



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0140034
(43) 공개일자 2012년12월28일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0059645
(22) 출원일자 2011년06월20일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
한국과학기술원
대전 유성구 구성동 373-1

(72) 발명자
이선희
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
신대엽
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤톡특허법인

전체 청구항 수 : 총 24 항

(54) 발명의 명칭 카보레인 화합물, 이를 포함한 유기 전계 발광 소자 및 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치

(57) 요 약

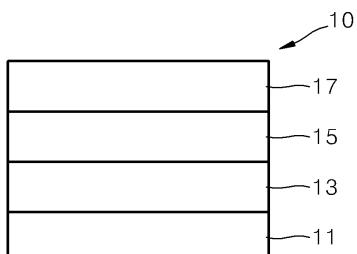
하기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물이 제공된다.

<화학식 1>



상기 식 중, CB는 카보레인이고, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐렌기이고, R₁, R₂, a, b 및 n은 상세한 설명을 참조한다. 상기 카보레인 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 높은 발광 효율을 가진다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자

송원준

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이관희

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

도영규

대전광역시 유성구 대학로 291, 한국과학기술원 화
학과 1117호 (구성동)

이민형

울산광역시 남구 대학로 93, 화학과 19-515호 (무
거동, 울산대학교)

이강문

대전광역시 유성구 대학로 291, 한국과학기술원 화
학과 1117호 (구성동)

배혜진

대전광역시 유성구 대학로 291, 한국과학기술원 화
학과 1117호 (구성동)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 카보레인(carborane) 화합물:

<화학식 1>



상기 식 중,

CB는 카보레인이고,

R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 니트릴기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아미드기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 에스테르기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

a 및 b는 1 내지 10의 정수이고, a개의 R_1 및 b개의 R_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,

Ar은 치환, 또는 비치환된 페닐렌기이고,

n은 1 내지 10의 정수이고, n개의 Ar은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 카보레인은 $C_2B_{10}H_{10}$ 의 화학식을 갖는 카보레인 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 카보레인은 $C_1B_{11}H_{10}$ 의 화학식을 갖는 카보레인 화합물.

청구항 4

제1 항에 있어서, 상기 카보레인은 오르소(ortho)-, 메타(meta)- 또는 파라(para)-카보레인인 카보레인 화합물.

청구항 5

제1 항에 있어서, 상기 $-[Ar]_n-$ 은 상기 카보레인의 탄소 원자에 결합되는 카보레인 화합물.

청구항 6

제1 항에 있어서, 상기 $-[Ar]_n-$ 은 상기 카보레인의 보론 원자에 결합되는 카보레인 화합물.

청구항 7

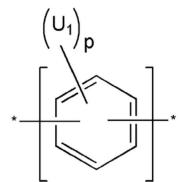
제1 항에 있어서,

상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 웬틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 폐녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 쿠놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 웹타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 햅타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 폐날레닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 웬타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 웬틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나인 카보레이인 화합물.

청구항 8

제1 항에 있어서, 상기 [Ar]는 하기 화학식2로 표시되는 카보레이인 화합물:

<화학식 2>



상기 식 중, U_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 웬틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 폐녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 쿠놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 웹타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 햅타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 폐날레닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또

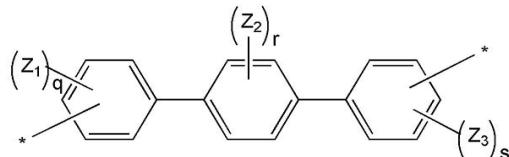
는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트렐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

p 는 0 내지 4의 정수이고, p 개의 U_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

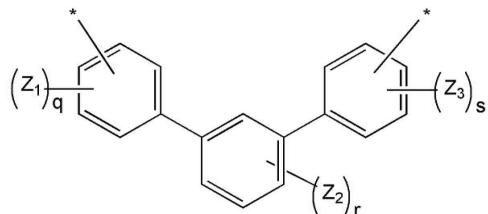
청구항 9

제1 항에 있어서, 상기 $-[Ar]_n-$ 이 하기 화학식 3a, 3b 또는 3c로 표시되는 카보레이인 화합물:

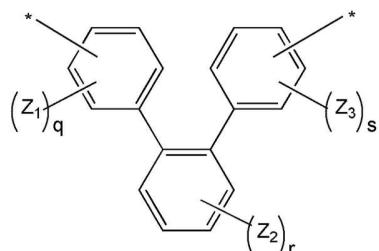
<화학식 3a>



<화학식 3b>



<화학식 3c>



상기 식 중,

Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 폐녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 쿠놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 햅타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 폐날레닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 폴루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 폴루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

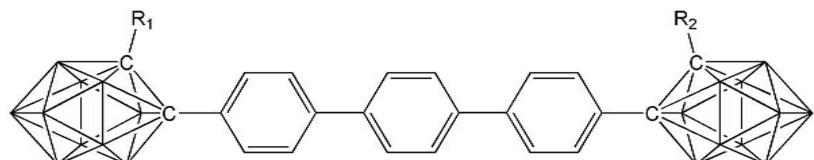
복수 개의 Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고,

q , r 및 s 는 0 내지 4의 정수 중 하나이고, *은 결합 사이트이다.

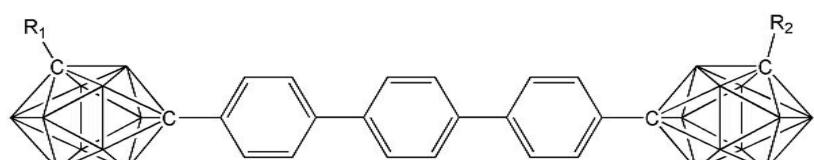
청구항 10

제1 항에 있어서, 상기 화학식 1 이 하기 화학식 4a 내지 4c로 표시되는 카보레인 화합물:

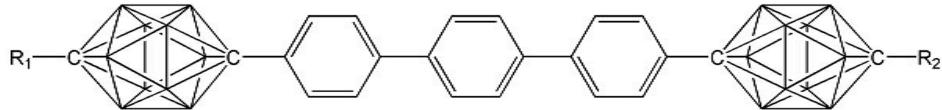
<화학식 4a>



<화학식 4b>



<화학식 4c>



상기 식 중,

원소 기호가 표시되지 않은 꼭지점은 B-H를 나타내고,

상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 웬틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라자지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 웬틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나인 카보레인 화합물.

청구항 11

제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항의 카보레인 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

청구항 12

제11 항에 있어서,

상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나인 유기 발광 소자.

청구항 13

제11 항에 있어서,

상기 제1층이 발광층이고, 상기 발광층이 호스트 및 도편트를 포함하고, 상기 도편트는 상기 카보레인 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 카보레인 화합물은 삼중항 상태(triplet state)(T₁)로부터 인광을 발광하는 유기 발광 소자.

청구항 15

제13항에 있어서,

상기 카보레인 화합물의 단일항 상태(S₁)와 삼중항 상태(T₂) 사이의 에너지 간격이 0.05 eV 내지 0.15 eV 사이에 있는 유기 발광 소자.

청구항 16

제13항에 있어서,

상기 카보레인 화합물의 인광 수명이 0.1μs 내지 50μs 의 범위를 갖는 유기 발광 소자.

청구항 17

제11 항에 있어서,

상기 제1층이 발광층이고, 상기 발광층이 호스트 및 도편트를 포함하고, 상기 호스트는 상기 카보레인 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 18

제11 항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 상기 제1층 외의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 이들 중 2 이상의 조합이 더 포함된 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가 전하-생성 물질을 더 포함한 유기 발광 소자.

청구항 20

제18항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 및 도편트를 포함하고, 상기 도편트는 형광 도편트 또는 인광 도편트인 유기 발광 소자.

청구항 21

제20항에 있어서,

상기 인광 도편트가 Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함하는 유기 금속 착체인 유기 발광 소자.

청구항 22

제18항에 있어서,

상기 전자 수송층이 전자 수송성 유기 물질 및 금속-함유 물질을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 23

제22항에 있어서,

상기 금속-함유 물질이 Li 캐드뮴을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 24

소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제10항 내지 제23항의 어느 한 항의 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된 평판 표시 장치.

명세서

기술 분야

[0001]

카보레이인 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002]

유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003]

일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수 송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004]

상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결 합하여 여기자(exiton)을 생성한다. 이 여기자가 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0005]

전류 여기에 의하여 생성되는 여기자에서는 일중항 여기자(singlet exiton)과 삼중항 여기자(triplet exiton)이 스핀 배열 통계에 따라 1:3의 비율로 형성된다. 보통 형광 재료는 일중항 여기자가 발광에 기여하며, 인광 재료는 삼중항 여기자가 발광에 기여한다. 25%의 일중항 여기자의 생성비율은 형광재료의 발광 효율을 제한하게 된다.

[0006]

삼중항 여기자를 발광에 사용할 수 있는 경우에 일중항 상태에서 삼중항 상태로 계간 전이(ISC: Intersystem Crossing)의 확률이 커지면 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 이리듐(Ir), 백금(Pt) 등을 포함하는 유기 금속 화합물이 중원자 효과(heavy atomic effect)에 의하여 계간 전이가 일어나서 비교적 높은 효율의 발광이 얻어지고 있다.

