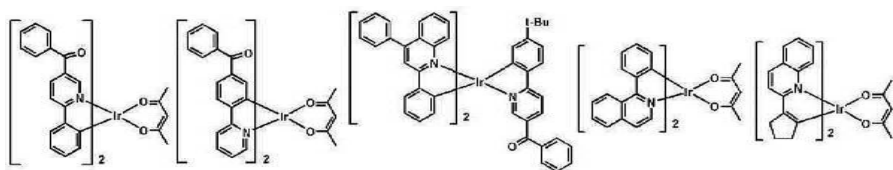
또한, 상기 R은 각각의 인접한 치환기와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

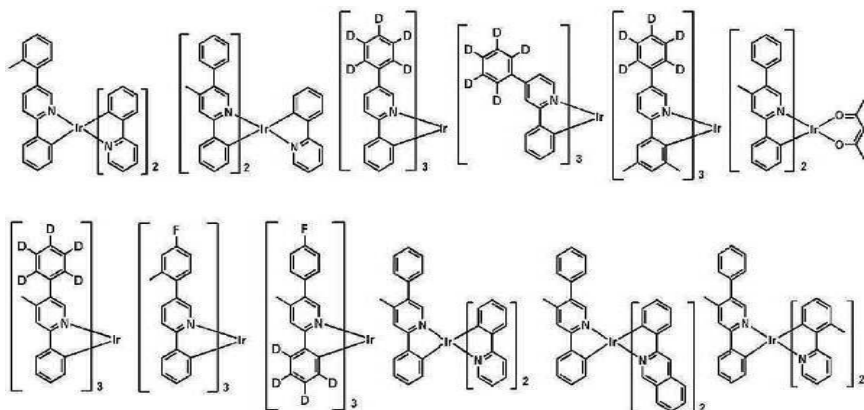
[0223]

상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

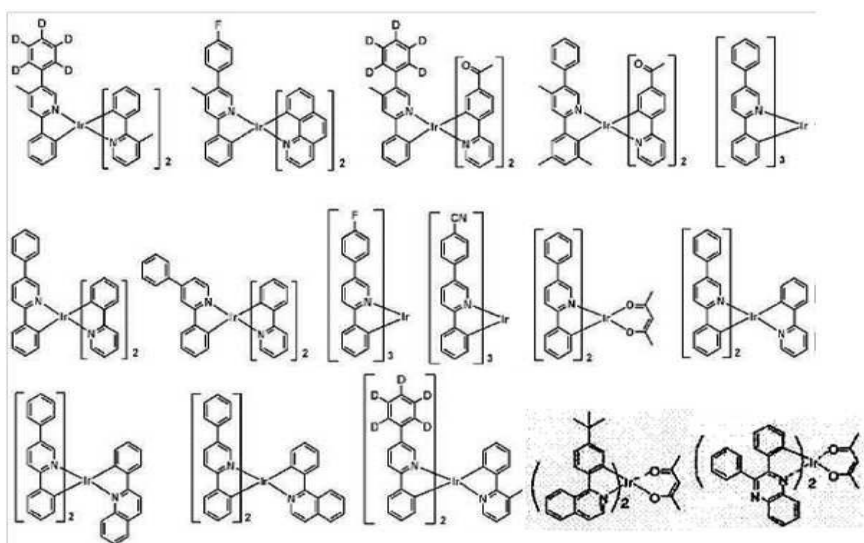
[0224]

구체적인 일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도펀트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

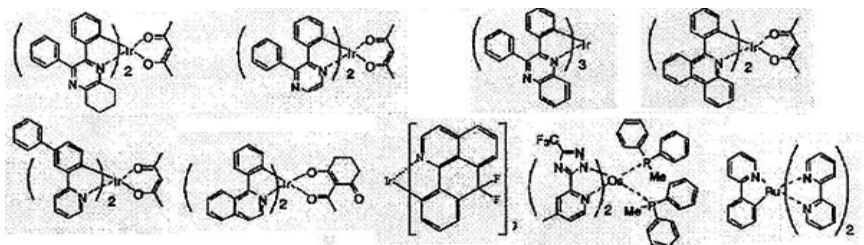




[0228]



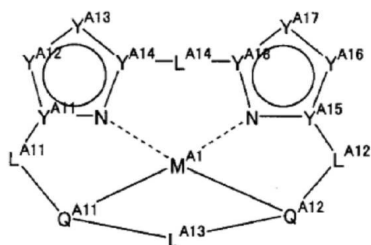
[0229]



[0230]

[0231]

[일반식 B-1]



[0232]

[0233]

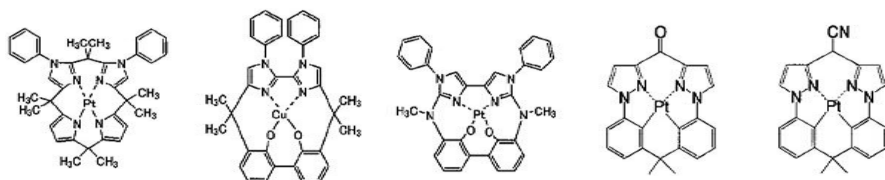
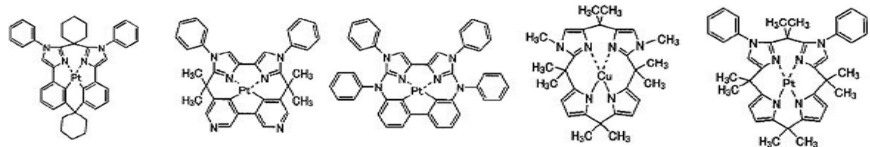
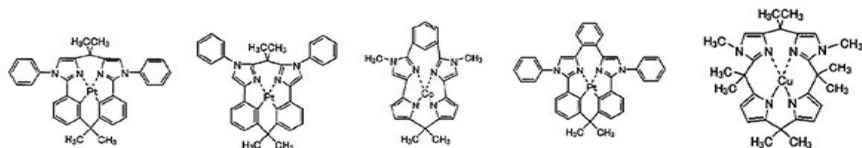
상기 [일반식 B-1]에서,

[0234]

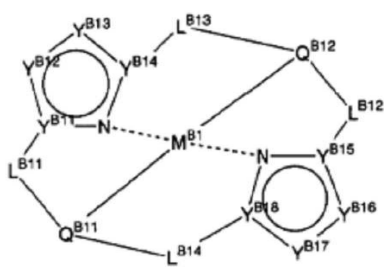
M^1 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, 또한, Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 및 Y^{A18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 및 Y^{A17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소

원자, 치환 또는 비치환된 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내고, L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} , L^{A14} 는 각각 앞서 정의한 바와 같은 연결기를 나타내며, Q^{A11} , Q^{A12} 는 M^{A1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

상기 [일반식 B-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



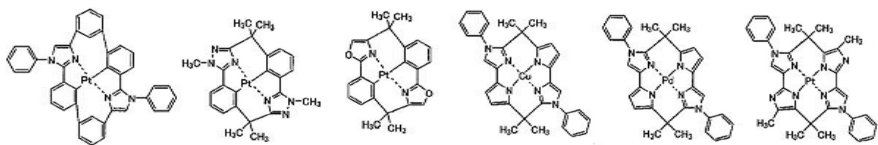
[일반식 C-1]

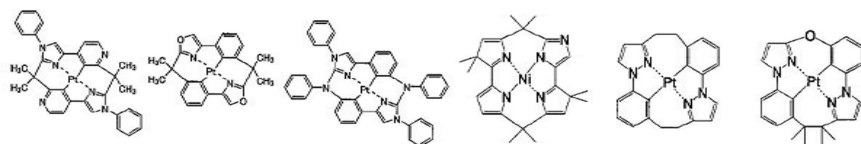


상기 [일반식 C-1]에서,

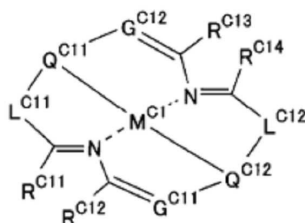
M^{B1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} 및 Y^{B18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고, Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} 및 Y^{B17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소 원자, 치환 또는 비치환의 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내며, L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} , L^{B14} 는 연결기를 나타내고, Q^{B11} , Q^{B12} 는 M^{B1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

상기 [일반식 C-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.





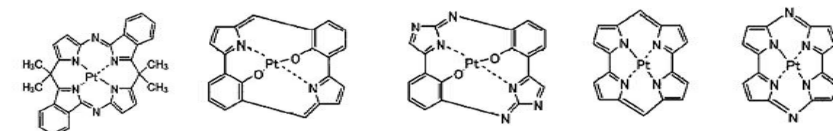
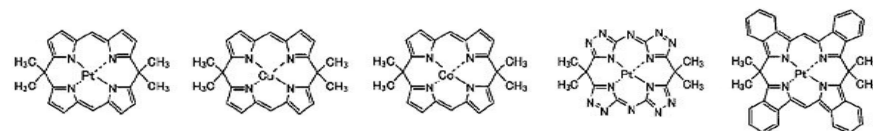
[일반식 D-1]



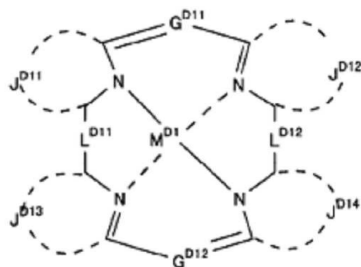
상기 [일반식 D-1]에서,

M^{C1} 은 금속 이온을 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, R^{C11} , R^{C12} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 없는 치환기를 나타내며, R^{C13} , R^{C14} 는 각각 독립에 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 것이 없는 치환기를 나타내며, G^{C11} , G^{C12} 는 각각 독립에 질소 원자, 치환 또는 비치환의 탄소 원자를 나타내며, L^{C11} , L^{C12} 는 연결기를 나타내며, Q^{C11} , Q^{C12} 는 M^{C1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[일반식 E-1]

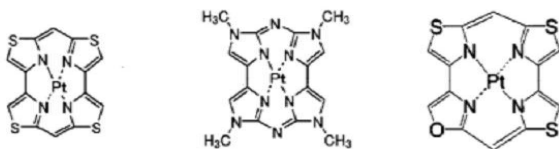


상기 [일반식 E-1]에서,

M^{D1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, G^{D11} , G^{D12} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치

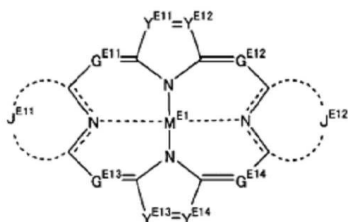
환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 및 J^{D14} 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, L^{D11} , L^{D12} 는 연결기를 나타낸다.

