



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년03월08일  
(11) 등록번호 10-2508116  
(24) 등록일자 2023년03월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H10K 50/00 (2023.01)  
H10K 99/00 (2023.01)  
(52) CPC특허분류  
C09K 11/06 (2022.01)  
H10K 50/11 (2023.02)  
(21) 출원번호 10-2020-0143030  
(22) 출원일자 2020년10월30일  
심사청구일자 2020년10월30일  
(65) 공개번호 10-2022-0057913  
(43) 공개일자 2022년05월09일  
(56) 선행기술조사문헌  
CN111138418 A\*  
KR1020130121841 A\*  
KR1020210091558 A  
KR1020210098706 A  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
한남대학교 산학협력단  
대전광역시 유성구 유성대로 1646 (전민동)  
(72) 발명자  
임춘우  
대전광역시 유성구 엑스포로 448 엑스포아파트  
308-1702  
(74) 대리인  
박노준

전체 청구항 수 : 총 3 항

심사관 : 김수미

(54) 발명의 명칭 인광 호스트 화합물 및 이를 이용한 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 인광 호스트 화합물, 인광 호스트용 조성물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

*H10K 85/622* (2023.02)

*H10K 85/649* (2023.02)

*C09K 2211/1018* (2013.01)

---

명세서

청구범위

청구항 1

삭제

청구항 2

삭제

청구항 3

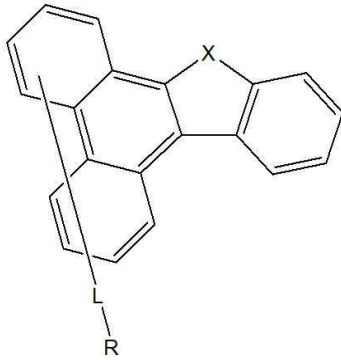
삭제

청구항 4

하기 화학식 1의 화합물; 및

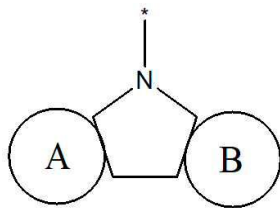
하기 화학식 3의 화합물을 포함하는 인광 호스트용 조성물.

[화학식 1]



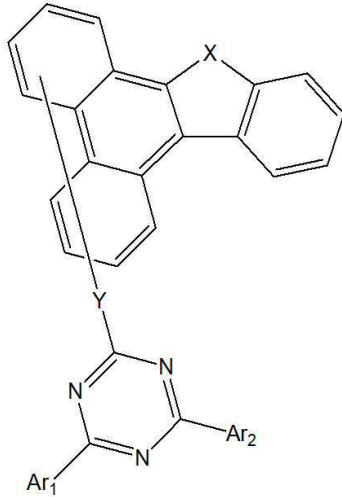
(X는 O 또는 S 이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, R은 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.)

[화학식 2]



(A 및 B는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

[화학식 3]



(X는 O 또는 S 이고, Y는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

**청구항 5**

제4항에 있어서,  
 상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 3의 화합물의 중량비는 30~70:70~30 인 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 조성물.

**청구항 6**

제4항의 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계발광소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 인광 호스트 화합물, 인광 호스트용 조성물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색 순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0003] 평판 표시소자는 최근 들어 급성장세를 보이고 있는 인터넷을 중심으로 고도의 영상 정보화 사회를 지탱하는 매우 중요한 역할을 수행하고 있다. 특히, 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기발광다이오드(OLED)는 평판 표시소자의 주류인 액정디스플레이(liquid crystal display, LCD)에 비해 시야각, 대조비 등이 우수하고, 백라이트가 불필요하여 경량 및 박형이 가능하며, 소비전력 측면에서도 유리한 장점을 가진다. 또한 응답속도가 빠르며, 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목을 받고 있다.

[0004] 일반적으로, 유기발광다이오드는 투명전극으로 이루어진 양극(anode), 발광영역을 포함하는 유기박막 및 금속전

극(cathode)의 순으로 유리기판 위에 형성된다. 이때, 유기박막은 발광층(emitting layer, EML), 정공 주입층(hole injection layer, HIL), 정공 수송층(hole transport layer, HTL), 전자 수송층(electron transport layer, ETL) 및 전자 주입층(electron injection layer, EIL)을 포함할 수 있으며, 발광층의 발광특성상 전자 차단층(electron blocking layer, EBL) 또는 정공차단층(hole blocking layer, HBL)을 추가로 포함할 수 있다.

[0005] 이러한 구조의 유기발광다이오드에 전기장이 가해지면 양극으로부터 정공이 주입되고 음극으로부터 전자가 주입되며, 주입된 정공과 전자는 각각 정공 수송층과 전자 수송층을 거쳐 발광층에서 재조합하여 발광여기자(를) 형성한다. 형성된 발광여기자는 바닥상태로 전이하면서 빛을 방출하는데, 이때 발광 상태의 효율과 안정성을 증가시키기 위해 발광 색소(게스트)를 발광층(호스트)에 도핑하기도 한다.

[0006] 유기발광다이오드의 주요 이슈는 발광효율, 수명 및 안정성인데, 이러한 특성을 개선하기 위하여 다양한 유도체가 개발되어 발광물질로 사용되고 있다.

[0007] 그러나 기존의 화합물은 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성이 낮아 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등에 장기간 안정적으로 사용될 수 없다.

