



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0041028  
(43) 공개일자 2022년03월31일

- |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                      |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)<br/>C07F 5/02 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)<br/>H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/05 (2006.01)<br/>H01L 51/42 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류<br/>C07F 5/027 (2013.01)<br/>C09K 11/06 (2022.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2021-0126405<br/>(22) 출원일자 2021년09월24일<br/>심사청구일자 2021년09월24일</p> <p>(30) 우선권주장<br/>1020200123770 2020년09월24일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인<br/>경상국립대학교산학협력단<br/>경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)</p> <p>(72) 발명자<br/>김윤희<br/>경상남도 진주시 가좌안골길21번길 5 가좌제일풍<br/>경채 101-1103<br/>권순기<br/>경상남도 진주시 가좌안골길21번길 5 가좌제일풍<br/>경채 101-1103<br/>(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인<br/>특허법인 플러스</p> |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

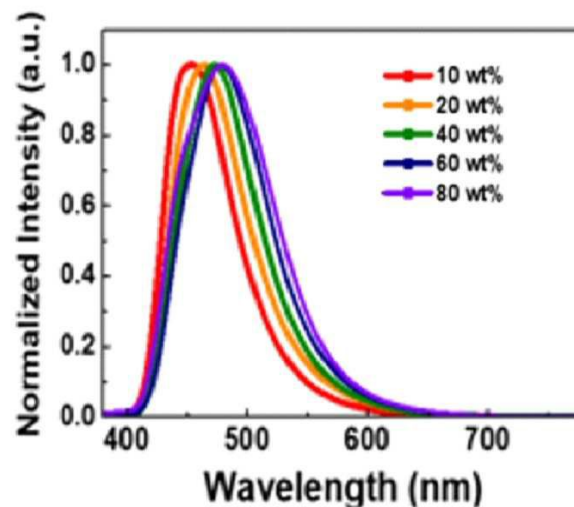
전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 **보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자**

(57) 요약

본 발명은 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자에 관한 것으로, 본 발명의 보론 화합물은 특정한 골격을 가짐으로써 열 활성화 지연 형광을 나타내어, 이를 채용한 유기 전자 소자는 향상된 효율을 가진다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

*H01L 51/008* (2013.01)

*H01L 51/0504* (2013.01)

*H01L 51/42* (2013.01)

*H01L 51/50* (2013.01)

*C09K 2211/188* (2013.01)

(72) 발명자

**박지현**

경상남도 통영시 용남면 대곡길 12 통영청구하이츠  
아파트105-106

**천형진**

부산광역시 북구 금곡대로 268 화명동대림타운  
206-1601

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

|             |                            |
|-------------|----------------------------|
| 과제고유번호      | 1711116327                 |
| 과제번호        | 2019M3D1A210396921         |
| 부처명         | 과학기술정보통신부                  |
| 과제관리(전문)기관명 | 한국연구재단                     |
| 연구사업명       | 소재융합혁신기술개발                 |
| 연구과제명       | 고효율 장수명 청색 인광 소재 연구 (1차년도) |
| 기 여 율       | 25/100                     |
| 과제수행기관명     | 경상대학교                      |
| 연구기간        | 2020.03.01 ~ 2020.12.31    |

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

|             |                                                |
|-------------|------------------------------------------------|
| 과제고유번호      | 1711112571                                     |
| 과제번호        | 2018R1A2A1A0507873413                          |
| 부처명         | 과학기술정보통신부                                      |
| 과제관리(전문)기관명 | 한국연구재단                                         |
| 연구사업명       | 중견연구자지원사업(도약연구)                                |
| 연구과제명       | 새로운 설계 개념을 통한 친환경 공정 가능한 고성능 유기 전자 소재 개발(3차년도) |
| 기 여 율       | 50/100                                         |
| 과제수행기관명     | 경상국립대학교                                        |
| 연구기간        | 2020.03.01 ~ 2021.02.28                        |

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

|             |                                    |
|-------------|------------------------------------|
| 과제고유번호      | 2020050800                         |
| 과제번호        | K_G012001105901                    |
| 부처명         | 산업통상자원부                            |
| 과제관리(전문)기관명 | 한국산업기술평가관리원                        |
| 연구사업명       | 산업기술혁신사업                           |
| 연구과제명       | 인쇄 공정용 고성능 장수명 발광층 잉크소재 및 소자 기술 개발 |
| 기 여 율       | 25/100                             |
| 과제수행기관명     | 에스에프씨(주)                           |
| 연구기간        | 2020.04.01 ~ 2020.12.31            |

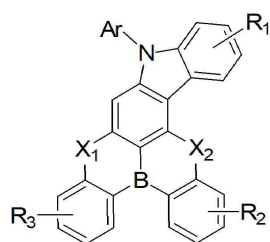
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 보론 화합물:

[화학식1]



상기 화학식 1에서,

$X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 0 또는 S이며;

Ar은 C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

$R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C1-C30알콕시, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

상기 Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며;

상기 Ar은 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬아미노 및 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있으며;

상기 Ar 및  $R_1$  내지  $R_3$ 의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.

#### 청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 0 또는 S이며;

Ar은 C6-C30아릴이며;

$R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C30알킬이며;

Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며;

상기 Ar은 C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬아미노 또는 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있는 보론 화합물.

#### 청구항 3

제 2항에 있어서,

상기  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 동일하게 0 또는 S이며;

Ar은 C6-C12아릴 또는 C1-C5알콕시로 치환된 C6-C12아릴이며;

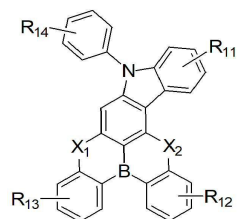
R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬인 보론 화합물.

#### 청구항 4

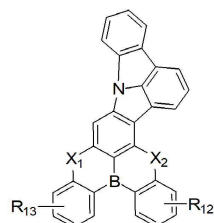
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 보론 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 0 또는 S이며;

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

R<sub>14</sub>는 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노C1-C30알킬아미노 또는 디C1-C30알킬아미노이며;

상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>13</sub>의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.

#### 청구항 5

제 4항에 있어서,

상기 화학식 2 및 3에서, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 서로 동일하게 0 또는 S이며;

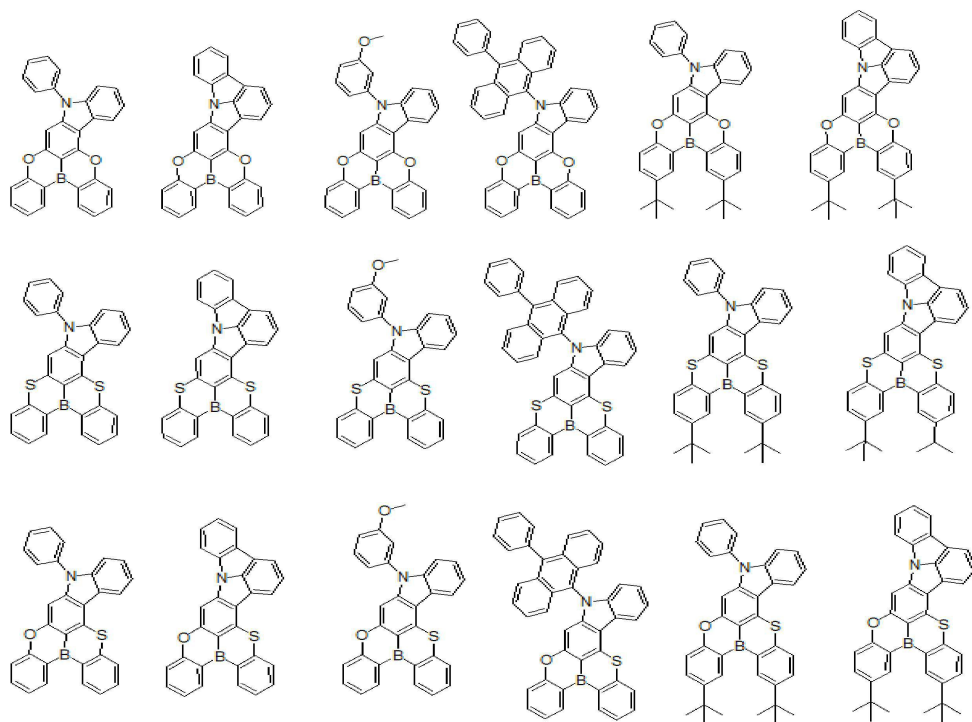
R<sub>11</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬이며;

R<sub>14</sub>는 수소, C1-C5알콕시, 모노C1-C5알킬아미노 또는 디C1-C5알킬아미노인 보론 화합물.

