

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2021년 5월 20일 (20.05.2021)



(10) 국제공개번호  
**WO 2021/096269 A1**

(51) 국제특허분류:  
*C09K 11/06* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2020/015931

(22) 국제출원일: 2020년 11월 12일 (12.11.2020)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:  
10-2019-0145233 2019년 11월 13일 (13.11.2019) KR

(71) 출원인: 고려대학교 산학협력단 (**KOREA UNIVERSITY RESEARCH AND BUSINESS FOUNDATION**)  
[KR/KR]; 02841 서울시 성북구 안암로 145, Seoul (KR).

(72) 발명자: 강상욱 (**KANG, Sang Ook**); 30005 세종시 전의면 운주산로 1398 109-101, Sejong (KR). 손호진 (**SON, Ho Jin**); 16663 경기도 수원시 권선구 동수원로145번길 24 211-104, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 박상열 (**PARK, Sang Youl**); 08505 서울시 금천구 가산디지털2로 123 1403, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD,

SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

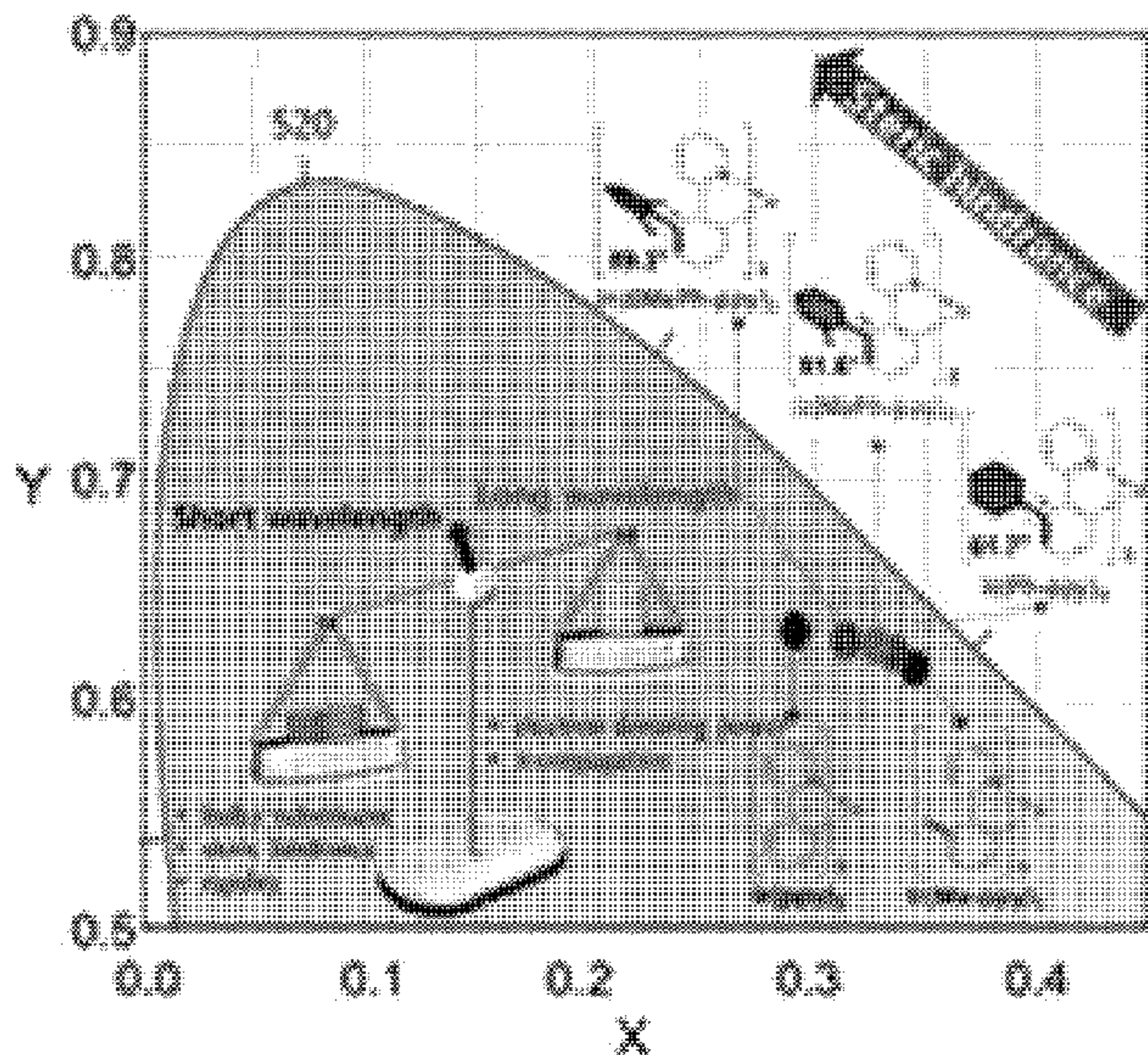
(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))
- 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

(54) Title: IRIIDIUM PHOSPHORESCENT MATERIAL, PREPARATION METHOD THEREFOR, AND PHOTOPHYSICAL PROPERTIES THEREOF

(54) 발명의 명칭: 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성



(57) Abstract: An iridium phosphorescent material comprises an iridium-containing core metal and a phenyl-pyridine ligand which is a bidentate ligand of the core metal and in which a steric hindrance phenyl group is introduced, wherein the steric hindrance phenyl is introduced at the ortho position of the phenyl group of the ligand. The present application relates to an iridium phosphorescent material comprising a phenylpyridine ligand in which a steric hindrance functional group is introduced, a method for preparing same, and the photophysical properties of the material.

(57) 요약서: 이리듐 인광소재에 있어서, 이리듐을 포함하는 중심 금속, 및 상기 중심 금속의 2좌 배위자이고, 입체장애 페닐기가 도입된 페닐-피리딘 리간드를 포함하되, 상기 입체장애 페닐은, 상기 리간드의 페닐기의 오르토(ortho) 위치에 도입되는 것을 포함할 수 있다. 본 출원은 상기 입체장애 작용기가 도입된 페닐피리딘 리간드를 포함하는 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성에 관한 것이다.

WO 2021/096269 A1

## 명세서

### 발명의 명칭: 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성

#### 기술분야

- [1] 본 출원은 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성에 관한 것으로, 보다 상세하게는, 이리듐 중심 금속, 및 상기 중심 금속에 배위되고, 입체장애 작용기가 도입된 페닐피리딘 리간드를 포함하는 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성에 관한 것이다.

#### 배경기술

- [2] 일반적으로, 유기 발광 다이오드(OLED)용 발광 소재는 CIE1931 색좌표에 의해 색이 표현될 수 있다. 이 때, 적색, 녹색, 및 청색의 기준 색좌표 값은 각각 (0.735, 0.265), (0.274, 0.717), 및 (0.167, 0.009)이다. 보통, RGB의 픽셀로 구현되는 디스플레이용 발광물질은 기준 색좌표 값을 나타내도록 제조된다. 하지만, 조명용 발광물질은 용도에 따라 기준 색좌표 값과 다르게 제조될 수 있다.
- [3] 발광물질의 발광파장 영역은 2개 이상의 메인 리간드에 의해 정해질 수 있다. 따라서, 발광효율이 잘 알려진 메인 리간드를 선택하고, 미세한 색좌표 값의 조정을 위해, 보조리간드를 제공하거나, 메인 리간드에 다양한 치환기를 도입시켜, 발광물질을 제조하는 연구가 진행되고 있다.
- [4] 예를 들어, 대한민국 공개 특허 공보 10-2014-0027315(출원번호 10-2013-7031102)에는 아릴-2-[1,3,5]트리아진을 리간드로 포함하는 유기 금속 착제로서, 상기 [1,3,5]트리아진의 4번 위치에 치환 또는 무치환의 탄소수1~탄소수4의 알킬기, 치환 또는 무치환의 탄소수5~탄소수7의 단환식 포화 탄화수소, 치환 또는 무치환의 탄소수7~탄소수10의 포화 탄화수소, 및 치환 또는 무치환의 탄소수6~탄소수10의 아릴기 중 어느 하나를 나타내고, 6번 위치에 수소, 치환 또는 무치환의 탄소수1~탄소수4의 알킬기를 나타내고, 상기 아릴은 치환 또는 무치환의 탄소수6~탄소수10의 아릴렌기를 나타내고, 상기 금속은 제9족 원소 또는 제10족 원소를 나타내는 유기 금속 착제가 개시된다.

#### 발명의 상세한 설명

##### 기술적 과제

- [5] 본 발명이 해결하고자 하는 일 기술적 과제는, 이리듐 중심 금속, 및 상기 중심 금속에 2좌 배위자이고, 입체장애 페닐이 도입된 페닐-피리딘 리간드를 포함하는 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성을 제공하는 데 있다.
- [6] 본 발명이 해결하고자 하는 또 다른 기술적 과제는, 입체장애 작용기를 포함하며, 발광 파장 및 색좌표가 튜닝된 이리듐 인광소재, 그 제조 방법, 및 이의 광물리적 특성을 제공하는 데 있다.

- [7] 본 발명이 해결하고자 하는 기술적 과제는 상술된 것에 제한되지 않는다.

### 과제 해결 수단

- [8] 본 발명이 해결하고자 하는 일 기술적 과제는, 이리듐 인광소재를 제공하는 데 있다.
- [9] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 이리듐을 포함하는 중심 금속, 및 상기 중심 금속의 2차 배위자이고, 입체장애 페닐기가 도입된 페닐-피리딘 리간드를 포함하되, 상기 입체장애 페닐은, 상기 리간드의 페닐기의 오르토(ortho) 위치에 도입되는 것을 포함할 수 있다.
- [10] 일 실시 예에 따르면, 상기 입체장애 페닐은, 페닐, 메틸페닐 또는 2,6-디메틸페닐 중에서 적어도 어느 하나인 것을 포함할 수 있다.
- [11] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 상기 입체장애 페닐의 분자량이 커질수록, 발광파장이 증가하는 것을 포함할 수 있다.
- [12] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 상기 입체장애 페닐의 종류에 따라, 광특성이 조절되어, 인광 메커니즘이 변화되는 것을 포함할 수 있다.
- [13] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 녹색 발광 물질인 것을 포함할 수 있다.
- [14] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 상기 리간드를 동종리간드로 포함하는 동종리간드 이리듐 착화합물을 포함할 수 있다.
- [15] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는, 상기 리간드를 메인 리간드로 갖고, 보조 리간드를 더 포함하는 이종리간드 이리듐 착화합물을 포함할 수 있다.
- [16]
- [17] 본 발명이 해결하고자 하는 일 기술적 과제는, 이리듐 인광소재의 제조 방법을 제공하는 데 있다.
- [18] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재의 제조 방법은, 페닐-피리딘의 상기 페닐기에 입체장애 페닐이 도입된 리간드를 준비하는 단계, 상기 리간드 및 이리듐 화합물을 포함하는 소스 용액을 제조하는 단계, 및 상기 소스 용액을 반응시켜, 상기 리간드가 3배위된 상기 이리듐 인광소재를 제조하는 단계를 포함할 수 있다.
- [19] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재의 제조 방법은, 페닐-피리딘의 상기 페닐기에 입체장애 페닐이 도입된 리간드를 준비하는 단계, 상기 리간드 및 이리듐 화합물을 포함하는 제1 혼합 용액을 준비하는 단계, 상기 제1 혼합 용액을 반응시켜, 상기 리간드 및 상기 이리듐 화합물의 이리듐이 결합된 이리듐 다이머를 제조하는 단계, 상기 이리듐 다이머 및 보조 리간드를 포함하는 제2 혼합 용액을 준비하는 단계, 및 상기 제2 혼합 용액을 반응시켜, 상기 리간드를 메인 리간드로 갖는 상기 이리듐 인광소재를 제조하는 단계를 포함할 수 있다.

### 발명의 효과

- [20] 본 발명의 실시 예에 따른, 이리듐 인광소재는, 이리듐을 포함하는 중심 금속 및 상기 중심 금속의 2차 배위자이고, 입체장애 페닐기가 도입된 페닐-피리딘 리간드를 포함할 수 있다.
- [21] 상기 입체장애 페닐은, 페닐, 메틸페닐 또는 2,6-디메틸페닐 중에서 적어도 어느 하나일 수 있고, 상기 리간드의 페닐기의 오르토(ortho) 위치에 도입될 수 있다. 이에 따라, 상기 입체장애 페닐은 상기 이리듐 인광소재에 입체장애 효과를 용이하게 제공할 수 있다.
- [22] 또한, 상기 입체장애 페닐의 분자량이 증가될수록, 상기 이리듐 인광소재의 발광파장이 증가할 수 있다. 즉, 상기 입체장애 페닐의 종류에 따라, 상기 이리듐 인광소재의 발광특성이 변화될 수 있고, 이에 따라, 상기 이리듐 인광소재의 양자 수율 및 색좌표가 조절될 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [23] 도 1은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 인광소재의 제조 방법을 나타내는 반응 메커니즘이다.
- [24] 도 2는 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 인광소재의 구조, 및 발광 특성을 설명하기 위한 도면이다.
- [25] 도 3 및 도 4는 본 발명의 실시 예에 따른 리간드의 밀도함수이론(DFT) 계산에 의한 최적의 구조를 나타내는 이미지이다.
- [26] 도 5은 본 발명의 실시 예에 따른 리간드 및 이리듐 착화합물의 흡광 스펙트럼을 나타내는 그래프이다.
- [27] 도 6은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 발광 스펙트럼을 나타내는 그래프이다.
- [28] 도 7 및 도 8은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 밀도함수이론(DFT) 계산에 의한 최적의 구조를 나타내는 이미지이다.
- [29] 도 9은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 시간에 따른 발광 감쇄(decay)를 나타내는 그래프이다.
- [30] 도 10은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 비발광 감쇄 속도 상수를 도시한 그래프이다.
- [31] 도 11 및 도 12은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 경계 분자 오비탈(frontier molecular orbital)을 나타내는 도면이다.
- [32] 도 13는 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 순환전압전류법(Cyclic voltammetry)의 결과를 나타내는 그래프이다.

### 발명의 실시를 위한 형태

- [33] 이하, 첨부된 도면들을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시 예를 상세히 설명할 것이다. 그러나 본 발명의 기술적 사상은 여기서 설명되는 실시 예에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화 될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시 예는 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 당업자에게 본 발명의

사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.

[34] 본 명세서에서, 어떤 구성요소가 다른 구성요소 상에 있다고 언급되는 경우에 그것은 다른 구성요소 상에 직접 형성될 수 있거나 또는 그들 사이에 제 3의 구성요소가 개재될 수도 있다는 것을 의미한다. 또한, 도면들에 있어서, 막 및 영역들의 두께는 기술적 내용의 효과적인 설명을 위해 과장된 것이다.

[35] 또한, 본 명세서의 다양한 실시 예들에서 제1, 제2, 제3 등의 용어가 다양한 구성요소들을 기술하기 위해서 사용되었지만, 이들 구성요소들이 이 같은 용어들에 의해서 한정되어서는 안 된다. 이들 용어들은 단지 어느 구성요소를 다른 구성요소와 구별시키기 위해서 사용되었을 뿐이다. 따라서, 어느 한 실시 예에 제 1 구성요소로 언급된 것이 다른 실시 예에서는 제 2 구성요소로 언급될 수도 있다. 여기에 설명되고 예시되는 각 실시 예는 그것의 상보적인 실시 예도 포함한다. 또한, 본 명세서에서 '및/또는'은 전후에 나열한 구성요소들 중 적어도 하나를 포함하는 의미로 사용되었다.

[36] 명세서에서 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한 복수의 표현을 포함한다. 또한, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 구성요소 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징이나 숫자, 단계, 구성요소 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 배제하는 것으로 이해되어서는 안 된다.

[37] 또한, 하기에서 본 발명을 설명함에 있어 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략할 것이다.

[38]

[39] 도 1은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 인광소재의 제조 방법을 나타내는 반응 메커니즘이고, 도 2는 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 인광소재의 구조, 및 발광 특성을 설명하기 위한 도면이다.

[40] 일 실시 예에 따르면, 이리듐을 포함하는 중심 금속, 및 상기 중심 금속의 2좌 배위자이고, 입체장애 페닐이 도입된 페닐-피리딘 리간드를 포함하는 이리듐 인광소재가 제조될 수 있다. 여기서, 상기 입체장애 페닐은 상기 리간드의 페닐기의 오르토(ortho) 위치에 도입될 수 있고, 상기 입체장애 페닐은 페닐, 메틸페닐, 또는 2,6-디메틸페닐 중에서 적어도 어느 하나일 수 있다. 예를 들어, 상기 입체장애 페닐은 상기 페닐기의 오르토(ortho) 위치에 도입될 수 있다. 또는, 다른 예를 들어, 상기 입체장애 페닐은 상기 페닐기의 메타(meta) 또는 파라(para) 중에서 어느 하나의 위치에 도입될 수 있다.

[41] 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는 상기 리간드를 동종리간드로 포함하는 동종리간드 이리듐 착화합물일 수 있다. 이 때, 상기 입체장애 페닐의 분자량이 커질수록, 입체장애 효과가 커질 수 있다. 이에 따라, 상기 동종리간드 이리듐 착화합물의 발광파장이 장파장으로 증가할 수 있다.

