



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0092963
(43) 공개일자 2014년07월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 7/10 (2006.01) C07F 7/08 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-0001313
(22) 출원일자 2013년01월04일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
경상대학교산학협력단
경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)
(72) 발명자
김미경
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
추창용
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리엔목특허법인

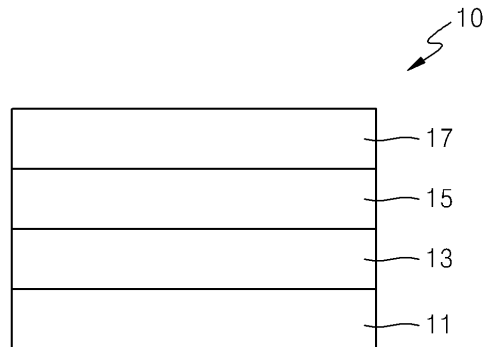
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 실리콘계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

실리콘계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

황재영

경남 진주시 진주대로 501, 그린에너지융합연구소
(가좌동, 경상대학교)

김윤희

경남 진주시 진주대로 501, 화학과 (가좌동, 경상
대학교)

권순기

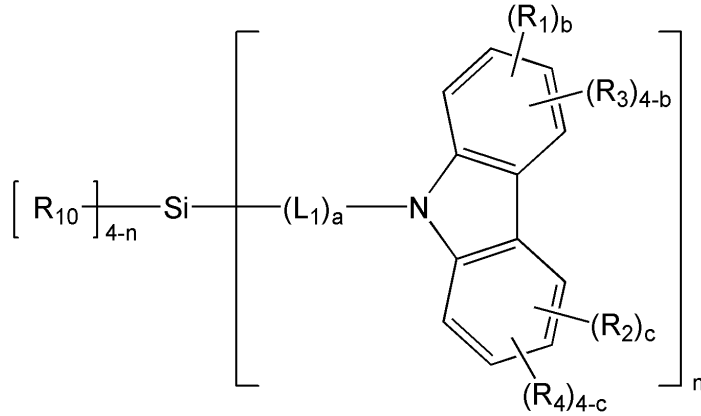
경남 진주시 진주대로 501, 고분자공학과 (가좌동,
경상대학교)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

L_1 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기이고;

a 는 1 내지 5의 정수이되, a 가 2 이상일 경우 a 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고;

R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 $-F$ 로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기이고;

b 및 c 는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택되되, $b+c \geq 1$ 이고;

R_3 및 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기; C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴싸이오기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴싸이오기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 중에서 선택되고;

R_{10} 은 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기 및 C_2-C_{60} 알키닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기 및 C_2-C_{60} 알키닐기; C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기,

나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및 -N(Q₁₁)(Q₁₂) (여기서, Q₁₁ 및 Q₁₂는 서로 독립적으로, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴기임); 중에서 선택되고;

n은 2 내지 4의 정수 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

L₁이,

i) 페닐렌기(phenylene), 펜타레닐렌기(pentalenylene), 인데닐렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphtylene), 아줄레닐렌기(azulenylene), 헵타레닐렌기(heptalenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), 아세나프틸렌기(acenaphtylene), 플루오레닐렌기(fluorenylene), 스파이로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기(phenalenylene), 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 안트릴렌기(anthrylene), 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기(pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페릴레닐렌기(perylene), 펜타페닐렌기(pentaphenylene), 헥사세닐렌기(hexacenylene), 피롤일렌기(pyrrolylene), 이미다졸일렌기(imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 피리디닐렌기(pyridinylene), 피라지닐렌기(pyrazinylene), 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 피리다지닐렌기(pyridazinylene), 이소인돌일렌기(isoindolylene), 인돌일렌기(indolylene), 인다졸일렌기(indazolylene), 푸리닐렌기(purinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 벤조퀴놀리닐렌기(benzoquinolinylene), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphtyridinylene), 퀴녹살리닐렌기(quinoxalinylene), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 카바졸일렌기(carbazolylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 아크리디닐렌기(acridinylene), 페난트롤리닐렌기(phenanthrolinylene), 페나지닐렌기(phenazinylene), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 푸라닐렌기(furanylene), 벤조푸라닐렌기(benzofuranylene), 티오펜일렌기(thiophenylene), 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 벤조티아졸일렌기(benzothiazolylene), 이소옥사졸일렌기(isoxazolylene), 옥사졸일렌기(oxazolylene), 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), 트리아지닐렌기(triazinylene), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 디벤조푸라닐렌기(dibenzofuranylene), 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 및 벤조카바졸일렌기; 및

ii) 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기; C₆-C₂₀아릴기 및 C₂-C₂₀헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₂₀아릴기 및 C₂-C₂₀헤테로아릴기; 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기로 치환된 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵타레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트릴렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 피롤일렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조옥사졸일렌기, 벤

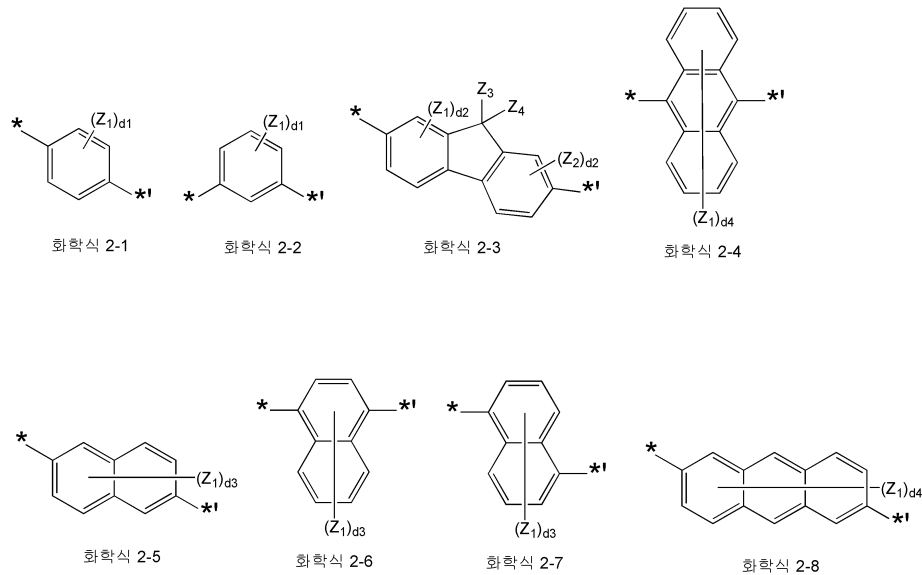
조이미다졸일렌기, 푸라닐렌기, 벤조푸라닐렌기, 티오펜일렌기, 벤조티오펜일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 벤조티아졸일렌기, 이소옥사졸일렌기, 옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 벤조옥사졸일렌기, 디벤조푸라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 및 벤조카바졸일렌기; 중에서 선택되고,

a는 1 또는 2인, 실리콘계 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

L₁이 하기 화학식 2-1 내지 2-8 중에서 선택된, 실리콘계 화합물:



Z₁ 내지 Z₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기; 및 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기; 중에서 선택되고;

d₁은 1 내지 4의 정수이고;

d₂는 1 내지 3의 정수이고;

d₃는 1 내지 6의 정수이고;

d₄는 1 내지 8의 정수이고;

*는 화학식 1의 Si와의 결합 사이트 또는 이웃한 L₁과의 결합 사이트이고;

*'는 화학식 1 중 카바졸의 "N"과의 결합 사이트 또는 이웃한 L₁과의 결합 사이트이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

R₁ 및 R₂가 서로 독립적으로, 탄소수 1 내지 60의 퍼플루오로알킬기인, 실리콘계 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

R_1 및 R_2 가 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 및 옥틸기 중에서 선택된, 실리콘계 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

R_1 및 R_2 가 서로 독립적으로, $-CF_3$, $-C_2F_5$, $-C_3F_7$, $-C_4F_9$, $-C_5F_{11}$ 및 $-C_6F_{13}$ 중에서 선택된 실리콘계 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

b 및 c가 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이 되, $b+c \geq 1$ 인, 실리콘계 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

R_3 및 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_1 - C_{10} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_1 - C_{10} 알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택된, 실리콘계 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

R_3 및 R_4 이 수소인, 실리콘계 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서,

R_{10} 이 C_1 - C_{10} 알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택된, 실리콘계 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서,

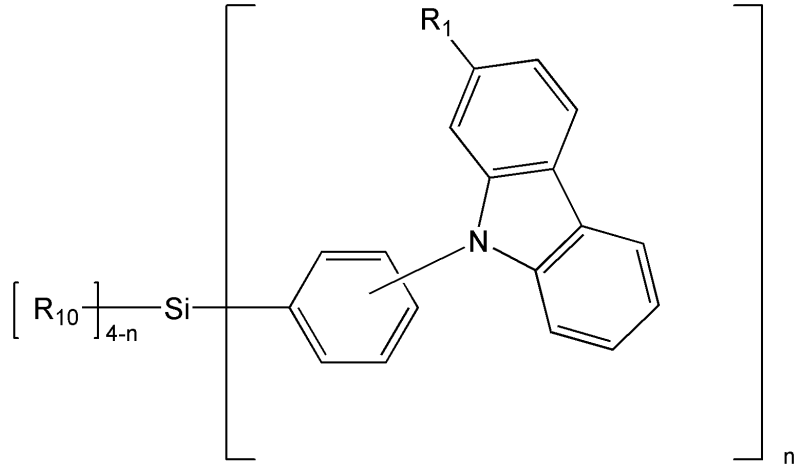
n이 2인, 실리콘계 화합물.

청구항 12

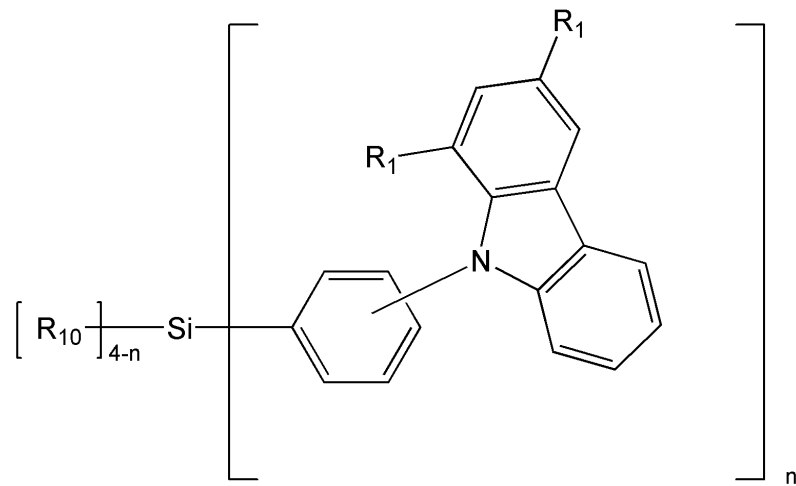
제1항에 있어서,

하기 화학식 1A 내지 1F 중 하나로 표시되는 실리콘계 화합물:

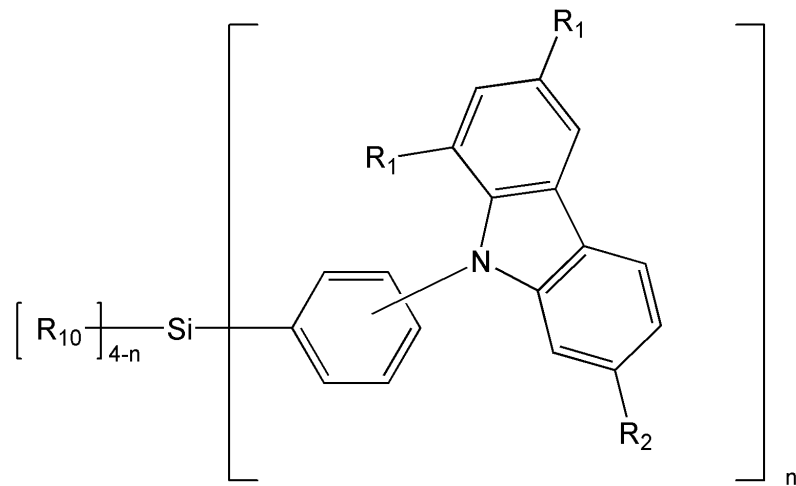
<화학식 1A>



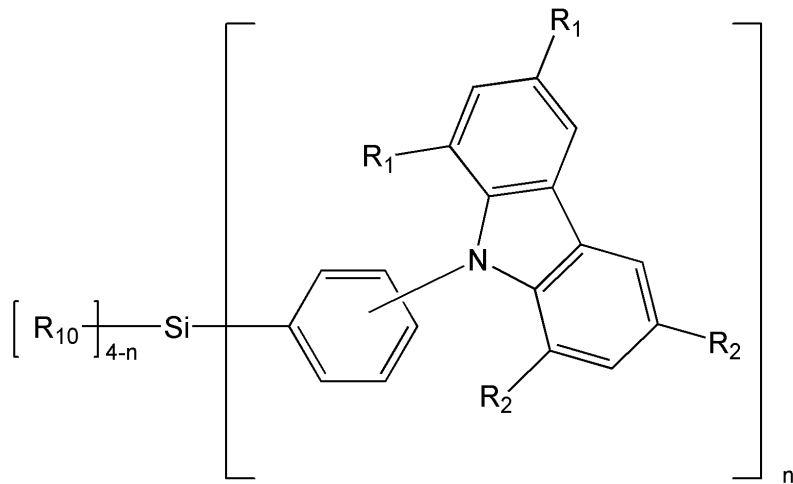
<화학식 1B>



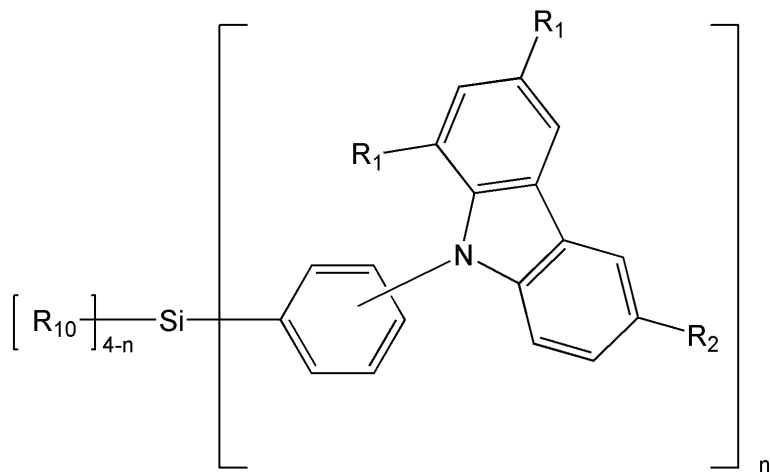
<화학식 1C>



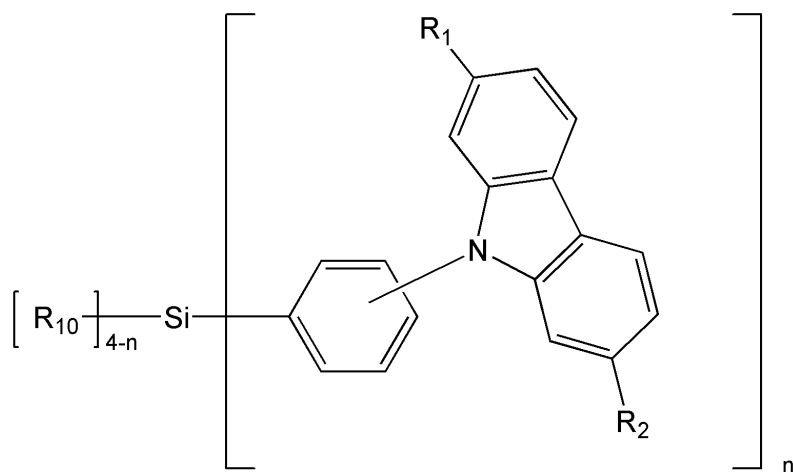
<화학식 1D>



<화학식 1E>



<화학식 1F>



상기 화학식 1A 내지 1F 중

R_1 및 R_2 가 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 및 옥틸기 중에서 선택되고;

R_{10} 이 C_1 - C_{10} 알킬기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진,

히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{10} 알킬기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택되고;

n은 2 내지 4 중에서 선택된 정수이다.

청구항 13

제12항에 있어서,

R_1 및 R_2 가 서로 독립적으로, $-CF_3$, $-C_2F_5$, $-C_3F_7$, $-C_4F_9$, $-C_5F_{11}$ 및 $-C_6F_{13}$ 중에서 선택되고, n은 2 인, 실리콘계 화합물.

청구항 14

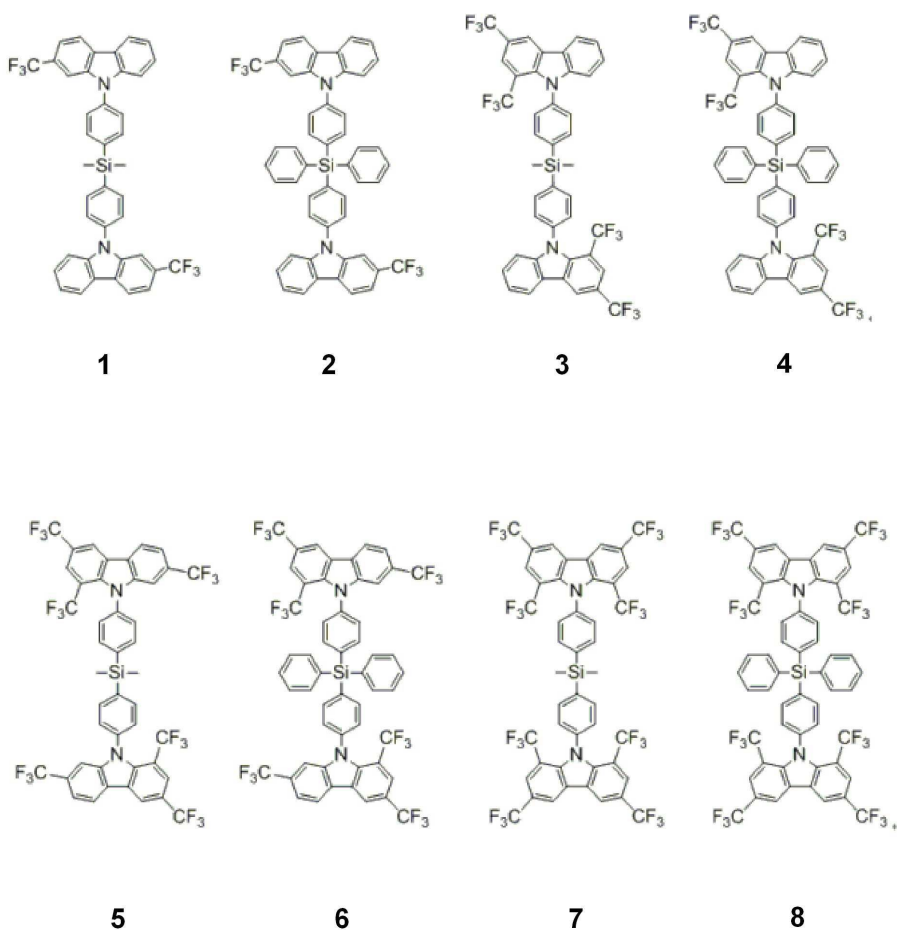
제1항에 있어서,

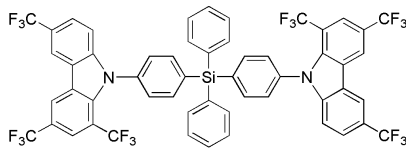
5.80eV 이상의 HOMO 레벨 절대값을 갖고, 2.20eV 이상의 LUMO 레벨 절대값을 갖는, 실리콘계 화합물.

청구항 15

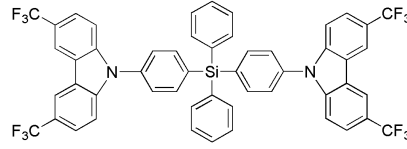
제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 10 중 하나인, 실리콘계 화합물:





9



10

청구항 16

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 실리콘계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 유기층이, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나의 층을 더 포함하고, ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 더 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 18

제17항에 있어서,

상기 발광층에 상기 실리콘계 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 발광층이 인광 방출 메커니즘에 의하여 청색광을 방출하는 청색 인광 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층 중 실리콘계 화합물이 호스트의 역할을 하는, 유기 발광 소자.

청구항 20

제17항에 있어서,

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

명세서

기술분야

[0001] 유기 발광 소자용 화합물 및 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[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, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

[0005] 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같

은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

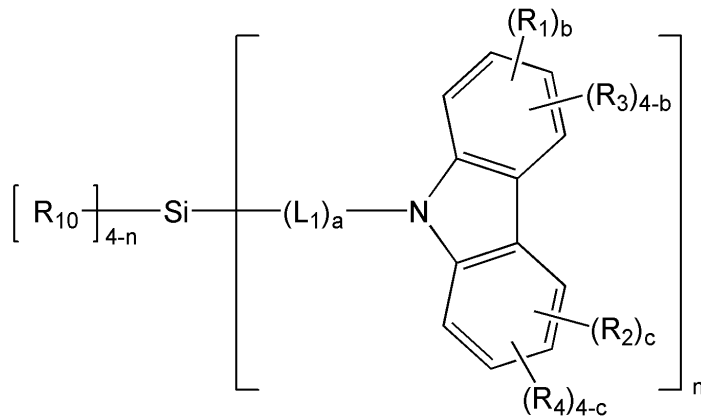
해결하려는 과제

[0006] 신규 구조를 갖는 실리콘계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0007] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] L₁은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기이고;

[0012] a는 1 내지 5의 정수이되, a가 2 이상일 경우 a개의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고;

[0013] R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 C₁-C₆₀알킬기이고;

[0014] b 및 c는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택되되, b+c≥1이고;

[0015] R₃ 및 R₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기; C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중에서 선택되고;

[0016] R₁₀은 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기 및 C₂-C₆₀알키닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염

중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기 및 C₂-C₆₀알키닐기; C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및 -N(Q₁₁)(Q₁₂) (여기서, Q₁₁ 및 Q₁₂는 서로 독립적으로, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴기임); 중에서 선택되고;

[0017] n은 2 내지 4의 정수 중에서 선택된다.

[0018] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 실리콘계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0019] 상기 실리콘계 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고색순도 및 장수명을 가질 수 있다.

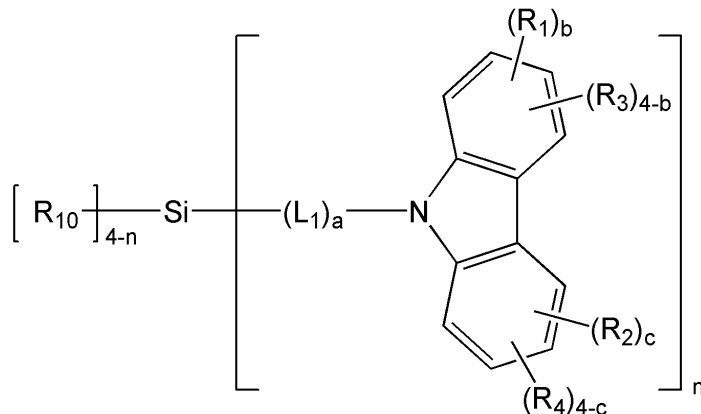
도면의 간단한 설명

[0020] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 상기 실리콘계 화합물 하기 화학식 1로 표시된다:

[0022] <화학식 1>



[0023]

[0024] 상기 화학식 1 중, L₁은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0025] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, L₁은,

[0026] i) 페닐렌기(phenylene), 펜타레닐렌기(pentalenylene), 인데닐렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphtylene), 아줄레닐렌기(azulenylene), 헵타레닐렌기(heptalenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), 아세나프틸렌기(acenaphtylene), 플루오레닐렌기(flourenylene), 스파이로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기(phenalenylene), 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 안트릴렌기(anthrylene), 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기(pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페릴레닐렌기(perylenylene), 펜타페닐렌기(pentaphenylene), 헥사세닐렌기(hexacenylene), 피롤일렌기(pyrrolylene), 이미다졸일렌기(imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 피리디닐렌기(pyridinylenylene), 피라지닐렌기(pyrazinylenylene), 피리미디닐렌기(pyrimidinylenylene), 피리다지닐렌기(pyridazinylenylene), 이소인돌일렌기(isoindolylenylene), 인돌일렌기(indolylenylene), 인다졸일렌기

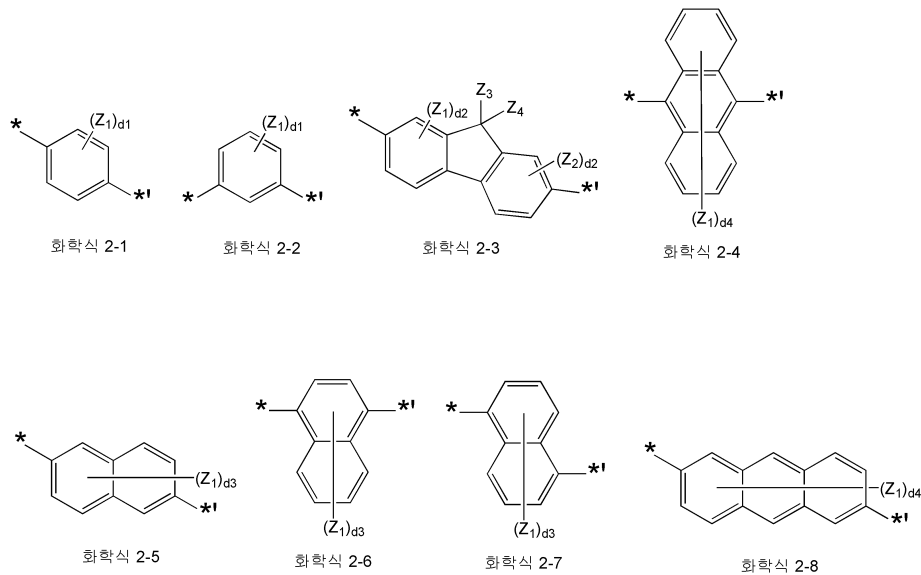
(indazolylene), 푸리닐렌기(purinylen), 퀴놀리닐렌기(quinolinylen), 벤조퀴놀리닐렌기(benzoquinolinylen), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphthyridinylen), 퀴녹살리닐렌기(quinoxalinylen), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylen), 시놀리닐렌기(cinnolinylen), 카바졸일렌기(carbazolylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylen), 아크리디닐렌기(acridinylen), 페난트롤리닐렌기(phenanthrolinylen), 페나지닐렌기(phenazinylen), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 푸라닐렌기(furanylen), 벤조푸라닐렌기(benzofuranylen), 티오펜일렌기(thiophenylene), 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 벤조티아졸일렌기(benzothiazolylene), 이소옥사졸일렌기(isoxazolylene), 옥사졸일렌기(oxazolylene), 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), 트리아지닐렌기(triazinylen), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 디벤조푸라닐렌기(dibenzofuranylen), 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 및 벤조카바졸일렌기; 및

[0027]

ii) 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기; C_6-C_{20} 아릴기 및 C_2-C_{20} 헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{20} 아릴기 및 C_2-C_{20} 헤테로아릴기; 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기로 치환된 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵타레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트릴렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 피롤일렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조옥사졸일렌기, 벤조이미다졸일렌기, 푸라닐렌기, 벤조푸라닐렌기, 티오펜일렌기, 벤조티오펜일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 벤조티아졸일렌기, 이소옥사졸일렌기, 옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 벤조옥사졸일렌기, 디벤조푸라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 및 벤조카바졸일렌기; 중에서 선택될 수 있다.