[0008] 따라서 소자의 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성을 향상시키고 구동전압을 낮출 수 있는 인광 호스트 화합물 및 조성물에 대한 기술개발이 필요하다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0010] (특허문헌 0001) 한국공개특허 제10-2011-0046839호(2011년 05월 06일)

**발명의 내용**

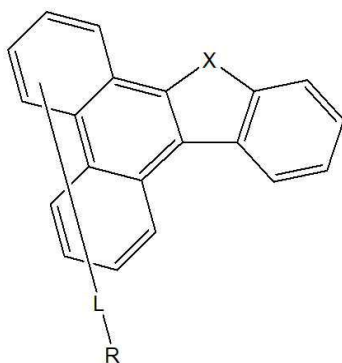
**해결하려는 과제**

[0011] 본 발명은 상기 문제점을 해결하기 위하여 안출된 것으로서, 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0013] 본 발명은 하기 화학식 1 또는 화학식 3의 구조를 갖는 인광 호스트 화합물을 제공한다.

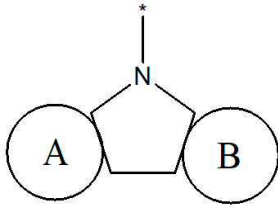
[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] (X는 O 또는 S 이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴렌이고, R은 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.)

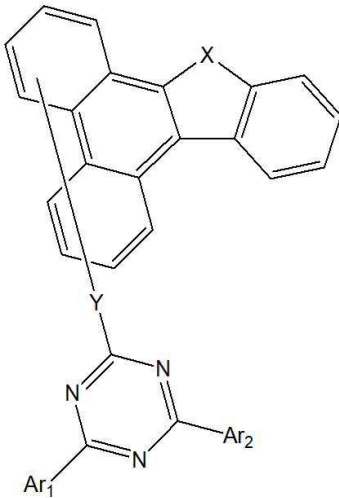
[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] (A 및 B는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

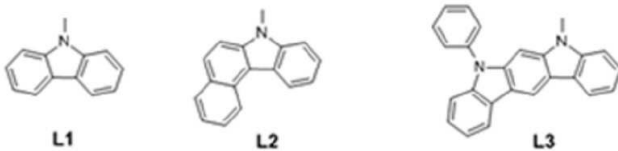
[0020] [화학식 3]



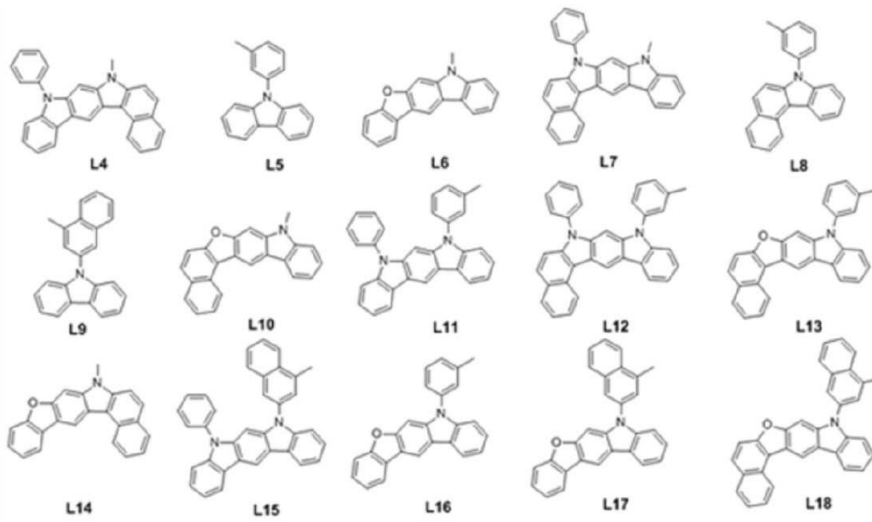
[0021]

[0022] (X는 O 또는 S 이고, Y는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴렌이고, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

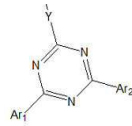
[0023] 본 발명의 일실시예에 있어서, 상기 -L-R은 하기 화학식 L1 내지 L18 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 한다.



[0024]

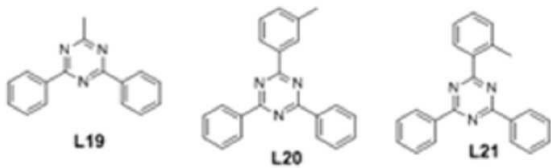


[0025]

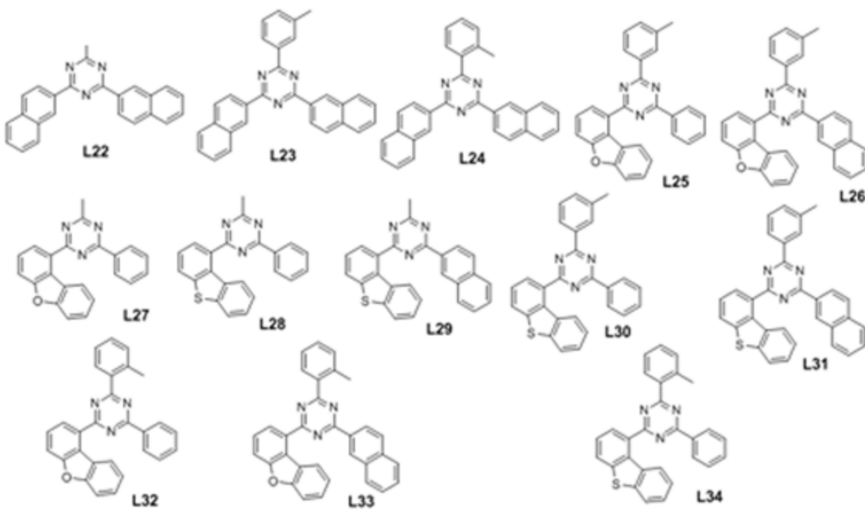


[0026]

본 발명의 일실시예에 있어서, 상기  은 하기 화학식 L19 내지 L34 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 한다.