[0257] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0258]

[0259] [일반식 F-1]

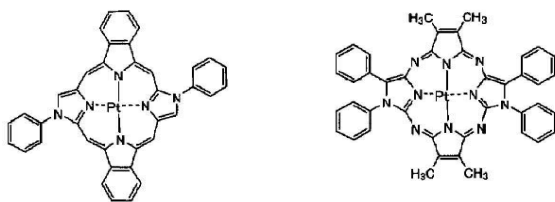


[0260]

[0261] 상기 [일반식 F-1]에서,

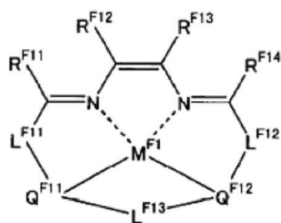
[0262] M^{E1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, J^{E11} , J^{E12} 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 및 G^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 및 Y^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

[0263] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0264]

[0265] [일반식 G-1]



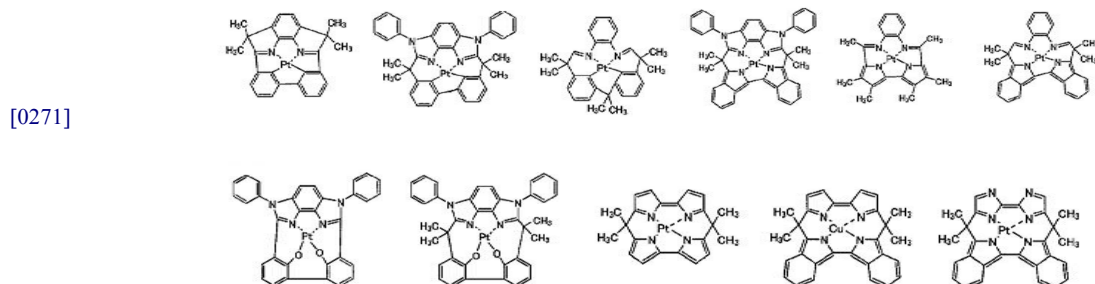
[0266]

[0267] 상기 [일반식 G-1]에서,

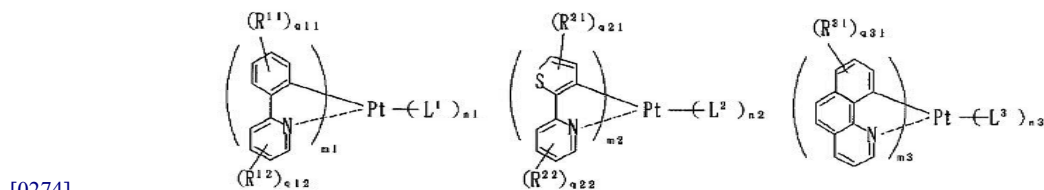
[0268] M^{F1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

[0269] L^{F11} , L^{F12} 및 L^{F13} 은 연결기를 나타내며, R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 및 R^{F14} 는 치환기를 나타내고, R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 과 R^{F13} , R^{F13} 과 R^{F14} 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때 R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 과 R^{F13} 과 R^{F14} 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한 Q^{F11} , Q^{F12} 는 M^{F1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0270] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0273] [일반식 H-1] [일반식 H-2] [일반식 H-3]



[0275] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0276] R^{11} , R^{12} 는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴의 치환기이며; 또한 서로 인접한 치환기와 융합고리를 형성할 수 있고, q_{11} , q_{12} 는 0 내지 4의 정수로서, 바람직하게는 0 내지 2가 될 수 있다.

[0277] 또한, q_{11} , q_{12} 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의 R_{11} 및 R_{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0278] L^1 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로젠 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0279] n^1 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고, m^1 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0280] 또한, 상기 n^1 , m^1 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

[0281] 상기 [일반식 H-2]에서,

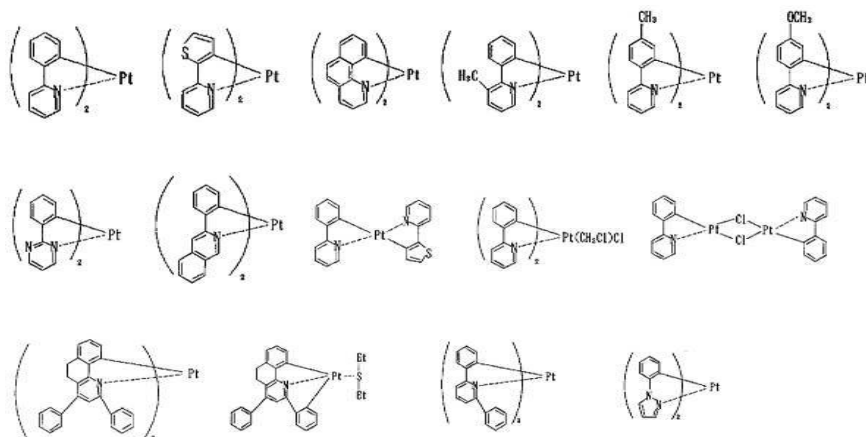
[0282] R^{21} , R^{22} , n^2 , m^2 , q^{21} , L^2 는 각각 상기 R^{11} , R^{12} , n^1 , m^1 , q^{12} , L^1 과 동일하고, q^{21} 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0283] 상기 [일반식 H-3]에서,

[0284] R^{31} , n^3 , m^3 , L^3 은 각각 상기 R^{11} , n^1 , m^1 , L^1 과 동일하고, q^{31} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0285]

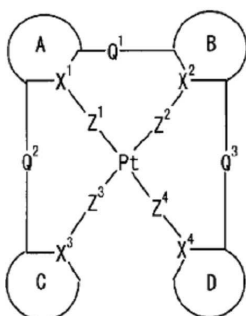
상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0286]

[0287]

[일반식 I-1]



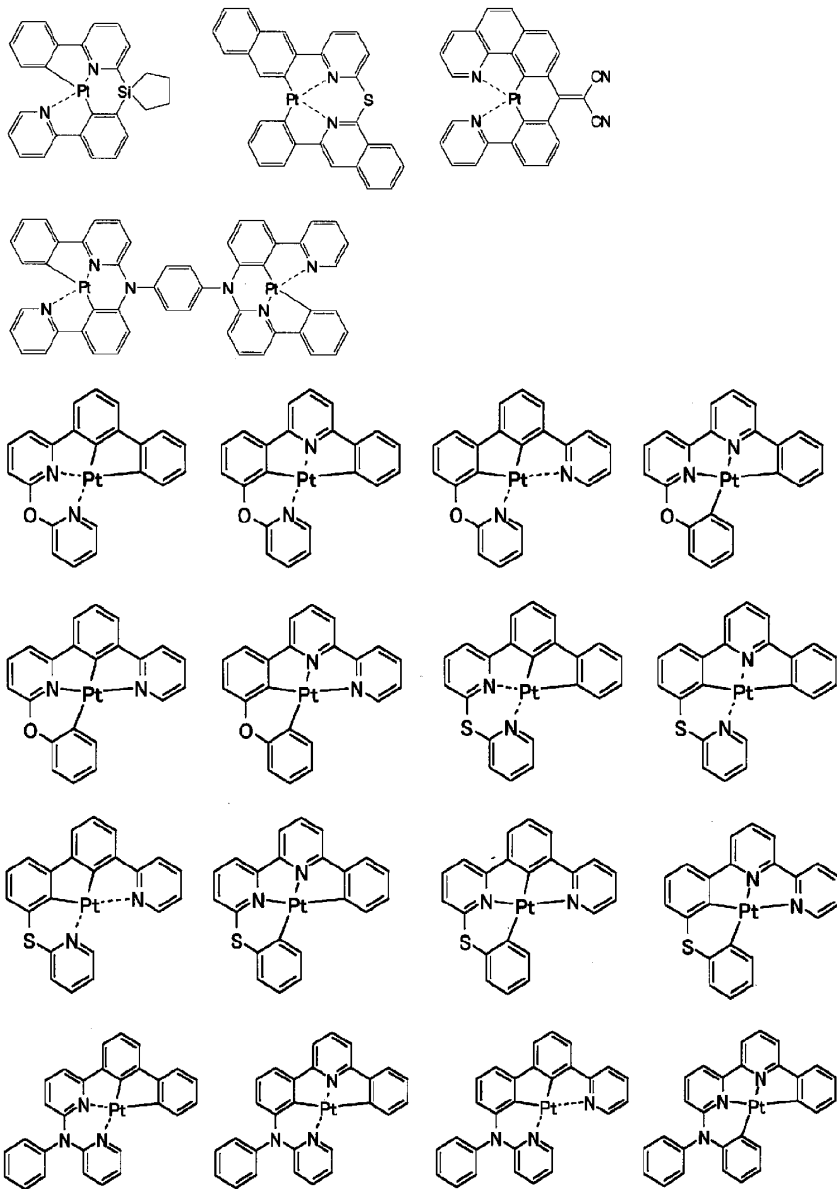
[0288]

[0289]

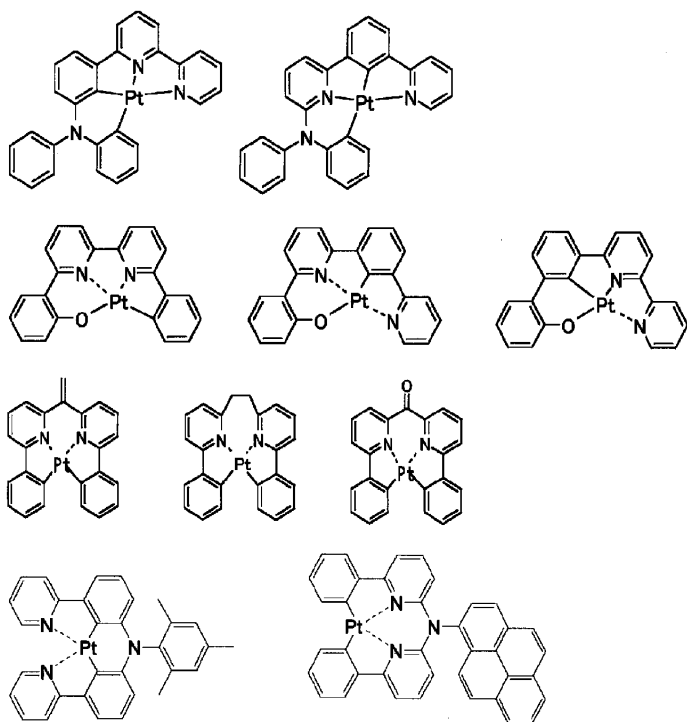
상기 [일반식 I-1]에서,

[0290]

고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다. X^1 , X^2 , X^3 및 X^4 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다. Q^1 , Q^2 및 Q^3 은 각각 독립적으로 2가의 원자(단) 또는 결합을 나타내지만, Q^1 , Q^2 및 Q^3 이 동시에 결합을 나타내지는 않는다. Z^1 , Z^2 , Z^3 및 Z^4 는 어느 2개가 배위결합을 나타내고, 나머지 2개는 공유결합, 산소원자 또는 황원자를 나타낸다.



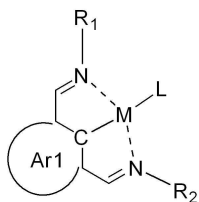
[0293]



[0294]

[0295]

[일반식 J-1]



[0296]

[0297]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0298]

M은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Ar1은 치환 또는 비치환의 고리구조를 표현하고, 상기 M에 결합하는 2개의 아조메틴(azomethine) 결합($-C=N-$)에 있어서, 질소원자(N)는 각각 상기 M에 결합하고, 전체로서 상기 M에 3좌에서 결합되는 3좌 배위자를 형성하고 있다.