#### 청구항 6

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 보론 화합물은 하기 화합물에서 선택되는 것인 보론 화합물.



#### 청구항 7

제 1항 내지 제6항에서 선택되는 어느 한 항의 보론 화합물을 포함하는 유기 전자 소자.

#### 청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 유기 전자 소자는 유기 태양 전지, 유기 박막트랜지스터, 유기 전계 발광 소자 또는 유기 센서인 유기 전자 소자.

#### 청구항 9

제 7항에 있어서,

상기 보론 화합물은 상기 유기 전자 소자의 유기물층에 포함되는 것인, 유기 전자 소자.

### 발명의 설명

#### 기술 분야

[0001] 본 발명은 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 보론 및 세 개 이상의 헤테로 원자를 포함하는 특정한 골격의 다환 방향족 화합물인 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자에 관한 것이다.

#### 배경 기술

[0002] 최근 정보 통신 산업의 발달이 가속화됨에 따라, 고도의 성능을 갖는 디스플레이 소자가 요구되고 있다.

[0003] 이러한 디스플레이 소자는 발광형과 비발광형으로 나눌 수 있다. 발광형에 속하는 디스플레이 소자는 음극 선관(Cathode Ray Tube: CRT), 전계 발광 소자(Electroluminescence Display: ELD), 전기발광 다이오드(Light Emitting Diode: LED), 플라즈마 소자 패널(Plasma Display Panel: PDP) 등을 들 수 있고, 비발광형 디스플레이 소자는 액정 디스플레이(Liquid Crystal Display: LCD) 등을 들 수 있다.

[0004] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

- [0005] 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [0006] 고도의 성능에 부합하기 위해 상기와 같은 유기 전계 발광 소자의 구조 및 각 층에 포함되는 물질에 대한 연구가 활발하게 진행되고 있으며, 그 핵심은 발광층에 포함되는 발광물질일 수 있다.
- [0007] 최근 발광물질로 형광물질과 인광물질에 이어, 3 세대 OLED용 물질로 평가받는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)을 나타내는 물질에 대한 관심이 증가되고 있다. 상기 열 활성화 지연 형광을 나타내는 물질은 일중항 여기자를 삼중항으로 바꾸어 빛으로 전환하는 인광물질과 달리, 삼중항 여기자를 일중항으로 바꾸어 빛으로 전환하는 물질이다. 이러한 과정 때문에 지연 형광 특색을 나타내며, 이론적으로 일중항과 삼중항 여기자를 모두 빛으로 바꿀 수 있기 때문에 100% 내부양자효율이 가능하여 청색 및 적색 인광 소재가 가지고 있는 수명과 효율의 한계를 극복할 수 있는 물질로 주목 받으면서 이에 대한 연구가 활성화되고 있는 실정이다.
- [0008] 상술한 열 활성화 지연 형광을 나타내는 대표적인 기작은 삼중항-삼중항 소멸 (Triplet-triplet annihilation: TTA)에 의한 것과 역항간교차(Reverse intersystem crossing: RISC)를 통하여 삼중항을 일중항으로 변환에 의한 것이다. 이때, 현재 상기 TTA는 효율 높은 형광청색 및 초록색 소자에 활용되고 있으나, 삼중항 2 개가 소멸되어 일중항 1 개가 형성되기 때문에 내부양자효율이 낮다는 한계를 가진다. 반면, RISC는 이론적으로 모든 삼중항을 일중항으로 바꿀 수 있어 모든 여기자를 빛으로 전환할 수 있기 때문에, 높은 내부양자효율을 구현할 수 있다는 장점을 가진다.
- [0009] 그러나, 보다 높은 내부양자효율을 구현할 수 있는 재료의 개발이 여전히 요구된다.

## 선행기술문헌

### 비특허문헌

- [0010] (비특허문헌 0001) Adv. Mater. 2009, 21, 4802-4806

## 발명의 내용

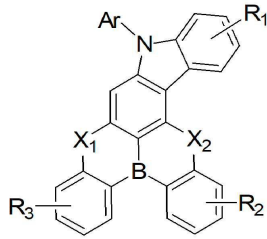
### 해결하려는 과제

- [0011] 본 발명은 특정한 골격을 가져 광학적 특성이 우수하고 유기용매에 대한 용해도가 현저하게 개선된 보론 화합물을 제공한다.
- [0012] 또한 본 발명은 본 발명의 보론 화합물을 채용하여 놀랍도록 향상된 광학적 특성을 가지는 동시에 용액공정으로 용이하게 제조가 가능한 유기 전자 소자를 제공한다.

### 과제의 해결 수단

- [0013] 본 발명은 다양한 유기 전자 소자에 유용하게 사용가능하며, 향상된 광학적 특성을 가지는 보론 화합물을 제공하는 것으로, 본 발명의 보론 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] (상기 화학식 1에서,

[0017]  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 O 또는 S이며;

[0018] Ar은 C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

[0019]  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C1-C30알콕시, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

[0020] 상기 Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며;

[0021] 상기 Ar은 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬아미노 및 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있으며;

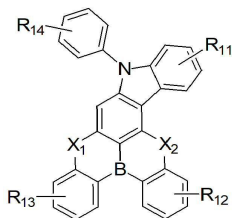
[0022] 상기 Ar 및  $R_1$  내지  $R_3$ 의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.)

[0023] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 화학식 1에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 O 또는 S이며; Ar은 C6-C30아릴이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C30알킬이며; Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며; 상기 Ar은 C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬아미노 및 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있다.

[0024] 보다 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 동일하게 O 또는 S이며; Ar은 C6-C12아릴 또는 C1-C5알콕시로 치환된 C6-C12아릴이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬일 수 있다.

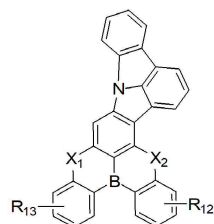
[0025] 보다 우수한 광학적 특성을 가지기위한 측면에서 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0026] [화학식 2]



[0027]

[0028] [화학식 3]



[0029]

[0030] (상기 화학식 2 및 3에서,

[0031]  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 0 또는 S이며;

[0032]  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

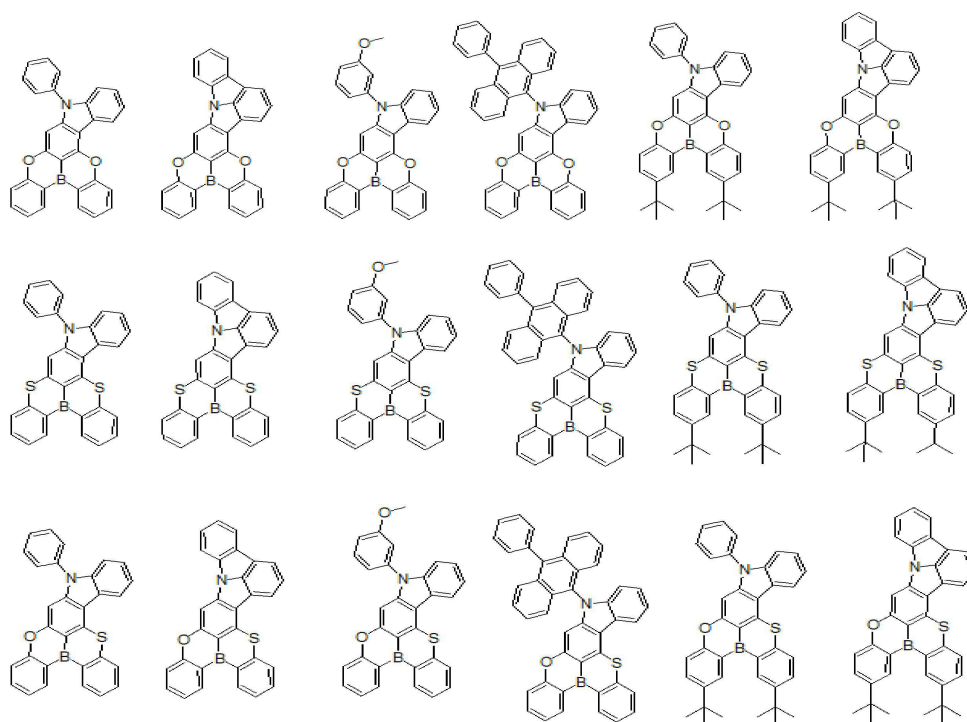
[0033]  $R_{14}$ 는 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노C1-C30알킬아미노 또는 디C1-C30알킬아미노이며;

[0034] 상기  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.)