[0007]

그러나 인광 유기 금속 화합물 이외의 발광효율이 높은 재료를 개발할 필요가 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0008]

본 발명의 목적은 높은 발광 효율이 높은 신규한 카보레이인 화합물, 상기 카보레이인 화합물을 포함하는 유기층을 채용한 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009]

일 측면에 따라 하기 화학식 1로 표시되는 카보레이인 화합물(carborane compound)이 제공된다.

[0010]

<화학식 1>

- [0011] $(R_1)_a-CB-[Ar]_n-CB-(R_2)_b$
- [0012] 상기 식 중,
- [0013] CB는 카보레인이고,
- [0014] R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 니트릴기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아미드기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 에스테르기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,
- [0015] a 및 b는 1 내지 10의 정수이고, a개의 R_1 및 b개의 R_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,
- [0016] Ar은 치환, 또는 비치환된 페닐렌기이고,
- [0017] n은 1 내지 10의 정수이고, n개의 Ar은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0018] 다른 측면에 따라 제1전극, 상기 제1전극에 대향하는 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상기 카보레인 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0019] 또 다른 측면에 따라, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된, 평판 표시 장치가 제공된다.

발명의 효과

- [0020] 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물은 실온에서 계간 전이의 확률이 커서 여기자의 생성 효율이 높고 따라서 높은 발광 효율을 갖는다. 따라서 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 실온에서 우수한 발광 효율을 가질 수 있는 바, 또한, 고품위의 평판 표시 장치를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0021] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 2는 화합물 p-터페닐의 광발광 스펙트럼의 그래프이다.
- 도 3은 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 광발광 스펙트럼의 그래프이다.
- 도 4a는 p-터페닐의 온도 및 형태에 따른 발광 스펙트럼의 그래프이다.
- 도 4b는 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 온도 및 형태에 따른 발광 스펙트럼의 그래프이다.
- 도 5a는 TD-DFT를 사용하여 계산된 비교예의 p-터페닐의 S_0 , S_1 및 T_1 의 기하구조의 에너지 레벨 다이어그램이다.
- 도 5b는 TD-DFT를 사용하여 계산된 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 S_0 , S_1 및 T_1 의 기하구조의 에너지 레벨 다이어그램이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

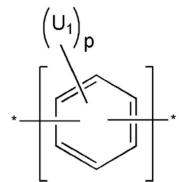
- [0022] 상기 카보레인 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

- [0023] <화학식 1>
- [0024] $(R_1)_a - CB - [Ar]_n - CB - (R_2)_b$
- [0025] 상기 식 중,
- [0026] CB는 카보레인이고,
- [0027] R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 니트릴기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 아미드기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 에스테르기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,
- [0028] a 및 b는 1 내지 10의 정수이고, a개의 R_1 및 b개의 R_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,
- [0029] Ar은 치환, 또는 비치환된 페닐렌기이고,
- [0030] n은 1 내지 10의 정수이고, n개의 Ar은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0031] R_1 및 R_2 는 상기 카보레인의 탄소 또는 보론에 결합될 수 있다. 또한, $-[Ar]_n-$ 도 상기 카보레인의 탄소 또는 보론에 결합될 수 있다.
- [0032] 카보레인은 보론과 탄소 원자들로 구성된 클러스터(cluster)이며, 카보레인 클러스터는 보통 다면체(polyhedron)를 형성한다.
- [0033] 상기 카보레인은 2개의 탄소를 포함하는 $C_2B_{10}H_{10}$ 의 화학식을 갖는 닫힌 케이지 구조의 클로소(closo)-카보레인일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 카보레인은 1개의 탄소 원자를 포함하는 $C_1B_{11}H_{11}^-$ 의 화학식을 갖는 카보레인일 수 있고, $C_2B_9H_{10}^-$ 의 화학식을 갖는 열린 케이지 구조의 니도(nido)-카보레인일 수 있다.
- [0034] 한편, 상기 카보레인은 오르소(ortho)-, 메타(meta)- 또는 파라(para)-카보레인일 수 있다. 양쪽의 카보레인은 같거나 다를 수 있다.
- [0035] 구체적으로, 상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 웨타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기,

치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 및 Q₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나일 수 있다.

[0036] 상기 [Ar]는 하기 화학식2로 표시되는 그룹 중의 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0037] <화학식 2>



[0038] 상기 식 중, U₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 폐녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 웬타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 폐날레닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 웬타페닐기, 치환 또는 비치환된 핵사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 푸리지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 및 Q₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된

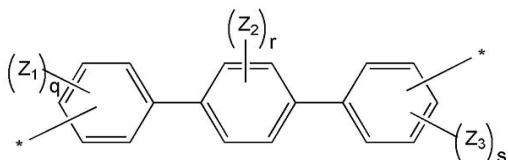
메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

[0040] p는 0 내지 4의 정수이고, p개의 U₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0041] 따라서 상기 -[Ar]_n-은 n이 1인 경우 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있고, n이 2인 경우 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일 수 있고, n이 3인 경우 치환 또는 비치환된 터페닐렌기일 수 있고, n이 4인 경우 치환 또는 비치환된 테트라페닐렌기일 수 있고, n이 5인 경우 치환 또는 비치환된 펜타페닐렌기일 수 있고, n이 6인 경우 치환 또는 비치환된 헥사페닐렌기일 수 있고, n이 7인 경우 치환 또는 비치환된 헬타페닐렌기일 수 있고, n이 8인 경우 치환 또는 비치환된 옥타페닐렌기일 수 있고, n이 9인 경우 치환 또는 비치환된 노나페닐렌기일 수 있고, n이 10인 경우 치환 또는 비치환된 데카페닐렌기일 수 있다.

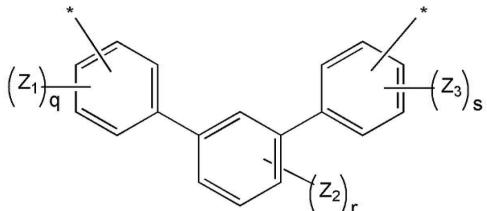
[0042] 한편, n이 3인 경우, 상기 -[Ar]_n-은 하기 화학식 3a, 3b 또는 3c로 표시될 수 있다.

[0043] <화학식 3a>



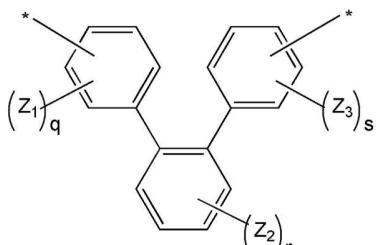
[0044]

[0045] <화학식 3b>



[0046]

[0047] <화학식 3c>



[0048]

[0049] 상기 식 중,

[0050] Z₁, Z₂ 및 Z₃은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 쿠놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헬타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 폐날레닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기,

치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조페리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조페리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 폐리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 폐나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 및 Q₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

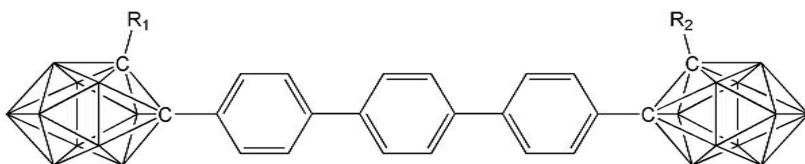
[0051] 복수 개의 Z₁, Z₂ 및 Z₃은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고,

[0052] q, r 및 s는 1 내지 4의 정수 중 하나이고, *은 결합 사이트이다.

[0053] n이 4 이상인 -[Ar]_n-에서, 각각의 -Ar-은 모두 파라 위치로 연결될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들면, 각각의 -Ar-는 모두 오르소 위치 또는 모두 메타 위치로 연결될 수도 있고, 오르소 위치, 메타 위치 및 파라 위치가 섞여서 연결될 수도 있다.

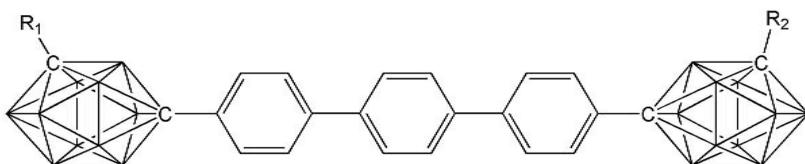
[0054] 상기 화학식 1로 표시되는 카보레이인 화합물이 예를 들면 하기 화학식 4a 내지 4c로 표시되는 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0055] <화학식 4a>



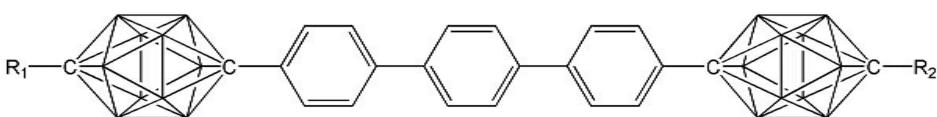
[0056]

<화학식 4b>



[0058]

<화학식 4c>



[0060]

[0061] 상기 화학식 4a 내지 4c 중, 원소 기호가 표시되지 않은 꼭지점은 B-H를 나타낸다.

