



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2017-0082296  
(43) 공개일자 2017년07월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)  
C07D 471/04 (2006.01) C07D 495/04 (2006.01)  
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(71) 출원인  
벽산페인트 주식회사  
서울특별시 금천구 가산디지털1로 219,904호(가산동, 벽산디지털밸리6차)

(52) CPC특허분류  
C09K 11/06 (2013.01)  
C07D 209/82 (2013.01)

(72) 발명자  
정국성  
서울특별시 강서구 양천로 489 우성아파트 102동 505호

(21) 출원번호 10-2016-0001527  
(22) 출원일자 2016년01월06일  
심사청구일자 2016년01월06일

김규성  
경기도 광명시 안현로 34 하안주공3단지아파트 311동 111호  
(뒷면에 계속)

(74) 대리인  
송두현, 강정빈

전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

**(57) 요약**

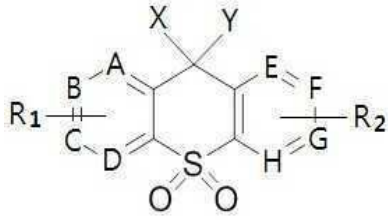
본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다:

(뒷면에 계속)

**대표도** - 도1



[화학식 1]



인광 호스트용 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 긴 수명과 전기 이동도 및 열적 안정성을 가질 수 있다.

(52) CPC특허분류

- C07D 471/04* (2013.01)
- C07D 495/04* (2013.01)
- H01L 51/0071* (2013.01)
- H01L 51/5012* (2013.01)
- H01L 51/5048* (2013.01)
- C09K 2211/1011* (2013.01)
- C09K 2211/1029* (2013.01)
- C09K 2211/1037* (2013.01)

**김미현**

충청남도 아산시 배방읍 배방로201번길 10 배방어  
울림아파트 102동 806호

(72) 발명자

**조남철**

인천광역시 부평구 안남로 272 금호타운 306동 50  
3호

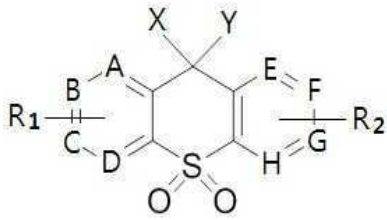
**명세서**

**청구범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물:

[화학식 1]



상기 식에서

A, B, C, D, E, F, G, 및 H 중에서 어느 하나 이상은 질소원자이며;

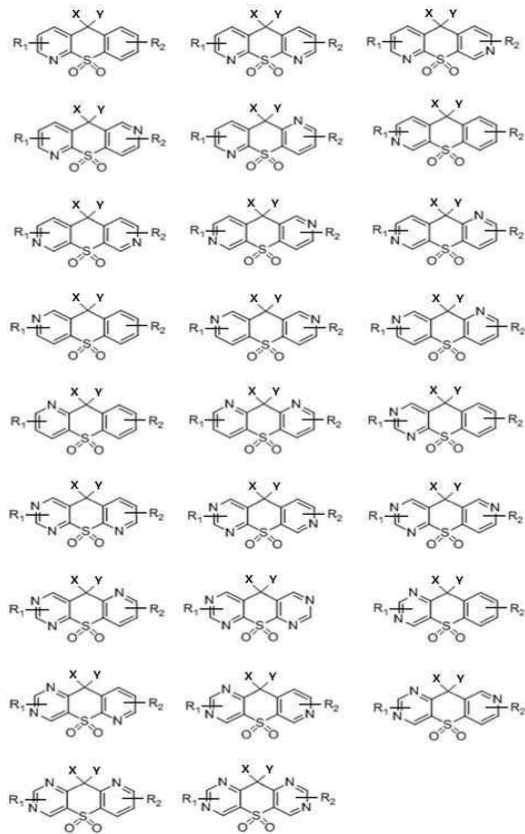
X와 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이다.

**청구항 2**

제2항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물은 하기의 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물:



상기 식에서

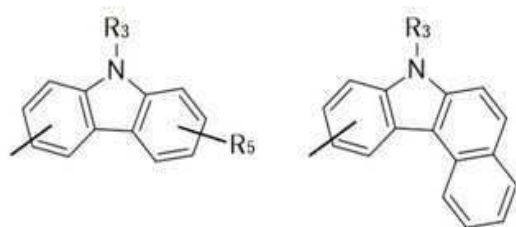
X와 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이다.

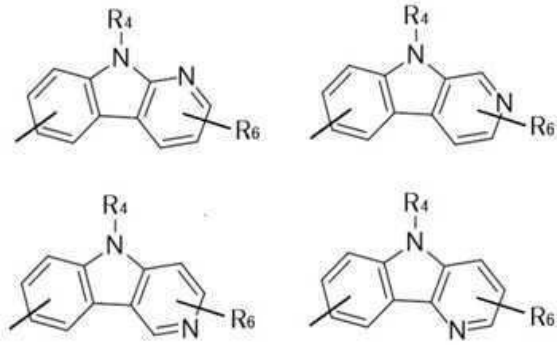
### 청구항 3

제2항에 있어서,

상기 치환 또는 비치환된 카바졸기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시되며,



상기 치환 또는 비치환된 카볼린기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시되며,

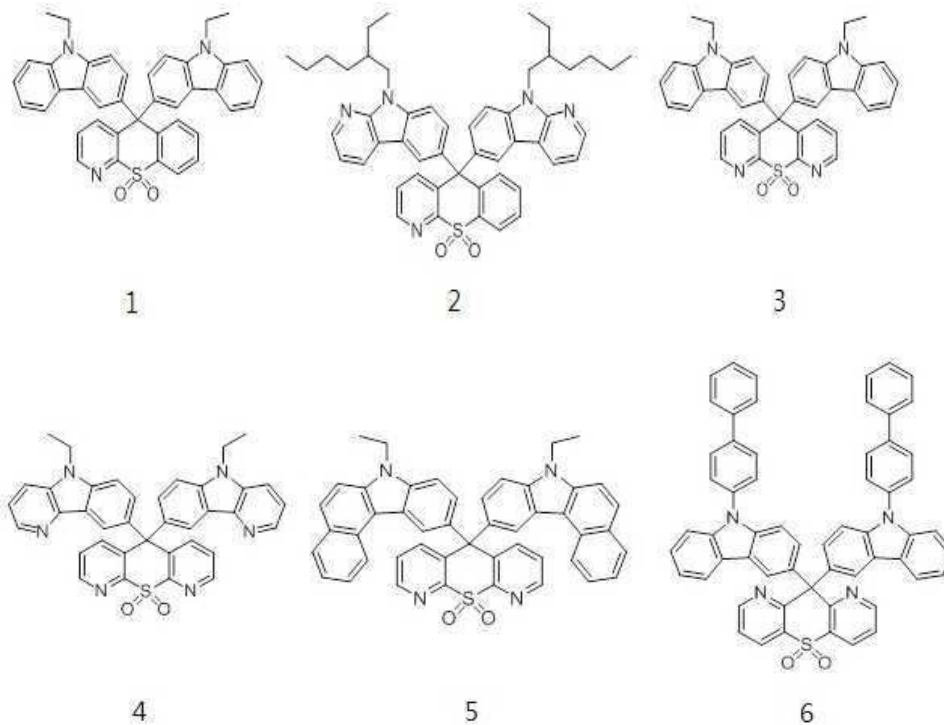


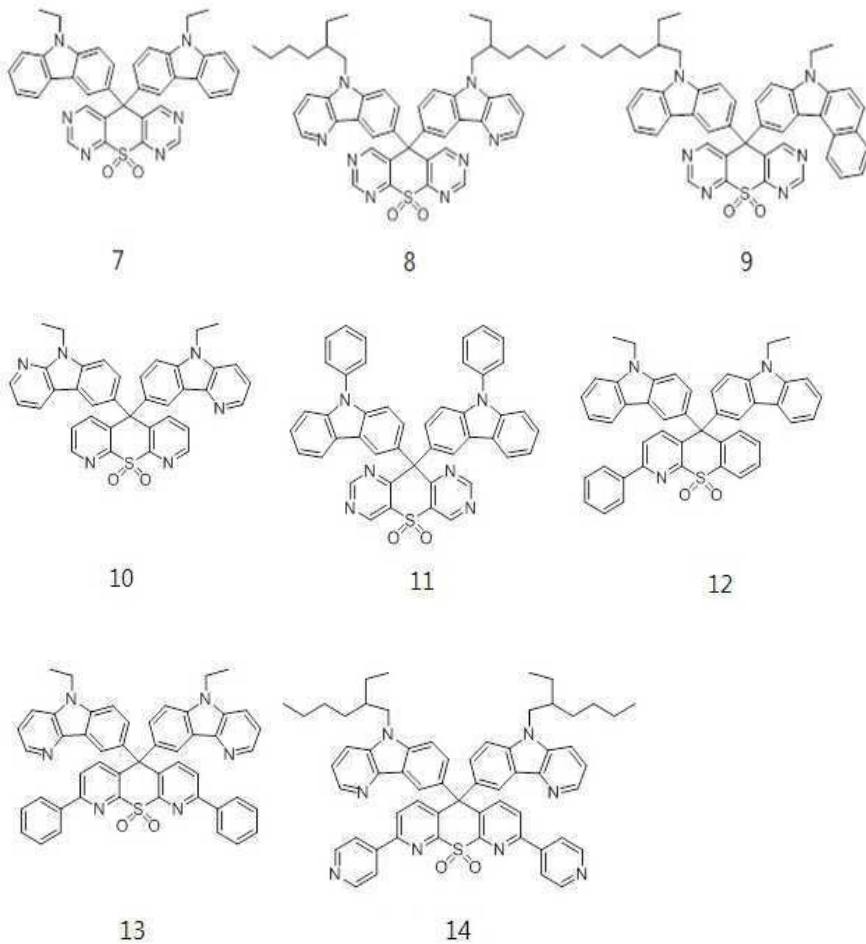
상기 화학식들에서, R3 내지 R6는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이고, 상기 R3 내지 R6의 작용기 중 서로 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물.

**청구항 4**

청구항 3에 있어서,

상기 인광 호스트용 화합물은 하기의 화합물 1 내지 14 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물:





**청구항 5**

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서,

상기 유기막이 제1항 내지 제4항 중 어느 하나의 항에 따른 인광 호스트용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 6**

제5항에 있어서,

상기 유기막은 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다. 보다 상세하게, 본 발명은 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물, 및 이를 포함시켜 색을 구현 하면서 우수한 발광효율을 갖는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0003] 전기발광소자(electroluminescent device : EL 소자)는 자발광형 표시소자로 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수 할 뿐만 아니라 응답 시간이 빠르다는 장점을 가지고 있다.

- [0004] EL 소자는 발광층(emitting layer) 형성용 재료에 따라 무기 EL 소자와 유기 EL 소자로 구분된다. 여기에서 유기 EL 소자는 무기 EL 소자에 비하여 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.
- [0005] 일반적인 유기 EL 소자는 기관 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가지고 있다. 여기에서 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 유기 화합물로 이루어진 유기 박막들이다.
- [0006] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 EL 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 상기 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송층을 경유하여 발광층에 이동된다. 한편, 전자는 캐소드로부터 전자 수송층을 경유하여 발광층에 주입되고 발광층 영역에서 캐리어들이 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변화되고, 이로 인하여 발광층의 분자가 발광함으로서 화상이 형성된다. 발광 재료는 그 발광 메커니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광 재료와 삼중항 상태를 이용하는 인광 재료로 나뉜다. 인광 재료는 일반적으로 무거운 원자를 함유하는 유기무기 화합물 구조를 가지고 있으며 무거운 원자에 의해 원래 금지 전이이던 삼중항 상태의 엑시톤이 허용 전이를 거쳐 인광 발광 하게 된다. 인광 재료는 75% 생성 확률을 갖는 삼중항 엑시톤을 사용할 수 있게 되어 25% 일중항 엑시톤을 이용하는 형광 재료보다 매우 높은 발광 효율을 가질 수 있다.
- [0007] 인광 재료를 이용한 발광층은 호스트 물질과 이로부터 에너지를 전이 받아 발광하는 도판트 물질로 구성되어 있는데, 도판트 물질로는 이리듐 금속 화합물을 이용한 여러 재료들이 보고 되고 있다. 이리듐 화합물을 이용한 유기 발광 재료에 대한 연구로는 프린스턴 대학, 남캘리포니아 대학 등에서 이리듐(Iridium), 플래티늄(platinum) 금속 화합물을 이용한 여러 인광 재료들이 발표되고 있으나, 좀 더 발광 특성이 우수하고 안정한 재료 개발이 진행되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0008] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2006-0113935호 (발명의 명칭: 전기발광 디바이스용 유기 소자, 공개일자: 2006년 11월 03일)

**발명의 내용**

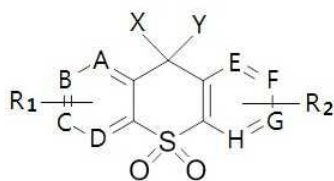
**해결하려는 과제**

- [0009] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물을 제공하는 것이다.
- [0010] 또한, 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물을 사용한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

- [0012] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물을 제공한다:

- [0013] [화학식 1]



- [0014]

- [0015] 상기 식에서
- [0016] A, B, C, D, E, F, G, 및 H 중에서 어느 하나 이상은 질소원자이며;
- [0017] X와 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;
- [0018] 상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이다.
- [0020] 또한, 본 발명은 한 쌍의 전극 사이에 구비되어 있는 유기막을 포함하고 있는 유기 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물을 포함하고 있는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

- [0022] 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 도너-억셉터-도너 (D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 하도록 설계 하면서, 특징적으로는 억셉터 역할의 중심부로 하나 이상의 질소원자가 치환된 티오잔텐(thioxanthene) 구조를 모핵으로 하고 모핵의 설폰(sulfone) 구조와 대응 되는 중심원자 주변에 도너 역할로 카바졸 또는 카볼린 화합물을 결합시켜 높은 삼중항 에너지(ET)를 가지면서 높은 유리전이 온도(Tg)와 분자량이 큰 비정형의 물질로 디자인되어, 상기 물질을 이용한 발광 소자는 우수한 발광 특성과 안정성을 가질 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

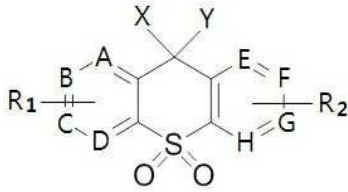
- [0024] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 나타낸 단면도이다.
- 도 2 내지 도8은 본 발명의 인광호스트 화합물들(1~4, 7, 11 및 12)에 대한 NMR 분석 그래프이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0025] 이하, 본 발명을 더욱 상세히 설명한다.
- [0026] 본 발명의 바람직한 실시 예를 첨부된 도면에 의하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 본 발명의 상세한 설명에 앞서, 이하에서 설명되는 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 안된다. 따라서, 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 가장 바람직한 일 실시예에 불과할 뿐이고 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들을 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형예들이 있을 수 있음을 이해하여야 한다.
- [0028] 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 HOMO-LUMO 간의 밴드갭을 크게 하기 위하여 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 설계한 것이며 특징적으로는 억셉터 역할의 중심부로 하나 이상의 질소원자가 치환된 티오잔텐 구조를 모핵으로 하여 모핵의 설폰 구조와 대응되는 중심원자 주변에 도너 역할로 카바졸 또는 카볼린 화합물이 결합된 구조이며, 대응 되는 중심원자 주변에 결합된 카바졸 또는 카볼린 화합물들은 1개 또는 2개로, 구조 내 아민과 고리환에 알킬 또는 오각 내지 육각 고리의 유도체가 치환된 화합물을 대칭 또는 비대칭 구조로 포함한다.
- [0029] 상기 모핵인 티오잔텐 구조에 치환된 하나 이상의 질소원자는 전자를 끌어당기는 역할을 수행함으로써 인광 호스트용 화합물의 밴드갭을 더 크게 하는 기능을 수행한다.

