



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0137007
(43) 공개일자 2024년09월19일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 487/16 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H10K 50/11 (2023.01)
H10K 85/60 (2023.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 487/16 (2013.01)
C07D 487/04 (2022.08)
- (21) 출원번호 10-2024-7026647
- (22) 출원일자(국제) 2023년01월20일
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년08월07일
- (86) 국제출원번호 PCT/KR2023/001065
- (87) 국제공개번호 WO 2023/140706
국제공개일자 2023년07월27일
- (30) 우선권주장
22152818.5 2022년01월21일
유럽특허청(EPO)(EP)

- (71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자
티리온 데미안
독일 칼스도르프-노이타르트 76689 하우스프스트
라세 8
징크 다니엘
독일 그라벤-노이도르프 76676 라인스트라세 41/1
- (74) 대리인
리엔목특허법인

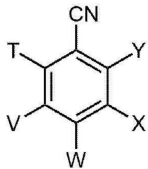
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 광전자 소자용 유기 분자

(57) 요약

본 발명은 특히 광전자 소자에 적용하기 위한 발광 유기 분자에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, 상기 유기 분자는

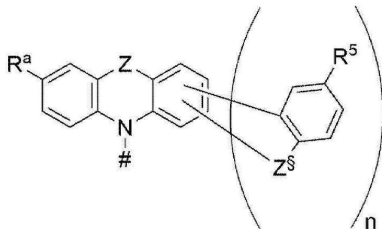
- 화학식 I의 구조를 포함하는 제1 화학 모이어티:



화학식 I

및

- 화학식 II의 구조를 포함하는, 한 개 또는 두 개의 제2 화학 모이어티를 포함한다:



화학식 II.

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2022.01)

H10K 50/11 (2023.02)

H10K 85/654 (2023.02)

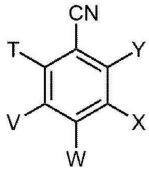
H10K 85/6572 (2023.02)

명세서

청구범위

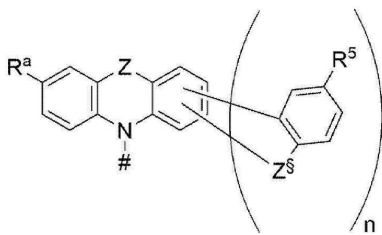
청구항 1

화학식 I의 구조를 포함하는 제1 화학 모이어티;



화학식 I

및 화학식 II의 구조를 포함하는, 한 개 또는 두 개의 제2 화학 모이어티를 포함하는, 유기 분자:



화학식 II

여기서

n은 각각의 경우에 독립적으로 1 및 2로 이루어진 정수의 군으로부터 선택되고;

제1 화학 모이어티는 각 제2 화학 모이어티와 단일 결합을 통해 연결되고;

T, V, W, X 및 Y는 R¹ 및 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트로부터 선택되고,

#은 제1 화학 모이어티의 제2 화학 모이어티로의 결합 사이트를 나타내고;

Z는 각각의 경우에 서로 독립적으로 직접 결합, CR^{3,4}, C=CR^{3,4}, C=O, C=NR³, NR³, O, SiR^{3,4}, S, S(O) 및 S(O)₂로 이루어진 군으로부터 선택되고;

Z^s는 각각의 경우에 서로 독립적으로 NR⁵, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고;

R¹은 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, CN, CF₃, 페닐,

C₁-C₅-알킬,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;

C₂-C₈-알케닐,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;

C₂-C₈-알키닐,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₆-C₁₈-아릴; 및

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₃-C₁₇-헤테로아릴;

R^a, R³ 및 R⁴는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소,

중수소,

N(R⁵)₂,

OR⁵,

Si(R⁵)₃,

B(OR⁵)₂,

OSO₂R⁵,

CF₃,

CN,

F,

Br,

I,

C₁-C₄₀-알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;

C₁-C₄₀-알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;

C₁-C₄₀-티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;

C₂-C₄₀-알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵,

$P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 로 선택적으로 치환되고;

C_2 - C_{40} -알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 로 선택적으로 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 R^5 로 치환된 C_6 - C_{60} -아릴; 및

선택적으로 하나 이상의 R^5 로 치환된 C_3 - C_{57} -헤테로아릴;

R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, $N(R^6)_2$, OR^6 , $Si(R^6)_3$, $B(OR^6)_2$, OSO_2R^6 , CF_3 , CN , F , Br , I ,

C_1 - C_{40} -알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 로 선택적으로 치환되고;

C_1 - C_{40} -알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 로 선택적으로 치환되고;

C_1 - C_{40} -티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 로 선택적으로 치환되고;

C_2 - C_{40} -알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 로 선택적으로 치환되고;

C_2 - C_{40} -알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$,

$P(=O)(R^6)$, SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 R⁶로 치환된 C₆-C₆₀-아릴; 및

선택적으로 하나 이상의 R⁶로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴;

R⁶는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, OPh, CF₃, CN, F,

C₁-C₅-알킬,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

C₁-C₅-알콕시,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

C₁-C₅-티오알콕시,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

C₂-C₅-알케닐,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

C₂-C₅-알키닐,

여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환된 C₆-C₁₈-아릴;

선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환된 C₃-C₁₇-헤테로아릴;

N(C₆-C₁₈-아릴)₂,

N(C₃-C₁₇-헤테로아릴)₂;

및 N(C₃-C₁₇-헤테로아릴)(C₆-C₁₈-아릴);

여기서 치환기 R^a, R³, R⁴ 또는 R⁵는 서로 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a, R³, R⁴ 또는 R⁵와 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 선택적으로 형성하고;

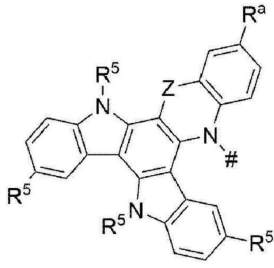
여기서

T, V, W, X 및 Y의 군으로부터 선택된 정확히 한 개의 치환기는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이거나;

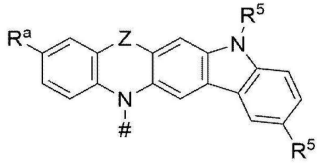
T, V, W, X 및 Y의 군으로부터 선택된 정확히 두 개의 치환기는 각각 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이다.