[0027]

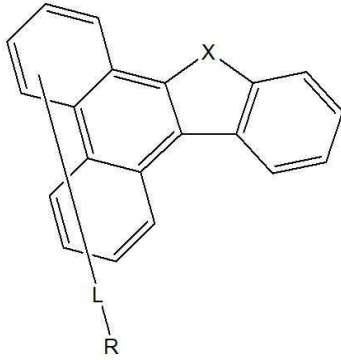


[0028]

[0029]

또한 본 발명은 하기 화학식 1의 화합물; 및 하기 화학식 3의 화합물을 포함하는 인광 호스트용 조성물을 제공한다.

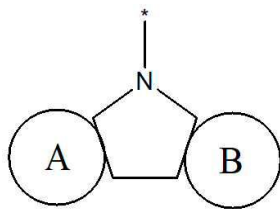
[0030] [화학식 1]



[0031]

[0032] (X는 O 또는 S 이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, R은 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.)

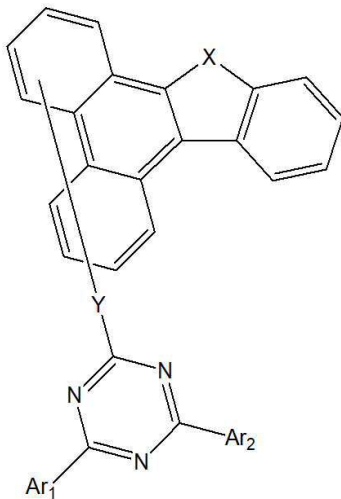
[0033] [화학식 2]



[0034]

[0035] (A 및 B는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

[0036] [화학식 3]



[0037]

[0038] (X는 O 또는 S 이고, Y는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

[0039] 본 발명의 일실시예에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 3의 화합물의 중량비는 30~70:70~30인 것을 특징으로 한다.



[0040] 또한 본 발명은 상기 인광 호스트 화합물 또는 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0042] 본 발명은 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동 전압을 낮출 수 있는 인광 호스트 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

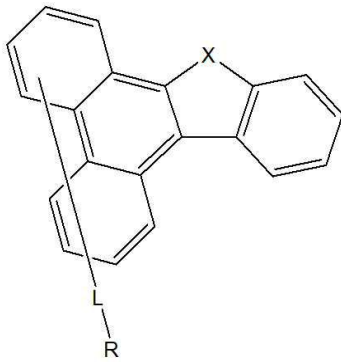
[0043] 본 발명의 인광 호스트 화합물은 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시킬 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0045] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 이를 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명은 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0047] 본 발명은 하기 화학식 1 또는 화학식 3의 구조를 갖는 인광 호스트 화합물에 관한 것이다.

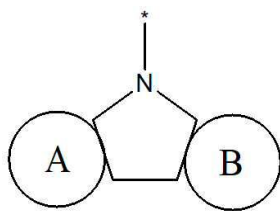
[0048] [화학식 1]



[0049]

[0050] (X는 O 또는 S 이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, R은 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.)

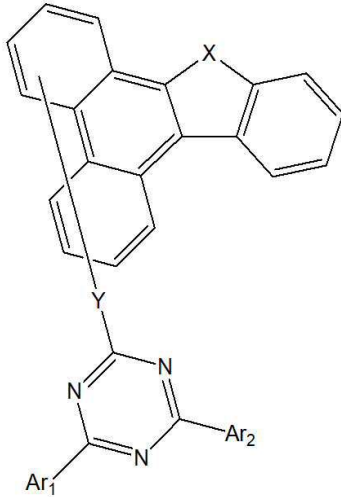
[0051] [화학식 2]



[0052]

[0053] (A 및 B는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

[0054] [화학식 3]



[0055]

[0056] (X는 O 또는 S 이고, Y는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴렌이고, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0057]

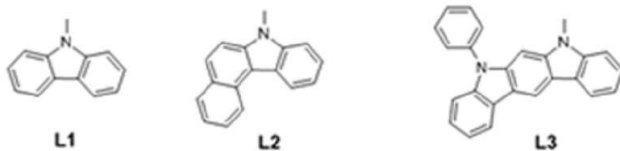
상기 아릴렌, 헤테로아릴렌, 아릴 및 헤테로아릴은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 수산화기, 아미노기, C1~C50의 알킬기, C2~C50의 알케닐기, C2~C50의 알키닐기, C6~C50의 아릴기, 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴기 및 C1~C50의 알킬옥시기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 복수개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0058]

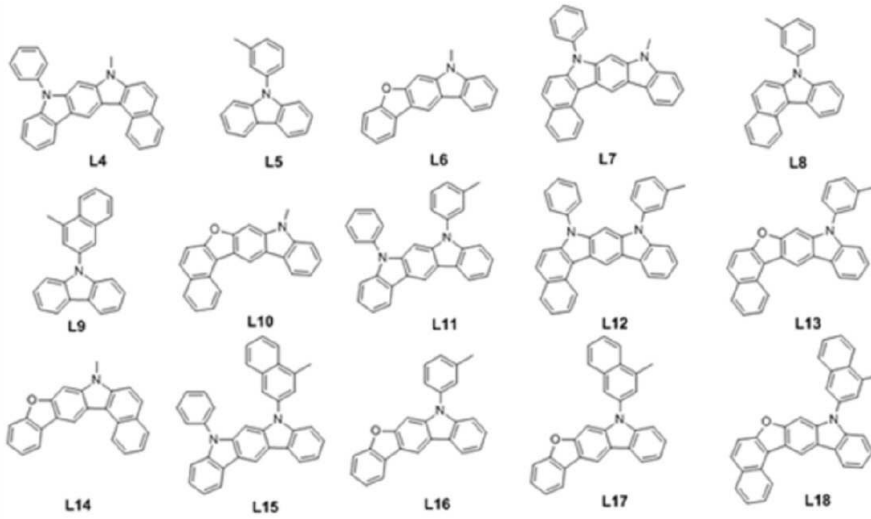
상기 인광 호스트 화합물은 유기발광다이오드, 유기전계발관소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광 효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시키고, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0059]