[0062] 상기 화학식 4a 내지 4c 중, R₁ 및 R₂에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

- [0063] 본 카보레인 화합물의 경우, 유기 발광단(luminophore)에 카보레인 치환기가 도입되어 분자의 여기 상태를 안정화시킬 수 있고, 이에 따라 계간 전이(intersystem crossing)를 빠르게 유도하여 인광을 향상시킬 수 있다. 즉, 본 카보레인 화합물은 삼중항 상태와 일중항 상태의 에너지 레벨 사이의 간격이 작아서(약 0.05eV 내지 약 0.15eV) 계간 전이가 빠르게 일어날 수 있고, 따라서 발광 효율을 높일 수 있다. 이때, 본 카보레인 화합물은 실온에서 상기와 같은 발광 효율로 발광할 수 있다.
- [0064] 한편, 상기 카보레인 화합물의 인광 수명은 $0.1\mu\text{s}$ 내지 $50\mu\text{s}$ 의 범위를 가질 수 있다. 또는 상기 카보레인 화합물의 인광 수명은 $1\mu\text{s}$ 내지 $10\mu\text{s}$ 의 범위를 가질 수 있다.
- [0065] 본 카보레인 화합물은 원자 번호가 큰 전이 금속을 사용하지 않으면서 종래의 인광을 발하는 유기 금속 화합물에 버금가는 실온의 인광 발광 효율을 얻을 수 있어서, 유기 발광 소자의 발광층에 사용될 수 있다. 호스트 및 도편트로 구성된 발광층에서 본 카보레인 화합물은 도편트로서 사용될 수 있다. 한편, 본 카보레인 화합물은 발광층의 호스트로서도 사용될 수 있을 것으로 여겨진다. 또한, 카보레인이 전자 끌기(electron withdrawing)의 역할을 할 수 있으므로 전자 수송층이나 정공 저지층으로서의 사용도 기대된다.
- [0066] 본 명세서 중의 "치환 또는 비치환된 A(A는 임의의 치환기)"라는 표현 중 "치환된 A"란 용어는 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기 또는 이의 염 유도체, 술폰산기 또는 이의 염 유도체, 인산기 또는 이의 염 유도체, C₁-C₃₀ 알킬기, C₂-C₃₀ 알케닐기, C₂-C₃₀ 알키닐기, C₁-C₃₀ 알콕시기, C₃-C₃₀ 시클로알킬기, C₃-C₃₀ 시클로알케닐기, C₅-C₃₀ 아릴기, C₅-C₃₀ 아릴옥시기, C₅-C₃₀ 아릴티오기, C₃-C₃₀ 헤테로아릴기, N(Q₁₀₁)(Q₁₀₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₁₀₃)(Q₁₀₄)(Q₁₀₅)로 표시되는 그룹 중 하나로 치환된 A"를 의미한다. 여기서, Q₁₀₁ 내지 Q₁₀₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, C₁-C₃₀ 알킬기, C₂-C₃₀ 알케닐기, C₂-C₃₀ 알키닐기, C₁-C₃₀ 알콕시기, C₃-C₃₀ 시클로알킬기, C₃-C₃₀ 시클로알케닐기, C₅-C₃₀ 아릴기, C₅-C₃₀ 아릴옥시기, C₅-C₃₀ 아릴티오기 및 C₃-C₃₀ 헤�테로아릴기 중 하나일 수 있다.
- [0067] 예를 들어, 상기 "치환된 A"란 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 폐닐기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피로-플루오레닐기, 폐닐레닐기, 폐난트레닐기, 폐난트리디닐기, 폐난트롤리닐기, 안트릴기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 폐릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 벤조이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 피리도인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 폐나지닐기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 디벤조푸라닐기, 티오페닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조티오페닐기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 옥사졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아졸일기, 트리아지닐기, 테트라졸일기, N(Q₁₀₁)(Q₁₀₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₁₀₃)(Q₁₀₄)(Q₁₀₅)로 표시되는 그룹 중 하나로 치환된 A"를 의미할 수 있다.
- [0068] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기는 알칸(alkane)에서 수소 원자 1 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 포화탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0069] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀ 알케닐기는 상기 비치환된 C₂-C₃₀ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀ 알케닐기의 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 헵타닐, 옥테닐, 프로파디에닐(propadienyl), 이소프레닐(isoprenyl), 알릴(allyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀ 알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0070] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀ 알키닐기는 상기 비치환된 C₂-C₆₀ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀ 알키닐기의 예로는 아세틸레닐(acetylenyl) 등을 들

수 있다. 치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0071] 본 명세서 중 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기는 $-OY$ (단, Y는 상기 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다. 치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0072] 본 명세서 중 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기는 고리형 포화 탄화수소기를 가리키는 것으로서, 이의 구체 예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸 등을 들 수 있다. 치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0073] 본 명세서 중 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기는 하나 이상의 탄소 이중결합을 가지면서 방향족 고리가 아닌 고리형 불포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기의 예로는 시클로프로페닐(cyclopropenyl), 시클로부테닐(cyclobutene), 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 1,3-시클로헥사디에닐기, 1,4-시클로헥사디에닐기, 2,4-시클로헵타디에닐기, 1,5-히클로옥타디에닐기 등을 들 수 있다. 치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0074] 본 명세서 중 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 (monovalent) 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹 등일 수 있다. 폴리시클릭 그룹인 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기의 예로는 페닐(phenyl), 펜타레닐(pentalenyl), 인데닐(indenyl), 나프틸(naphtyl), 아줄레닐(azulenyl), 헵타레닐/heptalenyl, 인다세닐(indacenyl), 아세나프틸(acenaphthy), 플루오레닐(fluorenyl), 스퍼로-플루오레닐, 페날레닐(phenaenyl), 페난트레닐(phenanthrenyl), 안트릴(anthryl), 플루오란테닐(fluorantheny), 트리페닐레닐(triphenylenyl), 피레닐(pyrenyl), 크리세닐(chrysene), 나프타세닐(naphthacenyl), 피세닐(picenyl), 페릴레닐(perylenyl), 펜타페닐(pentaphenyl), 헥사세닐(hexacenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C_5 - C_{30} 아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0075] 본 명세서 중 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기는 상기 C_5 - C_{30} 아릴기의 탄소 원자가 산소 연결기(-O-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0076] 본 명세서 중 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기는 상기 C_5 - C_{30} 아릴기의 탄소 원자가 황 연결기(-S-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기의 예로는 페닐티오, 나프틸티오, 인다닐티오 및 인데닐티오 등을 들 수 있다. 치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0077] 본 명세서 중 비치환된 C_3 - C_{30} 혼테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 혼테로원자를 포함한 고리를 하나 이상 포함하는 1가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹 등일 수 있다. 폴리시클릭 그룹일 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 비치환된 C_3 - C_{30} 혼테로아릴기의 구체 예로는 피롤일(pyrrolyl), 이미다졸일(imidazolyl), 피라졸일(pyrazolyl), 피리дин일(pyridinyl), 피라지닐(pyrazinyl), 피리미디닐(pyrimidinyl), 피리다지닐(pyridazinyl), 이소인돌일(isoindolyl), 인돌일(indolyl), 인다졸일(indazolyl), 푸리닐(purinyl), 퀴놀리닐(quinolinyl), 벤조퀴놀리닐(benzoquinolinyl), 프탈라지닐(phthalazinyl), 나프ти리디닐(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐(quinazolinyl), 시놀리닐(cinnolinyl), 카바졸일(carbazolyl), 페난트리닐(phenanthridinyl), 아크리디닐(acridinyl), 페난트롤리닐(phenanthrolinyl), 페나지닐(phenazinyl), 벤조옥사졸일(benzoxazolyl), 벤조이미다졸일(benzimidazolyl), 푸라닐(furanyl), 벤조푸라닐(benzofuranyl), 티오페닐(thiophenyl), 벤조티오페닐(benzothiophenyl), 티아졸일(thiazolyl), 이소티아졸일(isothiazolyl), 벤조티아졸일(benzothiazolyl), 이소옥사졸일(isoxazolyl), 옥사졸일(oxazolyl), 트리아졸일, 테트라졸, 옥사디아졸일, 트리아지닐, 벤조옥사졸일(benzooxazolyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C_3 - C_{30} 혼테로아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0078] 본 명세서 중 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬렌기는 알кан에서 수소 원자 2 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 2가

(divalent) 그룹을 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬렌기의 예는 상기 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀ 알킬렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