[0031] 구체적으로, 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 하기 화학식 1의 구조를 갖는다:

[0032] [화학식 1]



[0033]

[0034] 상기 식에서

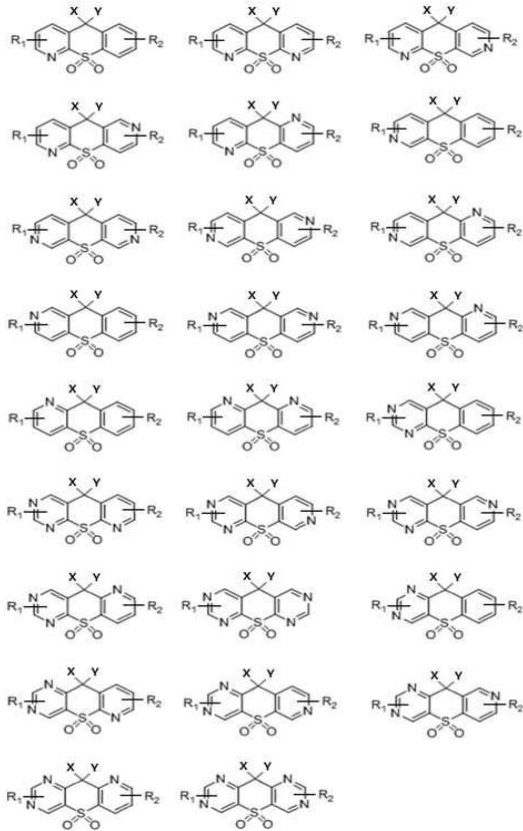
[0035] A, B, C, D, E, F, G, 및 H 중에서 어느 하나 이상은 질소원자이며;

[0036] X와 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

[0037] 상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이다.

[0038] 상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물은 한 분자내 밴드갭에 차이가 있는 도너-억셉터-도너 구조를 채택하여, 밴드갭이 3.0 eV 이상이 되어 에너지 전달이 우수하며, 이로 인한 높은 발광 효율을 나타낼 수 있다. 또한, 상술한 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물은 유기 발광 소자에 색을 구현하기 위해 사용될 수 있으며, 특히 청색을 구현하기 위해 사용될 수 있다.

[0040] 상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물로는 하기의 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 화합물들이 더욱 바람직하게 사용될 수 있다:



[0041]

[0042]

상기 식에서

[0043]

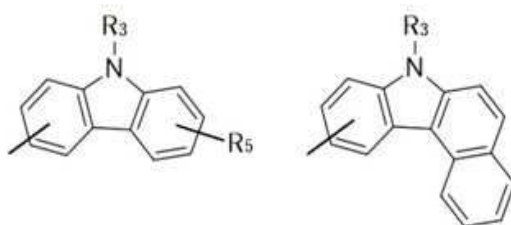
X와 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

[0044]

상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이다.

[0046]

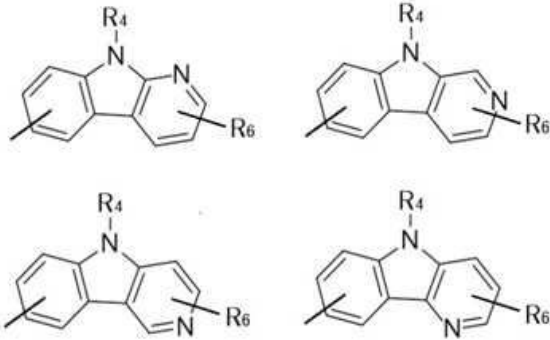
상기 치환 또는 비치환된 카바졸기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시될 수 있으며,



[0047]

[0049]

상기 치환 또는 비치환된 카볼린기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시될 수 있으며,



[0051]

[0053]

상기 화학식들에서, R3 내지 R6는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이고, 상기 R3 내지 R6의 작용기 중 서로 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0055]

상기 화학식들에서, "비치환된 알킬기" 또는 "비치환된 알콕시"는 그의 알킬부분이 탄소수 1 내지 14개의 알킬기(예를 들면, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 운데실, 도데실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 등등 및 이들의 이성체)를 의미하며, "치환된 알킬기" 또는 "치환된 알콕시"는 상술한 비치환된 알킬 부분의 수소 원자중 적어도 하나가 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, C1-C14의 알킬기, C2-C14의 알케닐기, C2-C14의 알키닐기, C6-C14의 아릴기, C7-C14의 아릴알킬기, C2-C14의 헤테로아릴기, 또는 C3-C14의 헤테로알킬기로 치환되는 것을 의미한다.

[0056]

또한, "비치환된 알케닐기"는 이중 결합이 적어도 하나 이상인 탄소수 2 내지 14개의 알케닐(예를 들면, 에텐, 프로텐, 부텐, 펜텐, 헥센, 등등 및 이들의 이성체)을 의미하며, "치환된 알케닐기"는 상술한 비치환된 알케닐기의 적어도 하나의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0057]

"비치환된 아릴기"는 단독 또는 조합하여 사용되어, 하나 이상의 고리를 포함하는 탄소수 6 내지 14개의 방향족 탄소 고리를 의미하며 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합될 수 있다. "치환된 아릴기"는 비치환된 아릴기중 적어도 하나의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0058]

"비치환된 아릴알킬기"는 상기 정의된 바와 같은 아릴기에서 수소 원자 중 일부가 저급알킬, 예를 들어 메틸, 에틸, 프로필 등과 같은 그룹으로 치환된 것을 의미한다. "치환된 아릴알킬기"는 상기 비치환된 아릴알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0059]

"비치환된 아릴옥시기"는 상기 정의된 바와 같은 아릴기에 산소가 치환된 것, 예를 들면 페닐옥시, 나프틸렌옥시, 디페닐옥시 등을 의미한다. "치환된 아릴옥시기"는 상기 비치환된 아릴옥시기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0060]

"비치환된 헤테로아릴기"는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리원자가 C인 고리원자수 2 내지 14의 1가 모노사이클릭 또는 비사이클릭 방향족 2가 유기 화합물을 의미하며, 그의 구체적인 예로는, 티에닐, 피리딜, 퓨릴(furyl) 등이 있다. "치환된 헤테로아릴기"는 상기 비치환된 헤테로아릴기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0061]

"비치환된 헤테로아릴알킬기"는 상술한 헤테로아릴기의 수소 원자중 일부가 저급알킬기로 치환된 것을

의미하며, "치환된 헤테로아릴알킬기"는 상기 비치환된 헤테로아릴알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0062] "비치환된 헤테로아릴옥시기"는 상기 정의된 바와 같은 헤테로아릴기에 산소가 결합된 것을 의미한다. "치환된 헤테로아릴옥시기"는 상기 비치환된 헤테로아릴옥시기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

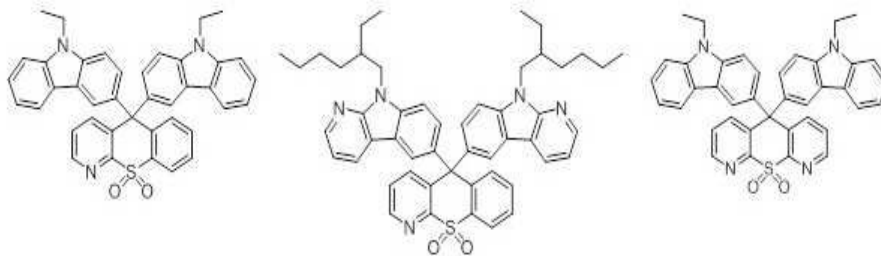
[0063] "비치환된 사이클로알킬기"는 탄소수 4 내지 14개의 1가 모노사이클릭을 의미하며, 구체적으로 사이클로헥실기, 사이클로펜틸기 등을 포함한다. "치환된 사이클로알킬기"는 상기 비치환된 사이클로알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환되는 것을 의미한다.

[0064] "비치환된 헤테로사이클로알킬기"는 N,O,P 또는 S중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리원자가 C인 고리원자수 1 내지 30개의 1가 모노사이클릭을 의미하며, 상기 사이클로알킬기의 수소 원자 일부가 저급 알킬기로 치환된 것을 의미한다. "치환된 헤테로사이클로알킬기"는 상기 비치환된 헤테로사이클로알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환되는 것을 의미한다.

[0065] "비치환된 알킬카르보닐기"의 구체적인 예로서, 아세틸, 에틸카르보닐, 이소프로필카르보닐, 페닐카르보닐, 나프탈렌카르보닐, 디페닐카르보닐, 시클로헥실카르보닐 등이 있고, "치환된 알킬카르보닐기"는 상기 비치환된 알킬카르보닐기중 적어도 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환되는 것을 의미한다.

[0066] "비치환된 아릴카르보닐기"의 구체적인 예로서, 페닐카르보닐, 나프탈렌카르보닐, 디페닐카르보닐, 등이 있고, "치환된 아릴카르보닐기"는 상기 비치환된 아릴카르보닐기중 적어도 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환되는 것을 의미한다.

[0068] 상기 인광 호스트용 화합물은 하기의 화합물 1 내지 14 중에서 선택되는 어느 하나인 것이 더욱 바람직하게 사용될 수 있다:

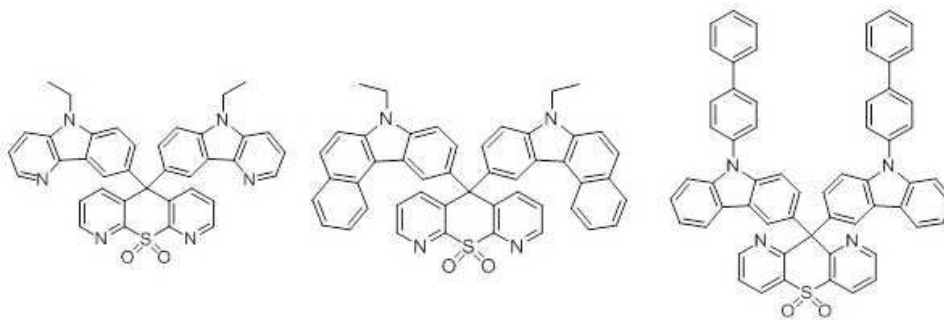


1

2

3

[0069]

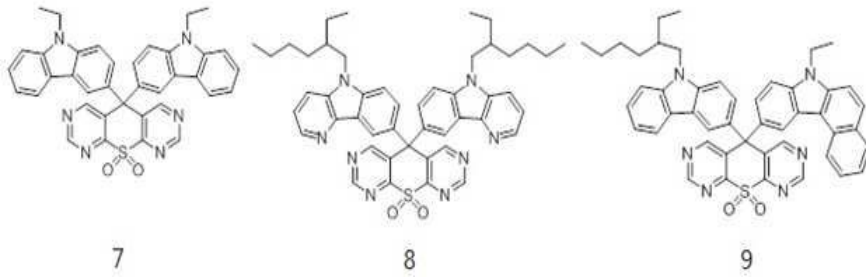


4

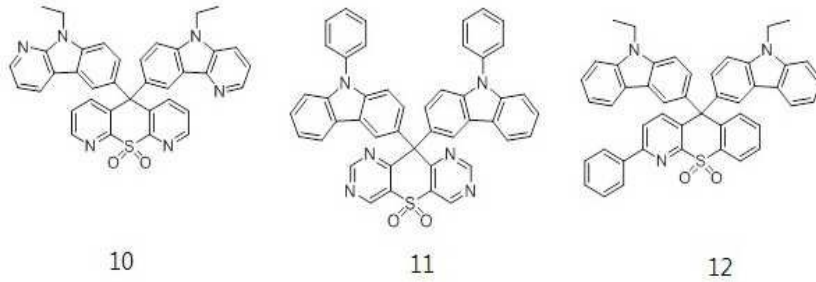
5

6

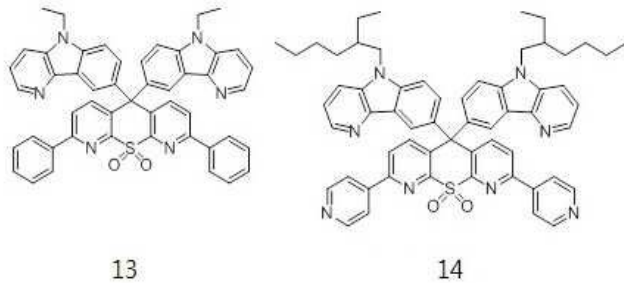
[0070]



[0071]



[0072]



[0073]

[0075]

또한, 본 발명은

[0076]

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

[0077]

상기 유기막은 발광층일 수 있다.