- [42] 예를 들어, 도 1에 도시된 바와 같이, 이리듐 화합물 및 상기 리간드를 포함하는 소스 용액이 제조될 수 있다. 상기 소스 용액을 반응시켜, 상기 이리듐 화합물의 이리듐 금속, 및 상기 리간드가 결합된 이리듐 다이머가 제조될 수 있다. 이 때, 상기 소스 용액은 상기 이리듐 화합물 및 상기 리간드를 1:2 내지 1:2.5의 몰비로 포함할 수 있다. 상술된 바에 따라 제조된 상기 이리듐 다이머 및 상기 리간드는 1:2 내지 1:2.5의 몰비로 반응할 있다. 이에 따라, 높은 수율로 상기 동종리간드 이리듐 착화합물이 제조될 수 있다.
- [43] 다른 예를 들어, 상기 동종리간드 이리듐 착화합물은 상기 이리듐 화합물 및 상기 리간드를 1:3 내지 1:3.5의 몰비로 반응시켜, 제조될 수 있다. 다시 말하면, 상기 동종리간드 이리듐 착화합물의 하나의 단계로 제조될 수 있고, 이에 따라, 상기 동종리간드 이리듐 착화합물의 제조 공정에 소요되는 시간이 감소될 수 있다.
- [44] 다른 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는 상기 리간드를 메인 리간드로 갖고, 보조 리간드를 더 포함하는 이종리간드 이리듐 착화합물일 수 있다. 이에 따라, 상기 보조 리간드는 상기 이종리간드 이리듐 착화합물의 발광 파장을 미세하게 조정할 수 있다. 예를 들어, 상기 보조 리간드는 에세틸아세토네이트(acac), 페닐피리딘, 피리딜이미다졸 등에서 선택되는 적어도 어느 하나일 수 있다.
- [45] 구체적으로 예를 들어, 상기 이종리간드 이리듐 착화합물은 도 1에 도시된 바와 같이 제조된 상기 이리듐 다이머 및 보조 리간드를 반응시켜 제조될 수 있다. 이 때, 상기 이리듐 다이머 및 상기 보조 리간드는 1:2 내지 1:2.5의 몰비로 반응할 수 있다.
- [46] 일 실시 예에 따르면, 상술된 바와 같이, 상기 입체장애 페닐의 종류에 따라, 상기 이리듐 인광소재의 발광특성이 변화될 수 있다. 구체적으로, 상기 입체장애 페닐의 부피가 커질수록(bulky), 상기 입체장애 페닐이 포함되는 제1 평면과, 상기 리간드가 포함되는 제2 평면 간의 결합 각도가 증가될 수 있다. 즉, 도 2에 도시된 바와 같이, 상기 입체장애 페닐의 부피가 커질수록, 상기 입체장애 페닐에 의한 상기 이리듐 인광소재의 입체장애 효과가 증가될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 상기 입체장애 페닐이 페닐인 경우, 상기 결합 각도는 61.2°일 수 있다. 다른 예를 들어, 상기 입체장애 페닐이 메틸페닐인 경우, 상기 결합 각도는 81.6°일 수 있다. 또 다른 예를 들어, 상기 입체장애 페닐이 2,6-디메틸페닐인 경우, 상기 결합 각도는 89.3°일 수 있다.
- [47] 이 때, 일 실시 예에 따르면, 상기 이리듐 인광소재는 녹색 발광 물질일 수 있다. 따라서, 상기 입체장애 페닐의 부피가 커질수록, 상기 이리듐 인광소재의 C.I.E 색좌표의 x 값은 감소될 수 있고, 동시에, 상기 C.I.E 색좌표의 y 값은 증가될 수 있다. 즉, 상기 입체장애 페닐의 부피가 커질수록, 상기 이리듐 인광소재의 발광파장이 증가될 수 있다.

[48]

- [49] 상술된 바에 따라, 이리듐을 포함하는 중심 금속, 및 상기 중심 금속에 2좌 배위자이고, 상기 입체장애 페닐이 도입된 상기 페닐피리딘 리간드를 포함하는 상기 이리듐 인광소재가 제조될 수 있다.
- [50] 구체적으로, 상기 입체장애 페닐은 상기 리간드의 상기 페닐기의 오르토 위치에 도입될 수 있다. 이에 따라, 상기 입체장애 페닐이 상기 페닐기의 메타 위치 또는 파라 위치에 도입되는 경우에 비하여, 상기 이리듐 인광소재에 더 큰 입체장애 효과를 제공할 수 있다.
- [51] 또한, 상기 입체장애 페닐의 부피가 증가될수록, 상기 리간드를 포함하는 평면과 상기 입체장애 페닐을 포함하는 평면 간의 상기 결합 각도가 증가될 수 있고, 이에 따라, 상기 이리듐 인광소재의 발광파장이 증가될 수 있다.
- [52] 즉, 상술된 바와 같이, 상기 입체장애 페닐의 종류에 따라, 발광특성이 조절된 상기 이리듐 인광소재가 제공될 수 있다.
- [53] 일 실시 예에 따르면, 상술된 바와 같이, 상기 이리듐 인광소재는 입체 장애가 큰 상기 작용기가 도입되며, 상기 이리듐 인광소재 간의 분자간 인력이 약화될 수 있다. 이에 따라, 상기 이리듐 인광소재의 승화정제(sublimation) 온도가 감소할 수 있다. 따라서, 상기 승화정제 공정에 소요되는 시간 및 비용이 감소할 수 있다.
- [54] 또한, 상기 이리듐 인광소재는 상기 작용기가 도입되며, 유기용매에 대한 용해도가 증가할 수 있다. 이에 따라, 상기 이리듐 인광소재가 표시장치에 제공되는 경우, 상기 이리듐 인광소재를 포함하는 상기 발광층은 용액 공정으로 용이하게 제조될 수 있다. 상기 용액 공정은, 그라비아-코팅, 바-코팅, 다이-코팅 등에서 선택되는 어느 하나 일 수 있다.
- [55]
- [56] 이하, 상술된 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 구체적인 제조 방법 및 특성 평가 결과가 설명된다.
- [57] 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy)의 제조
- [58] 2-페닐피리딘 (0.5mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 (0.025mmol), 벤조일 퍼옥사이드 (1mmol), 아세토니트릴 1mL 및 아세트산 1mL의 혼합 용액을 100°C의 온도에서 2시간 동안 반응시켰다.
- [59] 상기 반응의 결과물을 상온으로 냉각시킨 후, 실리카겔로 필터링하였다. 필터링된 상기 결과물을 농축시킨 후, 에틸 아세테이트에 용해시켰다. 탄산수소나트륨 포화수용액에 상기 결과물을 처리한 후, 디클로로메탄에 추출하였다. 추출된 상기 결과물에 황산나트륨을 첨가하여 수분을 제거한 후, 로터리 증발기에 건조시켰다. 이 후, 실리카 겔 관크로마토그래피하여, 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy)를 제조하였다.
- [60]
- [61] 실험 예 1-2에 따른 리간드(MePh-ppy)의 제조
- [62] 3-메틸-2-페닐피리딘 (0.5mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 (0.025mmol), 벤조일

퍼옥사이드 (1mmol), 아세토니트릴 1mL 및 아세트산 1mL의 혼합 용액을 100°C의 온도에서 2시간 동안 반응시켰다.

- [63] 상기 반응의 결과물을 상온으로 냉각시킨 후, 실리카겔로 필터링하였다. 필터링된 상기 결과물을 농축시킨 후, 에틸 아세테이트에 용해시켰다. 탄산수소나트륨 포화수용액에 상기 결과물을 처리한 후, 디클로로메탄에 추출하였다. 추출된 상기 결과물에 황산나트륨을 첨가하여 수분을 제거한 후, 로터리 증발기에 건조시켰다. 이 후, 실리카 겔 관크로마토그래피하여, 실험 예 1-2에 따른 리간드(MePh-ppy)를 제조하였다.

[64]

- [65] 실험 예 1-3에 따른 리간드(diMePh-ppy)의 제조

- [66] 2-(2-브로모페닐)피리딘 3g(12.8mmol), 2,6-디메틸페닐보론산 2.61g(19.2mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 0.29g(1.28mmol), 트리페닐포스핀 옥사이드 0.71g(2.56mmol), 플루오로화세슘 3.89g(25.6mmol) 및 테트라하이드로퓨란 120mL의 혼합 용액을 70°C의 온도에서 24시간 동안 교반하여 반응시켰다.

- [67] 상기 반응의 결과물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 증류수로 세척한 후, 황산마그네슘으로 상기 반응의 결과물을 건조시켰다.

- [68] 건조된 상기 결과물을 필터링하고, 용매를 제거한 후, 실리카겔 컬럼크로마토그래피하였다. 이 때, 전개액은 에틸 아세테이트:n-헥산을 1:9의 부피비로 사용하여, 실험 예 1-3에 따른 리간드(diMePh-ppy)를 제조하였다.

[69]

- [70] 비교 예 1-1에 따른 리간드(ppy)의 제조

- [71] 2-페닐피리딘을 준비하여, 비교 예 1-1에 따른 리간드(ppy)를 제조하였다.

[72]

- [73] 비교 예 1-2에 따른 리간드(Me-ppy)의 제조

- [74] 2-브로모피리딘 1.84mL(20mmol), 2-메틸페닐보론산 4.08g(30mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 231mg(0.2mmol), 탄산칼륨 5.52g(40mmol) 및 에탄올 30mL를 혼합한 후, 100°C의 온도에서 15시간 환류하여 반응시켰다.

- [75] 반응이 종료된 후, 상온으로 냉각시킨 반응 생성물에 1M 수산화나트륨 수용액을 첨가하였다. 이 후, 에틸아세테이트 용매에 추출하고, 추출된 상기 반응 생성물에 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 제거하였다. 용매를 제거한 후 실리카겔 관크로마토그래피하여, 비교 예 1-2에 따른 리간드(Me-ppy)를 제조하였다.

[76]

- [77] 실험 예 2-1에 따른 이리듐 착화합물(Ir(Ph-ppy)<sub>3</sub>)의 제조

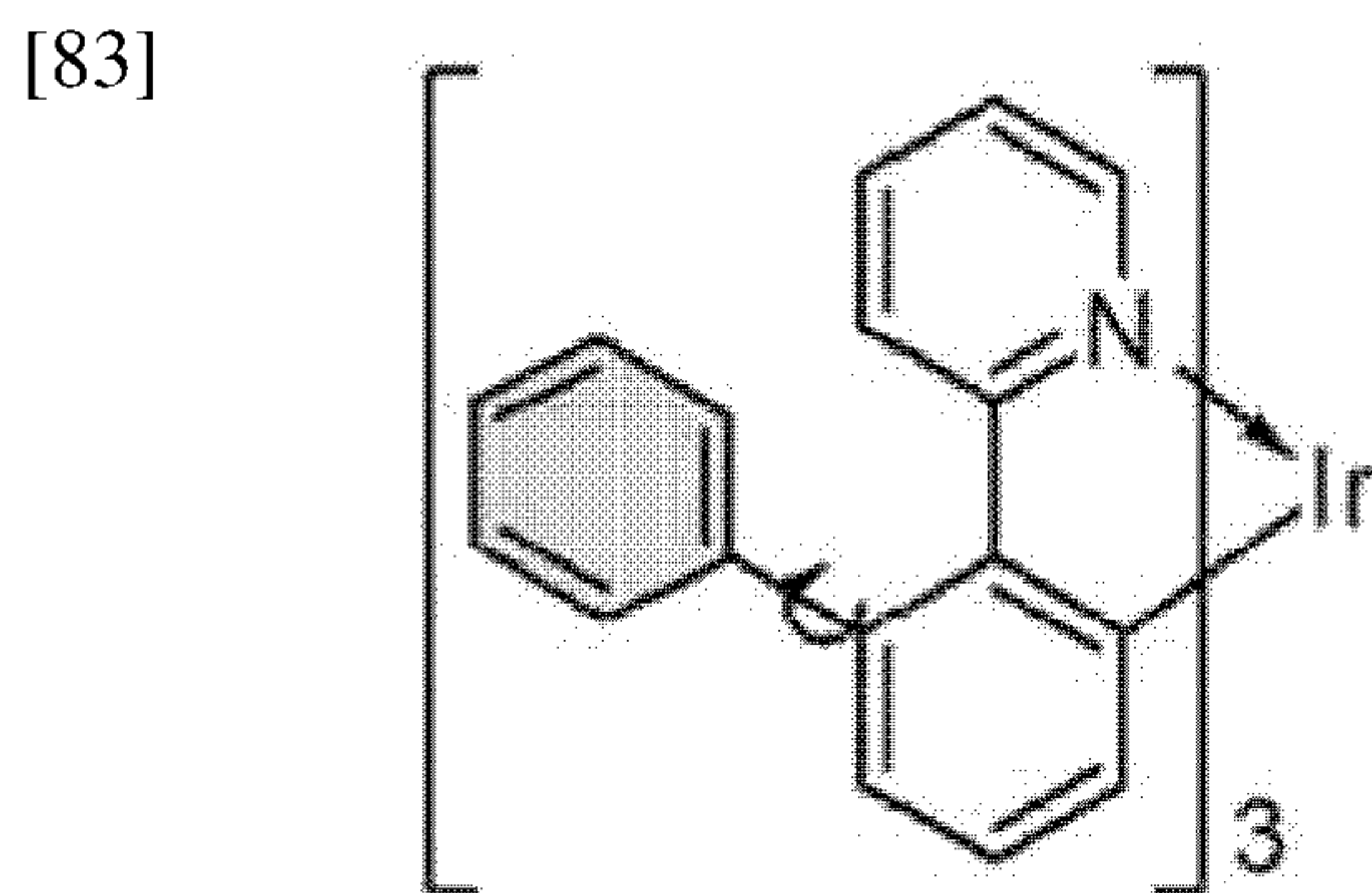
- [78] 질소 분위기 하에서, 이리듐(III) 클로라이드 0.50g(1.79mmol)을 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 1.04g(4.48mmol), 2-에톡시에탄올 30mL 및 증류수 10mL의 혼합 용액에 첨가하여 혼합물을 제조하였다.

[79] 상기 혼합물을 130°C의 온도에서 12시간 이상 교반하며 환류하여 반응시켰다. 반응된 상기 혼합물을 상온으로 냉각시킨 후, 50mL의 증류수를 첨가하여 침전물을 생성하였다. 생성된 상기 침전물을 헥산으로 세척하였다.

[80] 질소 분위기 하에서 세척된 상기 침전물 1.12g(0.81mmol), 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 0.56g(2.43mmol), 탄산칼륨 0.56g(4.05mmol), 및 글리세롤 5mL를 혼합한 후, 250°C의 온도에서 72시간동안 환류하여 반응시켰다.

[81] 반응 생성물을 상온으로 냉각시킨 후, 증류수를 첨가하여 상분리시켰다. 상분리된 상기 반응 생성물 중에서 유기물층을 디클로로메탄으로 추출한 후, 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 제거하였다. 상기 혼합물을 속성 크로마토그래피(flash chromatography)하여, 아래의 <화학식 1>로 표기되는 실험 예 1-1에 따른 이리듐 착화합물(Ir(Ph-ppy)<sub>3</sub>)을 제조하였다.

[82] <화학식 1>



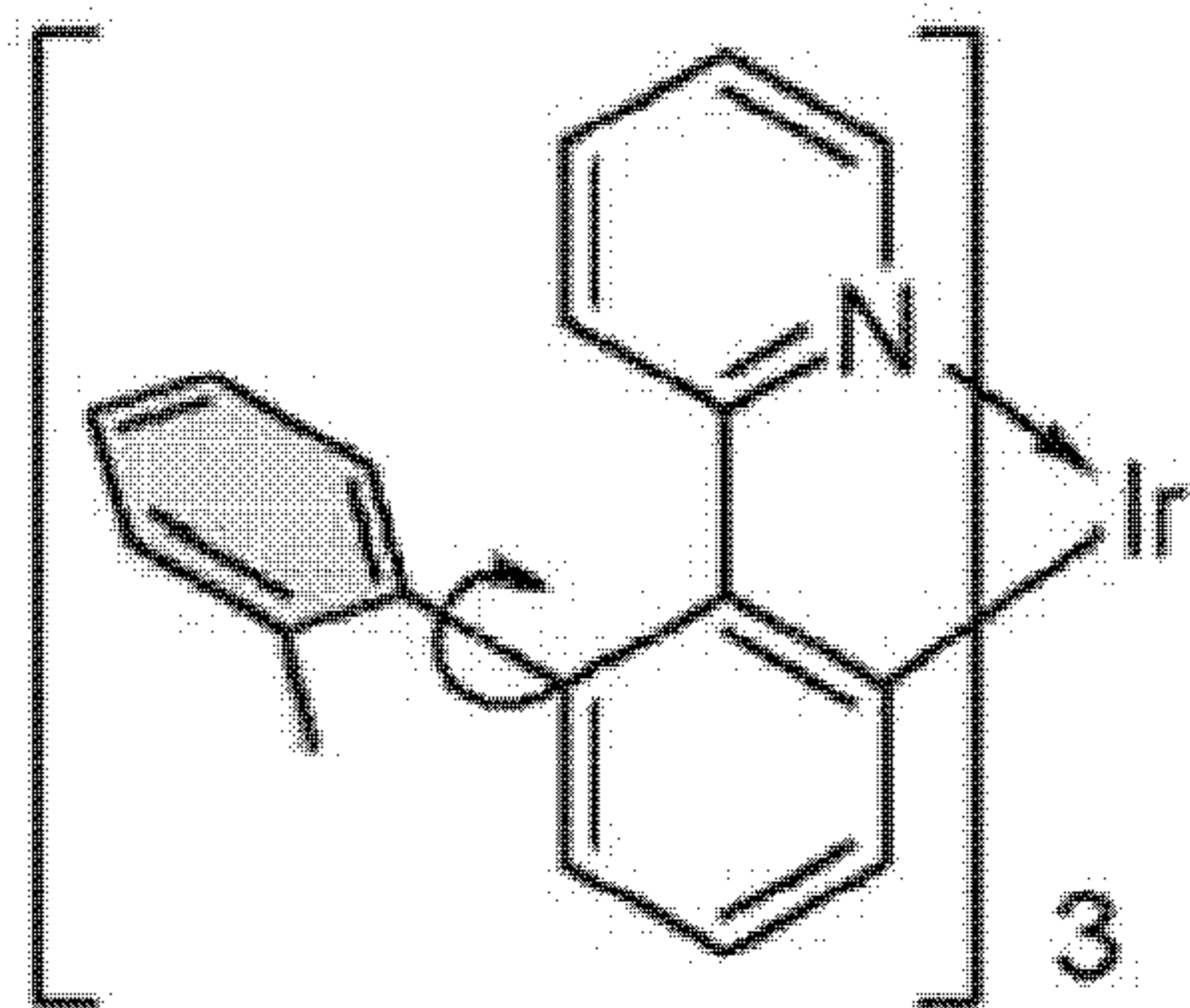
[84]

[85] 실험 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물(Ir(MePh-ppy)<sub>3</sub>)의 제조

[86] 실험 예 2-1과 동일한 방법으로 수행하되, 이리듐(III) 클로라이드 0.50g(1.79mmol)을 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 1.04g(4.48mmol) 대신, 이리듐(III) 클로라이드 0.27g(0.92mmol)을 실험 예 1-2에 따른 리간드(MePh-ppy) 0.5g(2.04mmol)을 혼합하였다. 이 후, 세척된 상기 침전물 1.12g(0.81mmol), 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 0.56g(2.43mmol), 탄산칼륨 0.56g(4.05mmol), 및 글리세롤 5mL 대신, 세척된 상기 침전물 0.44g(0.31mmol), 실험 예 1-2에 따른 리간드(MePh-ppy) 0.23g(0.94mmol), 탄산칼륨 0.21g(1.55mmol), 및 글리세롤 3mL을 혼합하여, 아래의 <화학식 2>로 표기되는 실험 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물(Ir(MePh-ppy)<sub>3</sub>)을 제조하였다.