- [0079] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0080] 상기 화학식 1을 갖는 카보레인 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 카보레인 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0081] 상기 화학식 1을 갖는 카보레인 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다.
- [0082] 일 구현예에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 카보레인 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0083] 상기 제1층은 정공 수송층, 정공 주입층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 구현하고자 하는 유기 발광 소자의 구조에 따라 공지된 다양한 층으로 변형 가능하다.
- [0084] 상기 유기 발광 소자는, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에, 상술한 바와 같은 제1층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 이들 중 2 이상의 조합을 갖는 층을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는, 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/상기 카보레인 화합물을 포함한 제1층(즉, 발광층의 역할을 함)/전자 수송층/전자 주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0085] 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재된 층들 중 하나 이상은 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.
- [0086] 본 명세서 중 "습식 공정"이란 소정의 물질을 소정의 용매와 혼합하여 수득한 혼합물을 소정의 기판 상에 제공한 후, 건조 및/또는 열처리하여 상기 소정의 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 상기 기판 상에 상기 소정의 물질을 포함한 막을 형성하는 공정을 말한다.
- [0087] 예를 들어, 상기 제1층은 통상의 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있다. 또는, 상기 카보레인 화합물 및 용매를 포함한 혼합물을 스펀 코팅법, 스프레이팅법, 잉크젯 프린팅법, 디핑법, 캐스팅, 그라비아 코팅, 바코팅, 롤코팅, 와이어 바 코팅, 스크린 코팅, 플렉소 코팅, 오프셋 코팅, 레이저 전사법 등을 이용하여 상기 제1층 형성 영역(예를 들면, 정공 수송층 상부 등)에 제공한 후, 제1층 형성 영역에 제공된 상기 혼합물을 건조 및/또는 열처리하여 상기 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 제1층을 형성할 수 있다.
- [0088] 한편, 베이스 필름에 상술한 바와 같은 진공 증착법 또는 습식 공정을 이용하여 제1층을 형성한 후, 상기 제1층을 제1층 형성 영역(예를 들면, 정공 수송층 상부 등)에 레이저 등을 이용하여 전사시키는 등의 레이저 전사법도 이용할 수 있다.
- [0089] 상기 제1층이 발광층일 경우, 상기 제1층은 상기 카보레인 화합물만을 포함할 수도 있고, 상기 카보레인 화합물 외의 이종의 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0090] 예를 들어, 상기 제1층이 발광층이고, 상기 제1층에 포함된 상기 카보레인 화합물은 인광 도편트로 사용될 수 있다. 이때 상기 카보레인 화합물의 단일항 여기 상태(S₁) 상태와 삼중항 여기 상태(T₂) 사이의 에너지 간격이 좁아서 두 상태 사이의 계간 전이가 촉진되고, 삼중항 여기 상태(T₂)에서 삼중항 여기 상태(T₁) 상태로의 에너지 전이를 거쳐서 인광 발광(T₁→S₀)이 일어날 수 있다.
- [0091] 여기서, 상기 제1층은 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 제1층은 인광 도편트의 역할을 하는 상기 카보레인 화합물과 인광 호스트 또는 형광 호스트를 포함한 발광층일 수 있다.
- [0092] 나아가 상기 제1층은 형광 도편트의 역할을 하는 상기 카보레인 화합물과 인광 호스트 또는 형광 호스트를 포함

한 발광층일 수 있다. 한편, 상기 제1층은 다른 인광 도편트를 더 포함할 수도 있다.

[0093] 또는, 상기 제1층이 발광층이고, 상기 제1층에 포함된 상기 카보레인 화합물은 형광 호스트 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다. 여기서, 상기 제1층은 형광 도편트 또는 인광 도편트를 더 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 제1층은 인광 호스트의 역할을 하는 상기 카보레인 화합물과 인광 도편트를 포함한 발광층이거나, 형광 호스트의 역할을 하는 상기 카보레인 화합물과 형광 도편트를 포함한 발광층일 수 있다.

[0094] 한편, 상기 유기 발광 소자 중 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 아릴아민계 화합물 및 스티릴계 화합물 중 하나 이상을 더 포함할 수 있다.

[0095] 또한, 상기 유기 발광 소자 중 제1층은 전자 수송층이고, 상기 전자 수송층은 상기 카보레인 화합물 또는 상기 카보레인 화합물과 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 이때 금속-함유 물질이 Li 착체를 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자 중 제1층은 정공 수송층이고, 상기 정자 수송층은 상기 카보레인 화합물을 포함할 수 있다. 즉, 상기 카보레인 화합물은 정공 수송층, 정공 주입층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 주입 기능 또는 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층에 포함될 수 있다.

[0096] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0097] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(13), 유기층(15) 및 제2전극(17)을 차례로 구비한다.

[0098] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0099] 상기 제1전극(13)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(13)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 이용하면, 상기 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.

[0100] 상기 제1전극(13) 상부로는 유기층(15)이 구비되어 있다. 본 명세서에 있어서, "유기층"이란 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 모든 층을 포괄하여 지칭하는 것으로서, 상기 유기층은 금속 착체 등도 포함할 수 있는 것으로서, 반드시 유기물로만 이루어진 층을 의미하는 것은 아니다.

[0101] 상기 유기층(15)은 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물을 포함한 제1층을 포함하며, 상기 제1층 이외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 하나 이상의 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 제1층이 전자 수송층일 경우, 상기 유기층(15)은 상기 전자 수송층의 기능을 하는 상기 제1층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 주입층을 더 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

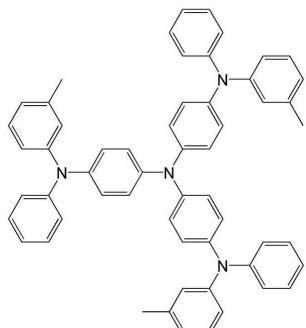
[0102] 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스판코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0103] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500 °C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

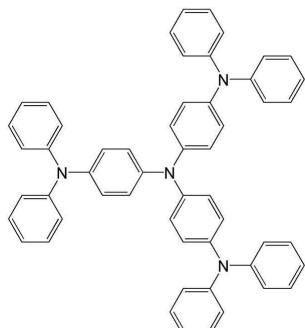
[0104] 습식 공정으로서, 스판 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0105] 정공 주입층 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물 및 공지된 정공 주입 재료 중 1종 이상을 사

용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 재료로는, 예를 들면, DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민), 구리프탈로시아닌 등과 같은 프탈로시아닌 화합물, m-MTADATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylaminophenyl) triphenylamine: 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민), NPB(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine: N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine: 4,4',4"-트리스(N,N'-디페닐아미노)트리페닐아민), 2T-NATA(4,4',4"-tris{N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine: 4,4',4"-트리스{N,-(2-나프틸)-N-페닐아미노}-트리페닐아민), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠솔폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오페인)/폴리(4-스티렌솔포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄퍼솔폰산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린)/폴리(4-스티렌솔포네이트)) 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

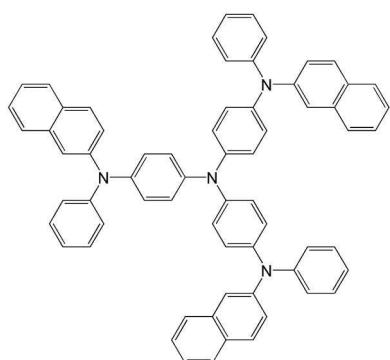


[0106]



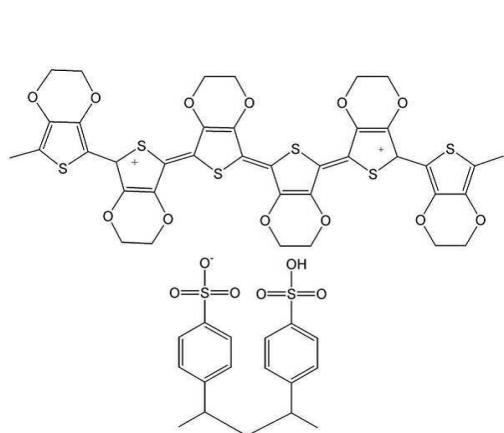
[0107]

m-MTADATA

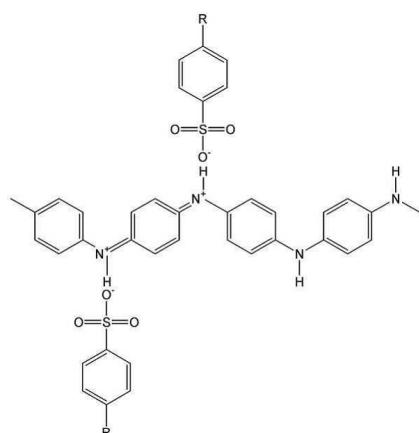


[0108]

2T-NATA



[0109]



[0110]

PEDOT/PSS

Pani/DBSA

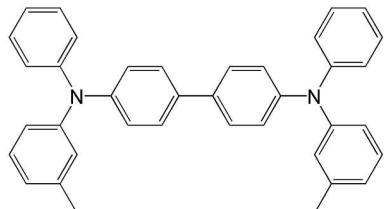
[0111]

상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도

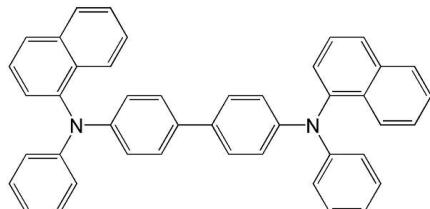
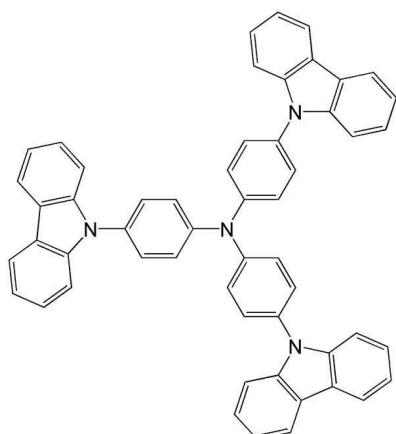
의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0113] 다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스판코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스판 킹법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택될 수 있다.