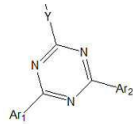
상기 화학식 1의 화합물에서, 상기 -L-R은 하기 화학식 L1 내지 L18 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



[0060]

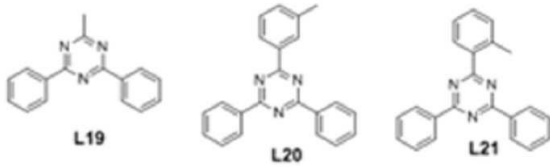


[0061]

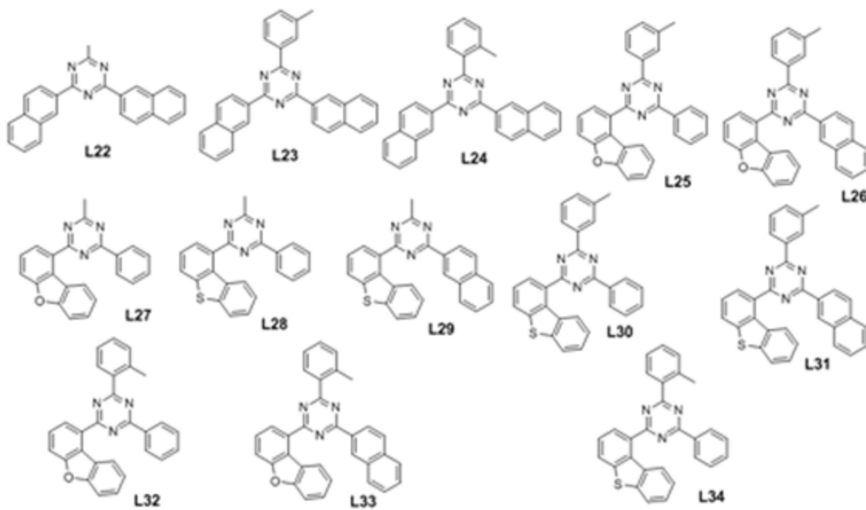


[0062]

상기 화학식 3의 화합물에서, 상기  $Y$  은 하기 화학식 L19 내지 L34 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



[0063]

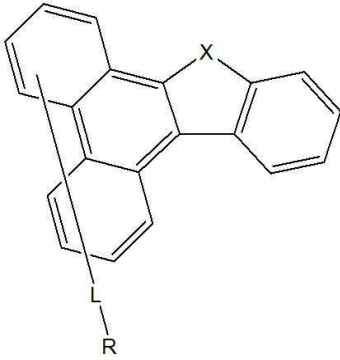


[0064]

[0066]

또한 본 발명은 하기 화학식 1의 화합물; 및 하기 화학식 3의 화합물을 포함하는 인광 호스트용 조성물에 관한 것이다.

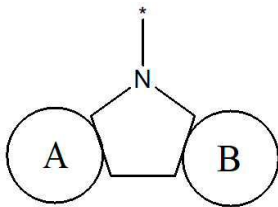
[0067] [화학식 1]



[0068]

[0069] (X는 O 또는 S 이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, R은 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.)

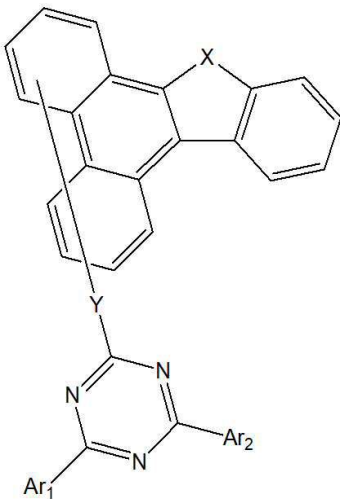
[0070] [화학식 2]



[0071]

[0072] (A 및 B는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

[0073] [화학식 3]



[0074]

[0075] (X는 O 또는 S 이고, Y는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸렌, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸렌이고, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아틸, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아틸이다.)

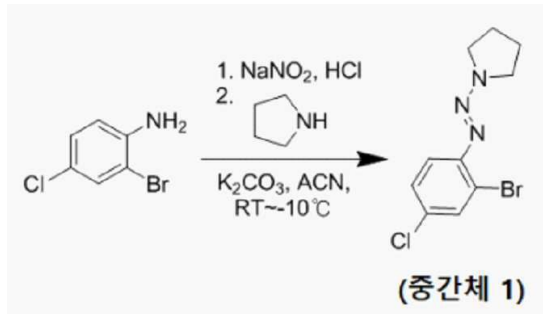
[0076] 상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 3의 화합물의 중량비는 30~70:70~30 인 것이 바람직하며, 상기 수치 범위를 만족하는 경우 소자의 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성을 극대화할 수 있다.

[0078] 또한 본 발명은 상기 인광 호스트 화합물 또는 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

[0079] 본 발명의 인광 호스트 화합물은 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시킬 수 있다.