[0078]

이하, 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물을 채용한 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명한다.

[0079]

본 발명에 따른 유기 발광 소자는 통상의 발광 소자의 구조를 채용할 수 있으며, 필요에 따라 구조가 변경될 수 있다. 기본적으로 유기 발광 소자는 제 1 전극(애노드 전극)과 제 2 전극(캐소드 전극) 사이에 유기막(발광층)을 포함하는 구조를 가지며, 필요에 따라서, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 억제층, 전자 주입층 또는 전자 수송층이 더 포함될 수 있다. 본 발명의 발광 소자의 구조를 설명하기 위하여 도 1를 참조한다.

[0080]

도 1를 참조하면, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 애노드 전극(20)과 캐소드 전극(80) 사이에 발광층(50)을 포함하는 구조를 가지며, 애노드 전극(20)과 발광층(50) 사이에 정공 주입층(30)과 정공 수송층(40)을 포함하고 있으며, 또한, 발광층(50)과 캐소드 전극(80) 사이에 전자 수송층(50)과 전자 주입층(70)을 포함하고 있다.

[0081]

한편, 본 발명의 실시예에 따른 도 1의 유기 발광 소자는 다음과 같은 공정을 통해 제조되며, 이는 하나의 예를 상술하고 있는 것일 뿐 이 방법으로 한정되는 것은 아니다.

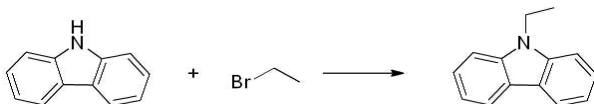
[0082]

먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드 전극(20)을 형성한다. 여기서, 기판(10)으로는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 기판을 사용할 수 있으며, 특히 투명성, 표면평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 또한, 상기 기판위에 형성된 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있지만, 이것으로 제한되는 것은 아니다.

- [0083] 상기 애노드 전극(20)의 상부에 정공 주입층(HIL)(30)을 선택적으로 형성한다. 이때 정공 주입층은 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법을 통해 형성한다. 정공 주입층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만 CuPc (구리 프탈로시아닌) 또는 IDE 406(Idemitsu Kosan사)이 사용될 수 있다.
- [0084] 이어서, 상기 정공 주입층(30) 상부에 상기 정공 수송층(HTL)(40)을 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법을 통해 형성한다. 상기 정공 수송층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, N, N'-디페닐-N, N'-비스(1-나프틸)-1,1'-비페닐-4,4'-디아민(NPB), N, N'-비스(3-메틸페닐)-N, N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N, N'-디(나프탈렌-1-일)-N, N'-디페닐벤지딘, N, N'-디(나프탈렌-1-일)-N, N'-디페닐-벤지딘 :  $\alpha$ -NPD) 등이 사용될 수 있다.
- [0085] 이어서 정공 수송층(40) 상부에 발광층(EML)(50)을 형성한다. 상기 발광층 형성 재료로는 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물 중에서 선택된 1종 이상을 발광 호스트 물질로 포함할 수 있으며, 단층 또는 2층 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 이때, 화학식 1의 화합물은 단독으로 포함되거나, 당 업계에 공지된 기타 화합물, 예를 들면 청색 발광 도판트(FIrppy 또는 FIrpic 등의 이리듐 화합물)등과 혼합되어 포함될 수 있다. 상기 발광층에 인광 호스트용 화합물은 발광층을 구성하는 물질 총 중량에 기초하여 1 내지 95중량%의 범위 내에서 포함될 수 있다.
- [0086] 상기 인광 호스트용 화합물은 진공 증착 방법으로 형성될 수 있으며, 또한 스핀 코팅과 같은 습식공정을 통해서 증착될 수 있으며, 레이저 열전사법(LITI)이 이용될 수도 있다.
- [0087] 선택적으로 상기 발광층(50)의 상부에는 발광 물질에서 형성되는 엑시톤이 전자수송층으로 이동되는 것을 막아 주거나 정공이 전자 수송층(60)으로 이동되는 것을 막아주는 정공 억제층(HBL)이 형성될 수 있으며, 정공 억제층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, 페난트롤린계 화합물(예를 들면, BCP) 등을 사용할 수 있다. 이것은 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법을 통해 형성될 수 있다.
- [0088] 또한 발광층(50)위에 전자 수송층(ETL)(60)이 형성될 수 있으며, 이는 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법이 이용될 수 있다. 전자 수송층용 재료로서는 특별히 제한되지 않지만 TBPI, 알루미늄 착물(예를 들면, Alq3(트리스(8-퀴놀리놀라토)-알루미늄))을 사용할 수 있다.
- [0089] 상기 전자 수송층(60) 상부에 전자 주입층(EIL)(70)이 진공증착 또는 스핀코팅과 같은 방법을 이용하여 형성될 수 있으며, 전자 주입층(70)용 재료로는 특별히 제한되지 않지만 LiF, NaCl, CsF 등의 물질을 이용할 수 있다.
- [0090] 이어서, 전자 주입층(70) 상부에 캐소드 전극(80)이 진공 증착을 통하여 형성됨으로써 발광 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등이 이용된다.
- [0091] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 도 1에 나타난 바와 같은 적층 구조를 가지며, 필요에 따라서 한층 또는 2층의 중간층, 예를 들면 정공 억제층 등을 더 형성하는 것도 가능하다. 또한 발광 소자의 각 층의 두께는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 범위에서 필요에 따라 결정될 수 있다.
- [0092] 이하, 본 발명을 실시예를 들어 더욱 상세히 설명하지만, 본 발명이 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0094] **합성예 1: 9H-에틸-카바졸의 합성**

[0095] **[반응식 1]**

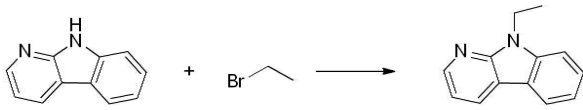


[0096]

[0097] 테트라하이드로퓨란 30mL에 9H-카바졸 10g(59.8mmol)을 가하고 0°C로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g (72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 후 반응 용액에 메틸렌클로라이드 100mL를 가하고 20% 소금물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적 화합물 9H-에틸-카바졸 10.8g(92.3%)을 얻었다.

[0099] **합성예 2: 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성**

[0100] **[반응식 2]**

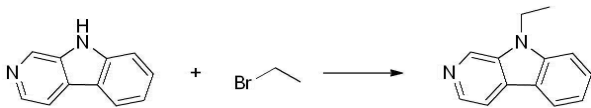


[0101]

[0102] 테트라하이드로퓨란 30mL에 알파-카볼린 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g (72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인한 다음 상온으로 한 후 반응 용액에 에틸아세테이트 100mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적 화합물 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 9.93g(84.3%)을 얻었다.

[0104] **합성예 3: 9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인들의 합성**

[0105] **[반응식 3]**



[0106]

[0107] 테트라하이드로퓨란 30mL에 베타-카볼린 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g (72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 2와 동일한 방법으로 처리하여 목적 화합물 9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인돌 8.22g(69.8%)을 얻었다.

[0109] **합성예 4: 5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인들의 합성**

[0110] **[반응식 4]**

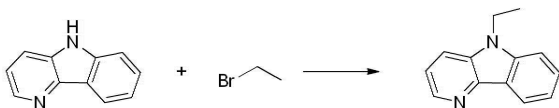


[0111]

[0112] 테트라하이드로퓨란 30mL에 감마-카볼린 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g (72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 2와 동일한 방법으로 처리하여 목적 화합물 5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인돌 8.6g(73.0%)을 얻었다.

[0114] **합성예 5: 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인들의 합성**

[0115] **[반응식 5]**

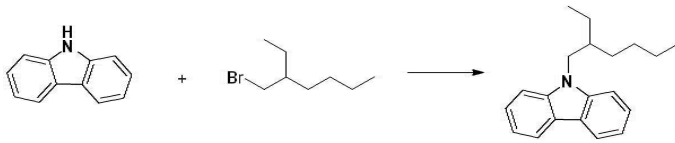


[0116]

[0118] 테트라하이드로퓨란 30mL에 델타-카볼린 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g (72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 2와 동일한 방법으로 처리하여 목적 화합물 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 10.2g(86.6%)을 얻었다.

[0120] **합성예 6: 9-(2-에틸헥실-9H-카바졸의 합성**

[0121] **[반응식 6]**

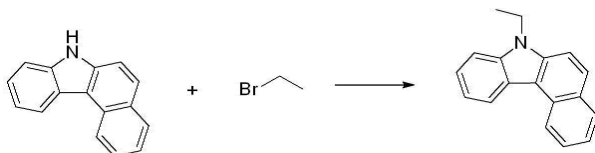


[0122]

[0123] 테트라하이드로퓨란 100mL에 9H-카바졸 15g(90mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 3-(브로모메틸)헵탄 26.1g (135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 후 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 300mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헵탄으로 결정화하여 백색의 목적 화합물 9-(2-에틸헥실-9H-카바졸 21.6g(85.9%)을 얻었다.

[0125] **합성예 7: 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸의 합성**

[0126] **[반응식 7]**

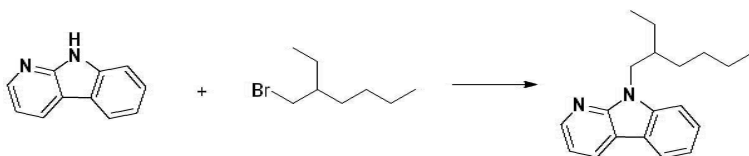


[0127]

[0128] 테트라하이드로퓨란 150mL에 7H-벤조[c]카바졸 19.6g(90mmol)을 질소 분위기 하에서 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 14.7g (135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 후 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 600mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헵탄으로 결정화하여 목적 화합물 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 18.1g(82.2%)을 얻었다.

[0130] **합성예 8: 9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성**

[0131] **[반응식 8]**

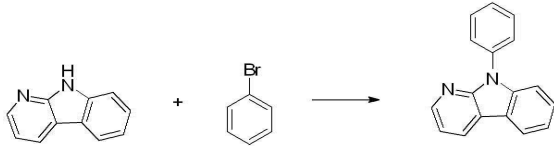


[0132]

[0133] 테트라하이드로퓨란 100mL에 알파-카볼린 15g(89.2mmol)을 가하고 0℃로 냉각한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 3-(브로모메틸)헵탄 26.1g(135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 500mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 차가운 디클로메탄과 소량의 n-헵탄으로 결정화하여 목적 화합물 9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인들 16.2g(64.3%)을 얻었다.

[0135] **합성예 9: 9-페닐-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성**

[0136] [반응식 9]

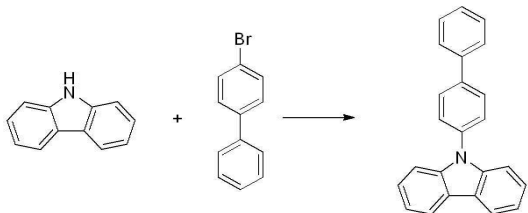


[0137]

[0138] 9H-피리도[2,3-b]인돌 12g(71mmol), 브로모벤젠 12.32g(78mmol), 소듐-t-부톡사이드 9.05g(94mmol)을 질소 분위기 하에서 톨루엔 200mL에 가하고 상온에서 30분 교반한 후 60℃로 냉각한 다음 트리스(디벤질리텐아세톤) 디팔라디움(0) 0.5g과 트리스-t-부틸포스핀 0.1g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 24시간 반응 시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 여과하고 여액을 모두 감압 증류하고 얻어진 잔사에 n-헵탄을 가하고 2시간 교반하여 생성된 결정을 여과하여 얻어진 고형물을 에틸아세테이트와 n-헥산 2:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 9-페닐-9H-피리도[2,3-b]인 15.2g(87.7%)을 얻었다.

[0140] 합성예 10: 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-5H-카바졸의 합성

[0141] [반응식 10]

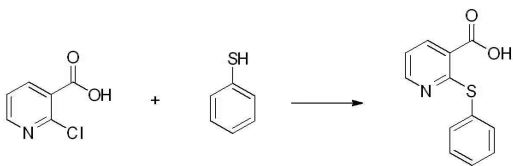


[0142]

[0143] 9H-카바졸 10g(60mmol), 4-브로모-1,1'-바이페닐 18.2g(78mmol), 소듐-t-부톡사이드 9.05g(94mmol)을 질소 분위기 하에서 크실렌 300mL에 가하고 상온에서 30분 교반한 후 60℃로 냉각한 다음 트리스(디벤질리텐아세톤) 디팔라디움(0) 0.5g과 트리스-t-부틸포스핀 0.1g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 30시간 반응 시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 여과하고 여액을 모두 감압 증류하고 얻어진 잔사에 n-헵탄을 가하고 2시간 교반하여 생성된 결정을 여과하여 얻어진 고형물을 에틸아세테이트와 n-헥산 4:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-5H-카바졸 19.5g(78.2%)을 얻었다.

[0145] 합성예 11: 2-(페닐티오)니코티닉 에시드의 합성

[0146] [반응식 11]

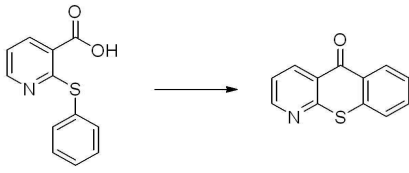


[0147]

[0148] 2-크로로니코티닉 에시드 5g(32mmol), 티오펜올 4.2g(38mmol)을 디메틸포름아마이드 50 mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 2.7g(19mmol)과 포타슘 카보네이트 6.6g(48mmol)을 가하여 150℃에서 18시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 디클로로메탄 200mL를 가하고 물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적 화합물 2-(페닐티오)니코티닉 에시드 5.6g(수율 76%)을 얻었다.