[87] <화학식 2>

[88]



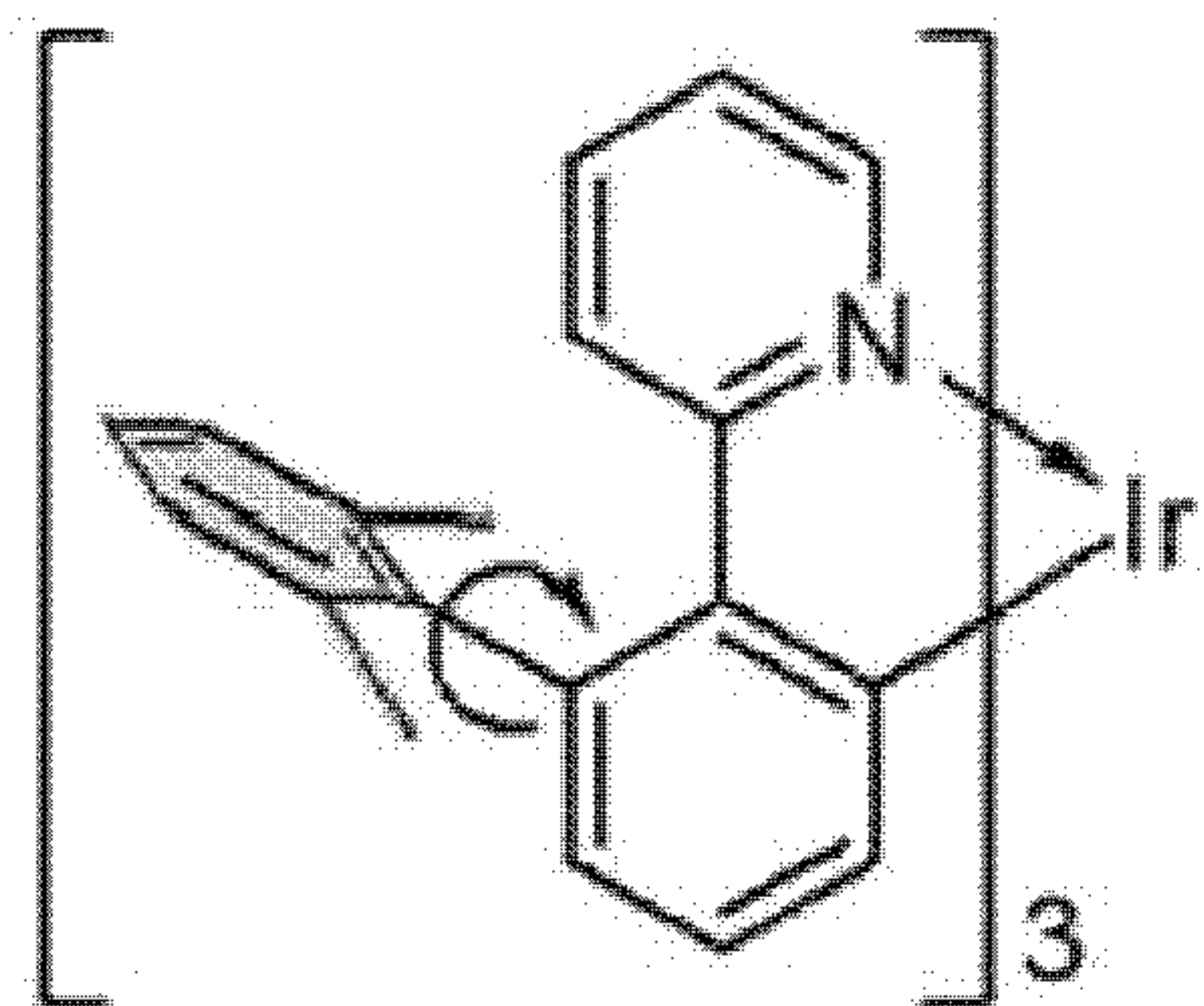
[89]

[90] 실험 예 2-3에 따른 이리듐 착화합물(Ir(diMePh-ppy)<sub>3</sub>)의 제조

[91] 실험 예 2-1과 동일한 방법으로 수행하되, 이리듐(III) 클로라이드 0.50g(1.79mmol)을 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 1.04g(4.48mmol) 대신, 이리듐(III) 클로라이드 0.52g(1.74mmol)을 실험 예 1-3에 따른 리간드(diMePh-ppy) 1.00g(3.86mmol)을 혼합하였다. 이 후, 세척된 상기 침전물 1.12g(0.81mmol), 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 0.56g(2.43mmol), 탄산칼륨 0.56g(4.05mmol), 및 글리세롤 5mL 대신, 세척된 상기 침전물 0.67g(0.45mmol), 실험 예 1-3에 따른 리간드(diMePh-ppy) 0.35g(1.35mmol), 탄산칼륨 0.31g(2.25mmol), 및 글리세롤 5mL을 혼합하여, 아래의 <화학식 3>로 표기되는 실험 예 2-3에 따른 이리듐 착화합물(Ir(diMePh-ppy)<sub>3</sub>)을 제조하였다.

[92] &lt;화학식 3&gt;

[93]



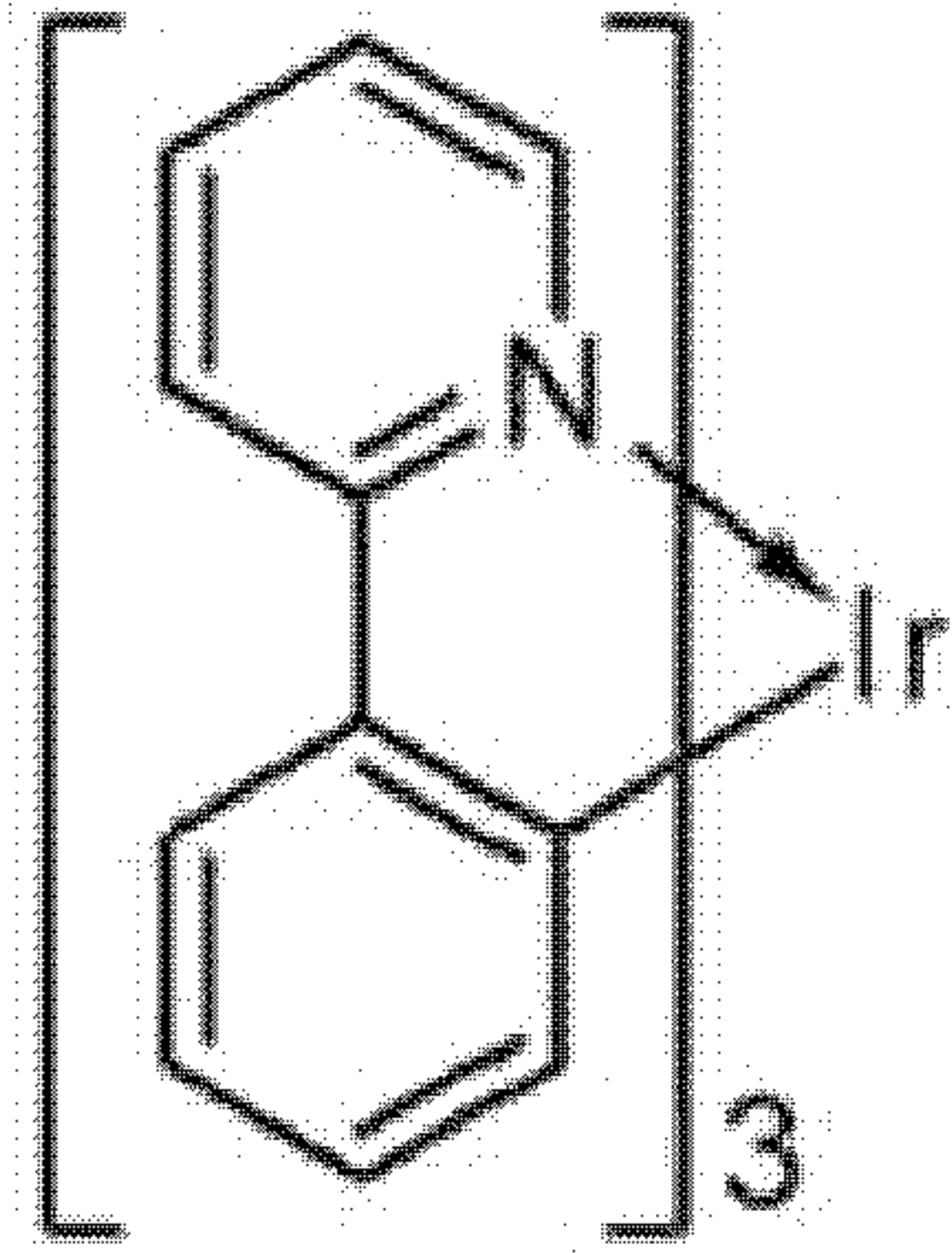
[94]

[95] 비교 예 2-1에 따른 이리듐 착화합물(Ir(ppy)<sub>3</sub>)의 제조

[96] 실험 예 2-1과 동일한 방법으로 수행하되, 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 대신, 비교 예 2-1에 따른 리간드(ppy)를 혼합하여, 아래의 <화학식 4>로 표기되는 비교 예 2-1에 따른 이리듐 착화합물(Ir(ppy)<sub>3</sub>)을 제조하였다.

[97] &lt;화학식 4&gt;

[98]



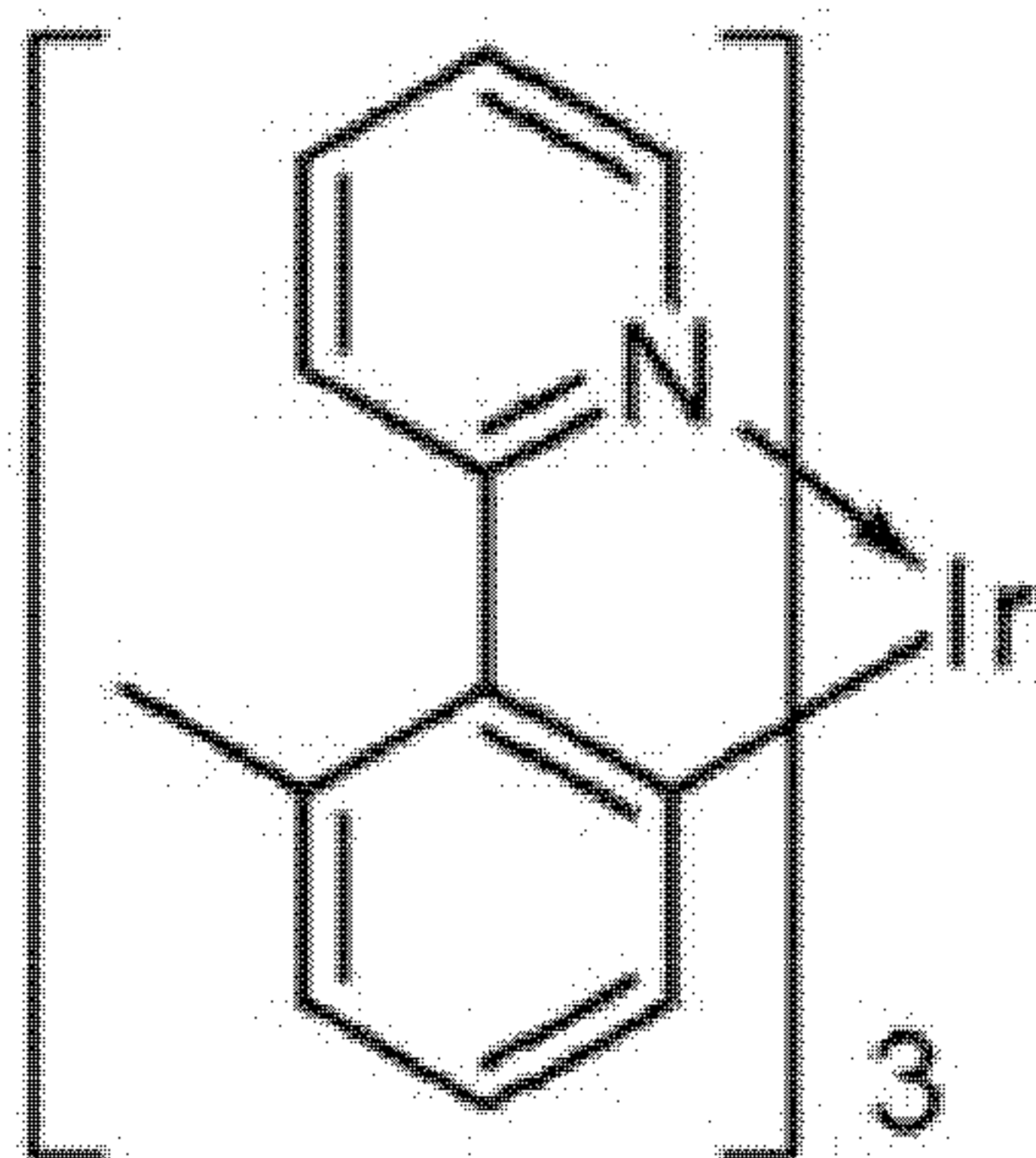
[99]

[100] 비교 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물(Ir(Me-ppy)<sub>3</sub>)의 제조

[101] 실험 예 2-1과 동일한 방법으로 수행하되, 이리듐(III) 클로라이드 0.50g(1.79mmol)을 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 1.04g(4.48mmol) 대신, 이리듐(III) 클로라이드 0.50g(1.79mmol)을 비교 예 1-2에 따른 리간드(Me-ppy) 1.04g(4.48mmol)을 혼합하였다. 이 후, 세척된 상기 침전물 1.12g(0.81mmol), 실험 예 1-1에 따른 리간드(Ph-ppy) 0.56g(2.43mmol), 탄산칼륨 0.56g(4.05mmol), 및 글리세롤 5mL 대신, 세척된 상기 침전물 0.88g(0.73mmol), 비교 예 1-2에 따른 리간드(Me-ppy) 0.39g(2.34mmol), 탄산칼륨 0.54g(3.9mmol), 및 글리세롤 20mL을 혼합하여, 아래의 <화학식 5>로 표기되는 비교 예 1-2에 따른 이리듐 착화합물(Ir(Me-ppy)<sub>3</sub>)을 제조하였다.

[102] &lt;화학식 5&gt;

[103]



[104] 상술된 비교 예 2-1 내지 비교 예 2-2 및 실험 예 2-1 내지 2-3에 따른 이리듐 착화합물의 리간드의 작용기가 아래의 <표 1>에 작성되었다.

[105] [표1]

|          | 작용기                |
|----------|--------------------|
| 비교 예 2-1 | -                  |
| 비교 예 2-2 | 메틸                 |
| 실험 예 2-1 | 페닐(입체장애 페닐)        |
| 실험 예 2-2 | 메틸페닐(입체장애 페닐)      |
| 실험 예 2-3 | 2,6-디메틸페닐(입체장애 페닐) |

[106] 도 3 및 도 4는 본 발명의 실시 예에 따른 리간드의 밀도함수이론(DFT) 계산에 의한 최적의 구조를 나타내는 이미지이다.

[107] 도 3 및 도 4를 참조하면, 비교 예 1-1 및 실험 예 1-1 내지 실험 예 1-3 에 따른 리간드의 이면각(dihedral angle)을 확인할 수 있다. 도 3에 도시된 바와 같이, 상기 페닐-피리딘 리간드에서, 페닐과 피리딘의 결합을 포함하는 이면각(D1) 및 상기 페닐-피리딘 리간드의 페닐기, 및 상기 페닐기에 결합된 작용기를 포함하는 이면각(D2)가 아래의 <표 2>에 작성되었다.

[108] [표2]

|          | D1(°) | D2(°) |
|----------|-------|-------|
| 비교 예 1-1 | 23.3  | -     |
| 실험 예 1-1 | 45.4  | 52.3  |
| 실험 예 1-2 | 44.0  | 69.3  |
| 실험 예 1-3 | 43.6  | 75.2  |

[109] <표 2>에서 알 수 있듯이, 상기 리간드(Ph-ppy, MePh-ppy 및 diMePh-ppy)는 작용기를 포함하며, 페닐-피리딘의 페닐을 포함하는 평면, 및 피리딘을 포함하는 평면 간의 각도(D1)가 증가하는 것을 알 수 있다. 반면, 상기 작용기(입체장애 리간드)의 분자량이 커질수록, 상기 입체장애 효과가 증가하고, 이에 따라, 상기 페닐-피리딘 리간드(Ph-ppy, MePh-ppy 및 diMePh-ppy)의 이면각(D1)이 감소하고, 동시에, 상기 페닐을 포함하는 평면, 및 상기 작용기를 포함하는 평면 간의 각도(D2)가 증가하는 것을 확인할 수 있다.