[0028]

예를 들어, 상기 화학식 1 중 L_1 은 하기 화학식 2-1 내지 2-8 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0029]

[0030]

상기 화학식 2-1 내지 2-8 중 Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기; 및 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기; 중에서 선택되고; d_1 은 1 내지 4의 정수이고; d_2 는 1 내지 3의 정수이고; d_3 는 1 내지 6의 정수이고; d_4 는 1 내지 8의 정수이고; $*$ 는 화학식 1의 Si와의 결합 사이트 또는 이웃한 L_1 과의 결합 사이트이고; $*$ '는 화학식 1 중 카바졸의 "N"과의 결합 사이트 또는 이웃한 L_1 과의 결합 사이트이다.

[0031]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, L_1 은 상기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0032]

상기 화학식 1 중 a 는 L_1 의 개수를 나타낸 것으로서, 1 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. 상기 a 가 2 이상일 경우 a 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, a 가 1 또는 2일 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 a 는 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0033]

상기 화학식 1 중, R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기이다. 상기 적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기는 직쇄형 또는 분지형일 수 있다.

[0034]

예를 들어, 상기 화학식 1 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 탄소수 1 내지 60의 퍼플루오로알킬기, 구체적으로, 탄소수 1 내지 20의 퍼플루오로알킬기일 수 있다.

[0035]

다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 및 옥틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0036]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 모든 수소가 -F로 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 및 옥틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0037]

또 다른 구현예에 따르면, R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, $-CF_3$, $-C_2F_5$, $-C_3F_7$, $-C_4F_9$, $-C_5F_{11}$ 및 $-C_6F_{13}$ 중에서 선택될 수 있다.

[0038]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 R_1 및 R_2 는 서로 동일할 수 있다.

[0039]

상기 화학식 1 중 b 는 R_1 의 개수를 나타낸 것이고, c 는 R_2 의 개수를 나타낸다. 상기 b 및 c 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수 중에서 선택되되, $b+c \geq 1$ 이다. 즉, b 와 c 가 동시에 0인 경우는 제외된다. 따라서, 화학식 1은 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 반드시 존재한다.

- [0040] b가 2 이상일 경우, b개의 R_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, c가 2 이상일 경우, c개의 R_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0041] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 b 및 c는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이되, $b+c \geq 1$ 이다.
- [0042] 상기 화학식 1 중, R_3 및 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기; C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴싸이오기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴싸이오기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 중에서 선택된다.
- [0043] 일 구현예에 따르면, 상기 R_3 및 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{10} 알킬기 및 C_1-C_{10} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{10} 알킬기 및 C_1-C_{10} 알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0044] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_3 및 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중에서 선택될 수 있다.
- [0045] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_3 및 R_4 은 모두 수소일 수 있다.
- [0046] 상기 화학식 1 중 R_{10} 은 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기 및 C_2-C_{60} 알키닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기 및 C_2-C_{60} 알키닐기; C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_3-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 및 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ (여기서, Q_{11} 및 Q_{12} 는 서로 독립적으로,

C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴기임); 중에서 선택될 수 있다.

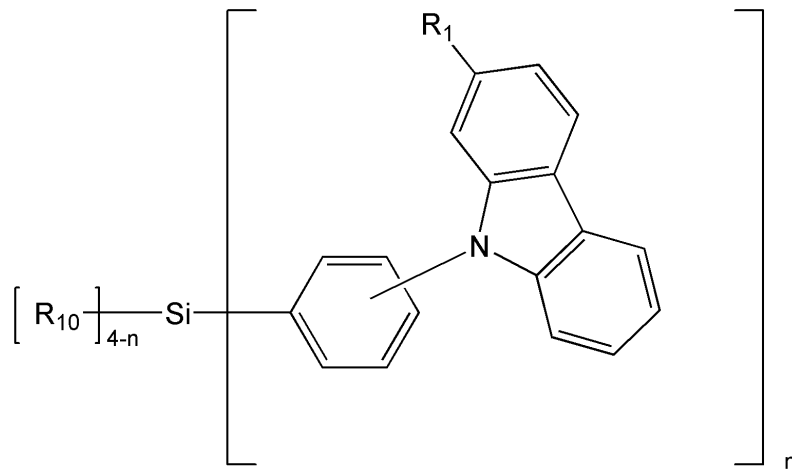
[0047] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, R₁₀은 C₁-C₁₀알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₁₀알킬기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택될 수 있다.

[0048] 상기 화학식 1 중, n은 2 내지 4의 정수 중에서 선택된다.

[0049] 일 구현예에 따르면, 상기 n은 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

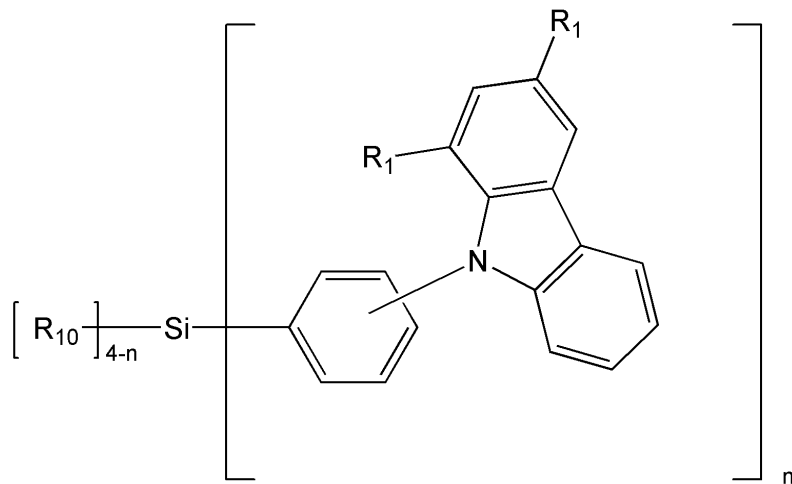
[0050] 상기 실리콘계 화합물은, 하기 화학식 1A 내지 1F 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0051] <화학식 1A>



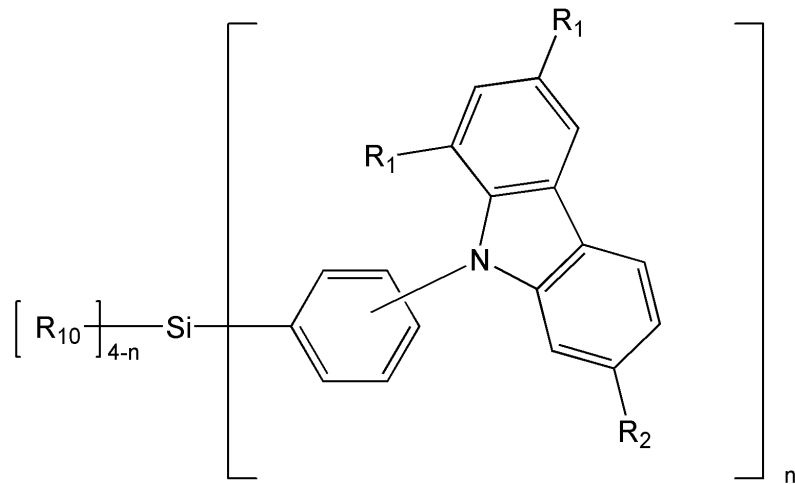
[0052]

[0053] <화학식 1B>



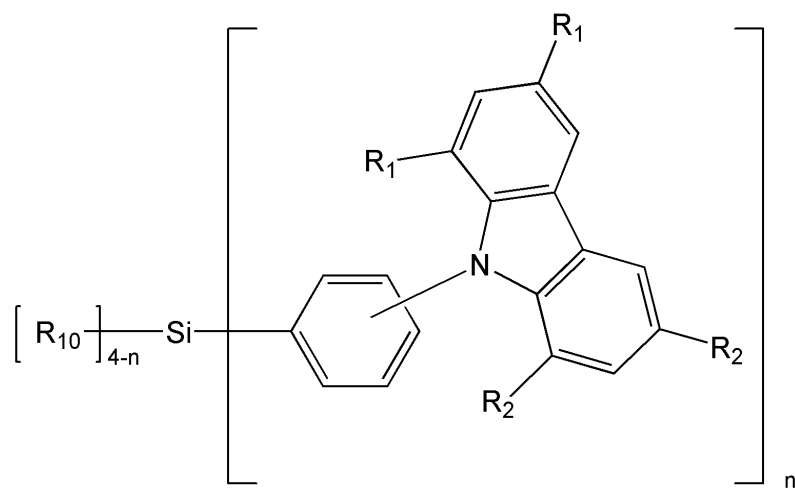
[0054]

[0055] <화학식 1C>



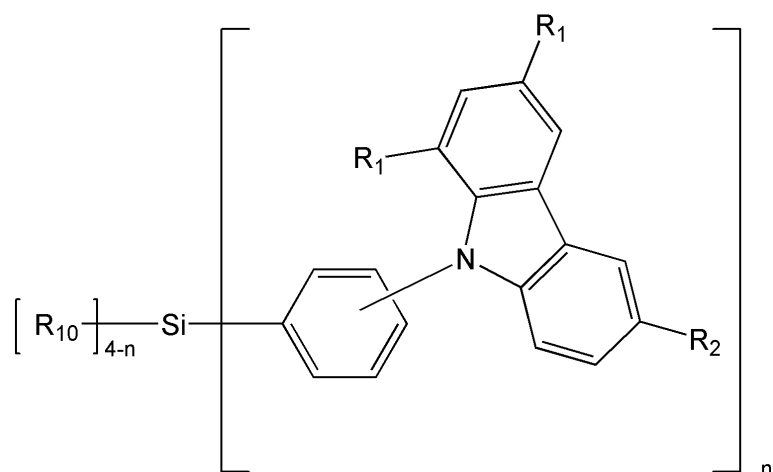
[0056]

[0057] <화학식 1D>



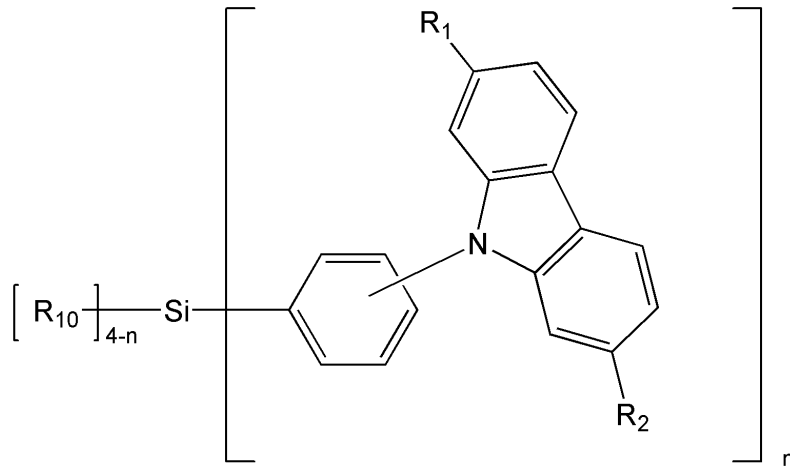
[0058]

[0059] <화학식 1E>



[0060]

[0061] <화학식 1F>



[0062]

[0063] 상기 화학식 1A 내지 1F 중 R_1 , R_2 , R_{10} 및 n 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0064]

예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1F 중, R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 -F로 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 및 옥틸기 중에서 선택되고; R_{10} 은 C_1 - C_{10} 알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기; 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀일기, 및 이소퀴놀일기 중 적어도 하나로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기, 페난쓰레닐기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택되고; n 은 2 내지 4의 정수일 수 있다.