청구항 2

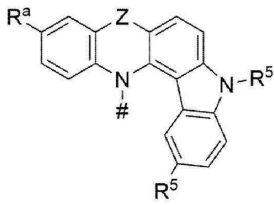
제1항에 있어서, 상기 제2 모이어티는 독립적으로 화학식 IIIa, 화학식 IIIb, 화학식 IIIc, 화학식 IIIe, 화학식 IIIf 및 화학식 IIIg로 이루어진 군으로부터 선택되는, 유기 분자:



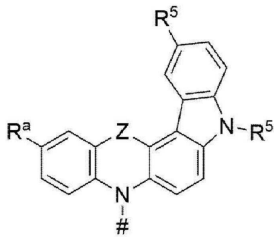
화학식 IIIa



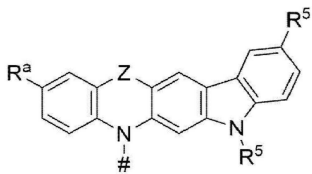
화학식 IIIb



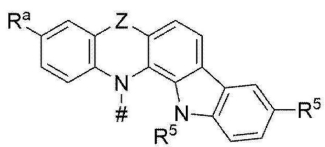
화학식 IIIc



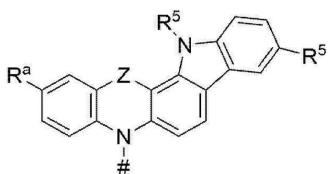
화학식 IIIId



화학식 IIIe



화학식 IIIIf



화학식 IIIg.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, R^a 및 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는, 유기 분자:

수소,

중수소,

Me,

ⁱPr,

^tBu,

CN,

CF₃,

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 Ph;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리디닐;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 카바졸일;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;

및

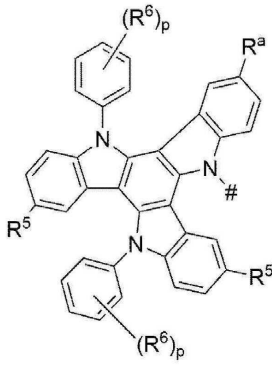
선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 N(Ph)₂.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, Z는 직접 결합인, 유기 분자.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제2 모이어티는 독립적으로 화학식 IVa에 따른 구조를 포함하는, 유기 분자:



화학식 IVa,

여기서

p는 각각의 경우에 독립적으로 1, 2, 3, 4, 및 5로 이루어진 군으로부터 선택되는 정수이고;

R⁶는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

수소,

중수소,

Me,

ⁱPr,

^tBu,

CN,

CF₃,

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 Ph;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리디닐;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 카바졸일;

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;

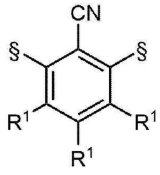
및

선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 N(Ph)₂.

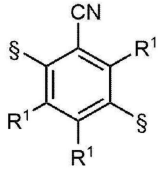
청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 Ia, 화학식 Ib, 화학식 Ic, 및 화학식 Id로 이루어진 군으로

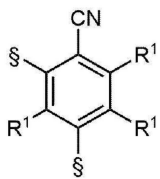
부터 선택되는 구조를 포함하는, 유기 분자:



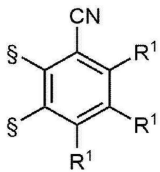
화학식 Ia



화학식 Ib



화학식 Ic

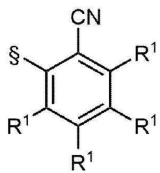


화학식 Id,

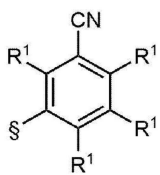
여기서 §는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타낸다.

청구항 7

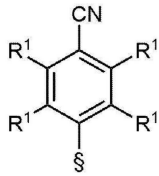
제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 IIa, 화학식 IIb 및 화학식 IIc로 이루어진 군으로부터 선택되는 구조를 포함하는, 유기 분자:



화학식 IIa



화학식 IIb

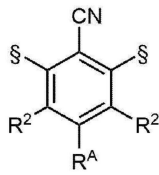


화학식 IIc,

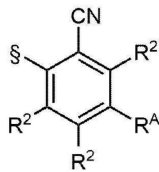
여기서 §는 제1 화학 모이어터를 제2 화학 모이어터로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타낸다.

청구항 8

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc로 이루어진 군으로부터 선택되는 구조를 포함하는, 유기 분자:



화학식 Va



화학식 Vb



화학식 Vc,

여기서

§는 제1 화학 모이어터를 제2 화학 모이어터들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타내고;

RA는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

CN, CF₃,

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₆-C₁₈-아릴; 및

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₃-C₁₇-헤테로아릴;

R²는 수소, 중수소, Me, ⁱPr, ^tBu 및 Ph로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기 분자를 포함하는, 광전자 소자.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 광전자 소자는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는, 광전자 소자:

- 유기 발광다이오드(OLED),
- 발광 전기화학 전지,
- OLED 센서,
- 유기 다이오드,
- 유기 태양 전지,
- 유기 트랜지스터,
- 유기 전계 효과 트랜지스터,
- 유기 레이저, 및
- 하향 변환 소자(down-conversion element).

청구항 11

제9항 또는 제10항에 있어서, 상기 광전자 소자는 유기 발광다이오드이고, 상기 유기 분자를 발광층(EML) 및/또는 상기 발광층(EML)에 직접 인접한 층에 포함하는, 광전자 소자.

청구항 12

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기 분자 및 상기 유기 분자와 상이한 호스트 물질 H^B를 포함하는, 조성물.

청구항 13

제12항에 있어서, 상기 유기 분자와 상이한, 형광 에미터 F 및/또는 인광 물질 P^B를 포함하고,
상기 유기 분자의 중량% 분율이 상기 형광 에미터 F 및/또는 인광 물질 P^B의 중량% 분율보다 높은, 조성물.

청구항 14

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기 분자 또는 제12항 또는 제13항에 따른 조성물을 사용하고, 특히 진공 증발 방법을 사용하여 또는 용액으로부터 유기 분자를 처리하는 것을 포함하는, 광전자 소자의 제조 방법..

청구항 15

하기 단계들을 포함하는, 500 nm 내지 560 nm 범위의 파장의 빛을 발생시키는 방법:

- (i) 제9항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 광전자 소자를 제공하는 단계; 및
- (ii) 상기 소자에 전류를 인가하는 단계.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 발광 유기 분자 및 유기 발광 다이오드(OLED) 및 기타 광전자 소자에서의 그의 용도에 관한 것이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0002] 본 발명의 목적은 광전자 소자에 사용하기에 적합한 분자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0003] 이러한 목적은 새로운 종류의 유기 분자를 제공하는 본 발명에 의해 달성된다.