[110] 도 5은 본 발명의 실시 예에 따른 리간드 및 이리듐 착화합물의 흡광 스펙트럼을 나타내는 그래프이다.

[111] 도 5의 (a)를 참조하면, 상기 페닐-피리딘 리간드(ppy)는 276 및 248nm에서 피크를 갖는 것을 알 수 있다. 이 때, 상기 페닐-피리딘 리간드(Ph-ppy, MePh-ppy 및 diMePh-ppy)는 상기 작용기를 더 포함하며, 상기 248nm의 피크가 230nm의 단파장으로 이동하고, 흡수 피크의 세기가 더 커지는 것을 알 수 있다.

[112] <표 2>를 참조하여 상술된 바와 같이, 상기 페닐-피리딘 리간드(Ph-ppy,

MePh-ppy 및 diMePh-ppy)의 이면각(D1)이 증가하고, 이에 따라, 상기 페닐 및 피리딘 간의  $\pi$ -컨쥬게이션이 감소할 수 있다. 이에 따라, 상기 피크가 단파장으로 이동할 수 있다. 또한, 상기 페닐-피리딘 리간드(Ph-ppy, MePh-ppy 및 diMePh-ppy)의 페닐기가 상기 작용기(입체장애 페닐)를 더 포함하며,  $\pi$ -컨쥬게이션이 증가하고, 이에 따라, 상기 230nm의 흡수 피크의 세기가 증가할 수 있다.

[113] 도 5의 (b)를 참조하면, 상기 이리듐 착화합물은 275nm에서  $\pi$ - $\pi^*$  전이(LC), 325 내지 430nm에서 스핀-허용된 금속-리간드 간의 전하 전이( $^1$ MLCT), 및 430nm 초과하는 범위에서 스핀-금지된 금속-리간드 간의 전하 전이( $^3$ MLCT)가 확인되었다. 이 때, 상기 이리듐 착화합물은 상기 작용기(입체장애 페닐)를 더 포함하며, 상기 흡수 피크가 장파장으로 이동한 것을 알 수 있다. 또한, 상기 작용기를 더 포함하며, 상기 흡수 피크의 세기가 증가하되, 상기 작용기의 분자량이 클수록, 상기 세기가 감소하는 것을 알 수 있다.

[114]

[115] 도 6은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 발광 스펙트럼을 나타내는 그래프이다.

[116] 도 6을 참조하면, 상온(300K) 및 극저온(77K)에서 상기 이리듐 착화합물의 최대 발광 파장, 발광 효율, 발광 및 비발광 감쇄 속도 상수 등이 <표 3>에 작성되었다.

[117] [표3]

|             | 300K                        |                       |              |                          |                             | 77K                         |                       |
|-------------|-----------------------------|-----------------------|--------------|--------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------|
|             | $\lambda_{\max}(\text{nm})$ | $\tau_p(\mu\text{s})$ | $\phi_p(\%)$ | $k_r(10^5\text{s}^{-1})$ | $k_{nr}(10^4\text{s}^{-1})$ | $\lambda_{\max}(\text{nm})$ | $\tau_p(\mu\text{s})$ |
| 비교 예<br>2-1 | 513                         | 1.52                  | 97           | 6.4                      | 1.8                         | 495                         | 4.14                  |
| 비교 예<br>2-2 | 527                         | 0.64                  | 73           | 11                       | 42                          | 506                         | 4.78                  |
| 실험 예<br>2-1 | 527                         | 1.36                  | 93           | 6.8                      | 5.5                         | 509                         | 3.22                  |
| 실험 예<br>2-2 | 524                         | 1.41                  | 91           | 6.5                      | 5.9                         | 503                         | 3.58                  |
| 실험 예<br>2-3 | 522                         | 1.33                  | 88           | 6.6                      | 9.2                         | 499                         | 3.73                  |

[118] 도 6의 (b) 및 <표 3>을 참조하면, 상기 이리듐 착화합물은 상온(300K) 대비 극저온(77K)에서 상기 발광 스펙트럼의 피크가 단파장으로 이동하는 것을 알 수 있다. 또한, 상기 이리듐 착화합물은 상기 발광 스펙트럼에서 진동 구조(vibronic

structure)를 나타내는 것을 알 수 있다. 이에 따라, 극저온에서 상기 발광 스펙트럼 측정에 사용한 용매가 재배열되지 못하고, 유리질(glassy matrix)을 형성하는 것을 알 수 있다. 두 개의 피크 중에서 단파장의 피크는 0-0 진동 밴드의 피크이고, 나머지 하나는 0-1 진동 밴드의 피크인 것을 확인하였다. 이 때, 상기 0-0 진동 밴드의 세기 대비 상기 0-1 진동 밴드의 세기( $I_{0-1}/I_{0-0}$ )는 0.45 내지 0.58로 계산되었다. 이에 따라, 상기 작용기가 상기 발광의 진동 구조를 변화시키는 데에 실질적으로 큰 영향을 미치지 않는 것을 알 수 있다. 반면, 도 6의 (a)에 도시된 바와 같이, 상온에서 상기 페닐-피리딘 리간드를 연결하는 탄소-탄소 결합의 스트레칭 모드(stretching mode)가 발생하고, 이에 따라, 상기 이리듐 착화합물은 실질적으로 진동 구조를 나타내지 않는 것을 알 수 있다.

[119] 도 6의 (b) 및 <표 3>에서 알 수 있듯이, 상기 이리듐 착화합물은 상기 작용기(입체장애 페닐)를 더 포함하며, 상기  $\pi$ -컨쥬게이션이 증가하고, 이에 따라, 상기 이리듐 착화합물의 발광 피크가 장파장으로 이동한 것을 알 수 있다. 반면, 상기 작용기를 더 포함하는 경우, 상기 작용기의 분자량이 커질수록, 상기 작용기는 상기 페닐기에 직각으로 배열되고, 이에 따라, 상기  $\pi$ -컨쥬게이션이 감소할 수 있다. 따라서, 상기 작용기의 분자량이 커질수록, 상기 이리듐 착화합물의 발광 피크가 단파장으로 이동할 수 있다. 또한, 상기 작용기는 분자량이 커질수록, 메틸기를 더 포함하고, 이에 따라, 상기 작용기의 전자 주개 능력이 증가할 수 있다. 이에 따라, 상기 이리듐 착화합물의 발광 파장이 단파장으로 이동할 수 있다.

[120]

[121] 도 7 및 도 8은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 밀도함수이론(DFT) 계산에 의한 최적의 구조를 나타내는 이미지이다.

[122] 도 7 및 도 8를 참조하면, 도 3 및 도 4를 참조하여 상술된 바와 같이, 상기 페닐-피리딘 리간드의 상기 이면각(D1) 및 상기 페닐-피리딘 리간드 및 상기 작용기 간의 이면각(D2)가 아래의 <표 4>에 작성되었다.

[123] [표4]

|          | D1(°)        | D2(°)        |
|----------|--------------|--------------|
| 비교 예 2-1 | 0.67         | -            |
| 실험 예 2-1 | 12.45(12.37) | 61.74(61.76) |
| 실험 예 2-2 | 4.48(4.96)   | 81.58(81.02) |
| 실험 예 2-3 | 1.55(1.51)   | 89.33(89.15) |

[124] <표 4>에서 알 수 있듯이, 상기 페닐-피리딘 리간드의 상기 이면각(D1)은 0.67 내지 12.5°의 범위를 갖는 것을 확인하였다. 이에 따라, 상기 페닐-피리딘 리간드가 상기 이리듐 금속과 결합하며, 실질적으로 평면의 형태를 갖는 것을 알 수 있다. 다시 말하면, 상기 페닐-피리딘 리간드에서 페닐을 포함하는 평면, 및

피리딘을 포함하는 평면이 실질적으로 동일한 평면인 것을 알 수 있다. 이에 따라, <표 2>를 참조하여 상술된 상기 이면각(D2)보다 상기 이리듬 착화합물의 이면각(D2)가 더 증가한 것을 알 수 있다. 이 때, 상기 이리듬 착화합물의 이면각(D2)는 <표 2>를 참조하여 상술된 바와 같이, 상기 작용기(입체장애 페닐)의 분자량이 커질수록 증가하는 것을 알 수 있다. 도 9은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듬 착화합물의 시간에 따른 발광 감쇄(decay)를 나타내는 그래프이고, 도 10은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듬 착화합물의 비발광 감쇄 속도 상수를 도시한 그래프이다.

[125] 도 9을 참조하면, 상온(300K)에서 상기 이리듬 착화합물의 인광 수명( $\tau_p$ )이 확인될 수 있다. 이에 따라, 상기 인광 수명( $\tau_p$ )은 상기의 <표 3>에 작성되었다. 이 때, 상기 인광 수명 및 양자 효율( $\phi_p$ )의 값을 사용하여, 아래의 <수식 1>에 따라 발광 감쇄 속도 상수( $k_r$ ) 및 아래의 <수식 2>에 따라 비발광 감쇄 속도 상수( $k_{nr}$ )이 계산될 수 있다.

[126] <수식 1>

[127]

$$k_r = \frac{\phi_p}{\tau_p}$$

[128] <수식 2>

[129]

$$k_{nr} = \frac{k_r}{\phi_p} - k_r$$

[130] <표 3>을 참조하면, 실험 예 1-1 내지 실험 예 1-3 및 비교 예 1-1에 따른 이리듬 착화합물은 실질적으로 상기 발광 감쇄 속도 상수가 일치하는 것을 알 수 있다. 반면, 상기 비발광 감쇄 속도 상수는 서로 다른 것을 알 수 있다. 이 때, 상기 비발광 감쇄 속도 상수는 아래의 <수식 3>으로 표기되는 에너지 갭 법칙(energy gap law)에 의해 분석될 수 있다.

[131] <수식 3>

[132]

$$\ln(k_{nr}) \propto \left( -\frac{\gamma}{\hbar\omega_M} \right) \times (\Delta E)$$

[133] 여기서,  $\Delta E$ 는 삼중항 여기 상태와 바닥 상태 간의 에너지 차이이고,  $\gamma$ 는 분자 파라미터(molecular parameter)이고,  $\omega_M$ 은 시스템에서 가능한 최대 및 주요 진동 주파수이다.

[134] 이에 따라, 도 10에 도시된 바와 같이, 비교 예 2-1 및 비교 예 2-2에 따른 이리듬

착화합물(Ir(Me-ppy)<sub>3</sub>)은 상기 에너지 차이( $\Delta E$ )에 대하여 상기 비발광 감쇄 속도 상수의 로그 함수 값이 선형적 관계인 것을 알 수 있다. 이에 따라, 도 9에 도시된 바와 같이, 비교 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물(Ir(Me-ppy)<sub>3</sub>)은 비교 예 2-1에 따른 이리듐 착화합물(Ir(ppy)<sub>3</sub>)보다 기하급수적으로 상기 인광 발광이 감소하는 것을 알 수 있다.

[135] 반면, 실험 예 1-1 내지 실험 예 1-3에 따른 이리듐 착화합물은 상기 비교 예 1-1 및 비교 예 1-2에 따른 이리듐 착화합물의 선형적 관계에서 벗어나는 것을 알 수 있다. 또한, 상기 에너지 차이( $\Delta E$ )가 커질수록, 상기 비발광 감쇄 속도 상수의 로그 함수 값이 증가하는 것을 알 수 있다. 이 때, 상기 작용기(입체장애 페닐)는 이리듐 착화합물이 용해된 용액(fluidic solution)에 회전이 어려운(rigid) 환경을 제공하고, 이에 따라, 상기 선형적 관계에서 벗어날 수 있다. 또한, 상기 작용기(입체장애 페닐)가 상기 메틸기를 더 포함하며, 진동 및 회전의 자유도가 상승하고, 이에 따라, 상기 에너지 차이( $\Delta E$ )가 커질수록, 상기 비발광 감쇄 속도가 커지는 경향이 나타나는 것을 알 수 있다.

[136]

[137] 도 11 및 도 12은 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 경계 분자 오비탈(frontier molecular orbital)을 나타내는 도면이다.

[138] 도 11 및 도 12을 참조하면, 상기 이리듐 착화합물의 최고준위 점유 분자궤도(HOMO), 최저준위 비점유 분자궤도(LUMO), 상기 최고준위 점유 분자궤도와 상기 최저준위 비점유 분자궤도 간의 에너지 차이, 단일로 채워진 최저준위 분자궤도(LSOMO), 단일로 채워진 최고준위 분자궤도(HSOMO), 및 상기 단일로 채워진 최저준위 분자궤도(LSOMO)와 단일로 채워진 최고준위 분자궤도(HSOMO) 간의 에너지 차이가 아래의 <표 5>에 작성되었다.

[139] [표5]

|          | HOMO<br>(eV) | LUMO<br>(eV) | $\Delta E$ (eV) | LSOMO<br>(eV) | HSOMO<br>(eV) | $\Delta E_s$ (eV) |
|----------|--------------|--------------|-----------------|---------------|---------------|-------------------|
| 비교 예 2-1 | -5.15        | -1.38        | 3.77            | -5.60         | -2.76         | 2.84              |
| 실험 예 2-1 | -5.13        | -1.52        | 3.61            | -5.56         | -2.93         | 2.63              |
| 실험 예 2-2 | -5.14        | -1.45        | 3.68            | -5.60         | -2.83         | 2.77              |
| 실험 예 2-3 | -5.14        | -1.40        | 3.73            | -5.62         | -2.77         | 2.85              |

[140] 도 11를 참조하면, 상기 이리듐 착화합물의 상기 최고준위 점유 분자궤도(HOMO)는 상기 이리듐 금속 및 상기 페닐-피리딘 리간드의 상기 페닐기에 분포하는 것을 알 수 있다. 이 때, 상기 작용기(입체장애 페닐)은 상기 입체장애 효과를 가져, 상기 최고준위 점유 분자궤도(HOMO)가 분포하지 않는 것을 알 수 있다. 또한, 상기 이리듐 착화합물의 상기 최저준위 비점유 분자궤도(LUMO)는 상기 페닐-피리딘 리간드에 분포하고, 주로 상기 리간드의

상기 피리딘에 분포하는 것을 알 수 있다. 도 5의 (b)에 도시된 바와 같이, 상기 이리듐 착화합물은 상기 작용기(입체장애 페닐)를 더 포함하며, 상기 스핀-허용된 금속-리간드 간의 전하 전이( $^1\text{MLCT}$ ), 상기 스핀-금지된 금속-리간드 간의 전하 전이( $^3\text{MLCT}$ ) 및 리간드간 전하 전이( $\text{ILCT}$ )가 중첩되고, 이에 따라, 상기 에너지 차이( $\Delta E$ )가 나타나는 것을 알 수 있다. 또한, 상기 이리듐 착화합물은 상기 최고준위 점유 분자궤도( $\text{HOMO}$ )가 실질적으로 일치하고, 이에 따라, 상기 최저준위 비점유 분자궤도( $\text{LUMO}$ )의 안정화를 위해, 장파장에서 흡수 스펙트럼의 차이를 보이는 것을 알 수 있다. 도 12에 도시된 바와 같이, 상기 이리듐 착화합물의 삼중항에서 전자 배치가 확인되었다. 상기 삼중항에서 전자 배치는 홀전자( $\text{unpaired electron}$ )이 각각 상기 단일로 채워진 최저준위 분자궤도( $\text{LSOMO}$ ) 및 상기 단일로 채워진 최고준위 분자궤도( $\text{HSOMO}$ )에 분포할 수 있다. 이 때, 상기 단일로 채워진 최저준위 분자궤도( $\text{LSOMO}$ )는 상기 이리듐 금속 및 상기 페닐-피리딘 리간드의 페닐기에 주로 분포할 수 있다. 또한, 상기 단일로 채워진 최고준위 분자궤도( $\text{HSOMO}$ )는 상기 페닐-피리딘 리간드에 분포할 수 있다.

[141] 이에 따라, 상기 단일로 채워진 최저준위 분자궤도( $\text{LSOMO}$ )는 상기 최고준위 점유 분자궤도( $\text{HOMO}$ )에 대응될 수 있고, 상기 단일로 채워진 최고준위 분자궤도( $\text{HSOMO}$ )는 상기 최저준위 비점유 분자궤도( $\text{LUMO}$ )에 대응될 수 있다. 또한, 상기 단일로 채워진 최저준위 분자궤도( $\text{LSOMO}$ )와 단일로 채워진 최고준위 분자궤도( $\text{HSOMO}$ ) 간의 에너지 차이( $\Delta E_s$ )에서도 비슷한 경향을 나타내는 것을 확인하였다.

[142]

[143] 상술된 비교 예 2-1 내지 비교 예 2-2 및 실험 예 2-1 내지 실험 예 2-3에 따른 이리듐 착화합물의 단일항 및 삼중항에서의 구조의 변화를 관찰하였다. 이 때, 상기 페닐-피리딘 리간드의 상기 페닐과 상기 피리딘 결합 간의 거리( $\text{C}_{\text{ph}}-\text{C}_{\text{py}}$ ), 상기 페닐과 상기 피리딘을 포함하는 평면 간의 이면각( $\text{D}_{\text{ph-py}}$ ), 상기 이리듐 금속과 상기 피리딘의 질소 간 결합 길이( $\text{Ir}-\text{N}_{\text{py}}$ ), 및 상기 이리듐 금속과 상기 페닐의 탄소 간 결합 길이( $\text{Ir}-\text{C}_{\text{ph}}$ )에 대해 상기 단일항 및 상기 삼중항에서의 차이가 아래의 <표 6>에 작성되었다.