[0035] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 2 및 3에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 동일하게 0 또는 S이며;  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬이며;  $R_{14}$ 는 수소, C1-C5알콕시, 모노C1-C5알킬아미노 또는 디C1-C5알킬아미노일 수 있다.

[0036] 구체적으로 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 하기 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0037]



[0038]

[0039] 또한 본 발명은 본 발명의 보론 화합물을 포함하는 유기 전자 소자를 제공한다.

[0040] 본 발명의 유기 전자 소자는 유기 태양 전지, 유기 박막 트랜지스터, 유기 전계 발광 소자 또는 유기 센서일 수 있다.

[0041] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기 전자 소자의 유기물층에 포함되는 것일 수 있다.

### 발명의 효과

[0042] 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 보론 및 세 개 이상의 헤테로원자를 가지는 다환 방향족 화합물로 높은 삼중항 에너지와 열안정성을 가져, 역향간교차를 통한 열 활성화 지연 형광을 나타낼 수 있다.

[0043] 또한 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 HOMO-LUMO 갭이 클 뿐만 아니라 공역계의 확장에 따른  $\pi$ -컨쥬게이션 길이를 최소화하여 HOMO-LUMO 갭이 감소하는 것을 억제하고, 일중항에너지 준위와 삼중항 에너지 준위 차이가 작아 이를 채용한 유기 전자 소자는 고효율을 구현할 수 있다.

[0044] 또한 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 다환 방향족 화합물로 특정한 치환기를 도입함으로써 HOMO-LUMO 갭을 조절할 수 있어 유기 전자 소자의 전자 수송층, 정공수송층 및 발광층 등에도 매우 유용하게 사용될 수 있다.

[0045] 나아가 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기용매에 대한 용해도가 극히 우수하여 용액공정으로 유기 전자 소자의 제조가 가능하며, 용액공정이 가능함에 따라 공정이 단순하고 용이하게 유기 전자 소자의 제조가 가능해 매우 경제적이다.

[0046] 따라서 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물을 채용한 유기 전자 소자, 특히 유기 전계 발광 소자는 놀랍도록 향상된 발광효율, 고색순도 및 장수명 특성을 가진다.

### 도면의 간단한 설명

[0047] 도 1은 본 발명의 실시예 1에서 제조된 보론 화합물의 PL(photoluminescence) 스펙트럼을 나타낸 도면이다.

도 2는 본 발명의 실시예 3에서 제조된 유기 전계 발광 소자의 전류밀도-전압-휘도 그래프를 나타낸 도면이다.

도 3은 본 발명의 실시예 3에서 제조된 유기 전계 발광 소자의 전류밀도에 따른 EQE를 나타낸 도면이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0048] 이하, 본 발명을 좀 더 구체적으로 설명한다. 이 때 사용되는 기술 용어 및 과학 용어에 있어서 다른 정의가 없다면, 이 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 통상적으로 이해하고 있는 의미를 가지며, 하기의 설명에서 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있는 공지 기능 및 구성에 대한 설명은 생략한다.

[0049] 본 명세서에서 사용된 용어 "알킬"은 (탄소수가 특별히 한정되지 않은 경우) 탄소수 1 내지 30, 바람직하게 탄소수 1 내지 20, 보다 바람직하게 탄소수 1 내지 10, 좋기로는 탄소수 1 내지 5, 보다 좋기로는 탄소수 1 내지 4를 가진 포화된 직쇄상 또는 분지상의 비-고리(cyclic) 탄화수소를 의미한다. 대표적인 포화 직쇄상 알킬은 -메틸, -에틸, -n-프로필, -n-부틸, -n-펜틸, -n-헥실, -n-헵틸, -n-옥틸, -n-노닐 과 -n-데실을 포함하고, 반면에 포화 분지상 알킬은 -이소프로필, -sec-부틸, -이소부틸, -tert-부틸, 이소펜틸, 2-메틸헥실, 3-메틸부틸, 2-메틸펜틸, 3-메틸펜틸, 4-메틸펜틸, 2-메틸헥실, 3-메틸헥실, 2-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, 4-메틸헵틸, 2-메틸헥실, 3-메틸헥실, 4-메틸헥실, 5- 메틸헥실, 2,3-디메틸부틸, 2,3-디메틸펜틸, 2,4-디메틸펜틸, 2,3-디메틸헥실, 2,4-디메틸헥실, 2,5-디메틸헥실, 2,2-디메틸펜틸, 2,2-디메틸헥실, 3,3-디메틸펜틸, 3,3-디메틸헥실, 4,4-디메틸헥실, 2-에틸펜틸, 3-에틸펜틸, 2-데틸헥실, 3-에틸헥실, 4-에틸헥실, 2-메틸-2-에틸펜틸, 2-메틸-3-에틸펜틸, 2-메틸-4-에틸펜틸, 2-메틸-2-에틸헥실, 2-메틸-3-에틸헥실, 2-메틸-4-에틸헥실, 2,2-디에틸펜틸, 3,3-디에틸헥실, 2,2-디에틸헥실, 및 3,3-디에틸헥실을 포함한다.

[0050] 본 명세서에서 " $C_{1-5}$ "와 같이 기재될 경우 이는 탄소수가 1 내지 5개임을 의미한다. 예를 들어,  $C_{1-5}$ 알킬은 탄소수가 1 내지 5인 알킬을 의미한다.

[0051] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로젠" 및 "할로"는 플루오린, 클로린, 브로민 또는 아이오딘을 의미한다.

[0052] 본 명세서에서 사용된 용어 "알콕시"는  $-OCH_3$ ,  $-OCH_2CH_3$ ,  $-O(CH_2)_2CH_3$ ,  $-O(CH_2)_3CH_3$ ,  $-O(CH_2)_4CH_3$ ,  $-O(CH_2)_5CH_3$ , 및 이와 유사한 것을 포함하는 -O-(알킬)을 의미하며, 여기에서 알킬은 위에서 정의된 것과 같다.

[0053] 본 명세서에서 사용된 용어 "아릴"은 5 내지 10의 고리 원자를 함유하는 탄소고리 방향족 그룹을 의미한다. 대표적인 예는 페닐, 톨일(tolyl), 자이릴(xylyl), 나프틸, 테트라하이드로나프틸, 안트라세닐(anthracenyl), 플루오레닐(fluorenyl), 인데닐(indenyl), 아주레닐(azulenyl) 등을 포함하나 이에 한정되는 것은 아니다. 탄소고

리 방향족 그룹은 선택적으로 치환될 수 있다.

[0054] 본 명세서에서 사용된 용어 "시클로알킬(cycloalkyl)"은 탄소 및 수소 원자를 가지며 탄소-탄소 다중 결합을 가지지 않는 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 포화 고리(ring)를 의미한다. 사이클로알킬 그룹의 예는 (C3-C10)사이클로알킬(예를 들어, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥실 및 사이클로헵틸)을 포함하나 이에 한정되는 것은 아니다. 사이클로알킬 그룹은 선택적으로 치환될 수 있다. 일 실시예에서, 사이클로알킬 그룹은 모노사이클릭 또는 바이사이클릭 링(고리)이다.