[0081] 이하 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 상세히 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 실시를 위하여 예시된 것일 뿐, 본 발명의 내용이 하기 실시예에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0083] (중간체 1의 합성)

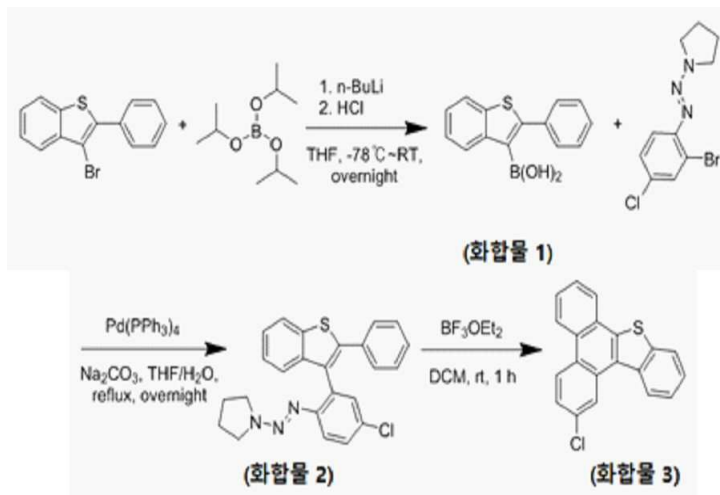


[0084]

[0085] 2-Bromo-4-chloroaniline(30g, 0.14mol, 1eq)을 acetonitrile 140ml에 녹인 후, HCl(56ml, 1.8mol, 5eq)를 첨가하였다. 용액을 -10°C로 냉각시킨 후 NaNO<sub>2</sub>(10g, 0.15mol, 1.05eq)를 물에 녹여 적가하였다.

[0086] 반응물을 30분 동안 교반한 후, pyrrolidine(11g, 0.154mol, 1.1eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(48.4g, 0.35mol, 2.5eq) 및 acetonitrile/water(1:2) 400ml를 넣고 실온으로 승온시켰다. 실온에서 30분 동안 교반 후, 반응이 완결되면 ethyl acetate로 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 중간체 1을 수득하였다(36.4g, 90%).

[0088] (화합물 1의 합성)



[0089]

[0090] 질소 기체 하에 무수 Tetrahydrofuran 140ml에 2-Phenyl-3-bromo- benzothiophene(30g, 0.1mol, 1eq)을 넣고 녹였다. 용액을 -78°C로 냉각시킨 후 1.6M n-butyllithium(60ml, 0.1mol, 1.05eq)을 적가하고 30분간 교반하였다. 무수 THF에 triisopropyl borate(20.6g, 0.11mol, 1.1eq)를 녹인 용액을 반응물에 천천히 적가한 후, 반응 혼합물을 실온으로 승온하고 밤새 교반하였다. 반응이 완결되면 10% 염산 수용액을 첨가한다. 유기층을 추출하여 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 1을 수득하였다(15.2g, 60%).

[0092] (화합물 2의 합성)

[0093] 화합물 1(15g, 0.06mol, 1eq), 중간체 1(15.6g, 0.054mol, 0.9eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2g, 1.8mmol, 0.03eq), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(19g, 0.18mol, 3eq), THF/water(3:1) 500mℓ를 넣고 질소 기체 하에서 환류 교반하였다.

[0094] 반응이 완결되면 반응물을 식힌 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거하였다. 용액을 감압 농축하고 column chromatography를 통해 화합물 2를 수득하였다(21g, 84%).

[0095]

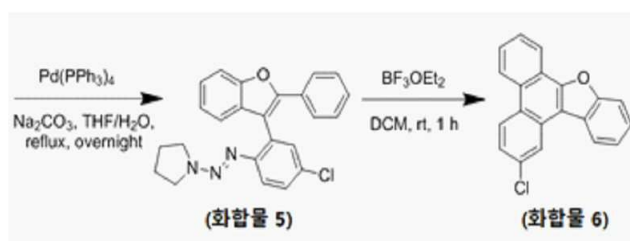
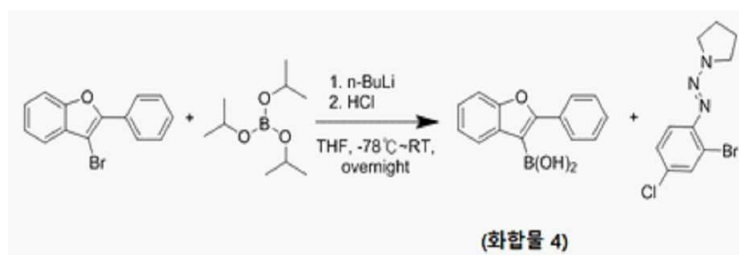
[0096] (화합물 3의 합성)

[0097] 질소 기체 하에 화합물 2(21g, 0.05mol, 1eq)를 dichloromethane 800mℓ에 녹였다. 반응 혼합물에 boron trifluoride diethyl ether(14.2g, 0.1mol, 2eq)를 넣고 실온에서 1시간 교반하였다. 반응이 완결된 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 3을 수득하였다 (10.68g, 67%).

[0098] <sup>1</sup>H NMR (400MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 8.88 (s, 1H), 8.62 (m, 3H), 8.12 (d, 1H), 8.00 (d, 1H), 7.62 (m, 4H), 7.48 (m, 1H);

[0099] <sup>13</sup>C NMR (100MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 139.7, 139.3, 137.3, 133.6, 131.0, 129.1, 128.2, 128.1, 127.8, 127.0, 126.1, 125.6, 125.5, 125.3, 124.5, 123.6, 123.5.

[0101] (화합물 4의 합성)



[0102]

[0103] 질소 기체 하에 무수 Tetrahydrofuran 140mℓ에 2-Phenyl-bromo-benzofuran (30g, 0.11mol, 1eq)을 넣고 녹였다. 용액을 -78℃로 냉각시킨 후 1.6M n-butyllithium(72mℓ, 0.12mol, 1.05eq)을 적가하고 30분간 교반하였다. 무수 THF에 triisopropyl borate(22.8g, 0.12mmol, 1.1 eq)를 녹인 용액을 반응물에 천천히 적가한 후, 반응 혼합물을 실온으로 승온하고 밤새 교반하였다. 반응이 완결되면 10% 염산 수용액을 첨가하였다. 유기층을 추출하여 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축한 다음 재결정을 통해 화합물 4를 수득하였다 (16.8g, 64%).