[0149] 합성예 12: 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온의 합성

[0150] [반응식 12]

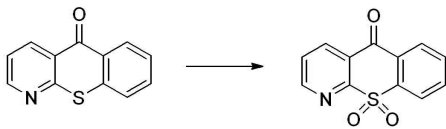


[0151]

[0152] 2-(페닐티오)니코티닉 에시드 5.6g(24mmol)을 폴리포스포릭 에시드 70mL에 가하고 120°C에서 4시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 에탄올로 재결정하여 목적 화합물 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 4.3g(수율 83%)을 얻었다.

[0154] 합성예 13: 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드의 합성

[0155] [반응식 13]

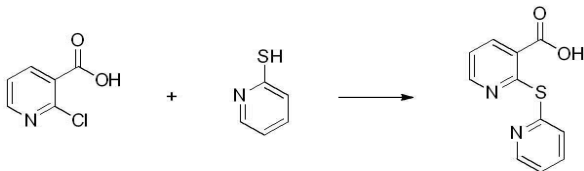


[0156]

[0157] 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 4.3g(20mmol)을 빙초산 100mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 4.27g(44mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 4.1g(수율 83%)을 얻었다.

[0159] 합성예 14: 2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드의 합성

[0160] [반응식 14]

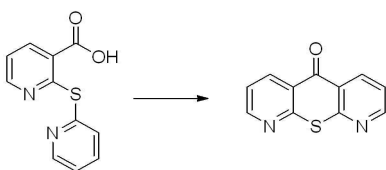


[0161]

[0162] 2-클로로니코티닉 에시드 5g(32mmol), 2-머캅토피리딘 4.2g(38mmol)을 디메틸포름아마이드 80mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 2.7g(19mmol)과 포타시움 카보네이트 6.6g(48mmol)을 가하여 150°C에서 24시간 강하게 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 디클로로메탄 500mL를 가하고 물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적 화합물 2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드 4.2g(수율 57%)을 얻었다.

[0164] 합성예 15: 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온의 합성

[0165] [반응식 15]



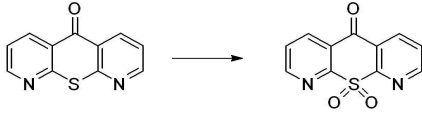
[0166]

[0167] 2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드 4.2g(18mmol)을 폴리포스포릭 에시드 60mL에 가하고 120°C에서 6시간 동안

반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 에틸알코올로 재결정하여 목적 화합물 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 3.1g(수율 80.3%)을 얻었다.

[0169] **합성예 16: 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드의 합성**

[0170] **[반응식 16]**

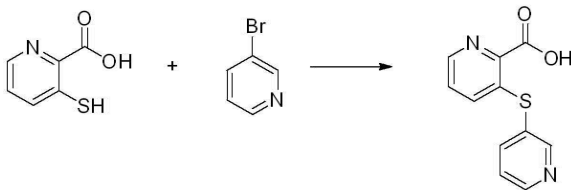


[0171]

[0172] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 3.1g(14mmol)을 빙초산 70mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 3g(30.8mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 3.1g (수율 87%)을 얻었다.

[0174] **합성예 17: 3-(피리딘-3-일티오)피콜리닉 에시드의 합성**

[0175] **[반응식 17]**

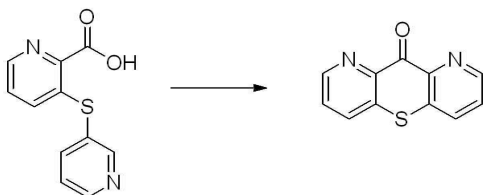


[0176]

[0177] 5-머캅토피리미딘-4-카르복실릭 에시드 5g(32.2mmol), 5-브로모피리미딘 24g(152mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 10.8g(76mmol)과 포타시움 하이드록사이드 14.4g(256mmol)을 가하여 150°C에서 48시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 에틸아세테이트 800mL를 가하고 물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 감압 증류하여 얻어진 잔사를 헥산과 에틸에테르 20:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 3-(피리딘-3-일티오)피콜리닉 에시드 6.9g(수율 19.5%)을 얻었다.

[0179] **합성예 18: 10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘-10-온의 합성**

[0180] **[반응식 18]**

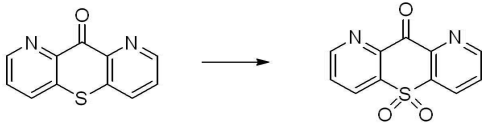


[0181]

[0183] 3-(피리딘-3-일티오)피콜리닉 에시드 6.9g(30mmol)을 폴리포스포릭 에시드 150mL에 가하고 120°C에서 30시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 이소부틸케톤으로 재결정하여 여과하고 차가운 메탄올로 세척하여 얻어진 고형물을 클로로에탄과 n-헥산 1:1 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘-10-온 2.1g(수율32.4%)을 얻었다.

[0185] **합성예 19: 10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘-10-온 5,5-디옥사이드의 합성**

[0186] [반응식 19]

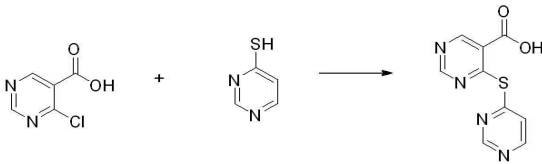


[0187]

[0188] 10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘-10-온 2g(9.3mmol)을 빙초산 50mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 1.9g(18.3mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 5,5-디옥사이드 1.92g (수율 83.8%)을 얻었다.

[0190] **합성예 20: 4-(피리미딘-4-일티오)피리미딘-5-카르보실릭 에시드의 합성**

[0191] [반응식 20]

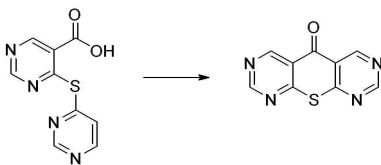


[0192]

[0193] 4-클로로피리미딘-5-카르보실릭 에시드 5g(31.5mmol), 피리미딘-4-티올 4.2g(38mmol)을 디메틸포름아마이드 30mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 2.7g(19mmol)과 포타시움 카보네이트 6.6g(48mmol)을 가하여 150°C에서 30시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 에틸아세테이트 150mL를 가하고 물로 2회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 감압 증류하여 얻어진 잔사를 헥산과 에틸에테르 10:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 4-(피리미딘-4-일티오)피리미딘-5-카르보실릭 에시드 2.8g(수율 38%)을 얻었다.

[0195] **합성예 21: 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온의 합성**

[0196] [반응식 21]

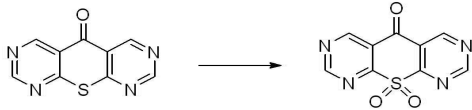


[0197]

[0199] 4-(피리미딘-4-일티오)피리미딘-5-카르보실릭 에시드 2.5g(10.7mmol)을 폴리포스포릭 에시드 60mL에 가하고 120°C에서 6시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 이소부틸알코올로 재결정하여 목적 화합물 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 1.8g(수율80%)을 얻었다.

[0201] **합성예 22: 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드의 합성**

[0202] [반응식 22]

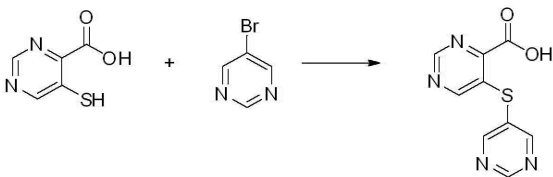


[0203]

[0205] 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 1.8g(8.3mmol)을 빙초산 50mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 1.8g(18.3mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드 1.7g (수율 82.4%)을 얻었다.

[0207] 합성예 23: 5-(피리미딘-5-일티오)피리미딘-4-카르복실릭 에시드

[0208] [반응식 23]

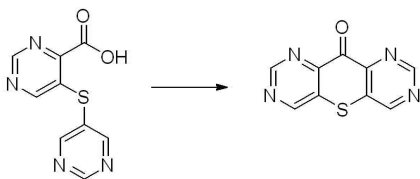


[0209]

[0210] 5-머캅토피리미딘-4-카르복실릭 에시드 5g(32mmol), 5-브로모피리미딘 6g(38mmol)을 디메틸포름아마이드 50 mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 2.7g(19mmol)과 포타시움 하이드록사이드 3.6g(64mmol)을 가하여 150°C에서 30시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 염산으로 pH를 5-6으로 맞추고 클로로포름 300mL를 가하고 물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 여과하여 얻어진 고형물을 클로로포름과 n-헥산을 5:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 5-(피리미딘-5-일티오)피리미딘-4-카르복실릭 에시드 3.2g(수율 42.3%)을 얻었다.

[0212] 합성예 24: 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온의 합성

[0213] [반응식 24]

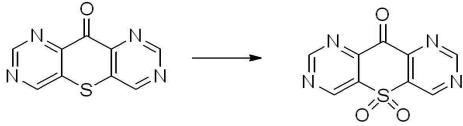


[0214]

[0215] 5-(피리미딘-5-일티오)피리미딘-4-카르복실릭 에시드 2.3g(10mmol)을 폴리포스포릭 에시드 50mL에 가하고 120°C에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 6-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 이소부틸케톤로 재결정하여 여과하고 차가운 메탄올로 세척하여 목적 화합물 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 1.8g(수율83.4%)을 얻었다.

[0217] 합성예 25: 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 5,5-디옥사이드의 합성

[0218] [반응식 25]

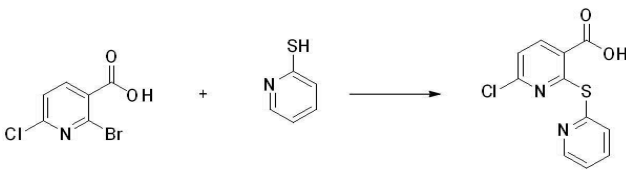


[0219]

[0220] 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 1.8g(8.3mmol)을 빙초산 50mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 1.8g(18.3mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 5,5-디옥사이드 1.5g (수율 72.8%)을 얻었다.

[0222] 합성예 26: 6-클로로-2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드의 합성

[0223] [반응식 26]

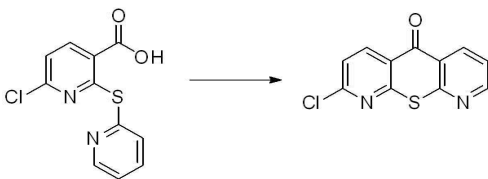


[0224]

[0225] 2-브로모-6-클로로니코티닉 에시드 5g(21.1mmol), 피리딘-2-티올 2.8g(25.3mmol)을 디메틸포름아마이드 50mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 1.8g(12.5mmol)과 포타시움 카보네이트 4.4g(31.7mmol)을 가하여 150°C에서 40시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 디클로로메탄 400mL를 가하고 물로 2회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 감압 증류하여 얻어진 잔사를 디클로메탄과 헥산 4:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 6-클로로-2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드 2.5g(수율 43.5%)을 얻었다.

[0227] 합성예 27: 2-클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온의 합성

[0228] [반응식 27]

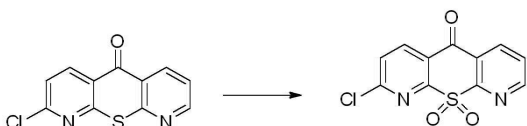


[0229]

[0230] 6-클로로-2-(피리딘-2-일티오)니코티닉 에시드 2.5g(10mmol)을 폴리포스포릭 에시드 60mL에 가하고 120°C에서 8시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 이소부틸알코올로 재결정하여 목적 화합물 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 1.8g(수율80%)을 얻었다.

[0232] 합성예 28: 2-클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드의 합성

[0233] [반응식 28]



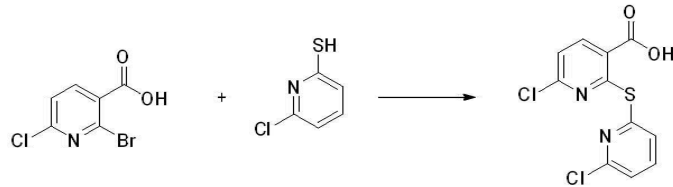
[0234]

[0235] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 1.8g(7.24mmol)을 빙초산 50mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산

화수소 1.55g(16mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 2-클로로-5H-티오피라노 [2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드 1.6g (수율 78.8%)을 얻었다.

[0237] **합성예 29: 6-클로로-2-((6-클로로피리딘-2-일)티오)니코티닉 에시드의 합성**

[0238] [반응식 29]

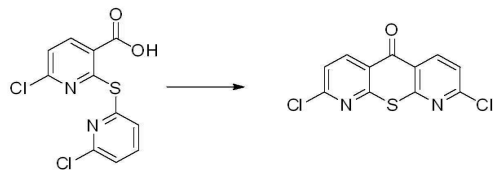


[0239]

[0240] 2-브로모-6-클로로니코티닉 에시드 10g(42.3mmol), 6-클로로피리딘-2-티올 7.4g(50.8mmol)을 디메틸포름아미드 200mL에 가하고 30분간 교반한 후 커피(I)브로마이드 3.64g(25.4mmol)과 포타슘 카보네이트 8.8g(63.8mmol)을 가하여 150°C에서 48시간 가열 교반하였다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 초산으로 pH를 5-6으로 맞추고 디클로로메탄 800mL를 가하고 물로 3회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 감압 증류하여 얻어진 잔사를 디클로로메탄과 헥산 10:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 6-클로로-2-((6-클로로피리딘-2-일)티오)니코티닉 에시드 8g(수율 62.8%)을 얻었다.

[0242] **합성예 30: 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온의 합성**

[0243] [반응식 30]

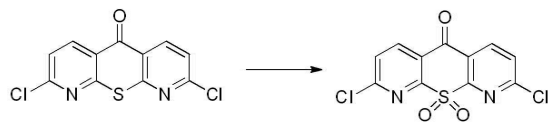


[0244]

[0245] 6-클로로-2-((6-클로로피리딘-2-일)티오)니코티닉 에시드 8g(26.6mmol)을 폴리포스포릭 에시드 80mL에 가하고 120°C에서 8시간 동안 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 조절한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 메탄올로 재결정하여 목적 화합물 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 5.8g(수율77.2%)을 얻었다.