발명의 효과

[0004] 본 발명에 따르면, 상기 유기 분자는 순수한 유기 분자로서, 즉, 광전자 소자에 사용되는 것으로 알려진 금속 착물과 달리 어떠한 금속 이온도 포함하지 않는다. 그러나, 본 발명의 유기 분자는 메탈로이드, 특히 B, Si, Sn, Se 및/또는 Ge를 포함할 수 있다.

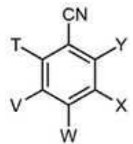
[0005] 본 발명에 따른 유기 분자는 바람직하게 하늘색, 녹색 또는 황색 스펙트럼 범위, 바람직하게는 녹색 스펙트럼 범위에서 최대 발광(emission maxima)을 나타낸다. 상기 유기 분자는 바람직하게 470 내지 580 nm, 바람직하게 490 내지 560 nm, 더욱 바람직하게는 500 내지 560 nm, 훨씬 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 가장 더 바람직하게는 520 내지 540 nm에서 최대 발광을 나타낸다. 본 발명에 따른 유기 분자의 광발광 양자 수율은 바람직하게는 10% 이상, 더 바람직하게는 20% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 30% 이상, 특히 40%, 특히 바람직하게는 50% 이상이다. 본 발명의 분자는 특히 열활성화 지연 형광(TADF) 물질을 나타낸다. 광전자 소자, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED)에서 본 발명에 따른 분자의 사용은 더 높은 효율을 가져온다. 해당 OLED는 공지된 에미터 물질 및 비슷한 색상을 갖는 OLED보다 더 높은 안정성을 갖고/갖거나 OLED 디스플레이에서 본 발명에 따른 분자를 사용함으로써 자연에서 보이는 색상의 더 정확한 재현, 즉 디스플레이된 이미지에서 더 높은 해상도를 갖는 것을 달성할 수 있다. 특히, 상기 분자는 형광 에미터와 함께 사용되어 소위 초형광(hyper-fluorescence)을 가능하게 할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0006] 본 발명에 따른 유기 분자

[0007] 본 발명에 따른 유기 분자는

[0008] - 화학식 I의 구조를 포함하는 제1 화학 모이어티:



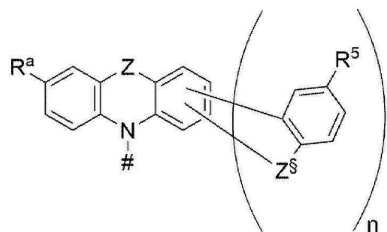
[0009]

[0010] 화학식 I

[0011] 및

[0012] 한 개 또는 두 개의

[0013] - 화학식 II의 구조를 포함하는 제2 화학 모이어티를 포함한다:



[0014]

[0015] 화학식 II,

[0016] 여기서

[0017] n은 각각의 경우에 서로 독립적으로 1 및 2로부터 선택되는 정수이고;

[0018] 제1 화학 모이어티는 각 제2 화학 모이어티와 단일 결합을 통해 연결되고;

[0019] T, V, W, X 및 Y는 R¹ 및 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트로부터 선

택되고,

- [0020] #은 제1 화학 모이어티의 제2 화학 모이어티로의 결합 사이트를 나타내고;
- [0021] Z는 각각의 경우에 서로 독립적으로 직접 결합, CR^3R^4 , $C=CR^3R^4$, $C=O$, $C=NR^3$, NR^3 , O , SiR^3R^4 , S , $S(O)$ 및 $S(O)_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0022] Z^{δ} 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 NR^5 , O 및 S 로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0023] R^1 은 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, CN, CF_3 , 페닐(Ph),
- [0024] C_1 - C_5 -알킬,
- [0025] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;
- [0026] C_2 - C_8 -알케닐,
- [0027] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;
- [0028] C_2 - C_8 -알키닐,
- [0029] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 치환되고;
- [0030] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환된 C_6 - C_{18} -아릴; 및
- [0031] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환된 C_3 - C_{17} -헤테로아릴;
- [0032] R^a , R^3 및 R^4 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소,
- [0033] 중수소,
- [0034] $N(R^5)_2$,
- [0035] OR^5 ,
- [0036] $Si(R^5)_3$,
- [0037] $B(OR^5)_2$,
- [0038] OSO_2R^5 ,
- [0039] CF_3 ,
- [0040] CN,
- [0041] F,
- [0042] Br,
- [0043] I,
- [0044] C_1 - C_{40} -알킬,
- [0045] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 으로 선택적으로 치환되고,
- [0046] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 로 선택적으로 치환되고;

- [0047] C₁-C₄₀-알콕시,
- [0048] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵으로 선택적으로 치환되고,
- [0049] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;
- [0050] C₁-C₄₀-티오알콕시,
- [0051] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵으로 선택적으로 치환되고,
- [0052] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;
- [0053] C₂-C₄₀-알케닐,
- [0054] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵으로 선택적으로 치환되고,
- [0055] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;
- [0056] C₂-C₄₀-알키닐,
- [0057] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵으로 선택적으로 치환되고,
- [0058] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵로 선택적으로 치환되고;
- [0059] 선택적으로 하나 이상의 R⁵로 치환된 C₆-C₆₀-아릴; 및
- [0060] 선택적으로 하나 이상의 R⁵로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴;
- [0061] R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, N(R⁶)₂, OR⁶, Si(R⁶)₃, B(OR⁶)₂, OSO₂R⁶, CF₃, CN, F, Br, I,
- [0062] C₁-C₄₀-알킬,
- [0063] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0064] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;
- [0065] C₁-C₄₀-알콕시,
- [0066] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0067] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;

- [0068] C₁-C₄₀-티오알콕시,
- [0069] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0070] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;
- [0071] C₂-C₄₀-알케닐,
- [0072] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0073] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;
- [0074] C₂-C₄₀-알킬닐,
- [0075] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0076] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는 R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶로 선택적으로 치환되고;
- [0077] 선택적으로 하나 이상의 R⁶로 치환된 C₆-C₆₀-아릴; 및
- [0078] 선택적으로 하나 이상의 R⁶로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴;
- [0079] R⁶는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, OPh, CF₃, CN, F,
- [0080] C₁-C₅-알킬,
- [0081] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0082] C₁-C₅-알콕시,
- [0083] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0084] C₁-C₅-티오알콕시,
- [0085] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0086] C₂-C₅-알케닐,
- [0087] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0088] C₂-C₅-알킬닐,
- [0089] 여기서 선택적으로 하나 이상의 수소 원자는 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0090] 선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환된 C₆-C₁₈-아릴;
- [0091] 선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환된 C₃-C₁₇-헤테로아릴;
- [0092] N(C₆-C₁₈-아릴)₂,

[0093] $N(C_3-C_{17}\text{-헤테로아릴})_2$;

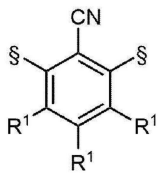
[0094] 및 $N(C_3-C_{17}\text{-헤테로아릴})(C_6-C_{18}\text{-아릴})$;

[0095] 여기서 치환기 R^a , R^3 , R^4 또는 R^5 는 서로 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a , R^3 , R^4 또는 R^5 와 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 선택적으로 형성하고;

[0096] 여기서 T, V, W, X 및 Y의 군으로부터 선택된 정확히 한 개의 치환기는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이거나;

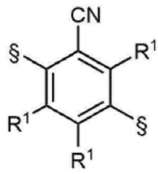
[0097] T, V, W, X 및 Y의 군으로부터 선택된 정확히 두 개의 치환기는 모두 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이다.

