



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2024년02월06일  
(11) 등록번호 10-2633478  
(24) 등록일자 2024년01월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 209/56 (2006.01) C07D 401/04 (2006.01)  
C07D 401/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)

(52) CPC특허분류  
C07D 209/56 (2013.01)  
C07D 401/04 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0178068  
(22) 출원일자 2016년12월23일  
심사청구일자 2021년11월29일  
(65) 공개번호 10-2018-0074209  
(43) 공개일자 2018년07월03일  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020100130197 A  
KR1020100133467 A  
KR1020160134571 A  
KR1020180069437 A

(73) 특허권자  
솔루스첨단소재 주식회사  
전라북도 익산시 서동로 627 (팔봉동)

(72) 발명자  
손효석  
경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성북동)  
김충한  
경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성북동)

(74) 대리인  
특허법인위더피플

전체 청구항 수 : 총 7 항

심사관 : 이동욱

(54) 발명의 명칭 **유기 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자**

**(57) 요약**

본 발명은 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대한 것으로서, 상기 유기 화합물이 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 사용됨에 따라, 소자의 열적 안정성, 발광효율, 구동 전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.

(52) CPC특허분류

*C07D 401/14* (2013.01)

*C09K 11/06* (2022.01)

*H10K 50/00* (2023.02)

*H10K 50/11* (2023.02)

*H10K 50/16* (2023.02)

*H10K 85/6572* (2023.02)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

---

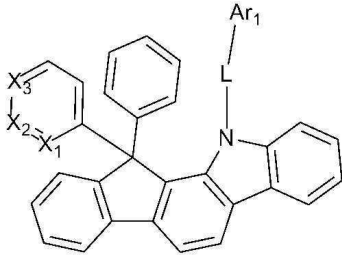
명세서

청구범위

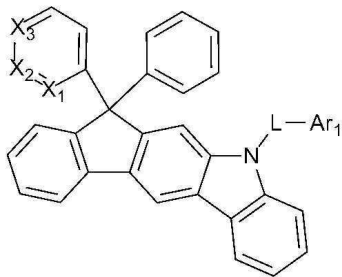
청구항 1

하기 화학식 3, 5 및 7 중 어느 하나로 표시되는 유기 화합물:

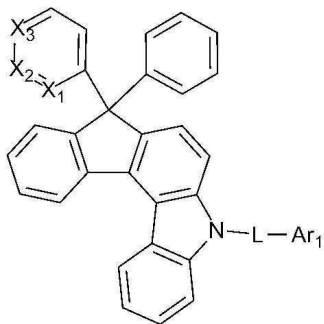
[화학식 3]



[화학식 5]



[화학식 7]



(상기 화학식 3, 5, 및 7에서

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>1</sub>이고, 다만 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 어느 하나가 N이며,

이때 상기 CR<sub>1</sub>이 복수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 각각 수소이고;

L은 단일결합이거나, 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

Ar<sub>1</sub>은 수소, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며;

상기 Ar<sub>1</sub>의 아릴기, 및 헤테로아릴기는 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 동일하거나 상이함).

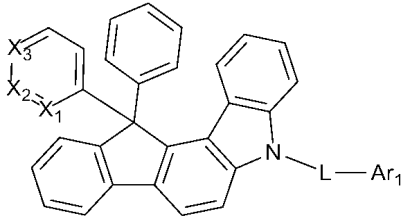
청구항 2

삭제

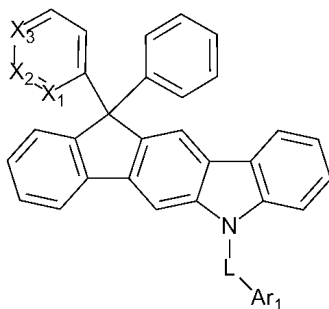
**청구항 3**

하기 화학식 2, 4 및 6 중 어느 하나로 표시되는 유기 화합물:

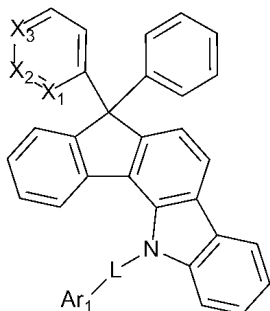
[화학식 2]



[화학식 4]



[화학식 6]



(상기 화학식 2, 4 및 6에서

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>1</sub>이고, 다만 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 어느 하나가 N이며,

이때 상기 CR<sub>1</sub>이 복수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 수소이고;

L은 단일결합이거나, 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아틸렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

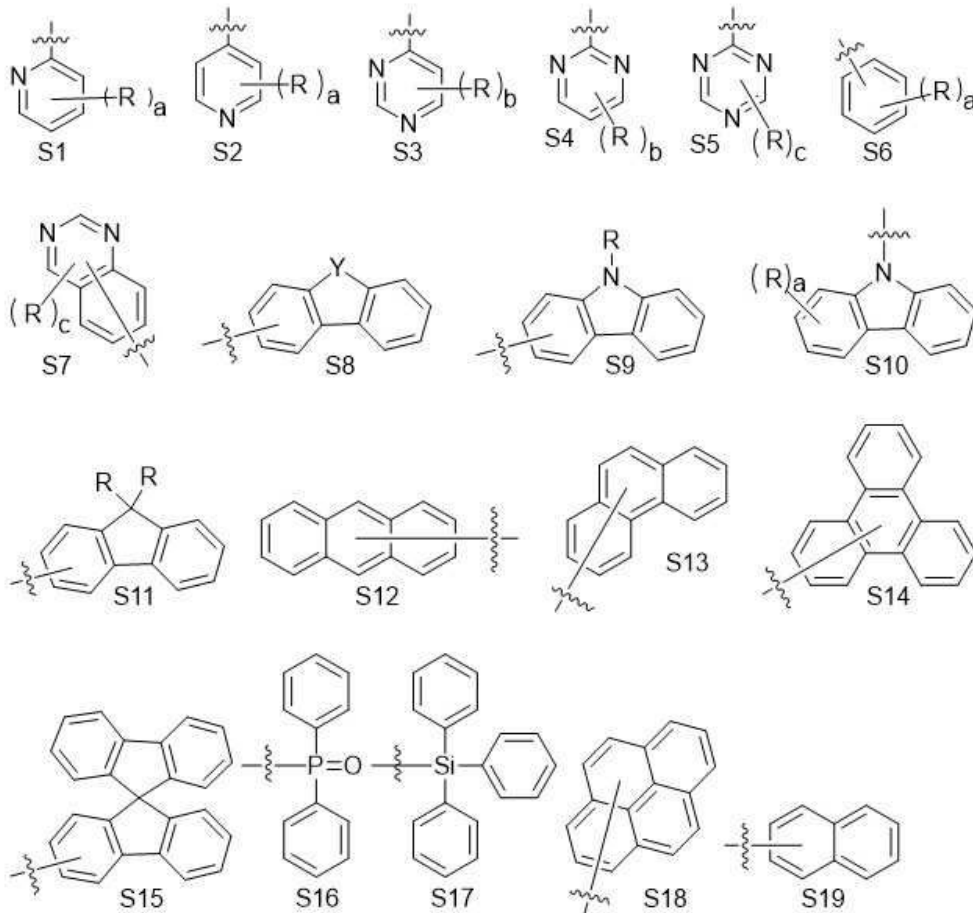
Ar<sub>1</sub>은 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아틸기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아틸기로 이루어진 군에서 선택되며;

상기 Ar<sub>1</sub>의 아틸기, 및 헤테로아틸기는 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아틸기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아틸기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 동일하거나 상이함).

**청구항 4**

제1항에 있어서,

상기 Ar<sub>1</sub>은 수소이거나, 또는 하기 치환체 S1 내지 S19로 이루어진 군에서 선택된 치환체인 것이 특징인 유기 화합물:



(상기 치환체 S1 내지 S19에서,

a는 0 내지 4의 정수이고,

b는 0 내지 3의 정수이며,

c는 0 내지 2의 정수이고,

Y는 0 또는 S이며,

복수의 R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택됨).

**청구항 5**

제1항에 있어서,

일중항 에너지와 삼중항 에너지의 차이(ΔEst)는 0.2-0.4 eV인 것이 특징인 유기 화합물.

**청구항 6**

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,

상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 및 제3항 내지 제5항 중 어느 한 항에 기재된 유기 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 7**

제6항에 있어서,

상기 1층 이상의 유기물층은 발광층을 포함하고,

상기 발광층은 상기 유기 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 8**

제6항에 있어서,

상기 1층 이상의 유기물층은 전자수송층을 포함하고,

상기 전자수송층은 상기 유기 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 전자 주입 및 수송능, 발광능, 열적 안정성이 우수한 유기 화합물 및 상기 화합물을 포함하여 소자의 발광효율, 구동전압, 수명 등이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 전계 발광 소자(이하, '유기 EL소자'라 함)는 두 전극에 전류, 또는 전압을 인가해 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어져 빛을 내게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[0003] 종래 전자 수송 물질로는 BCP나 Alq<sub>3</sub> 등이 널리 알려져 있으며, 발광 물질, 특히 호스트로는 CBP(4,4'-dicarbazolybiphenyl), ADN 등이 알려져 있다. 그러나, 종래 전자 수송 물질이나 발광 물질은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 떨어지기 때문에, OLED 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하는 실정이다. 따라서, 보다 성능이 뛰어난 재료의 개발이 요구되고 있다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

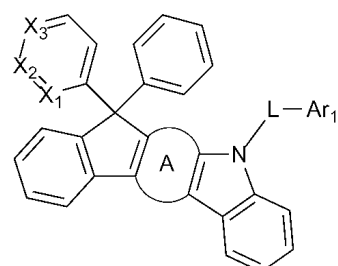
[0004] 본 발명은 전자 주입능, 전자 수송능 및 발광능의 특성과 열적 안정성이 우수하여 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 또는 전자수송 보조층 재료로 사용될 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0005] 또, 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 구동 전압이 낮고, 발광 효율이 높으며, 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0006] 상기 목적을 달성하기 위해, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물을 제공한다.

**화학식 1**



[0007]

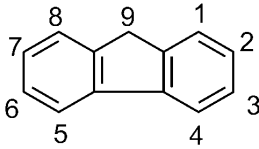
- [0008] (상기 화학식 1에서,
- [0009] A 고리는 6원의 방향족 고리이고,
- [0010]  $X_1$  내지  $X_3$ 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는  $CR_1$ 이고, 다만  $X_1$  내지  $X_3$  중 적어도 어느 하나가 N이며,
- [0011] 이때 상기  $CR_1$ 이 복수인 경우, 복수의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0012] L은 단일결합이거나, 또는  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;
- [0013]  $Ar_1$ 은 수소,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0014] 상기  $Ar_1$ 의 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 동일하거나 상이함).
- [0015] 또한, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0016] 일례로, 상기 1층 이상의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.
- [0017] 다른 일례로, 상기 1층 이상의 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

**발명의 효과**

- [0018] 본 발명에 따른 화합물은 열적 안정성, 전자 주입/수송능 및 발광능이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료로 사용될 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 종래 호스트 재료나 전자수송층 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비해 구동전압이 낮고, 발광 및 전류 효율이 높으며, 장수명을 갖기 때문에, 풀 칼라 디스플레이 패널의 성능 및 수명을 향상시킬 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0019] 이하, 본 발명에 대해 설명한다.
- [0020] <신규 유기 화합물>
- [0021] 본 발명에 따른 유기 화합물은 플루오렌 모이어티(fluorene moiety)에 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합(fused)되어 이루어진 코어(core) 구조를 포함하되, 상기 코어 구조 중 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 6원(membered)의 N-함유 헤테로환과 페닐기가 함께 도입되어 있는 구조로서, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다. 이러한 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자가 포함할 경우, 소자의 구동전압은 낮고, 발광 및 전류 효율이 높으며, 장수명을 갖는다. 여기서, 플루오렌의 탄소 위치 번호는 하기와 같다.



- [0022]
- [0023] 종래 유기 전계 발광 소자의 호스트로서, 9번 탄소 위치에 수소나 메틸기가 도입된 플루오렌계 화합물이 알려져 있다. 그러나, 상기 플루오렌계 화합물은 유리전이온도(Tg)가 낮아 열적 안정성이 낮기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 내구성, 수명 특성이 저하되는 문제가 있었다.
- [0024] 그런데, 본 발명자들은 상기 플루오렌에 인돌을 축합할 경우, 화합물의 강직성(Rigidity)이 향상되어 전자이동도나 정공이동도가 향상될 수 있고, 유리전이온도(Tg)가 상승하여 열적안정성도 향상될 수 있을 뿐만 아니라, 쌍극자 효과로 인해서 일중항 에너지(S1)와 삼중항 에너지(T1)의 차이( $\Delta E_{ST}=T1-S1$ )가 약 0.2~0.4 eV로 작아 고 효율의 발광 특성을 발휘할 수 있다는 것을 알았다. 따라서, 본 발명의 화합물은 플루오렌 모이어티(fluorene moiety)에 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합(fused)되어 이루어진 코어 구조를 포함한다.
- [0025] 게다가, 본 발명자들은 상기 코어 구조 내 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 6원의 N-함유 헤테로환과 페닐기가 동시에 도입할 경우, 상기 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 수소나 메틸기, 페닐기가 도입된 경우에 비해, 열적 안정성의 저하 없이 전자수송성이 현저히 개선되어 유기 전계 발광 소자의 구동전압이 낮아지고, 전류효율이 높아질 수 있다는 것을 알았다.
- [0026] 구체적으로, 상기 6원의 N-함유 헤테로환(예, 피리딘, 피리미딘, 트리아진)은 전자 흡수성이 큰 전자끌개기(electron withdrawing group, EWG)로서, 상기 헤테로환 내 질소 원자(N)로 인해서 분자 간 수소 결합이 유도될 수 있다. 이러한 6원의 N-함유 헤테로환이 상기 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 도입된 본 발명의 화합물은 플루오렌의 다른 탄소위치에 상기 헤테로환이 도입된 화합물에 비해, 상기 6원의 N-함유 헤테로환에 의한 분자 간 수소 결합이 더 유도될 수 있다. 그렇기 때문에, 본 발명의 화합물은 2개의 페닐기가 도입된 종래 플루오렌계 화합물에 비해 유리전이온도(Tg)가 높을 뿐만 아니라, 더 규칙적으로 분자들이 배열되어 높은 결정성 및 패킹 밀도(packing density)를 갖고, 따라서 열적 안정성 및 전자수송성이 더 향상될 수 있다.
- [0027] 또한, 본 발명의 화합물은 상기 6원의 N-함유 헤테로환과 함께 페닐기가 상기 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 도입됨으로써, 상기 6원의 N-함유 헤테로환의 연결 분해(bonding dissociation)가 방지됨과 동시에, 판상 구조를 이루어 분자 간의 스택킹(stackings)이 유도되고, 따라서 전자이동도가 증가되어 우수한 전자수송성을 가질 수 있다. 또한, 상기 페닐기가 상기 플루오렌 모이어티의 9번 탄소 위치에 도입됨으로써, 청색, 녹색 발광에 적합한 밴드갭을 가지며, 일중항 에너지(S1)와 삼중항 에너지(T1)의 차이( $\Delta E_{ST}=T1-S1$ )도 작아 유기 전계 발광 소자가 고효율 특성을 가질 수 있다.
- [0028] 이와 같이, 본 발명의 코어 구조는 9번 탄소 위치에 6원의 N-함유 헤테로환과 페닐기가 동시에 결합된 플루오렌 모이어티;와 인돌 모이어티가 축합된 구조를 가짐으로써, 전자수송성이 향상될 뿐만 아니라, 고효율의 발광 특성을 발휘할 수 있다.
- [0029] 또한, 본 발명의 화합물은 상기 코어 구조에 다양한 치환기가 도입되는데, 특히 상기 코어 구조 내 인돌 모이어티의 N 위치에 카바졸, 다이벤조사이오펜, 다이벤조퓨란 등과 같이 전자공여성이 큰 전자주개기(electron donating group, EDG)가 도입될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력이 향상될 수 있고, 일중항 에너지(S1)와 삼중항 에너지(T1)의 차이( $\Delta E_{ST}=T1-S1$ )도 약 0.3 eV 미만으로 더 작아지기 때문에, 고효율의 발광 특성을 발휘할 수 있다.
- [0030] 아울러, 본 발명의 화합물은 상기 코어 구조에 다양한 치환기(예, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴아민기, 아릴포스피닐기, 아릴실릴기)가 도입됨으로써, 상기 화합물의 분자량이 유의적으로 증대되어 높은 유리전이온도(Tg)를 갖기 때문에, CBP(4,4-dicarbazolybiphenyl) 등의 종래 호스트 물질보다 더 높은 열적 안정성을 가질 수 있다.
- [0031] 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 전자수송층 재료나, 청색, 녹색 및/또는 적색의 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 유기물층 재료(예컨대, CBP, ADN, Alq<sub>3</sub>) 비해 유기 전계 발광 소자의 구동전압, 발광 및 전류효율, 내구성, 수명 등의 특성을 더 향상시킬 수 있다.
- [0032] 상기 화학식 1에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 CR<sub>1</sub>이고, 다만 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>



중 적어도 어느 하나가 N이며, 바람직하게  $X_1$  내지  $X_3$  중에서 1개는 N이고, 나머지는 CR<sub>1</sub>일 수 있다.

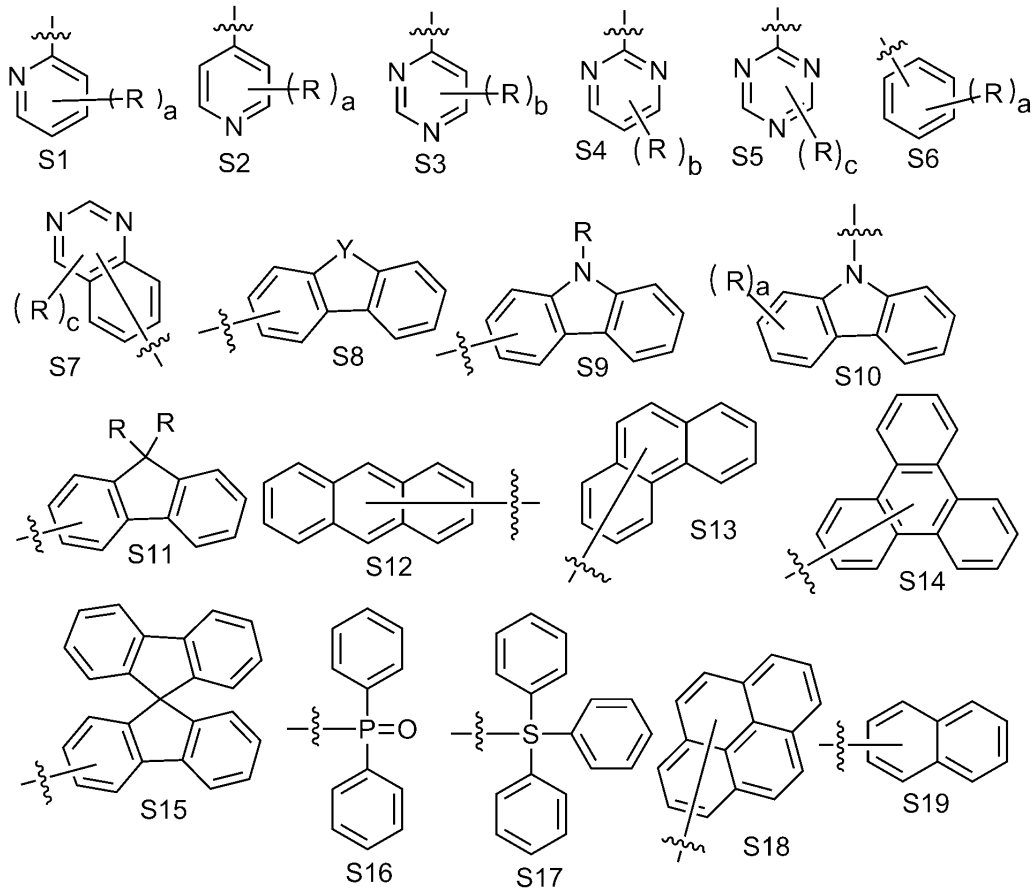
[0033] 이때, 상기 CR<sub>1</sub>이 복수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스핀기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기(더 바람직하게 C<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>의 알킬기), C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기(더 바람직하게, C<sub>6</sub>~C<sub>20</sub>의 아릴기) 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기(더 바람직하게, 핵원자수 5 내지 20의 헤테로아릴기)로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 이때, 헤테로시클로알킬기 및 헤테로아릴기는 각각 N, S, O 및 Se로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0034] 또, L은 2가(divalent)의 연결기(linker)로서, 단일결합이거나, 또는 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 이때, 상기 헤테로아릴렌기는 N, S, O 및 Se로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0035] 또, Ar<sub>1</sub>은 수소, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 수소, C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 이때, 상기 Ar<sub>1</sub>로 전자 공여성이 큰 전자주개기(electron donating group, EDG)를 선택하는 것이 바람직하다. 이 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar)특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 상기 헤테로아릴기는 N, S, O 및 Se로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함한다.

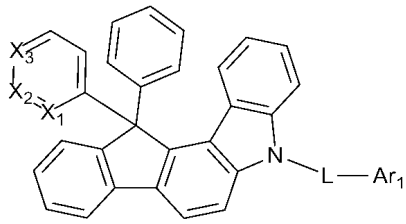
[0036] 이때, 상기 Ar<sub>1</sub>의 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 바람직하게 시아노기, C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있다. 이때, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 동일하거나 상이하다.

[0037] 일례에 따르면, 상기 Ar<sub>1</sub>은 수소가거나, 또는 하기 치환체 S1 내지 S19로 이루어진 군에서 선택된 치환체일 수 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.