[0299]

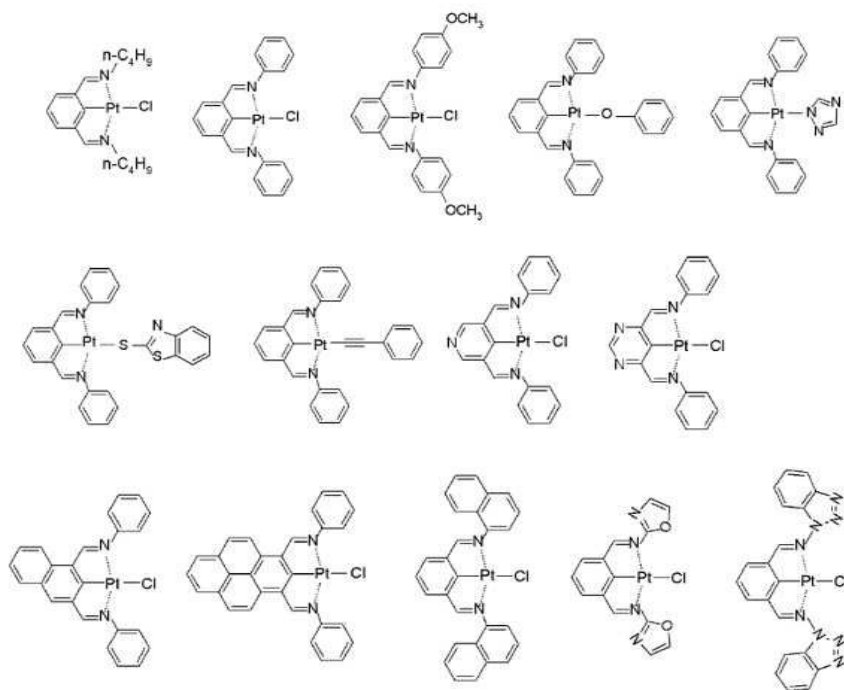
또한, Ar1에 있어서 C는 Ar1으로 표시되는 고리구조를 구성하는 탄소원자를 나타낸다. 또한 상기 R1 및 R2는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 치환 또는 비치환의 알킬기 또는 아릴기를 나타내며, L은 1좌 배위자를 표현한다.

[0300]

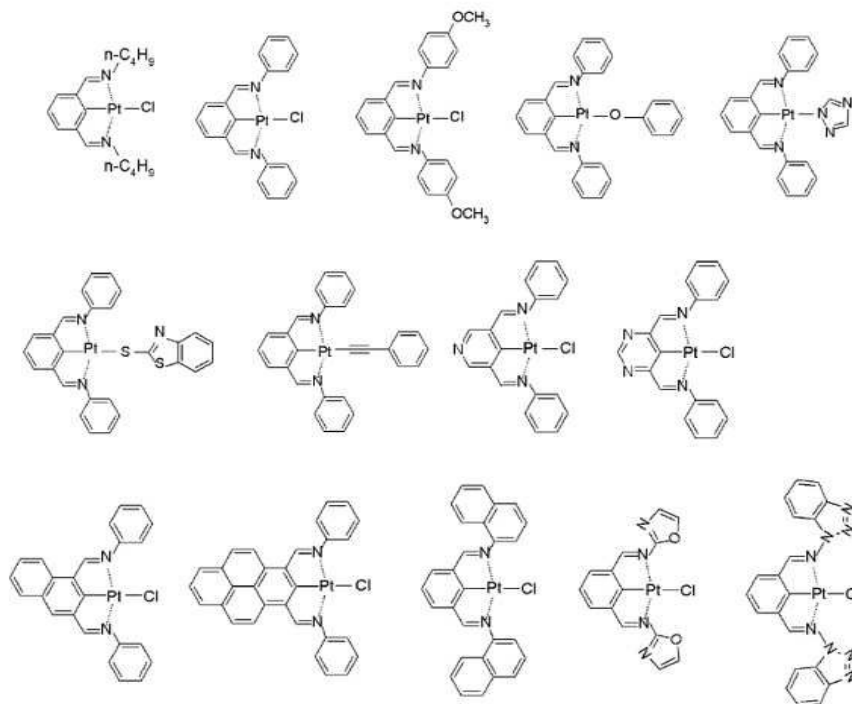
상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0301]

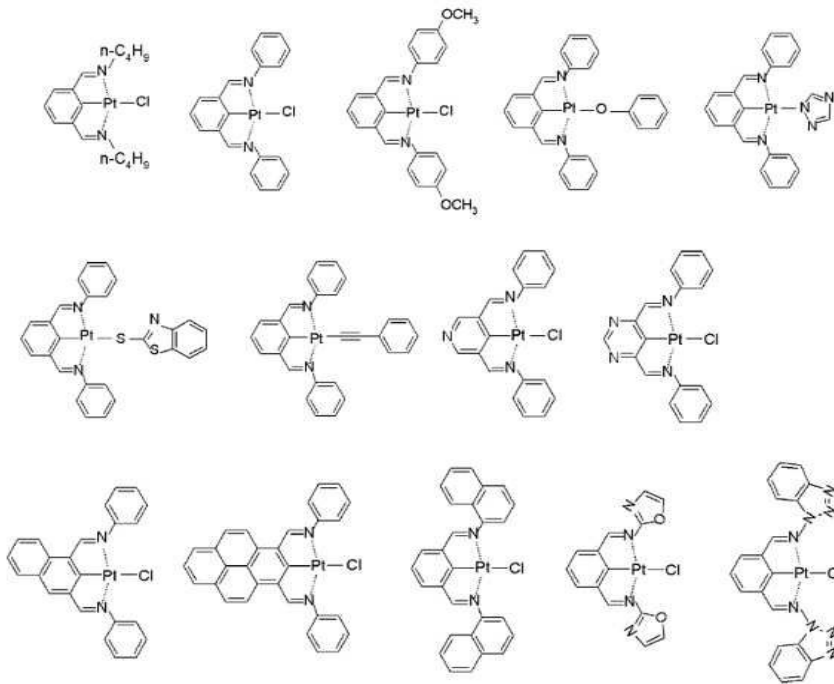
상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0302]



[0303]



[0304]

[0305]

또한, 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도펀트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0306]

또한, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 여기서 상기 증착 방식은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 롤투롤 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[0307]

또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 평판 디스플레이 장치, 플렉시블 디스플레이 장치, 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치에서 선택되는 장치에 사용될 수 있다.

[0308]

이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0309]

<실시예>

[0310]

<합성예 1> [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0311]

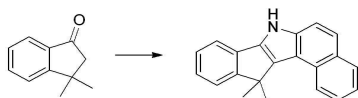
(1) [화학식 1-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0312]

하기 [반응식 1]에 의하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0313]

[반응식 1]



[0314]

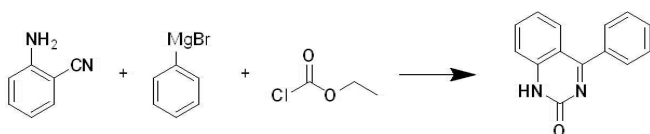
[0315] [화학식 1-a]

[0316] 3,3-다이메틸-2,3-다이하이드로-1H-인덴-1-온 60 g (375 mmol), 2-나프틸 히드라진 염산염 87.5 g (450 mmol)에 아세트산 600 mL, 염산 30 mL를 넣고 12시간 환류 교반 시킨다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 물로 추출한 후 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 77 g을 얻었다. (수율 72 %)

[0317] (2) [화학식 1-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0318] 하기 [반응식 2]에 의하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0319] [반응식 2]



[0320]

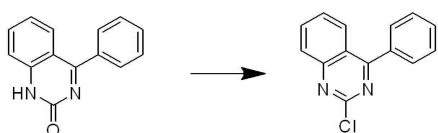
[0321] [화학식 1-b]

[0322] 건조된 2L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 45.0 g (381 mmol), 테트라하이드로퓨란 405 mL를 넣고 0 °C에서 3 M페닐마그네슘브로마이드 279 mL (838 mmol)를 천천히 적가한 후 3시간 환류 교반시킨다. 출발물질이 사라지면 다시 저온으로 낮춘 후 에틸클로로포메이트 62.0 g (0.571 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹인 후 천천히 적가한 후 2시간 환류 교반 시킨다. 반응이 종료되면 암모늄클로라이드 수용액을 넣어 반응을 멈추고 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 감압농축한 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 50 g을 얻었다. (수율 58 %)

[0323] (3) [화학식 1-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0324] 하기 [반응식 3]에 의하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0325] [반응식 3]



[0326]

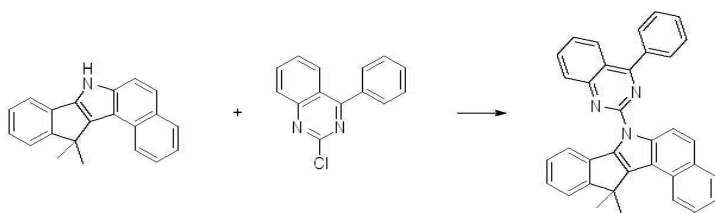
[0327] [화학식 1-b] [화학식 1-c]

[0328] 상기 [반응식 2]로부터 얻은 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 50.0 g (225 mmol), 포스포러스 옥시클로라이드 500 mL에 넣고 5시간 환류 교반 시킨다. 반응이 종료되면 온도를 낮춘 물에 천천히 적가한다. 적가가 완료되면 여과한 후 메틸렌 클로라이드와 물로 추출하고 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 41 g을 얻었다. (수율 75.1 %)

[0329] (4) [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0330] 하기 [반응식 4]에 의하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0331] [반응식 4]



[0332]

[0333] [화합식 1-a] [화합식 1-c] [화합식 2]

[0334] 상기 [반응식 1]로부터 얻은 [화합식 1-a]로 표시되는 화합물 4 g (14.15 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 0.72 g (30.063 mmol)을 디메틸포름아마이드 80 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 [반응식 3]으로부터 얻은 [화합식 1-c]로 표시되는 화합물 4.95 g (20.57 mmol)을 디메틸포름아마이드 80 mL에 녹여 천천히 적가한 후 3시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 120 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화합식 2]로 표시되는 화합물 3.86 g을 얻었다. (수율 56 %)

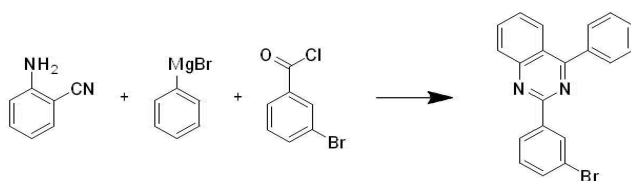
[0335] MS $[M]^+$: 488

[0336] <합성에 2> [화합식 3]으로 표시되는 화합물의 합성

[0337] (1) [화합식 2-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0338] 하기 [반응식 5]에 의하여 [화합식 2-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0339] [반응식 5]



[0340]

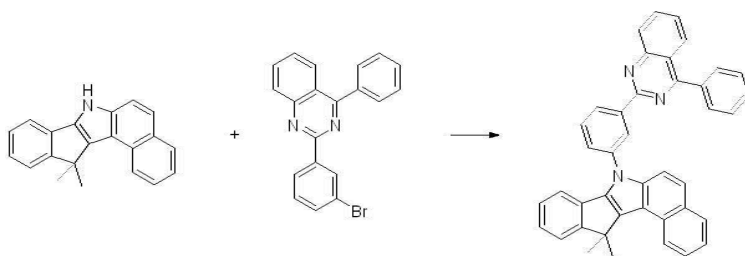
[0341] [화합식 2-a]

[0342] 건조된 1 L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 20.0 g (169 mmol), 테트라하이드로퓨란 200 mL을 넣고 0 °C에서 3M-페닐마그네슘브로마이드 113 mL (339 mmol)를 천천히 적가한 후 3시간 환류 교반시킨다. 출발 물질이 사라지면 다시 저온으로 낮춘 후 3-브로모벤조일클로라이드 44.58 g (0.203 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹인 후 천천히 적가한 후 2시간 환류 교반 시킨다. 반응이 종료되면 암모늄클로라이드 수용액을 넣어 반응을 멈추고 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 감압농축한 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화합식 2-a]로 표시되는 화합물 37 g을 얻었다. (수율 60.3 %)