[0098] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 두 개의 제2 화학 모이어티를 포함하고, 여기서 본 발명에 따른 유기 분자는 화학식 Ia, 화학식 Ib, 화학식 Ic, 및 화학식 Id로 이루어진 군으로부터 선택된 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



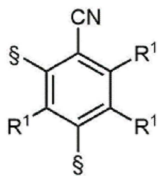
[0099]

[0100] 화학식 Ia



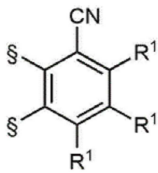
[0101]

[0102] 화학식 Ib



[0103]

[0104] 화학식 Ic

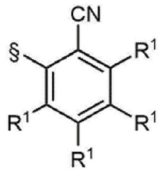


[0105]

[0106] 화학식 Id,

[0107] 여기서 §는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타낸다.

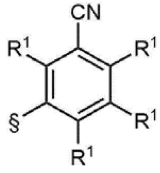
[0108] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 한 개의 제2 화학 모이어티를 포함하고, 여기서 본 발명에 따른 유기 분자는 화학식 IIa, 화학식 IIb 및 화학식 IIc로 이루어진 군으로부터 선택된 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0109]

[0110]

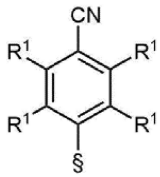
화학식 IIa



[0111]

[0112]

화학식 IIb



[0113]

[0114]

화학식 IIc,

[0115]

여기서 §는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타낸다.

[0116]

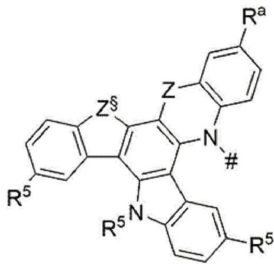
바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 화학식 Ia, 화학식 IIa 및 화학식 IIc로 이루어진 군으로부터 선택된 구조를 포함하거나 이로 이루어진다.

[0117]

바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 Z[§]는 NR⁵이다.

[0118]

일 구현예에서, 제2 화학 모이어티는 각각의 경우에 서로 독립적으로 화학식 IIIa-1로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0119]

[0120]

화학식 IIIa-1.

[0121]

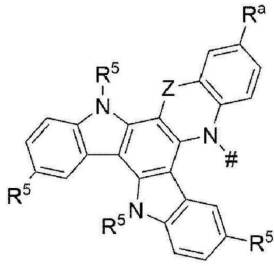
일 구현예에서, 제2 모이어티는 각각의 경우에 서로 독립적으로 화학식 IIIa-1로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 Z[§]는 0 또는 NR⁵이다.

[0122]

일 구현예에서, Z[§]는 각각의 경우에 NR⁵이다.

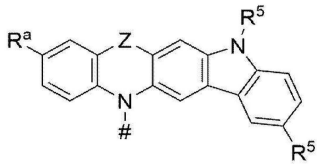
[0123]

일 구현예에서, 제2 모이어티는 각각의 경우에 서로 독립적으로 화학식 IIIa, 화학식 IIIb, 화학식 IIIc, 화학식 IIIe, 화학식 IIIf 및 화학식 IIIg로 이루어진 군으로부터 선택된다:



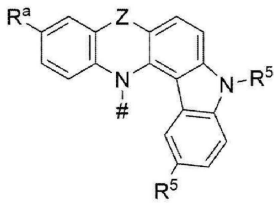
[0124]

[0125] 화학식 IIIa



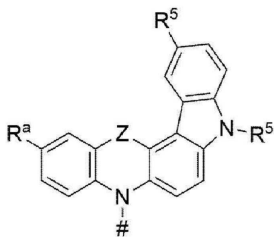
[0126]

[0127] 화학식 IIIb



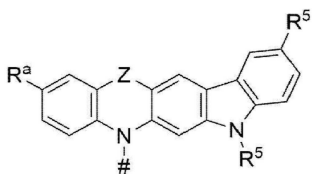
[0128]

[0129] 화학식 IIIc



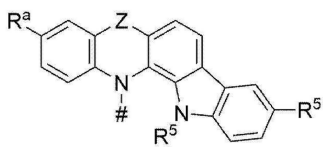
[0130]

[0131] 화학식 IIIId



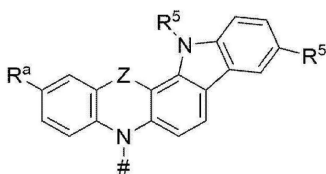
[0132]

[0133] 화학식 IIIe



[0134]

[0135] 화학식 IIIIf



[0136]

- [0137] 화학식 IIIg.
- [0138] 본 발명의 유기 분자의 특정 구현예에서, Z는 단일 결합이다.
- [0139] 본 발명의 일 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0140] 수소,
- [0141] 중수소,
- [0142] Me,
- [0143] ⁱPr,
- [0144] ^tBu,
- [0145] CN,
- [0146] CF₃,
- [0147] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 Ph;
- [0148] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리디닐;
- [0149] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;
- [0150] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 카바졸일;
- [0151] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;
- [0152] 및
- [0153] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 N(Ph)₂.
- [0154] 본 발명의 일 구현예에서, R⁵는 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0155] 수소,
- [0156] 중수소,
- [0157] Me,
- [0158] ⁱPr,
- [0159] ^tBu,
- [0160] CN,
- [0161] CF₃,
- [0162] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로

치환된 Ph;

[0163] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리디닐;

[0164] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;

[0165] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 카바졸일;

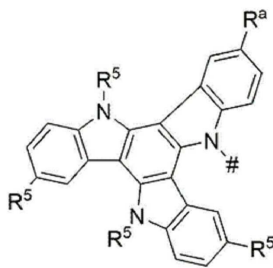
[0166] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;

[0167] 및

[0168] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 N(Ph)₂.