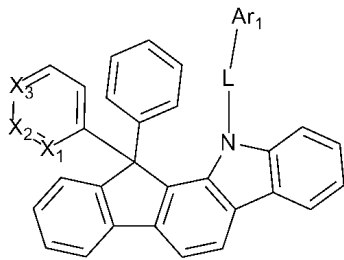
- [0038]
- [0039] (상기 치환체 S1 내지 S19에서,
- [0040] a는 0 내지 4의 정수이고, 바람직하게 0 내지 2의 정수일 수 있으며;
- [0041] b는 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게 0 내지 2의 정수일 수 있으며;
- [0042] c는 0 내지 2의 정수이고;
- [0043] Y는 산소 원자(O) 또는 황 원자(S)이며,
- [0044] 복수의 R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직하게 수소, 중수소(D), C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고;
- [0045] 상기 R의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 바람직하게 C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있음).
- [0046] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 2 내지 7로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

화학식 2



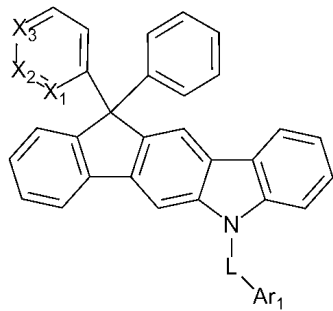
[0047]

화학식 3



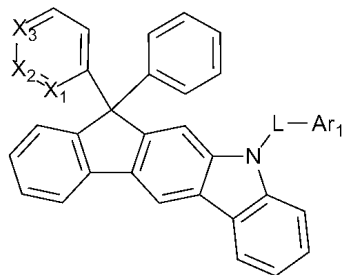
[0048]

화학식 4



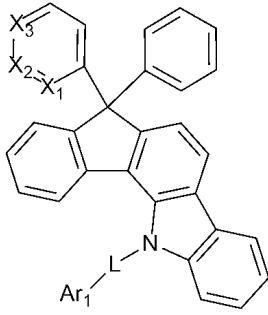
[0049]

화학식 5



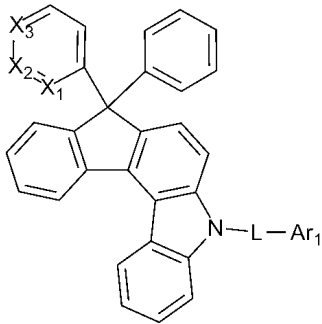
[0050]

화학식 6



[0051]

화학식 7



[0052]

[0053]

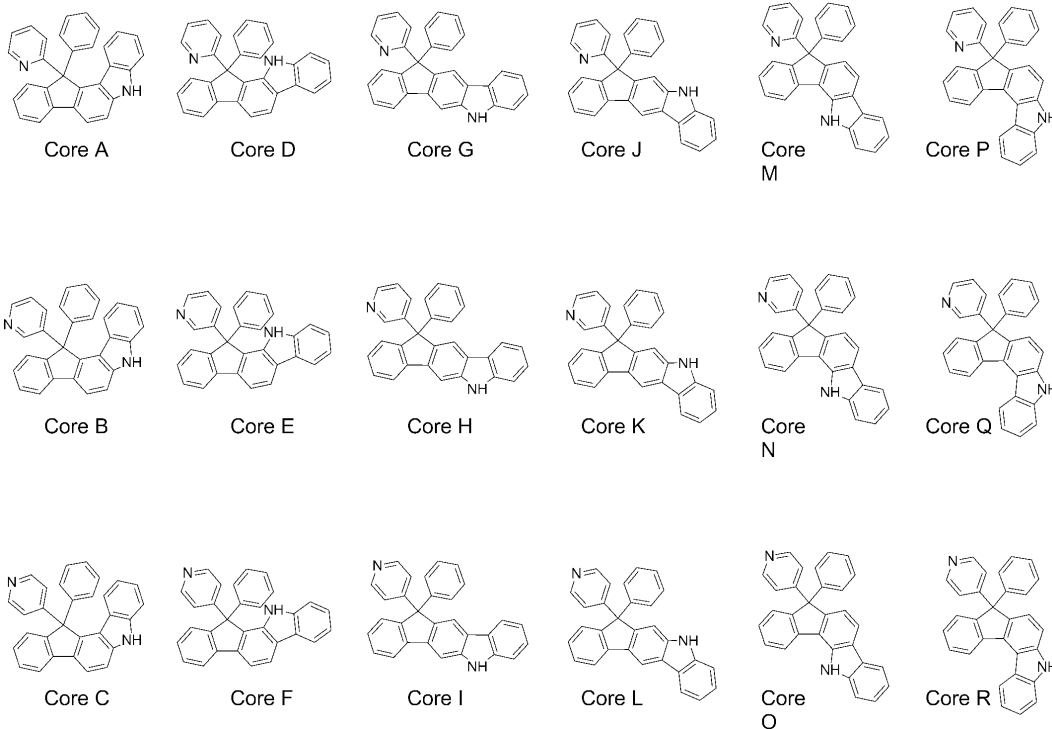
(상기 화학식 2 내지 7에서,

[0054]

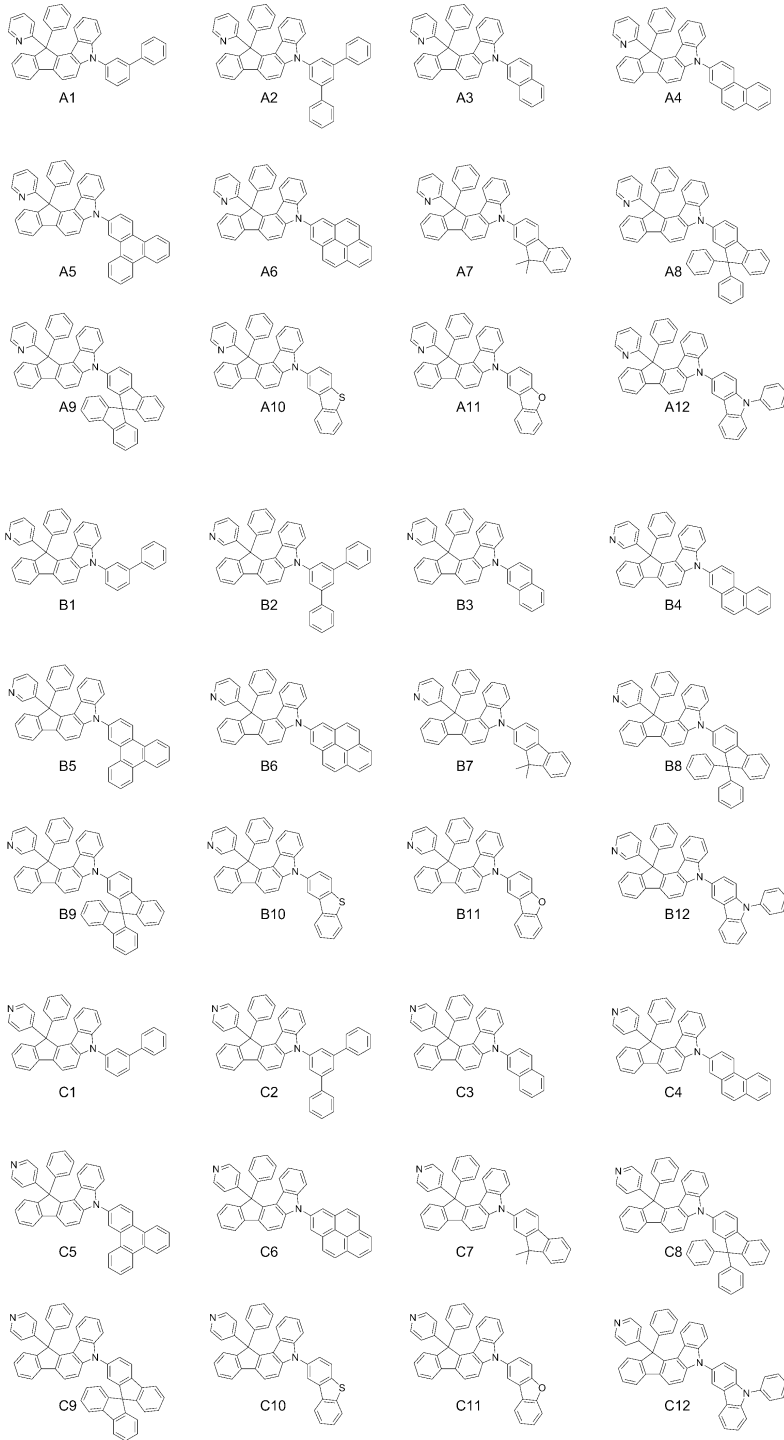
X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, L 및 Ar<sub>1</sub>은 각각 상기 화학식 1에 정의된 바와 같음).

[0055]

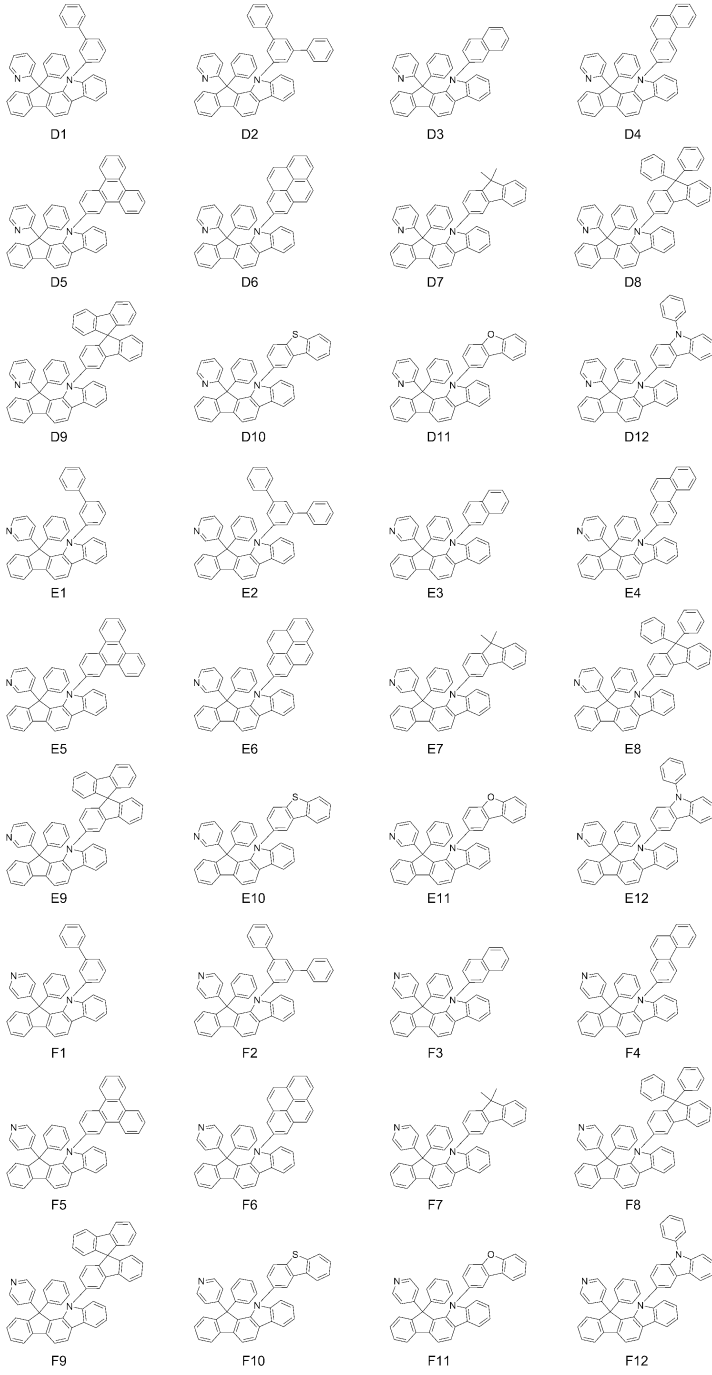
본 발명에 따른 화학식 1의 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.



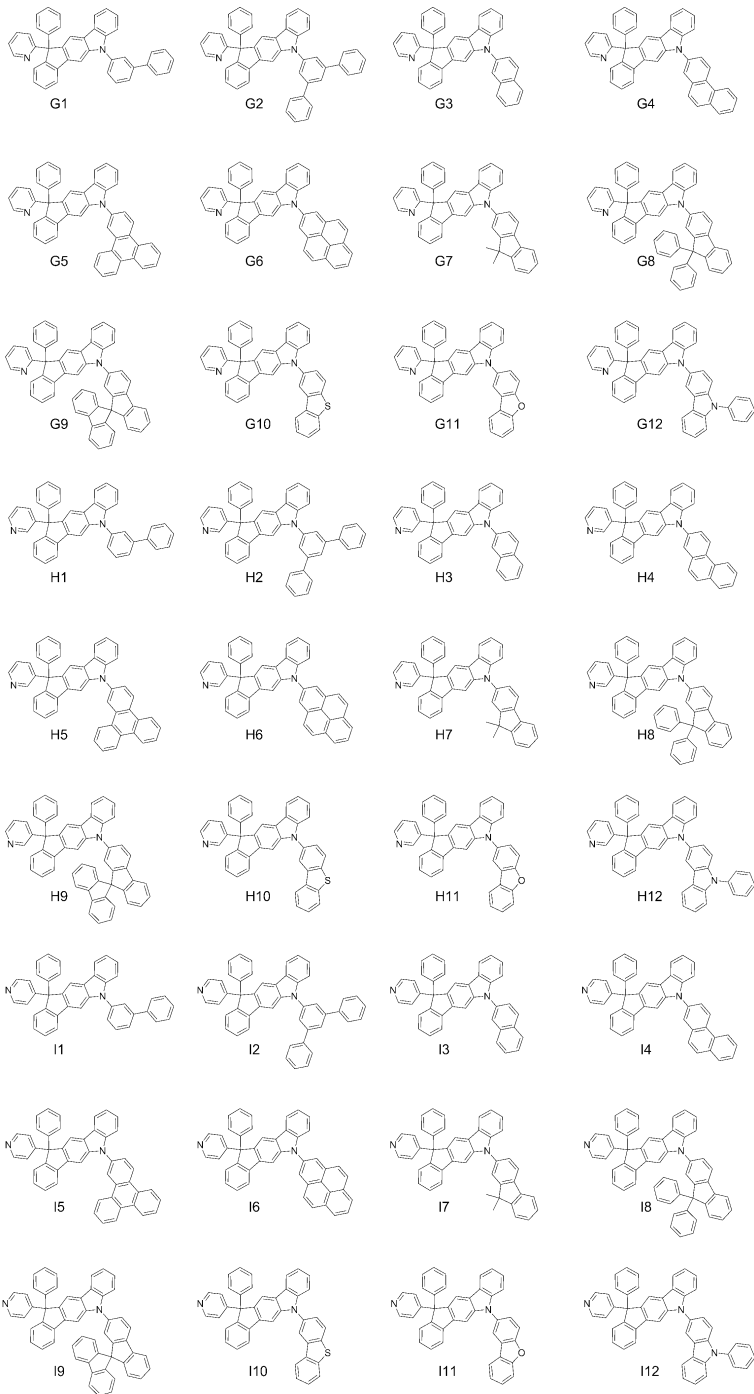
[0056]



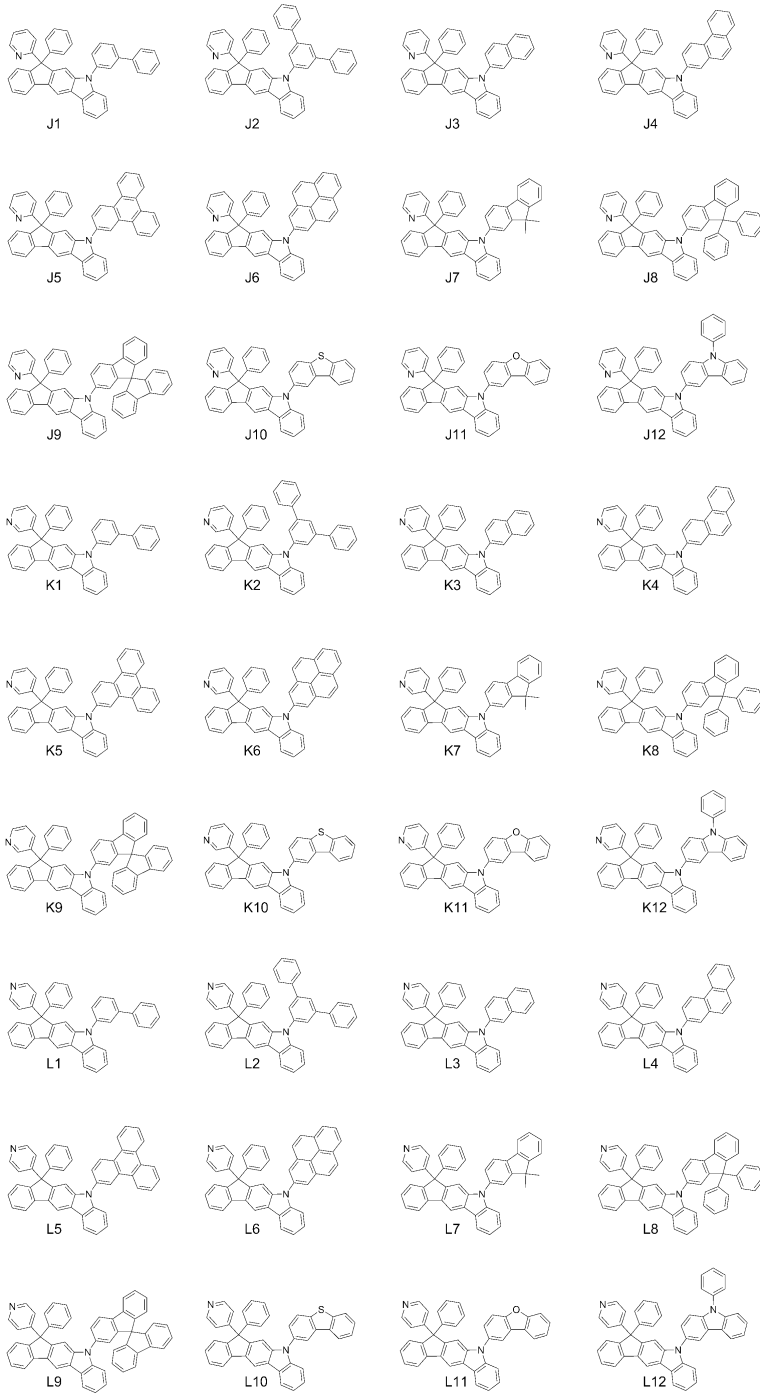
[0057]



[0058]

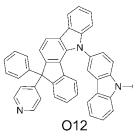
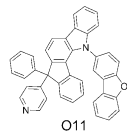
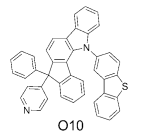
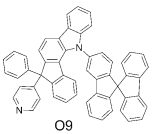
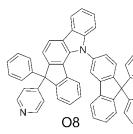
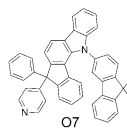
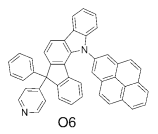
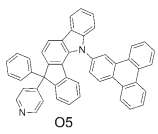
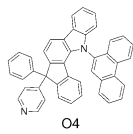
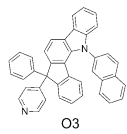
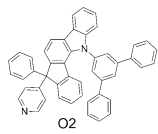
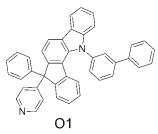
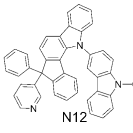
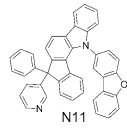
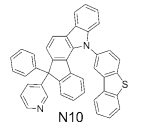
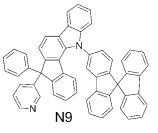
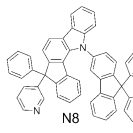
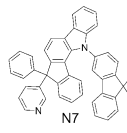
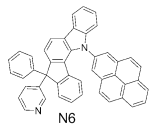
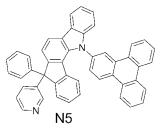
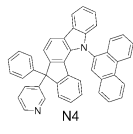
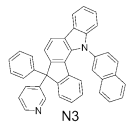
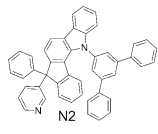
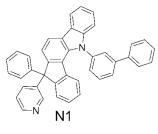
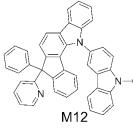
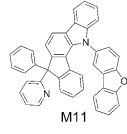
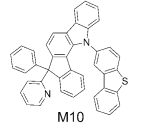
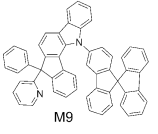
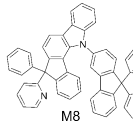
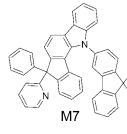
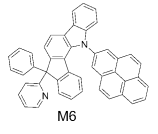
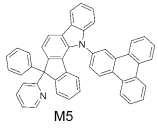
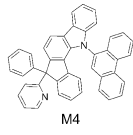
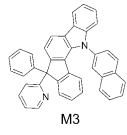
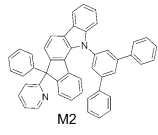
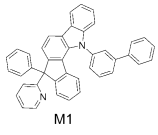


[0059]

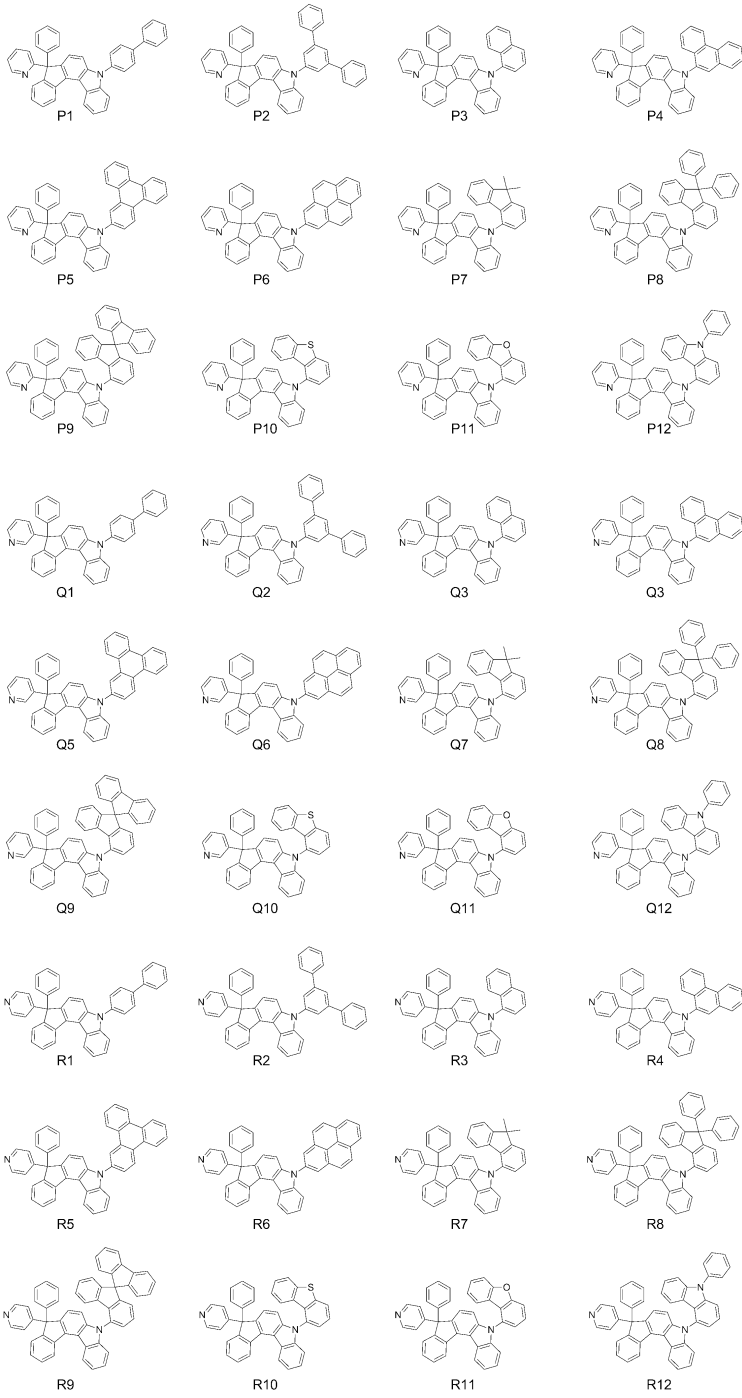


[0060]