[0343] (2) [화합식 3]으로 표시되는 화합물의 합성

[0344] 하기 [반응식 6]에 의하여 [화합식 3]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0345] [반응식 6]



[0346]

[0347] [화학식 1-a] [화학식 2-a] [화학식 3]

[0348] 실시예 1-1의 [반응식 1]로부터 얻은 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 6 g (21 mmol), 상기 [반응식 5]로부터 얻은 [화학식 2-a]로 표시되는 화합물 9.7 g (24 mmol), 트리스(다이벤지리덴아세톤) 다이팔라듐 0.39 g (0.43 mmol), 트리터셔리 부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트 0.5 g (1.7 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 33.23 g (345.82 mmol) 및 자일렌 100 mL를 넣고 12 시간 환류시켰다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 감압 건조 후에 컬럼크로마토그래피를 이용하여 [화학식 3]으로 표시되는 화합물 2.9 g을 얻었다. (수율 24.5 %)

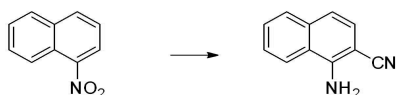
[0349] MS [M]⁺:564

[0350] <합성예 3> [화학식 4]로 표시되는 화합물의 합성

[0351] (1) [화학식 3-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0352] 하기 [반응식 7]에 의하여 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0353] [반응식 7]



[0354]

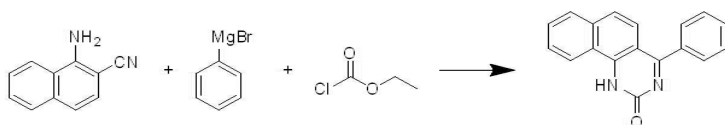
[0355] [화학식 3-a]

[0356] 건조된 2L 반응기에 질소 하에서 에틸 시아노아세테이트 139.8 g (1.236 mol), 포타슘 시아나이드 29.5 g (0.453 mol), 포타슘 하이드록사이드 46.2 g (0.824 mol), 디메틸포름아마이드 920 mL 에 녹인 후 10 °C에서 20분 동안 교반한다. 그 후 1-니트로나프탈렌 92 g (412 mmol)을 반응물에 넣고 60 °C에서 4시간 동안 교반한다. 반응 종료 후 용매를 농축하고 10% 소듐 하이드록사이드 수용액을 600 mL을 넣고 1시간 동안 환류 교반한다. 고체를 여과하고 메틸렌 클로라이드와 헵탄으로 컬럼크로마토그래피를 하여 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물 50 g을 얻었다. (수율 60 %)

[0357] (2) [화학식 3-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0358] 하기 [반응식 8]에 의하여 [화학식 3-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0359] [반응식 8]



[0360]

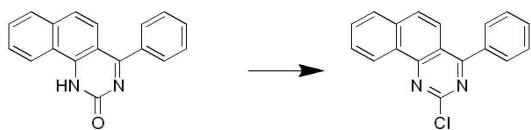
[0361] [화학식 3-a] [화학식 3-b]

[0362] 실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 3-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 3-b]로 표시되는 화합물 104 g을 얻었다. (수율 63 %)

[0363] (3) [화학식 3-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0364] 하기 [반응식 9]에 의하여 [화학식 3-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 9]



[화학식 3-b]

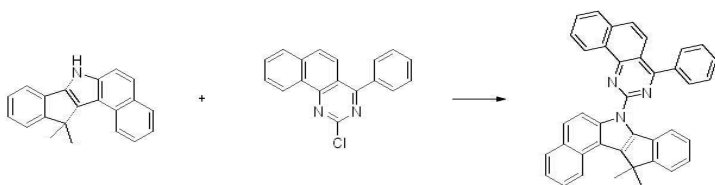
[화학식 3-c]

실시에 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 3-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 3-c]로 표시되는 화합물 63 g을 얻었다. (수율 60 %)

(4) [화학식 4]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 10]에 의하여 [화학식 4]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 10]



[화학식 1-a]

[화학식 3-c]

[화학식 4]

실시에 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c]대신 [화학식 3-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 4]로 표시되는 화합물 2.36 g을 얻었다. (수율 31 %)

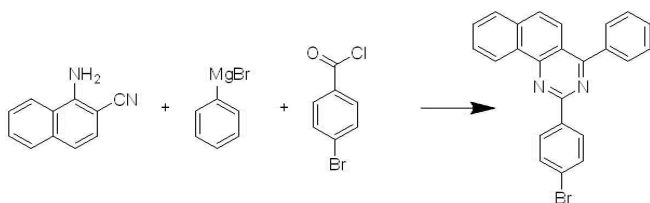
MS $[M]^+$: 538

<합성에 4> [화학식 5]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 4-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 11]에 의하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 11]



[화학식 3-a]

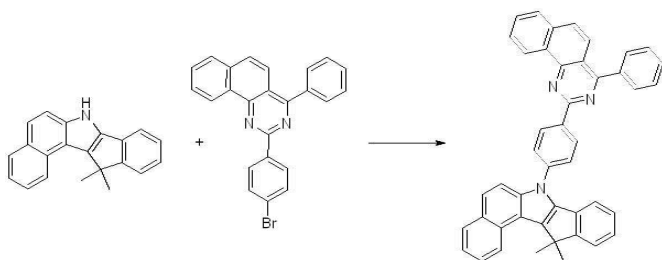
[화학식 4-a]

실시에 2-1의 [반응식 5]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 3-a], 3-브로모벤조일클로라이드 대신 4-브로모벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물 44.2 g을 얻었다. (수율 56.6 %)

(2) [화학식 5]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 12]에 의하여 [화학식 5]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0385] [반응식 12]



[0386]

[0387] [화학식 1-a] [화학식 4-a] [화학식 5]

[0388] 실시예 2-2의 [반응식 6]에서 사용한 [화학식 2-a]대신 [화학식 4-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 5]로 표시되는 화합물 3.93 g을 얻었다. (수율 30.5 %)

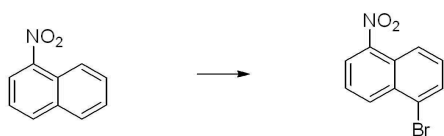
[0389] MS $[M]^+$: 614

[0390] <합성예 5> [화학식 6]으로 표시되는 화합물의 합성

[0391] (1) [화학식 5-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0392] 하기 [반응식 13]에 의하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0393] [반응식 13]



[0394]

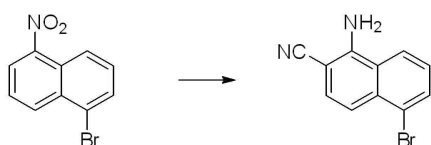
[0395] [화학식 5-a]

[0396] 건조된 500 mL 반응기에 1-니트로나프탈렌 100 g (577 mmol), 아이론클로라이드 90 g (58 mmol)을 넣고 90℃까지 온도를 높인 후 브로민 93.3 g (577 mmol)을 천천히 떨어뜨리고 3시간 교반 한다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 감압농축한 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물 61 g을 얻었다. (수율 42 %)

[0397] (2) [화학식 5-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0398] 하기 [반응식 14]에 의하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0399] [반응식 14]



[0400]

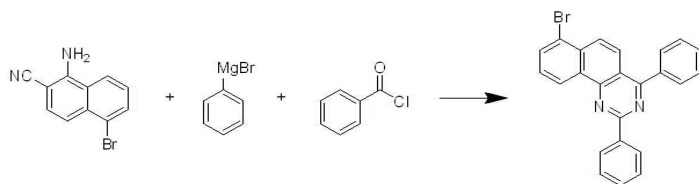
[0401] [화학식 5-a] [화학식 5-b]

[0402] 실시예 3-1의 [반응식 7]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 [화학식 5-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물 40 g을 얻었다. (수율 45.5 %)

[0403] (3) [화학식 5-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0404] 하기 [반응식 15]에 의하여 [화학식 5-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

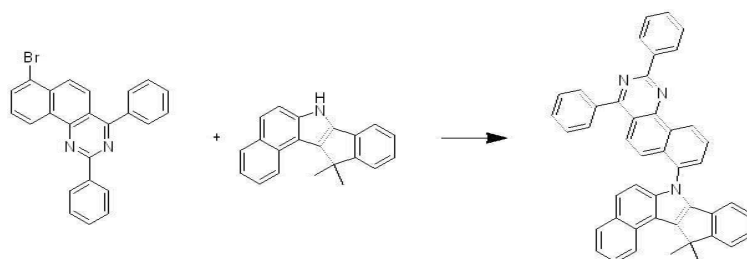
[0405] [반응식 15]



[0406]
[0407] [화학식 5-b] [화학식 5-c]

[0408] 실시예 2-1의 [반응식 5]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 5-b], 3-브로모벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 5-c]로 표시되는 화합물 31.3 g 을 얻었다. (수율 59.8 %)

[0409] (4) [화학식 6]으로 표시되는 화합물의 합성
[0410] 하기 [반응식 16]에 의하여 [화학식 6]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.
[0411] [반응식 16]

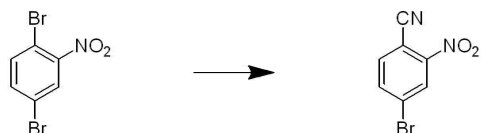


[0412]
[0413] [화학식 5-c] [화학식 1-a] [화학식 6]

[0414] 실시예 2-2의 [반응식 6]에서 사용한 [화학식 2-a]대신 [화학식 5-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으 로 합성하여 [화학식 6]으로 표시되는 화합물 5.18 g을 얻었다. (수율 40.2 %)

[0415] MS [M]⁺ : 614

[0416] <합성예 6> [화학식 12]로 표시되는 화합물의 합성
[0417] (1) [화학식 6-a]로 표시되는 화합물의 합성
[0418] 하기 [반응식 17]에 의하여 [화학식 6-a]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.
[0419] [반응식 17]



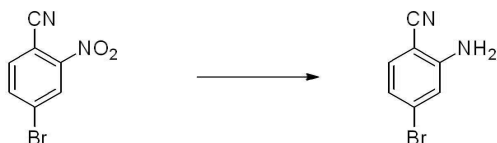
[0420]
[0421] [화학식 6-a]

[0422] 건조된 1000 mL 플라스크에 1,4-다이브로모-2-니트로벤젠 50 g (178 mmol), 커피시아나이드 23.9 g (267 mmol), 디메틸포름아마이드 312 mL를 넣고 100 ℃에서 1시간 교반한다. 반응이 종료되면 톨루엔과 물을 첨가하고 셀라이트를 넣고 30분간 교반한 후 여과하여 고체들을 제거한다. 액체층을 1%암모니아수와 소금물로 세척한 후 감압 농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 30 g을 얻었다. (수율 72 %)

[0423] (2) [화학식 6-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0424] 하기 [반응식 18]에 의하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0425] [반응식 18]



[0426]

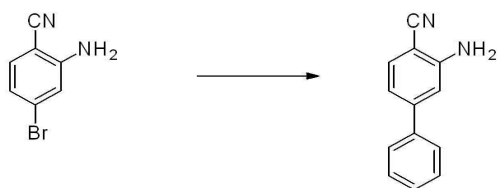
[0427] [화학식 6-a] [화학식 6-b]