[0169] 일 구현예에서, R^a 및 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로 수소(H), 메틸(Me), *i*-프로필(CH(CH₃)₂)(ⁱPr), *t*-부틸(^tBu), 페닐(Ph), CN, CF₃ 및 디페닐아민(NPh₂)으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

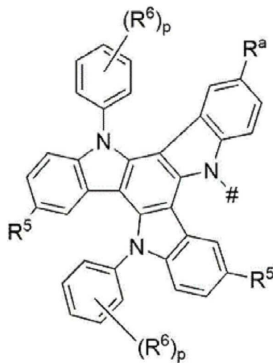
[0170] 바람직한 구현예에서, 제2 모이어티는 각각의 경우에 서로 독립적으로 화학식 IV에 따른 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0171]

[0172] 화학식 IV.

[0173] 바람직한 구현예에서, 제2 모이어티는 각각의 경우에 서로 독립적으로 화학식 IVa에 따른 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0174]

[0175] 화학식 IVa,

[0176] 여기서 p는 각각의 경우에 서로 독립적으로 1, 2, 3, 4, 및 5로부터 선택되는 정수이고;

- [0177] R^6 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0178] 수소,
- [0179] 중수소,
- [0180] Me,
- [0181] i Pr,
- [0182] t Bu,
- [0183] CN,
- [0184] CF_3 ,
- [0185] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 Ph;
- [0186] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리디닐;
- [0187] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;
- [0188] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 카바졸일;
- [0189] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;
- [0190] 및
- [0191] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 $N(Ph)_2$.
- [0192] 일 구현예에서, R^6 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0193] 수소, 중수소, Me, i Pr, t Bu 및 CN.
- [0194] 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 R^1 은 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0195] CN, CF_3 ,
- [0196] 선택적으로 하나 이상의 R^5 로 치환된 C_6-C_{18} -아릴; 및
- [0197] 선택적으로 하나 이상의 R^5 로 치환된 C_3-C_{17} -헤테로아릴.
- [0198] 일 구현예에서, 적어도 하나의 R^1 은 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0199] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 Ph;
- [0200] 선택적으로 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로

치환된 피리디닐;

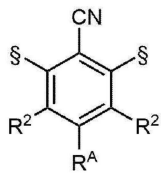
[0201] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 피리미디닐;

[0202] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 트리아지닐;

[0203] 및

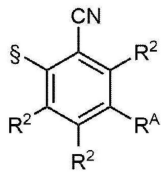
[0204] 선택적으로 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 치환된 N(Ph)₂.

[0205] 바람직한 구현예에서, 상기 유기 분자는 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc로 이루어진 군으로부터 선택되는 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



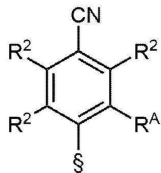
[0206]

[0207] 화학식 Va



[0208]

[0209] 화학식 Vb



[0210]

[0211] 화학식 Vc,

[0212] 여기서 §는 제1 화학 모이어티를 제2 화학 모이어티들 중 하나로 연결하는 단일 결합의 결합 사이트를 나타낸다;

[0213] R^A는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

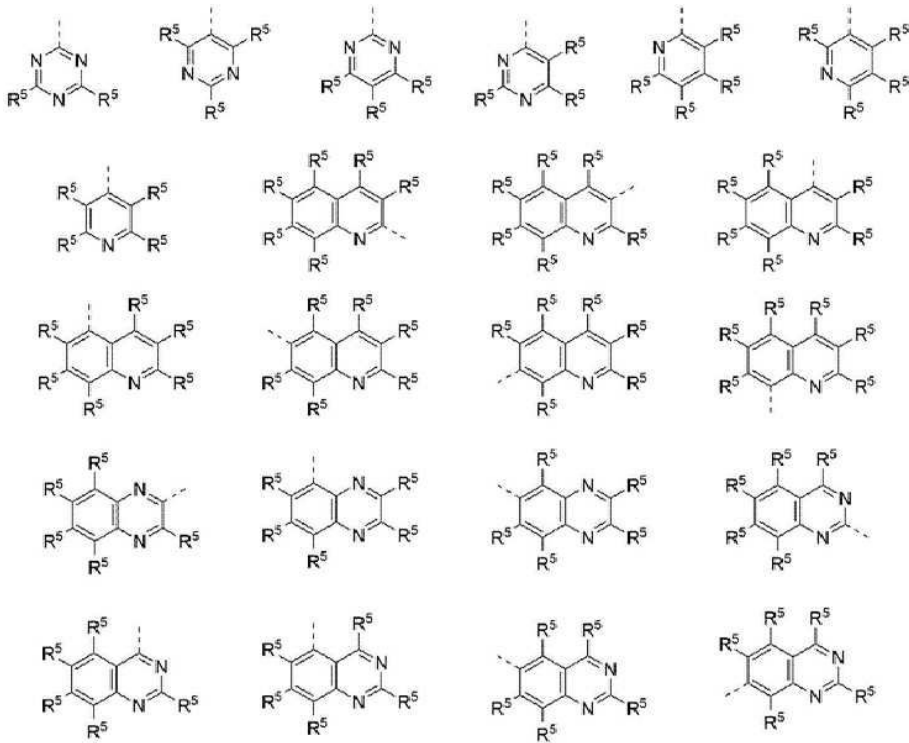
[0214] CN, CF₃,

[0215] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₆-C₁₈-아릴; 및

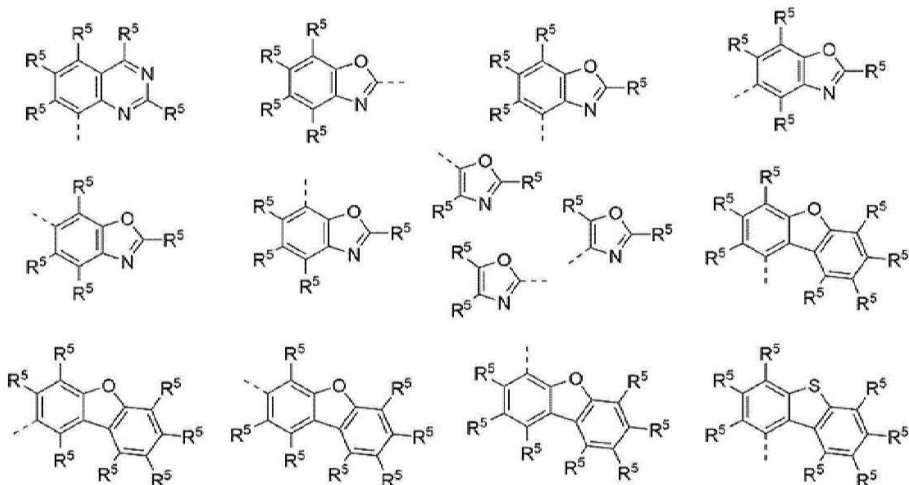
[0216] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환된 C₃-C₁₇-헤테로아릴;

[0217] R²는 수소, 중수소, Me, ⁱPr, ^tBu 및 Ph로 이루어진 군으로부터 선택된다.