[144] [표6]

|          | $\Delta R_{S0-T1}$          |                       |                         |                         |
|----------|-----------------------------|-----------------------|-------------------------|-------------------------|
|          | $C_{ph}-C_{py}(\text{\AA})$ | $D_{ph-py}(^{\circ})$ | $Ir-N_{py}(\text{\AA})$ | $Ir-C_{ph}(\text{\AA})$ |
| 비교 예 2-1 | 0.06                        | 0.48                  | 0.03                    | 0                       |
| 비교 예 2-2 | 0.06                        | 1.03                  | 0.03                    | 0.04                    |
| 실험 예 2-1 | 0.07                        | 1.40                  | 0.01                    | 0.04                    |
| 실험 예 2-2 | 0.07                        | 3.67                  | 0.02                    | 0.05                    |
| 실험 예 2-3 | 0.07                        | 3.84                  | 0.03                    | 0.04                    |

[145] <표 6>에서 알 수 있듯이, 상기 이리듐 리간드는 상기 단일항 및 상기 삼중항에서 구조적인 차이가 실질적으로 없는 것을 알 수 있다. 이에 따라, 상기 작용기가 상기 단일항 및 상기 삼중항에서의 구조적인 차이를 발생시키지 않는 것을 알 수 있다. 도 13는 본 발명의 실시 예에 따른 이리듐 착화합물의 순환전압전류법(Cyclic voltammetry)의 결과를 나타내는 그래프이다.

[146] 도 13를 참조하면, 비교 예 2-1 내지 비교 예 2-2 및 실험 예 2-1 내지 실험 예 2-3에 따른 이리듐 착화합물의 산화 전위( $E_{1/2}^{ox}$ )가 아래의 <표 7>에 작성되었다.

[147] [표7]

|          | $E_{1/2}^{ox}(eV)$ | $E_{HOMO}(eV)$ | $E_{LUMO}(eV)$ | $E_g(eV)$ |
|----------|--------------------|----------------|----------------|-----------|
| 비교 예 2-1 | 0.38               | -5.18          | -2.67          | 2.51      |
| 비교 예 2-2 | 0.28               | -5.08          | -2.63          | 2.45      |
| 실험 예 2-1 | 0.37               | -5.17          | -2.73          | 2.44      |
| 실험 예 2-2 | 0.34               | -5.14          | -2.67          | 2.47      |
| 실험 예 2-3 | 0.33               | -5.13          | -2.64          | 2.49      |

[148] 도 13 및 <표 7>에서 알 수 있듯이, 비교 예 2-1 대비 비교 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물의 상기 산화 전위는 상기 작용기로 전자 주개 그룹(EDG)을 더 포함하며, 감소하는 것을 알 수 있다. 반면, 실험 예 2-1 내지 실험 예 2-3에 따른 이리듐 착화합물은 비교 예 2-2에 따른 이리듐 착화합물( $Ir(Me-ppy)_3$ )보다 상기 산화 전위의 감소가 낮게 관찰되었다. 이에 따라, 상기 이리듐 착화합물은 상기 작용기(입체장애 페닐)의 상기 입체장애 효과로 상기 전자 주개 그룹의 의한 전자 밀도가 향상되는 정도가 크지 않은 것을 알 수 있다.

[149] 이상, 본 발명의 바람직한 실시 예를 사용하여 상세히 설명하였으나, 본 발명의 범위는 특정 실시 예에 한정되는 것은 아니며, 첨부된 특허청구범위에 의하여 해석되어야 할 것이다. 또한, 이 기술분야에서 통상의 지식을 습득한 자라면, 본 발명의 범위에서 벗어나지 않으면서도 많은 수정과 변형이 가능함을 이해하여야 할 것이다.

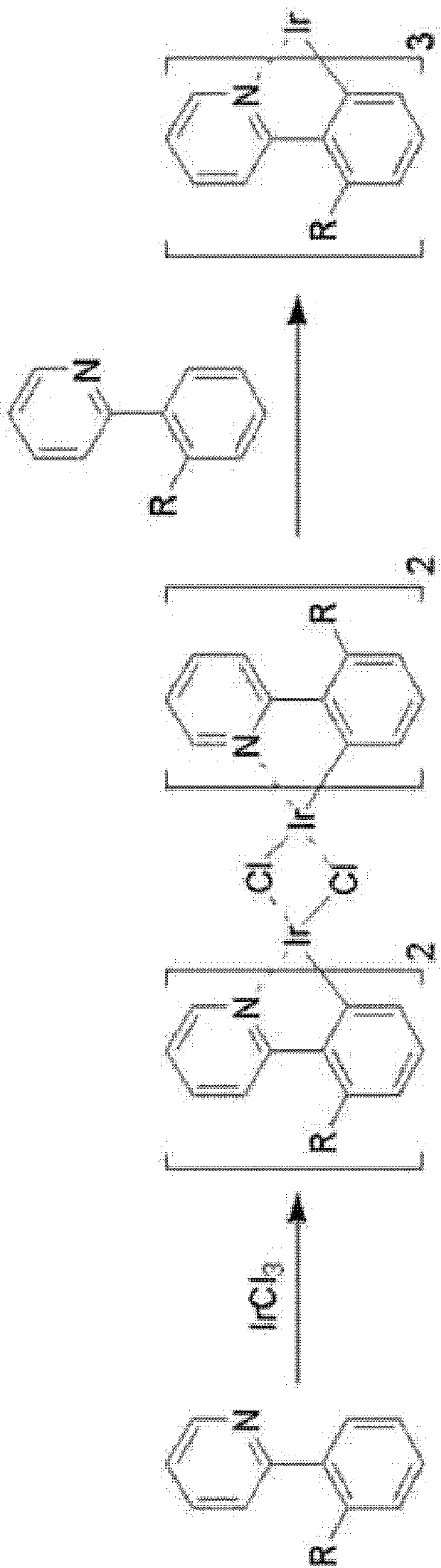
### 산업상 이용가능성

- [150] 본 출원의 실시 예에 따른 이리듐 인광소재는 다양한 디스플레이 소자에 이용될 수 있다.

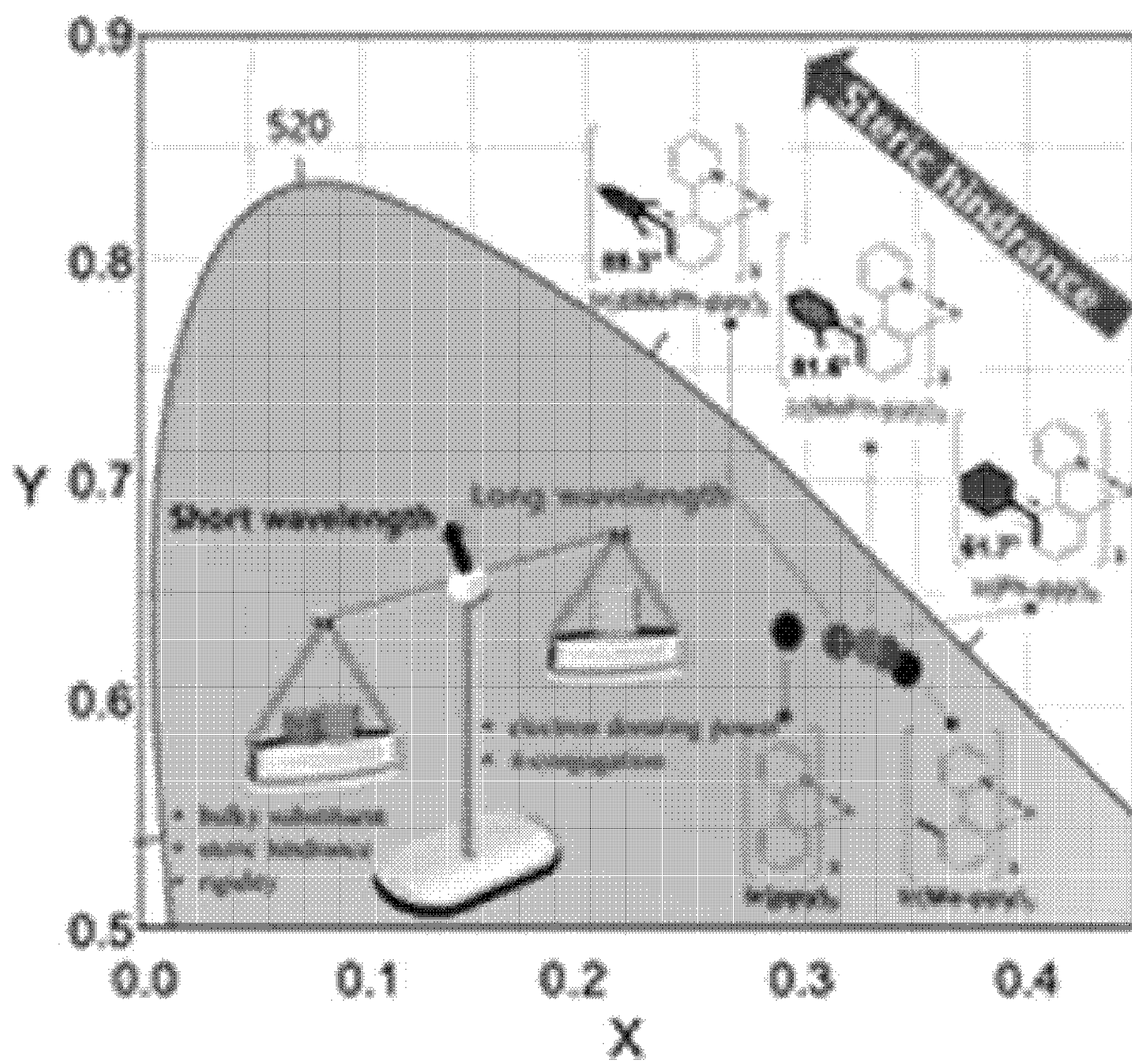
## 청구범위

- [청구항 1] 이리듐을 포함하는 중심 금속; 및  
상기 중심 금속의 2차 배위자이고, 입체장애 페닐기가 도입된  
페닐-피리딘 리간드를 포함하되,  
상기 입체장애 페닐은, 상기 리간드의 페닐기의 오르토(ortho) 위치에  
도입되는 것을 포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 2] 제1 항에 있어서,  
상기 입체장애 페닐은, 페닐, 메틸페닐 또는 2,6-디메틸페닐 중에서  
적어도 어느 하나인 것을 포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 3] 제1 항에 있어서,  
상기 입체장애 페닐의 분자량이 커질수록, 발광파장이 증가하는 것을  
포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 4] 제1 항에 있어서,  
녹색 발광 물질인 것을 포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 5] 제1 항에 있어서,  
상기 리간드를 동종리간드로 포함하는 동종리간드 이리듐 착화합물을  
포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 6] 제1 항에 있어서,  
상기 리간드를 메인 리간드로 갖고, 보조 리간드를 더 포함하는  
이종리간드 이리듐 착화합물을 포함하는 이리듐 인광소재.
- [청구항 7] 페닐-피리딘의 상기 페닐기에 입체장애 페닐이 도입된 리간드를  
준비하는 단계;  
상기 리간드 및 이리듐 화합물을 포함하는 소스 용액을 제조하는 단계; 및  
상기 소스 용액을 반응시켜, 상기 리간드가 3배워진 제 5항에 따른 이리듐  
인광소재를 제조하는 단계를 포함하는 이리듐 인광소재의 제조 방법.
- [청구항 8] 페닐-피리딘의 상기 페닐기에 입체장애 페닐이 도입된 리간드를  
준비하는 단계;  
상기 리간드 및 이리듐 화합물을 포함하는 제1 혼합 용액을 준비하는  
단계;  
상기 제1 혼합 용액을 반응시켜, 상기 리간드 및 상기 이리듐 화합물의  
이리듐이 결합된 이리듐 다이머를 제조하는 단계;  
상기 이리듐 다이머 및 보조 리간드를 포함하는 제2 혼합 용액을  
준비하는 단계; 및  
상기 제2 혼합 용액을 반응시켜, 상기 리간드를 메인 리간드로 갖는 제  
6항에 따른 이리듐 인광소재를 제조하는 단계를 포함하는 이리듐  
인광소재의 제조 방법.

[도1]

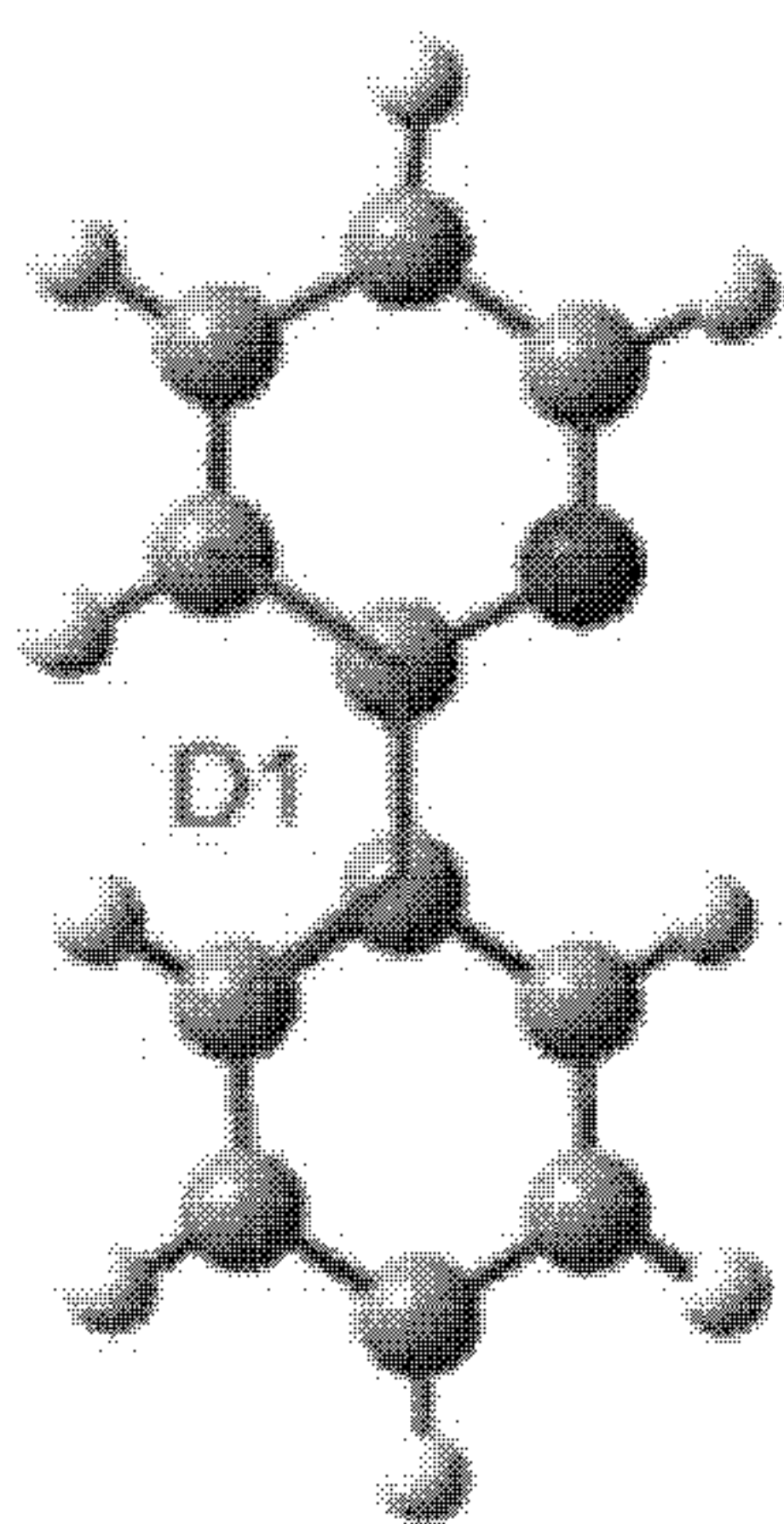


[도2]

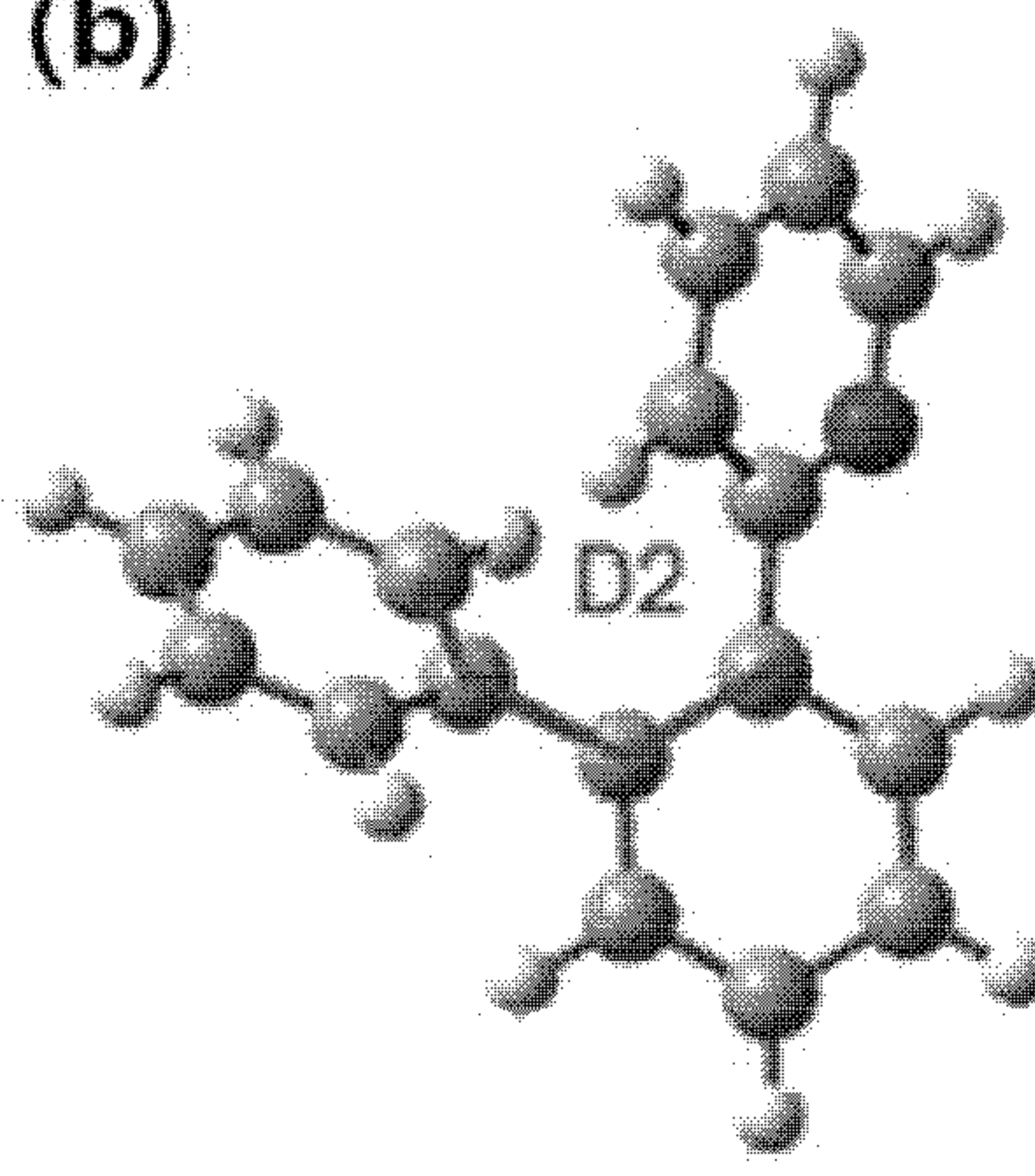


[도3]