[0104]

[0105] (화합물 5의 합성)

[0106] 화합물 4(16g, 0.067mol, 1eq), 중간체 1(17.5g, 0.06mol, 0.9eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2.3g, 2mmol, 0.03eq), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(21.3g, 0.2mol, 3eq), THF/water(3:1) 500mℓ를 넣고 질소 기체 하에서 환류 교반하였다. 반응이 완결되

면 반응물을 식힌 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거하였다. 용액을 감압 농축하고 column chromatography를 통해 화합물 5를 수득하였다(23.2g, 86%).

[0107]

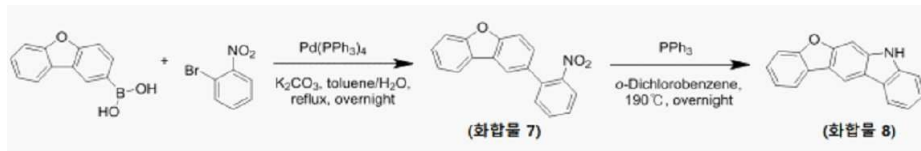
[0108] (화합물 6의 합성)

[0109] 질소 기체 하에 화합물 5(23g, 0.057mol, 1eq)를 dichloromethane 800ml에 녹였다. 반응 혼합물에 boron trifluoride diethyl ether(15.6g, 0.11mol, 2eq)를 넣고 실온에서 1시간 교반하였다. 반응이 완결된 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 6을 수득하였다(12.3g, 71%).

[0110] <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 8.50 (m, 2H), 8.34 (m, 2H), 8.17 (m, 1H), 7.59 (m, 3H), 7.48 (m, 3H);

[0111] <sup>13</sup>C NMR (100 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 155.5, 151.4, 133.2, 129.7, 129.2, 127.6, 126.2, 125.5, 125.1, 124.9, 124.8, 123.4, 123.2, 123.0, 121.8, 121.6, 121.3, 113.2, 111.9.

[0113] (화합물 7의 합성)



[0114]

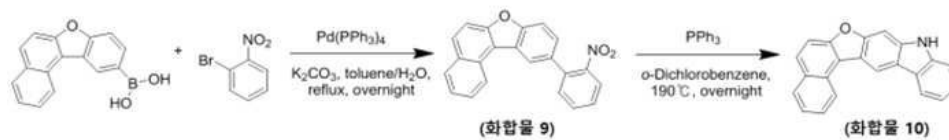
[0115] 플라스크에 Dibenzofuran-2-ylboronic acid(40g, 0.19mol, 1eq), 1-bromo-2-nitrobenzene(40g, 0.20mol, 1.05eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(6.6g, 5.7mmol, 0.03eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(78.8g, 0.57mol, 3eq), toluene/water(3:1) 800 ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결된 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 7을 수득하였다(43.9g, 80%).

[0116]

[0117] (화합물 8의 합성)

[0118] 플라스크에 화합물 7(43g, 0.15mol, 1eq), PPh<sub>3</sub>(2g, 7.5mmol, 0.05eq), o-dichlorobenzene 1L를 넣고 190°C에서 밤새 가열 교반하였다. 반응이 완결되면 반응물을 식힌 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거하였다. 용액을 감압 농축하고 재결정을 통해 화합물 8을 수득하였다(25g, 65%).

[0120] (화합물 9의 합성)



[0121]

[0122] 플라스크에 Benzo[b]naphtha[2,1-d]furan-10-ylboronic acid(40g, 0.15mol, 1eq), 1-bromo-2-nitrobenzene(32.4g, 0.16mol, 1.05eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(5.2g, 4.5mmol, 0.03eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(62.2g, 0.45mol, 3eq), toluene/water(3:1) 700ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결된 후에 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 9를 수득하였다(42.2g, 83%).

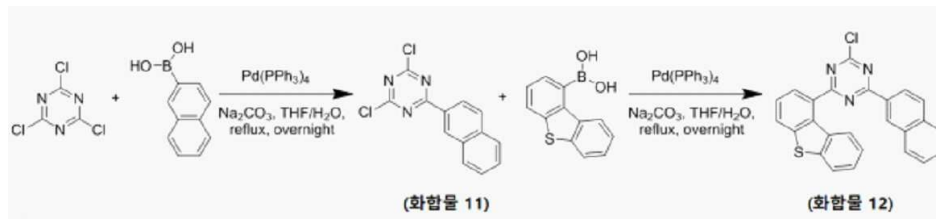
[0123]

[0124] (화합물 10의 합성)

[0125] 플라스크에 화합물 9(42g, 0.12mol, 1eq), PPh<sub>3</sub>(1.6g, 6.2mmol, 0.05eq), o-dichlorobenzene 900ml를

넣고 190℃에서 밤새 가열 교반하였다. 반응이 완결되면 반응물을 식힌 후 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거하였다. 용액을 감압 농축하고 재결정을 통해 화합물 10을 수득하였다(23.2g, 63%).