[0428] 상기 [반응식 17]로부터 얻은 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 15 g (66 mmol)과 진한 염산 150 mL를 넣고 0 ℃로 맞춘 후 틴 클로라이드 74.55 g (330 mmol)을 천천히 넣어 준다. 상온에서 1시간 교반한다. 반응이 종료되면 반응기 온도를 0 ℃로 맞춰준 후 10 N 수산화나트륨을 이용하여 염기 상태로 만든다. 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 무수황산마그네슘처리하고 감압 증류하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 12 g을 얻었다. (수율 92 %)

[0429] (3) [화학식 6-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0430] 하기 [반응식 19]에 의하여 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0431] [반응식 19]



[0432]

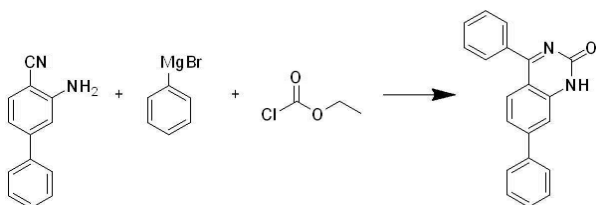
[0433] [화학식 6-b] [화학식 6-c]

[0434] 상기 [반응식 18]로부터 얻은 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 12 g (60.72 mmol), 페닐보론산 8.88 g (72.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.4 g (1.21 mmol), 탄산칼륨 16.78 g (121.44 mmol), 1,4-다이옥산 60 mL, 톨루엔 60 mL, 증류수 24 mL에 넣고 100 ℃에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물 11.4 g을 얻었다. (수율 97 %)

[0435] (4) [화학식 6-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0436] 하기 [반응식 20]에 의하여 [화학식 6-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0437] [반응식 20]



[0438]

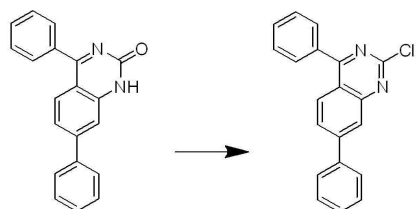
[0439] [화학식 6-c] [화학식 6-d]

[0440] 실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 6-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-d]로 표시되는 화합물 11.07 g을 얻었다. (수율 63 %)

(5) [화학식 6-e]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 21]에 의하여 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 21]



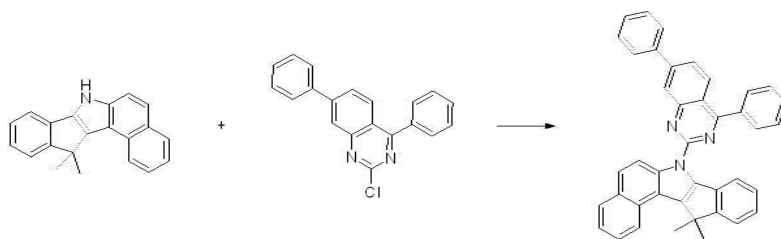
[화학식 6-d] [화학식 6-e]

실시예 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 6-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물 7.05 g을 얻었다. (수율 60 %)

(6) [화학식 12]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 22]에 의하여 [화학식 12]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 22]



[화학식 1-a] [화학식 6-e] [화학식 12]

실시예 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c]대신 [화학식 6-e]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 12]로 표시되는 화합물 2.47 g을 얻었다. (수율 31 %)

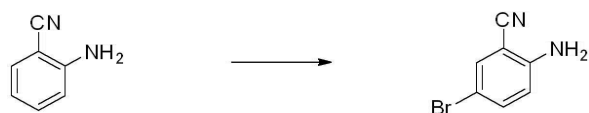
MS $[M]^+$: 564

<합성예 7> [화학식 13]으로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 7-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 23]에 의하여 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 23]



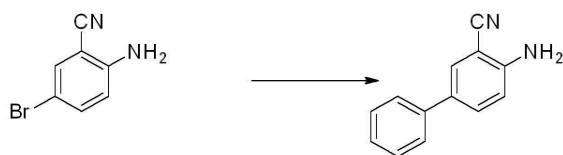
[화학식 7-a]

건조된 1L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 35.1 g (297 mmol), 디메틸포름아마이드 350 mL을 교반시킨다. 그 후 N-브로모석신이미드 55.56 g (312 mmol)을 반응기에 천천히 넣는다. 상온으로 올린 후 4시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수를 상온에서 적가한 후 갈색 결정이 생기면 결정을 여과하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물 54.2 g을 얻었다. (수율 92.6%)

(2) [화학식 7-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 24]에 의하여 [화학식 7-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 24]



[화학식 7-a]

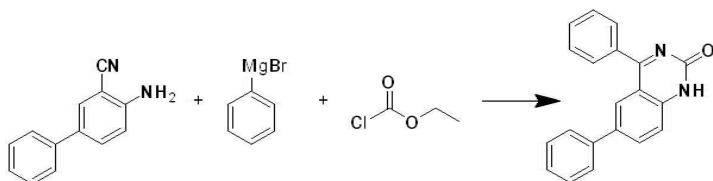
[화학식 7-b]

상기 [반응식 23]으로부터 얻은 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물 12 g (60.72 mmol), 페닐 보론산 8.88 g (72.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.4 g (1.21 mmol), 탄산칼륨 16.78 g (121.44 mmol), 1,4-다이옥산 60 mL, 톨루엔 60 mL, 증류수 24 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [화학식 7-b]로 표시되는 화합물 11.4 g을 얻었다. (수율 97 %)

(3) [화학식 7-c]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 25]에 의하여 [화학식 7-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 25]



[화학식 7-b]

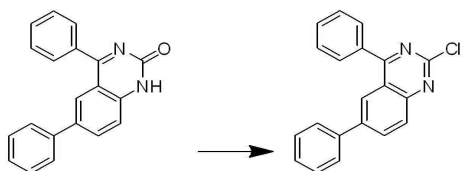
[화학식 7-c]

실시에 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 7-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 7-c]로 표시되는 화합물 11.07 g을 얻었다. (수율 63 %)

(4) [화학식 7-d]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 26]에 의하여 [화학식 7-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 26]



[화학식 7-c]

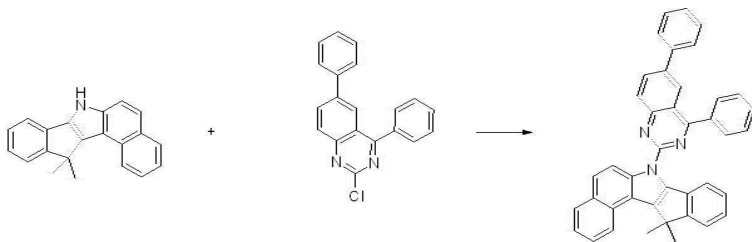
[화학식 7-d]

실시에 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 7-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 7-d]로 표시되는 화합물 7.05 g을 얻었다. (수율 60 %)

(5) [화학식 13]으로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 27]에 의하여 [화학식 13]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 27]



[화·학·식 1-a] [화·학·식 7-d] [화·학·식 13]

실시에 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화합식 1-c]대신 [화합식 7-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합식 13]으로 표시되는 화합물 2.47 g을 얻었다. (수율 31 %)

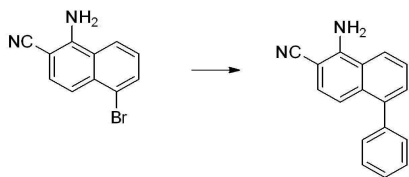
MS $[M]^+$: 564

<합성예 8> [화학식 16]으로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 8-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 28]에 의하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 28]



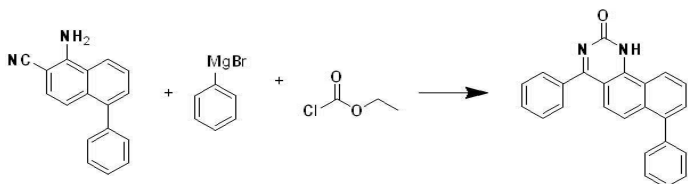
[화학식 5-b] [화학식 8-a]

실시에 5-2에서 얻은 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물 15 g (60.72 mmol), 페닐 보론산 8.88 g (72.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.4 g (1.21 mmol), 탄산칼륨 16.78 g (121.44 mmol), 1,4-다이옥산 75 mL, 톨루엔 75 mL, 증류수 30 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물 14.4 g을 얻었다. (수율 97 %)

(2) [화학식 8-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 29]에 의하여 [화학식 8-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 29]



[화학식 8-a] [화학식 8-b]

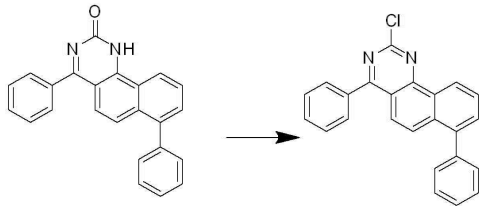
실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 8-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한

방법으로 합성하여 [화학식 8-b]로 표시되는 화합물 12.9 g을 얻었다. (수율 63 %)

(3) [화학식 8-c]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 30]에 의하여 [화학식 8-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 30]



[화학식 8-b]

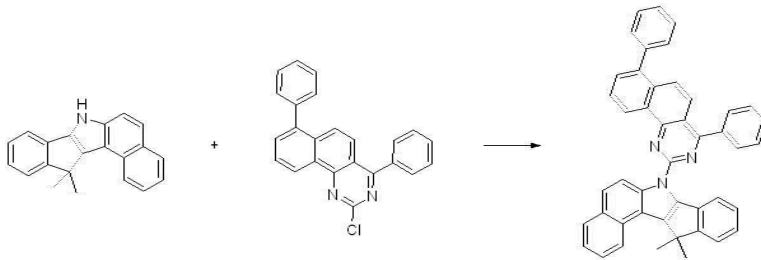
[화학식 8-c]

실시예 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 8-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 8-c]로 표시되는 화합물 8.15 g을 얻었다. (수율 60 %)

(4) [화학식 16]으로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 31]에 의하여 [화학식 16]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 31]



[화학식 1-a]

[화학식 8-c]

[화학식 16]

실시예 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c]대신 [화학식 8-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 16]으로 표시되는 화합물 2.69 g을 얻었다. (수율 31 %)

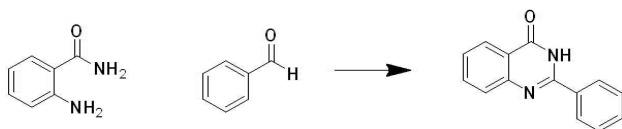
MS $[M]^+$: 614

<합성예 9> [화학식 17]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 9-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 32]에 의하여 [화학식 9-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 32]



[화학식 9-a]

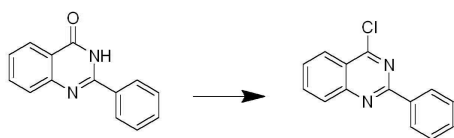
건조된 2L 반응기에 2-아미노벤자미드 50 g (370 mmol), 벤zal데하이드 39 g (370 mmol), 디메틸아세트아

마이트 1000 mL를 넣고 교반시킨다. 그 후 소듐 바이설파이트 40.1 g (390 mmol)을 반응기에 넣는다. 150 °C에서 3시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 낮춘 후 차가운 물에 반응액을 넣는다. 결정이 생기면 여과하여 [화학식 9-a]로 표시되는 화합물 48.2 g을 얻었다. (수율 59 %)

(2) [화학식 9-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 33]에 의하여 [화학식 9-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 33]