(a)

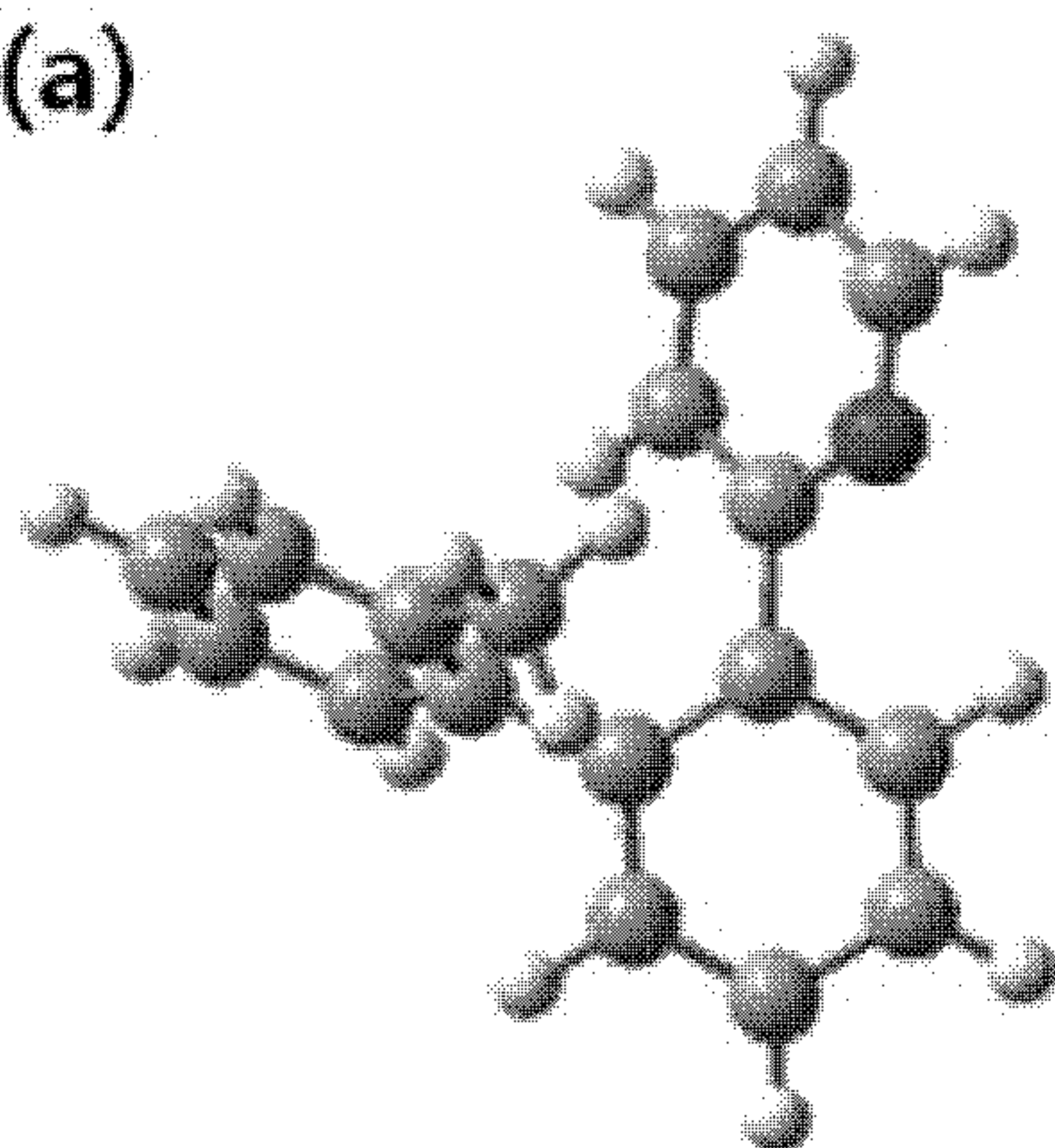


(b)

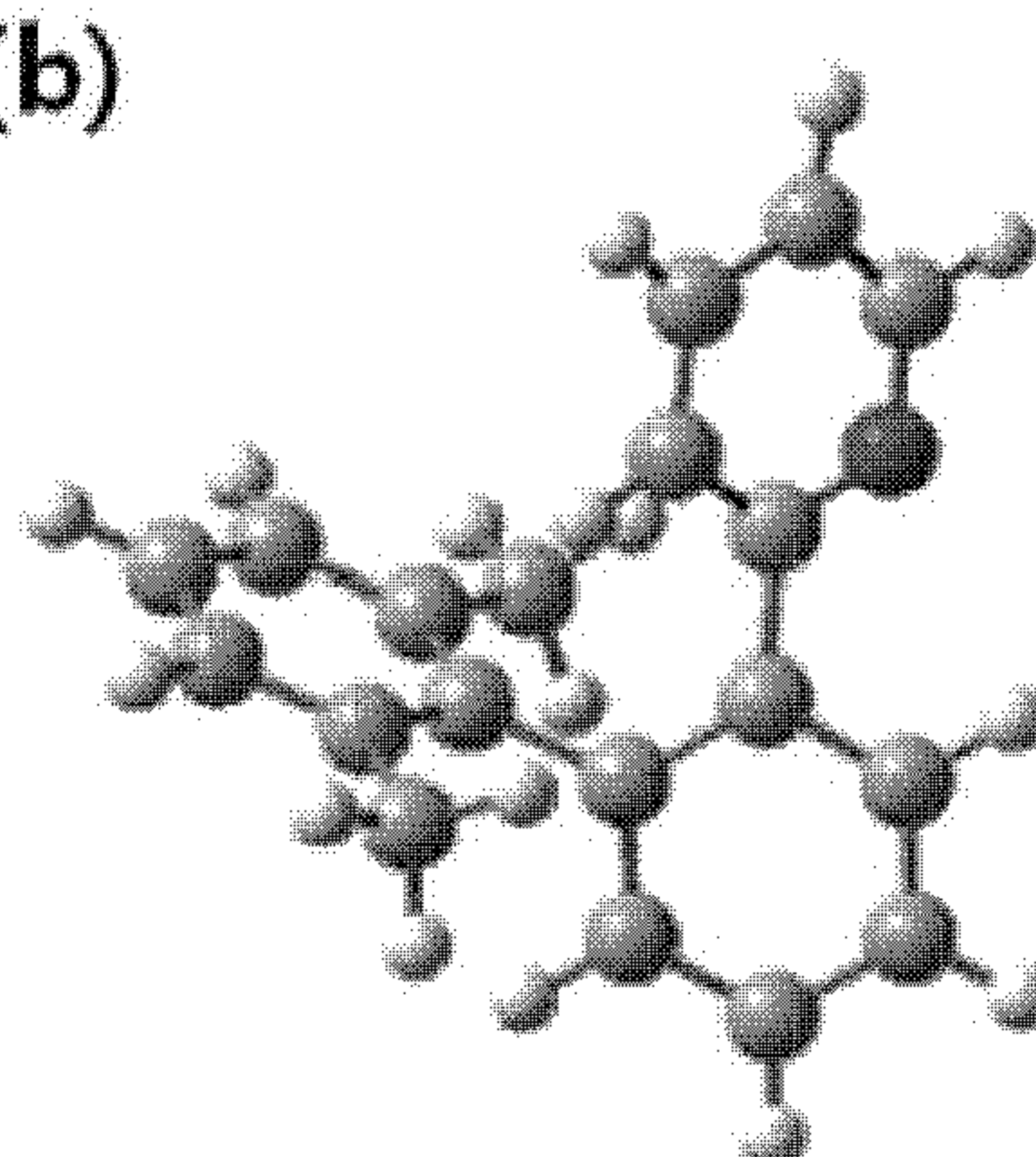


[도4]

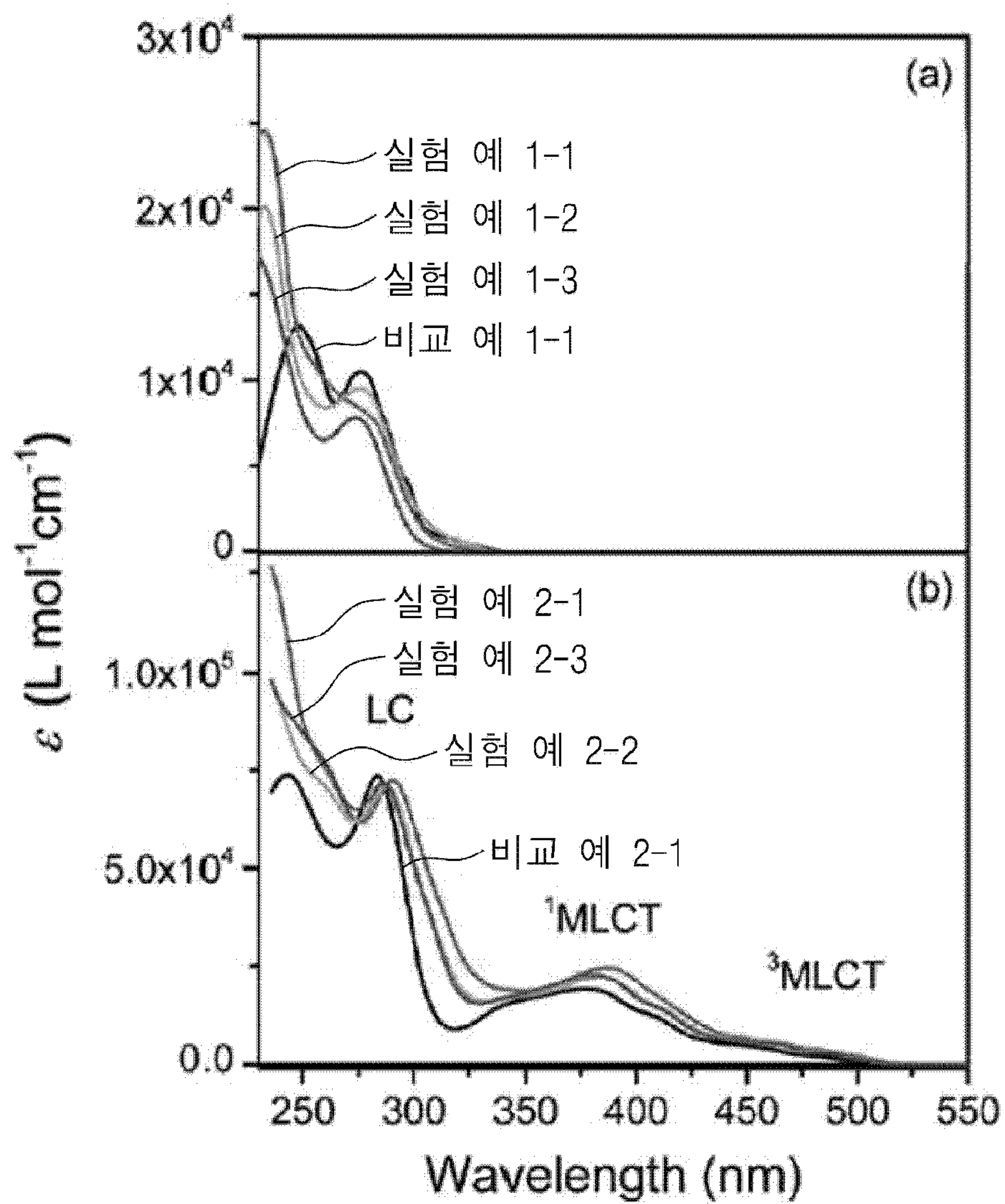
(a)



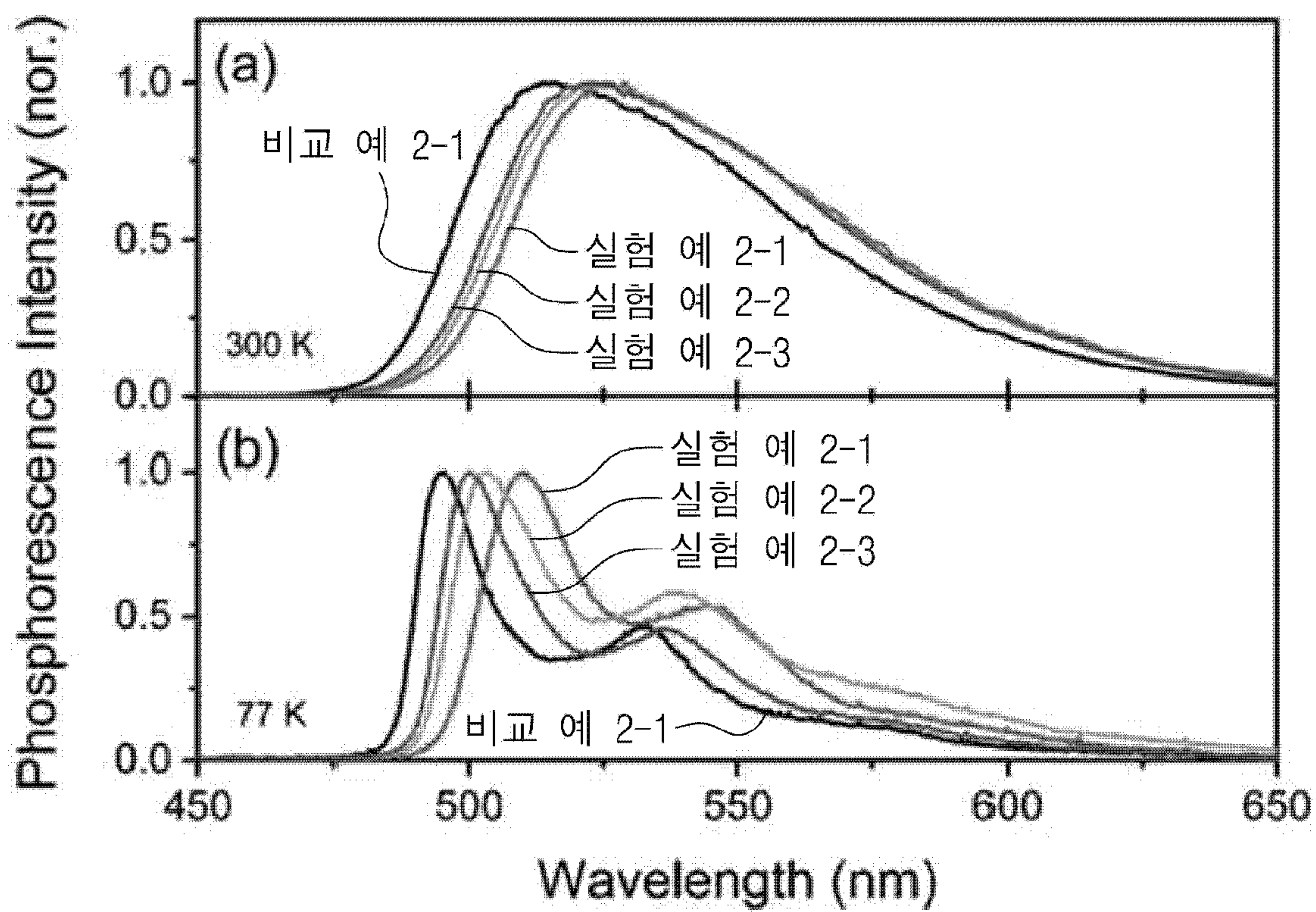
(b)