[0065]

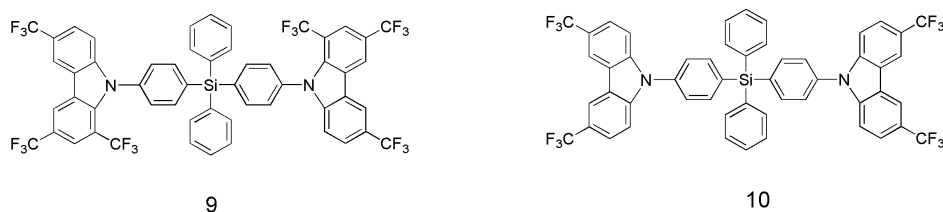
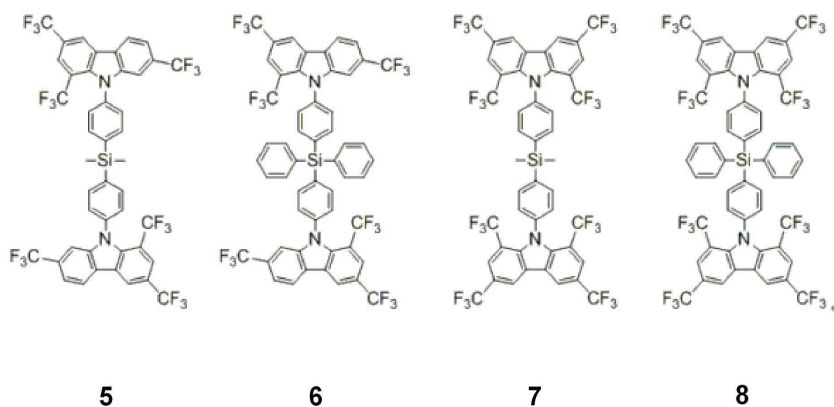
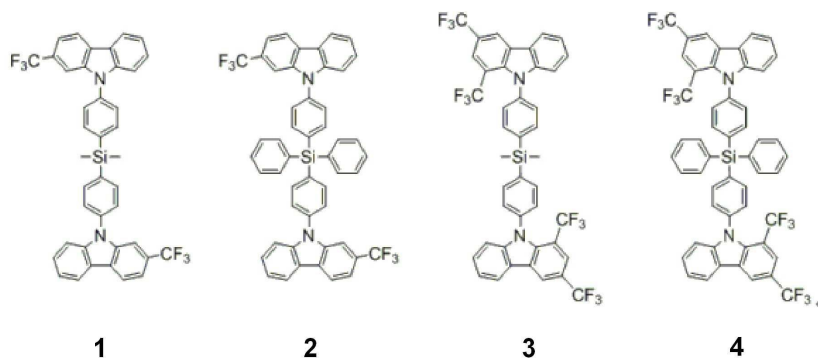
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A 내지 1F 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, $-CF_3$, $-C_2F_5$, $-C_3F_7$, $-C_4F_9$, $-C_5F_{11}$ 및 $-C_6F_{13}$ 중에서 선택되고; R_{10} 은 C_1 - C_{10} 알킬기, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중에서 선택되고; n 은 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물은 5.80eV 이상의 HOMO 에너지 레벨 절대값을 갖고, 2.20eV 이상의 LUMO 에너지 레벨 절대값을 가질 수 있다. 상기 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨 절대값 및 이로부터 계산되는 에너지 밴드갭(E_g)는 유기 발광 소자용 재료, 예를 들면, 발광층 중 호스트로서 적합한 수치 범위로서, 이는 후술하는 평가예로부터 확인할 수 있는 것이다.

[0067]

구체적으로, 상기 실리콘계 화합물은, 하기 화합물 1 내지 10 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



상기 화학식 1의 실리콘계 화합물 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 "적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기" 중에서 선택된다. 상기 R_1 의 개수는 b 로 표시되고, R_2 의 개수는 c 로 표시되는데, b 및 c 는 0 내지 4의 정수에서 선택되되, $b+c \geq 1$ 이다. 즉, b 와 c 가 동시에 0인 경우는 제외된다. 따라서, 상기 화학식 1의 실리콘계 화합물의 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 반드시 카바줄기에 치환되어 있으므로, 상기 화학식 1의 실리콘계 화합물의 "카바줄기"에는 "적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기"가 반드시 치환되어 있다.

상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, "적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기(예를 들면, $-CF_3$ 등)"이므로, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물은 우수한 열안정성을 가질 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 효율 특성을 가질 수 있다.

예를 들어, 상기 R_1 및 R_2 가 -F라는 점을 제외하고는 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물과 동일한 가상의 화합물을 가정해 본다면, 상기 가상의 화합물(예를 들면, 비교예 3의 화합물 C 참조)은 반응성이 지나치게 높은 -F를 포함하므로 합성 수율이 낮고 합성 후 열 안정성도 낮다.

또한, 상기 R_1 및 R_2 는 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물 중 "카바줄기"에 치환되어 있으므로, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물의 LUMO 에너지 레벨의 절대값이 커질 수 있다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물은 유기 발광 소자용 재료, 예를 들면, 청색 인광 도펀트와 함께 사용되는 청색 인광 호스트로서 유용하게 사용될 수 있다.

예를 들어, 상술한 바와 같은 R_1 및 R_2 를 포함하지 않고 "적어도 하나의 -F로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기"가 L_1 에 치환

되어 있다는 점을 제외하고는 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물과 동일한 가상의 화합물(예를 들면, 하기 비교예 2의 화합물 B 참조)을 가정해 본다면, 상기 가상의 화합물은 R_1 및 R_2 를 포함하지 않으므로 상대적으로 작은 LUMO 에너지 레벨 절대값을 갖게 된다. 따라서, 상기 가상의 화합물은 상대적으로 작은 에너지 밴드 갭(Eg) (HOMO 에너지 레벨 절대값과 LUMO 에너지 레벨 절대값의 차)을 가지므로, 유기 발광 소자용 재료, 예를 들면, 청색 인광 도펀트와 함께 사용되는 청색 인광 호스트로서는 부적합할 수 있다.

- [0075] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 고구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명의 효과를 가질 수 있다.
- [0076] 상기 화학식 1을 갖는 실리콘계 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0077] 상기 화학식 1의 실리콘계 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 실리콘계 화합물은 발광층에 사용될 수 있다.
- [0078] 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층을 포함하되, 상기 유기층은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 실리콘계 화합물을 1종 이상 포함, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0079] 본 명세서 중 "(유기층이) 실리콘계 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 실리콘계 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 실리콘계 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0080] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 실리콘계 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 실리콘계 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 발광층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0081] 상기 유기층이, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나의 층을 더 포함하고, ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.
- [0082] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다.
- [0083] 상기 유기층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 실리콘계 화합물이 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 발광층 중 실리콘계 화합물은 호스트의 역할을 하고, 상기 발광층은 인광 도펀트 또는 형광 도펀트를 더 포함할 수 있다.
- [0084] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 상기 실리콘계 화합물이 존재하되, 상기 발광층은 인광 방출 메커니즘에 의하여 청색광을 방출하는 청색 인광 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층 중 실리콘계 화합물이 호스트의 역할을 할 수 있다.
- [0085] 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.
- [0086] 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.
- [0087] 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(SnO_2), 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.
- [0088] 상기 제1전극(13)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(13)은

ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0089]

상기 제1전극(13) 상부로는 유기층(15)이 구비되어 있다.

[0090]

상기 유기층(15)은 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있다.

[0091]

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

[0092]

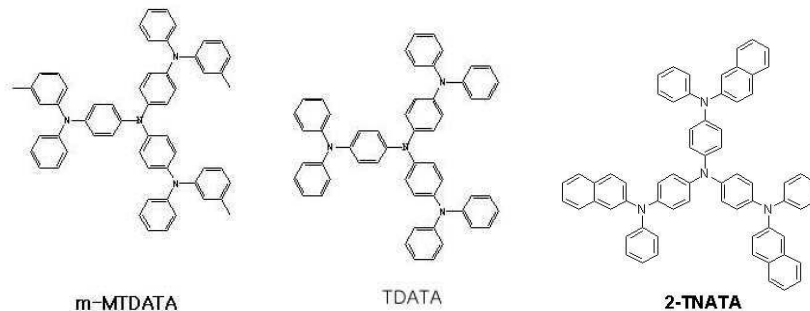
진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500 °C, 진공도 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0093]

스핀 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.

[0094]

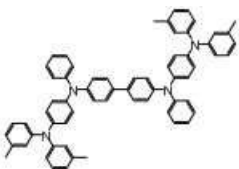
정공 주입 물질로는 공지된 정공 주입 물질을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 물질로는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid: 폴리아닐린/캄페술폰산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0095]

<DNTPD>

[0096]



[0097]

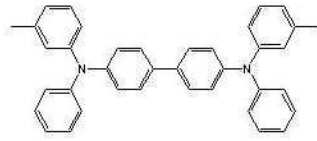
[0098]

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

[0099]

다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 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.

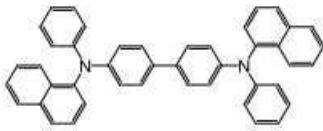
[0100] 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TPD

[0101]

[0102] <NPB>



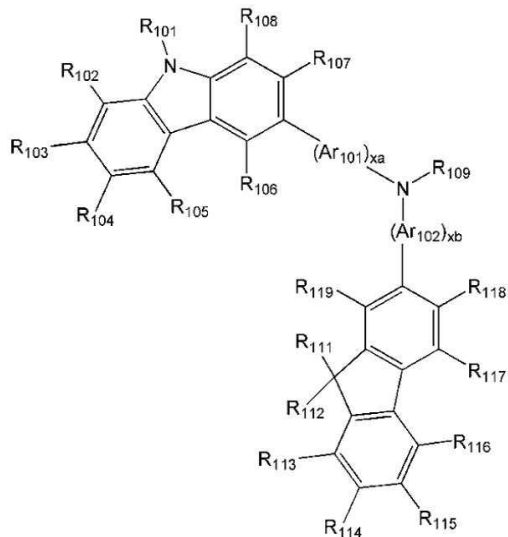
[0103]

[0104] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0105] 상기 H-기능성(정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층)에는 상술한 바와 같은 정공 주입층 물질 및 정공 수송층 물질 중에서 1 이상의 물질이 포함될 수 있으며, 상기 H-기능층의 두께는 약 500Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 H-기능층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 및 수송 특성을 얻을 수 있다.

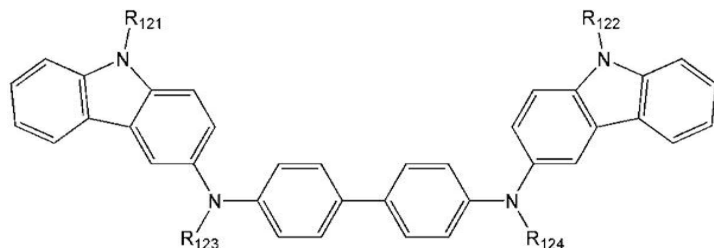
[0106] 한편, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 한 층은 하기 화학식 300으로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 301으로 표시되는 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다:

[0107] <화학식 300>



[0108]

[0109] <화학식 301>



[0110]

[0111] 상기 화학식 300 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기일 수 있다. 예를 들어, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트릴렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₃-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기 중 적어도 하나로 치환된 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트릴렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 중 하나일 수 있다.

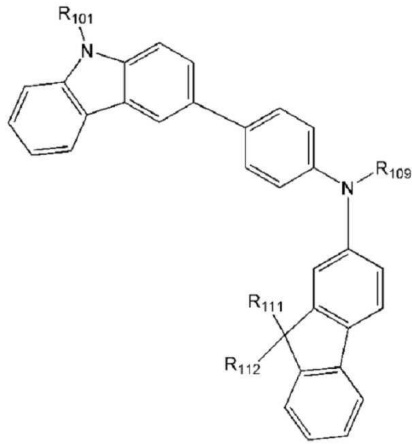
[0112] 상기 화학식 300 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0113] 상기 화학식 300 및 301 중, R₁₀₁ 내지 R₁₀₈, R₁₁₁ 내지 R₁₁₉ 및 R₁₂₁ 내지 R₁₂₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기일 수 있다. 예를 들어, 상기 R₅₁ 내지 R₅₈, R₆₁ 내지 R₆₉ 및 R₇₁ 및 R₇₂은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0114] 상기 화학식 300 중, R₁₀₉는, 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 바이페닐기; 피리딜기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 바이페닐기 및 피리딜기; 중 하나일 수 있다.

[0115] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 300으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 300A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