[0055] 본 명세서에 사용된 용어 "헤테로사이클로알킬"은 2 내지 12개, 바람직하게 2 내지 10개의 탄소 원자 및 질소, 산소 및 황으로 이루어진 군으로부터 선택된 1 내지 6개의 헤테로원자, 예를 들어 1 내지 5개의 헤테로원자, 1 내지 4개의 헤테로원자, 1 내지 3개의 헤테로원자, 또는 1 내지 2개의 헤테로원자로 이루어진 안정한 3- 내지 18-원 포화 또는 일부 불포화 라디칼을 지칭한다. 예시적인 헤테로사이클로알킬은 비제한적으로 안정한 3-15 원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 안정한 3-12 원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 안정한 3-9 원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 안정한 8-원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 안정한 7-원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 안정한 6-원 포화 또는 일부 불포화 라디칼, 또는 안정한 5-원 포화 또는 일부 불포화 라디칼을 포함한다.

[0056] 본 명세서에서 사용된 "헤테로아릴"은 질소, 산소 및 황으로 구성된 군으로부터 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 가지고, 모노- 및 바이사이클릭 링 시스템을 포함하는 적어도 하나의 탄소 원자를 포함하는 5 내지 10 멤버의 방향족 헤테로고리(heterocycle) 링이다. 대표적인 헤테로아릴은 트리아졸일, 테트라졸일, 옥사디아졸일, 피리딜, 퓨릴, 벤조퓨라닐, 티오펜일, 벤조티오펜일, 퀴노리닐, 피롤일(pyrrolyl), 인돌일, 옥사졸일, 벤조사졸일(benzoxazolyl), 이미다졸일, 벤즈이미다졸일, 티아졸일(thiazolyl), 벤조티아졸일, 이속사졸일, 파이라졸일(pyrazolyl), 이소티아졸일, 피리다지닐, 피리미디닐, 파이라지닐, 트리아지닐, 신놀리닐(cinnolinyl), 프탈라지닐, 퀴나졸리닐, 피리미딜, 옥세타닐, 아제피닐, 피페라지닐, 모포리닐(morpholinyl), 디옥사닐, 티에타닐 및 옥사졸일이다. 헤테로아릴 그룹은 모노사이클릭 또는 바이사이클릭일 수 있다. 헤테로아릴은 용어 헤테로아릴환, 헤테로아릴 그룹 또는 헤테로방향족과 혼용하여 사용될 수 있으며, 이들 용어는 모두 임의로 치환된 환을 포함할 수 있다.

[0057] 본 명세서에서 사용된 용어 "모노 알킬아미노"는  $-NHCH_3$ ,  $-NHCH_2CH_3$ ,  $-NH(CH_2)_2CH_3$ ,  $-NH(CH_2)_3CH_3$ ,  $-NH(CH_2)_4CH_3$ ,  $-NH(CH_2)_5CH_3$ , 및 이와 유사한 것을 포함하는,  $-NH(알킬)$ 을 의미하며, 여기에서 알킬은 위에서 정의된 것과 같다.

[0058] 본 명세서에서 사용된 용어 "디 알킬아미노"는  $-N(CH_3)_2$ ,  $-N(CH_2CH_3)_2$ ,  $-N((CH_2)_2CH_3)_2$ ,  $-N(CH_3)(CH_2CH_3)$ , 및 이와 유사한 것을 포함하는  $-N(알킬)(알킬)$ 을 의미하며, 여기에서 각 알킬은 서로 독립적으로 위에서 정의된 알킬이다.

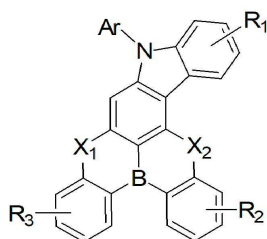
[0060] 이하, 본 발명을 구체적으로 설명한다.

[0061] 본 발명은 보론 및 세 개 이상의 헤테로원자를 포함하는 다환 방향족 화합물인 보론 화합물을 제공하는 것으로, 본 발명의 보론 화합물은 역향간교차를 통한 열 활성화 지연 형광을 나타낸다.

[0062] 또한 본 발명의 보론 화합물은 열안정성이 우수하고, 일중향에너지 준위와 삼중향 에너지 준위 차이가 작아, 이를 채용한 유기 전자 소자의 광학적 특성을 놀랍도록 향상시키며, 특히 이를 채용한 유기 전계 발광 소자의 안정성, 발광효율 및 색순도를 극히 향상시킬 수 있다.

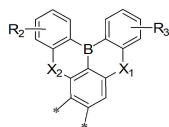
[0063] 본 발명의 보론 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

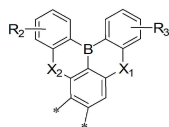
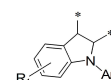
[0064] [화학식1]



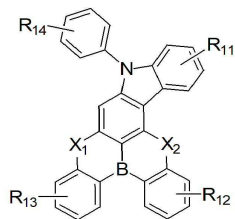
[0065]

- [0066] (상기 화학식 1에서,
- [0067]  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 0 또는 S이며;
- [0068] Ar은 C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;
- [0069]  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C1-C30알콕시, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;
- [0070] 상기 Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며;
- [0071] 상기 Ar은 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬 아미노 및 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있으며;
- [0072] 상기 Ar 및  $R_1$  내지  $R_3$ 의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.)
- [0073] 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 열안정성이 우수하며, 보론을 포함하는 다환 방향족 화합물로 HOMO-LUMO 갭이 클 뿐만 아니라 일중향에너지 준위와 삼중향 에너지 준위 차이가 작아 이를 채용한 유기 전자 소자는 고효율을 구현할 수 있다.
- [0074] 나아가 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기용매에 대한 용해도가 우수하여 용액공정이 가능함에 따라 값비싼 증착장비 등이 필요치 않아 단순한 공정으로 용이하게 유기 전자 소자의 제조가 가능하여 매우 경제적이다.



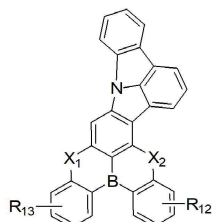
- [0075] 또한 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 의 특정 자리에 가 융합되어  $\pi$ -컨쥬게이션 길이를 최소화하고 분자의 경직성을 증가시켜 비발광 진동을 감소시킴으로써 이를 채용한 유기 전자 소자는 놀랍도록 향상된 효율을 가지는 것으로 판단된다.
- [0076] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 화학식 1에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 0 또는 S이며; Ar은 C6-C30아릴이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C30알킬이며; Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있으며, 상기 Ar은 C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노 C1-C30알킬아미노 및 디 C1-C30알킬아미노에서 선택되는 하나 이상의 작용기로 더 치환될 수 있다.
- [0077] 보다 향상된 효율을 가기기 위한 측면에서 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1에서  $X_1$  및  $X_2$ 가 모두 0이거나,  $X_1$  및  $X_2$ 가 모두 S이며; Ar은 C6-C12아릴 또는 C1-C5알콕시로 치환된 C6-C12아릴이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소, C1-C10알킬이며; Ar과  $R_1$ 은 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있다.
- [0078] 보다 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 동일하게 0 또는 S이며; Ar은 C6-C12아릴 또는 C1-C5알콕시로 치환된 C6-C12아릴이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬일 수 있으며, 더욱 좋기로는  $X_1$  및  $X_2$ 는 0 이며; Ar은 C1-C4알콕시로 치환되거나 비치환된 페닐, C1-C4알콕시로 치환되거나 비치환된 1-나프틸 또는 C1-C4알콕시로 치환되거나 비치환된 2-나프틸이며;  $R_1$  내지  $R_3$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C4알킬일 수 있다.
- [0079] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 다른 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0080] [화학식 2]



[0081]

[0082] [화학식 3]



[0083]

[0084] (상기 화학식 2 및 3에서,

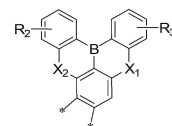
[0085]  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로 H 또는 S이며;

[0086]  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, C1-C30알킬, C3-C30시클로알킬, C3-C30헤테로시클로알킬, C6-C30아릴 또는 C3-C30헤테로아릴이며;

[0087]  $R_{14}$ 는 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, 하이드록시, C1-C30알킬, 할로C1-C30알킬, C1-C30알콕시, 모노C1-C30알킬아미노 또는 디C1-C30알킬아미노이며;

[0088] 상기  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 의 헤테로아릴 및 헤테로시클로알킬은 서로 독립적으로 B, N, O, S, Se, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.)