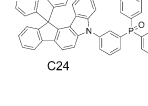
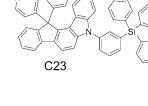
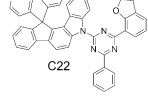
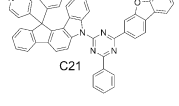
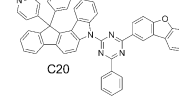
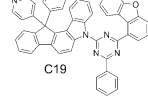
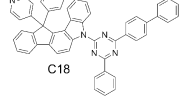
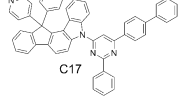
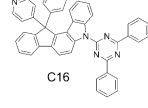
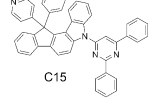
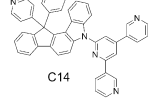
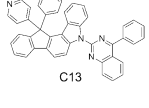
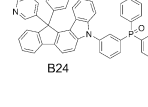
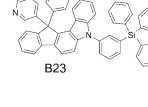
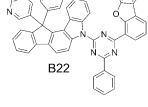
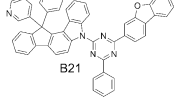
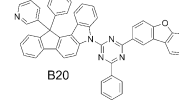
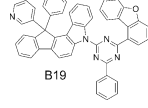
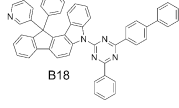
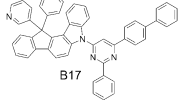
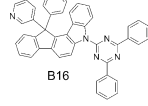
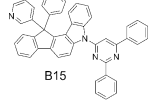
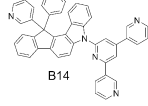
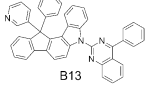
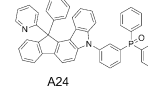
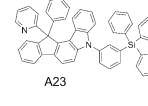
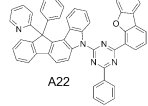
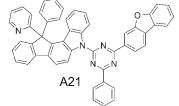
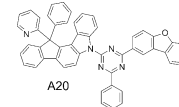
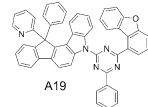
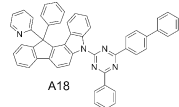
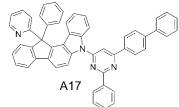
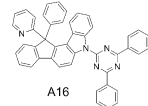
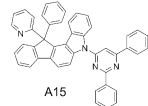
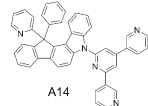
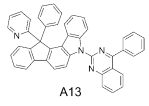




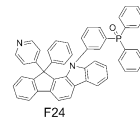
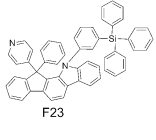
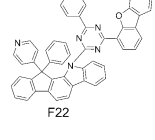
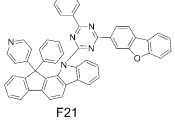
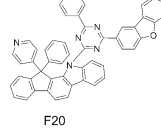
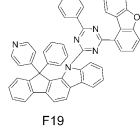
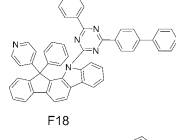
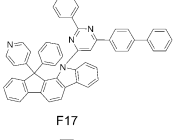
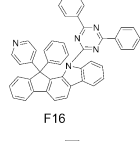
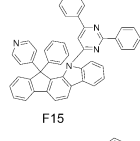
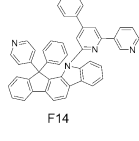
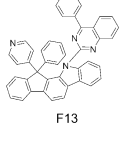
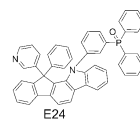
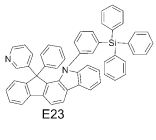
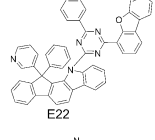
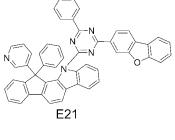
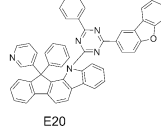
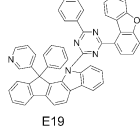
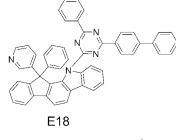
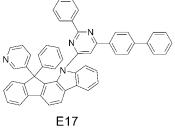
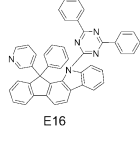
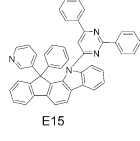
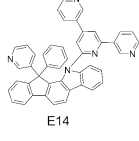
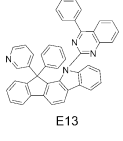
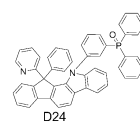
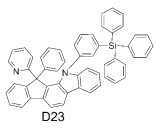
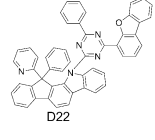
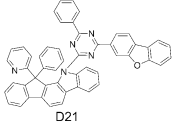
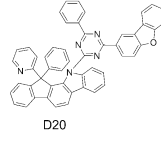
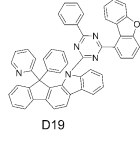
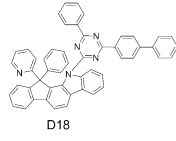
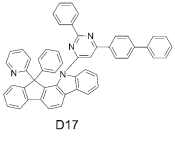
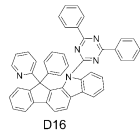
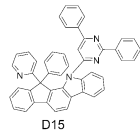
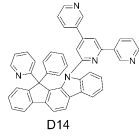
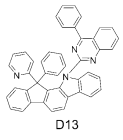
[0061]



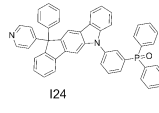
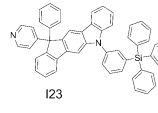
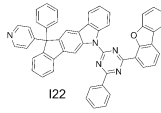
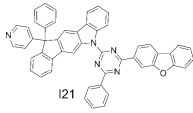
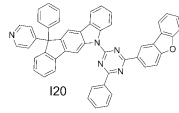
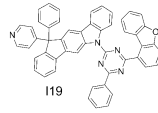
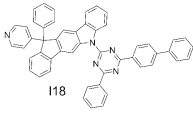
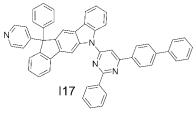
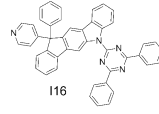
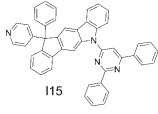
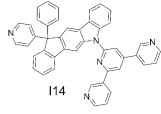
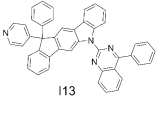
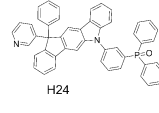
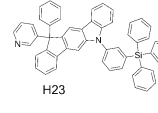
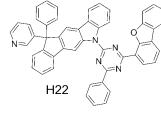
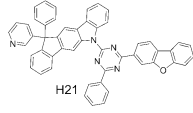
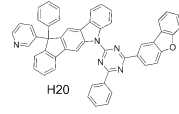
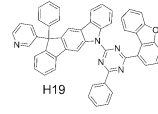
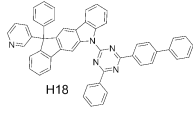
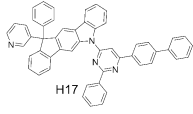
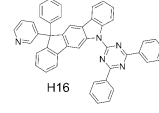
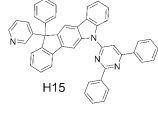
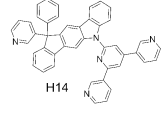
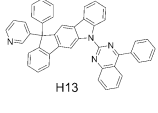
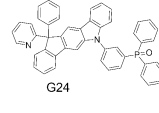
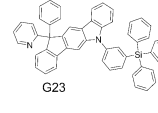
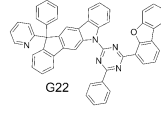
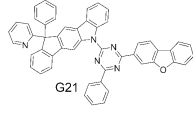
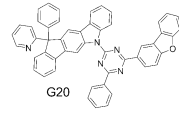
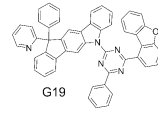
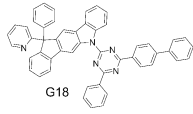
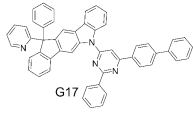
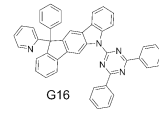
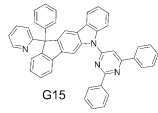
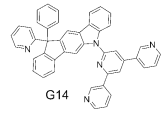
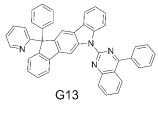
[0062]



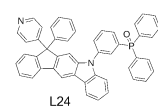
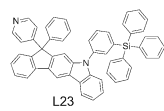
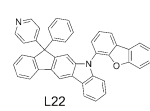
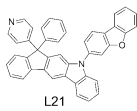
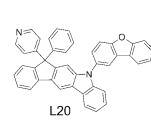
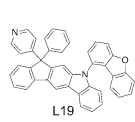
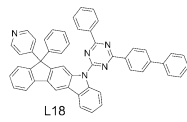
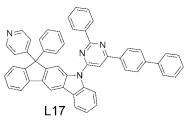
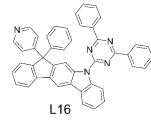
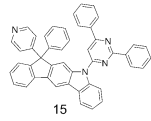
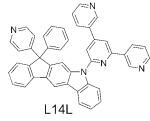
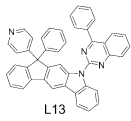
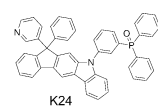
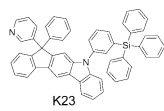
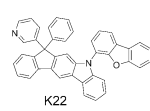
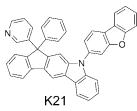
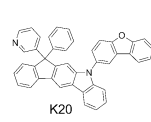
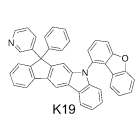
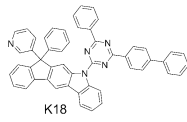
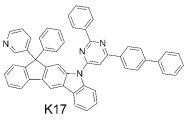
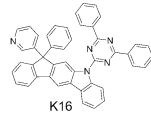
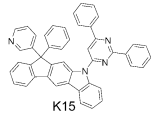
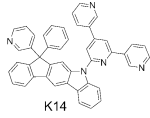
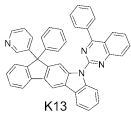
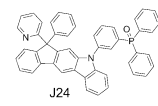
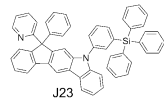
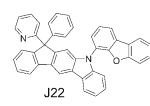
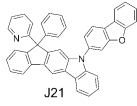
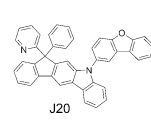
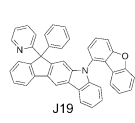
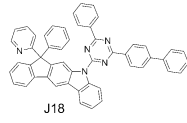
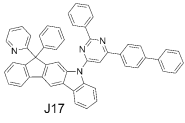
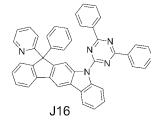
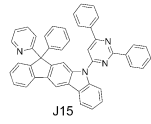
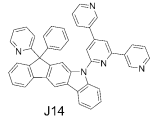
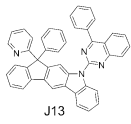
[0063]



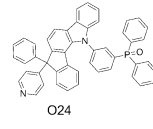
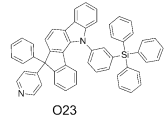
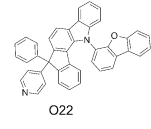
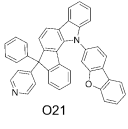
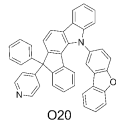
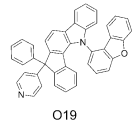
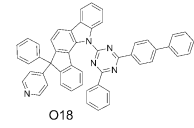
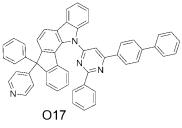
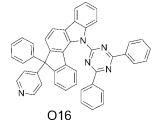
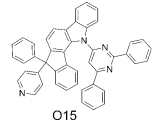
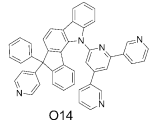
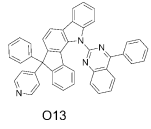
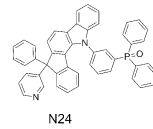
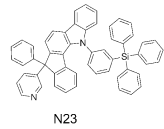
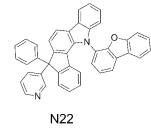
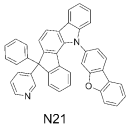
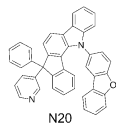
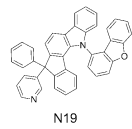
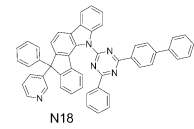
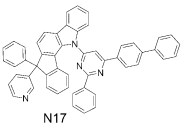
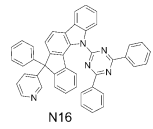
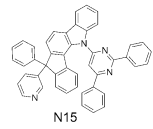
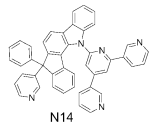
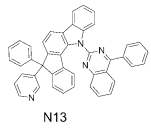
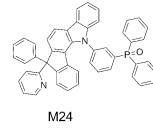
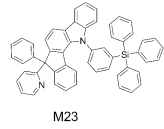
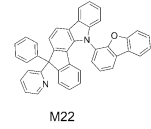
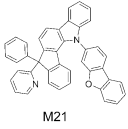
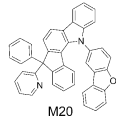
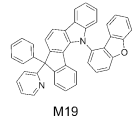
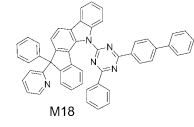
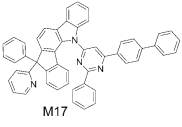
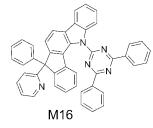
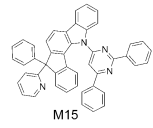
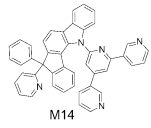
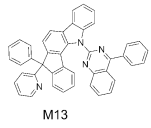
[0064]



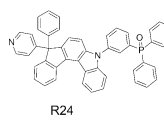
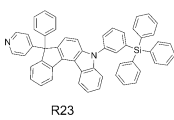
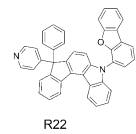
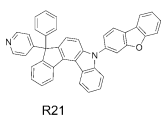
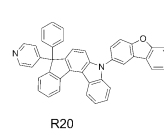
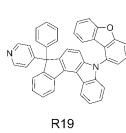
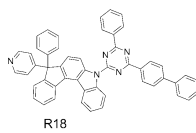
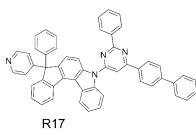
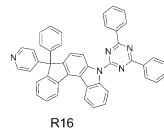
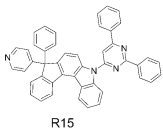
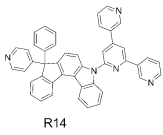
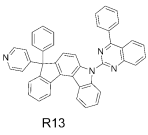
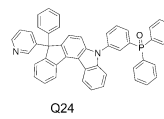
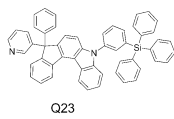
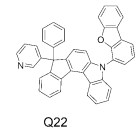
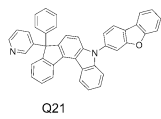
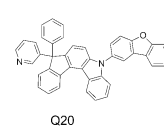
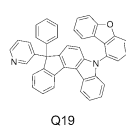
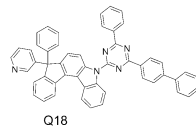
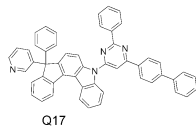
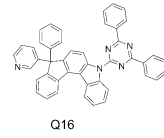
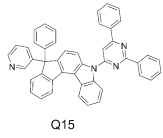
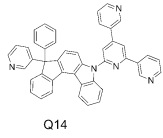
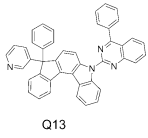
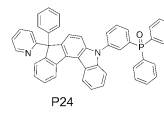
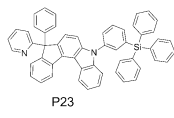
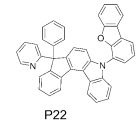
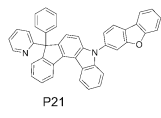
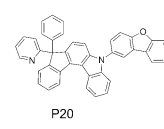
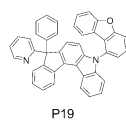
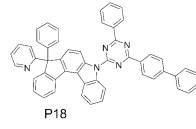
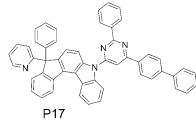
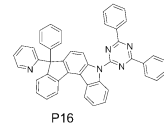
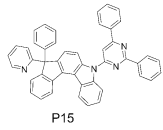
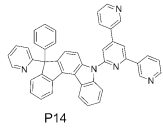
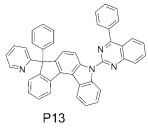
[0065]



[0066]

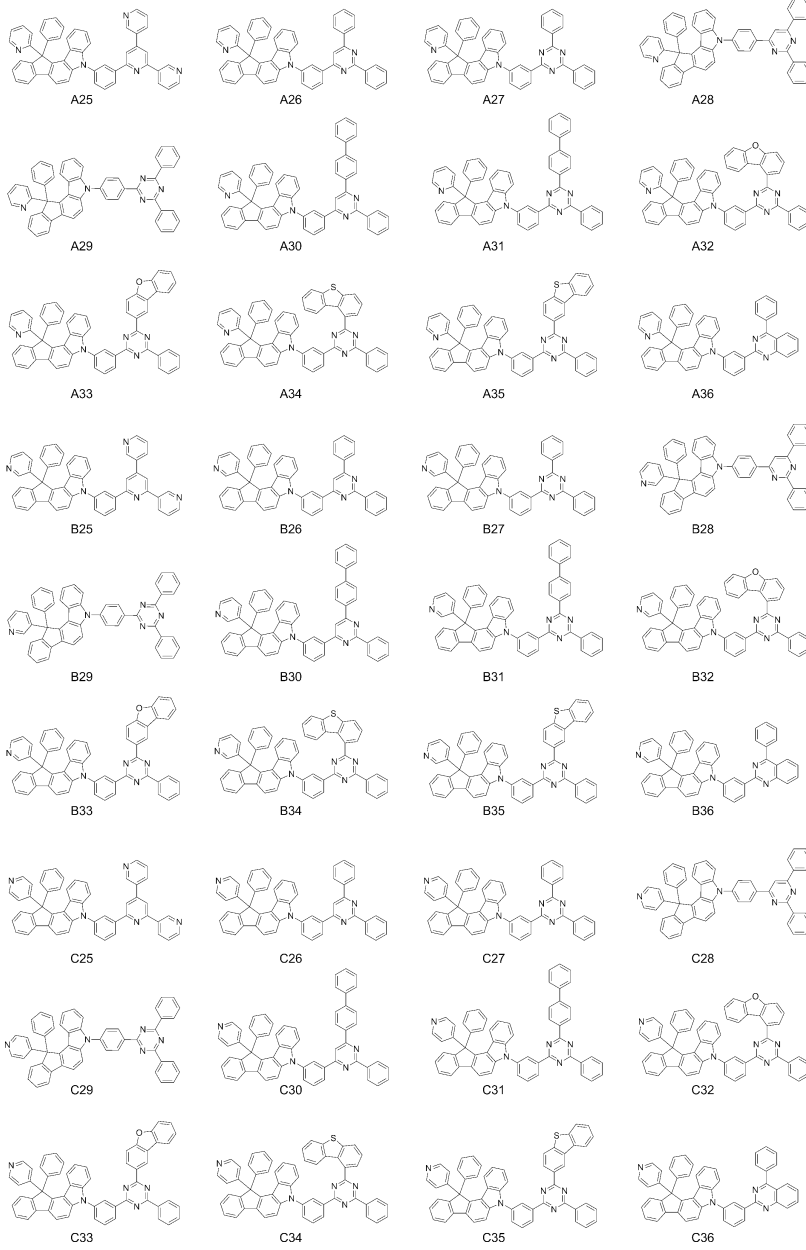


[0067]