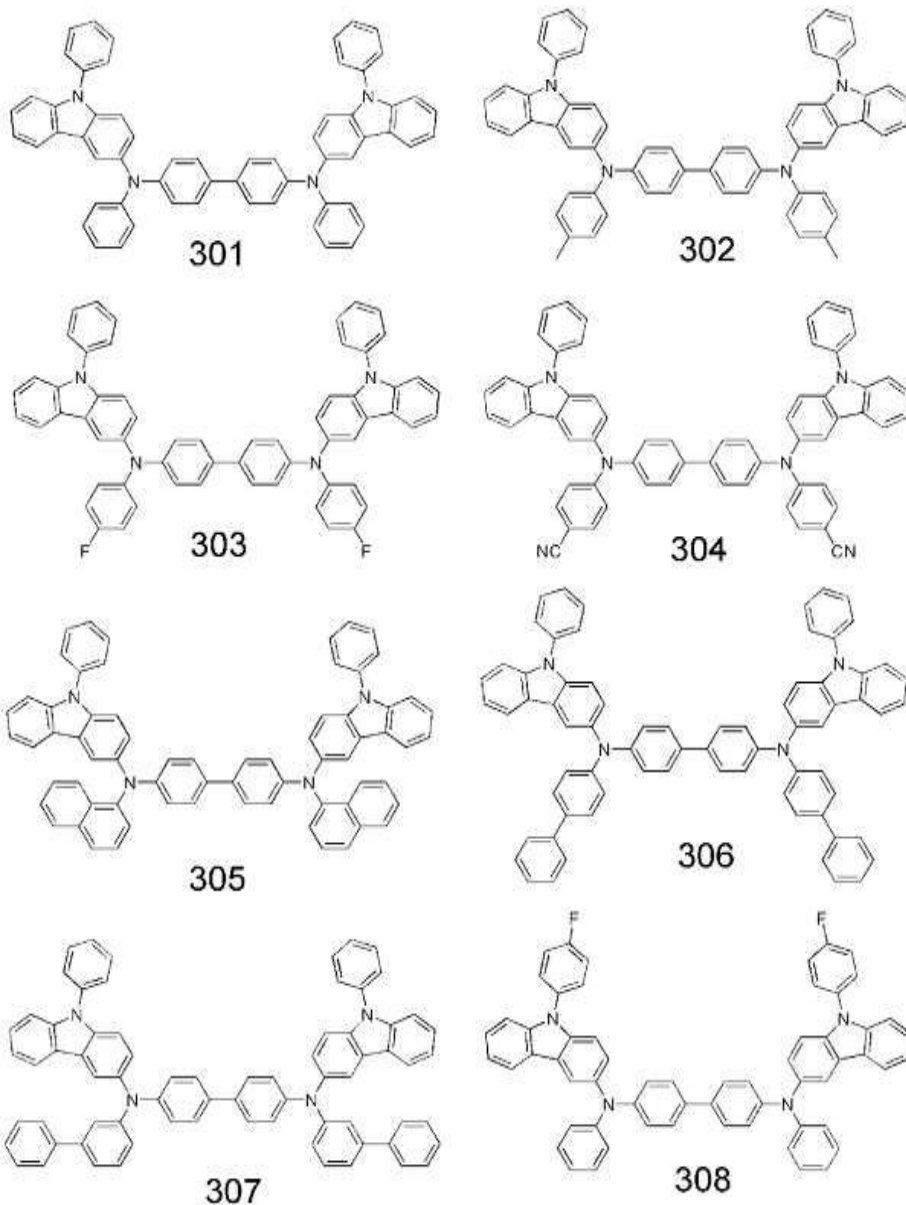
[0116] <화학식 300A>



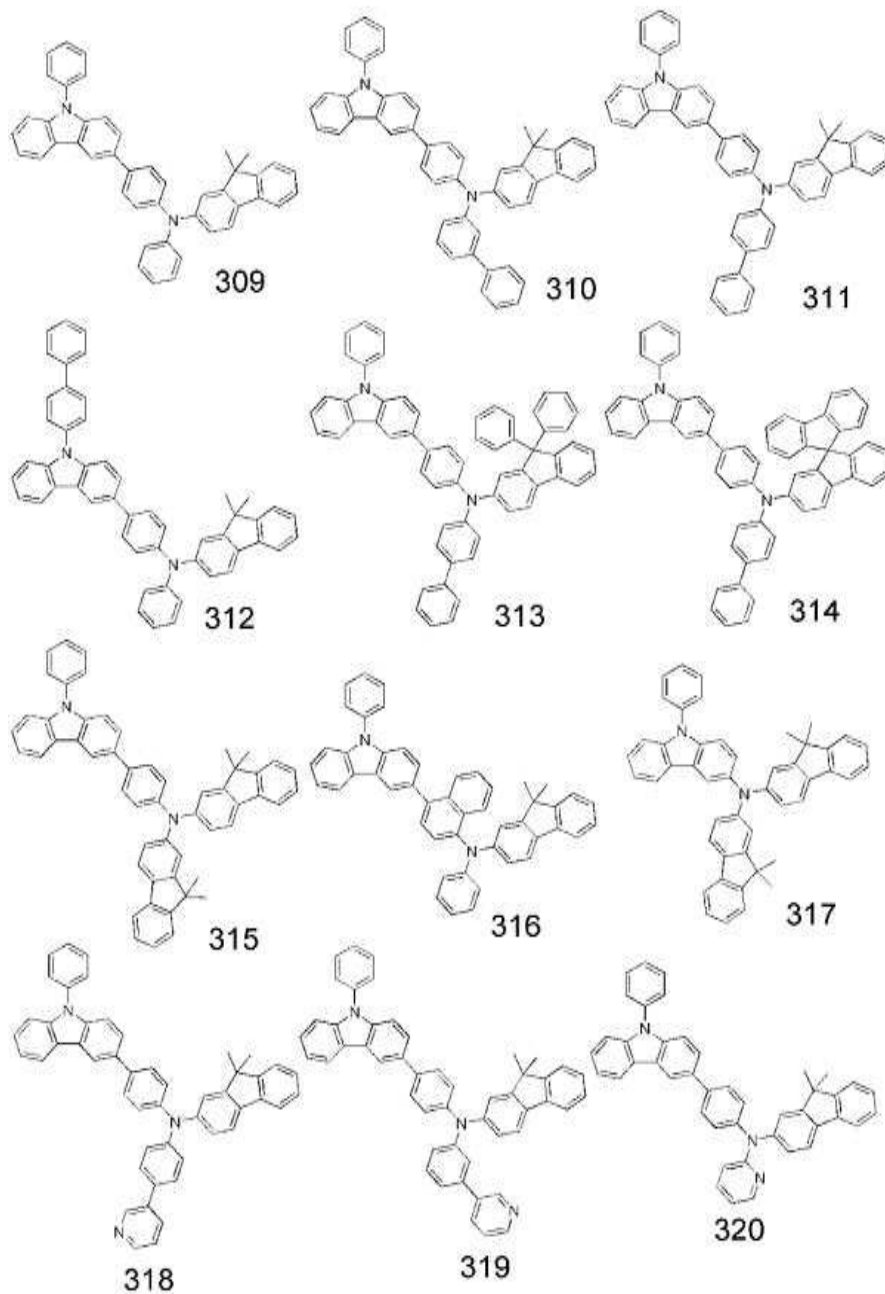
[0117]

[0118] 상기 화학식 300A 중, R₁₀₁, R₁₁₀, R₁₂₁ 및 R₁₀₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0119] 예를 들어, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 한 층은 하기 화합물 301 내지 320 중 하나 이상을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0120]



[0121]

[0122]

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 공지된 정공 주입 물질, 공지된 정공 수송 물질 및/또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

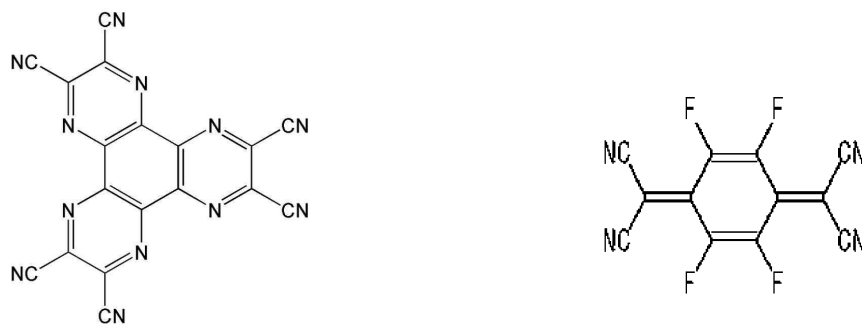
[0123]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀸온 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀸온 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 200 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0124]

<화합물 200>

<F4-TCNQ>



[0125]

[0126]

상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0127]

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나와 상기 발광층 사이에는 버퍼층이 개재될 수 있다. 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할 또는 발광층과의 에너지 레벨을 조정하는 역할을 수 있다. 상기 버퍼층은 공지된 정공 주입 재료, 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 또는, 상기 버퍼층은 버퍼층 하부에 형성된 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층에 포함된 물질 중 하나와 동일한 물질 또는 호스트 물질을 포함할 수 있는 등, 다양한 변형에 가능하다.

[0128]

이어서, 정공 수송층, H-기능층 또는 버퍼층 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.

[0129]

상기 발광층은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물을 포함할 수 있다. 상기 발광층은 발광 물질로서, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물만을 포함하거나, 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물 외에 공지의 호스트 및 도펀트 중 1종 이상의 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0130]

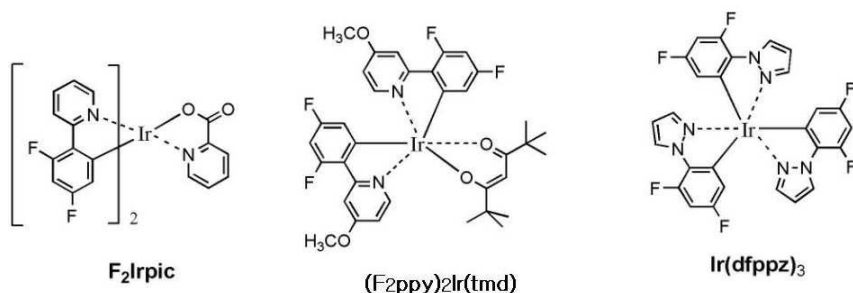
상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 2 이상이 적층되어 백색광을 방출할 수도 있다.

[0131]

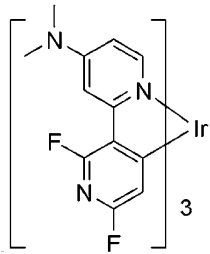
상기 발광층은 공지된 임의의 도펀트를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 적색 형광, 적색 인광, 녹색 형광, 녹색 인광, 청색 형광 또는 청색 인광을 방출할 수 있는 공지의 임의의 도펀트를 포함할 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 실리콘계 화합물을 호스트로서 포함하고, 청색 인광을 방출하는 청색 인광 도펀트를 더 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0132]

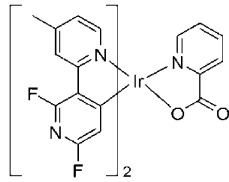
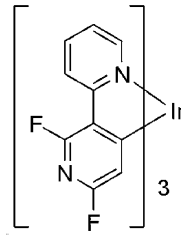
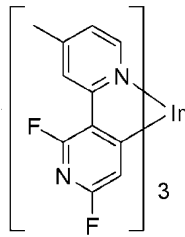
예를 들어, 청색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



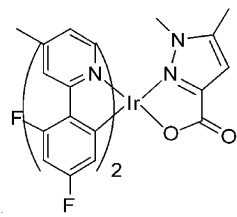
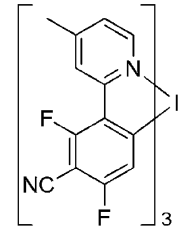
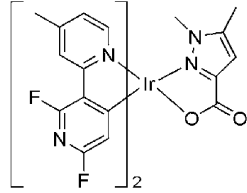
[0133]



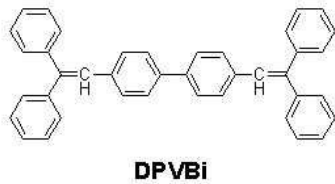
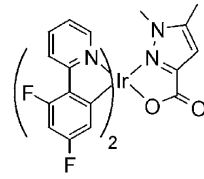
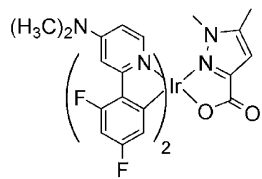
[0134]



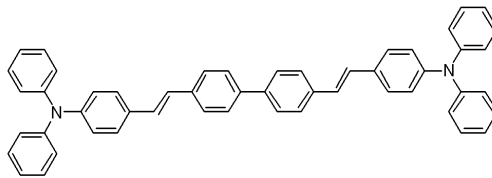
[0135]



[0136]

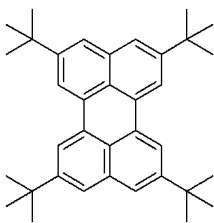


[0137]



[0138]

DPAVB



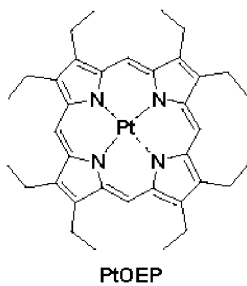
[0139]

[0140]

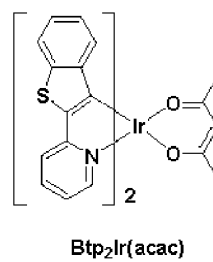
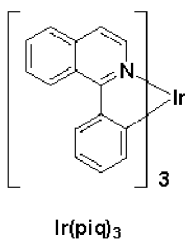
TBPe

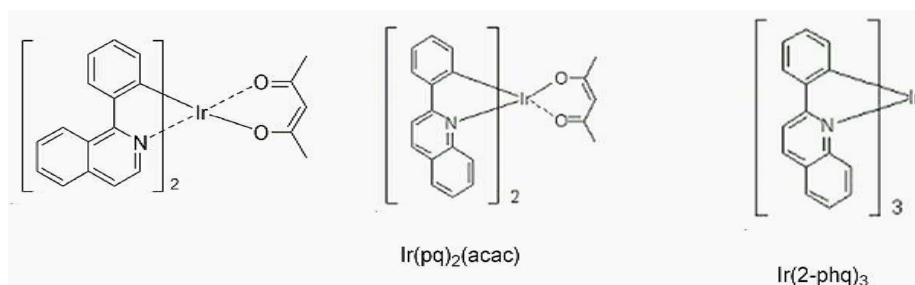
[0141]

예를 들어, 적색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 상기 적색 도펀트로서, 후술한 DCM 또는 DCJTb를 사용할 수도 있다.