[0089] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 보론 화합물은



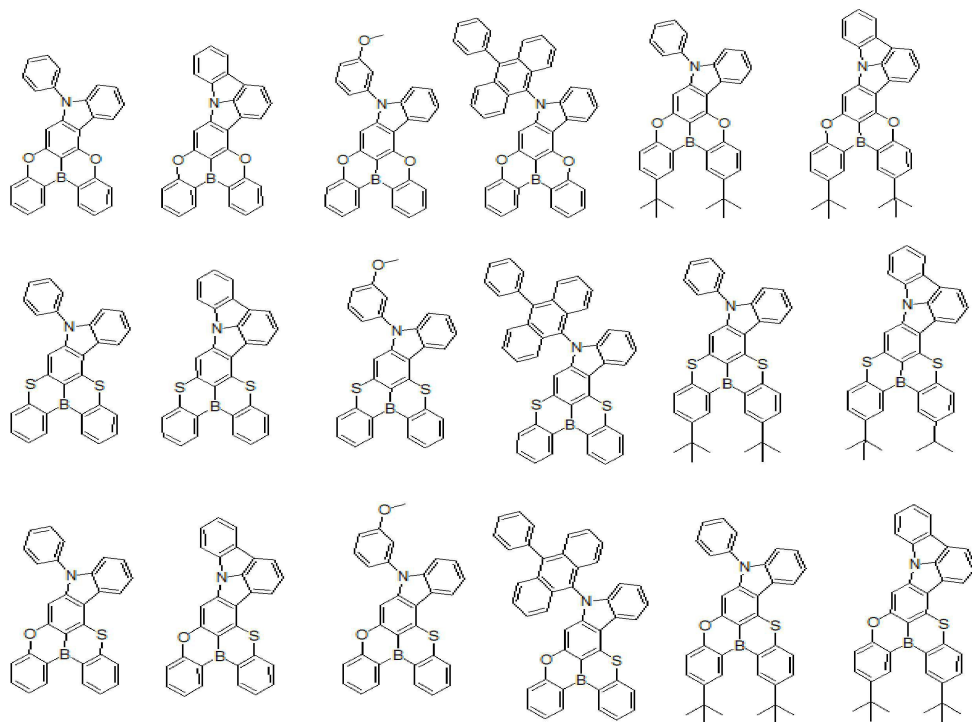
의 특정 자리

에 가 융합되어 자리에 가 융합된 와 대비하여 분자의 경직성을 보다 증가되어 비발광 진동을 감소시킴으로써 놀랍도록 향상된 효율을 가지는 것으로 판단된다.

[0090] 또한 본 발명의 화학식 2 또는 화학식 3의 보론 화합물은 유기용매에 대한 용해도가 높아 용액공정으로 유기 전자 소자를 제조할 수 있어 공정이 단순화되고 고가의 증착장비가 필요치 않아 매우 경제적이다.

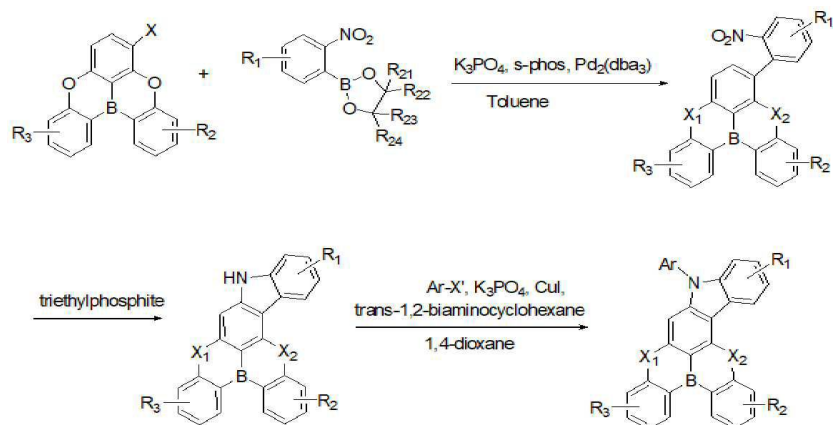
[0091] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 2 및 3에서  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 동일하게 H 또는 S이며;  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C5알킬일 수 있으며;  $R_{14}$ 는 수소, C1-C5알콕시, 모노C1-C5알킬아미노 또는 디C1-C5알킬아미노일 수 있으며, 보다 바람직하게  $X_1$  및  $X_2$ 는 H이며;  $R_{11}$  내지  $R_{13}$ 은 서로 독립적으로 수소 또는 C1-C4알킬이며;  $R_{14}$ 는 수소 또는 C1-C5알콕시일 수 있다.

[0092] 구체적으로 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 하기 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 당업자가 인식할 수 있는 모든 방법으로 합성될 수 있으며, 일례로 하기 반응식 1의 방법으로 제조될 수 있다.

[반응식 1]



(상기 반응식에서 X 및 X'는 할로젠이며,  $X_1$  및  $X_2$ , Ar, 및  $R_1$  내지  $R_5$ 는 화학식 1의 정의와 동일하다.)

본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 통상의 제조방법에 따라 반응조건의 변경을 통해 제조될 수 있다.

본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물의 제조방법은 유기용매 하에서 수행되는 것이 바람직하나, 용매를 사용하지 않고 용해된 상태에서 또한 반응이 수행될 수 있음은 물론이다. 상기 유기용매는 반응물을 완벽하게 용해시킬 수 있다면 한정되는것은 아니나, 이의 구체적인 일례로는 톨루엔, 메탄올, 에탄올, 벤젠, n-헵탄, 테트라하이드로퓨란(THF), 클로로포름 또는 이들의 혼합용매일 수 있다.

또한, 본 발명은 화학식 1로 표시되는 보론 화합물을 포함하는 유기 전자 소자를 제공한다.

본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전자 소자는 유기 태양 전지, 유기 박막 트랜지스터, 유기 전계 발광 소자 또는 유기 센스일 수 있다.

바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 본 발명의 유기 전자 소자의 유기물층에 포함되는 것일 수 있다.

바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전자 소자는 유기 전계 발광 소자 일 수 있으며, 보다 바람직하게

본 발명의 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 보론 화합물이 발광층에 포함된 것일 수 있다.

- [0105] 좋기로는 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광층 호스트로 사용될 수 있다.
- [0106] 구체적으로, 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 유기물층은 본 발명의 보론 화합물을 포함할 수 있다.
- [0107] 보다 바람직하게, 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광층에 포함될 수 있다.
- [0108] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 본 기술분야의 당업자가 인식할 수 있는 범위 내에서 가능한 방법으로 제조할 수 있음을 물론이다.
- [0109] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 보론 화합물은 다양한 유기 전계 발광 소자에 응용 가능하며, 이러한 유기 전계 발광 소자는 평판 디스플레이 장치, 플렉시블 디스플레이 장치, 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치 등에서 선택되는 장치에 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0110] 이하, 유기 전계 발광 소자의 일 양태를 들어 구체적으로 설명한다.
- [0111] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(OLED)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함하는 것일 수 있다.
- [0112] 상기 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 일 예로, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다.
- [0113] 상기 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다.
- [0114] 또한, 상기 제1 전극(EL1)은 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 일 예로, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0115] 상기 제1 전극(EL1)의 두께는 일 예로, 1000Å 내지 10000Å, 1000Å 내지 3000Å일 수 있다.
- [0116] 상기 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0117] 상기 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 일 예로, 상기 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0118] 상기 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0119] 정공 주입층(HIL)은 일 예로, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris{N, -(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine),

PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

[0120] 상기 정공 수송층(HTL)은 일 예로, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.

[0121] 상기 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 일 예로, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 또는 mCP 등을 포함할 수 있다. 또한, 전술한 바와 같이, 전자 저지층(EBL)은 상기 화학식 1의 보론 화합물을 포함할 수 있다.