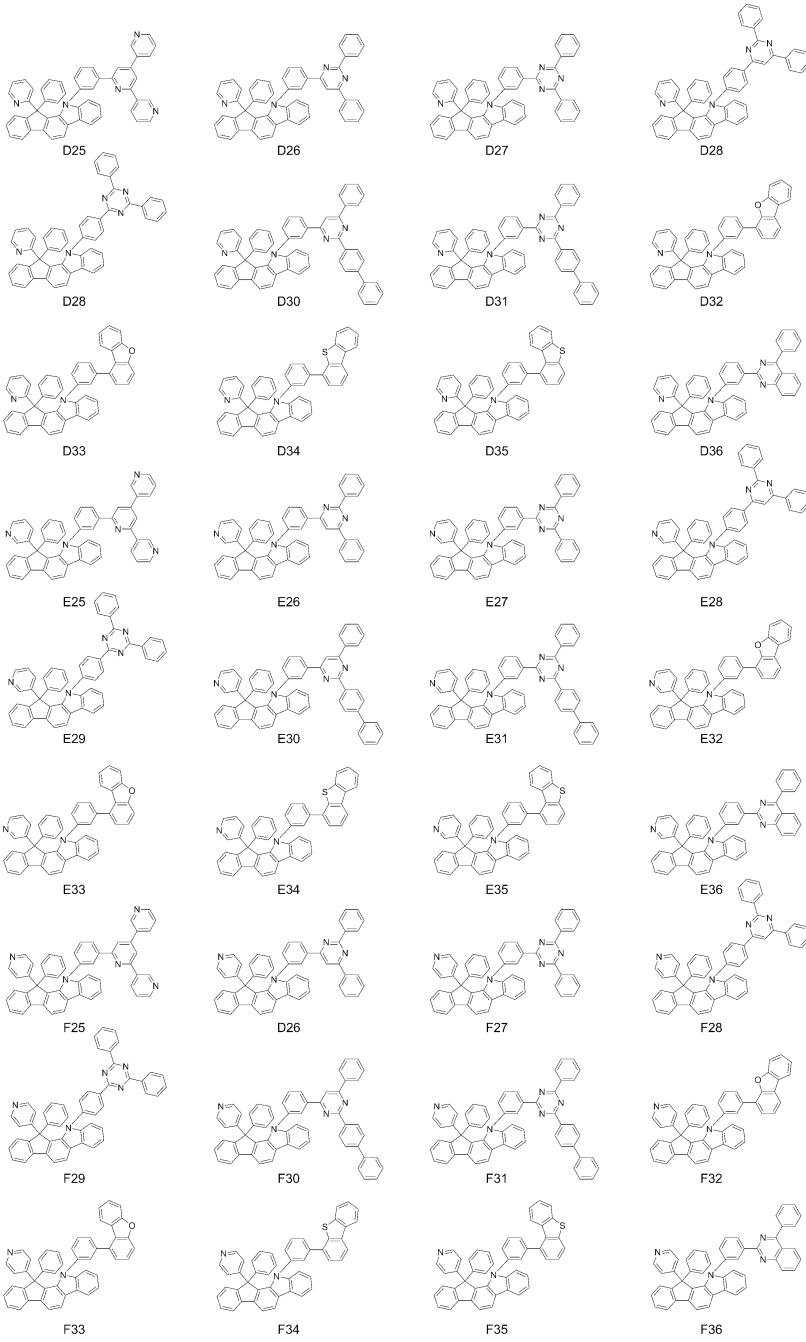


[0068]

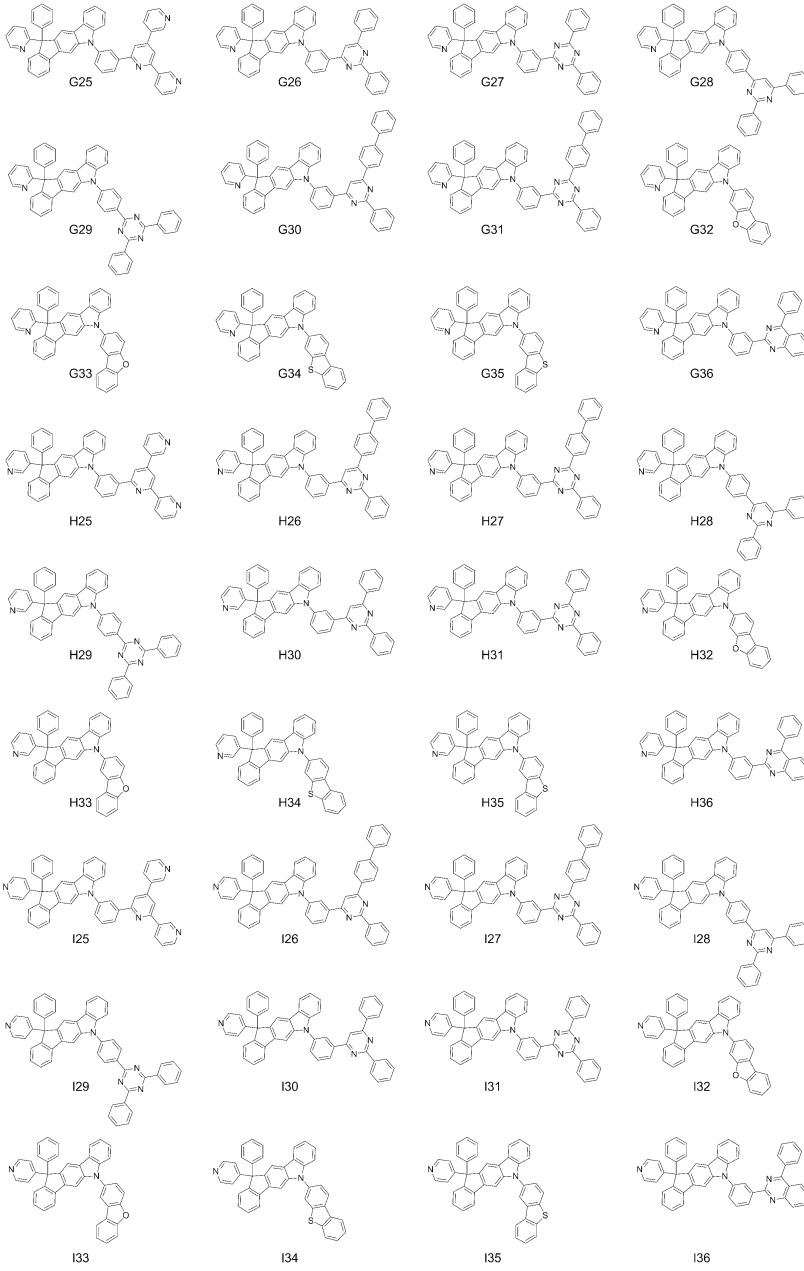




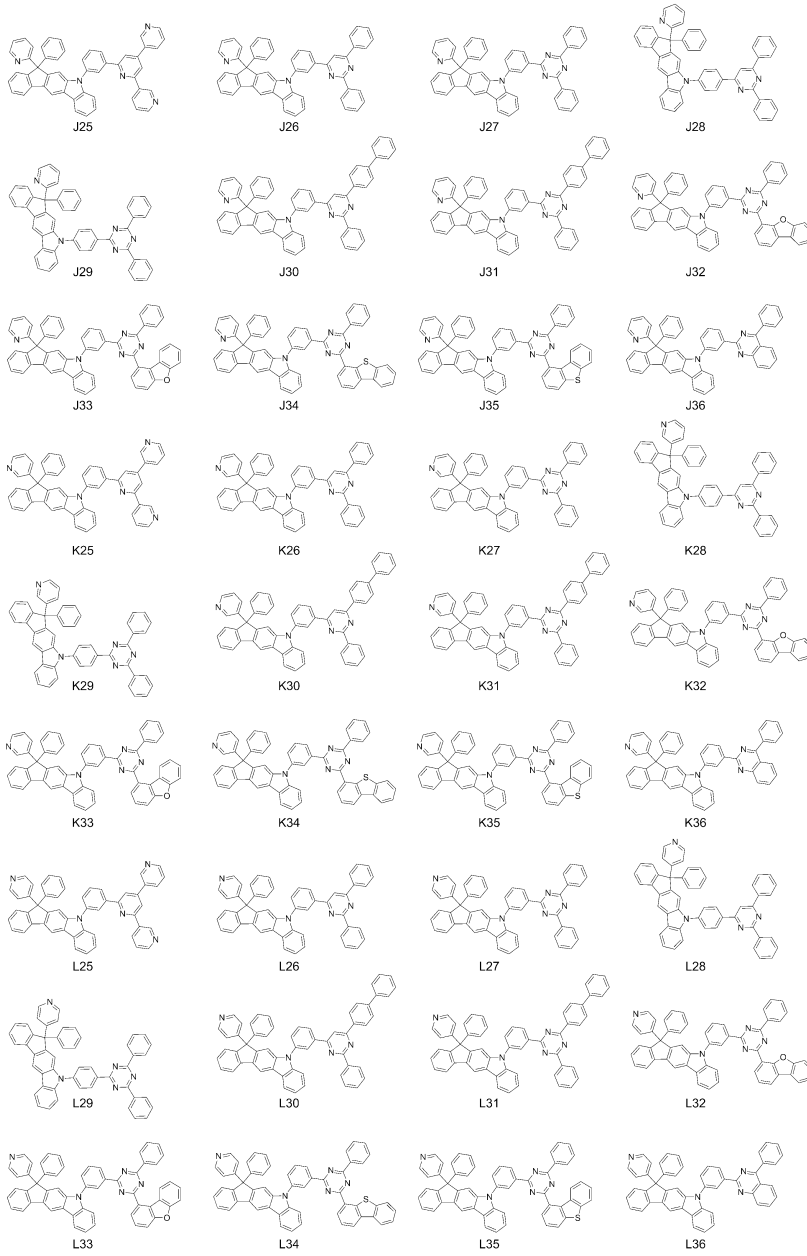
[0069]



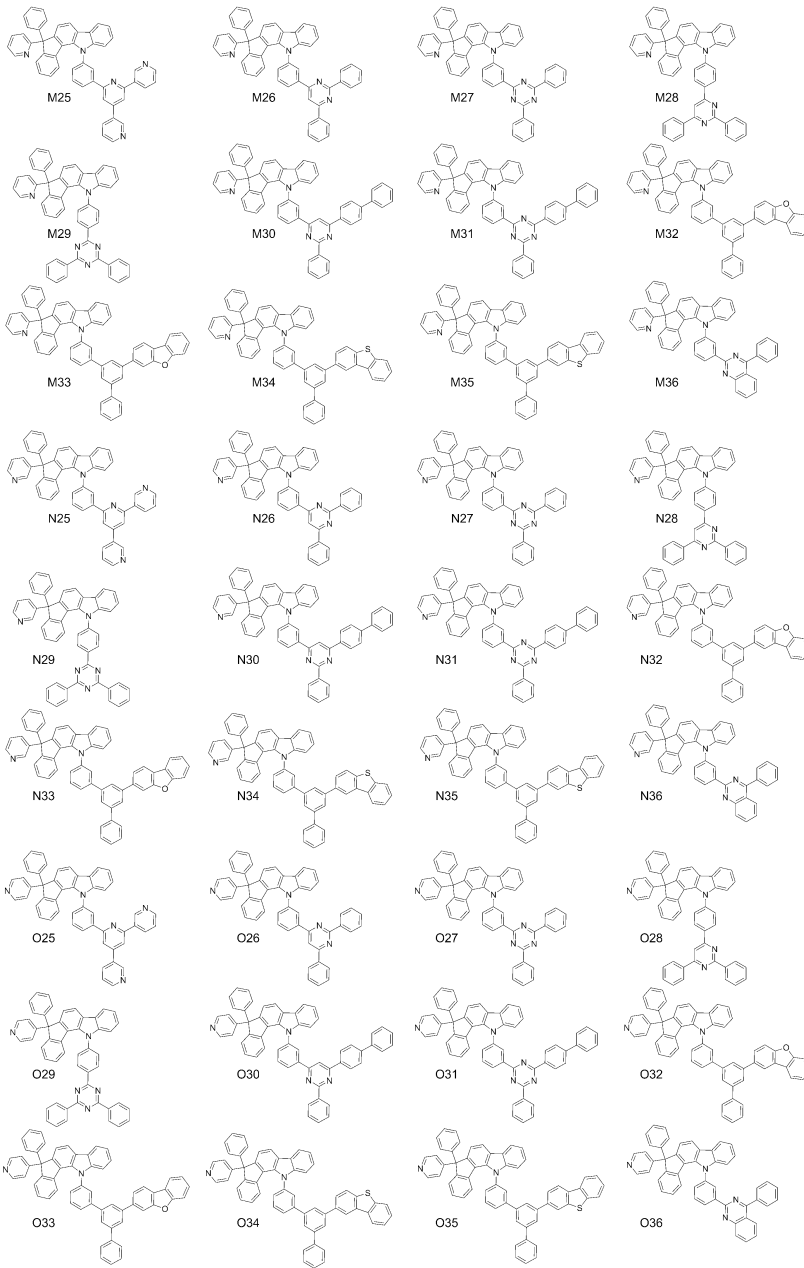
[0070]



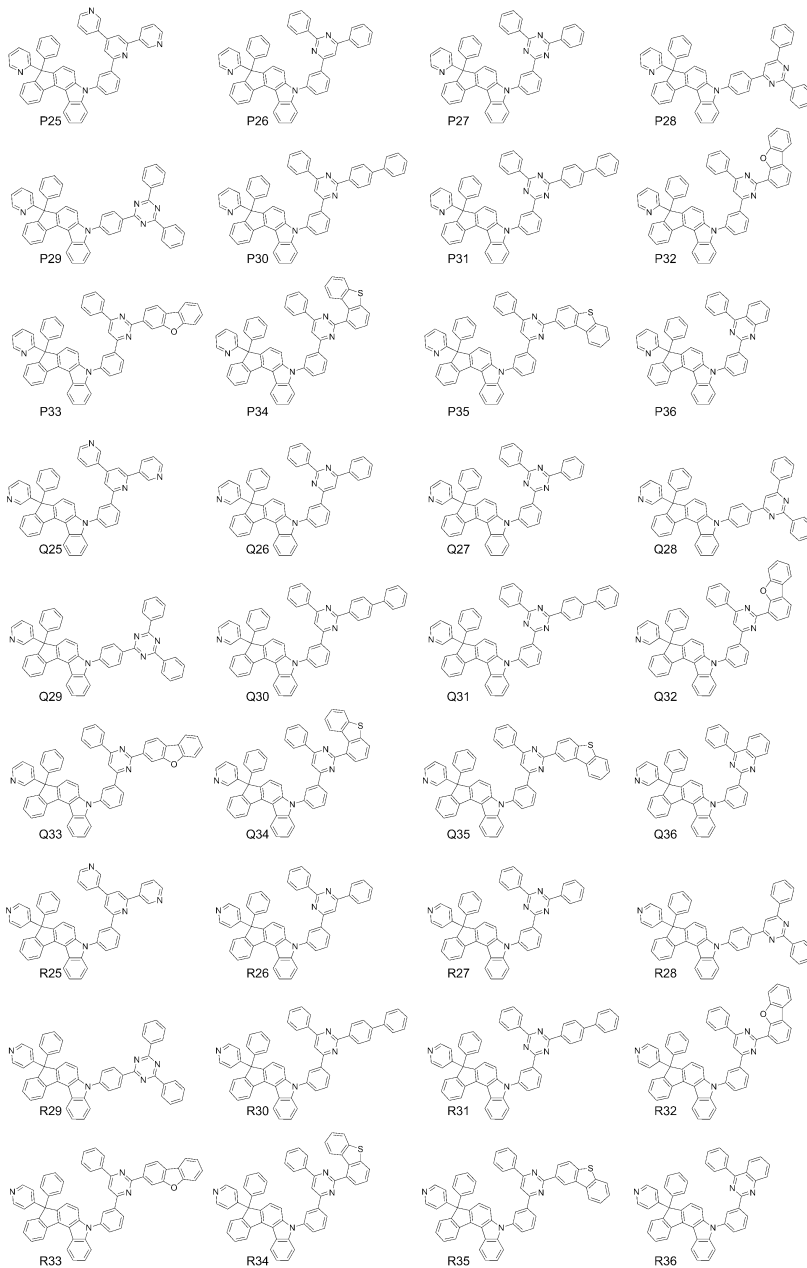
[0071]



[0072]



[0073]



[0074]

[0075]

본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[0076]

본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[0077]

본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[0078]

본 발명에서 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantane) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[0079]

본 발명에서 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로

치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

- [0080] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.
- [0081] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazoly)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.
- [0082] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.
- [0083] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.
- [0084] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴을 의미하며, 모노-뿐만 아니라 디-, 트리-알킬실릴을 포함한다. 또, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미하고, 모노-뿐만 아니라 디-, 트리-아릴실릴 등의 폴리아릴실릴을 포함한다.
- [0085] 본 발명에서 "알킬보론기"는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 보론기를 의미하며, "아릴보론기"는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 보론기를 의미한다.
- [0086] 본 발명에서 "알킬포스피닐기"는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 포스핀기를 의미하고, 모노- 뿐만 아니라 디-알킬포스피닐기를 포함한다. 또, 본 발명에서 "아릴포스피닐기"는 탄소수 6 내지 60의 모노아릴 또는 디아릴로 치환된 포스핀기를 의미하고, 모노- 뿐만 아니라 디-아릴포스피닐기를 포함한다.
- [0087] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미하며, 모노-뿐만 아니라 디-아릴아민을 포함한다.
- [0088] <유기 전계 발광 소자>
- [0089] 한편, 본 발명의 다른 측면은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(이하, '유기 EL 소자')에 관한 것이다.
- [0090] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극(anode), 음극(cathode) 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.
- [0091] 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 발광층을 포함하고, 선택적으로 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상을 포함한다. 다만, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층 물질, 바람직하게 청색, 녹색 및 적색의 호스트로서 유기 전계 발광 소자에 포함된다. 이 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함함으로써, 발광층 내 전자 주입 및 수송 능력이 우수하여 발광층에서의 정공과 전자의 결합력이 높기 때문에, 발광효율, 전력효율, 수명, 휘도, 구동 전압, 열적 안정성 등이 우수하다.
- [0092] 다른 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 선택적으로 정공수송층, 정공주입층, 정공수소층, 발광층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상을 포함한다. 다만, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자수송층 물질로 유기 전계 발광 소자에 포함된다. 이 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1의 화합물을 포함함으로써, 전자가 음극에서 전자수송층으로 용이하게 주입되면서, 전자수송층에서 발광층으로 빠르게 이동되기 때문에, 발광층에

서의 정공과 전자의 결합력이 높고, 따라서 발광효율, 전력효율, 휘도 등이 우수하다.

[0093] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 기판 위에, 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[0094] 일례에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 기판 위에, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조를 가질 수 있다. 선택적으로, 상기 전자수송층과 음극 사이에 전자주입층이 위치할 수 있다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 적어도 하나(예컨대, 발광층 또는 전자수송층)가 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0095] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0096] 본 발명에서 사용 가능한 기판은 특별히 한정되지 않으며, 비제한적인 예로는 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 있다.

[0097] 또, 양극 물질의 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

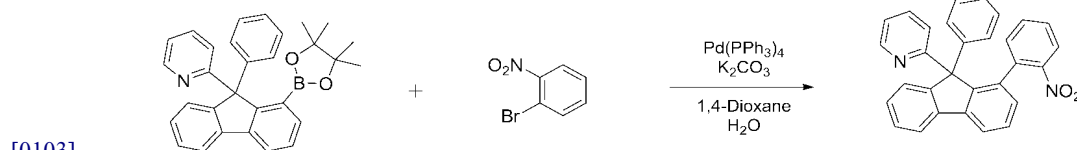
[0098] 또, 음극 물질의 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[0099] 또한, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

[0100] 이하, 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[0101] **[준비예 1]**

[0102] <단계 1> 2-(1-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

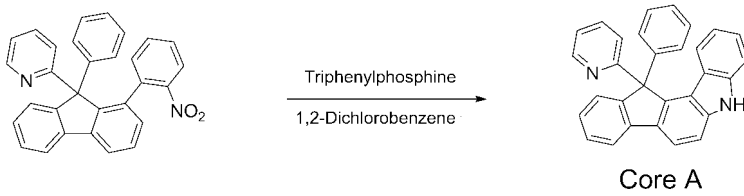


[0104] 2-(9-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고, 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 6.9 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0105] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)



[0106] <단계 2> Core A의 합성



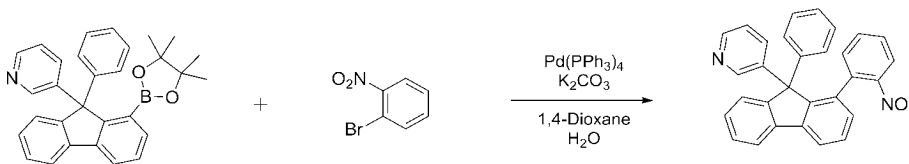
[0107]

[0108] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (1,2-dichlorobenzene)(200 ml)를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.84 g (yield: 80 %)를 획득하였다.

[0109] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0110] [준비에 2]

[0111] <단계 1> 3-(1-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

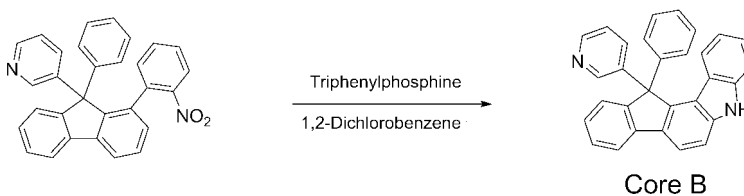


[0112]

[0113] 3-(9-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고, 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후, 다이클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 7.5 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0114] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0115] <단계 2> Core B의 합성



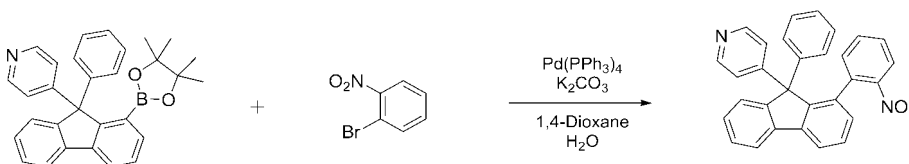
[0116]

[0117] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고, 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.84 g (yield: 80 %)를 획득하였다.

[0118] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0119] [준비에 3]

[0120] <단계 1> 4-(1-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성



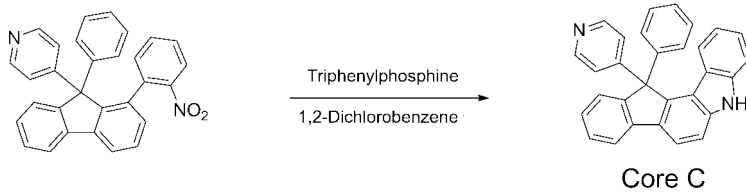
[0121]

[0122] 4-(9-phenyl-1-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine (10.0 g, 22.45

mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고, 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 7.5 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0123] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0124] <단계 2> Core C의 합성



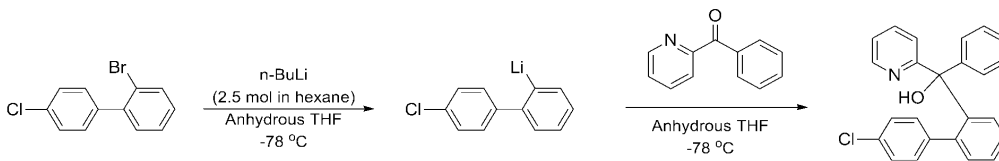
[0125]

[0126] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고, 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 15.77 g (yield: 85 %)를 획득하였다.