[0127] (화합물 11의 합성)



[0128]

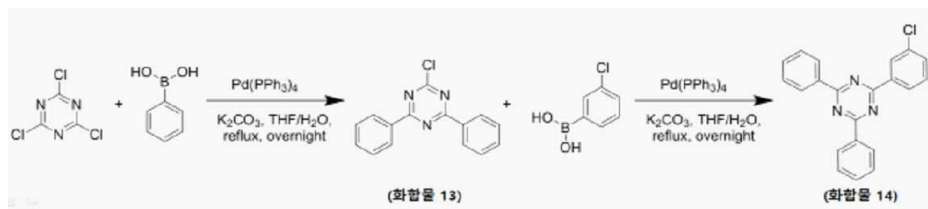
[0129] 플라스크에 Cyanuric chloride(30g, 0.16mol, 1eq), naphthalene-2-boronic acid(28g, 0.16mol, 1eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(5.5g, 4.8mmol, 0.03eq), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(50.9g, 0.48mol, 3eq), THF/water(3:1) 800ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 11을 수득하였다(20.7g, 47%).

[0130]

[0131] (화합물 12의 합성)

[0132] 플라스크에 화합물 11(20g, 0.07mol, 1eq), dibenzothiophene-1-boronic acid(16g, 0.07mol, 1eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(2.4g, 2.1mmol, 0.03eq), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(22.3g, 0.21mol, 3eq), THF/water(3:1) 500ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 12를 수득하였다(20.2g, 68%).

[0134] (화합물 13의 합성)



[0135]

[0136] 플라스크에 Cyanuric acid(30g, 0.16mol, 1eq), phenylboronic acid(39g, 0.32mol, 2eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(5.5g, 4.8mmol, 0.03eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(66.3g, 0.48mmol, 3eq), THF/water(3:1) 800ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 13을 수득하였다(25.2g, 59%).

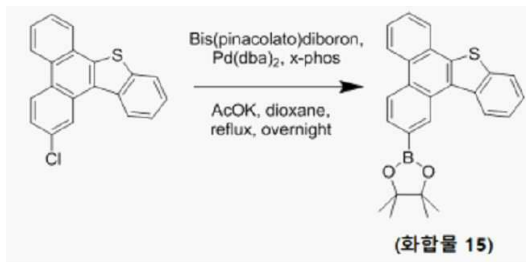
[0137]

[0138] (화합물 14의 합성)

[0139] 플라스크에 화합물 13(25g, 0.093mol, 1eq), 3-chlorophenylboronic acid(14.6g, 0.093mol, 1eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(3.2g, 2.79mmol, 0.03eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(38.6g, 0.28mol, 3eq), THF/water(3:1) 600ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 14를 수득하였다(26.2g, 82%).

[0141] (화합물 15의 합성)





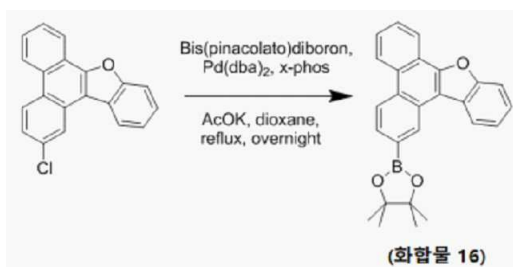
[0142]

[0143]

플라스크에 화합물 3(10g, 0.03mol, 1eq), bis(pinacolato)diboron(8.4g, 0.033mol, 1.1eq), Pd(dba)<sub>2</sub>(0.5g, 0.9mmol, 0.03eq), x-phos(0.57g, 1.2mmol, 0.04eq), AcOK(8.8g, 0.09mol, 3eq), dioxane 200 ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 15를 수득하였다(10.5g, 86%).

[0145]

(화합물 16의 합성)



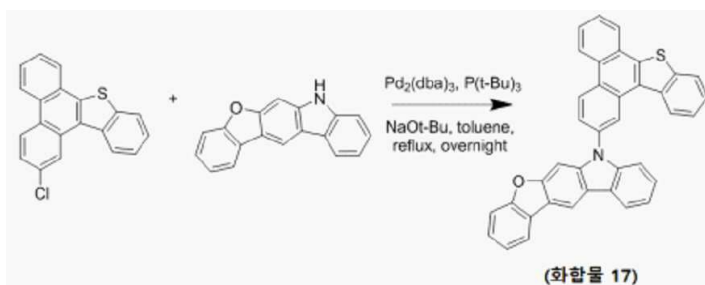
[0146]

[0147]

플라스크에 화합물 6(10g, 3mol, 1eq), bis(pinacolato)diboron(8.4g, 0.033mol, 1.1eq), Pd(dba)<sub>2</sub>(0.5g, 0.9mmol, 0.03eq), x-phos(0.57g, 1.2mmol, 0.04eq), AcOK(8.8g, 0.09mol, 3eq), dioxane 200 ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 16을 수득하였다(10.4g, 88%).

[0149]

[실시예 1]



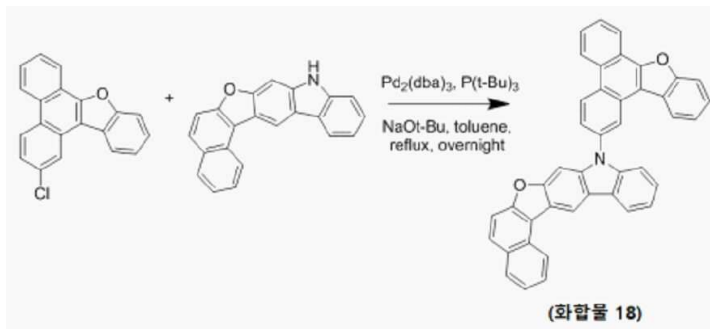
[0150]

[0151]

플라스크에 화합물 3 (5 g, 15.7 mmol, 1 eq), 화합물 8 (4 g, 15.7 mmol, 1 eq), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.4 g, 0.47mmol, 0.03 eq), P(t-Bu)<sub>3</sub> (0.19 g, 0.94 mmol, 0.06 eq), NaOt-Bu (4.5 g, 47.1 mmol, 3 eq), toluene (200 mL)를 넣고 밤새 환류 교반한다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축한다. 재결정을 통해 화합물 17을 수득하였다(7.37g, 87%).