[0122] 상기 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 100Å 내지 10000Å, 100Å 내지 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 일 예로, 30Å 내지 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 일 예로, 30Å 내지 1000Å 일 수 있다. 또한, 상기 전자 저지층(EBL)의 두께는, 일 예로, 10Å 내지 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL) 등의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0123] 상기 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 일 예로, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 p-도펀트의 일 예로, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0124] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0125] 상기 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 일 예로, 100Å 내지 1000Å 또는 100Å 내지 300Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 상기 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0126] 이하에서는, 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 화학식 1의 보론 화합물이 발광층(EML)에 포함되는 것을 예로 들어 설명한다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 화학식 1의 보론 화합물은 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 제공된 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있다. 일 예로, 본 발명의 일 실시예에 따른 상기 화학식 1의 보론 화합물은 정공 수송 영역(HTR)에 포함되는 것일 수 있다. 일 예로, 본 발명의 상기 화학식 1의 보론 화합물은 정공 수송층(HTL) 또는 전자 저지층(EBL)에 포함되는 것일 수 있다.

[0127] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물은 유기 전자 소자 특히, 유기 전계 발광 소자에 적용될 시 10중량%내지 80중량%으로 포함될 수 있으며, 보다 구체적으로 10중량% 내지 40중량%미만으로 포함될 수 있다.

- [0128] 상기 발광층(EML)은 본 발명의 화학식 1로 표시되는 보론 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 발광층(EML)은 상기 화학식 1의 보론 화합물을 호스트로 포함하고, 열 활성 지연 형광을 방사하는 층일 수 있다. 또한, 상기 발광층(EML)은 본 발명의 보론 화합물외에 추가 호스트를 더 포함할 수 있다. 추가 포함되는 호스트는 통상적으로 사용하는 물질이라면 특별히 한정하지 않으나, 일 예로,  $\text{Alq}_3$ (tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenyl cyclotriposphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene),  $\text{DPSiO}_3$  (Hexaphenylcyclotrisiloxane),  $\text{DPSiO}_4$ (Octaphenylcyclotetra siloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 사용될 수 있다.
- [0129] 상기 발광층(EML)은 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색광을 발광하는 것일 수 있고, 구체적으로는 440nm 내지 470nm, 보다 구체적으로는 450nm 내지 470nm의 파장 영역을 갖는 청색광을 발광하는 것일 수 있다.
- [0130] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 보론 화합물과 병용할 수 있는 도펀트 재료로서는 제한이 있는 것은 아니며, 원하는 발광색에 따라 다양한 도펀트를 선택하여 사용할 수 있다. 구체적인 일례로 발광층이 적색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는  $\text{PIrIr}(\text{acac})(\text{bis}(1\text{-phenylisoquinoline})\text{acetylacetonate})\text{iridium}$ ,  $\text{PQIr}(\text{acac})(\text{bis}(1\text{-phenylquinoline})\text{acetylacetonate})\text{iridium}$ ,  $\text{PQIr}(\text{tris}(1\text{-phenylquinoline})\text{iridium})$ ,  $\text{PtOEP}(\text{octaethylporphyrin platinum})$ 와 같은 인광 물질이나,  $\text{Alq}_3$ (tris(8-hydroxyquinolino)aluminum)와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다. 발광층이 녹색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는  $\text{Ir}(\text{ppy})_3(\text{fac tris}(2\text{-phenylpyridine})\text{iridium})$ 와 같은 인광물질이나,  $\text{Alq}_3$ (tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 보론계 화합물 등과 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다. 발광층이 청색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는  $(4,6\text{-F}_2\text{ppy})_2\text{Irpic}$ 와 같은 인광 물질이나, spiro-DPVBi, spiro-6P, 디스틸벤젠(DSB), 디스트릴아릴렌(DSA), PF0계 고분자, PPV계 고분자, 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 보론계 화합물 등과 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.
- [0131] 바람직하게 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물을 호스트 물질로 채용할 경우 바람직한 도펀트로는  $(4,6\text{-F}_2\text{ppy})_2\text{Irpic}$ , spiro-DPVBi, spiro-6P, 디스틸벤젠(DSB), 디스트릴아릴렌(DSA), 안트라센계 화합물 및 파이렌계 화합물일 수 있다.
- [0132] 상기 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0133] 상기 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 일 예로, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 발광층(EML)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0134] 상기 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 일 예로, 1000Å 내지 1500Å인 것일 수 있다.
- [0135] 상기 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0136] 상기 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은  $\text{Alq}_3$ (Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, DPEPO (bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-

benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Beq<sub>2</sub>(beryllumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0137] 상기 전자 수송층(ETL)들의 두께는 일 예로, 100 Å 내지 1000 Å, 150 Å 내지 500 Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0138] 상기 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li<sub>2</sub>O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 일 예로, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다.

[0139] 상기 전자 주입층(EIL)들의 두께는 일 예로, 1 Å 내지 100 Å, 3 Å 내지 90 Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0140] 상기 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), 또는 DPEPO (bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0141] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 일 예로, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

[0142] 상기 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0143] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0144] 또한 본 발명의 일 실시예에 따른 보론 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0145] 상기 유기 전계 발광 소자가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0147] 이하, 실시예를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명한다. 그러나, 이하의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한

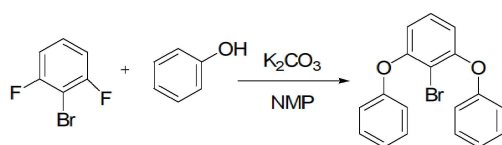
것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0148] 이에 앞서, 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 아니되며, 발명자는 그 자신의 발명을 가장 최선의 방법으로 설명하기 위해 용어의 개념을 적절하게 정의할 수 있다는 원칙에 입각하여 본 발명의 기술적 사상에 부합하는 의미와 개념으로 해석되어야만 한다. 따라서, 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 가장 바람직한 일 실시예에 불과할 뿐이고 본 발명의 기술적인 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들은 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형 예들이 있음을 이해하여야 한다.

[0149] 별도로 언급되는 경우를 제외하고 모든 화합물의 합성은 질소 분위기 하에서 표준슐랭크 (Schlenk) 또는 글로브박스를 사용하여 수행되었으며 반응에 사용되는 유기용매는 나트륨금속과 벤조페논 하에서 환류시켜 수분을 제거하여 사용직전 증류하여 사용하였다.

[0151] [실시예 1] 11-phenyl-11H-9,16-dioxo-11-aza-4b-boraindeno[1,2-a]naphtho[3,2,1-de]anthracene 의 제조

[0152] 단계1. ((2-bromo-1,3-phenylene)bis(oxy))dibenzene 의 제조

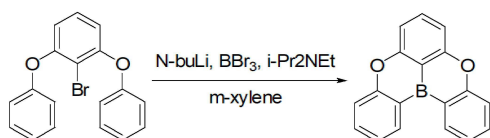


[0153]

[0154] 질소분위기 하 2-bromo-1,3-difluorobenzene(30.0 g, 155.4 mmol), phenol(43.88 g, 466.3 mmol) 및  $K_2CO_3$ (64.45 g, 466.3 mmol)을 무수 N-methylpyrrolidinone(70.0 mL)에 녹인 후 180 °C에서 24 시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료되면 반응혼합물을 실온으로 냉각 하여 얼음물에 붓고 침전물을 여과하고 물로 세척하였다. 조 생성물을 톨루엔으로 추출하여 모아진 유기 층을 물로 세척하고,  $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 실리카겔을 통해 여과 하였다. 용매를 증발시킨 후, 조 생성물을 에탄올로 세척하여 백색 고체로서 수득 하였다(25.3 g, 47.7 % 수율).

[0155]  $^1H$ -NMR (300 MHz,  $CD_2Cl_2$ )  $\delta$  = 7.44-7.39 (m, 4H) 7.27-7.16 (m, 3H), 7.07-7.04 (m, 4H), 6.78-6.76 (d, J=8.2Hz, 2H).