[0127] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0128] [준비예 4]

[0129] <단계 1> (4'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-2-yl)methanol의 합성

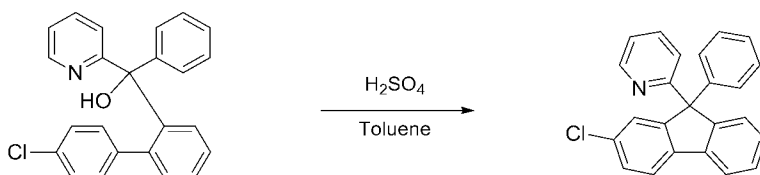


[0130]

[0131] 질소 기류 하에서 2-bromo-4'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-2-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이어서, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터링하였다. 필터링된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0132] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0133] <단계 2> 2-(2-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성



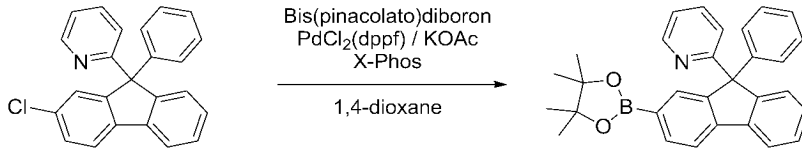
[0134]

[0135] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가한 후, 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 18.52 g을 획득하였다.

[0136] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0137] 1H-NMR: δ 7.50 (m, 14H), 7.70 (s, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.95 (m, 2H), 8.30 (d, 2H)

[0138] <단계 3> 2-(9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

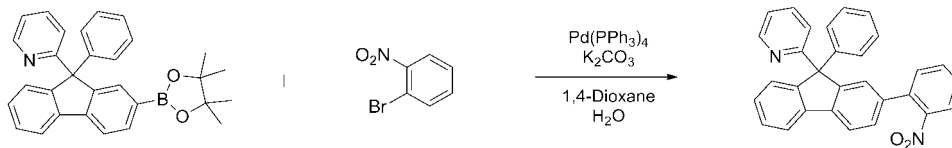


[0139]

[0140] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터링하였다. 필터링된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.07 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0141] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0142] <단계 4> 2-(2-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

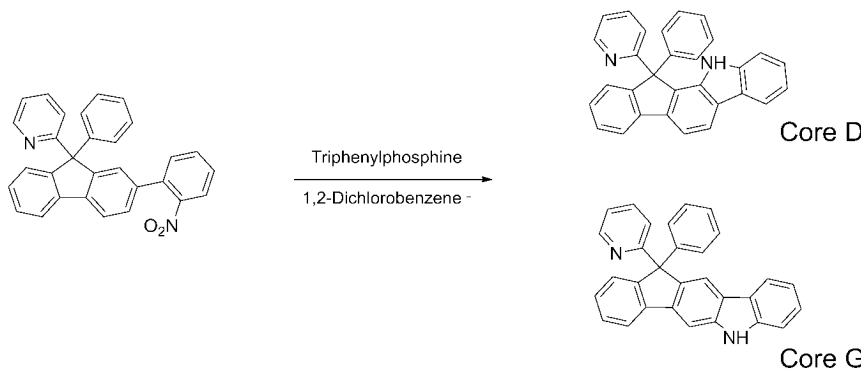


[0143]

[0144] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol)와 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 7.42 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0145] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0146] <단계 5> Core D 및 Core G의 합성



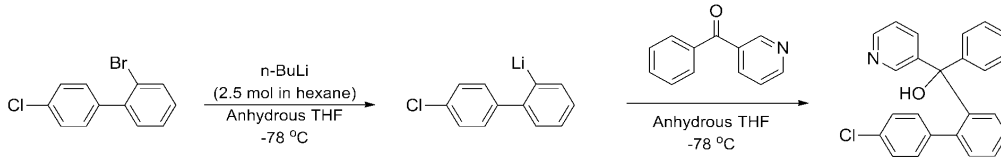
[0147]

[0148] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core D (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core G (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0149] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0150] [준비에 5]

[0151] <단계 1> (4'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-3-yl)methanol의 합성

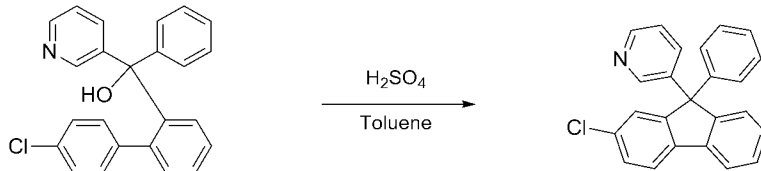


[0152]

[0153] 질소 기류 하에서 2-bromo-4'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-3-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이어서, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터링하였다. 필터링된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0154] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0155] <단계 2> 3-(2-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

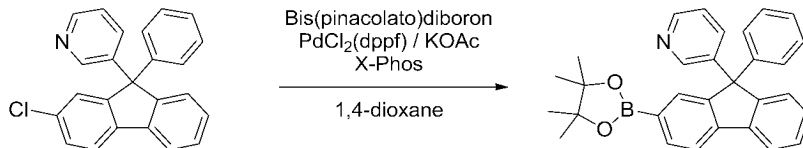


[0156]

[0157] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 16 g을 획득하였다.

[0158] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0159] <단계 3> 3-(9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성



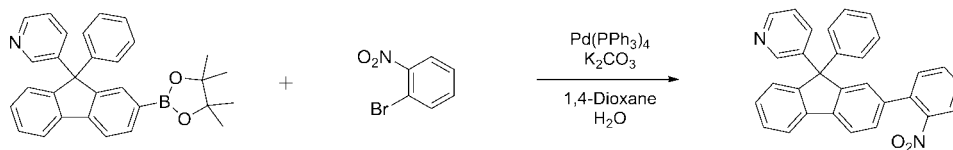
[0160]

[0161] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf)(0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.07 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0162] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0163] <sup>1</sup>H-NMR: δ 1.20 (s, 12H), 7.06 (s, 1H), 7.20 (m, 8H), 7.50 (m, 6H), 7.90 (d, 2H), 8.30 (d, 2H)

[0164] <단계 4> 3-(2-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성



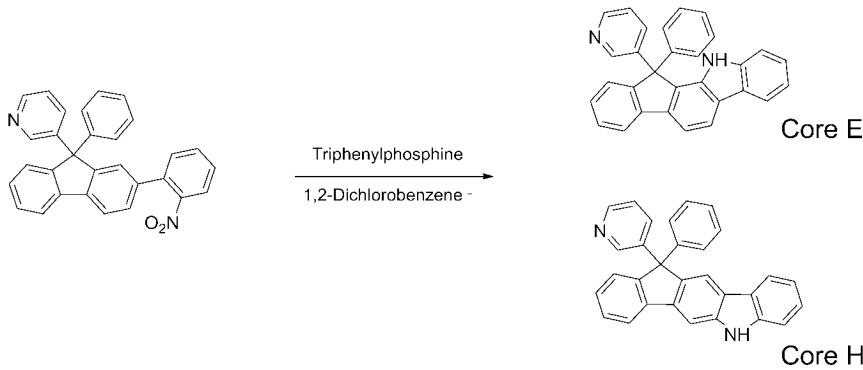
[0165]

[0166] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하

고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0167] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0168] <단계 5> Core E, Core H의 합성



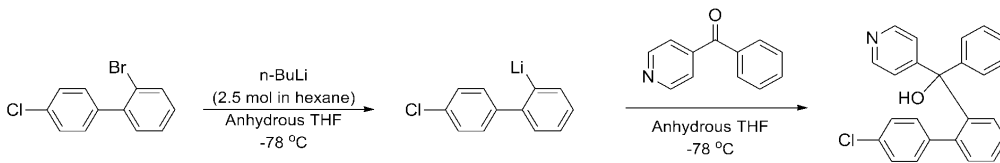
[0169]

[0170] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core E (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core H (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0171] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0172] [준비예 6]

[0173] <단계 1> (4'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-4-yl)methanol의 합성

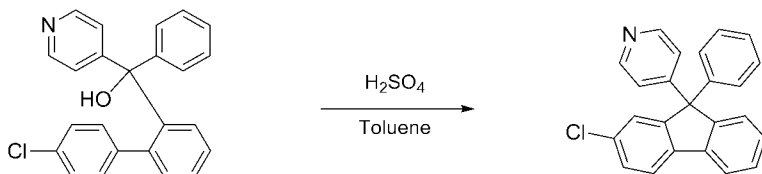


[0174]

[0175] 질소 기류 하에서 2-bromo-4'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-4-yl)methanone(13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물(THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0176] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0177] <단계 2> 4-(2-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

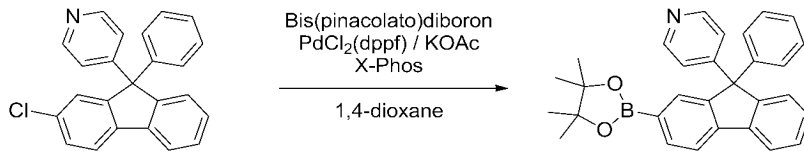


[0178]

[0179] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 18 g을 획득하였다.

[0180] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0181] <단계 3> 4-(9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

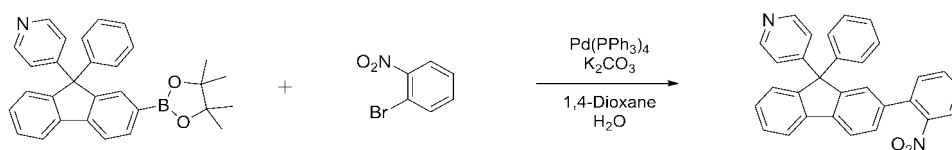


[0182]

[0183] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고, 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.7 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

[0184] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0185] <단계 4> 4-(2-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

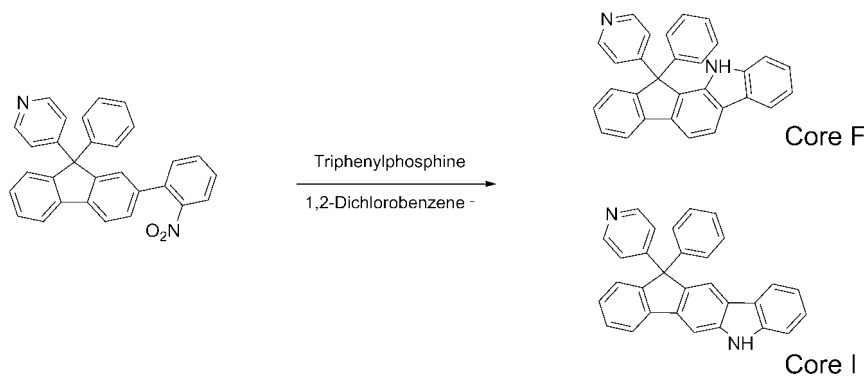


[0186]

[0187] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0188] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0189] <단계 5> Core F, Core I의 합성



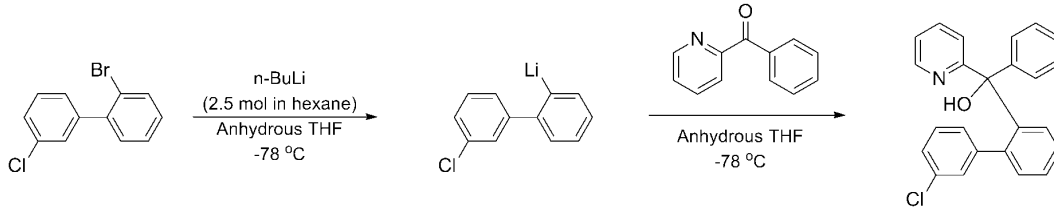
[0190]

[0191] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core F (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core I (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0192] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0193] [준비예 7]

[0194] <단계 1> (3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-2-yl)methanol의 합성

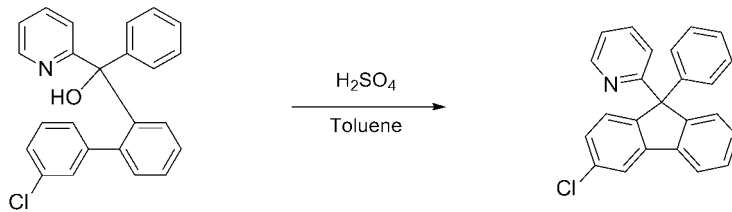


[0195]

[0196] 질소 기류 하에서 2-bromo-3'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-2-yl)methanone(13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물(THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0197] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0198] <단계 2> 2-(3-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

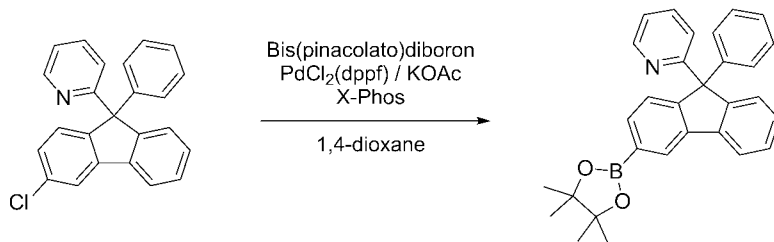


[0199]

[0200] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 20 g을 획득하였다.

[0201] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0202] <단계 3> 2-(9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

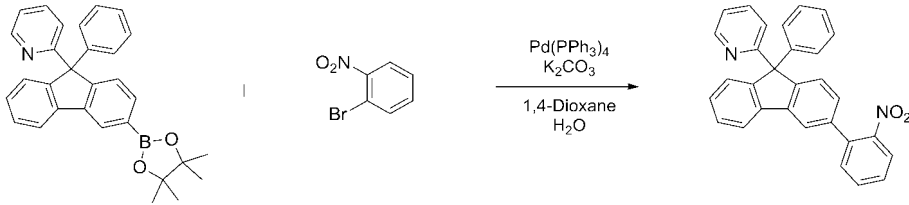


[0203]

[0204] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.07 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0205] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0206] <단계 4> 2-(3-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

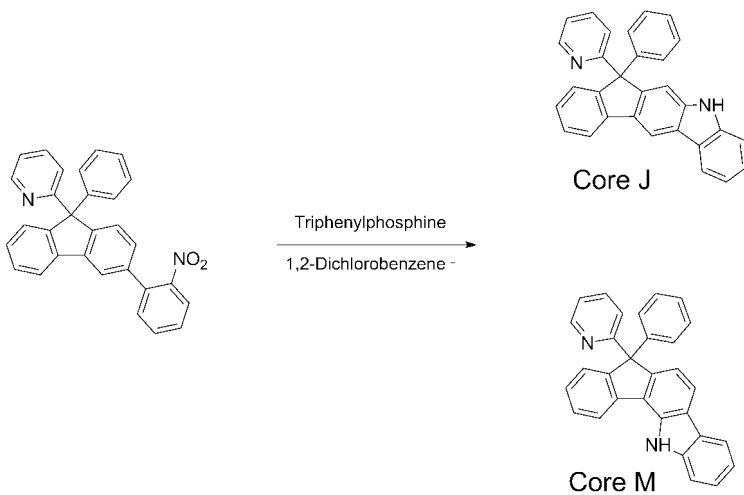


[0207]

[0208] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0209] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0210] <단계 5> Core J, Core M의 합성



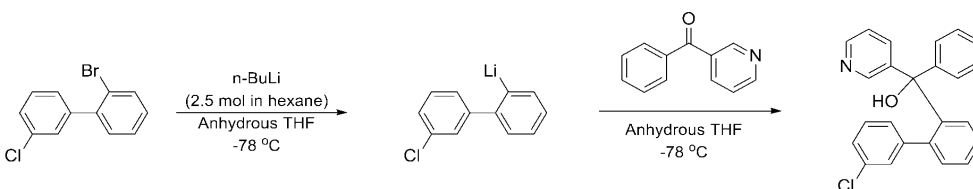
[0211]

[0212] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB 200 ml를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core J (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core M (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0213] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0214] [준비에 8]

[0215] <단계 1> (3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-3-yl)methanol의 합성



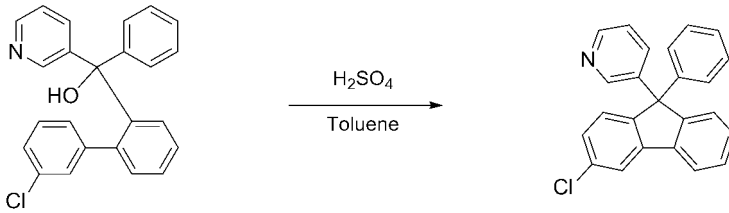
[0216]

[0217] 질소 기류 하에서 2-bromo-3'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-3-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.



[0218] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0219] <단계 2> 3-(3-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

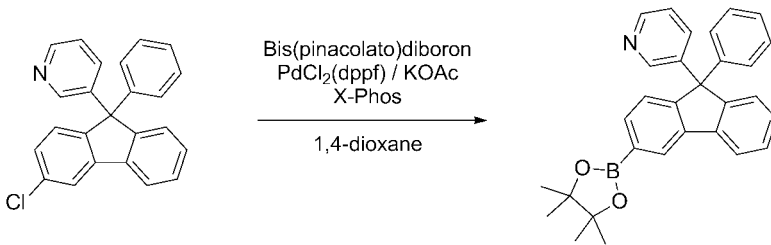


[0220]

[0221] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 17 g을 획득하였다.

[0222] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0223] <단계 3> 3-(9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

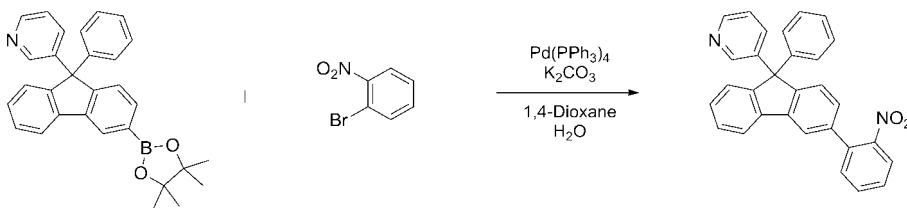


[0224]

[0225] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.57 g (yield: 84 %)을 획득하였다.

[0226] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0227] <단계 4> 3-(3-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

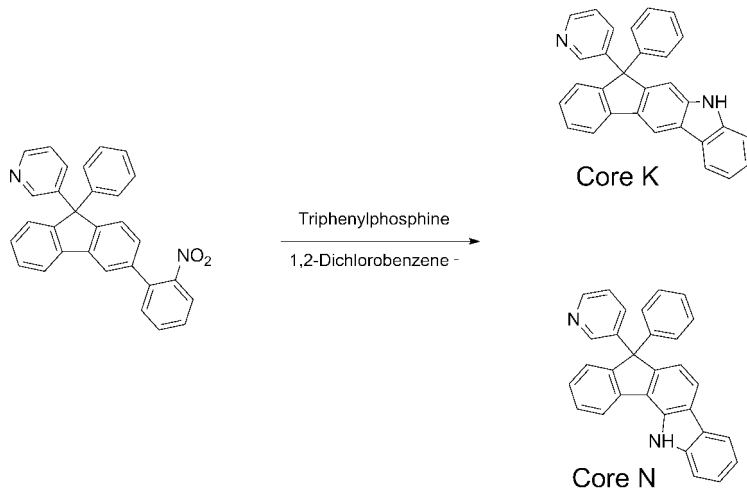


[0228]

[0229] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0230] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0231] <단계 5> Core K 및 Core N의 합성



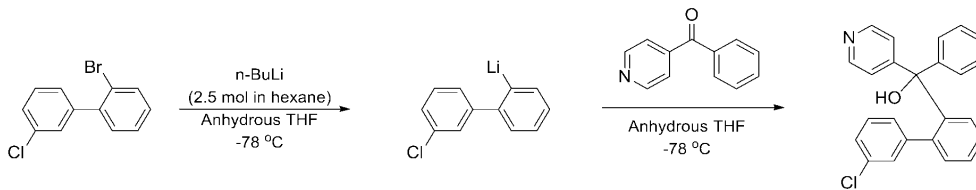
[0232]

[0233] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core K (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core N (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0234] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0235] [준비에 9]

[0236] <단계 1> (3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-4-yl)methanol의 합성

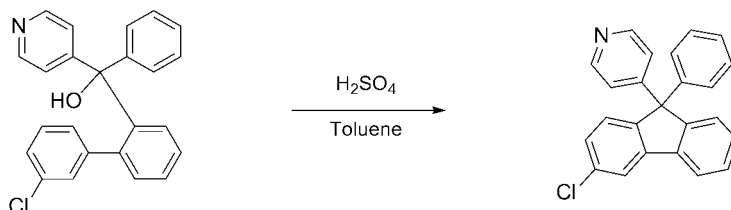


[0237]

[0238] 질소 기류 하에서 2-bromo-3'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78°C에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-4-yl)methanone(13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78°C)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0239] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0240] <단계 2> 4-(3-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

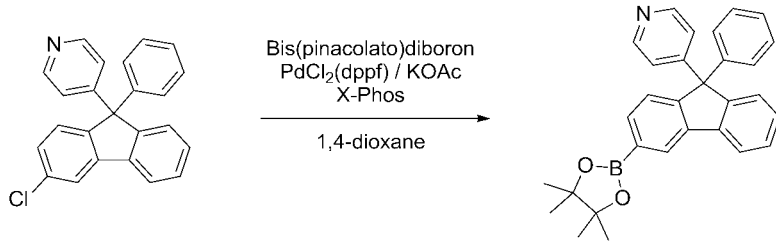


[0241]

[0242] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100°C에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 20 g을 획득하였다.

[0243] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0244] <단계 3> 4-(9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

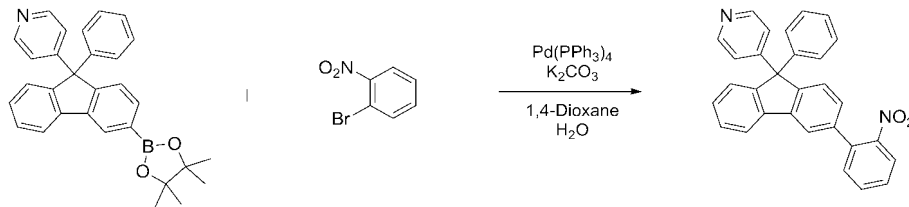


[0245]

[0246] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.33 g (yield: 90 %)을 획득하였다.