[0247] **합성예 31: 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드의 합성**

[0248] [반응식 31]

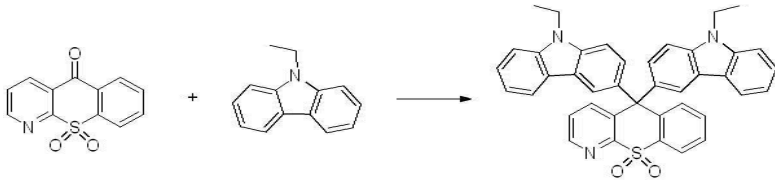


[0249]

[0250] 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 5g(17.7mmol)을 빙초산 80mL에 넣고 30분간 교반 한 후 35% 과산화수소 3.77g(38.9mmol)을 가하고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종결을 확인하고 상온에서 1시간 동안 교반하여 생성된 침전물을 여과하고, 과량의 n-헥산으로 세척 한 다음 건조하여 목적 화합물 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드 4.1g (수율 73.8%)을 얻었다.

[0252] **합성예 32: 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-옥사이드의 합성(화합물 1)**

[0253] [반응식 32]



[0254]

[0255] 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 10g(40.8mmol)과 9-에틸-9H-카바졸 17.5g(89.7mmol)을 디클로로메탄 200mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 28.9g(204mmol)을 메탄설포닉에시드 345g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 24시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 800mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척한 다음, 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 n-헥산 1:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-옥사이드 5.8g(수율 56%)을 얻었다(도 2 참조).

[0257] 합성예 33: 5,5-(9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 2)

[0258] [반응식 33]

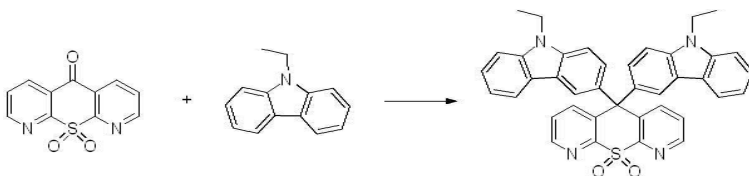


[0259]

[0260] 5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12.2mmol)과 9-에틸-9H-카바졸 7.5g(27mmol)을 디클로로에탄 80mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.7g(61mmol)을 메탄설포닉에시드 100g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 22시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 400mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척한 다음, 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 n-헥산 3:2 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 5,5-(9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드 5g(수율 52.4%)을 얻었다(도 3 참조).

[0262] 합성예 34: 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 3)

[0263] [반응식 34]

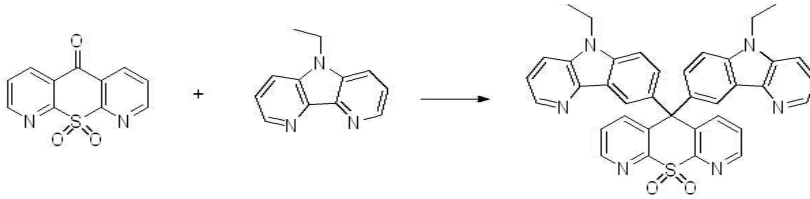


[0264]

[0265] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12.2mmol)과 9-에틸-9H-카바졸 5.3g(27mmol)을 디클로로메탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.7g(61mmol)을 메탄설포닉에시드 100g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 합성예 32와 같은 방법으로 처리하여 목적 화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드 3.9g(수율 51.8%)을 얻었다(도 4 참조).

[0267] 합성예 35: 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 4)

[0268] [반응식 35]

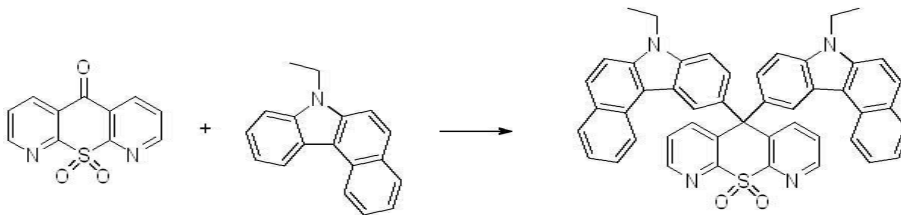


[0269]

[0270] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12.2mmol)과 5-에틸-5H-피롤로[3,2-b:4,5-b']디피리딘 5.3g(27mmol)을 디클로로메탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.7g(61mmol)을 메탄설포닉에시드 100g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 합성예 33과 같은 방법으로 처리하여 목적 화합물 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드 4.1g(수율 54.6%)을 얻었다(도 5 참조).

[0272] 합성예 36: 5,5-비스(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 5)

[0273] [반응식 36]



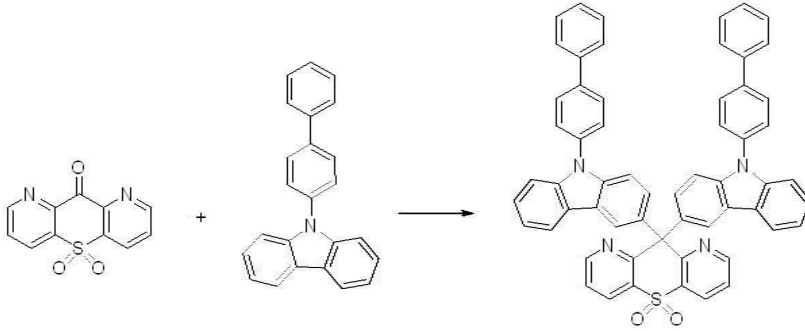
[0274]

[0276] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12.2mmol)과 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 6.6g(27mmol)을 디클로로에탄 120mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.7g(61mmol)을 메탄설포닉에시드 100g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 40시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 고형물을 에틸아세테이트와 n-헥산 10:1 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 5,5-비스(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드 3.1g(수율 35.4%)을 얻었다.

[0278] <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, DMSO d<sub>6</sub>): δ = 1.29-1.31(t, 6H, CH<sub>3</sub>), 4.53-4.57(q, 4H, CH<sub>2</sub>), 6.88-6.97(m, 2H, indol H), 7.02-7.07(m, 2H, pyridine H), 7.56-7.66(m, 6H, indol H), 7.65-7.67(m, 4H, naph- H), 7.85-7.86(m, 2H, indol H), 8.16-8.17(m, 2H, naph- H), 8.54-8.67(m, 4H, pyridine H, 2H naph- H), ppm.

[0280] 합성예 37: 10,10-비스(9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘 5,5-옥사이드의 합성(화합물 6)

[0281] [반응식 37]



[0282]

[0283] 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 5,5-디옥사이드 1.5g(6mmol)과 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸 4.2g(13mmol)을 디클로로에탄 50mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 4.3g(30mmol)을 메탄설포닉에시드 45g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 100mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 차가운 에탄올로 세척한 다음, 얻어진 고형물을 클로로에탄과 n-헥산 3:2 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 10,10-비스(9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘 5,5-옥사이드 2.7g(수율 52.4%)을 얻었다.

[0285]

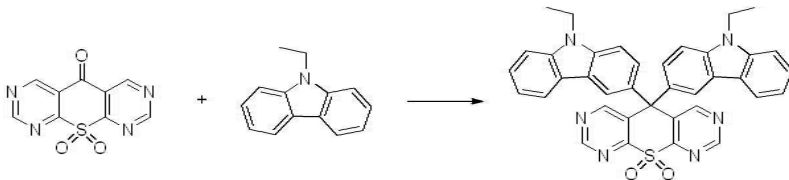
<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, DMSO d<sub>6</sub>): δ = 7.32-7.35(m, 2H, indol H), 7.50-7.63(m, 2H, indol H), 7.63-7.64 (m, 2H, pyridine H), 7.33-7.50(m, 4H, indol H), 7.41-7.53(m, 10H, phe- H), 7.69-7.79(m, 4H phe- H), 7.50-7.63(m, 2H, indol H), 8.36-8.88(m, 4H, pyridine H), ppm.

[0287]

합성예 38: 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 7)

[0288]

[반응식 38]



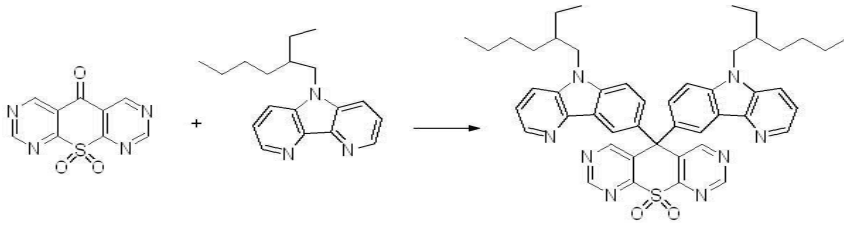
[0289]

[0290] 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12mmol)과 9-에틸-9H-카바졸 4.7g(24mmol)을 디클로로메탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.5g(60mmol)을 메탄설포닉에시드 90g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 500mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척한 다음, 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 n-헥산 5:1 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드 3g(수율 40.4%)을 얻었다(도 6 참조).

[0292]

합성예 39: 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 8)

[0293] [반응식 39]



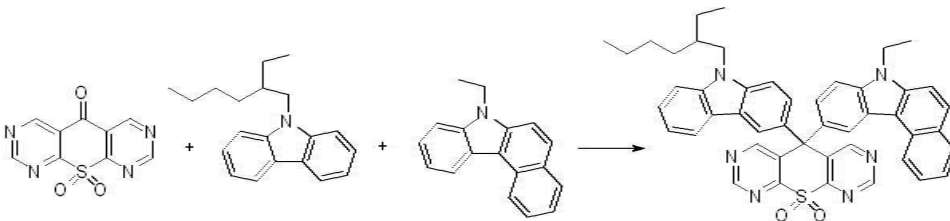
[0294]

[0295] 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드 3g(12mmol)과 5-(2-에틸헥실)-5H-피롤로[3,2-b:4,5-b']디피리딘 6.75g(24mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 8.5g(60mmol)을 메탄설포닉에시드 90g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 합성에 35와 동일한 방법으로 처리하여 목적 화합물 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드 3.63g(수율 38.2%)을 얻었다.

[0297] <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 0.90-0.93(t, 12H, CH<sub>3</sub>), 1.25-1.26(m, 8H, CH<sub>2</sub>), 1.32-1.34(st, 4H, CH<sub>2</sub>), 1.50-1.51(p, 2H, CH), 1.55-1.56(p, 4H, CH<sub>2</sub>), 3.68-3.92(m, 4H, N-CH), 7.22-7.23(m, 2H, indol H), 7.56-7.58(m, 2H, indol H), 7.96-7.98(m, 4H, indol H), 8.35-8.37(m, 2H, indol H), 8.35-8.36(s, 2H, pyrimidine H), 9.35-9.36(s, 2H, pyrimidine H), ppm.

[0299] 합성예 40: 5-(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5-(9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 9)

[0300] [반응식 40]



[0301]

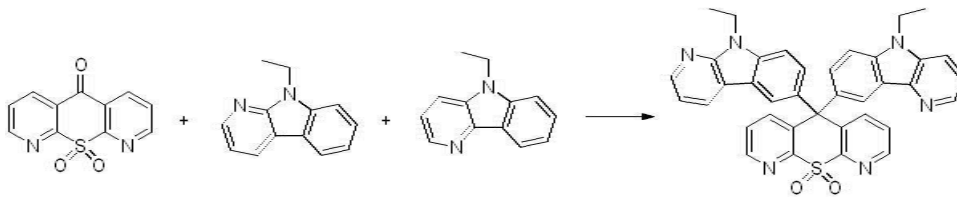
[0303] 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드 10g(40.3mmol)과 5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5-온 10,10-디옥사이드 17g(60.5mmol), 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 16g(60.5mmol)을 질소 분위기 하에서 디클로로에탄 200mL에 모두 가하고 환류시킨다. 환류 상태 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 29g(200mmol)을 메탄설포닉에시드 340g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 48시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 합성에 38과 동일한 방법으로 처리하여 목적 화합물 5-(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5-(9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드 9.56g(수율 31.4%)을 얻었다.

[0305] <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 0.90-0.93(t, 6H, CH<sub>3</sub>), 1.29-1.30(t, 3H, CH<sub>3</sub>), 1.25-1.33(m 6H, CH<sub>2</sub>), 1.51-1.52(st, 1H, CH), 1.54-1.55(st, 1H, CH<sub>2</sub>) 3.94-3.96(m, 2H, N-CH), 4.53-4.54(q, 2H, N-CH), 7.29-7.30(m, 1H, indol H), 7.50-7.69(m, 7H, indol H, naph- H), 7.77-8.02(m, 4H, indol H), 8.16-8.17(m, 2H, naph- H), 8.32-8.33(m, 2H, indol H), 8.55-8.56(s, 2H, pyrimidine H), 9.33-9.34(s, 2H, pyrimidine H), ppm.

[0307] 합성예 41: (5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5-(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오피라노[2,3-

**b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 10)**

[0308] [반응식 41]



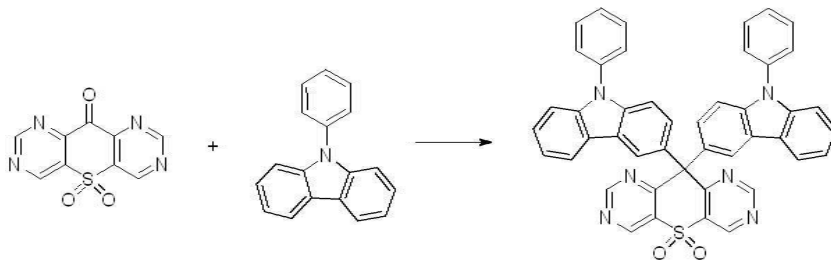
[0309]

[0310] 5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 10g(41mmol)과 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 12.2g(62mmol), 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 12.2g(0.062mmol)을 질소 분위기 하에서 디클로로에탄 200mL에 모두 가하고 환류시킨다. 환류 상태 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 30g(210mmol)을 메탄설포닉에시드 345g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 48시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 800mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척하였다. 얻어진 고형물을 아세톤 800mL를 가하고 1시간 환류한 다음 상온에서 1시간 더 교반하여 여과하고 아세톤으로 세척하여 여과하였다. 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 에틸아세테이트 2:3 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피를 이용하여 목적화합물 (5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5-(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드 11.58g(수율 45.5%)을 얻었다.