[0156] 단계2. 5,9-dioxo-13b-boranapththo[3,2,1-de]anthracene 의 제조

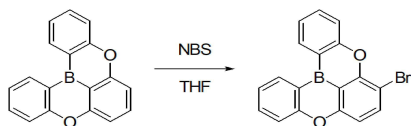


[0157]

[0158] 질소 분위기 하에서 ((2-bromo-1,3-phenylene)bis(oxy))dibenzene(25.0 g, 34.52 mmol)을 무수 m-xylene(250.0 mL)에 녹인 후 -30°C에서 n-BuLi 용액(헥산 중 2.5 M 용액, 35.16 mL, 87.92 mmol)을 적가하였다. 혼합물을 -30°C에서 2 시간 동안 교반시킨 후  $BBr_3$  (8.34 mL, 87.92 mmol)를 첨가하고 실온에서 1 시간 동안 교반시켰다. 이후 여기에 N,N-diisopropylethylamine (14.04mL, 146.54 mmol)을 0°C에서 첨가한 후 120°C에서 12시간 동안 교반시켰다. 반응이 완료되면 반응혼합물을 실온으로 냉각시킨 후 톨루엔을 사용하여 필터하고 생성물을 컬럼크로마토그래피 (용리액 = n-헥산)로 정제하여 표제 화합물인 백색 고체로서 수득 하였다 (9.6 g, 48.5 % 수율).

[0159]  $^1H$ -NMR (300 MHz,  $CD_2Cl_2$ )  $\delta$  = 8.65-8.62 (dd, J=1.7Hz, J=7.7Hz, 2H) 7.77-7.72 (m, 1H), 7.69-7.63 (m, 2H), 7.49-7.46 (dd, J=0.9Hz, J=8.3Hz, 2H), 7.36-7.30 (m, 2H), 7.18-7.15 (d, J=8.2Hz, 2H).

[0160] 단계3. 8-bromo-5,9-dioxa-13b-boranaphtho[3,2,1-de]anthracene 의 제조

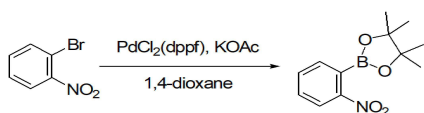


[0161]

[0162] 질소 분위기 하에서 5,9-dioxa-13b-boranaphtho[3,2,1-de]anthracene(9.5 g, 35.17 mmol)을 무수 Tetrahydrofuran(200.0 mL)에 녹인 후 상온에서 N-Bromosuccinimide(6.57g, 36.93 mmol)를 소분해서 적가한 후 상온에서 5시간 교반시켰다. 반응혼합물을 물에 붓고 필터하여 고체를 수득한 후, dichloromethane을 사용하여 추출하였다. 추출된 유기용액을 MgSO<sub>4</sub>상에서 건조시킨 후, 용매를 증발시킨 후 에탄올로 씻어주어 백색 고체의 표제 화합물을 수득 하였다(10.1 g, 82.28 % 수율).

[0163] <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ = 8.64 (d, J=7.6Hz, 1H) 7.94-7.91 (d, J=8.7Hz, 1H), 7.73-7.64 (m, 2H), 7.59-7.56 (d, J=8.4Hz, 1H), 7.49-7.46 (d, J=8.4Hz, 1H), 7.40-7.32 (m, 2H), 7.12-7.09 (m, 1H)

[0164] 단계4. 4,4,5,5-tetramethyl-2-(2-nitrophenyl)-1,3,2-dioxaborolane의 제조

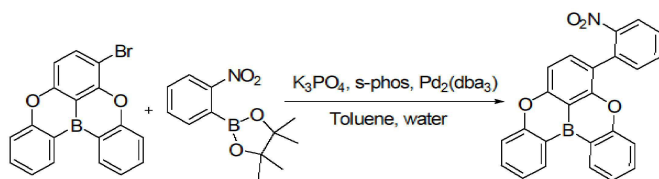


[0165]

[0166] 질소 분위기 하에서 1-bromo-2-nitrobenzene(20.0 g, 99.01 mmol)와 bis(pinacolato)diboron(35.19 g, 138.60 mmol), Potassium acetate(29.15 g, 297.01 mmol)를 무수 1,4-dioxane(160.0 mL)에 녹인 후 30분간 버블링시켰다. 여기에 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (3.62 g, 4.95 mmol)를 첨가한 후, 100℃에서 12시간 교반시켰다. 반응 혼합물을 물에 첨가한 후, dichloromethane으로 추출하였다. 추출된 유기 용액을 MgSO<sub>4</sub>상에서 건조시킨 후, 용매를 증발시키고 남은 조 생성물을 컬럼크로마토그래피(용리액 = n-hexane: dichloromethane/ : 4:1)로 분리정제 하여 표제 화합물을 수득하였다(13.5 g, 54.7 % 수율).

[0167] <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ = 8.19-8.16 (dd, J=1.0Hz, J=8.6Hz, 1H), 7.75-7.70 (m, 1H), 7.63-7.57 (m, 2H), 1.43 (s, 12H).

[0168] 단계 5. 8-(2-nitrophenyl)-5,9-dioxa-13b-boranaphtho[3,2,1-de]anthracene의 제조

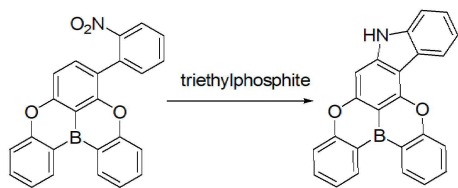


[0169]

[0170] 질소 분위기 하에서 8-bromo-5,9-dioxa-13b-boranaphtho[3,2,1-de]anthracene(10 g, 28.654 mmol), 4,4,5,5-tetramethyl-2-(2-nitrophenyl)-1,3,2-dioxaborolane(10.7 g, 42.981mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(18.2g, 85.962 mmol), s-phos (1.76 g, 4.2981 mmol)을 Toluene(200 mL), H<sub>2</sub>O (60mL)에 녹인 후 30분간 버블링 시켰다. 여기에 Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0)(1.3 g, 1.4327 mmol)를 첨가하여 100 ℃에서 10시간 동안 환류교반 시켰다. 반응이 완료되면 반응혼합물을 상온으로 냉각시킨 후 물 600 mL에 부어주었다. 이를 Dichloromethane과 물로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거하고 실리카로 도포하여 컬럼 크로마토 그래피(n-Hexane/Dichloromethane(6/1))로 분리정제하여 표제 화합물을 고체로 수득하였다(7.9 g (70.4 %)).

[0171] <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ = 8.78-8.73 (m, 2H), 8.14-8.11 (m, 1H), 7.95-7.93 (d, J=8.4Hz, 1H), 7.84-7.62 (m, 6H), 7.50-7.42 (m, 3H), 7.35-7.32 (dd, J=0.8Hz, J=8.4Hz, 1H).

[0172] 단계 6. 11H-9,16-dioxa-11-aza-4b-boraindeno[1,2-a]naphtho[3,2,1-de]anthracene의 제조

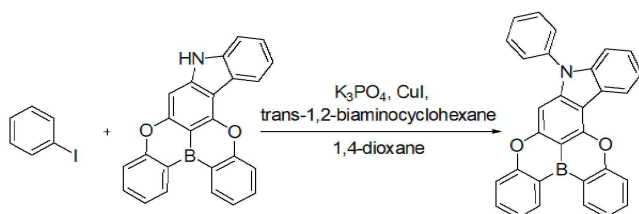


[0173]

[0174] 질소 분위기 하에서 8-(2-nitrophenyl)-5,9-dioxa-13b-boranaphtho[3,2,1-de]anthracene(7.0 g, 10.225 mmol)을 triethylphosphite(20 ml, 112.477 mmol)에 적가한 후 160 °C에서 10시간 동안 가열환류시켰다. 반응이 완료되면 반응혼합물을 상온으로 냉각시킨 후 물 500 mL에 부어주었다. 이를 Dichloromethane과 물로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후 실리카로 도포하여 컬럼 크로마토 그래피(n-Hexane/ Dichloromethane (7/1))로 분리정제하여 표제 화합물을 고체로 수득하였다(4.5 g (70 %)).

[0175] <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ = 8.81-8.74 (m, 2H), 8.67-8.64 (m, 1H), 8.57 (s, 1H), 7.87-7.72 (m, 3H), 7.58-7.41 (m, 6H), 7.28 (s, 1H).