[0153]

[실시예 2]



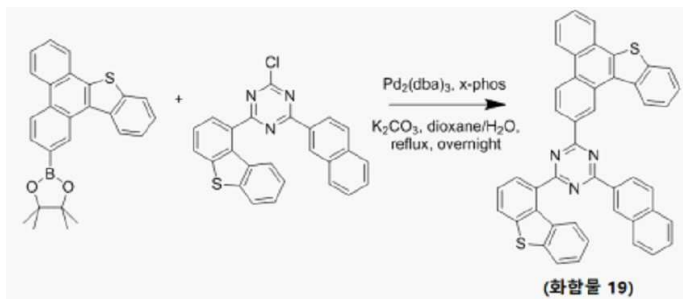
[0154]

[0155]

플라스크에 화합물 6(5g, 16.5mmol, 1eq), 화합물 10(5.1g, 16.5mmol, 1eq), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(0.45g, 0.5mmol, 0.03eq), P(t-Bu)<sub>3</sub>(0.2g, 0.99mmol, 0.06eq), NaOt-Bu (4.8g, 49.5mmol, 3eq), toluene 200ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 18을 수득하였다(7.85g, 83%).

[0157]

[실시예 3]



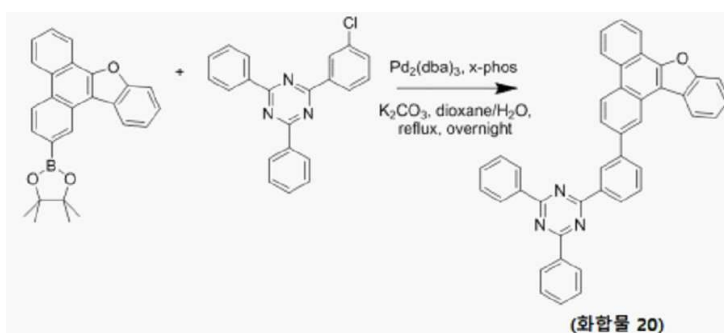
[0158]

[0161]

플라스크에 화합물 15(5g, 0.012mol, 1eq) 화합물 12(5.2g, 0.012mol, 1eq), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(0.3g, 0.36mmol, 0.03eq), x-phos(0.23g, 0.48mmol, 0.04eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(5g, 0.036mol, 3eq), dioxane/water(3:1) 200ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 19를 수득하였다(7.1g, 89%).

[0163]

[실시예 4]



[0164]

[0165]

플라스크에 화합물 16(5g, 0.013mol, 1eq), 화합물 14(4.4g, 0.013mol, 1eq), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(0.35g, 0.39mmol, 0.03eq), x-phos(0.25g, 0.52mmol, 0.04eq), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(5.4g, 0.039mol, 3eq), dioxane/water(3:1) 200ml를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완결되면 유기층을 분리하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 뒤 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 20을 수득하였다(6.88g, 92%).

[0167] 상기 인광 호스트 화합물 17 내지 20의 Mass 스펙트럼의 피크 위치는 표 1에 제시된다.

[0169] **표 1**

Compound	m/z
화합물 17	539.13
화합물 18	573.17
화합물 19	671.15
화합물 20	575.20

[0171] [실시예 5]

[0172] 실시예 1의 화합물 50중량부 및 실시예 3의 화합물 50중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0174] [실시예 6]

[0175] 실시예 1의 화합물 50중량부 및 실시예 4의 화합물 50중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0177] [실시예 7]

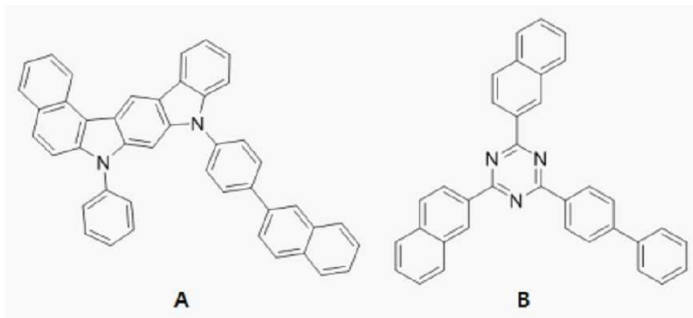
[0178] 실시예 2의 화합물 50중량부 및 실시예 3의 화합물 50중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0180] [실시예 8]

[0181] 실시예 2의 화합물 50중량부 및 실시예 4의 화합물 50중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0183] [비교예 1]

[0184] 하기 화학식 A의 화합물 50중량부 및 화학식 B의 화합물 50중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.



[0185]

[0187] 상기 실시예 및 비교예에서 제조한 화합물 및 조성물을 이용하여 발광효율, 구동전압 및 수명을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0189] **표 2**

	발광효율(lm/W)	구동전압(V)	수명(T99, h)
실시예 1	29.43	3.21	124
실시예 2	25.74	2.82	120
실시예 3	26.67	3.05	131
실시예 4	25.62	3.17	122
실시예 5	37.76	2.80	162
실시예 6	42.45	2.70	185
실시예 7	34.80	3.15	232
실시예 8	31.28	2.75	156
비교예 1	18.50	4.10	107

[0191] 상기 표에서 알 수 있듯이, 실시예 1 내지 8은 비교예 1에 비하여 발광효율 및 수명이 우수하고, 구동전압이 낮으며, 특히 실시예 5 내지 8은 상기 특성이 가장 우수함을 확인할 수 있다.