[0312]  $^1\text{H NMR}$  (300 MHz, DMSO  $d_6$ ):  $\delta$  = 1.29-1.30(t, 6H, CH<sub>3</sub>), 4.23-4.24(q, 2H, N-CH), 4.53-4.54(q, 2H, N-CH), 6.97-6.98(m, 2H, indol H), 7.07-7.09(m, 4H, pyridine H), 7.22-7.36(m, 2H, indol H), 7.59-7.61(m, 4H, indol H), 7.88-7.90(m, 2H, indol H), 8.43-8.49(m, 2H, indol H), 8.77-8.69(m, 2H, pyridine H), ppm.

**합성예 42: 10,10-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘 5,5-디옥사이드의 합성(화합물 11)**

[0315] [반응식 42]

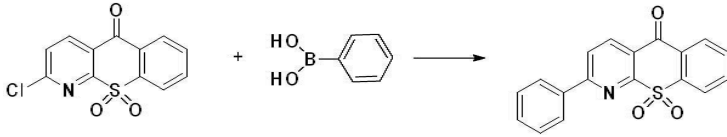


[0316]

[0317] 10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘-10-온 5,5-디옥사이드 1.5g(6mmol)과 9-페닐-9H-카바졸 3.2g(13mmol)을 디클로로에탄 50mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 4.3g(30mmol)을 메탄설포닉에시드 45g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 100mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 차가운 에탄올로 세척한 다음, 얻어진 고형물을 클로로에탄과 n-헥산 3:2 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 10,10-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘 5,5-디옥사이드 1.9g(수율 44.4%)을 얻었다(도 7 참조).

**합성예 43: 2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드의 합성**

[0320] [반응식 43]

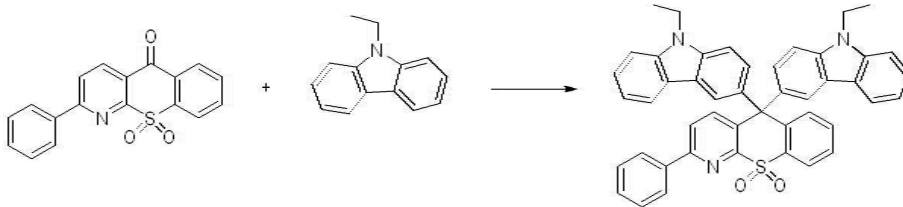


[0321]

[0322] 2-클로로-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 5.6g(20mmol)과 페닐보로닉에시드 2.7g(22mmol)을 톨루엔 60mL에 녹이고 포타슘 카보네이트 6.1g(44mmol)을 물30mL에 녹인 용액을 가한 다음 에탄올 30mL를 가한다. 혼합 용액을 40℃로 승온시킨 후 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 116mg(0.5mol%)을 한번에 가하고 80℃에서 환류하여 5시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 후 트랩을 사용하여 에탄올을 제거하고 톨루엔 40mL를 가하여 여과하고 포화 식염수로 3회 세척 추출한다. 여액에 활성탄 0.5g과 무수 마그네슘을 가하여 30분간 교반한 후 여과하고 감압 증류하여 목적 화합물 2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 6g(93.3%)을 얻었다.

[0324] 합성예 44: 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드의 합성 (화합물 12)

[0325] [반응식 44]

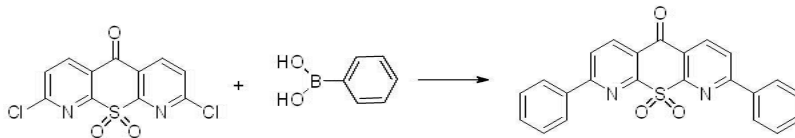


[0326]

[0327] 2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 6g(18.7mmol)과 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 8g(41.1mmol)을 질소 분위기 하에서 디클로로메탄 100mL에 모두 가하고 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포르스 펜톡사이드 12.8g(90mmol)을 메탄설포닉에시드 140g에 녹인 용액을 1시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종료를 확인하고 상온으로 한 다음 800mL의 메탄올을 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척하였다. 얻어진 고형물을 아세톤 400mL를 가하고 1시간 환류한 다음 상온에서 1시간 더 교반하여 여과하고 아세톤으로 세척하여 여과하였다. 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 에틸아세테이트 1:3 혼합 용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드 6.7g(51.4%)을 얻었다(도 8 참조).

[0329] 합성예 45: 2,8-디페닐-5H-티오크로메노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드의 합성

[0330] [반응식 45]

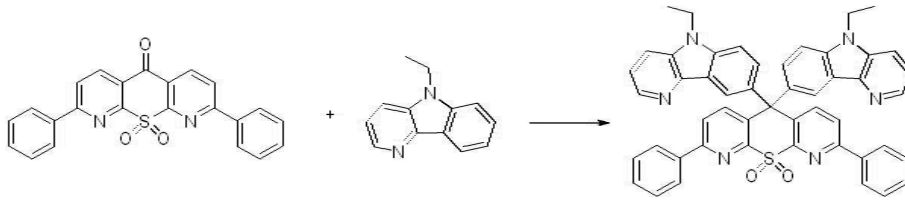


[0331]

[0332] 2,8-디클로로-5H-티오크로메노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5-온 10,10-디옥사이드 6.3g(20mmol)과 페닐보로닉에시드 5.4g(44mmol)을 톨루엔 120mL에 녹이고 포타슘 카보네이트 12.2g(88mmol)을 물 60mL에 녹인 용액을 가한 다음 에탄올 60mL를 가한다. 혼합 용액을 40℃로 승온시킨 후 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 116mg(0.5mol%)을 한번에 가하고 80℃에서 환류하여 6시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 후 합성예 43과 같은 방법으로 처리하여 목적 화합물 2,8-디페닐-5H-티오크로메노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드 7.1g(89.2%)을 얻는다

[0334] **합성예 46:** 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-2,8-디페닐-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 13)

[0335] [반응식 46]



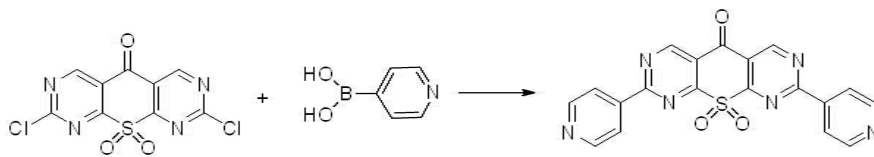
[0336]

[0337] 2,8-디페닐-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘-5온 10,10-디옥사이드 6g(18.7mmol)과 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 8g(41.1mmol)을 질소 분위기 하에서 디클로메탄에 100mL에 모두 가하고 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 12.8g(90mmol)을 메탄설포닉에시드 140g에 녹인 용액을 1시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시켰다. 반응 종료를 확인하고 합성예 35와 같은 방법으로 처리하여 목적 화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-2-페닐-5H-티오피라노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드 5.3g(36.8%)을 얻었다.

[0339] <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, DMSO d<sub>6</sub>): δ = 1.29-1.30(t, 6H, CH<sub>3</sub>), 4.53-4.54(q, 2H, N-CH), 6.97-7.22(m, 4H, indol H), 7.47-7.54(m, 6H, benzene), 7.55-7.57(m, 2H, pyridine H), 7.59-7.61(m, 4H, indol H), 7.97-7.81(m, 2H, indol H), 8.30-8.32(m, 4H, benzene), 8.34-8.36(m, 2H, pyridine H), 8.43-8.44(m, 2H, indol H), ppm.

[0341] **합성예 47:** 2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5온 10,10-디옥사이드의 합성

[0342] [반응식 47]

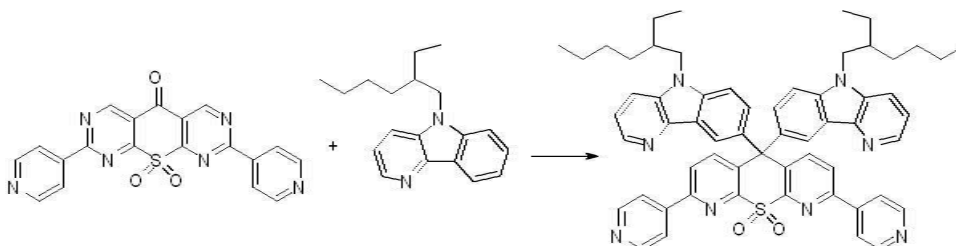


[0343]

[0345] 2,8-디클로로-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5온 10,10-디옥사이드 6.3g (20mmol)과 피리딘-4-일 보로닉 에시드 5.4g(44mmol)을 톨루엔 120mL에 녹이고 포타슘 카보네이트 12.2g(88mmol)을 물 60mL에 녹인 용액을 가한 다음 에탄올 60mL를 가한다. 혼합 용액을 40℃로 승온 후 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 116mg(0.5mol%)을 한번에 가하고 80℃에서 환류하여 6시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 후 합성예 33과 같은 방법으로 처리하여 목적 화합물 2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5온 10,10-디옥사이드 6.4g(80.2%)을 얻는다.

[0347] **합성예 48:** 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드의 합성(화합물 14)

[0348] [반응식 48]



[0349]

[0350] 2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘-5온 10,10-디옥사이드 8g(20mmol)과 5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌 12.3g(44mmol)을 질소 분위기 하에서 80mL의 디클로로에탄에 모두 가하고, 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 12.8g(90mmol)을 메탄설폰닉에시드 140g에 녹인 용액을 1시간에 걸쳐 서서히 가하고 48시간 반응시켰다. 반응 종료를 확인하고 상온으로 한 다음 400mL의 메탄올을 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 메탄올로 세척하였다. 얻어진 고형물을 아세톤 400mL를 가하고 1시간 환류한 다음 상온에서 1시간 더 교반하여 여과하고 아세톤으로 세척하여 여과하였다. 얻어진 고형물을 디클로로메탄과 에틸아세테이트 10:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드 5.8g(수율 30.9%)을 얻었다.

[0352] <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 0.90-0.93(t, 12H, CH<sub>3</sub>), 1.25-1.26(m, 8H, CH<sub>2</sub>), 1.32-1.34(st, 4H, CH<sub>2</sub>), 1.50-1.51(p, 2H, CH), 1.55-1.56(p, 4H, CH<sub>2</sub>), 3.68-3.92(m, 4H, N-CH), 7.22-7.23(m, 2H, indol H), 7.56-7.58(m, 2H, indol H), 7.96-7.98(m, 4H, indol H), 8.35-8.37(m, 2H, indol H), 8.25-8.26(m, 4H, side pyridine), 8.75-8.76(m, 4H, side pyridine), ppm.

[0354] **시험예 1**

[0355] 상기 합성예에서 제조된 화합물 1 내지 14에 대한 대표적 물성을 평가하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

**표 1**

물성	UV max(nm)	PL max (nm)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	밴드갭 (eV)	Ti (eV)	T <sub>10</sub> (°C)
화합물1(합성예 32)	284,317,330	357	5.40	1.91	3.49	2.96	380
화합물2(합성예 33)	280,327,333	361	5.36	1.90	3.46	2.97	377
화합물3(합성예 34)	278,300,325	374	5.34	2.00	3.34	2.99	365
화합물4(합성예 35)	281,305,321	369	5.40	2.01	3.39	2.96	380
화합물5(합성예 36)	290,337,346	379	5.51	2.09	3.42	2.97	377
화합물6(합성예 37)	284,311,345	387	5.47	2.14	3.33	2.99	365
화합물7(합성예 38)	259,308,322	374	5.69	2.16	3.53	2.96	380
화합물8(합성예 39)	261,280,311	367	5.68	1.90	3.78	3.01	377
화합물9(합성예 40)	275,298,324	355	5.40	2.00	3.40	3.02	365
화합물10(합성예 41)	259,305,325	367	5.60	1.91	3.69	2.96	380
화합물11(합성예 42)	247,268,296	357	5.50	1.97	3.53	2.99	379
화합물12(합성예 44)	258,272,290	337	5.36	1.92	3.44	3.06	350
화합물13(합성예 46)	268,282,300	356	5.40	1.91	3.49	2.96	380
화합물14(합성예 48)	274,287,307	354	5.33	1.86	3.47	2.89	365

[0358] UV<sub>max</sub>: 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정된 물질의 흡수파장

[0359] PL<sub>max</sub>: 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정된 물질의 발광파장

[0360] HOMO, LUMO, 밴드갭 : 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정

[0361] T<sub>1</sub>: 필름형태로 삼중항 에너지(Triplet energy) (77K에서 인광측정을 하여 확인)

[0362] T<sub>10</sub>: 물질의 degradation 온도 (TGA를 통해 확인)

[0363] T<sub>m</sub>: 용융점(melting point)

[0364] Tg: 유리전이온도

[0365] 본 발명에 따라 합성된 호스트 물질의 삼중항 에너지( $T_1$ )가 대표적인 도펀트 물질(예를 들면, FIrpic)의 삼중항 에너지(2.7 eV)보다 높은 값을 가지고 있어 효율적인 에너지 전이가 일어날 수 있으며, 또한 170°C 이상의 Tg로 열적 안정성을 가지고 있다.

[0367] **실시예 1**

[0368] ITO 기판은 발광 면적이 3mm×3mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이  $1 \times 10^{-6}$  torr가 되도록 한 후 애노드 ITO 위에 정공수송층으로 NPB를 40nm의 두께로 성막하고, 그 위에 발광층으로 상기 합성예 32에서 제조된 화합물 1, 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-옥사이드와 도펀트인 [FCNIr]를 도펀트의 도핑 농도 11%로 20nm의 두께로 성막하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 TPBI를 진공 증착하여 50nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, 전자주입층인 LiF를 1.0nm의 두께로 성막하고, 캐소드인 Al을 500nm의 두께로 성막하여 유기발광소자를 제조하였다. 이어서 이들에 대한 발광 특성을 평가하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0370] **실시예 2**

[0371] 상기 합성예 33에서 제조된 화학식 2, 5,5-(9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0373] **실시예 3**

[0374] 상기 합성예 34에서 제조된 화학식 3, 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0376] **실시예 4**

[0377] 상기 합성예 35에서 제조된 화학식 4, 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0379] **실시예 5**

[0380] 상기 합성예 36에서 제조된 화학식 5, 5,5-비스(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0382] **실시예 6**

[0383] 상기 합성예 37에서 제조된 화학식 6, 10,10-비스(9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-b:5,6-b']디피리딘 5,5-옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0385] **실시예 7**

[0386] 상기 합성예 38에서 제조된 화학식 7, 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를

하기 표 2에 나타내었다.