[화학식 9-a]

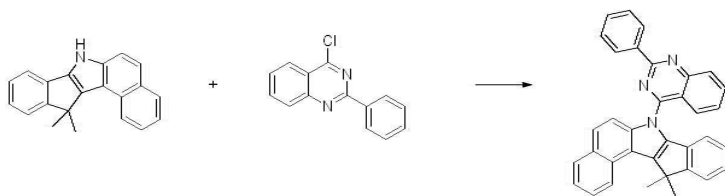
[화학식 9-b]

실시에 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 9-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 9-b]로 표시되는 화합물 23.8 g을 얻었다. (수율 46 %)

(3) [화학식 17]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 34]에 의하여 [화학식 17]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 34]



[화학식 1-a]

[화학식 9-b]

[화학식 17]

실시에 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c]대신 [화학식 9-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 17]로 표시되는 화합물 4.65 g을 얻었다. (수율 31 %)

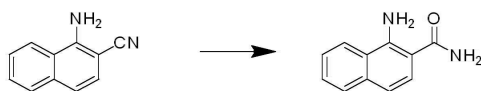
MS $[M]^+$: 488

<합성예 10> [화학식 18]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 10-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 35]에 의하여 [화학식 10-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 35]



[화학식 3-a]

[화학식 10-a]

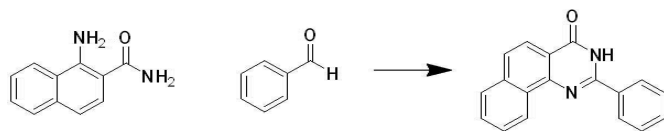
실시에 3-1의 [반응식 7]로부터 얻은 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물 50 g (297 mmol)과 포타슘 하이드록사이드 83.40 g (1486 mmol)을 넣고 에탄올 1250 mL를 가하여 12시간동안 환류 교반한다. 반응이 종료되면 상온으로 식힌 후 결정을 여과한다. 고체를 에틸아세테이트로 녹여서 소듐 바이카보네이트 수용액으로 추출하여 유기층을

농축시켜 재결정하여 [화학식 10-a]로 표시되는 화합물 23.5 g을 얻었다. (수율 42 %)

(2) [화학식 10-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 36]에 의하여 [화학식 10-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 36]



[화학식 10-a]

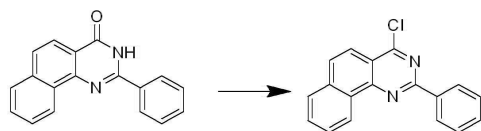
[화학식 10-b]

실시예 9-1의 [반응식 32]에서 사용한 2-아미노벤즈아마이드 대신 [화학식 10-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 10-b]로 표시되는 화합물 24.5 g을 얻었다. (수율 74 %)

(3) [화학식 10-c]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 37]에 의하여 [화학식 10-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 37]



[화학식 10-b]

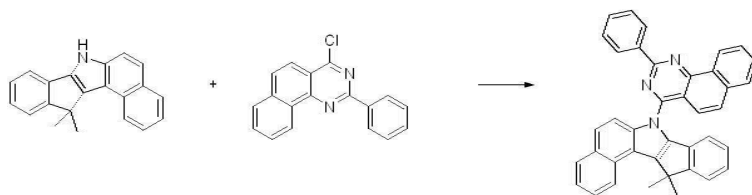
[화학식 10-c]

실시예 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 10-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 10-c]로 표시되는 화합물 21.6 g을 얻었다. (수율 82 %)

(4) [화학식 18]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 38]에 의하여 [화학식 18]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 38]



[화학식 1-a]

[화학식 10-c]

[화학식 18]

실시예 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c]대신 [화학식 10-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 18]로 표시되는 화합물 4.9 g을 얻었다. (수율 31 %)

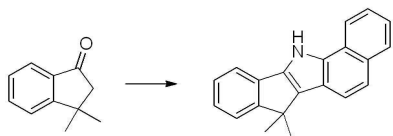
MS $[M]^+$: 538

<합성예 11> [화학식 25]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 11-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0560] 하기 [반응식 39]에 의하여 [화학식 11-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0561] [반응식 39]



[0562]

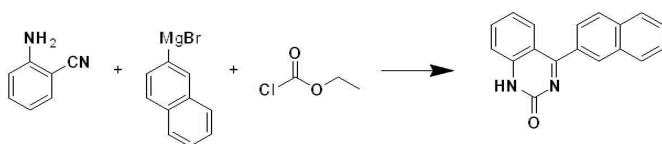
[0563] [화학식 11-a]

[0564] 실시예 1-1의 [반응식 1]에서 사용한 2-나프틸 히드라진 염산염 대신 1-나프틸 히드라진 염산염을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 11-a]로 표시되는 화합물 77 g을 얻었다. (수율 72 %)

[0565] (2) [화학식 11-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0566] 하기 [반응식 40]에 의하여 [화학식 11-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0567] [반응식 40]



[0568]

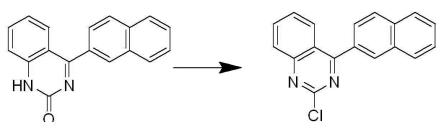
[0569] [화학식 11-b]

[0570] 실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 페닐마그네슘브로마이드 대신 2-나프틸마그네슘브로마이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 11-b]로 표시되는 화합물 60.17 g을 얻었다. (수율 58 %)

[0571] (3) [화학식 11-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0572] 하기 [반응식 41]에 의하여 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0573] [반응식 41]



[0574]

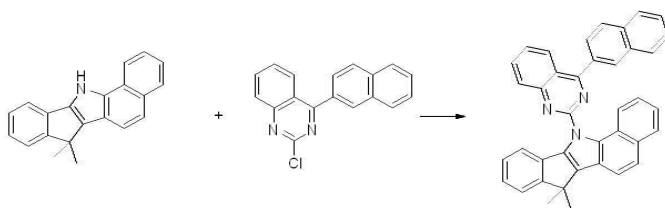
[0575] [화학식 11-b] [화학식 11-c]

[0576] 실시예 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 11-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물 49 g을 얻었다. (수율 75.1 %)

[0577] (4) [화학식 25]로 표시되는 화합물의 합성

[0578] 하기 [반응식 42]에 의하여 [화학식 25]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0579] [반응식 42]



[0580]

[0581] [화학식 11-a] [화학식 11-c] [화학식 25]

[0582] 상기 [반응식 39]로부터 얻은 [화학식 11-a]로 표시되는 화합물 6 g (21 mmol), 상기 [반응식 41]로부터 얻은 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물 6.97 g (24 mmol), 트리스(다이벤지리덴아세톤) 다이팔라듐 0.39 g (0.43 mmol), 트리터셔리 부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트 0.5 g (1.7 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 33.23 g (345.82 mmol) 및 자일렌 100 mL를 넣고 12 시간 환류시켰다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 감압 건조 후에 컬럼크로마토그래피를 이용하여 [화학식 25]로 표시되는 화합물 2.76 g을 얻었다. (수율 24.5 %)

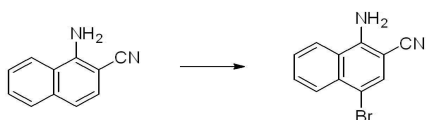
[0583] MS $[M]^+$: 538

[0584] <합성에 12> [화학식 28]로 표시되는 화합물의 합성

[0585] (1) [화학식 12-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0586] 하기 [반응식 43]에 의하여 [화학식 12-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0587] [반응식 43]



[0588]

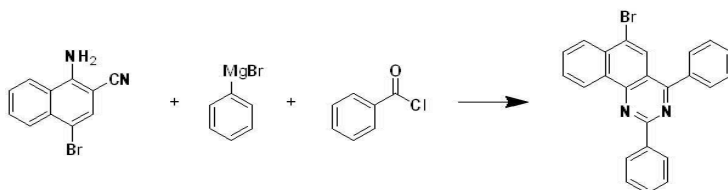
[0589] [화학식 3-a] [화학식 12-a]

[0590] 건조된 1L 반응기에 질소를 채워준 후 실시예 3-1의 [반응식 7]로부터 얻은 [화학식 3-a] 50.0 g (297 mmol), 디메틸포름아마이드 500 mL을 교반시킨다. 그 후 N-브로모석신이미드 55.56 g (312 mmol)을 반응기에 천천히 넣는다. 상온으로 올린 후 4시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수를 상온에서 적가한 후 갈색 결정이 생기면 결정을 여과하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 12-a]로 표시되는 화합물 68 g을 얻었다. (수율 92.6%)

[0591] (2) [화학식 12-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0592] 하기 [반응식 44]에 의하여 [화학식 12-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0593] [반응식 44]



[0594]

[0595] [화학식 12-a] [화학식 12-b]

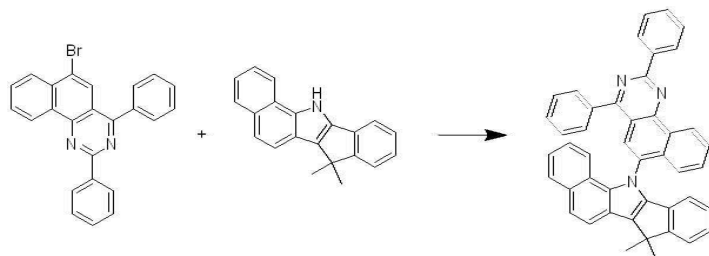
[0596] 실시예 2-1의 [반응식 5]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 43]으로부터 얻은 [화학식 12-a], 3-브로모벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식

12-b]로 표시되는 화합물 67.6 g을 얻었다. (수율 59.8 %)

(3) [화학식 28]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 45]에 의하여 [화학식 28]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 45]



[화학식 12-b] [화학식 11-a] [화학식 28]

실시에 11-4의 [반응식 42]에서 사용한 [화학식 11-c] 대신 [화학식 12-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 28]로 표시되는 화합물 4.85 g을 얻었다. (수율 37.6 %)

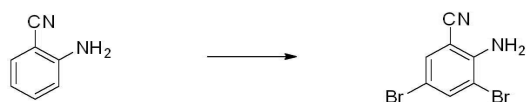
MS [M]⁺: 614

<합성에 13> [화학식 29]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 13-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 46]에 의하여 [화학식 13-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 46]



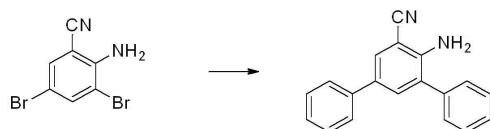
[화학식 13-a]

건조된 1L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 25 g (212 mmol), 아세트산 500 mL을 교반시킨다. 그 후 브롬 94.7 g (593 mmol)을 반응기에 천천히 넣는다. 밤새 상온에서 교반 후 결정이 생기면 여과하여 [화학식 13-a]로 표시되는 화합물 37 g을 얻었다. (수율 63 %)

(2) [화학식 13-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 47]에 의하여 [화학식 13-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 47]



[화학식 13-a] [화학식 13-b]

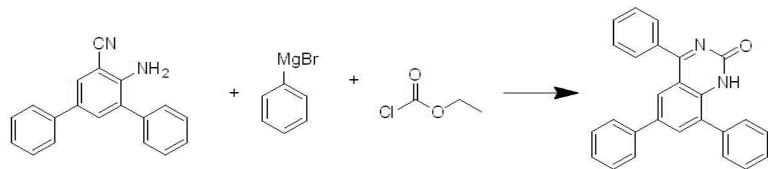
상기 [반응식 46]으로부터 얻은 [화학식 13-a]로 표시되는 화합물 37 g (134 mmol), 페닐 보론산 39.2 g (322 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 3.1 g (3 mmol), 탄산칼륨 37.1 g (268 mmol), 테트라하이드로퓨란 200 mL, 톨루엔 200 mL, 증류수 80 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로