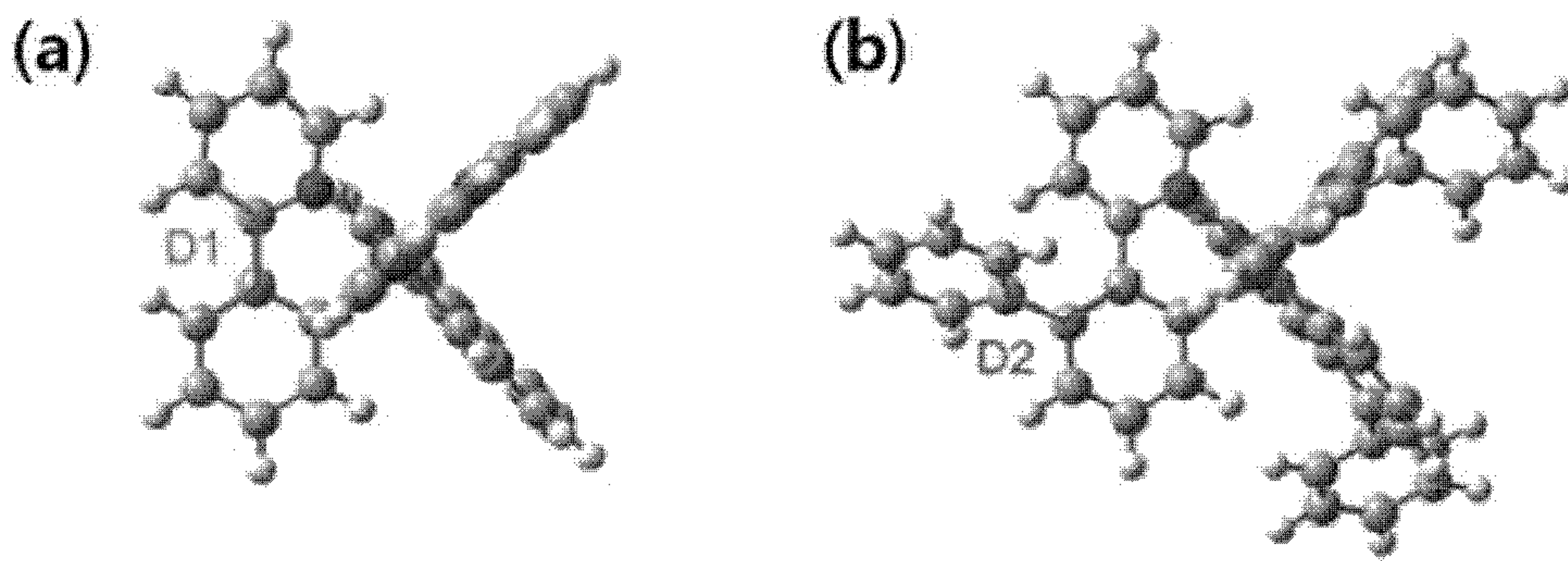
[도5]



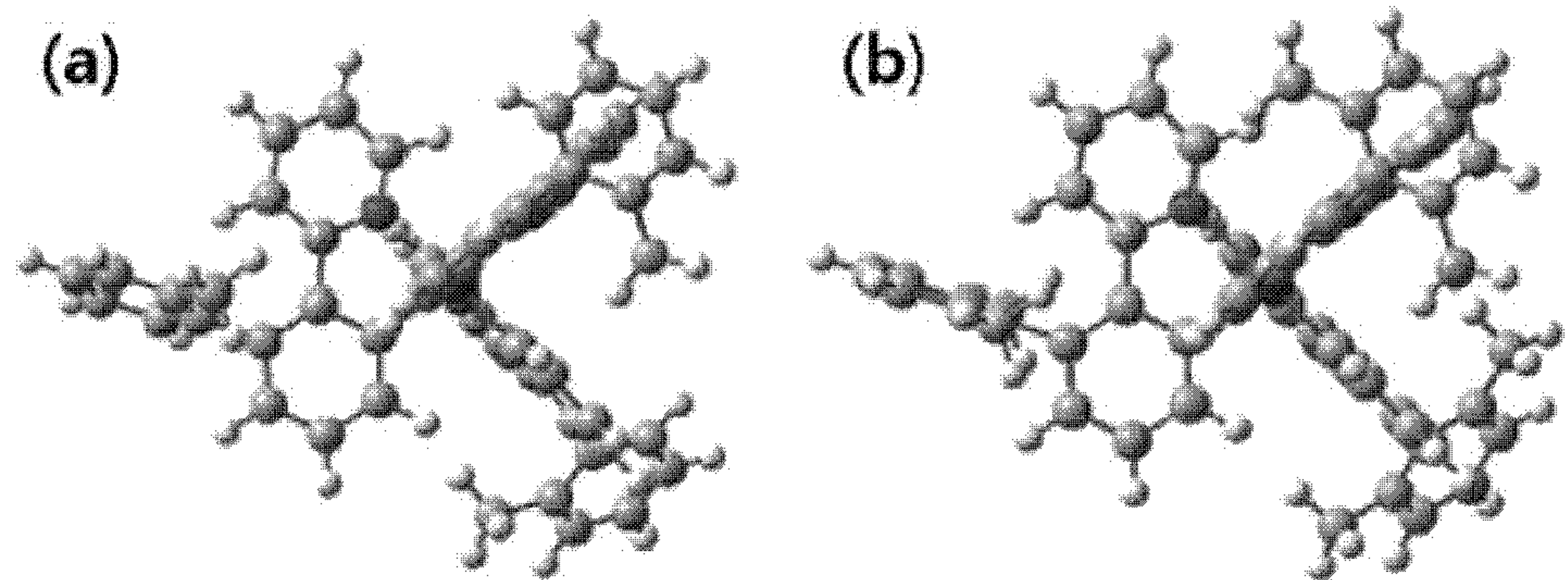
[도6]



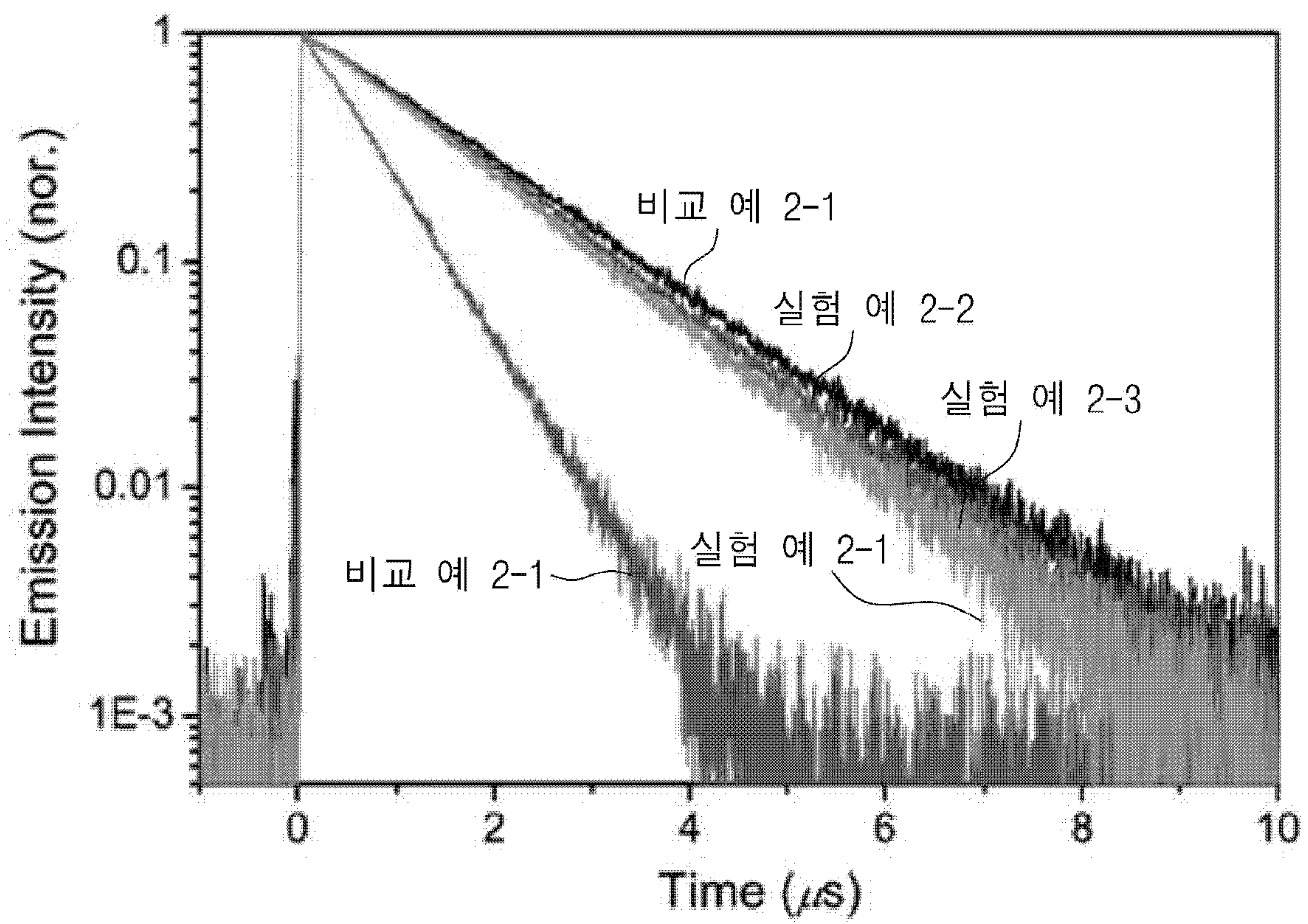
[도7]



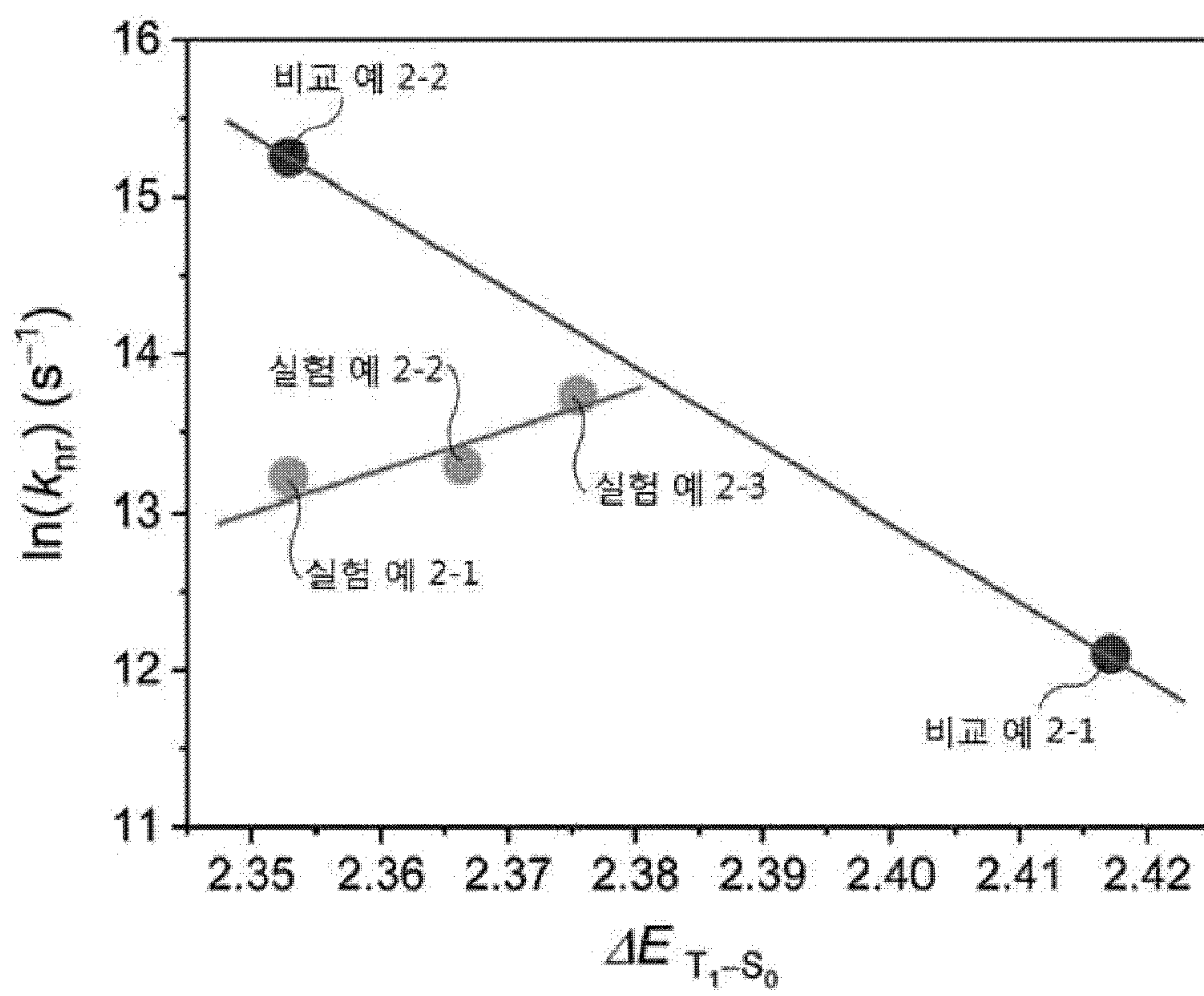
[도8]



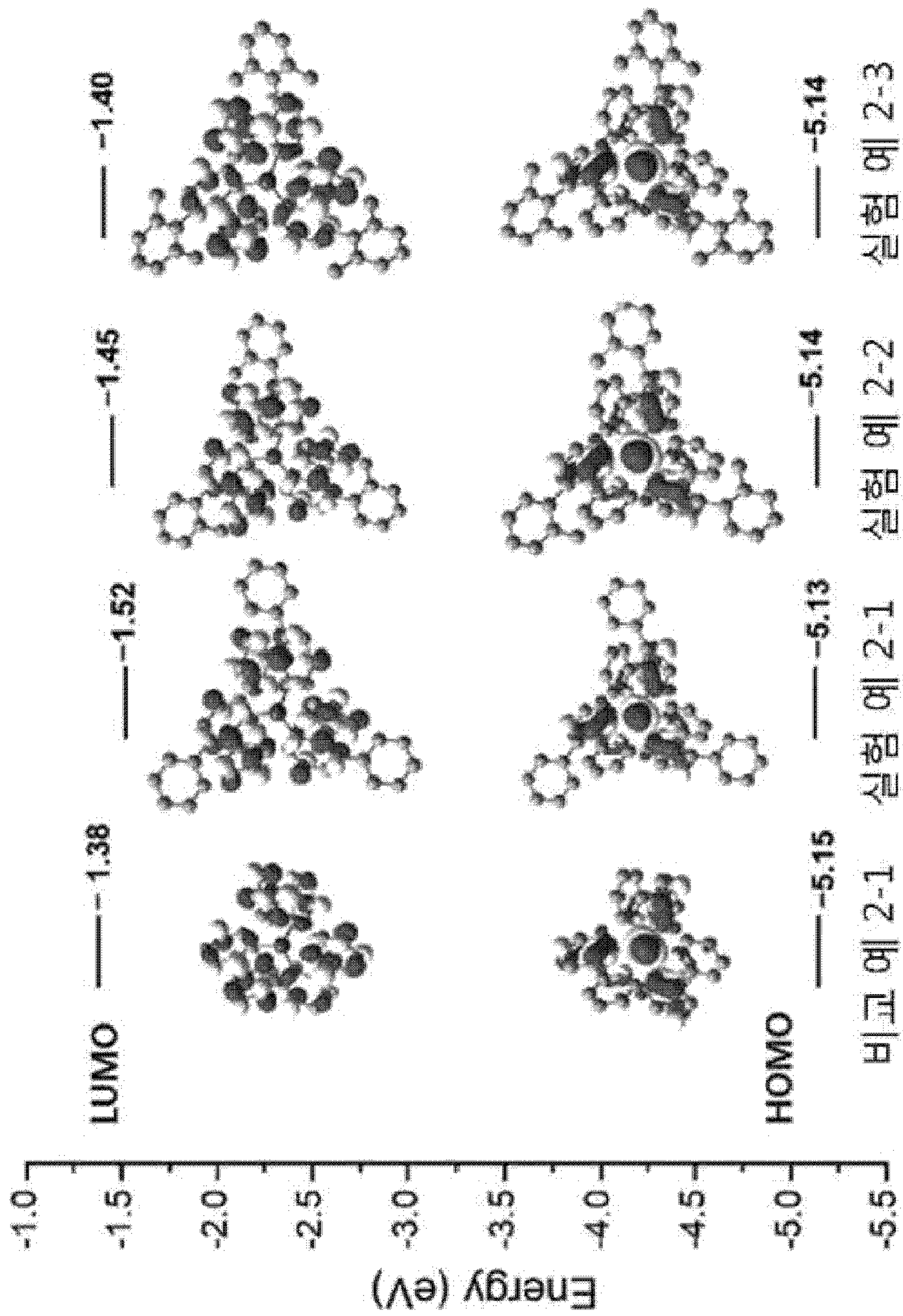
[도9]