[0114] 정공 수송층 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물 및 공지된 정공 수송 재료 중 1종 이상을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, TPD(*N,N'*-bis(3-methylphenyl)-*N,N'*-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine: *N,N'*-비스(3-메틸페닐)-*N,N'*-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민), α -NPD(*4,4'*-bis[N-(1-naphthyl)-*N*-phenylamino]biphenyl: *4,4'*-비스[*N*-(1-나프ти)-*N*-페닐아미노]비페닐) 등의 방향족 축합환을 갖는 아민 유도체, TCTA(*4,4',4''*-tris(*N*-carbazolyl)triphenylamine: *4,4',4''*-트리스(*N*-카바졸일)트리페닐아민) 등과 같은 트리페닐아민계 물질과 같은 공지된 정공 수송 물질을 사용할 수 있다.



TPD

 α -NPD

[0116]

TCTA

[0118] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(14)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

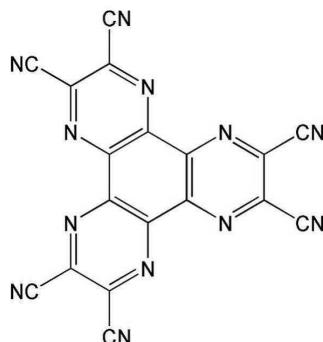
[0119] 또는, 정공 주입층과 정공 수송층 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있으며, 상기 화학식 1의 카보레인 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0120] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 화학식 1의 카보레인 화합물, 공지된 정공 주입 재료, 공지된 정공 수송 재료 및 공지된 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0121] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도편트일 수 있다. 상기 p-도편트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 100 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0122]

<화합물 100>



[0123]

[0124] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0125]

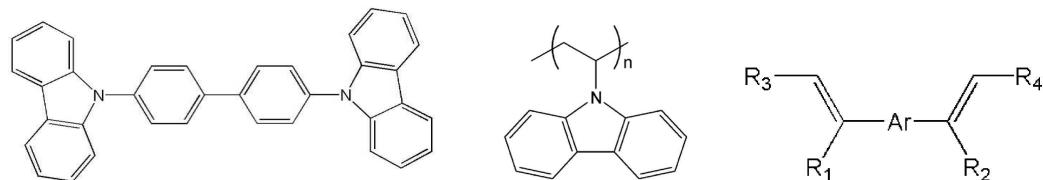
[0125] 상기 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0126]

[0126] 상기 발광층 물질로는 상기 화학식 1의 카보레인 화합물 및 공지의 발광 재료(호스트 및 도편트를 모두 포함함) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다. 상기 발광층이 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물을 포함하는 경우, 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물 외에, 공지의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도편트 또는 형광 도편트를 더 포함할 수 있다. 상기 카보레인 화합물은 인광 도편트, 형광 도편트, 인광 호스트 또는 형광 호스트로서의 역할을 할 수 있다.

[0127]

[0127] 예를 들면, 공지의 호스트로서, Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-dicabazole-biphenyl: 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(poly(n-vinyl carbazole): 폴리(n-비닐카바졸)), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene: 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), TCTA, TPBI(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene: 1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl) anthracene : 3-터트-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), DSA(distyrylarylene: 디스티릴아릴렌), E3 등을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

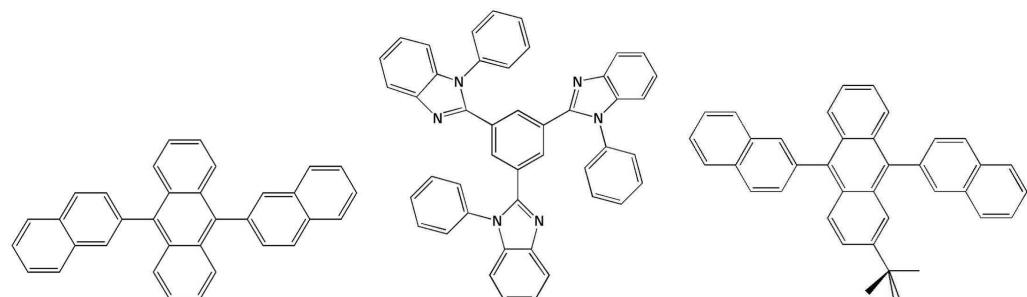


[0128]

CBP

PVK

DSA



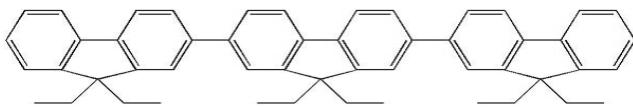
[0130]

[0131]

ADN

TPBI

TBADN



[0132]

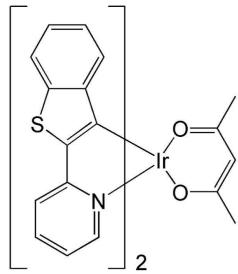
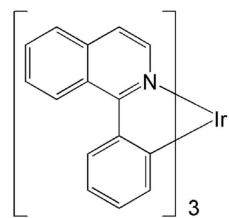
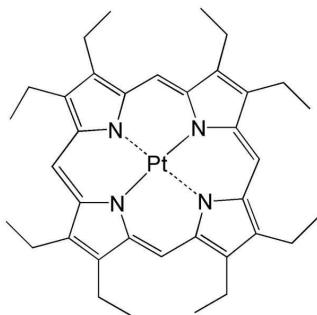
E3

[0134]

상기 공지의 도편트는 형광 도편트 및 인광 도편트 중 적어도 하나일 수 있다. 상기 공지의 인광 도편트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0135]

한편, 적색 도편트로서 PtOEP(하기 화학식 참조), Ir(piq)₃(하기 화학식 참조) Btp₂Ir(acac)(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



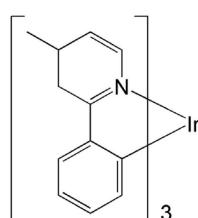
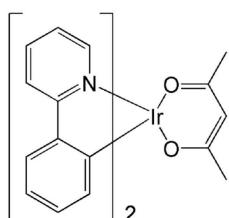
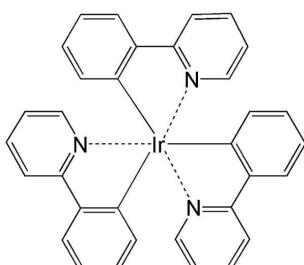
[0136]

PtOEP

Ir(piq)₃Btp₂Ir(acac)

[0138]

또한, 녹색 도편트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 폐닐피리딘, 하기 화학식 참조), Ir(ppy)₂(acac)(하기 화학식 참조), Ir(mpyp)₃(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

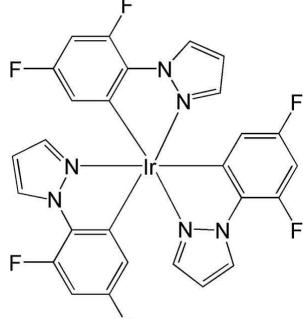
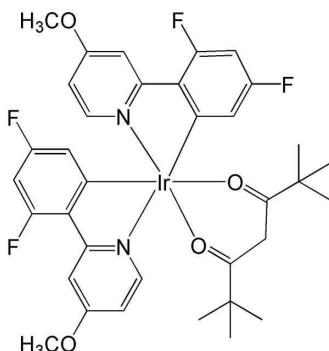
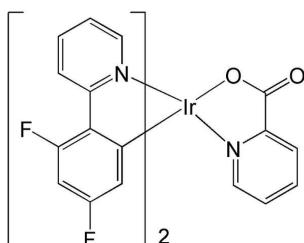


[0139]

Ir(ppy)₃Ir(ppy)₂(acac) Ir(mpyp)₃

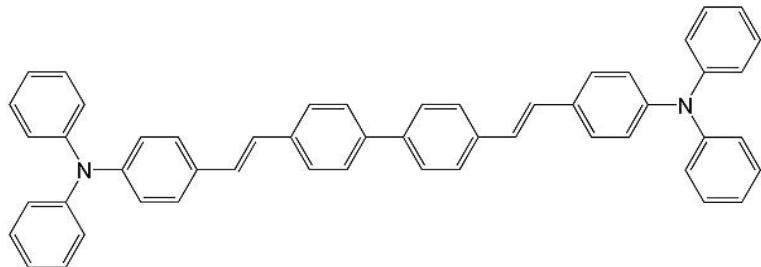
[0141]

한편, 청색 도편트로서, F₂Irpic(하기 화학식 참조), (F₂ppy)₂Ir(tmd)(하기 화학식 참조), Ir(dfppz)₃(하기 화학식 참조), DPABVi(4,4-비스(4-디페닐아미노스타릴)비페닐), DPVB(하기 화학식 참조), TBPe(2,5,8,11-테트라-tert-부틸 폐릴렌) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



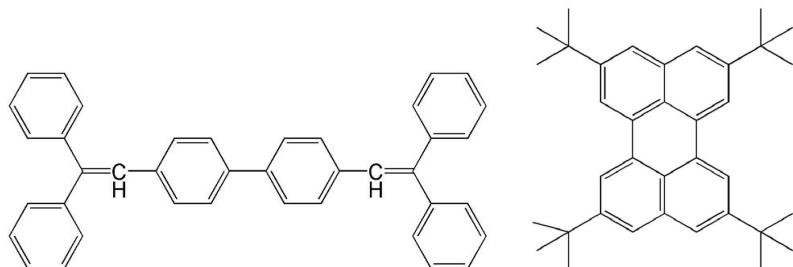
[0142]

[0143]

F₂Irpic(F₂ppy₂)Ir(tmd)Ir(dfppz)₃

[0144]

DPAVBi



[0146]

DPVB TBPe

[0148] 상기 발광층이 호스트 및 도편트를 포함할 경우, 도편트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0149]

[0149] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0150]

[0150] 발광층에 인광 도편트와 함께 사용할 경우에는 삼중향 여전자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 전자 수송층과 발광층 사이에 진공증착법, 스판코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스팬코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다.