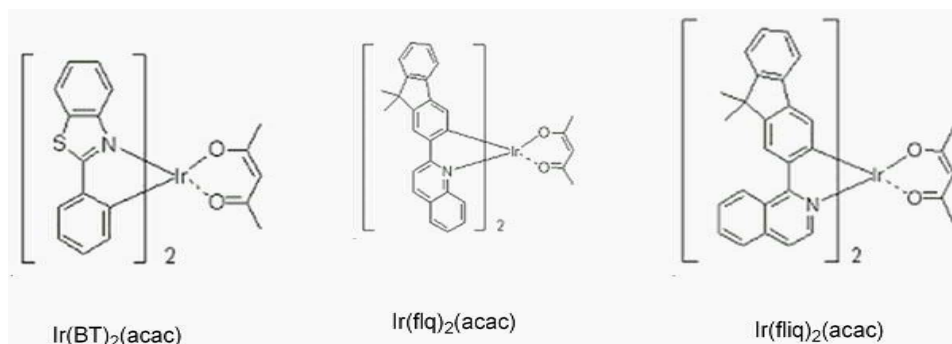


[0142]

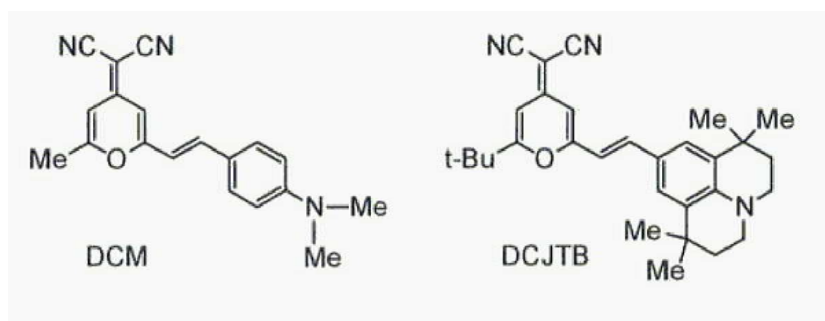




[0143]



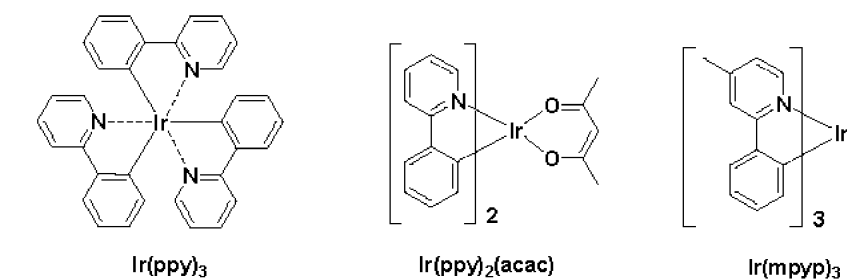
[0144]



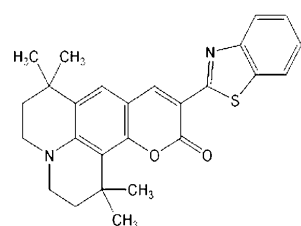
[0145]

[0146]

예를 들어, 녹색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는 녹색 도펀트로서, 하기 C545T를 사용할 수 있다.



[0147]



[0148]

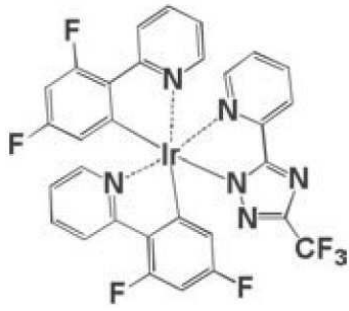
[0149]

이외에, 하기와 같은 도펀트가 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0150]

<FIrtaz>

<FIrN4>



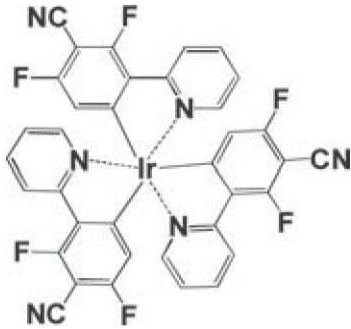
[0151]

[0152]

<FCNIr>



<FCNIrpic>



[0153]

[0154]

<PCF3Irpic>



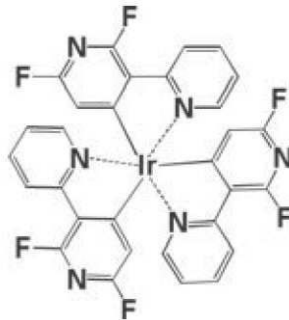
<Ir(dfpppy)₃>



[0155]

[0156]

<Fir6>



[0157]

[0158]

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

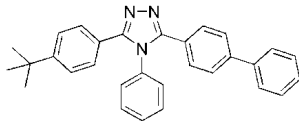
[0159]

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.

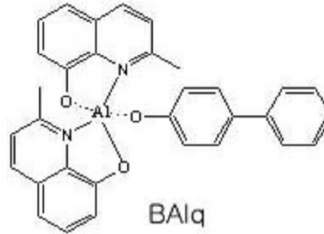
[0160]

다음으로 발광층 상부에 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스퍼터링법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용

하여 형성한다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀸올린 유도체, 특히 트리스(8-퀸올리노레이트)알루미늄(Alq₃), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀸올리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Beq₂), ADN, 화합물 201, 화합물 202, TmPyPB 등과 같은 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



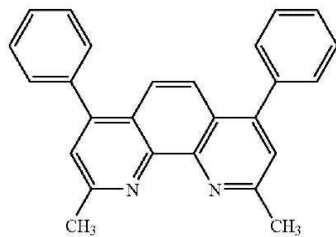
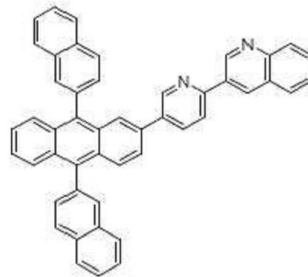
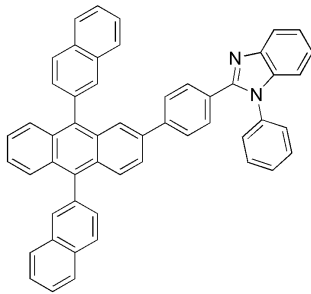
TAZ



BAlq

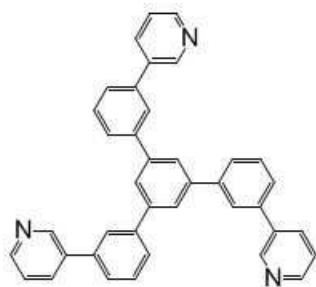
<화합물 201>

<화합물 202>



BCP

<TmPyPB>

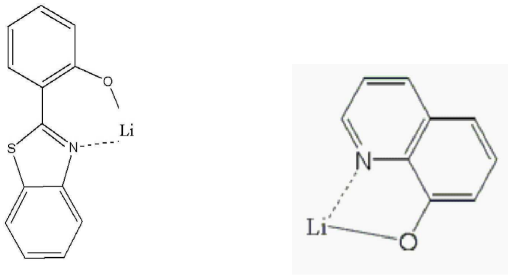


상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

또는, 상기 전자 수송층은 공지의 전자 수송성 유기 화합물 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0170] 상기 금속-함유 화합물은 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0171] <화합물 203> <LiQ>



[0172]

[0173] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0174] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

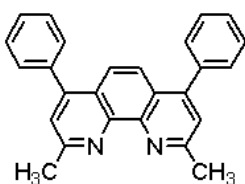
[0175] 상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0176] 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.

[0177] 이와 같은 유기층(15) 상부로는 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성을 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.

[0178] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0179] 또한, 발광층에 인광 도펀트를 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이 또는 H-기능층과 발광층 사이에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 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. 예를 들면, 하기와 같은 BCP를 정공 저지층 재료로 사용할 수 있다.



BCP

[0180]

[0181] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 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.

- [0182] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.
- [0183] 본 명세서 중, 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기(또는 C_1-C_{60} 알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등과 같은 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기를 들 수 있고, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기는 상기 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자가 중수소, 할로겐 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, 및 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ (여기서, Q_{11} 내지 Q_{15} 는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_5-C_{60} 아릴기, 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.
- [0184] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기(또는 C_1-C_{60} 알콕시기)는 $-OA$ (단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0185] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기(또는 C_2-C_{60} 알케닐기)는 상기 비치환된 C_2-C_{60} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0186] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기(또는 C_2-C_{60} 알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C_2-C_{60} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에티닐(ethynyl), 프로피닐(propynyl), 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0187] 본 명세서 중 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 아릴기 및 아릴렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0188] 상기 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기의 예로는 페닐기, C_1-C_{10} 알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C_1-C_{10} 알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α , α -디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C_1-C_{10} 알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C_1-C_{10} 알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예와 상기 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.
- [0189] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C_2-

C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0190] 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

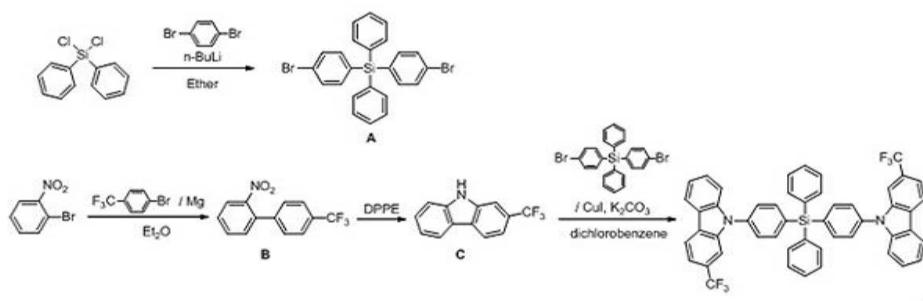
[0191] 상기 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기는 ??OA₂(여기서, A₂는 상기 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기는 ??SA₃(여기서, A₃는 상기 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0192] [실시예]

[0193] **합성예 1 : 화합물 2의 합성**

[0194] 하기 반응식 1에 따라 화합물 2를 합성하였다:

[0195] <반응식 1>



화합물 2

[0198] **중간체 A의 합성**

[0199] 500 mL 3구 플라스크에 1,4-디브로모벤젠(1,4-dibromobenzene) (11.8 g, 50 mmol)와 정제된 디에틸 에테르(diethyl ether) (100 mL)를 넣고 N₂ 기류 하에서 교반 한다. 반응 혼합물을 냉각 중탕 (EtOAc/Liq-N₂ bath.)을 사용하여 -78℃로 낮추고 n-BuLi (2.5 M, 10 mL, 25 mmol)을 가하였다. 질소 기류 하에서 1시간 동안 교반한 후 디클로로페닐실란(dichlorodiphenylsilane) (6.33 g, 25 mmol)를 넣고 천천히 온도를 올려 실온에서 12시간 교반 시킨 후 물 (100 mL)을 가하여 반응을 종결시켰다. 디에틸 에테르(Diethyl ether) (100 ml x 3)로 추출한 다음 무수 MgSO₄를 사용하여 수분을 제거한 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 컬럼 크로마토그래피(n-hexane/ EA ; 20/1)로 분리하여 흰색 고체인 중간체 A (10.1g, 81.6%)를 수득하였다.

[0200] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 7.53 (m, 8H), 7.41 (m, 10H).

[0201] **중간체 B의 합성**

[0202] 250 mL 3구 플라스크에 Mg (1.2 g, 49.5 mmol)과 정제된 디에틸 에테르(diethyl ether) (80 mL)를 넣고, ice-bath을 이용하여 0℃로 낮추고, 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)benzene) (11.1 g, 49.5 mmol)를 천천히 가하였고, 1시간동안 교반시켜, Grignard 시약을 만들었다. 500 mL 3구 플라스크에 1-브로모-2-니트로벤젠(1-bromo-2-nitrobenzene) (10 g, 49.5 mmol)와 Ni(dppp)Cl₂ (0.5 g, 1 mmol)와 정

제된 디에틸 에테르(diethyl ether) (200 mL)를 넣고, ice-bath을 이용하여 반응물을 온도를 0℃로 유지시키면서 교반하고, 상기 Grignard 시약을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반시키고, 2N HCl을 가하여 반응을 종결시켰다. Ethyl acetate (250 mL)로 추출한 후 다음 무수 MgSO₄를 사용하여 수분을 제거한 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 컬럼 크로마토그래피 (petroleum ether/ EA ; 7/1)로 분리하여 노란색 고체인 중간체 B (7.1 g, 54 %)을 수득하였다.

[0203] ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂) d 7.98 (dd, 1H), 7.75-7.71 (m, 3H), 7.63 (m, 1H), 7.56-7.47(m, 3H).

[0204] 중간체 C의 합성

[0205] 10 mL 2구 플라스크에 2-니트로-4'-트리플루오로메틸비페닐(2-nitro-4'-trifluoromethylbiphenyl) (중간체 B) (2g, 7.49 mmol)과 1,2-bis(diphenylphosphino)ethane (DPPE) (3.24 g, 8.24 mmol)를 넣고 N₂ 기류하에서 150℃에서 5시간 동안 반응시킨 후 실온으로 냉각시킨다. 컬럼 크로마토그래피 (petroleum ether/ EA ; 2/1)로 분리하여 흰색 고체인 중간체 C (1.5 g, 85 %)을 수득하였다.

[0206] ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂) d 11.64 (s, 1H), 8.34 (d, 1H), 8.23 (d, 1H), 7.82 (s, 1H), 7.60 (d, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.24 (t, 1H).

[0207] 화합물 2의 합성

[0208] 100 mL 2구 플라스크에 2-(트리플루오로메틸)-9H-카바졸(2-(trifluoromethyl)-9H-carbazole) (중간체 C) (1 g, 4.3 mmol), 디브로모페닐디페닐실란(dibromophenyldiphenylsilane) (중간체 A) (0.99 g, 2.0 mmol), CuI (20 mg, 0.1mmol), 18-crown-6 ether (40 mg, 0.15 mmol), K₂CO₃(0.41 g, 3 mmol)를 넣고 N₂ 기류하에서 30분 동안 교반한 후 1,2-디클로로벤젠(1,2-dichlorobenzene) (4 mL)를 넣고, 180℃에서 48 시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트(Ethyl acetate) (100 mL)로 추출한 후 다음 무수 MgSO₄를 사용하여 수분을 제거한 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 컬럼 크로마토그래피 (petroleum ether/ n-hexane ; 7/1)로 분리하여 흰색 고체인 화합물 2 (0.76 g, 47 %)을 수득하였다.