[0247] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0248] <단계 4> 4-(3-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

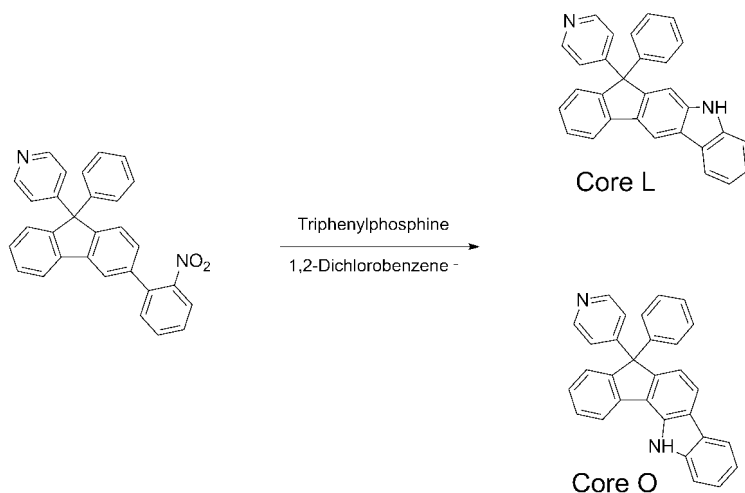


[0249]

[0250] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0251] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0252] <단계 5> Core L, Core O의 합성



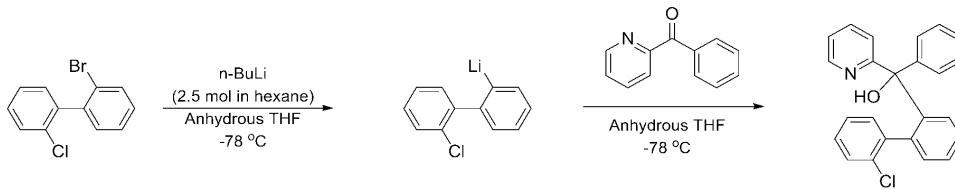
[0253]

[0254] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 Core L (5.56 g, yield: 30 %) 및 Core O (8.35 g, yield: 45 %)를 획득하였다.

[0255] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0256] [준비예 10]

[0257] <단계 1> (2'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-2-yl)methanol의 합성

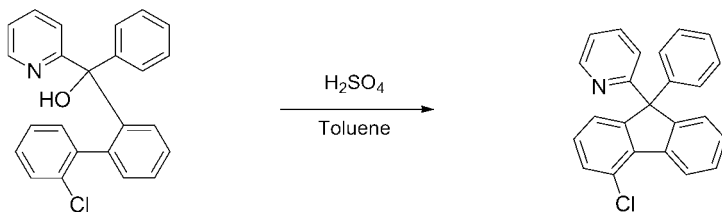


[0258]

[0259] 질소 기류 하에서 2-bromo-2'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-2-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0260] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0261] <단계 2> 2-(4-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

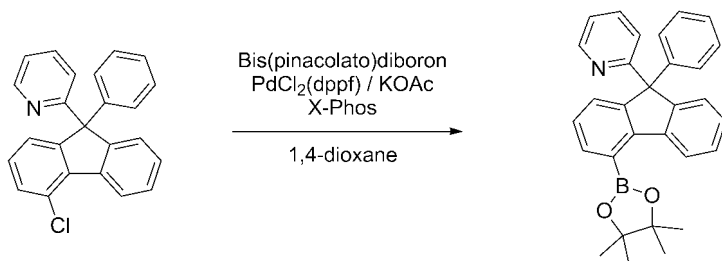


[0262]

[0263] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 15 g을 획득하였다.

[0264] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0265] <단계 3> 2-(9-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

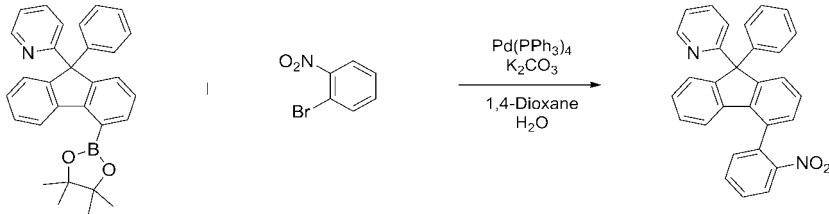


[0266]

[0267] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.33 g (yield: 90 %)을 획득하였다.

[0268] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0269] <단계 4> 2-(4-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

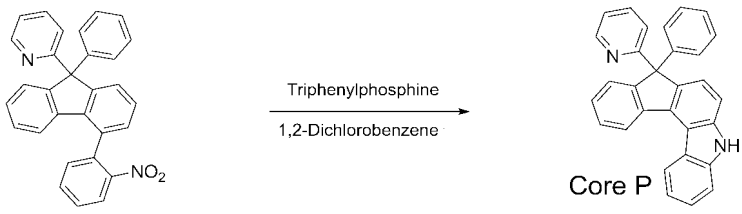


[0270]

[0271] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0272] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0273] <단계 5> Core P의 합성



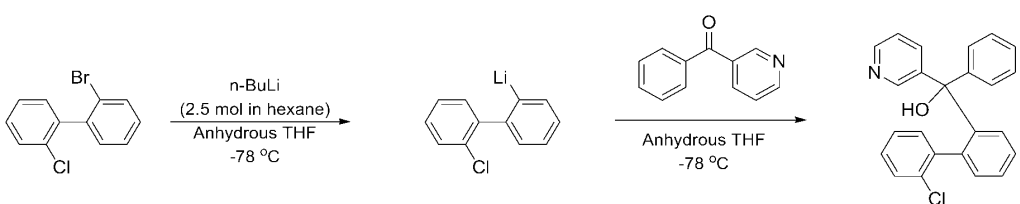
[0274]

[0275] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB 200 ml를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 13.91 g (yield: 75 %)를 획득하였다.

[0276] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0277] [준비에 11]

[0278] <단계 1> (2'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-3-yl)methanol의 합성

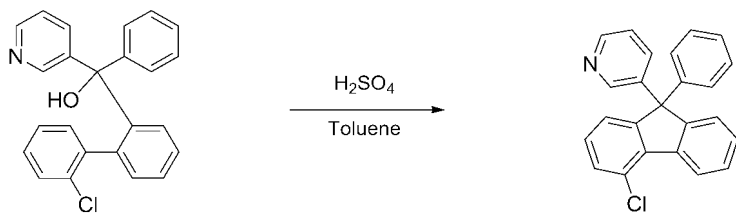


[0279]

[0280] 질소 기류 하에서 2-bromo-2'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-3-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0281] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0282] <단계 2> 3-(4-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성



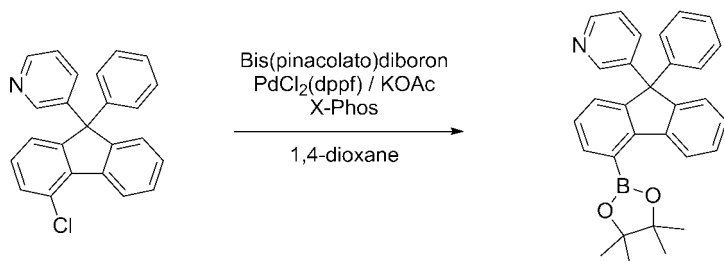
[0283]

[0284] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 여기에 황산 (10 ml)를 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 22 g을 획득하였다.

[0285] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0286] 1H-NMR: δ 7.50 (m, 14H), 7.70 (s, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.95 (m, 2H), 8.30 (d, 2H)

[0287] <단계 3> 3-(9-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

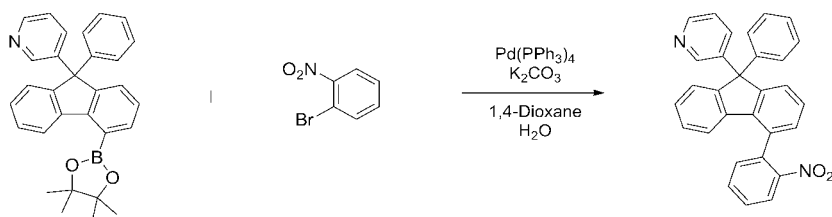


[0288]

[0289] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.5 g (yield: 86 %)을 획득하였다.

[0290] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0291] <단계 4> 3-(4-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

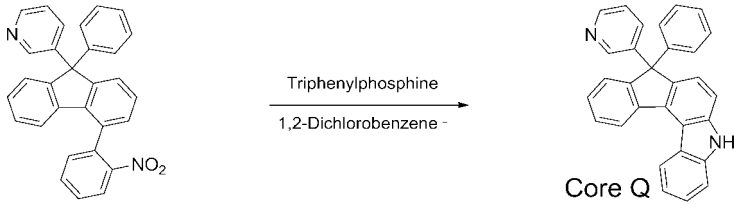


[0292]

[0293] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0294] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0295] <단계 5> Core Q의 합성



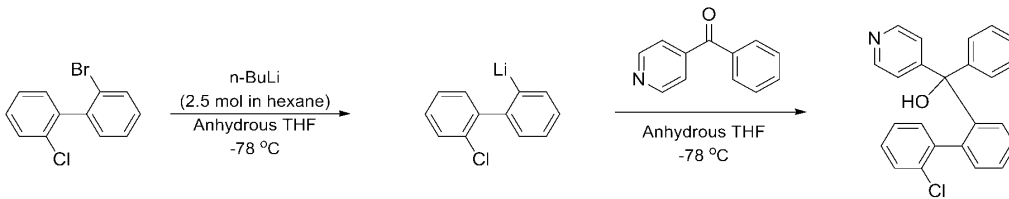
[0296]

[0297] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.84 g (yield: 80 %)를 획득하였다.

[0298] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)

[0299] [준비에 12]

[0300] <단계 1> (2'-chloro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)(phenyl)(pyridin-4-yl)methanol의 합성

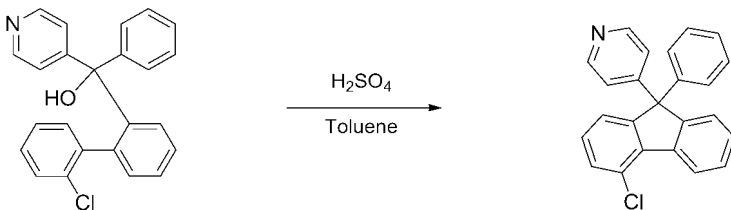


[0301]

[0302] 질소 기류 하에서 2-bromo-2'-chloro-1,1'-biphenyl (20.0 g, 74.75 mmol)에 무수 THF(200 ml)을 넣고 -78℃에서 교반하였다. 이후, n-BuLi (2.5M in Hexane, 35.88 ml)을 반응기에 천천히 적가하여 1시간 동안 반응하고, 반응한 혼합물을 phenyl(pyridin-4-yl)methanone (13.70 g, 74.75 mmol) 혼합물 (THF, 100 ml, -78℃)이 담긴 반응기에 적가하여 상온에서 2시간동안 교반하였다. 이후, 반응물에 염화암모늄 용액을 넣어 반응을 종결하고 다이클로로메탄으로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물을 획득하였다.

[0303] GC-Mass (이론치: 371.86 g/mol, 측정치: 371 g/mol)

[0304] <단계 2> 4-(4-chloro-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

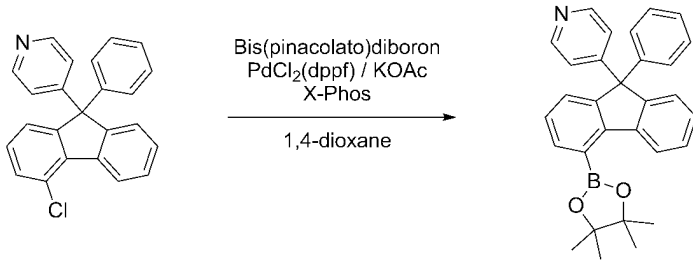


[0305]

[0306] 상기 <단계 1>에서 얻은 화합물을 정제하지 않고, 황산 (10 ml)을 적가하고 100℃에서 5시간 동안 교반하였다. 이후, 생성된 고체를 필터로 여과하고 1M 수산화나트륨 수용액으로 씻어준 후 여과하여 목적 화합물 20 g을 획득하였다.

[0307] GC-Mass (이론치: 353.85 g/mol, 측정치: 353 g/mol)

[0308] <단계 3> 4-(9-phenyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

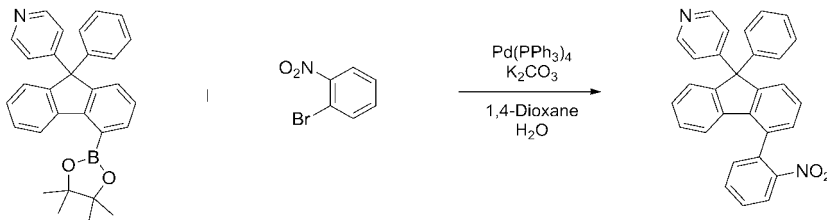


[0309]

[0310] 상기 <단계 2>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 28.26 mmol), bis(pinacolato)diboron (8.61 g, 33.91 mmol), PdCl<sub>2</sub>(dppf) (0.19 g, 0.85 mmol), KOAc (5.55 g, 56.52 mmol), X-Phos (2.69 g, 5.65 mmol) 및 1,4-dioxane (100 ml)를 혼합하고 110°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.5 g (yield: 86 %)을 획득하였다.

[0311] GC-Mass (이론치: 445.37 g/mol, 측정치: 445 g/mol)

[0312] <단계 4> 4-(4-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluoren-9-yl)pyridine의 합성

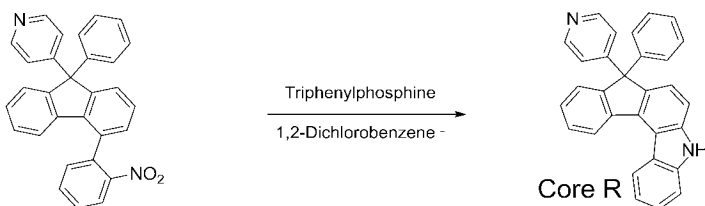


[0313]

[0314] 상기 <단계 3>에서 얻은 화합물 (10.0 g, 22.45 mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (4.54 g, 22.45 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.78 g, 0.67 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (9.31 g, 67.36 mmol), 1,4-dioxane (100 ml) 및 H<sub>2</sub>O (25 ml)를 혼합하고 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0315] GC-Mass (이론치: 440.50 g/mol, 측정치: 440 g/mol)

[0316] <단계 5> Core R의 합성



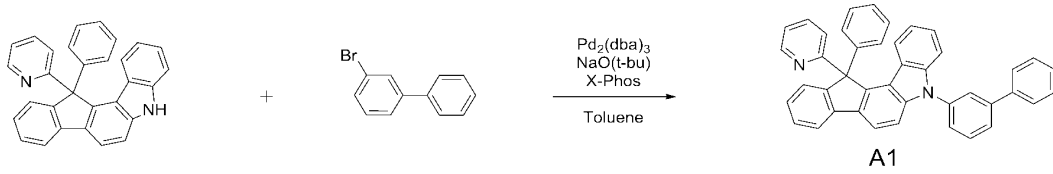
[0317]

[0318] 상기 <단계 4>에서 얻은 화합물 (20.0 g, 45.40 mmol), triphenylphosphine (35.73 g, 136.21 mmol) 및 DCB (200 ml)를 혼합하고 180°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 유기 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.84 g (yield: 80 %)를 획득하였다.

[0319] GC-Mass (이론치: 408.50 g/mol, 측정치: 408 g/mol)



[0320] [합성예 1] 화합물 A1의 합성

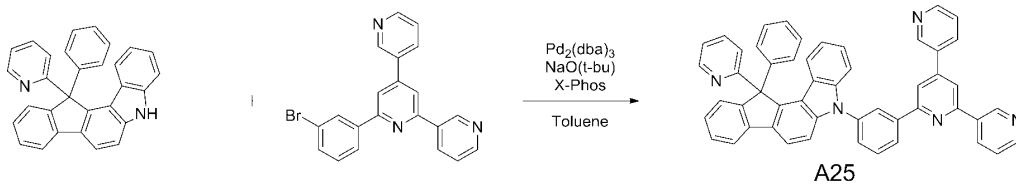


[0321]

[0322] 질소 기류 하에서 Core A (10.0 g, 24.48 mmol), 3-bromo-1,1'-biphenyl (5.71 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.98 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0323] GC-Mass (이론치: 560.70 g/mol, 측정치: 560 g/mol)

[0324] [합성예 2] 화합물 A25의 합성

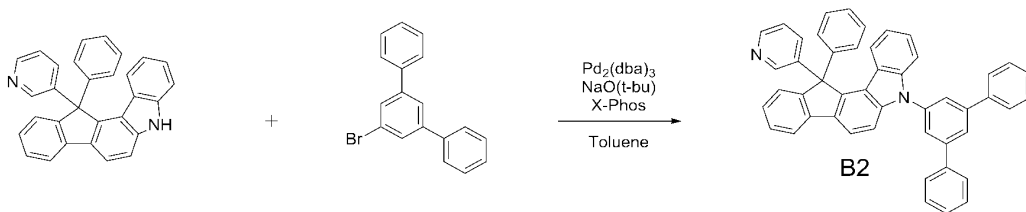


[0325]

[0326] 질소 기류 하에서 Core A (10.0 g, 24.48 mmol), 6'-(3-bromophenyl)-3,2':4',3''-terpyridine (9.50 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 13.14 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0327] GC-Mass (이론치: 715.86 g/mol, 측정치: 715 g/mol)

[0328] [합성예 3] 화합물 B2의 합성

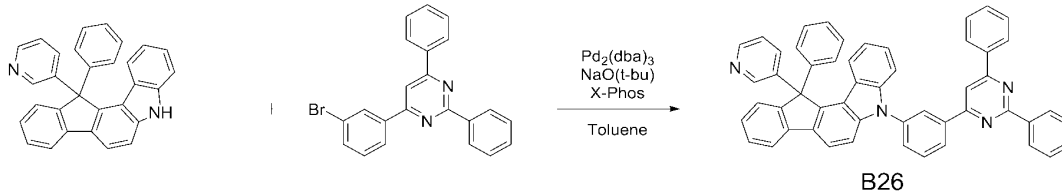


[0329]

[0330] 질소 기류 하에서 Core B (10.0 g, 24.48 mmol), 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl (7.57 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.69 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0331] GC-Mass (이론치: 636.80 g/mol, 측정치: 636 g/mol)

[0332] [합성예 4] 화합물 B26의 합성

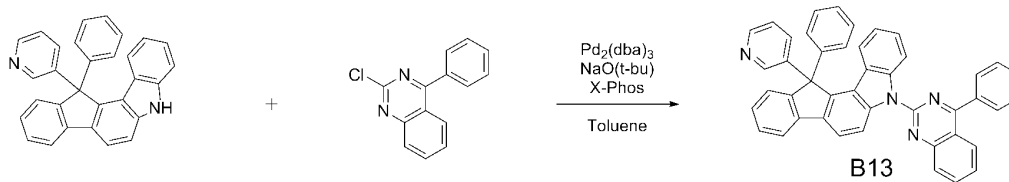


[0333]

[0334] 질소 기류 하에서 Core B (10.0 g, 24.48 mmol), 4-(3-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (9.48 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.25 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0335] GC-Mass (이론치: 714.87 g/mol, 측정치: 714 g/mol)

[0336] [합성예 5] 화합물 B13의 합성

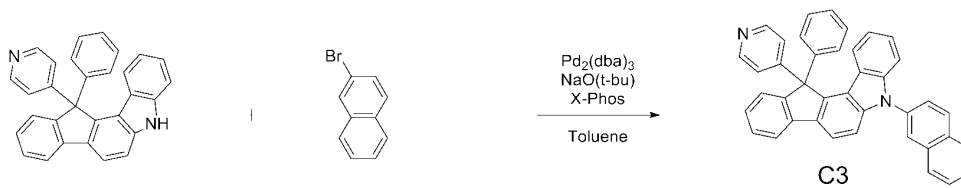


[0337]

[0338] 질소 기류 하에서 Core B (10.0 g, 24.48 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline (5.89 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.55 g (yield: 77 %)을 획득하였다.