[0151]

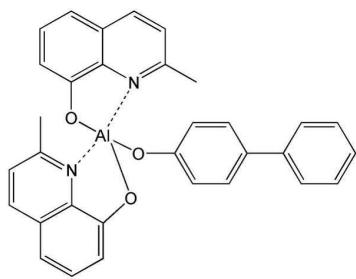
[0151] 상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0152]

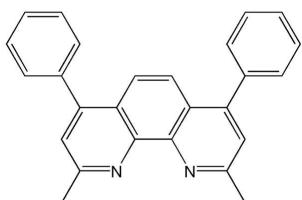
[0152] 다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스팬코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스팬코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0153]

[0153] 전자 수송층 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 카보레이인 화합물 및 공지된 전자 수송 재료 중 1종 이상을 사용할 수 있는데, 공지된 전자 수송 재료로는, 예를 들면, 퀴놀린 유도체, 특히 Alq₃(트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline: 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline: 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole: 3-(4-비페닐)-4-페닐-5-tert-부틸페닐-1,2,4-트리아졸), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole: 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole: 2-(4-비페닐)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸), BA1q(하기 화학식 참조), Bebq₂(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)) 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

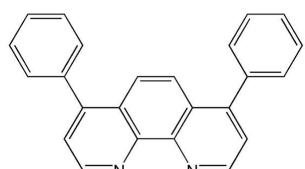


[0154]



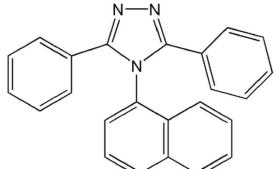
[0155]

BAlq



[0156]

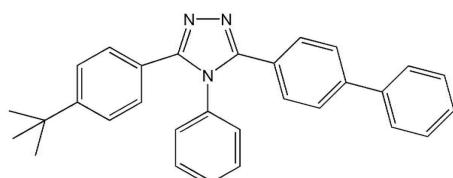
BCP



[0157]

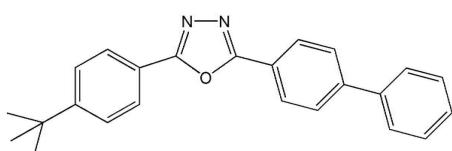
Bphen

NTAZ



[0158]

TAZ



tBu-PBD

[0160]

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

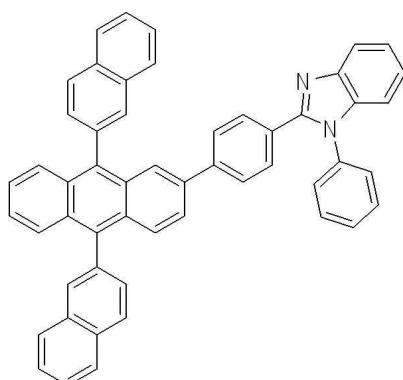
[0161]

또는, 상기 전자 수송층은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, ADN(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센) 및 하기 화합물 101 및 102와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

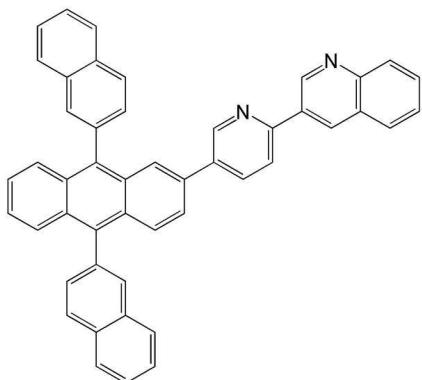
[0162]

<화합물 101>

<화합물 102>



[0163]

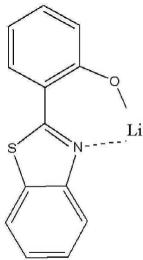


[0164]

상기 금속-함유 물질은 Li 캐체를 포함할 수 있다. 상기 Li 캐체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 103 등을 들 수 있다:

[0165]

<화합물 103>



[0166]

[0167] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0168]

상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 중착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0169]

상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0170]

이와 같은 유기층(15) 상부로는 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0171]

상기 유기 발광 소자 중, 상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층일 경우, 상기 제1층은 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물 외에, 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 또는, 상기 상기 유기 발광 소자 중, 상기 제1층이 발광층일 경우, 상기 제1층은 상기 화학식 1로 표시되는 카보레인 화합물 외에, 상술한 바와 같은 인광 도편트를 더 포함할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0172]

상기 유기 발광 소자는 트랜지스터를 포함한 평판 표시 장치에 포함될 수 있다. 따라서, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상술한 바와 같은 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된, 평판 표시 장치가 제공된다. 상기 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층, 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.

[0173]

이하에서, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0174]

실시예: 화합물 1의 합성

[0175]

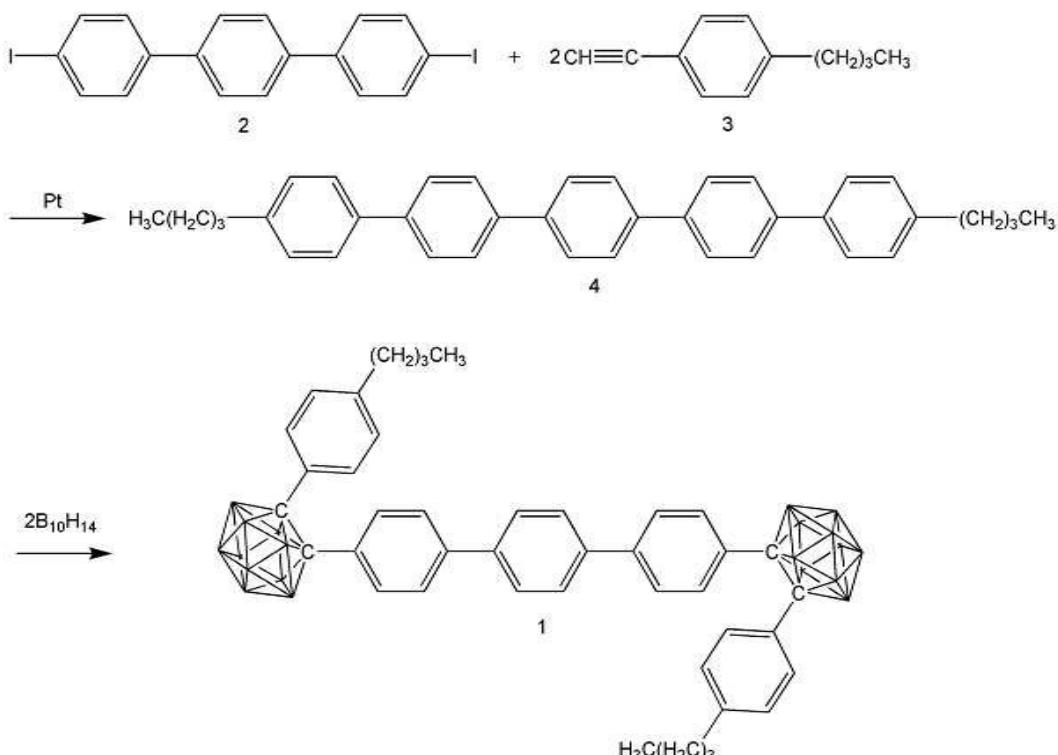
백금 촉매 하에서 4,4"-디아이오도-p-터페닐(4,4"-di iodo-p-terphenyl)(2)을 1-부틸-4-에티닐벤젠(1-butyl-4-ethynylbenzene)(3)과 반응시켜 비스아세틸렌 전구체(4)를 형성하였다. 그리고 실온에서 테카보레인(B₁₀H₁₄) 5.0 mmol 과 비스아세틸렌 전구체(4)의 툴루엔 용액 100mL을 과량의 Et₂S(Diethyl sulfide) 5 당량에 추가하였다. 상기 반응 혼합물을 가열하여 리플렉스시키고 3일동안 더 교반하였다. 상기 혼합물로부터 용매를 진공 하에서 제거하고 메탄올 50 mL를 추가한 후, 황색 고체를 여과하였고, 상기 황색 고체를 톨루엔에 재용해시켰다. 상기 재용해된 용액을 알루미나 컬럼을 통과시켜 정제하였고 용매를 진공 내에서 제거하여 백색 고체로서 실시예 화합물 1인 얻었다. CH₂Cl₂-In-헥산을 용매로 재결정하여 0.698g(40.6%)의 실시예 화합물 1인 4,4-비스[2-(p-n-부틸페닐)-1-o-카보란-1-일]-p-터페닐(4,4-bis[2-(p-n-butylphenyl)-1-o-carboran-1-y1]-p-terphenyl)(1)을 얻었다.