[0209] ¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆) d 8.52 (d, 2H), 8.40 (d, 2H), 7.93 (d, 4H) 7.83 (d, 4H), 7.73-7.66 (m, 8H), 7.63-7.55 (m, 10H), 7.42-7.37 (m, 2H). MS(FAB) m/z 803.22 [(M+1)⁺]

[0210] 평가예 1: 화합물 2의 특성 평가

[0211] 화합물 2의 열적 특성 평가

[0212] 화합물 2에 대하여 TGA(Thermo Gravimetric Analysis) 및 DSC(Differential Scanning Calorimetry)를 이용하여 열분석 (N₂ 분위기, 온도구간 : 상온~ 600℃ (10℃/min)-TGA , 상온에서 400℃까지-DSC, Pan Type : Pt Pan in 일회용 Al Pan(TGA) , 일회용 Al pan(DSC))을 수행한 결과를 도 2 및 3에 나타내었다. 도 2 및 3에 따르면, 화합물 2는 열적 안정성이 우수함을 확인할 수 있다.

[0213] 화합물 2의 분광학적 특성 평가

[0214] 상기 화합물 2의 UV 흡수 스펙트럼 및 PL(photoluminescence) 스펙트럼을 평가하여, 그 결과를 도 4에 나타내었다. 도 4의 3가지 그래프는 하기 방법을 이용하여 측정하였다:

표 1

[0215]	"UV_solution" 그래프	화합물 2를 CHCl ₃ 에 1x10 ⁻⁵ M의 농도로 희석시켜, 시마즈 유브이-350 스펙트로메터(Shimadzu UV-350 Spectrometer)를 이용하여, 상온에서 UV 흡수 스펙트럼을 측정함
--------	-------------------	---

"PL_solution" 그래프	화합물 2를 CHCl ₃ 에 1x10 ⁻⁵ M의 농도로 희석시켜, 제논(Xenon) 램프가 장착되어 있는 ISC PC1 스펙트로플로로메터 (Spectrofluorometer)를 이용하여, 상온에서 PL(Photoluminecence) 스펙트럼을 측정함
"PL_저온" 그래프	화합물 2를 CHCl ₃ 에 1x10 ⁻⁵ M의 농도로 희석시켜, 제논(Xenon) 램프가 장착되어 있는 ISC PC1 스펙트로플로로메터 (Spectrofluorometer)를 이용하여, 저온(77K)에서 PL(Photoluminecence) 스펙트럼을 측정함

[0216] 도 4에 따르면, 상기 화합물 2는 유기 발광 소자용 재료로 사용하기에 적합한 분광학적 특성을 가지고 있음을 알 수 있다.

[0217] 화합물 2의 전기화학적 특성 평가

[0218] Cyclic voltammetry (CV) (전해질: 0.1 M Bu₄NClO₄ / 용매: CH₂Cl₂을 / 전극: 3전극 시스템(작업전극: GC, 기준 전극: Ag/AgCl, 보조전극: Pt))를 이용하여 화합물 1의 특성을 조사하여 그 결과를 도 5에 나타내었다.

[0219] 화합물 2의 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨 평가

[0220] 도 5의 환원 온셋(reduction onset)으로부터 화합물 1의 LUMO 에너지 레벨을 계산하고, 도 4의 UV 흡수 스펙트럼의 에지(edge)로부터의 광학 밴드갭(optical band gap)(E_g)를 이용하여 HOMO 에너지 레벨을 계산하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다. 비교를 위하여 상기 TGA 및 DSC 그래프로부터 얻은 데이터도 표 2(HOMO 에너지 레벨 및 LUMO 에너지 레벨은 절대값으로 표기함)에 함께 나타내었다:

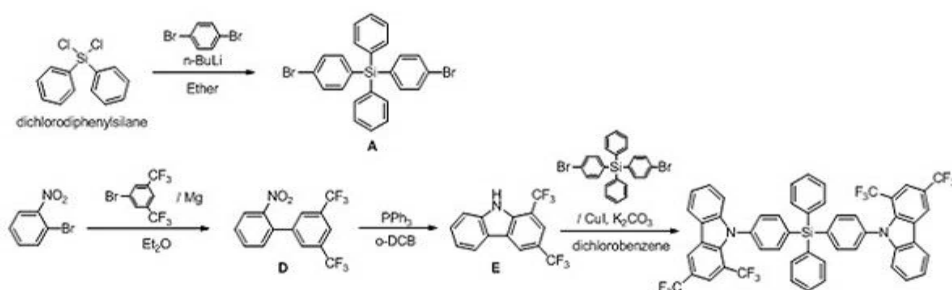
표 2

Td (°C)	Tg (°C)	Tm (°C)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	E _g (eV)	E _T (eV)
385	135	215	5.80	2.37	3.43	2.97

[0222] 합성예 2 : 화합물 4의 합성

[0223] 하기 반응식 2에 따라 화합물 4를 합성하였다:

[0224] <반응식 2>



[0225]

[0226] 화합물 4

[0227] 중간체 D의 합성

[0228] 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)benzene) 대신 1-브로모-3,5-비스(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-3,5-bis(trifluoromethyl)benzene) (14.5 g, 49.5mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체B의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 노란색 고체인 중간체 D (5.2 g, 31 %)을 수득하였다.

[0229] ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂) δ 7.81 (d, 1H), 7.51-7.55 (m, 3H), 7.39-7.31 (m, 1H), 7.19(s, 1H).

[0230] 중간체 E의 합성

[0231] 중간체 C 대신 중간체 D(2.34 g, 7.0mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 C의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 흰색 고체인 중간체 E (1.1 g, 51 %)을 수득하였다.

[0232] ^1H NMR (300 MHz, CD_2Cl_2) d 8.67 (s, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.41 (d, 2H), 7.33 (s, 2H), 7.15-7.10 (m, 1H).

[0233] 화합물 4의 합성

[0234] 중간체 C 대신 중간체 E를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 흰색 고체인 화합물 4 (0.82 g, 44 %)을 수득하였다.

[0235] ^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) d 7.77-7.73 (m, 2H), 7.57-7.22 (m, 23H), 7.04-7.00 (m, 5H). MS(FAB) m/z 939.20 $[(\text{M}+1)^+]$

[0236] 평가예 2: 화합물 4의 특성 평가

[0237] 화합물 4의 열적 특성, 분광학적 특성, 전기화학적 특성, HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 상기 평가예 1에서와 동일한 방법을 이용하여 평가하여, 그 결과를 도 6 내지 9 및 하기 표 3에 나타내었다:

표 3**[0238]**

Td ($^{\circ}\text{C}$)	Tg ($^{\circ}\text{C}$)	Tm ($^{\circ}\text{C}$)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Eg (eV)	ET (eV)
269	-	-	5.80	2.37	3.43	2.97

[0239] 도 6 내지 9 및 표 3으로부터 화합물 4는 유기 발광 소자용 재료로서 적합한 열적 안정성, 분광학적 특성, 전기화학적 특성 등을 가짐을 확인할 수 있다.

[0240] 합성예 3 : 화합물 6의 합성

[0241] 상기 합성예 1 중 중간체 B 합성시 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)benzene) 및 1-브로모-2-니트로벤젠(1-bromo-2-nitrobenzene) 대신 1-브로모-3,5-비스(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-3,5-bis(trifluoromethyl)benzene) 및 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)-2-니트로벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)-2-nitrobenzene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 6을 합성하였다.

[0242] 합성예 4 : 화합물 9의 합성

[0243] 상기 합성예 1 중 중간체 B 합성시 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)benzene) 및 1-브로모-2-니트로벤젠(1-bromo-2-nitrobenzene) 대신 1-브로모-3,5-비스(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-3,5-bis(trifluoromethyl)benzene) 및 2-브로모-4-(트리플루오로메틸)-1-니트로벤젠(2-bromo-4-(trifluoromethyl)-1-nitrobenzene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 9를 합성하였다.

[0244] 합성예 5 : 화합물 10의 합성

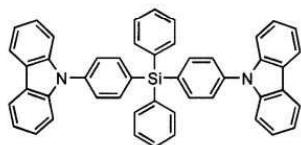
[0245] 상기 합성예 1 중 중간체 B 합성시 1-브로모-4-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-4-(trifluoromethyl)benzene) 및 1-브로모-2-니트로벤젠(1-bromo-2-nitrobenzene) 대신 1-브로모-3-(트리플루오로메틸)벤젠(1-bromo-3-(trifluoromethyl)benzene) 및 2-브로모-4-(트리플루오로메틸)-1-니트로벤젠(2-bromo-4-(trifluoromethyl)-1-nitrobenzene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용

하여 화합물 10을 합성하였다.

[0246] 비교 합성예 1 : 화합물 A의 합성

[0247] 상기 합성예 1 중 중간체 B 합성시 1-브로모-2-니트로벤젠(1-bromo-2-nitrobenzene) 대신 브로모벤젠을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 하기 화합물 A를 합성하였다.

[0248] <화합물 A>



[0250] 평가예 3: 화합물 A, 6, 9 및 10의 특성 평가

[0251] 상기 화합물 A, 6, 9 및 10의 분광학적 특성, HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 시뮬레이션을 통하여 평가하여 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

표 4

	UV 흡수 최대 파장(nm)	PL 흡수 최대 파장(nm)	E _g (eV)	E _T (eV)	HOMO(eV)	LUMO(eV)
화합물 A	292, 320, 335	347, 361	3.53	3.03	5.59	2.06
화합물 6	240, 264, 295, 322	36	3.54	3.00	5.93	2.39
화합물 9	242, 262, 293, 325	357	3.53	3.03	6.02	2.49
화합물 10	256, 291, 320, 332	342, 354	3.65	3.05	5.92	2.27

[0253] 상기 표 2, 3 및 4에 따르면, 화합물 2, 4, 6, 9 및 10의 E_g(에너지 밴드갭)은 화합물 A의 E_g에 비하여 동등 이상의 수준이나, 화합물 2, 4, 6, 9 및 10의 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨 절대값은 화합물 A의 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨 절대값보다 모두 큼을 확인할 수 있다. 이로써, 화합물 2, 4, 6, 9 및 10은 유기 발광 소자용 재료, 예를 들면, 발광층 중 호스트로서 사용하기 적합함을 확인할 수 있다.

[0254] 실시예 1

[0255] 코닝(corning) 15Ω/cm² (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 초순수를 이용하여 각 5 분 동안 초음파 세정한 후, 30 분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

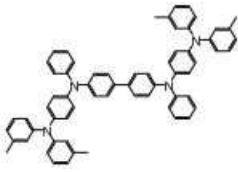
[0256] 상기 애노드인 ITO층 상부에 DNTPD를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 이어서 상기 정공 주입층 상부에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 증착하여 100Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0257] 상기 정공 수송층 상부에 발광층 상부에 mCP를 증착하여 200Å 두께의 버퍼층을 형성하고, 상기 버퍼층 상부에 상기 화합물 2(청색 인광 호스트) 및 FCNIr(청색 인광 도펀트)를 90 : 10의 중량비로 공증착하여, 200Å의 두께의 발광층을 형성하였다.

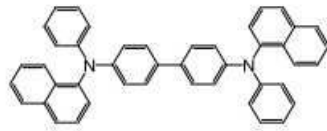
[0258] 이어서 상기 발광층 상부에 화합물 TmPyPB를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 증착하여 3000Å(캐소드) 두께의 제2전극을 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0259]

<DNTPD>



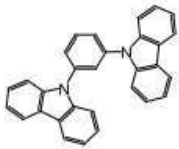
<NPB>



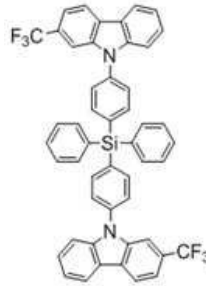
[0260]

[0261]

<mCP>



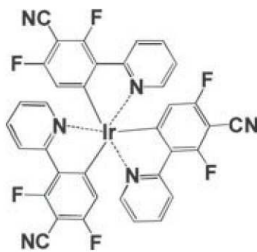
<화합물 2>



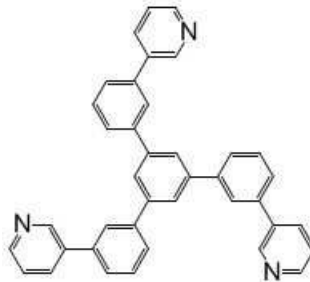
[0262]

[0263]

<FCNIr>



<TmPyPB>



[0264]

[0265]

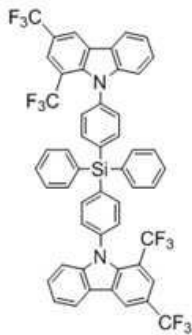
실시예 2

[0266]

발광층 형성시 화합물 2 대신 화합물 4를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0267]

<화합물 4>



[0268]

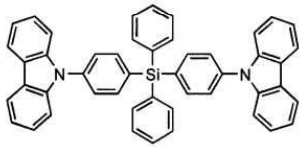
[0269]

비교예 1

[0270]

발광층 형성시 화합물 2 대신 화합물 A를 이용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0271] <화합물 A>

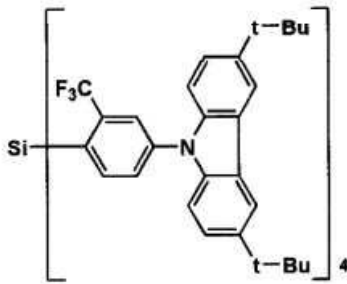


[0272]

[0273] **비교예 2**

[0274] 발광층 형성시 화합물 2 대신 화합물 B를 이용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0275] <화합물 B>

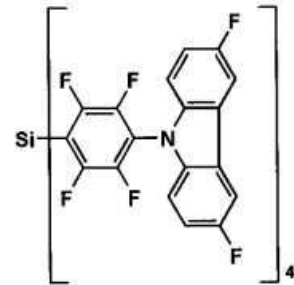


[0276]

[0277] **비교예 3**

[0278] 발광층 형성시 화합물 2 대신 화합물 C를 이용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0279] <화합물 C>



[0280]

[0281] 상기 실시예 1 및 2 및 비교예 1 내지 3의 유기 발광 소자의 소자 특성을 요약하면 하기 표 5와 같다 (구동 전압, 휘도, 효율 및 색순도는 Kethley SMU 236를 이용하여 측정하였다).