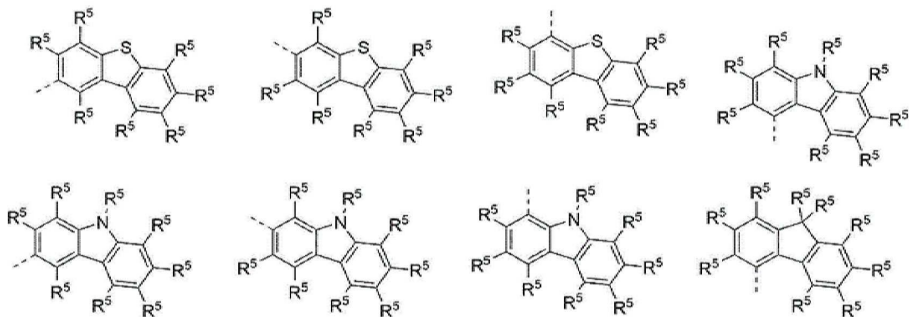
[0218] 일 구현예에서, R^A는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:



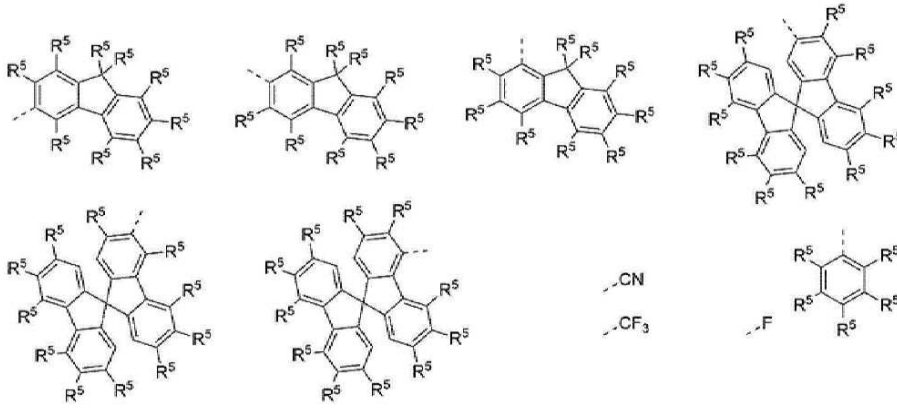
[0219]



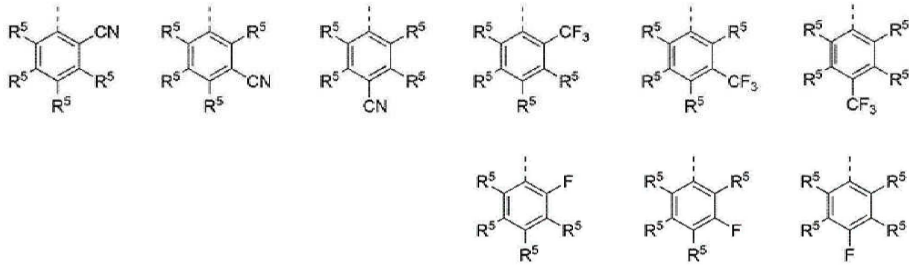
[0220]



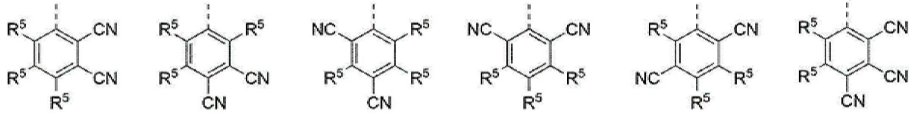
[0221]



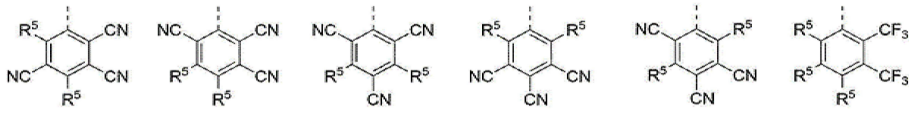
[0222]



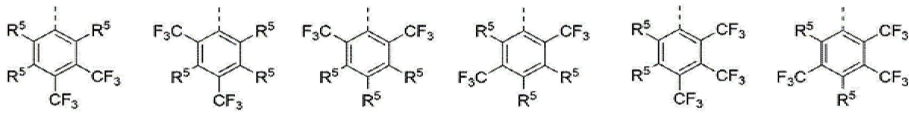
[0223]



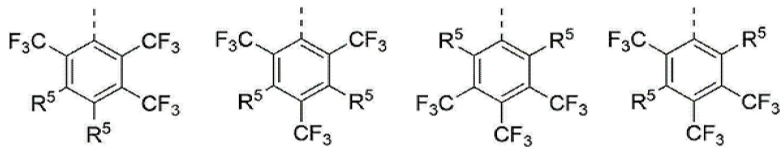
[0224]



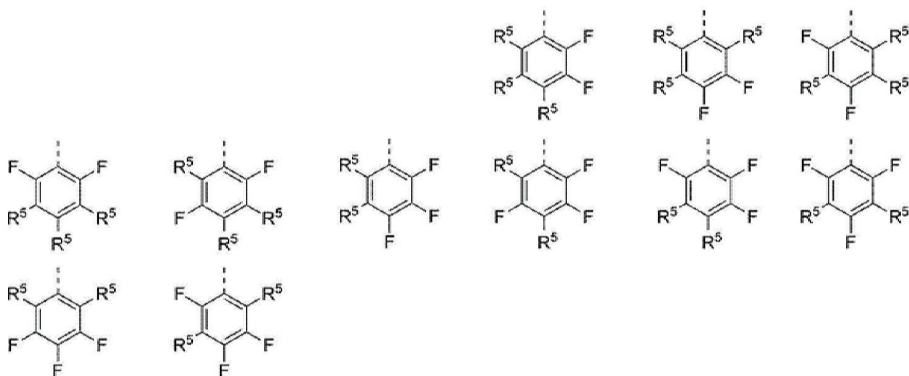
[0225]



[0226]



[0227]



[0228]

여기서

[0229]