[0176]

생성된 실시예 화합물 1을 다크 NMR 분광 및 원소 분석에 의하여 확인하였다.

[0177] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 7.49 (s, 4H), 7.45 (d, $J = 8.8$, 4H), 7.33 (t, $J = 18.0$, 8H), 6.91 (d, $J = 8.4$, 4H), 3.30–1.50 (br, 20H, CB–BH), 2.44 (t, $J = 15.2$, 4H), 1.46 (m, $J = 30.4$, 4H), 1.18 (m, $J = 22.4$, 4H), 0.80 (t, $J = 14.8$, 6H). ^{13}C NMR (100 MHz, CDCl_3): δ 145.30, 141.72, 138.91, 131.10, 130.53, 130.08, 128.29, 127.99, 127.36, 126.48, 85.68 (CB–C), 84.88 (CB–C), 34.92, 32.90, 22.08, 13.80.

[0178] ^{11}B NMR (CDCl_3): δ -2.6 (br s, 4B), -10.3 (br s, 16B). Anal. Calcd for $\text{C}_{42}\text{H}_{58}\text{B}_{20}$: C, 64.75; H, 7.50. Found: C, 64.61 H, 7.90.



[0179]

[0180] b) 비교 화합물

[0181] b) 비교 화합물로는 p-터페닐(p-terphenyl)을 사용하였다.

[0182] 평가예

[0183] UV-VIS 흡수 스펙트럼 및 광발광 스펙트럼(photoluminescence: PL)을 각각 Jasco V-530 및 Spex Fluorog-3 발광 스펙트로미터를 사용하여 측정하였다. 용액의 PL 측정은 탈가스 THF 용액 (실시예 화합물 1 5.0×10^{-5} M, p-터페닐 1.0×10^{-5} M)에 대하여 측정하였다. 저온 PL 측정은 액체 질소(77K)로 채워진 큐즈벽 Dewar 플라스크에 놓여진 큐즈튜브를 사용하여 수행하였다. 필름은 실시예 화합물 1(10wt %)를 포함하는 PMMA의 THF 용액을 스펀 캐스팅하여 형성하였다. 실시예 화합물 1의 파우더 샘플의 발광 수명은 Xe 마이크로초 플래시램프의 여기광원과 마이크로채널 플레이트 광증폭기 튜브(MCP-PMT, 200–900nm) 검출기를 장착한 시간 상관(time-correlated) 단일 포톤 계수(TCSPC) 스펙트로미터(FLS920, EDINBURGH instruments)를 사용하여 실온에서 측정하였다. p-터페닐의 여기자 수명(τ)은 모드 동기화된(mode locked) Ti: 사파이어 펄스 레이저 (~200fs) 여기 광원을 갖춘 TCSPC 시스템으로 측정하였다.

[0184] 도 2는 비교예 화합물 p-터페닐의 광발광 스펙트럼의 그래프이고, 도 3은 p-터페닐의 양단에 카보레인이 결합된 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 광발광 스펙트럼의 그래프이다. 도 2 및 도 3의 스펙트럼은 실온의 고체 상태에서 측정되었다. 도 2 및 도 3을 참조하면, p-터페닐의 발광 스펙트럼은 약 370nm의 피크를 가지는데 반하여, 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 스펙트럼은 약 480nm의 피크를 갖는다. 즉, p-터페닐에 카보레인이 결합됨에 따라서 발광 스펙트럼이 적색 이동(red shift)을 하였고, 또한 여기자 수명(τ)이 2ns에서 2.5μs로

늘어났다. 이는 실시예 화합물 1의 발광 메커니즘이 p-터페닐의 $S_1 \rightarrow S_0$ 의 형광 발광보다 작은 에너지를 갖는 $T_1 \rightarrow S_0$ 의 인광 발광에 의함으로써 발광 파장이 늘어났고, 인광 발광에 따라서 여기자 수명이 늘어났기 때문으로 여겨진다.

[0185] 도 4a는 비교예의 p-터페닐의 온도 및 형태에 따른 발광 스펙트럼의 그래프이고, 도 4b는 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 온도 및 형태에 따른 발광 스펙트럼의 그래프이다.

도 4a 및 도 4b를 참조하면, p-터페닐의 흡수 스펙트럼은 약 270nm에서 나타나고, 실시예 화합물 1의 흡수 스펙트럼은 약 304nm에서 나타난다. 실온의 용액 상태의 p-터페닐은 약 340nm에 중심을 둔 강한 형광을 나타내는 반면, 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물은 실온의 용액 상태에서 발광을 나타내지 않고, 77K의 용액 상태에서 강한 청녹색(약 480nm)의 발광을 보여준다. 주목할 만하게 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물은 실온의 고체 샘플에서 77K의 용액 상태와 거의 동일한 발광 밴드를 보여준다. 큰 스토크 변이(Stokes shift)(약 180nm)와 더불어 고체 상태에서의 약 2.5μs의 여기자 수명은 실시예 화합물 1의 발광이 인광임을 확인하여 준다. 나아가, 10 wt %의 실시예 화합물 1로 도핑된 PMMA 필름의 발광 스펙트럼은 다소 적색 이동을 한 유사한 발광 특징을 보여준다.

[0187] 이와 달리 p-터페닐의 77K에서의 PL 스펙트럼은 실온의 용액에서 관측된 것과 같은 위치에서 강한 형광을 나타내며, 낮은 에너지 영역에 약한 인광 쇼울더를 갖는다. p-터페닐은 실온의 고체상태에서 또한 발광 밴드의 전체적인 적색 이동을 포함하는 유사한 형광 특성을 나타낸다.

[0188] 도 5a는 TD-DFT를 사용하여 계산된 비교예의 p-터페닐의 S_0 , S_1 및 T_1 의 기하구조의 에너지 레벨ダイ어그램이고, 도 5b는 TD-DFT를 사용하여 계산된 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물의 S_0 , S_1 및 T_1 의 기하구조의 에너지 레벨ダイ어그램이다. S_0 , S_1 및 T_1 의 기하구조는 각각 흡수 스펙트럼, 형광 발광 스펙트럼 및 인광 발광 스펙트럼으로부터 계산한 분자의 기하구조이다. 비교예의 p-터페닐과 실시예 화합물 1의 카보레인 화합물에서 공통적으로 $S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow T_1$ 기하구조로 갈수록 p-터페닐기 부분에서 폐닐기들이 이루는 각도의 차이가 작아져서 T_1 기하구조는 폐닐기들이 실질적으로 평면을 이룬다.

[0189] 도 5a 및 도 5b를 참조하면, 실시예 화합물 1 및 p-터페닐의 최적화된 S_1 및 T_1 기하 구조에서, 실시예 화합물 1의 S_1 상태의 에너지는 p-터페닐의 S_1 상태의 에너지 보다 낮고, 실시예 화합물 1의 T_1 및 T_2 상태의 에너지는 p-터페닐의 T_1 및 T_2 상태의 에너지 보다 더 높다. 따라서 실시예 화합물 1의 S_1 상태와 그에 가장 인접한 T_2 상태 사이의 에너지 갭이 p-터페닐의 경우보다 훨씬 작아진다. 이는 실시예 화합물 1의 S_1 상태가 T_2 상태로 쉽게 변환될 수 있도록 한다.

[0190] 용액 상태의 실시예 화합물 1에서 발광이 나타나지 않는 것은 용액 내에서 카보레인과 p-터페닐의 자유로운 회전에 기인한 비방사성 감쇠를 통하여 S_1 상태의 에너지가 T_2 를 포함하여 다른 상태로 소실되기 때문으로 여겨진다. 또한, 용액 상태와 고체 상태에서의 실시예 화합물 1의 구조의 차이가 용액 상태의 실시예 화합물 1에서 발광이 나타나지 않는 것을 설명할 수 있다. 즉, 실시예 화합물 1의 강한 인광은 T_1 상태로부터 기인할 수 있는데, 용액 상태에서는 빠른 $S_1 \rightarrow T_2$ 의 계간 전이에도 불구하고, 카보레인과 p-터페닐 부분의 자유로운 회전에 의하여 실질적으로 평면이고 단단한 컨포메이션을 요구하는 안정한 T_1 상태를 유지하는 것을 방해하기 때문이다.