[0388] **실시예 8**

[0389] 상기 합성예 39에서 제조된 화학식 8, 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0391] **실시예 9**

[0392] 상기 합성예 40에서 제조된 화학식 9, 5-(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸-10-일)-5-(9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸-3-일)-5H-티오피라노[2,3-d:6,5-d']디피리미딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0394] **실시예 10**

[0395] 상기 합성예 41에서 제조된 화학식 10, (5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5-(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0397] **실시예 11**

[0398] 상기 합성예 42에서 제조된 화학식 11, 10,10-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-10H-티오피라노[3,2-d:5,6-d']디피리미딘 5,5-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0400] **실시예 12**

[0401] 상기 합성예 44에서 제조된 화학식 12, 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-2-페닐-5H-티오크로메노[2,3-b]피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0403] **실시예 13**

[0404] 상기 합성예 46에서 제조된 화학식 13, 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-2,8-디페닐-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0406] **실시예 14**

[0407] 상기 합성예 48에서 제조된 화학식 14, 5,5-비스(5-(2-에틸헥실)-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-2,8-디(피리딘-4-일)-5H-티오피라노[2,3-b:6,5-b']디피리딘 10,10-디옥사이드를 발광층의 호스트로 사용하였고 실험 방법은 실시예 1과 동일하게 하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0409] **비교예 1**

[0410] 전술한 실시예 1과 동일한 공정 조건 하에 발광층의 호스트로 mCP(1,3-비스(N-카바졸릴)벤젠 물질을 사용한 것만을 달리하여 유기발광소자를 제조하고, 마찬가지로 이들에 대한 발광 특성을 평가하여 그 결과를 하기 표 2에

나타내었다.

표 2

[0411]

항목	전압 [V]	전류밀도 [mA/cm <sup>2</sup> ]	전류효율 Cd/A	전력효율 [Lm/W]	양자효율 [%]
화합물1(합성예 32)	4.56	5.10	19.61	13.51	10.50
화합물2(합성예 33)	4.32	4.80	20.83	15.15	11.40
화합물3(합성예 34)	3.92	4.70	21.28	17.05	12.80
화합물4(합성예 35)	3.80	5.10	19.61	16.21	11.40
화합물5(합성예 36)	4.90	4.60	21.74	13.94	10.31
화합물6(합성예 37)	4.80	4.80	20.83	13.64	10.33
화합물7(합성예 38)	3.80	4.60	21.74	17.97	11.95
화합물8(합성예 39)	4.10	4.56	21.93	16.80	11.92
화합물9(합성예 40)	3.93	4.74	21.10	16.86	11.90
화합물10(합성예 41)	4.40	4.55	21.98	15.69	9.87
화합물11(합성예 42)	3.85	4.62	21.65	17.66	13.10
화합물12(합성예 44)	4.21	5.01	19.96	14.89	9.88
화합물13(합성예 46)	4.05	4.91	20.37	15.80	10.23
화합물14(합성예 48)	4.09	4.99	20.04	15.39	10.21
비교예 1	6.71	14.1	6.80	3.21	3.86

[0413]

이상에서와 같이 도면과 명세서에서 최적의 실시예가 개시되었다. 본 발명은 상기한 실시예에 한정되지 아니하며 본 발명의 정신을 벗어나지 않는 범위 내에서 당해 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 다양한 변경과 수정이 가능할 것이며, 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

[0415]

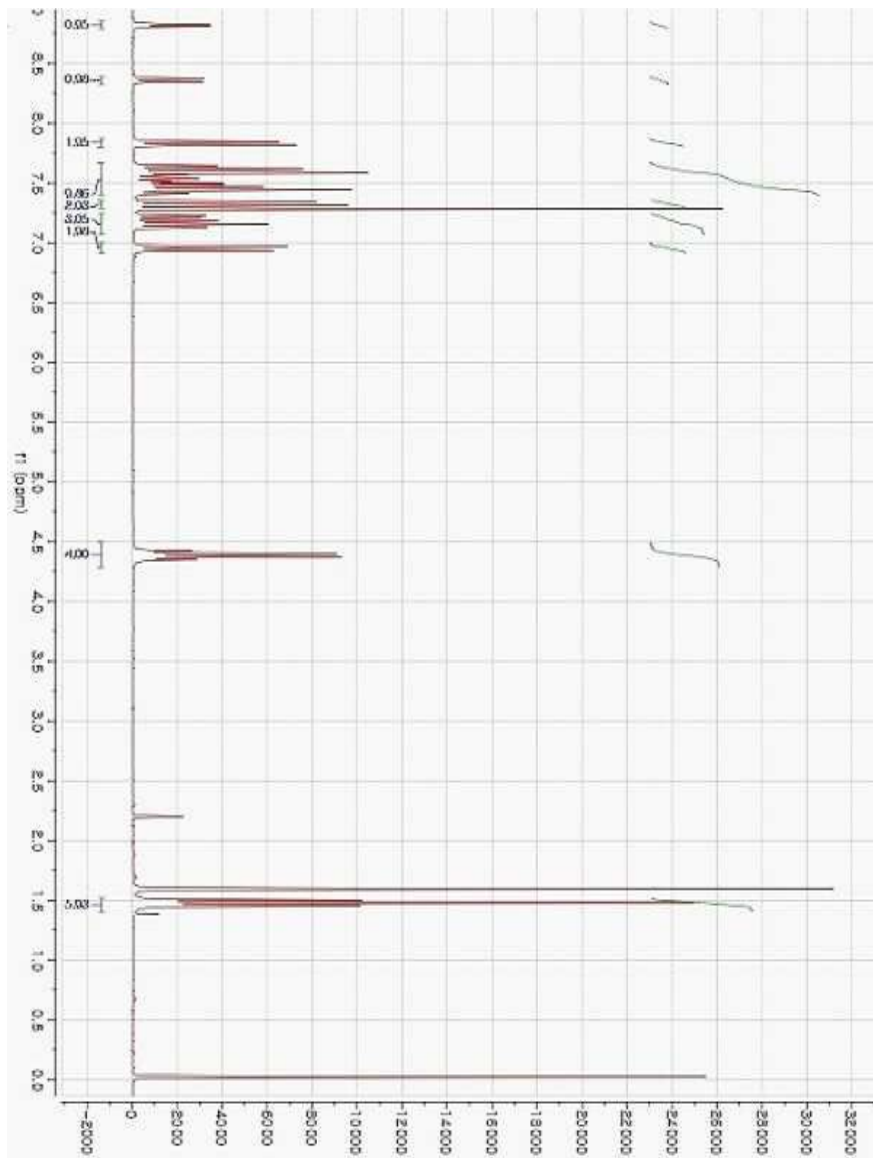
- 10: 기관
- 20: 애노드 전극
- 30: 정공 주입층
- 40: 정공 수송층
- 50: 발광층
- 60: 전자 수송층
- 70: 전자 주입층
- 80: 캐소드 전극

도면

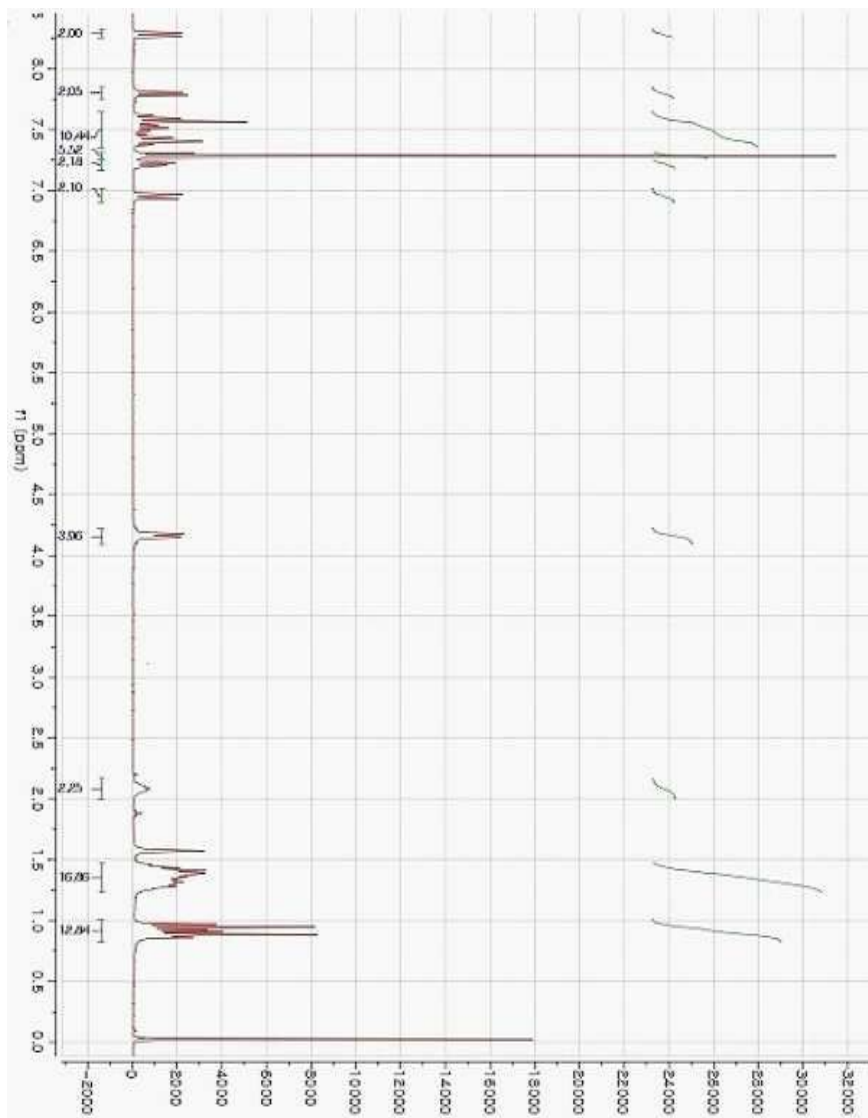
도면1

캐소드 전극	80
전자 주입층 (EIL)	70
전자 수송층 (ETL)	60
발광층 (EML)	50
정공 수송층 (HTL)	40
정공 주입층 (HIL)	30
애노드 전극	20
기판	10