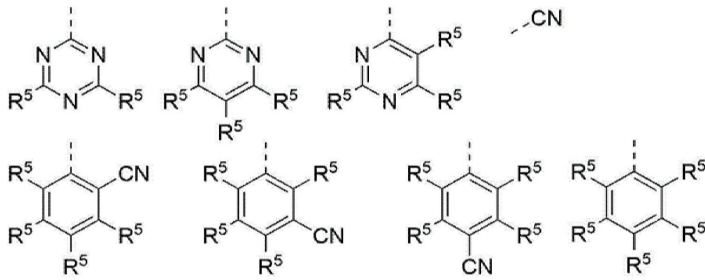
파선은 치환기 R^A를 화학식 I로 표시되는 유기 분자의 나머지와 연결하는 단일 결합을 나타내고;

[0230]

여기서 선택적으로 두 개 이상의 인접한 치환기 R⁵는 서로 독립적으로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족

및/또는 벤조-융합된 고리 시스템을 형성할 수 있고, 여기서 선택적으로 이렇게 형성된 고리 시스템의 하나 이상의 수소 원자는 R⁶로 치환될 수 있다.

[0231] 일 구현예에서, R^A는 각각의 경우에 서로 독립적으로 하기 구조들로 구성되는 그룹 B로부터 선택된다:



[0232]

[0233] 여기서

[0234] 파선은 치환기 R^A를 화학식 I로 표시되는 유기 분자와 연결하는 단일 결합을 나타내고;

[0235] 여기서 선택적으로 두 개 이상의 인접한 치환기 R⁵는 서로 독립적으로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 및/또는 벤조-융합된 고리 시스템을 형성할 수 있고, 여기서 선택적으로 이렇게 형성된 고리 시스템의 하나 이상의 수소 원자는 R⁶로 치환될 수 있다.

[0236] 정의

[0237] 여기서, "층"이라는 용어는 광범위하게 평면 형상을 갖는 몸체 또는 시트형 덩어리를 의미한다. 광전자 소자는 여러 층으로 구성될 수 있다.

[0238] 본 발명의 단락에서 발광층(EML)은 광전자 소자의 층이며, 여기서 상기 층으로부터의 발광은 소자에 전압 및 전류를 인가할 때 관찰된다. 당업자는 광전자 소자로부터의 발광이 적어도 하나의 EML로부터의 발광에 기인함을 이해할 수 있다. 숙련된 기술자는 EML로부터의 발광이 전형적으로 (주로) 상기 EML에 포함된 모든 물질이 아니라 특정 에미터 물질에 기인함을 이해할 수 있다.

[0239] 본 발명의 단락에서 "에미터 물질"("에미터"라고도 함)은 광전자 소자의 발광층(EML)에 포함될 때 전압 및 전류가 해당 소자에 인가된다면 빛을 발광하는 물질이다. 에미터 물질은 일반적으로 "발광성 도펀트" 물질이다. 도펀트 물질(발광성이든 아니든)은 본 명세서에서 호스트 물질이라고 하는 매트릭스 물질에 매립된 물질이다. 여기서, 호스트 물질은 또한 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED와 같은 광전자 소자에 포함될 때 일반적으로 H^B로 지칭된다.

[0240] 본 발명의 단락에서, 용어 "시클릭 그룹"은 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다.

[0241] 본 발명의 단락에서, 화학 구조를 언급할 때 "고리"라는 용어는 가장 넓은 의미에서 임의의 모노시클릭 모이어티로 이해될 수 있다. 같은 견지에서 화학 구조를 언급할 때 "고리"라는 용어는 가장 넓은 의미에서 임의의 바이- 또는 폴리시클릭 모이어티로 이해될 수 있다.

[0242] 본 발명의 단락에서, "고리 시스템"은 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다.

[0243] 본 발명의 단락에서, 용어 "고리 원자"는 고리 또는 고리 시스템의 시클릭 코어의 일부이고 시클릭 코어에 임의로 부착된 비고리형 치환기의 일부가 아닌 임의의 원자를 지칭한다.

[0244] 본 발명의 단락에서, 용어 "카보시클"은 시클릭 코어 구조가 수소는 물론 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있는 탄소 원자만을 포함하는 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 용어 "카보시클릭"은 형용사로서 시클릭 코어 구조가 수소는 물론 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있는, 탄소 원자만을 포함하는 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해될 수 있다.

[0245] 본 발명의 단락에서, 용어 "헤테로시클(헤테로환)"은 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의

헤테로원자를 포함하는 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 용어 "헤테로시클릭(헤테로환의)"은 형용사로서 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해된다. 헤테로원자는 특정 실시예에서 달리 언급되지 않는 한, 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 B, Si, N, O, S 및 Se, 더 바람직하게는 B, N, O 및 S, 가장 바람직하게는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 본 발명의 단락에서 헤테로시클에 포함된 모든 탄소 원자 또는 헤테로원자는 물론 수소 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있다.

[0246] 당업자는 임의의 시클릭 그룹(즉 임의의 카보시클 및 헤테로시클)이 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있음을 이해할 수 있다.

[0247] 본 발명의 단락에서, 시클릭 그룹(즉, 고리, 고리들, 고리 시스템, 카보시클, 헤테로시클)을 언급할 때 용어 지방족은 시클릭 코어 구조(선택적으로 부착된 치환기는 포함하지 않음)가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템의 일부가 아닌 적어도 하나의 고리 원자를 포함하는 것을 의미한다. 바람직하게는, 지방족 시클릭 그룹 내의 대부분의 고리 원자 및 보다 바람직하게는 모든 고리 원자는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템(예를 들어, 시클로hex산 또는 피페리딘에서)의 일부가 아니다. 여기서, 일반적으로 지방족 고리 또는 고리 시스템을 언급할 때 카보시클릭 그룹과 헤테로시클릭 그룹 사이에 구별이 이루어지지 않는 반면, 용어 "지방족"은 지방족 고리 그룹 내에서 헤테로원자가 포함되는지 여부를 나타내기 위해 카보시클 또는 헤테로시클을 설명하는 형용사로 사용될 수 있다.