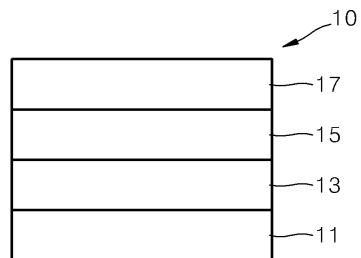
[0191] p-터페닐의 카보레인의 치환은 여기된 S_1 상태와 그에 가장 인접한 T_2 상태 사이의 에너지 갭을 좁힘으로써, $S_1 \rightarrow T_2$ 계간 전이를 촉진시키며, 이것은 최종적으로 T_1 상태를 만들어 실온에서 강한 인광을 나타내게 한다.

부호의 설명

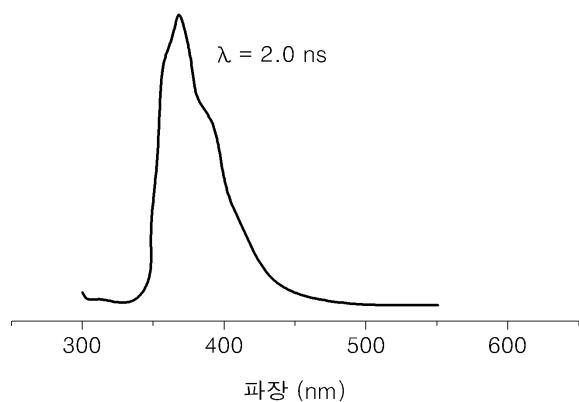
10: 유기 발광 소자	11: 기판
13: 제1전극	15: 유기층
17: 제2전극	

도면

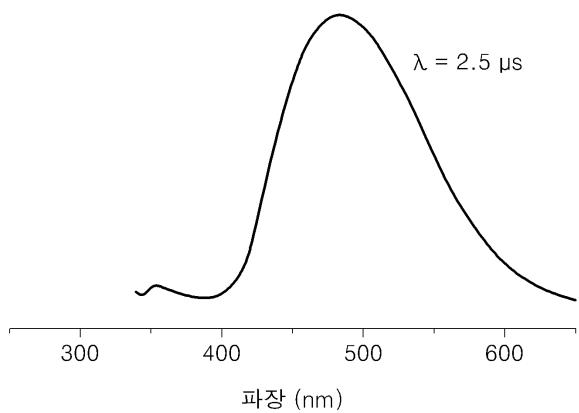
도면1



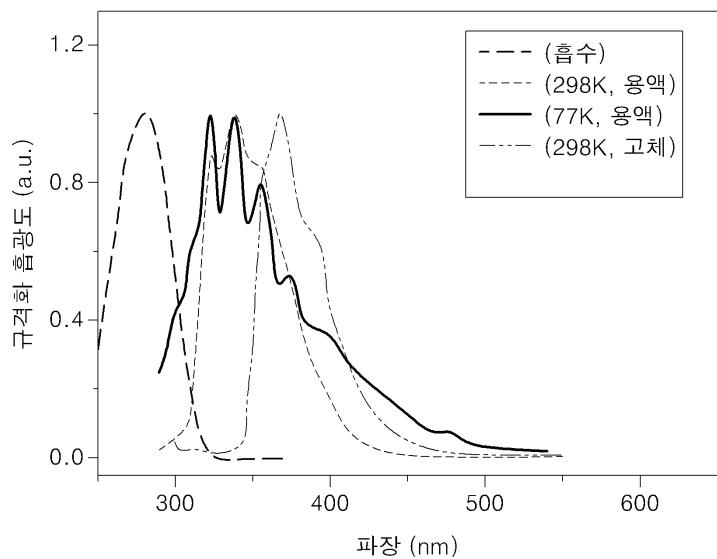
도면2



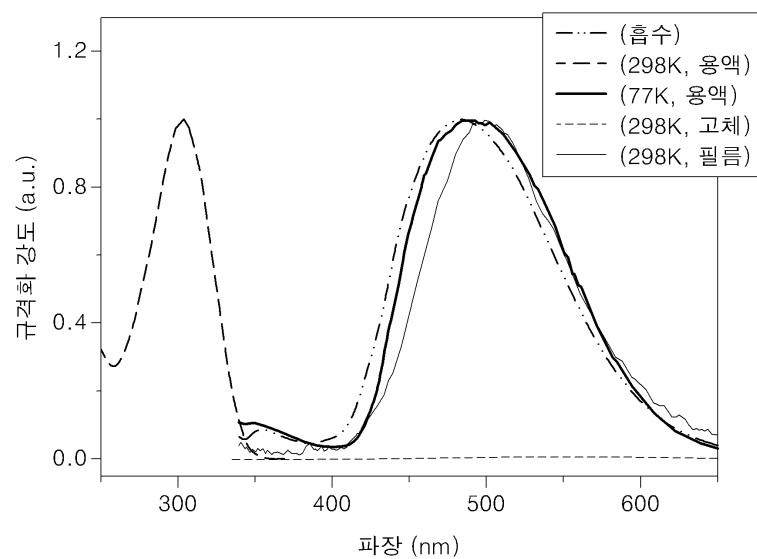
도면3



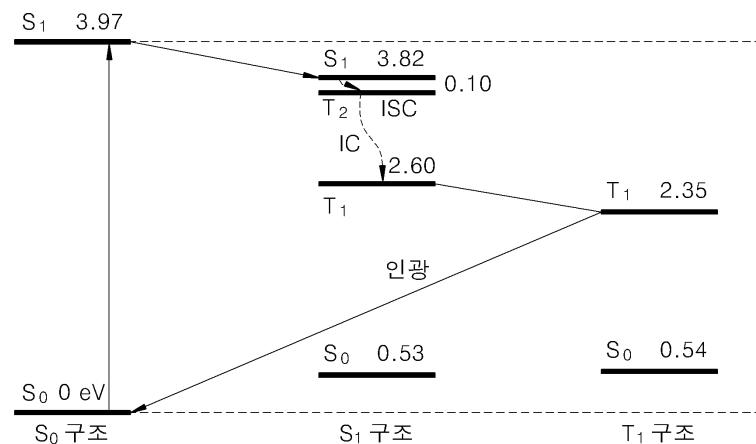
도면4a



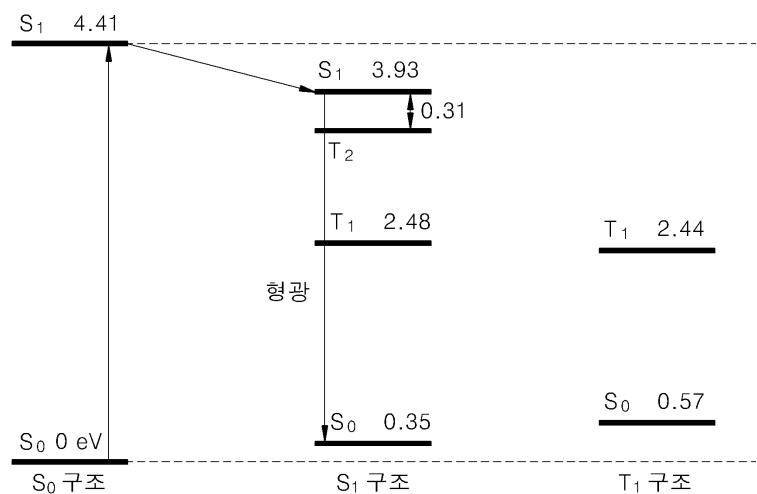
도면4b



도면5a



도면5b

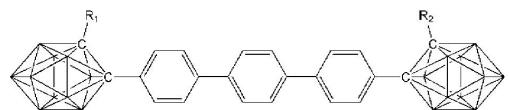


专利名称(译)	碳硼烷化合物，包含该化合物的有机电致发光器件，以及包括该有机电致发光器件的平板显示装置		
公开(公告)号	KR1020120140034A	公开(公告)日	2012-12-28
申请号	KR1020110059645	申请日	2011-06-20
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 韩国科学技术院		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 科学与韩国高等科技研究院		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 科学与韩国高等科技研究院		
[标]发明人	LEE SUN HEE 이선희 SHIN DAE YUP 신대엽 SONG WON JUN 송원준 LEE KWAN HEE 이관희 DO YOUNGKYU 도영규 LEE MIN HYUNG 이민형 LEE KANG MUN 이강문 BAE HYE JIN 배혜진		
发明人	이선희 신대엽 송원준 이관희 도영규 이민형 이강문 배혜진		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/5012 H01L51/008 H01L51/5016 C07F5/02		
其他公开文献	KR101881082B1		
外部链接	Espacenet		

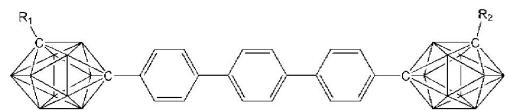
摘要(译)

提供由下式(1)表示的卡宾化合物。 <math>R_1, R_2, a, b, n</math> 相同或不同，各自为氢原子或甲基，请参阅说明。具有包含卡宾化合物的有机层的有机发光器件具有高发光效率。 <math>RTI\ ID = 0.0</math>

<화학식 4a>



<화학식 4b>



<화학식 4c>