[0339] GC-Mass (이론치: 612.74 g/mol, 측정치: 612 g/mol)

[0340] [합성예 6] 화합물 C3의 합성

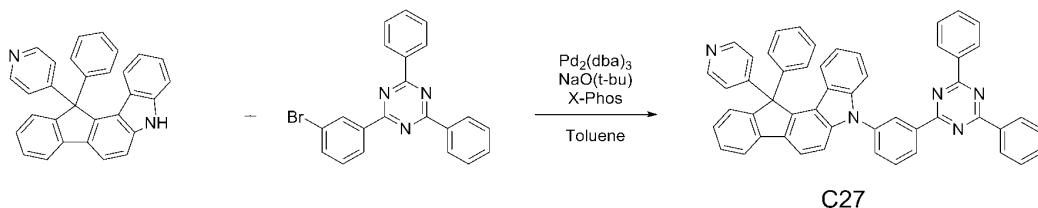


[0341]

[0342] 질소 기류 하에서 Core C (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromonaphthalene (5.07 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.47 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0343] GC-Mass (이론치: 534.66 g/mol, 측정치: 534 g/mol)

[0344] [합성예 7] 화합물 C27의 합성

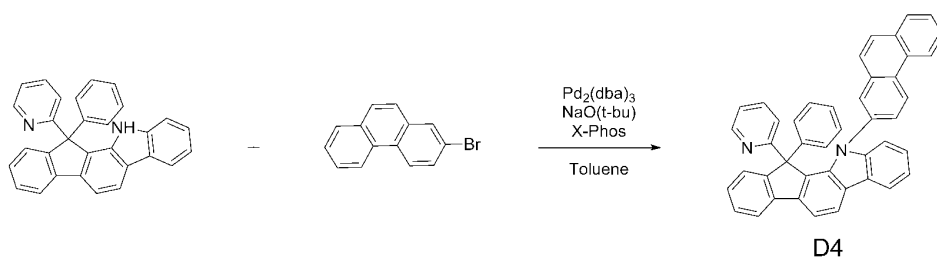


[0345]

[0346] 질소 기류 하에서 Core C (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (9.50 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 13.14 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0347] GC-Mass (이론치: 715.86 g/mol, 측정치: 715 g/mol)

[0348] [합성예 8] 화합물 D4의 합성

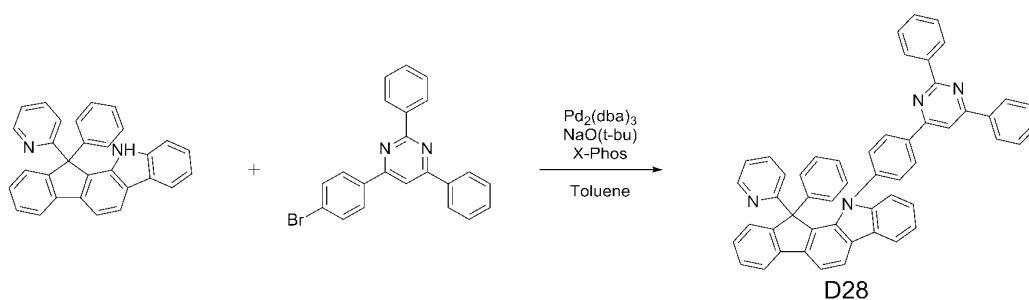


[0349]

[0350] 질소 기류 하에서 Core D (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromophenanthrene (6.29 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.74 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0351] GC-Mass (이론치: 584.72 g/mol, 측정치: 584 g/mol)

[0352] [합성예 9] 화합물 D28의 합성

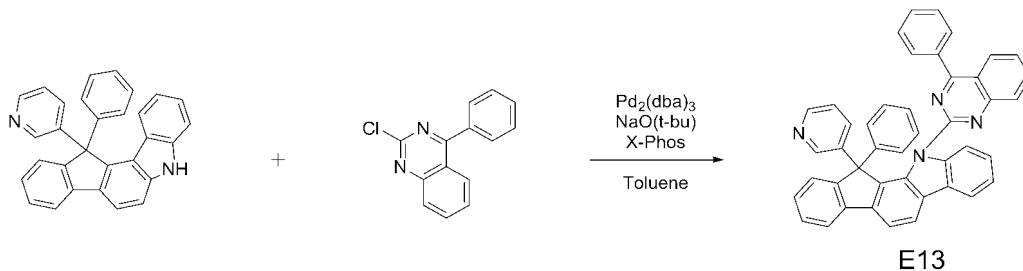


[0353]

[0354] 질소 기류 하에서 Core D (10.0 g, 24.48 mmol), 4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (9.48 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.0 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0355] GC-Mass (이론치: 714.87 g/mol, 측정치: 714 g/mol)

[0356] [합성예 10] 화합물 E13의 합성

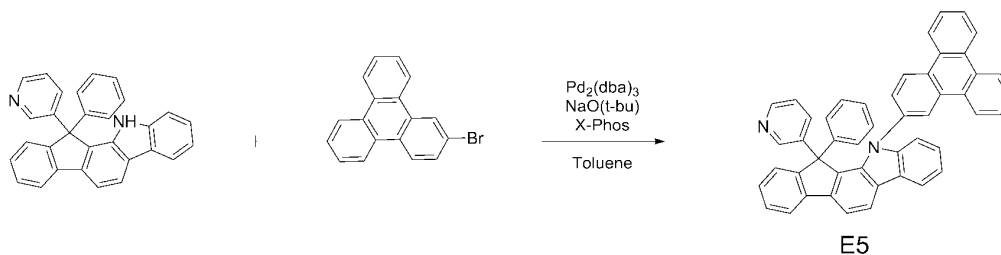


[0357]

[0358] 질소 기류 하에서 Core E (10.0 g, 24.48 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline (9.50 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.50 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0359] GC-Mass (이론치: 612.74 g/mol, 측정치: 612 g/mol)

[0360] [합성예 11] 화합물 E5의 합성

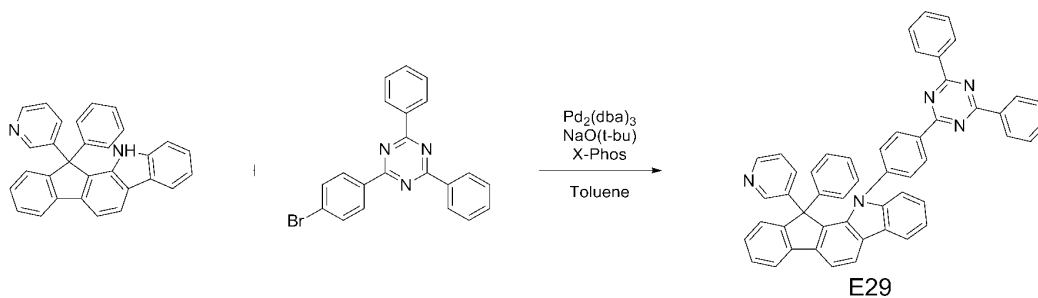


[0361]

[0362] 질소 기류 하에서 Core E (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromotriphenylene (7.52 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.97 g (yield: 77 %)을 획득하였다.

[0363] GC-Mass (이론치: 634.78 g/mol, 측정치: 634 g/mol)

[0364] [합성예 12] 화합물 E29의 합성

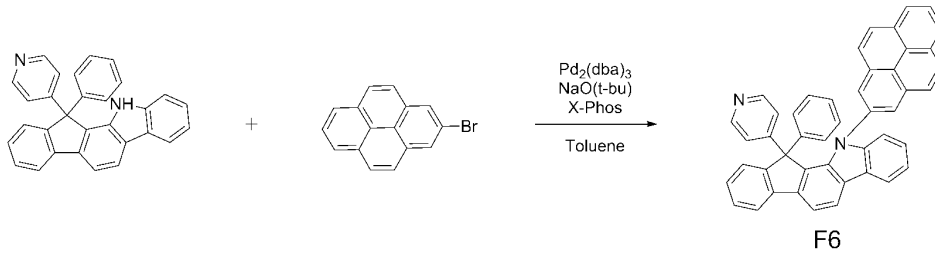


[0365]

[0366] 질소 기류 하에서 Core E (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (9.50 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.02 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0367] GC-Mass (이론치: 715.86 g/mol, 측정치: 715 g/mol)

[0368] [합성예 13] 화합물 F6의 합성

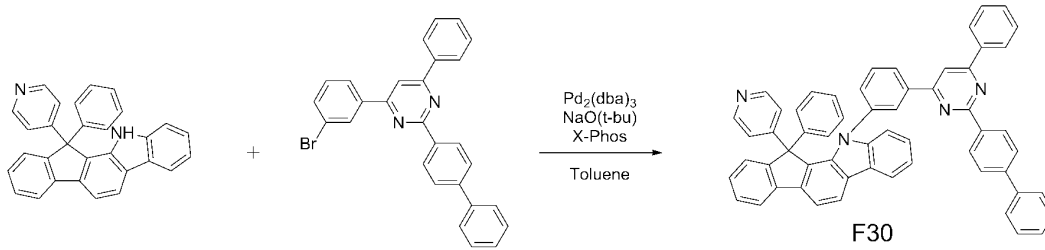


[0369]

[0370] 질소 기류 하에서 Core F (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromopyrene (6.88 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100 °C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.43 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0371] GC-Mass (이론치: 608.74 g/mol, 측정치: 608 g/mol)

[0372] [합성예 14] 화합물 F30의 합성

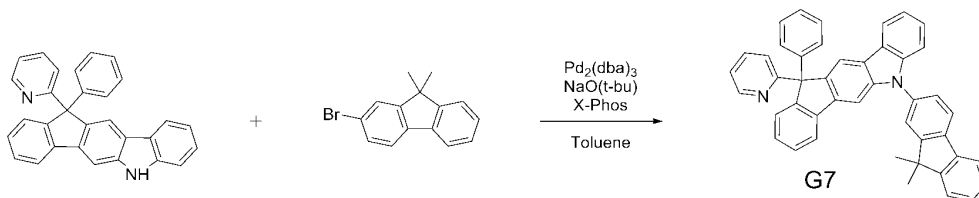


[0373]

[0374] 질소 기류 하에서 Core F (10.0 g, 24.48 mmol), 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(3-bromophenyl)-6-phenylpyrimidine (11.34 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.52 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0375] GC-Mass (이론치: 608.74 g/mol, 측정치: 608 g/mol)

[0376] [합성예 15] 화합물 G7의 합성

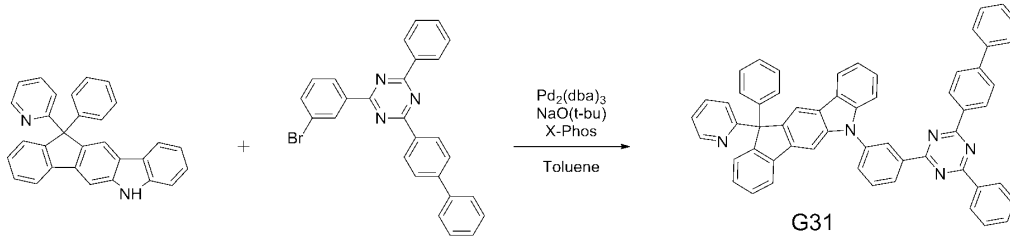


[0377]

[0378] 질소 기류 하에서 Core G (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (6.69 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.50 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

[0379] GC-Mass (이론치: 600.77 g/mol, 측정치: 600 g/mol)

[0380] [합성예 16] 화합물 G31의 합성

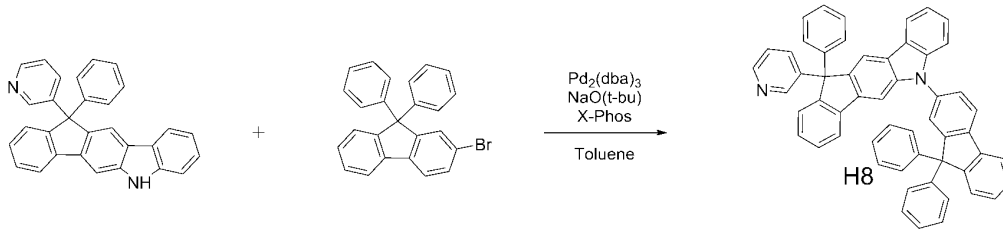


[0381]

[0382] 질소 기류 하에서 Core G (10.0 g, 24.48 mmol), 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(3-bromophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (11.37 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 15.51 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0383] GC-Mass (이론치: 791.96 g/mol, 측정치: 791 g/mol)

[0384] [합성예 17] 화합물 H8의 합성

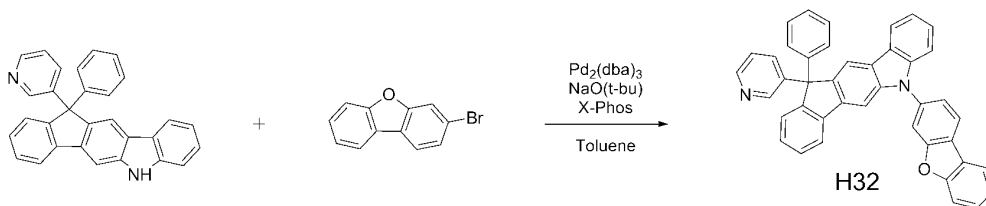


[0385]

[0386] 질소 기류 하에서 Core H (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (9.73 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.20 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0387] GC-Mass (이론치: 724.91 g/mol, 측정치: 724 g/mol)

[0388] [합성예 18] 화합물 H32의 합성

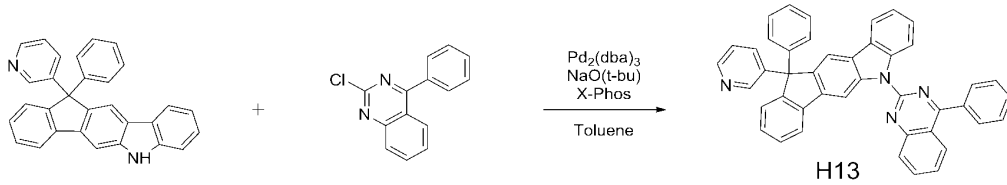


[0389]

[0390] 질소 기류 하에서 Core H (10.0 g, 24.48 mmol), 3-bromodibenzo[b,d]furan (6.05 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.55 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0391] GC-Mass (이론치: 574.68 g/mol, 측정치: 574 g/mol)

[0392] [합성예 19] 화합물 H13의 합성

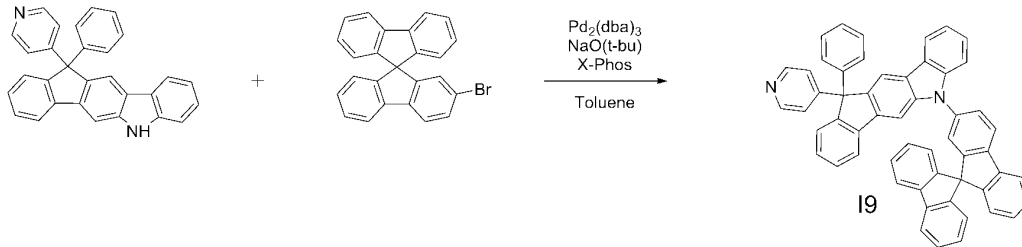


[0393]

[0394] 질소 기류 하에서 Core H (10.0 g, 24.48 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline (5.89 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.25 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0395] GC-Mass (이론치: 612.74 g/mol, 측정치: 612 g/mol)

[0396] [합성예 20] 화합물 I9의 합성

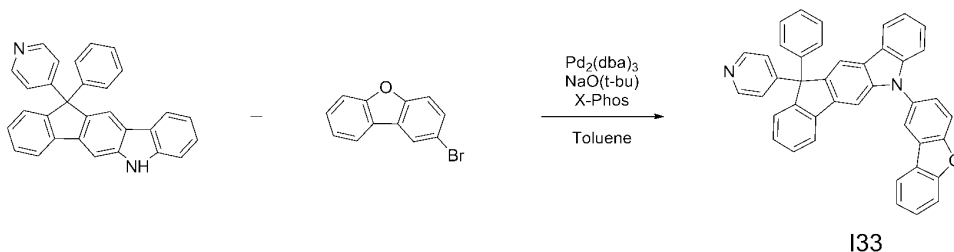


[0397]

[0398] 질소 기류 하에서 Core I (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromo-9,9'-spirobi[fluorene] (9.68 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.39 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0399] GC-Mass (이론치: 722.89 g/mol, 측정치: 722 g/mol)

[0400] [합성예 21] 화합물 I33의 합성

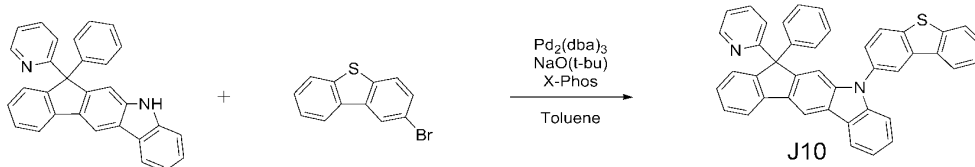


[0401]

[0402] 질소 기류 하에서 Core I (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (6.05 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.13 g (yield: 72 %)을 획득하였다.

[0403] GC-Mass (이론치: 574.68 g/mol, 측정치: 574 g/mol)

[0404] [합성예 22] 화합물 J10의 합성

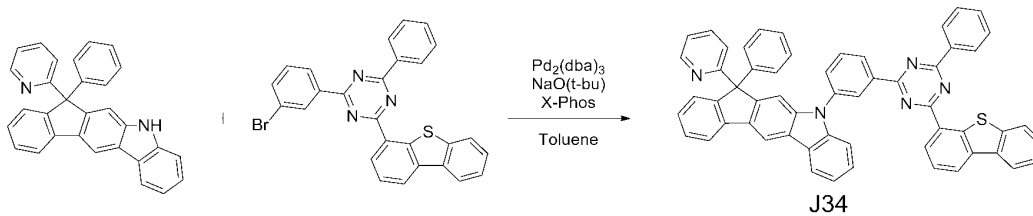


[0405]

[0406] 질소 기류 하에서 Core J (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (6.44 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.85 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0407] GC-Mass (이론치: 590.74 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[0408] [합성예 23] 화합물 J34의 합성

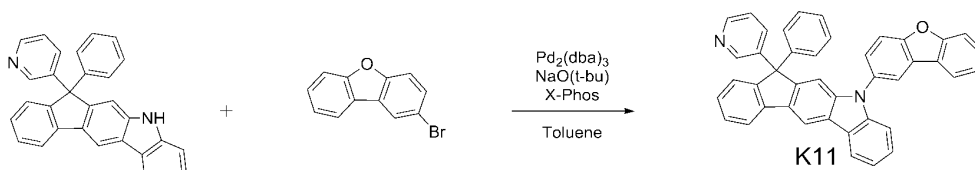


[0409]

[0410] 질소 기류 하에서 Core J (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (12.10 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 15.70 g (yield: 78 %)을 획득하였다.

[0411] GC-Mass (이론치: 822.00 g/mol, 측정치: 822 g/mol)

[0412] [합성예 24] 화합물 K11의 합성



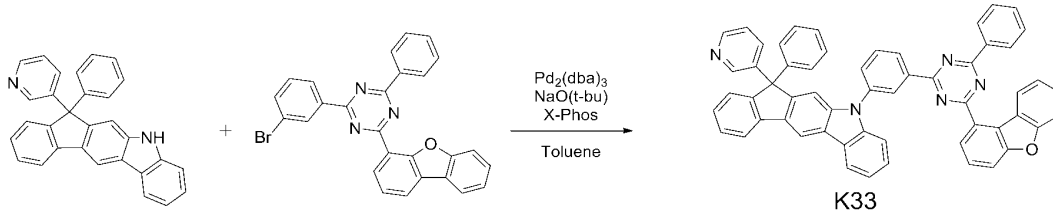
[0413]

[0414] 질소 기류 하에서 Core K (10.0 g, 24.48 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (6.05 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.25 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0415] GC-Mass (이론치: 574.68 g/mol, 측정치: 574 g/mol)



[0416] [합성예 25] 화합물 K33의 합성

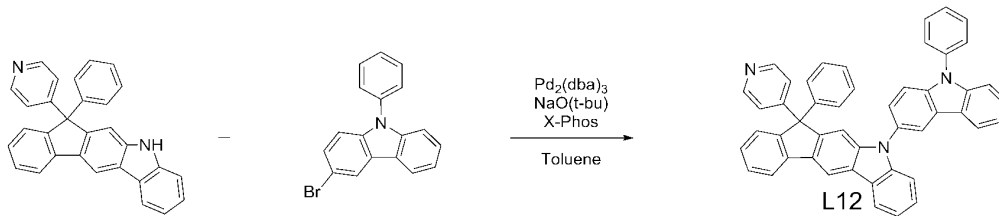


[0417]

[0418] 질소 기류 하에서 Core K (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (11.71 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.99 g (yield: 76 %)을 획득하였다.

[0419] GC-Mass (이론치: 805.94 g/mol, 측정치: 805 g/mol)

[0420] [합성예 26] 화합물 L12의 합성

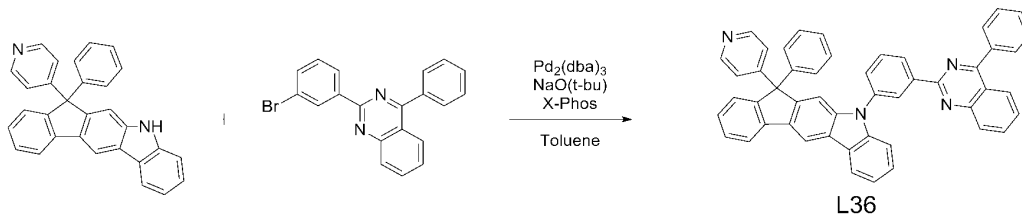


[0421]

[0422] 질소 기류 하에서 Core L (10.0 g, 24.48 mmol), 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.89 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.73 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0423] GC-Mass (이론치: 649.80 g/mol, 측정치: 649 g/mol)

[0424] [합성예 27] 화합물 L36의 합성

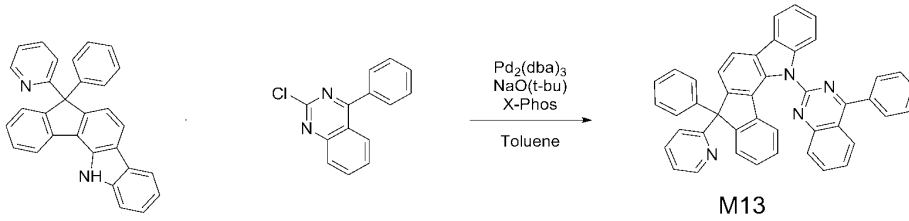


[0425]

[0426] 질소 기류 하에서 Core L (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-phenylquinazoline (8.84 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 13.49 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0427] GC-Mass (이론치: 688.83 g/mol, 측정치: 688 g/mol)

[0428] [합성예 28] 화합물 M13의 합성

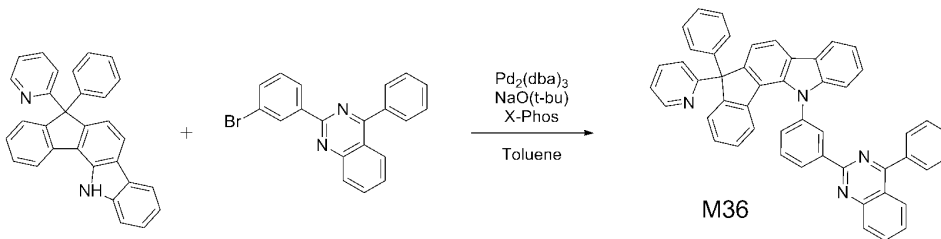


[0429]

[0430] 질소 기류 하에서 Core M (10.0 g, 24.48 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline (5.89 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.25 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0431] GC-Mass (이론치: 612.74 g/mol, 측정치: 612 g/mol)

[0432] [합성예 29] 화합물 M36의 합성

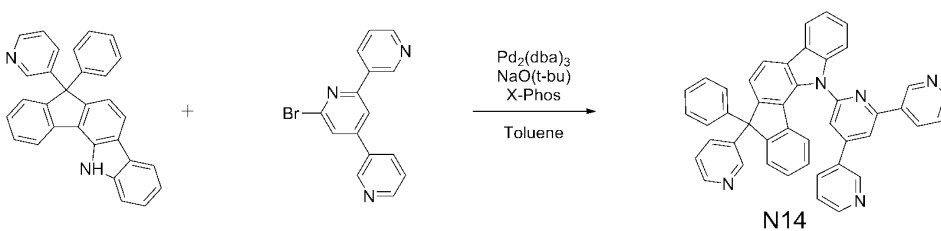


[0433]

[0434] 질소 기류 하에서 Core M (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-phenylquinazoline (8.84 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.80 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[0435] GC-Mass (이론치: 688.83 g/mol, 측정치: 688 g/mol)

[0436] [합성예 30] 화합물 N14의 합성

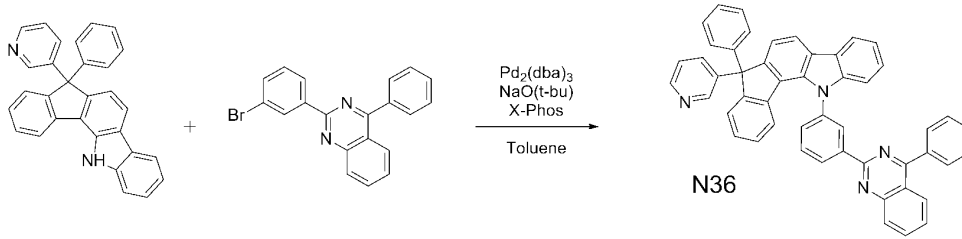


[0437]

[0438] 질소 기류 하에서 Core N (10.0 g, 24.48 mmol), 6'-bromo-3,2':4',3''-terpyridine (7.64 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.75 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0439] GC-Mass (이론치: 639.76 g/mol, 측정치: 639 g/mol)

[0440] [합성예 31] 화합물 N36의 합성

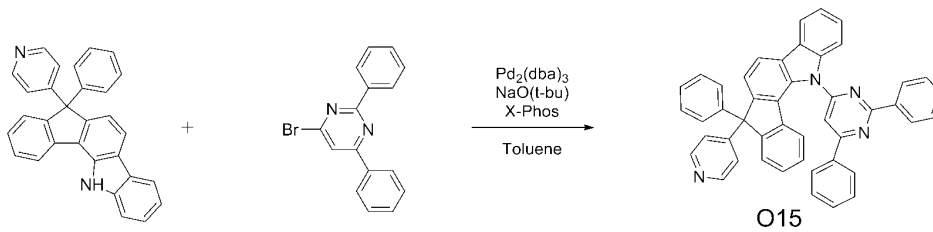


[0441]

[0442] 질소 기류 하에서 Core N (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-phenylquinazoline (8.84 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.97 g (yield: 71 %)을 획득하였다.