[0176] 단계 7. 11-phenyl-11H-9,16-dioxa-11-aza-4b-boraindeno[1,2-a]naphtho[3,2,1-de]anthracene의 제조



[0177]

[0178] 질소 분위기 하에서 11H-9,16-dioxa-11-aza-4b-boraindeno[1,2-a]naphtho[3,2,1-de]anthracene(4.5 g, 12.528 mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(10.64 g, 50.112 mmol), CuI(0.23 g, 1.2528 mmol), I-Benzene(7.6 g, 37.584 mmol), trans-1,2-bisaminocyclohexane(0.22 g, 1.8792 mmol)를 1,4-dioxane에 녹인 후 100 °C에서 10시간 동안 가열환류시켰다. 반응이 완료되면 반응혼합물을 상온으로 식힌 후 물 500mL에 부어주었다. 이를 Dichloromethane과 물로 추출한 후 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 다음 실리카로 도포하여 컬럼 크로마토 그래피(n-Hexane/ Dichloromethane (6/1))로 분리정제하여 표제 화합물인 고체를 수득하였다(2.9 g (53.1 %)).

[0179] <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ = 8.85-8.82 (dd, J=1.5Hz, J=7.7Hz, 1H), 8.80-8.75 (m, 2H), 7.94-7.83 (m, 2H), 7.77-7.69 (m, 5H), 7.70-7.60 (m, 1H), 7.56-7.41 (m, 6H), 7.22 (s, 1H).

[0181] [실시예 2] 광특성 평가

[0182] 상기 실시예 1에서 얻어진 보론 화합물의 UV 흡수스펙트럼 및 PL(photoluminescence) 스펙트럼을 평가하였다. 구체적으로, 보론 화합물을 톨루엔에 녹여 각각 10중량%, 20중량%, 40중량%, 60중량% 및 80중량%의 보론 화합물 용액을 제조하고, 시마즈 유브이-350 스펙트로메터(Shimadzu UV-350 Spectrometer)를 이용하여, UV 흡수스펙트럼을 측정하였다. 또한, 상기에서 제조된 각각의 보론 화합물 용액을 제논(Xenon) 램프가 장착되어 있는 ISC PC1 스펙트로플로로메터(Spectrofluorometer)를 이용하여 PL(Photoluminescence)스펙트럼을 측정하였다. 또한, 그 결과는 하기 도 1에 나타내었다.

[0183] 도 1에서 시사하는 바와 같이, 본 발명의 실시예 1의 보론 화합물이 PL 스펙트럼이 460nm부근에서 발광하는 것으로 보아 청색 발광물질로 사용될 수 있음을 알 수 있다.

[0185] [실시예 3] 유기 전계 발광 소자의 제작

[0186] OLED용 글래스로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막 cell을 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

[0187] 소자의 구성은 Glass / indiumtin oxide (ITO) / 4 % ReO<sub>3</sub>: mCP (45 nm) / mCP(15 nm)/ mCP : TSP01 : 각각 10wt%, 20wt%, 40wt%, 60wt%, 80wt% 실시예의 보론 화합물 (15 nm)/ TSP01 (15 nm) / 4 wt Rb<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>:TSP01 (50 nm) / Al 이다.

[0188] 구체적으로 ITO 박막 4% ReO<sub>3</sub>: mCP을 증착하여 45 nm의 정공주입층을 형성 후 1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene (mCP)을 증착하여 15 nm의 정공 전달층을 형성하였으며, 발광층의 호스트 물질로 9-(3-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)-3-(diphenylphosphoryl)-9H-carbazole (mCP): diphenyl(4-(triphenylsilyl)phenyl)phosphine oxide(TSP01)을 사용하였고, 실시예 1에서 제조된 보론 화합물(청색 발광 재료)을 발광층의 도판트로 사용하였으며, 도판트의 농도가 각각 10wt%, 20wt%, 40wt%, 60wt%, 80wt%으로 하여 mCP, TSP01 및 본 발명의 실시예 1에서 제조된 보론 화합물을 15 nm 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 전자전달층으로 TSP01를 15 nm 증착하고, 전자주입층으로 4 wt% Rb<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>:TSP01 를 50 nm 증착하고, 상기 전자주입 및 전자전달층 위에 Al을 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기 전계 발광 소자의 특성을 측정하여 그 결과를 표 1 및 도 2와 도 3에 나타내었다.

표 1

[0189]

| 본 발명의 실시예 1의 보론 화합물 함량(중량%) | V <sub>on</sub> <sup>a</sup> | EQE (%) | CIE (x, y)   |
|-----------------------------|------------------------------|---------|--------------|
|                             |                              | Max     |              |
| 10                          | 5.0                          | 8.0     | (0.15, 0.13) |
| 20                          | 3.5                          | 9.0     | (0.16, 0.18) |
| 40                          | 3.5                          | 5.7     | (0.16, 0.22) |

[0190] a:Turn on voltage at 1 cd/m<sup>2</sup> .

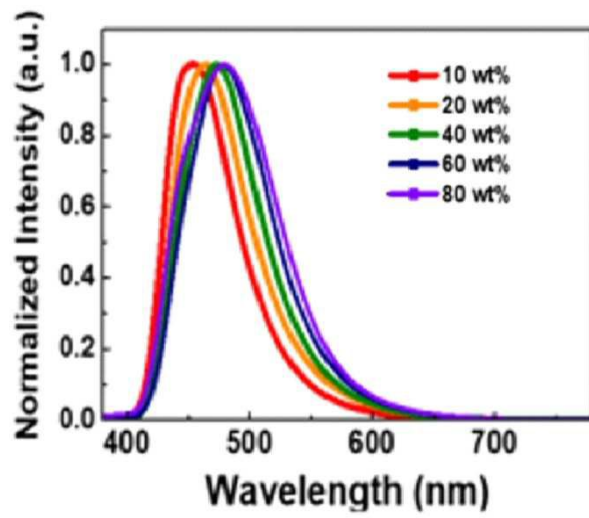
[0191] 표 1 및 도 2에서 보이는 바와 같이 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 보론 화합물을 도입함으로써 유기 전계 발광 소자의 효율을 향상시키고, 높은 색순도를 나타내었다.

[0192] 보다 구체적으로 본 발명의 보론 화합물을 10중량% 내지 80중량%, 바람직하게 10중량%초과 내지 60중량%미만으로 포함하는 경우, 보다낮은 구동전압을 가지며 외부양자효율이 현저히 향상되었음을 알 수 있다.

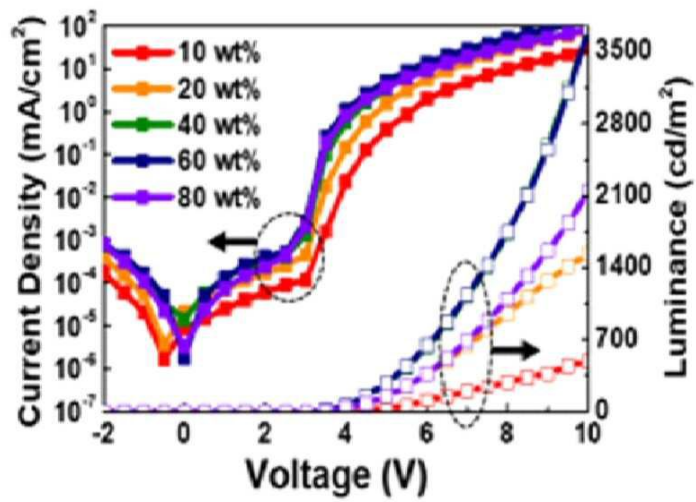
[0194] 이상에서 살펴본 바와 같이 본 발명의 실시예에 대해 상세히 기술되었지만, 본 발명이 속하는 기술분야에 있어서 통상의 지식을 가진 사람이라면, 첨부된 청구범위에 정의된 본 발명의 정신 및 범위를 벗어나지 않으면서 본 발명을 여러 가지로 변형하여 실시할 수 있을 것이다. 따라서 본 발명의 앞으로의 실시예들의 변경은 본 발명의 기술을 벗어날 수 없을 것이다.

도면

도면1



도면2



도면3