온도를 조절한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [화학식 13-b]로 표시되는 화합물 30 g을 얻었다. (수율 82.8 %)

(3) [화학식 13-c]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 48]에 의하여 [화학식 13-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 48]



[화학식 13-b]

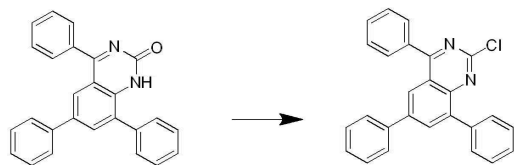
[화학식 13-c]

실시에 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 13-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 13-c]로 표시되는 화합물 10 g을 얻었다. (수율 63 %)

(4) [화학식 13-d]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 49]에 의하여 [화학식 13-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 49]



[화학식 13-c]

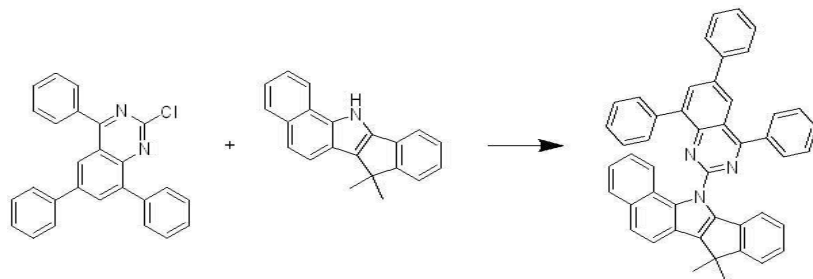
[화학식 13-d]

실시에 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 13-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 13-d]로 표시되는 화합물 8.08 g을 얻었다. (수율 60 %)

(5) [화학식 29]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 50]에 의하여 [화학식 29]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 50]



[화학식 13-d]

[화학식 11-a]

[화학식 29]

실시에 11-4의 [반응식 42]에서 사용한 [화학식 11-c] 대신 [화학식 13-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 29]로 표시되는 화합물 3.77 g을 얻었다. (수율 37.6 %)

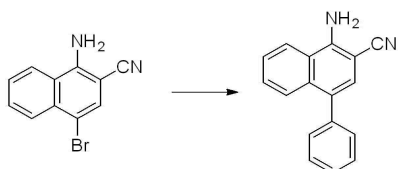
[0635] MS $[M]^+$: 640

[0636] <합성예 14> [화학식 30]으로 표시되는 화합물의 합성

[0637] (1) [화학식 14-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0638] 하기 [반응식 51]에 의하여 [화학식 14-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0639] [반응식 51]



[0640]

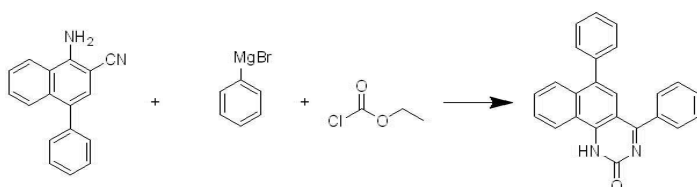
[0641] [화학식 12-a] [화학식 14-a]

[0642] 실시예 12-1의 [반응식 43]으로부터 얻은 [화학식 12-a]로 표시되는 화합물 68.0 g (275 mmol), 페닐보로닉산 40.3 g (330 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 6.36 g (6 mmol), 탄산칼륨 76.07 g (192 mmol), 1,4-다이옥산 340 mL, 톨루엔 340 mL, 증류수 136 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 증류수를 사용하여 추출한다. 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 14-a]로 표시되는 화합물 45 g을 얻었다. (수율 66.9 %)

[0643] (2) [화학식 14-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0644] 하기 [반응식 52]에 의하여 [화학식 14-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0645] [반응식 52]



[0646]

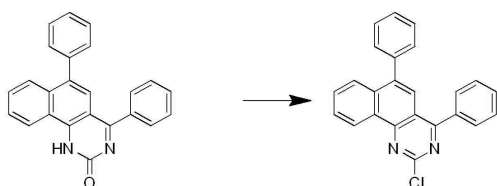
[0647] [화학식 14-a] [화학식 14-b]

[0648] 실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 [화학식 14-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 14-b]로 표시되는 화합물 51 g을 얻었다. (수율 78 %)

[0649] (3) [화학식 14-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0650] 하기 [반응식 53]에 의하여 [화학식 14-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0651] [반응식 53]



[0652]

[0653] [화학식 14-b] [화학식 14-c]

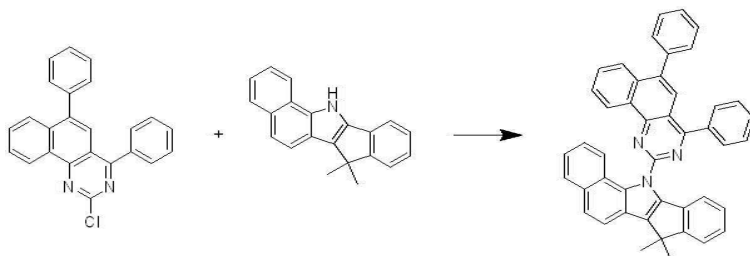
[0654] 실시예 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식1-c] 대신 [화학식14-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으

로 합성하여 [화학식 14-c]로 표시되는 화합물 31 g을 얻었다. (수율 57.8 %)

(4) [화학식 30]으로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 54]에 의하여 [화학식 30]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 54]



[화학식 14-c] [화학식 11-a] [화학식 30]

실시에 11-4의 [반응식 42]에서 사용한 [화학식 11-c] 대신 [화학식 14-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 30]으로 표시되는 화합물 4.85 g을 얻었다. (수율 37.6 %)

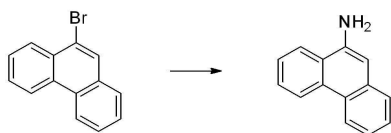
MS [M]⁺: 614

<합성에 15> [화학식 34]로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 15-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 55]에 의하여 [화학식 15-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 55]



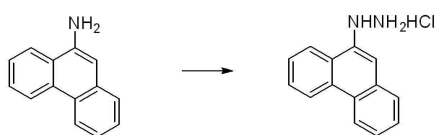
[화학식 15-a]

건조된 반응기에 9-브로모페난트렌 55 g (217 mmol), 요오드화구리 8.3 g (43 mmol), 트랜스-4-히드록시-L-프롤린 11.4 g (87 mmol), 탄산칼슘 90.1 g (652 mmol), 다이메틸설폭사이드 275 mL를 넣고 28 % 암모니아 수용액을 244 g을 천천히 넣어준다. 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 식힌 후 에틸아세테이트와 증류수를 사용하여 추출한다. 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 15-a]로 표시되는 화합물 26 g을 얻었다. (수율 62 %)

(2) [화학식 15-b]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 56]에 의하여 [화학식 15-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 56]



[화학식 15-a]

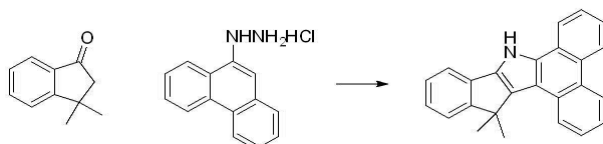
[화학식 15-b]

[0674] 상기 [반응식 55]로부터 얻은 [화학식 15-a]로 표시되는 화합물 26 g (134.5 mmol)과 염산 260 mL를 넣고 5 ℃로 맞춘다. 소듐 나이트라이트 9.28 g (134.5 mmol)과 물 78 mL를 섞어 천천히 넣어준다. 5 ℃로 2시간을 유지한 후 틴(II) 클로라이드 디하이드레이트 151.7 g (672.5 mmol)와 염산 520 mL를 섞은 용액을 천천히 넣어준다. 상온에서 3시간동안 유지한 후 여과하여 [화학식 15-b]로 표시되는 화합물 20.4 g을 얻었다. (수율 62 %)

[0675] (3) [화학식 15-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0676] 하기 [반응식 57]에 의하여 [화학식 15-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0677] [반응식 57]



[0678]

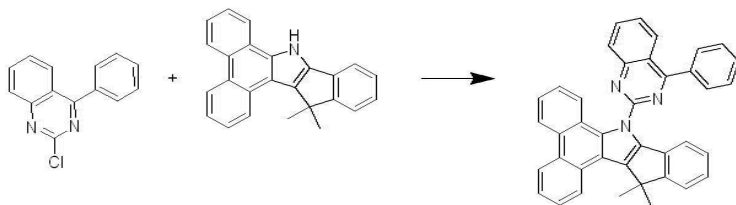
[0679] [화학식 15-b] [화학식 15-c]

[0680] 실시예 1-1의 [반응식 1]에서 사용한 2-나프틸 히드라진 염산염 대신 상기 [반응식 56]으로부터 얻은 [화학식 15-b]로 표시되는 화합물을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 15-c]로 표시되는 화합물 16.67 g을 얻었다. (수율 72 %)

[0681] (4) [화학식 34]로 표시되는 화합물의 합성

[0682] 하기 [반응식 58]에 의하여 [화학식 34]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0683] [반응식 58]



[0684]

[0685] [화학식 1-c] [화학식 15-c] [화학식 34]

[0686] 상기 [반응식 57]로부터 얻은 [화학식 15-c]로 표시되는 화합물 7 g (21 mmol), 실시예 1-3의 [반응식 3]으로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 5.8 g (24 mmol), 트리스(다이벤지리덴아세톤) 다이팔라듐 0.39 g (0.43 mmol), 트리티셔리 부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트 0.5 g (1.7 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 33.23 g (345.82 mmol) 및 자일렌 100 mL를 넣고 12 시간 환류시켰다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 감압 건조 후에 컬럼크로마토그래피를 이용하여 [화학식 34]로 표시되는 화합물 2.77 g을 얻었다. (수율 24.5 %)

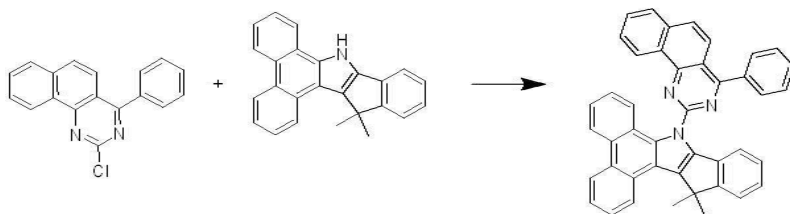
[0687] MS [M]⁺ : 538

[0688] <합성에 16> [화학식 36]으로 표시되는 화합물의 합성

[0689] (1) [화학식 36]으로 표시되는 화합물의 합성

[0690] 하기 [반응식 59]에 의하여 [화학식 36]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0691] [반응식 59]



[0692]

[0693] [화학식 3-c] [화학식 15-c] [화학식 36]

[0694] 실시예 15-4의 [반응식 58]에서 사용한 [화학식 1-c] 대신 [화학식 3-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 36]으로 표시되는 화합물 3.02 g을 얻었다. (수율 37.6 %)