[0443] GC-Mass (이론치: 688.83 g/mol, 측정치: 688 g/mol)

[0444] [합성예 32] 화합물 O15의 합성

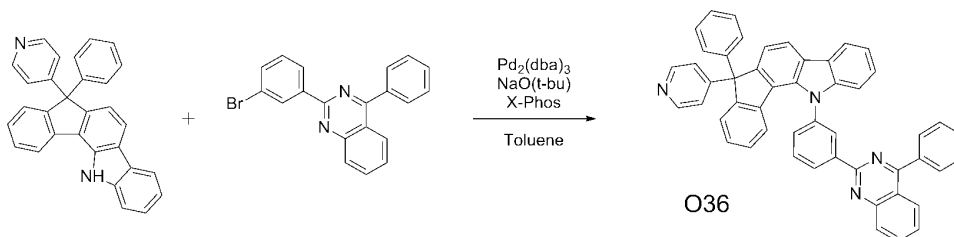


[0445]

[0446] 질소 기류 하에서 Core O (10.0 g, 24.48 mmol), 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine (7.62 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.51 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0447] GC-Mass (이론치: 638.77 g/mol, 측정치: 638 g/mol)

[0448] [합성예 33] 화합물 O36의 합성

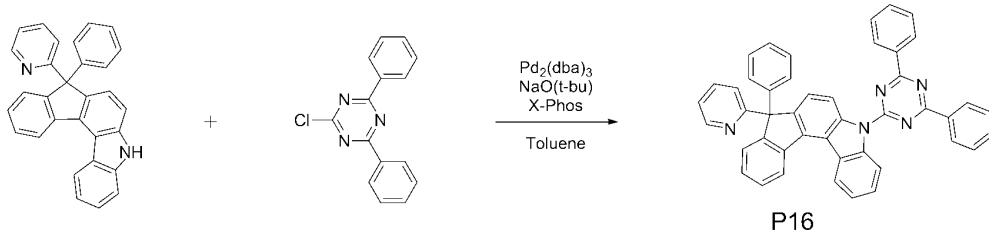


[0449]

[0450] 질소 기류 하에서 Core O (10.0 g, 24.48 mmol), 2-(3-bromophenyl)-4-phenylquinazoline (8.84 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 13.49 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0451] GC-Mass (이론치: 688.83 g/mol, 측정치: 688 g/mol)

[0452] [합성예 34] 화합물 P16의 합성

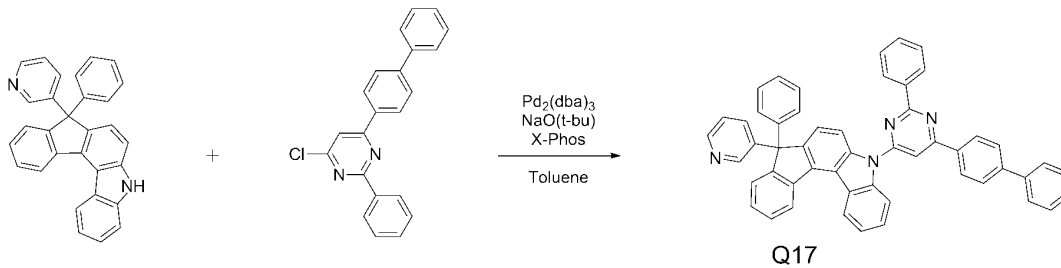


[0453]

[0454] 질소 기류 하에서 Core P (10.0 g, 24.48 mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (6.55 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.75 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[0455] GC-Mass (이론치: 639.76 g/mol, 측정치: 639 g/mol)

[0456] [합성예 35] 화합물 Q17의 합성

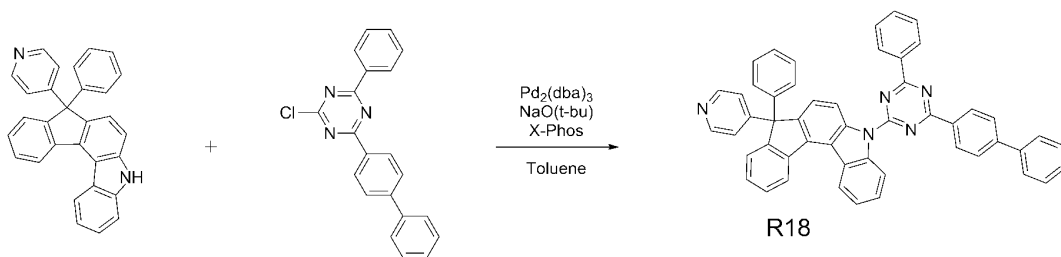


[0457]

[0458] 질소 기류 하에서 Core Q (10.0 g, 24.48 mmol), 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine (8.39 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 14.00 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[0459] GC-Mass (이론치: 714.87 g/mol, 측정치: 714 g/mol)

[0460] [합성예 36] 화합물 R18의 합성



[0461]

[0462] 질소 기류 하에서 Core R (10.0 g, 24.48 mmol), 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (8.42 g, 24.48 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.67 g, 0.73 mmol), X-Phos (2.33g, 4.90 mmol), NaO(t-Bu) (4.71 g, 48.96 mmol)와 Toluene (100ml)를 혼합하고 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 12.62 g (yield: 72 %)을 획득하였다.

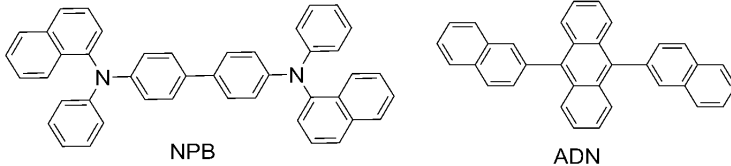
[0463] GC-Mass (이론치: 715.86 g/mol, 측정치: 715 g/mol)

[0464] [실시예 A-1] 유기 EL 소자의 제조

[0465] 합성된 화합물 A25를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[0466] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0467] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 DS-205(궤두산 전자 BG)(80 nm)/ NPB(15nm)/ 95 중량%의 ADN + 5 중량% DS-405(궤두산 전자 BG)(30nm)/ 화합물 A25(80nm)/ LiF(1nm)/Al(200nm) 순서로 유기 EL 소자를 제조하였다. 이때 사용된 NPB 및 ADN의 구조는 하기와 같다.



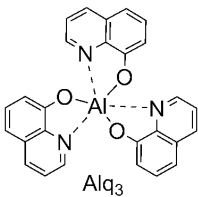
[0468]

[실시예 A-2 ~ A-14] 유기 EL 소자의 제조

[0470] 실시예 A-1에서 전자 수송층 형성시 전자 수송층 물질로 사용된 화합물 A25 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는 실시예 A-1과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[비교예 1] 유기 EL 소자의 제작

[0472] 실시예 A-1에서 전자 수송층 형성시 전자 수송층 물질로 사용된 화합물 A25 대신 Alq<sub>3</sub>를 전자수송층 물질로 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다. 이때, 사용된 Alq<sub>3</sub>의 구조는 하기와 같다.



[0473]

[평가예 1]

[0475] 실시예 A-1 내지 A-14 및 비교예 1에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0476]

샘플	전자 수송층	구동전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 A-1	A25	4.2	8.2
실시예 A-2	B26	3.7	8.5
실시예 A-3	C27	3.5	7.2
실시예 A-4	D28	3.5	8.8
실시예 A-5	E29	3.7	9.1
실시예 A-6	F30	3.8	8.5
실시예 A-7	G31	4.5	8.5
실시예 A-8	J34	4.5	7.8
실시예 A-9	K33	3.9	7.9
실시예 A-10	N14	3.6	8.2
실시예 A-11	O15	3.7	8.2
실시예 A-12	P16	3.8	7.5
실시예 A-13	Q17	3.5	7.9
실시예 A-14	R18	3.5	8.6

비교예 1	Alq <sub>3</sub>	4.7	5.6
-------	------------------	-----	-----

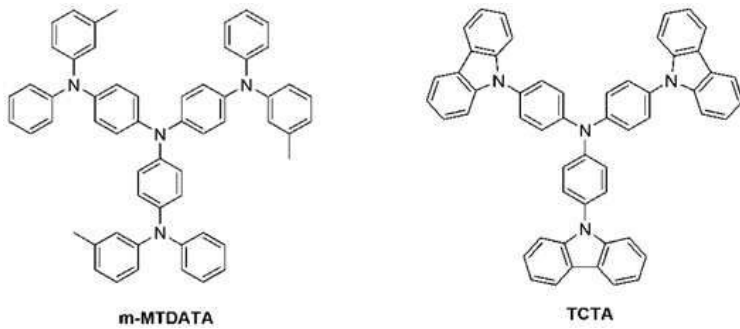
[0477] 상기 표1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A25-Q17)을 전자수송층으로 사용한 실시예 A-1~A-14의 유기 EL 소자는, 종래 Alq<sub>3</sub>를 사용한 비교예 1의 유기 EL 소자에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수하다는 것을 알 수 있었다.

[0478] [실시예 B-1] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

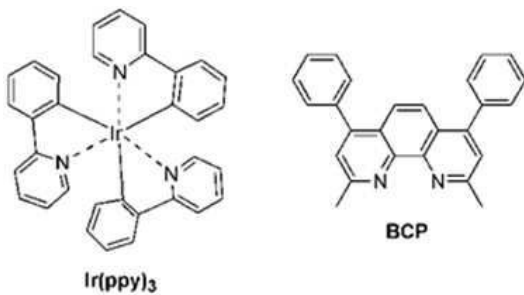
[0479] 합성된 화합물 A1를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[0480] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고, 건조시킨 후, UV OZONE 세정기(Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0481] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/90중량%의 화합물 A1 + 10 중량% Ir(ppy)<sub>3</sub>(40nm) / BCP (10 nm)/Alq<sub>3</sub> (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)<sub>3</sub>, BCP의 구조는 하기와 같고, Alq<sub>3</sub>의 구조는 비교예 1에 기재된 바와 같다.



[0482]



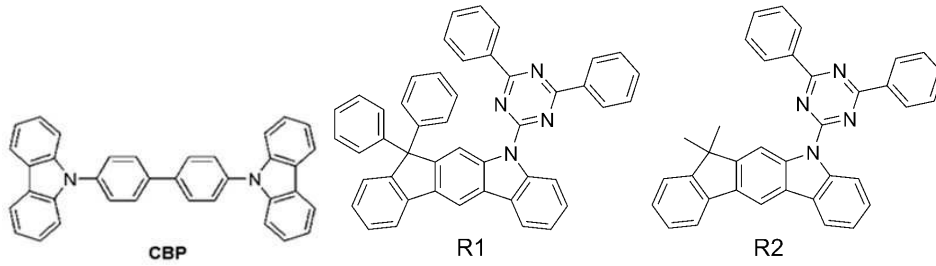
[0483]

[0484] [실시예 B-2 ~ B-27] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

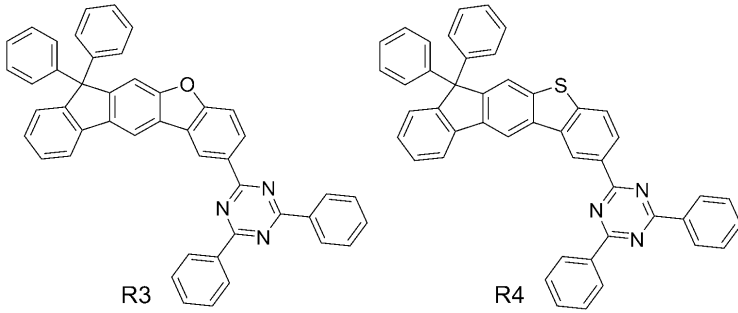
[0485] 실시예 B-1에서 녹색 발광층 형성시 녹색 발광 물질로 사용된 화합물 A1 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 B-1과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0486] [비교예 2 ~ 6] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[0487] 실시예 B-1에서 녹색 발광층 형성시 녹색 발광 물질로 사용된 화합물 A1 대신 표 2에 기재된 비교예 2 내지 6의 각 물질을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 B-1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 CBP 및 화합물 R1 ~R4의 구조는 하기와 같다.



[0488]



[0489]

[0490] [평가예 2]

[0491] 실시예 B-1 내지 B-27, 및 비교예 2 내지 6에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

[0492]

샘플	녹색발광층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 B-1	A1	6.7	41.9
실시예 B-2	A25	6.85	42.1
실시예 B-3	B2	6.8	44.8
실시예 B-4	B26	6.8	47.5
실시예 B-5	C3	6.85	41.5
실시예 B-6	C27	6.65	41.9
실시예 B-7	D4	6.01	42.4
실시예 B-8	D28	6.8	42.3
실시예 B-9	E5	6.9	45.2
실시예 B-10	E29	6.8	44.6
실시예 B-11	F30	6.7	44.1
실시예 B-12	G7	6.65	43.6
실시예 B-13	G31	6.7	42.6
실시예 B-14	H8	6.9	44.1
실시예 B-15	H32	6.8	42.8
실시예 B-16	I9	6.7	41.4
실시예 B-17	I33	6.7	41.8
실시예 B-18	J10	6.65	45.3
실시예 B-19	J34	6.7	45.1
실시예 B-20	K11	6.9	44.8
실시예 B-21	K33	6.8	47.5
실시예 B-22	L12	6.7	41.5
실시예 B-23	N14	6.65	41.9
실시예 B-24	O15	6.7	42.4
실시예 B-25	P16	6.9	42.3
실시예 B-26	Q17	6.8	45.2
실시예 B-27	R18	6.65	42.6
비교예 2	CBP	6.93	38.2
비교예 3	R1	7.2	40.5
비교예 4	R2	7.0	37.5
비교예 5	R3	7.0	39.7

비교예 6	R4	7.5	35.4
-------	----	-----	------

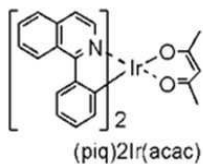
[0493] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A1~R18)을 발광 재료로 사용한 실시예 B-1~B-27의 녹색 유기 전계 발광 소자는, 종래 발광층 재료(CBP, R1~R4)를 사용한 비교예 2~6의 녹색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수하다는 것을 알 수 있었다.

[0494] [실시예 C-1] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조

[0495] 합성된 화합물 A25를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0496] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0497] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90 중량%의 화합물 A25+10 중량% (piq)<sub>2</sub>Ir(acac) (40nm)/BCP (10 nm)/Alq<sub>3</sub> (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 m-MTDATA, NPB, 및 CBP의 구조는 실시예 B-1에 기재된 바와 같고, (piq)<sub>2</sub>Ir(acac)의 구조는 하기와 같다.



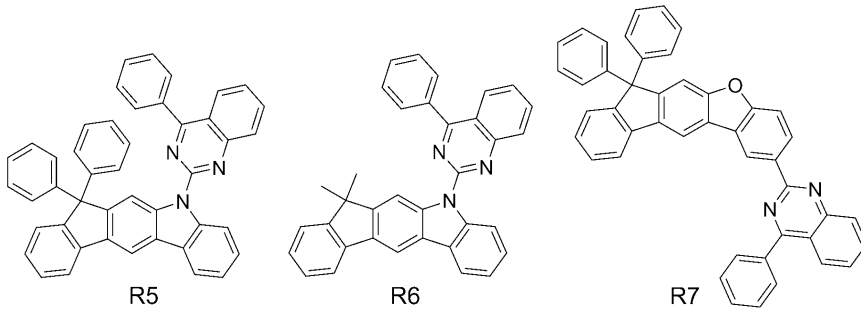
[0498] [실시예 C-2 ~ C-26] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조

[0500] 실시예 C-1에서 적색 발광층 형성시 적색 발광 물질로 사용된 화합물 A25 대신 하기 표 3에 기재된 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는 실시예 C-1과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

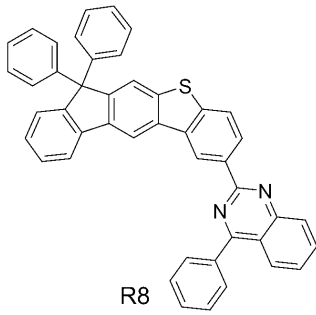
[0501] [비교예 7 ~ 11] 적색 유기 전계 발광 소자의 제작

[0502] 실시예 C-1 에서 적색 발광층 형성시 적색 발광 물질로 사용된 화합물 A25 대신 하기 표 3에 기재된 비교예 7 내지 11의 각 물질을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 C-1과 동일하게 수행하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 CBP의 구조는 비교예 1~6에 기재된 바와 같고, R5~R8의 구조는 아래 기재된 바와 같다.





[0503]



[0504]

[0505] [평가예 3]

[0506] 실시예 C-1 내지 C-26, 및 비교예 7 및 11에서 각각 제조된 적색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

표 3

[0507]

샘플	적색발광층	구동전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 C-1	A25	4.9	12.1
실시예 C-2	B26	4.6	14.8
실시예 C-3	B13	4.7	11.5
실시예 C-4	C3	4.1	11.9
실시예 C-5	C27	4.3	12.4
실시예 C-6	D4	4.6	12.3
실시예 C-7	D28	4	15.2
실시예 C-8	E13	4.2	13.6
실시예 C-9	E5	4.7	17.8
실시예 C-10	E29	4.7	16.5
실시예 C-11	F6	4.3	16.7
실시예 C-12	F30	4.3	11.8
실시예 C-13	G31	4.1	13.7
실시예 C-14	H13	4.9	12.1
실시예 C-15	J34	4.6	14.8
실시예 C-16	K33	4.7	11.5
실시예 C-17	L36	4.1	11.9
실시예 C-18	M13	4.3	12.4
실시예 C-19	M36	4.6	12.3
실시예 C-20	N14	4	15.2
실시예 C-21	N36	4.2	13.6
실시예 C-22	O15	4.7	11.5
실시예 C-23	O36	4.1	11.9
실시예 C-24	P16	4.3	12.4
실시예 C-25	Q17	4.6	12.3
실시예 C-26	R18	4	15.2
비교예 7	CBP	5.2	6.2
비교예 8	R5	5.5	9.5
비교예 9	R6	6.0	8.0

비교예 10	R7	6.2	7.2
비교예 11	R8	5.8	7.0

[0508] 상기 표 3에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A25~R18)을 발광 재료로 사용한 실시예 C-1 내지 C-26의 적색 유기 전계 발광 소자는, 종래 발광층 재료(CBP, R5~R8)를 사용한 비교예 7~11의 적색 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수하다는 것을 알 수 있었다.

[0509] **[실시예 D-1] 청색 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0510] 합성된 화합물 A1를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0511] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0512] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (주두산전자BG) (80 nm)/NPB (15 nm)/ 95중량%의 화합물 A1+5% DS-405 (주두산전자BG)(40nm) /BCP (10 nm)/Alq<sub>3</sub> (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 NPB 및 Alq<sub>3</sub>의 구조는 실시예 A-1에 기재된 바와 같고, BCP의 구조는 실시예 B-1에 기재된 바와 같다.

[0513] **[실시예 D-2 ~ D-12] 청색 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0514] 실시예 D-1에서 청색 발광층 형성시 청색 발광 물질로 사용된 화합물 A1 대신 하기 표 4에 기재된 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 D-1과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0515] **[비교예 4] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[0516] 실시예 D-1에서 청색 발광층 형성시 청색 발광 물질로 사용된 화합물 A1 대신 ADN을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 D-1과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이때 사용된 ADN의 구조는 실시예 A-1에 기재된 바와 같다.

[0517] **[평가예 4]**

[0518] 실시예 D-1 ~ D-12 및 비교예 4 에서 각각 제조된 청색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

**표 4**

[0519]

샘플	청색발광층	구동 전압 (V)	전류효율(cd/A)
실시예 D-1	A1	4.3	9.2
실시예 D-2	B2	4.5	7.1
실시예 D-3	C3	4.6	8.3
실시예 D-4	D4	4.2	9.6
실시예 D-5	F6	4.7	6.5
실시예 D-6	G7	4	7.1
실시예 D-7	H8	4.5	8.6
실시예 D-8	H32	4.3	7.5
실시예 D-9	I33	4.4	7.6
실시예 D-10	J10	4.6	8.6
실시예 D-11	K11	5.2	7.1
실시예 D-12	L12	4.3	5.6
비교예 4	ADN	5.6	4.8

[0520] 상기 표 4에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A1~L12)을 발광 재료로 사용한 실시예 D-1 내지 D-12의 청색 유기 전계 발광 소자는, 종래 ADN만을 발광층 재료로 사용한 비교예 4의 청색 유기 전계 발광 소자에 비해

전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수하다는 것을 알 수 있었다.