표 5

[0282]

	발광층 재료	구동전압 [V]	전류밀도 [mA/cm ²]	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	CIE x	CIE y
실시예1	화합물 2	6.4	19	100	15.1	0.147	0.192
실시예2	화합물 4	6.7	24	100	16.7	0.147	0.195
비교예1	화합물 A	6.5	15	100	5.2	0.147	0.197
비교예 2	화합물 B	6.6	16	100	5.5	0.149	0.201
비교예 3	화합물 C	6.5	17	100	4.2	0.150	0.193

[0283] 상기 표 5로부터, 실시예 1 및 2의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 3의 유기 발광 소자에 비하여 낮은 구동 전압 및 높은 휘도, 효율 및 수명 특성을 가지며, 우수한 색순도 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0284] 10: 유기 발광 소자

11: 기판

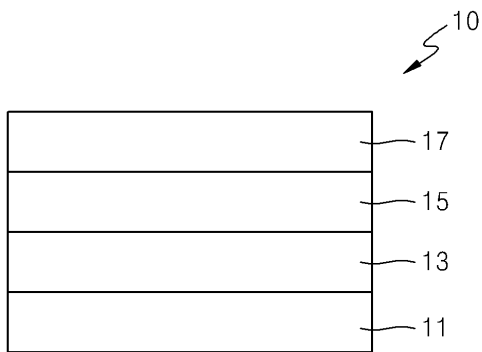
13: 제1전극

15: 유기층

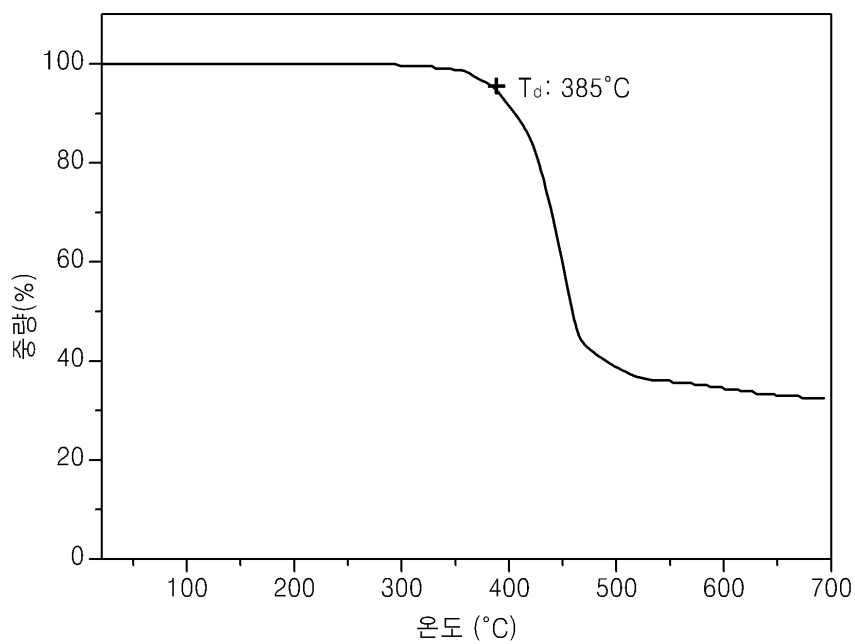
17: 제2전극

도면

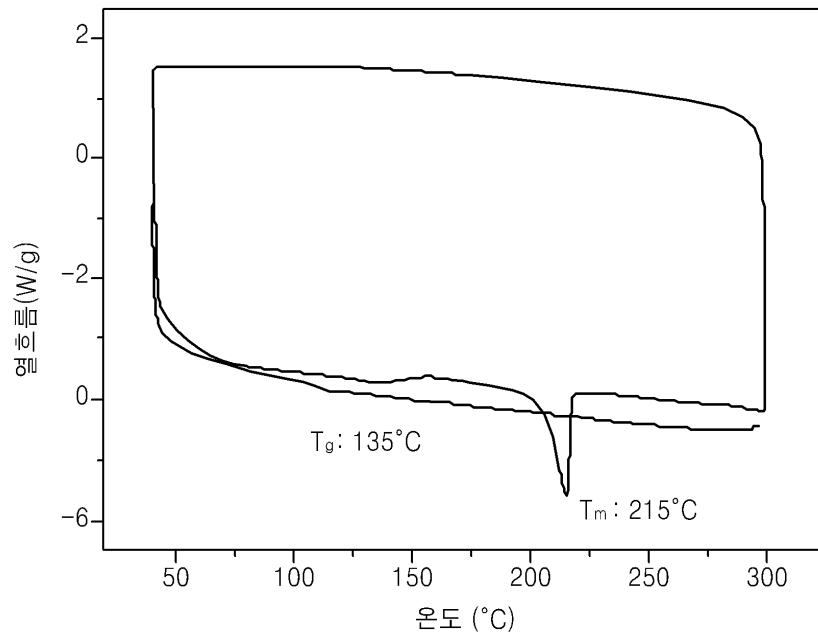
도면1



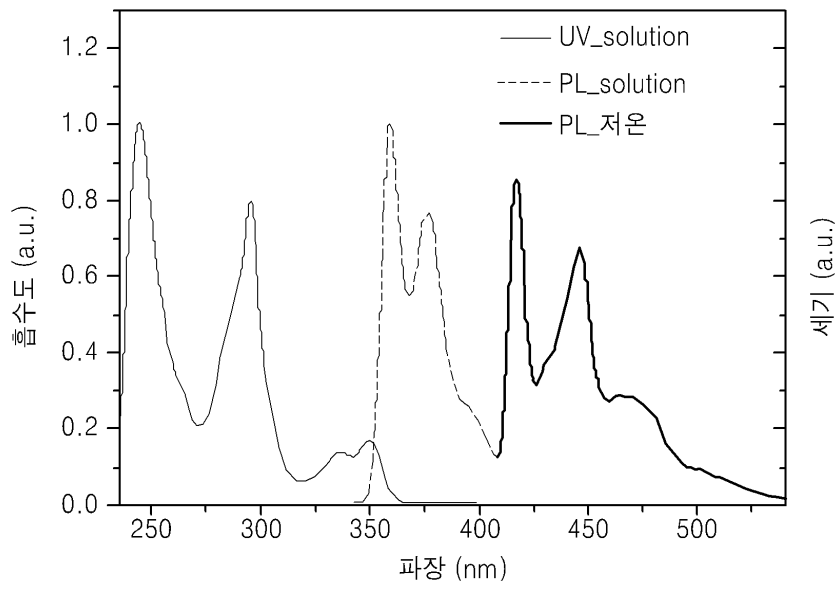
도면2



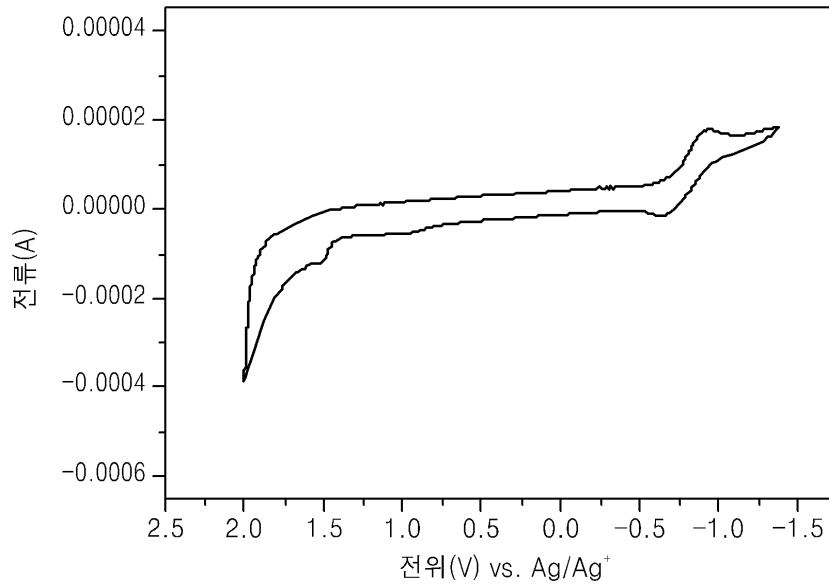
도면3



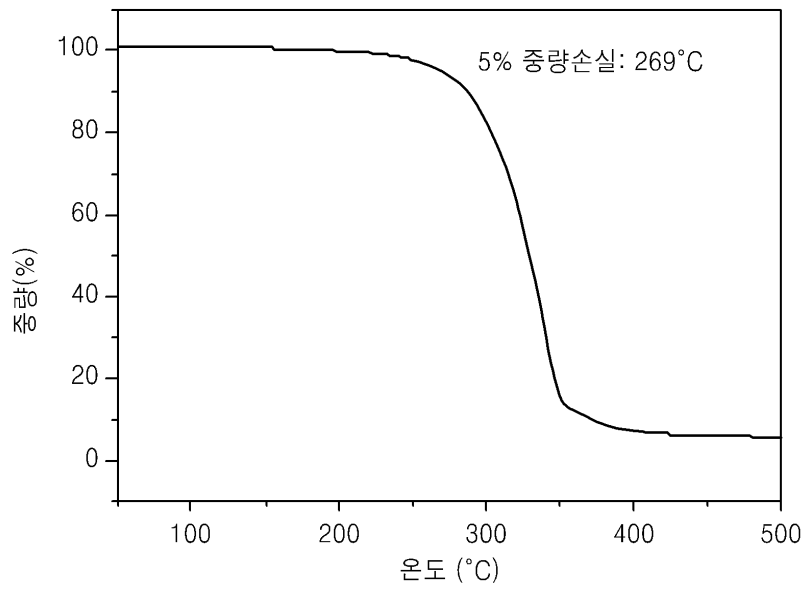
도면4



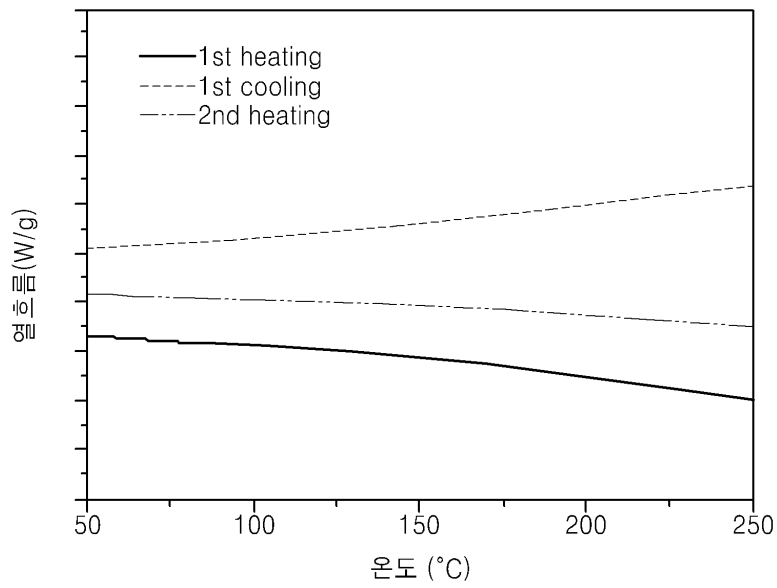
도면5



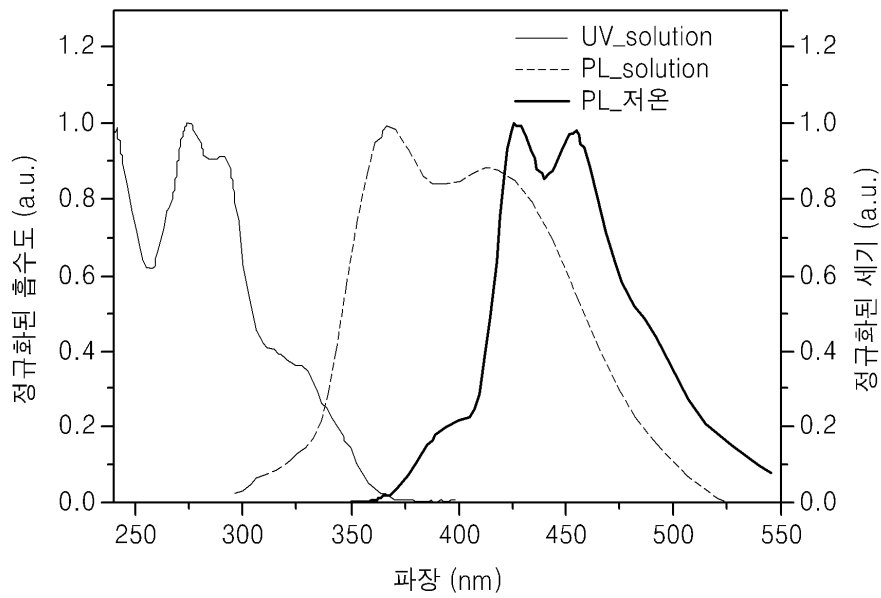
도면6



도면7



도면8



도면9