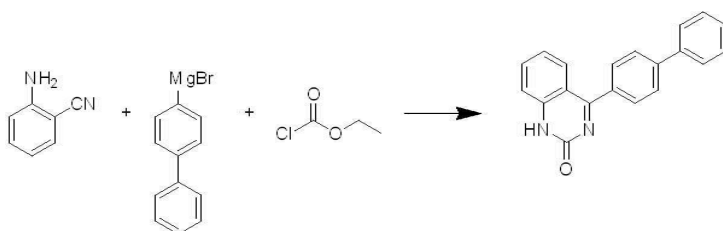
[0695] MS $[M]^+$: 588

[0696] <합성에 17> [화학식 38]로 표시되는 화합물의 합성

[0697] (1) [화학식 17-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0698] 하기 [반응식 60]에 의하여 [화학식 17-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0699] [반응식 60]



[0700]

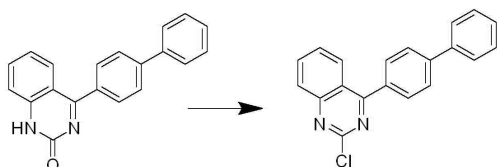
[0701] [화학식 17-a]

[0702] 실시예 1-2의 [반응식 2]에서 사용한 페닐마그네슘브로마이드 대신 4-바이페닐마그네슘브로마이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 17-a]로 표시되는 화합물 65.9 g을 얻었다. (수율 58 %)

[0703] (2) [화학식 17-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0704] 하기 [반응식 61]에 의하여 [화학식 17-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0705] [반응식 61]



[0706]

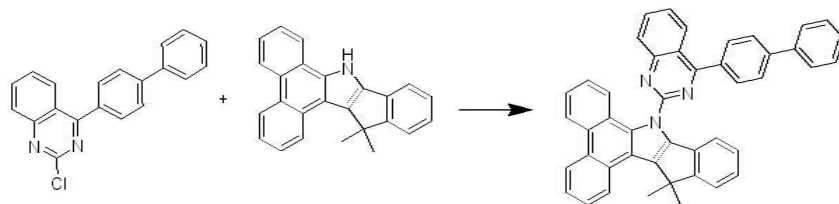
[0707] [화학식 17-a] [화학식 17-b]

[0708] 실시예 1-3의 [반응식 3]에서 사용한 [화학식 1-b] 대신 [화학식 17-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 17-b]로 표시되는 화합물 53.5 g을 얻었다. (수율 75.1 %)

[0709] (3) [화학식 38]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 62]에 의하여 [화학식 38]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 62]



[화학식 17-b] [화학식 15-c] [화학식 38]

실시에 15-4의 [반응식 58]에서 사용한 [화학식 1-c] 대신 [화학식 17-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 38]로 표시되는 화합물 4.8 g을 얻었다. (수율 37.6 %)

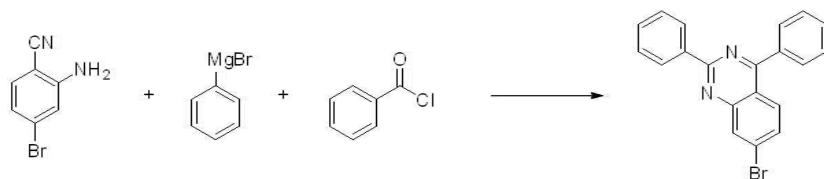
MS $[M]^+$: 614

<합성에 18> [화학식 73]으로 표시되는 화합물의 합성

(1) [화학식 18-a]로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 63]에 의하여 [화학식 18-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 63]



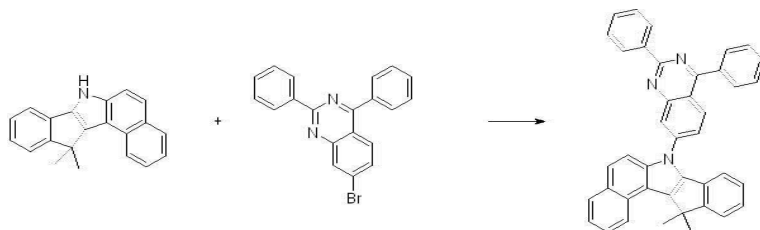
[화학식 6-b] [화학식 18-a]

실시에 2-1의 [반응식 5]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 실시 예 6-2의 [반응식 18]로부터 얻은 [화학식 6-b], 3-브로모벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 18-a]로 표시되는 화합물 35 g을 얻었다. (수율 57.3 %)

(2) [화학식 73]으로 표시되는 화합물의 합성

하기 [반응식 64]에 의하여 [화학식 73]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[반응식 64]



[화학식 1-a] [화학식 18-a] [화학식 73]

실시에 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c] 대신 [화학식 18-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 73]으로 표시되는 화합물 3.67 g을 얻었다. (수율 31 %)

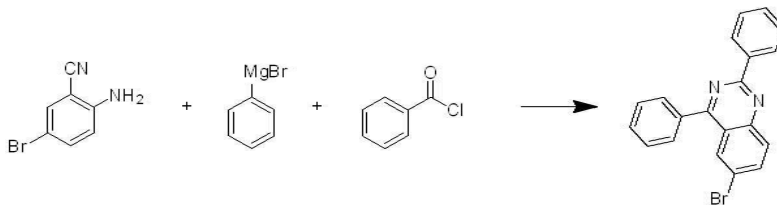
[0729] MS [M]⁺ : 564

[0730] <합성에 19> [화학식 74]로 표시되는 화합물의 합성

[0731] (1) [화학식 19-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0732] 하기 [반응식 65]에 의하여 [화학식 19-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0733] [반응식 65]



[0734]

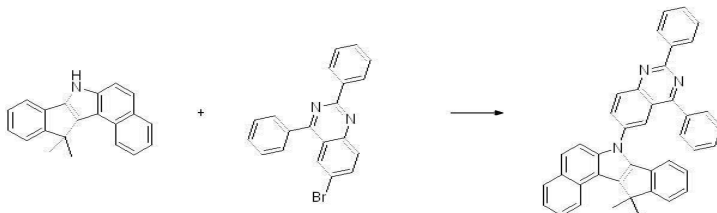
[0735] [화학식 7-a] [화학식 19-a]

[0736] 실시예 2-1의 [반응식 5]에서 사용한 2-아미노벤조니트릴 대신 실시예 7-1의 [반응식 23]으로부터 얻은 [화학식 7-a], 3-브로모벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 19-a]로 표시되는 화합물 20.7 g을 얻었다. (수율 60.4 %)

[0737] (2) [화학식 74]로 표시되는 화합물의 합성

[0738] 하기 [반응식 66]에 의하여 [화학식 74]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0739] [반응식 66]



[0740]

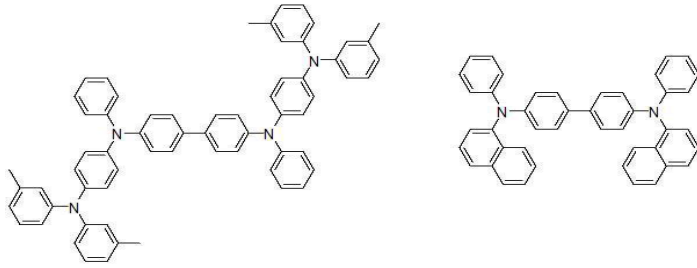
[0741] [화학식 1-a] [화학식 19-a] [화학식 74]

[0742] 실시예 1-4의 [반응식 4]에서 사용한 [화학식 1-c] 대신 [화학식 19-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 74]로 표시되는 화합물 3.67 g을 얻었다. (수율 31 %)

[0743] MS [M]⁺ : 564

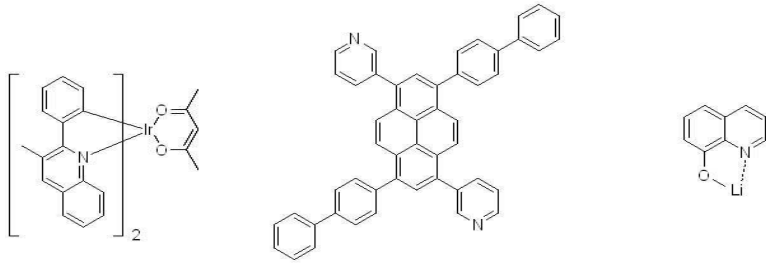
[0744] 실시예 1 내지 19 : 유기 발광다이오드의 제조

[0745] ITO 글래스의 발광 면적이 2 mm × 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1 × 10⁻⁶ torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700Å), NPD(300Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물(합성에 1 내지 19) + RD-1 (10%)(300Å), 화합물 E : Liq = 1:1 (250Å), Liq(10Å), Al(1,000Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.



[DNTPD]

[NPD]



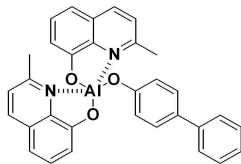
[RD-1]

[화합물 E]

[Liq]

비교예 1

비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 BA1q를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 BA1q의 구조는 아래와 같다.



[BA1q]

상기 실시예 1 내지 19, 비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자에 대하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다. T95은 휘도가 초기휘도(3000 cd/m^2)에서 95%로 감소 되는데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

구분	호스트	도핑농도%	V	Cd/m^2	CIE _x	CIE _y	T ₉₅ (Hr)
비교예 1	BA1q	10	6.2	1470	0.665	0.334	40
실시예 1	2	10	4.6	2400	0.665	0.336	570
실시예 2	3	10	4.4	2260	0.666	0.334	430
실시예 3	4	10	4.9	2350	0.663	0.335	530
실시예 4	5	10	4.4	2210	0.663	0.333	410
실시예 5	6	10	3.9	2070	0.666	0.334	450
실시예 6	12	10	4.3	2150	0.664	0.335	430
실시예 7	13	10	4.2	2100	0.665	0.333	470
실시예 8	16	10	4.2	2260	0.663	0.335	450
실시예 9	17	10	4.0	2100	0.666	0.336	520
실시예 10	18	10	4.1	2050	0.665	0.334	470
실시예 11	25	10	4.4	2190	0.665	0.335	310
실시예 12	28	10	3.7	2230	0.664	0.336	350

실시예13	29	10	4.0	2300	0.663	0.335	330
실시예14	30	10	4.1	2010	0.636	0.335	450
실시예15	34	10	4.3	2260	0.663	0.334	345
실시예16	36	10	4.6	2310	0.666	0.336	370
실시예17	38	10	4.2	2020	0.664	0.335	300
실시예18	73	10	3.8	2270	0.665	0.336	320
실시예19	74	10	3.7	2180	0.665	0.336	420

[0756]

상기 [표 1]에서 보는 바와 같이 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 인광 발광성 호스트 재료로 많이 쓰이는 물질인 BA1q에 비하여 현저히 낮은 구동전압과 동시에 높은 발광효율 및 장수명을 갖는다.

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020150043571A	公开(公告)日	2015-04-23
申请号	KR1020130120936	申请日	2013-10-11
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
[标]发明人	KIM SU JIN 김수진 PARK SANG WOO 박상우 YANG BYUNG SUN 양병선 OH HYUN JU 오현주 YOO JUNG HO 유정호 LEE SE JIN 이세진		
发明人	김수진 박상우 양병선 오현주 유정호 이세진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D403/04 C07D403/10 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0071 C07D403/04 C07D403/10 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/0069 H01L51/5012 H01L51/5016 H01L51/5024		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由下式1-1至1-2表示的有机电致发光化合物，其中采用该有机电致发光元件的有机电致发光元件具有优异的发光效率并且可以在低电压下驱动，寿命长。[公式1-1] [公式1-2]

80
70
60
50
40
30
20
10