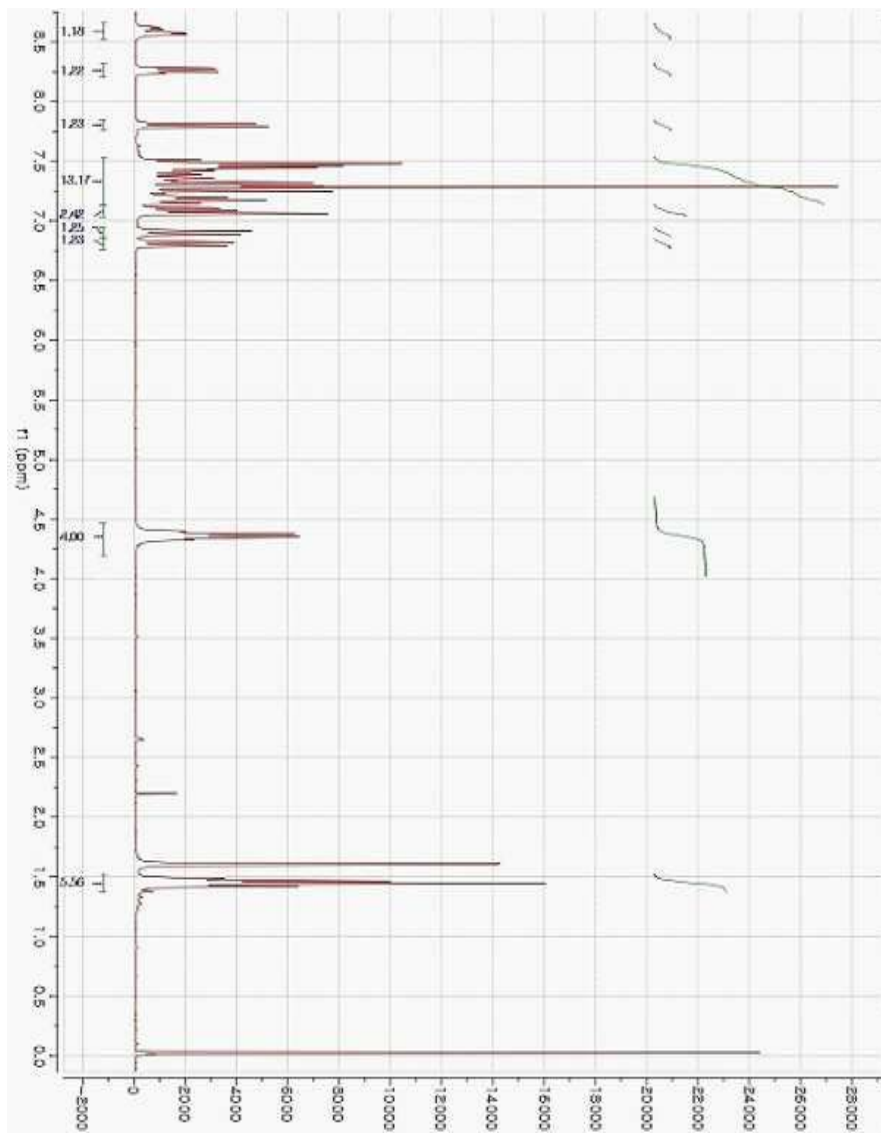
도면2



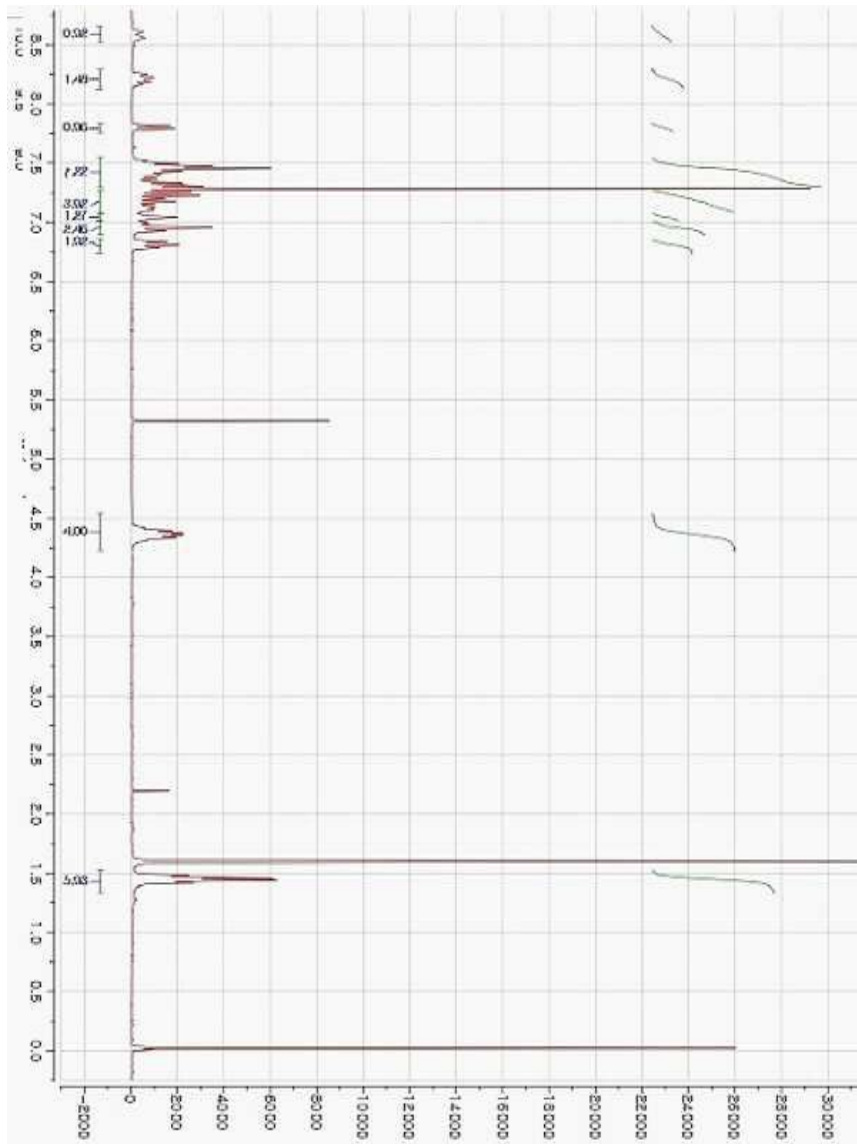
도면3



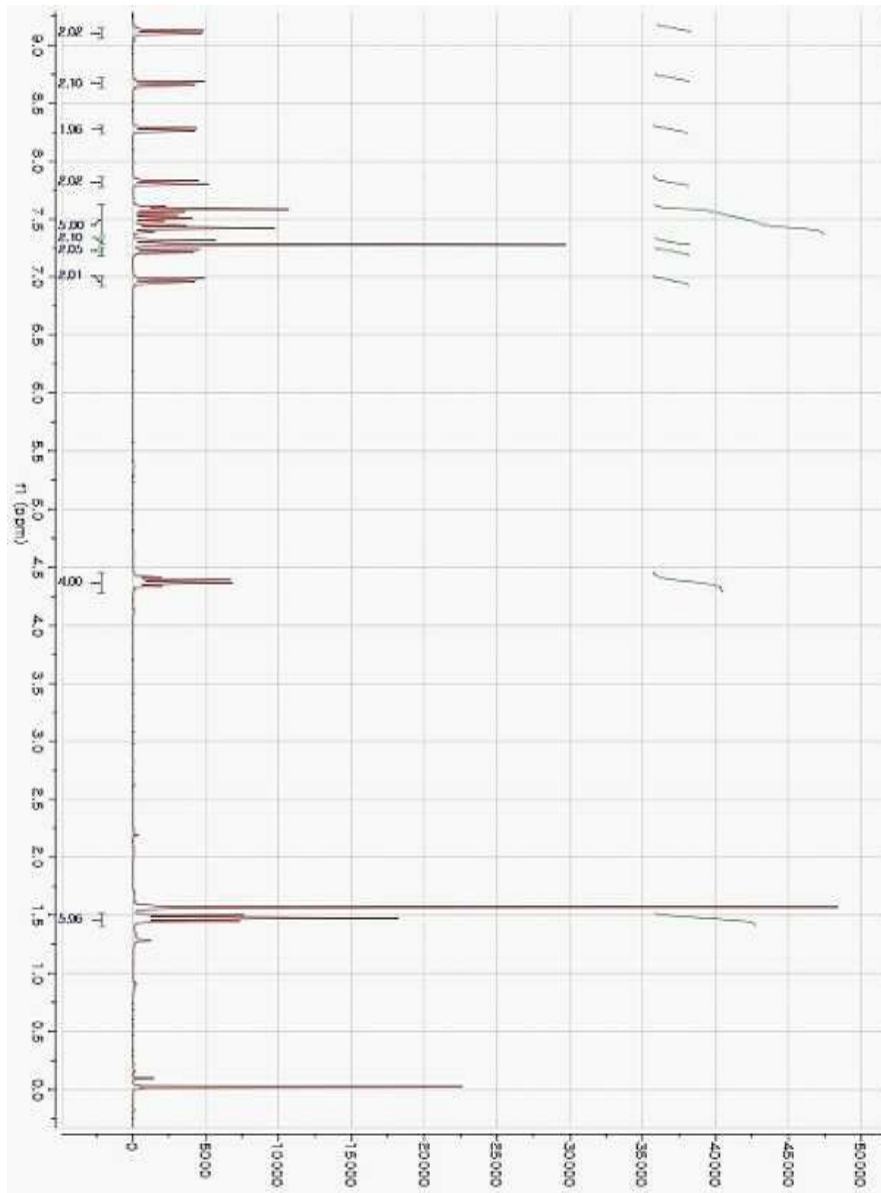
도면4



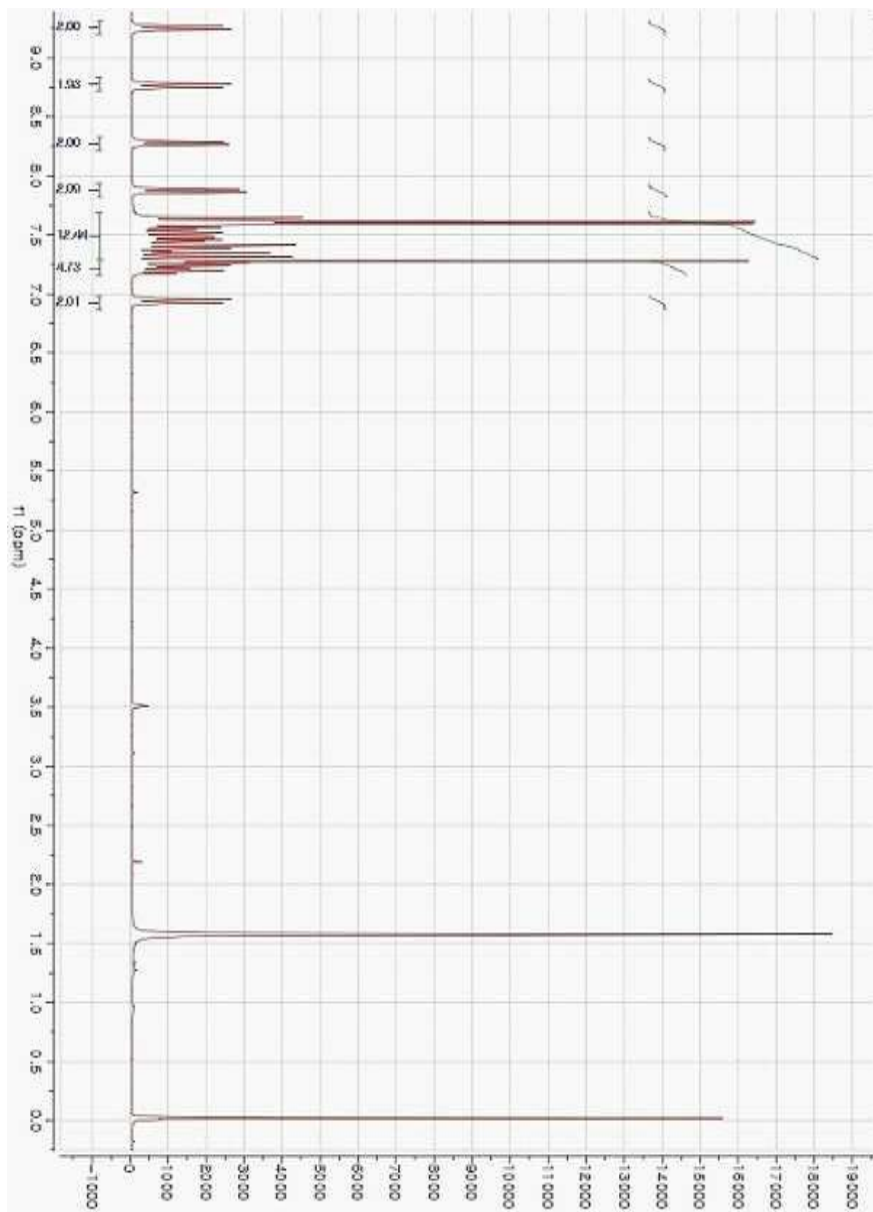
도면5



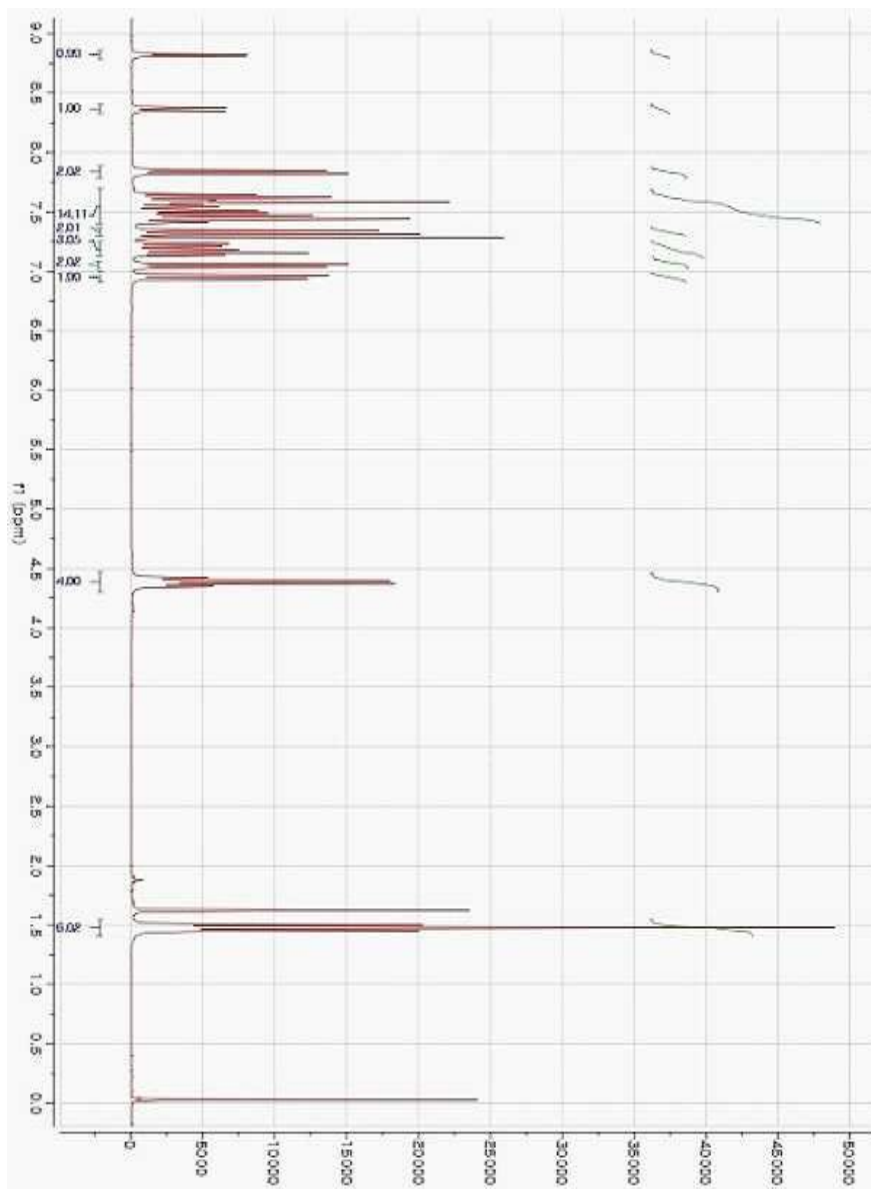
도면6



도면7



도면8



专利名称(译)	用于磷光主体的化合物和含有该化合物的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020170082296A</a>	公开(公告)日	2017-07-14
申请号	KR1020160001527	申请日	2016-01-06
申请(专利权)人(译)	Byeoksan涂料有限公司		
[标]发明人	JOUNG KUK SOUNG 정국성 KIM KYU SOUNG 김규성 JO NAM CHOL 조남철 KIM MI HYUN 김미현		
发明人	정국성 김규성 조남철 김미현		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D471/04 C07D495/04 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D495/04 C07D209/82 C07D471/04 H01L51/5012 H01L51/5048 H01L51/0071 C09K2211/1037 C09K2211/1029 C09K2211/1011		
代理人(译)	Songduhyeon		
其他公开文献	KR101793122B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及由下列通式(1)表示的磷光主体化合物和包含该磷光主体的有机发光器件：包含用于磷光主体的化合物的有机发光器件可具有长寿命，电迁移率和热稳定性。