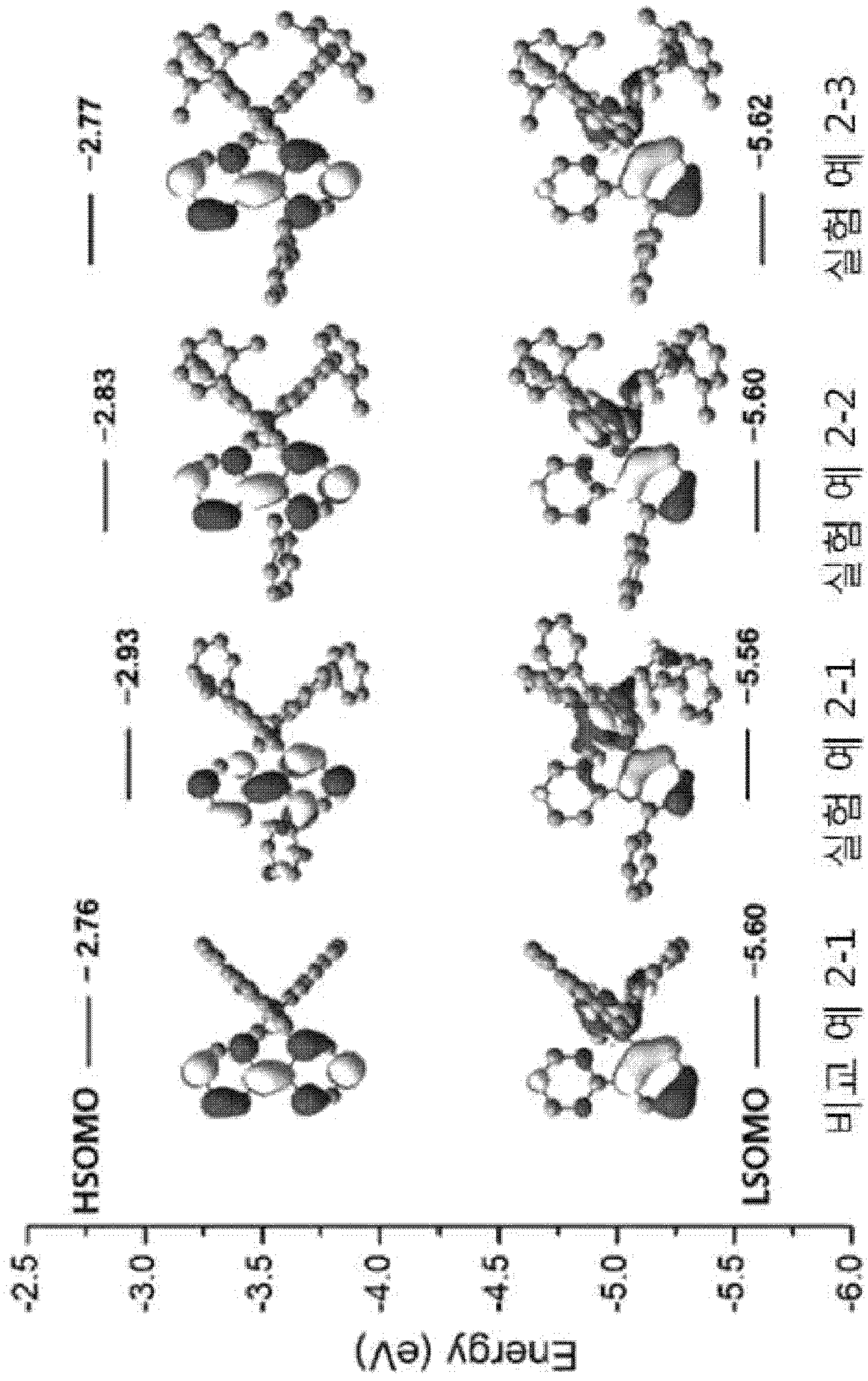
[도10]



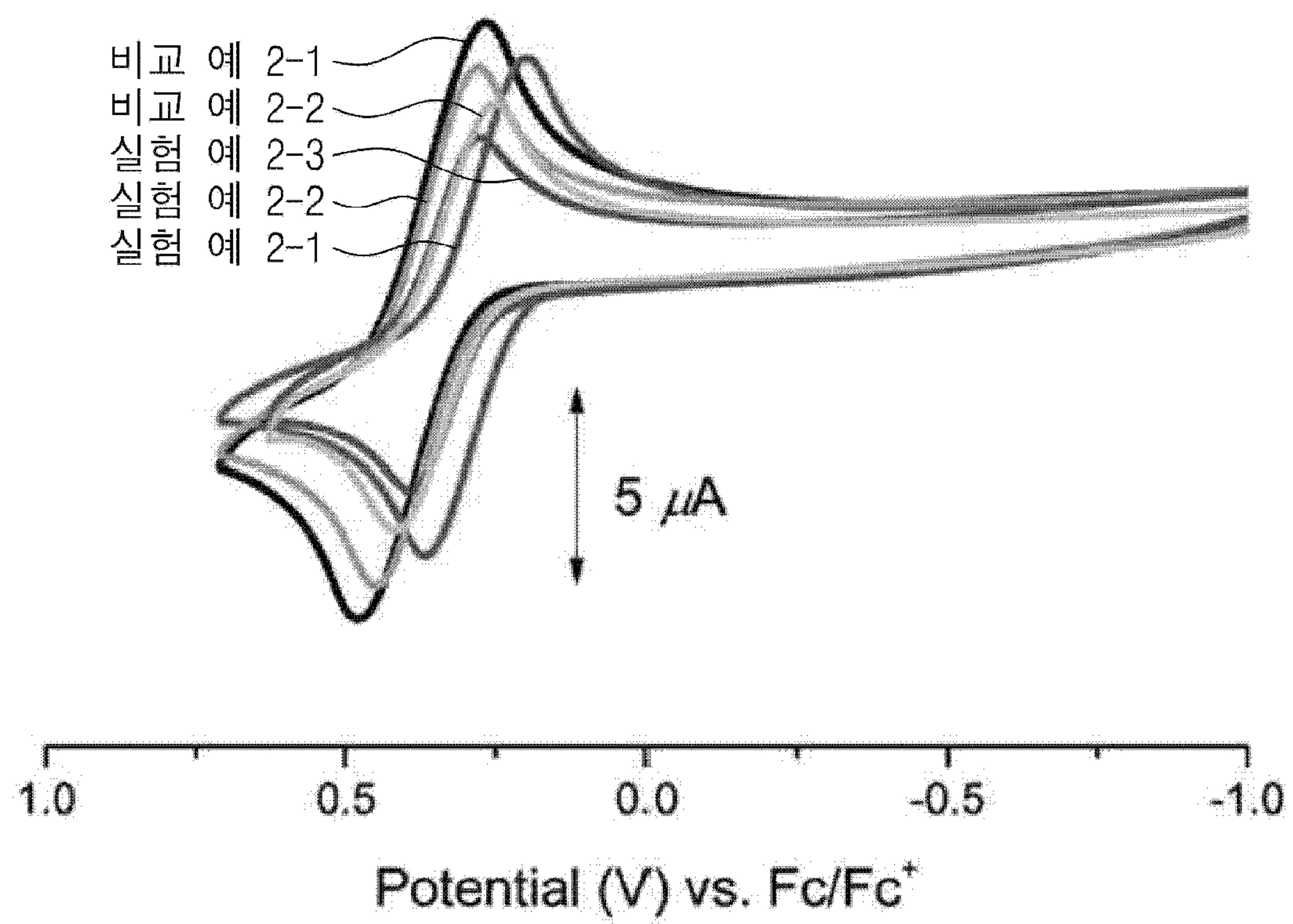
[도11]



[도12]



[도13]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2020/015931

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C09K 11/06(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 11/06(2006.01); C07F 15/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01)

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean utility models and applications for utility models: IPC as above

Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & keywords: 이리듐 인광소재(iridium phosphorescent material), 페닐-피리딘 리간드(phenyl-pyridine ligand), 입체장애 페닐(steric hindrance phenyl)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                       | Relevant to claim No. |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| X         | KR 10-2011-0036098 A (MITSUBISHI CHEMICAL CORPORATION) 06 April 2011 (2011-04-06)<br>See paragraphs [0127]-[0130] and [0171]-[0173].                                                                                                                                     | 1-6                   |
| Y         |                                                                                                                                                                                                                                                                          | 7,8                   |
| Y         | SINGH, A. et al. Facile synthesis and complete characterization of homoleptic and heteroleptic cyclometalated Iridium(III) complexes for photocatalysis. Journal of organometallic chemistry. 2015, vol. 776, pp. 51-59.<br>See abstract; and page 53, formulas 3 and 4. | 7,8                   |
| X         | JP 2012-149083 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP.) 09 August 2012 (2012-08-09)<br>See claims 2, 8 and 85; and paragraphs [0104]-[0108].                                                                                                                                          | 1-6                   |
| A         | KR 10-1926771 B1 (JINWOONG INDUSTRIAL CO., LTD.) 07 December 2018 (2018-12-07)<br>See paragraphs [0044] and [0045].                                                                                                                                                      | 1-8                   |



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

|                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| * Special categories of cited documents:                                                                                                                                | “T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention                                              |
| “A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance                                                                | “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone                                                                     |
| “D” document cited by the applicant in the international application                                                                                                    | “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art |
| “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date                                                                               | “&” document member of the same patent family                                                                                                                                                                                                    |
| “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) |                                                                                                                                                                                                                                                  |
| “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                                  |
| “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                  |

Date of the actual completion of the international search

07 April 2021

Date of mailing of the international search report

07 April 2021

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office  
Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

| C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                       |
|----------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category*                              | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Relevant to claim No. |
| A                                      | <p>JUNG, S. et al. Effect of substitution of methyl groups on the luminescence performance of IrIII complexes: preparation, structures, electrochemistry, photophysical properties and their applications in organic light-emitting diodes (OLEDs). European journal of inorganic chemistry. 2004, vol. 17, pp. 3415-3423.</p> <p>See entire document.</p>                                                                                                                                             | 1-8                   |
| X                                      | <p>KIM, J.-H. et al. Influence of bulky substituents on the photophysical properties of homoleptic Iridium(III) complexes. Physical chemistry chemical physics. March 2019, vol. 21, no. 13, pp. 6908-6916.</p> <p>See abstract; page 6909, left column; introduction 3.1.; formula 1; and figure 1.</p> <p>(This document is a document declaring exceptions to lack of novelty in an earlier application that serves as a basis for claiming priority of the present international application.)</p> | 1-8                   |

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/KR2020/015931**

| Patent document<br>cited in search report |                 |    | Publication date<br>(day/month/year) | Patent family member(s) |                 |    | Publication date<br>(day/month/year) |
|-------------------------------------------|-----------------|----|--------------------------------------|-------------------------|-----------------|----|--------------------------------------|
| KR                                        | 10-2011-0036098 | A  | 06 April 2011                        | CN                      | 102113147       | A  | 29 June 2011                         |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 2312667         | A1 | 20 April 2011                        |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 2312667         | A4 | 16 October 2013                      |
|                                           |                 |    |                                      | JP                      | 2010-056547     | A  | 11 March 2010                        |
|                                           |                 |    |                                      | JP                      | 5743388         | B2 | 01 July 2015                         |
|                                           |                 |    |                                      | TW                      | 201014453       | A  | 01 April 2010                        |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2011-0127503    | A1 | 02 June 2011                         |
|                                           |                 |    |                                      | WO                      | 2010-013780     | A1 | 04 February 2010                     |
| JP                                        | 2012-149083     | A  | 09 August 2012                       | CN                      | 101076902       | A  | 21 November 2007                     |
|                                           |                 |    |                                      | CN                      | 101076902       | B  | 28 July 2010                         |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 1763902         | A2 | 21 March 2007                        |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 1763902         | B1 | 29 August 2018                       |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 2378582         | A1 | 19 October 2011                      |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 2378582         | B1 | 17 August 2016                       |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 3428986         | A1 | 16 January 2019                      |
|                                           |                 |    |                                      | EP                      | 3428986         | B1 | 20 January 2021                      |
|                                           |                 |    |                                      | JP                      | 2008-505925     | A  | 28 February 2008                     |
|                                           |                 |    |                                      | JP                      | 5009154         | B2 | 22 August 2012                       |
|                                           |                 |    |                                      | JP                      | 5577370         | B2 | 20 August 2014                       |
|                                           |                 |    |                                      | KR                      | 10-1214539      | B1 | 24 December 2012                     |
|                                           |                 |    |                                      | KR                      | 10-1258042      | B1 | 24 April 2013                        |
|                                           |                 |    |                                      | KR                      | 10-2007-0050438 | A  | 15 May 2007                          |
|                                           |                 |    |                                      | KR                      | 10-2012-0089376 | A  | 09 August 2012                       |
|                                           |                 |    |                                      | TW                      | 200621935       | A  | 01 July 2006                         |
|                                           |                 |    |                                      | TW                      | 201333161       | A  | 16 August 2013                       |
|                                           |                 |    |                                      | TW                      | I399421         | B  | 21 June 2013                         |
|                                           |                 |    |                                      | TW                      | I479008         | B  | 01 April 2015                        |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2006-0008671    | A1 | 12 January 2006                      |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2006-0008673    | A1 | 12 January 2006                      |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2007-0003789    | A1 | 04 January 2007                      |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2010-0176390    | A1 | 15 July 2010                         |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 2011-0060143    | A1 | 10 March 2011                        |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 7709100         | B2 | 04 May 2010                          |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 7851072         | B2 | 14 December 2010                     |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 8449990         | B2 | 28 May 2013                          |
|                                           |                 |    |                                      | US                      | 8603645         | B2 | 10 December 2013                     |
|                                           |                 |    |                                      | WO                      | 2006-014599     | A2 | 09 February 2006                     |
|                                           |                 |    |                                      | WO                      | 2006-014599     | A3 | 22 June 2006                         |
| KR                                        | 10-1926771      | B1 | 07 December 2018                     | None                    |                 |    |                                      |
|                                           |                 |    |                                      |                         |                 |    |                                      |

A.발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))  
C09K 11/06(2006.01)i

B.조사된 분야  
조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)  
C09K 11/06(2006.01); C07F 15/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01)  
조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌  
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC  
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC  
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))  
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 이리듐 인광소재(iridium phosphorescent material), 페닐-피리딘 리간드(phenyl-pyridine ligand), 입체장애 페닐(steric hindrance phenyl)

C.관련 문헌

| 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재                                                                                                                                                                                                                 | 관련 청구항 |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| X     | KR 10-2011-0036098 A (미쓰비시 가가꾸 가부시키가이샤) 2011.04.06<br>단락 [0127]-[0130], [0171]-[0173]                                                                                                                                                      | 1-6    |
| Y     |                                                                                                                                                                                                                                            | 7,8    |
| Y     | SINGH, A. 등, “Facile synthesis and complete characterization of homoleptic and heteroleptic cyclometalated Iridium(III) complexes for photocatalysis”, Journal of organometallic chemistry, 2015, 제 776권, 페이지 51-59<br>초록; 페이지 53, 도식 3, 4 | 7,8    |
| X     | JP 2012-149083 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP.) 2012.08.09<br>청구항 2, 8, 85; 단락 [0104]-[0108]                                                                                                                                                    | 1-6    |
| A     | KR 10-1926771 B1 (주식회사 진웅산업) 2018.12.07<br>단락 [0044], [0045]                                                                                                                                                                               | 1-8    |

☒ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

\* 인용된 문헌의 특별 카테고리:  
“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌  
“D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌  
“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌  
“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌  
“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌  
“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일  
2021년04월07일(07.04.2021)

국제조사보고서 발송일  
2021년04월07일(07.04.2021)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소  
대한민국 특허청  
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)  
팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관  
  
정다원  
  
전화번호 +82-42-481-5373

서식 PCT/ISA/210 (두 번째 용지) (2019년 7월)

### C. 관련 문헌

| 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 관련 청구항 |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| A     | JUNG, S. 등, “Effect of substitution of methyl groups on the luminescence performance of IrIII complexes: preparation, structures, electrochemistry, photophysical properties and their applications in organic light-emitting diodes (OLEDs)”, European journal of inorganic chemistry, 2004, 제17권, 페이지 3415-3423<br>전체 문헌 | 1-8    |
| X     | KIM, J.-H. 등, “Influence of bulky substituents on the photophysical properties of homoleptic Iridium(III) complexes”, Physical chemistry chemical physics, 2019.03, 제21권, 제13호, 페이지 6908-6916<br>초록; 페이지 6909, 왼쪽 컬럼; 3.1. 합성; 도식 1; 도면 1<br>(위 문헌은 본 국제출원의 우선권주장의 기초가 되는 선출원에서 ‘공지예외주장’된 문헌임)                             | 1-8    |

| 국제조사보고서에서<br>인용된 특허문헌 | 공개일        | 대응특허문헌               | 공개일        |
|-----------------------|------------|----------------------|------------|
| KR 10-2011-0036098 A  | 2011/04/06 | CN 102113147 A       | 2011/06/29 |
|                       |            | EP 2312667 A1        | 2011/04/20 |
|                       |            | EP 2312667 A4        | 2013/10/16 |
|                       |            | JP 2010-056547 A     | 2010/03/11 |
|                       |            | JP 5743388 B2        | 2015/07/01 |
|                       |            | TW 201014453 A       | 2010/04/01 |
|                       |            | US 2011-0127503 A1   | 2011/06/02 |
|                       |            | WO 2010-013780 A1    | 2010/02/04 |
| JP 2012-149083 A      | 2012/08/09 | CN 101076902 A       | 2007/11/21 |
|                       |            | CN 101076902 B       | 2010/07/28 |
|                       |            | EP 1763902 A2        | 2007/03/21 |
|                       |            | EP 1763902 B1        | 2018/08/29 |
|                       |            | EP 2378582 A1        | 2011/10/19 |
|                       |            | EP 2378582 B1        | 2016/08/17 |
|                       |            | EP 3428986 A1        | 2019/01/16 |
|                       |            | EP 3428986 B1        | 2021/01/20 |
|                       |            | JP 2008-505925 A     | 2008/02/28 |
|                       |            | JP 5009154 B2        | 2012/08/22 |
|                       |            | JP 5577370 B2        | 2014/08/20 |
|                       |            | KR 10-1214539 B1     | 2012/12/24 |
|                       |            | KR 10-1258042 B1     | 2013/04/24 |
|                       |            | KR 10-2007-0050438 A | 2007/05/15 |
|                       |            | KR 10-2012-0089376 A | 2012/08/09 |
|                       |            | TW 200621935 A       | 2006/07/01 |
|                       |            | TW 201333161 A       | 2013/08/16 |
|                       |            | TW I399421 B         | 2013/06/21 |
|                       |            | TW I479008 B         | 2015/04/01 |
|                       |            | US 2006-0008671 A1   | 2006/01/12 |
|                       |            | US 2006-0008673 A1   | 2006/01/12 |
|                       |            | US 2007-0003789 A1   | 2007/01/04 |
|                       |            | US 2010-0176390 A1   | 2010/07/15 |
|                       |            | US 2011-0060143 A1   | 2011/03/10 |
|                       |            | US 7709100 B2        | 2010/05/04 |
|                       |            | US 7851072 B2        | 2010/12/14 |
|                       |            | US 8449990 B2        | 2013/05/28 |
|                       |            | US 8603645 B2        | 2013/12/10 |
|                       |            | WO 2006-014599 A2    | 2006/02/09 |
|                       |            | WO 2006-014599 A3    | 2006/06/22 |
| KR 10-1926771 B1      | 2018/12/07 | 없음                   |            |