[0248] 숙련된 기술자에 의해 이해되는 바와 같이, "아릴" 및 "방향족"이라는 용어는 가장 넓은 의미에서 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이머티, 즉 모든 고리 원자가 방향족 고리 시스템의 일부인 시클릭 그룹, 바람직하게는 동일한 방향족 고리 시스템의 일부로 이해될 수 있다. 그러나, 본 출원 전체에 걸쳐 용어 "아릴" 및 "방향족"은 모든 방향족 고리 원자가 탄소 원자인 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이머티로 제한된다. 대조적으로, 본원에서 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로방향족"은 적어도 하나의 방향족 탄소 고리 원자가 헤테로원자(즉, 탄소가 아님)로 대체된 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이머티를 지칭한다. 본 발명의 특정 구현예에서 달리 언급되지 않는 한, "헤테로아릴" 또는 "헤테로방향족" 내의 적어도 하나의 헤테로원자는 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S 로 이루어진 그룹으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 당업자는 형용사 "방향족" 및 "헤테로방향족"이 임의의 시클릭 그룹(즉, 임의의 고리 시스템)을 기술하는 데 사용될 수 있음을 이해한다. 즉, 방향족 시클릭 그룹(즉, 방향족 고리 시스템)은 아릴기이고 헤테로방향족 시클릭 그룹(즉, 헤테로방향족 고리 시스템)은 헤테로아릴기이다.

[0249] 본 발명의 특정 구현예에서 다르게 나타내지 않는 한, 본원에서 아릴기는 바람직하게는 6 내지 60개의 방향족 고리 원자, 더 바람직하게는 6 내지 40개의 방향족 고리 원자, 더욱 더 바람직하게는 6 내지 18개의 방향족 고리 원자를 포함한다. 본 발명의 특정 구현예에서 달리 나타내지 않는 한, 본원의 헤테로아릴기는 바람직하게는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 40개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 5 내지 20개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이 중 적어도 하나는 헤테로원자이고, 바람직하게는 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다. 하나 보다 많은 헤테로원자가 헤테로방향족 그룹을 포함하는 경우, 모든 헤테로원자는 바람직하게는 서로 독립적으로 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다.

[0250] 본 발명의 단락에서, 방향족 및 헤테로방향족 그룹(예를 들어, 아릴 또는 헤테로아릴 치환기) 모두에 대해, 방향족 고리 탄소 원자의 수는 특정 치환기의 정의에서 아래 첨자 숫자로, 예를 들어 "C₆-C₆₀-아릴"의 형태로 주어질 수 있다. 이는 각각의 아릴 치환기가 6 내지 60개의 방향족 탄소 고리 원자를 포함함을 의미한다. 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 치환기인지 여부에 관계없이 모든 다른 종류의 치환기에서 허용되는 탄소 원자의 수를 나타내기 위해 동일한 아래 첨자 숫자가 또한 사용된다. 예를 들어 "C₁-C₄₀-알킬"이라는 표현은 1 내지 40개의 탄소 원자를 포함하는 알킬 치환기를 의미한다.

[0251] 아릴기의 바람직한 예는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디하이드로피렌, 크라이센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤잔트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌으로부터 유도된 그룹 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0252] 헤테로아릴기의 바람직한 예는 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜; 피롤, 인돌, 이소인돌, 카바졸, 인돌로카바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프토이미다졸, 페난트로이미다졸, 피리도이미다졸, 피라지노이미다졸,

퀴녹살리노이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프후옥사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 카르볼린, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2, 4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,4,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸으로부터 유도된 그룹 또는 이들의 조합을 포함한다.

[0253] 본 출원 전반에 걸쳐 사용되는 용어 "아릴렌"은 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 부위를 보유함으로써 링커 구조로서 작용하는 2가 아릴 치환기를 지칭한다. 같은 단락에서 용어 "헤테로아릴렌"은 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 부위를 보유하여 링커 구조로 작용하는 2가 아릴 치환기를 의미한다.

[0254] 본 발명의 단락에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 언급할 때 "융합된(fused)"이라는 용어는 "융합된" 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 양쪽 고리 시스템의 일부인 적어도 하나의 결합을 공유함을 의미한다. 예를 들어, 나프탈렌(또는 치환기로 언급될 때 나프틸) 또는 벤조티오펜(또는 치환기로 언급될 때 벤조티페닐)은 본 발명의 단락에서 융합된 방향족 고리 시스템으로 간주되며, 여기에서 두 개의 벤젠 고리(나프탈렌의 경우) 또는 티오펜 및 벤젠(벤조티오펜의 경우)은 하나의 결합을 공유한다. 또한, 이러한 단락에서 결합을 공유하는 것은 각각의 결합을 구축하는 2개의 원자를 공유하는 것을 포함하는 것으로 이해될 수 있고, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 하나의 방향족 또는 헤테로방향족 시스템으로 이해될 수 있다. 또한, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템(예: 피렌에서)을 구성하는 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 의해 한 개보다 많은 결합이 공유될 수 있는 것으로 이해될 수 있다. 또한, 지방족 고리 시스템도 융합될 수 있으며, 이는 융합된 지방족 고리 시스템이 방향족이 아니라는 점을 제외하고는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는 것으로 이해될 수 있을 것이다. 또한, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 또한 지방족 고리 시스템과 융합(즉, 최소한 하나의 결합을 공유)될 수 있다.

[0255] 본 발명의 단락에서, 용어 "축합된(condensed)" 고리 시스템은 "융합된(fused)" 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는다.

[0256] 본 발명의 특정 구현예에서, 고리 또는 고리 시스템에 결합된 인접한 치환기는 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 융합되는 추가적인 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있다. 선택적으로 그렇게 형성된 융합된 고리 시스템은 인접한 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템보다 더 클(더 많은 고리 원자를 포함함을 의미함) 것으로 이해된다. 이러한 경우(및 그러한 숫자가 제공되는 경우), 융합된 고리 시스템에 포함된 고리 원자의 "총" 양은 인접한 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 포함된 고리 원자 및 인접한 치환기에 의해 형성된 추가적인 고리 시스템의 고리 원자의 합으로 이해되어야 하지만, 여기서 융합된 고리에 의해 공유되는 고리 원자는 한 번으로 계산되며 두 번은 계산되지 않는다. 예를 들어, 벤젠 고리는 나프탈렌 코어가 형성되도록 함께 다른 벤젠 고리를 형성하는 2개의 인접한 치환기를 가질 수 있다. 이 나프탈렌 코어는 2개의 탄소 원자가 2개의 벤젠 고리에 의해 공유되므로 10개의 고리 원자를 포함하므로 두 번이 아니라 한 번만 계산된다. 이 단락에서 "인접한 치환기"라는 용어는 동일한 또는 이웃하는 원자에 부착된 치환기를 의미한다.

[0257] 일반적으로, 본 발명의 단락에서, "인접한 치환기" 또는 "인접한 그룹"라는 용어는 동일하거나 이웃하는 원자에 결합된 치환기 또는 그룹을 지칭한다.

[0258] 본 발명의 단락에서, 용어 "알킬기"는 임의의 선형, 분지형 또는 환형 알킬 치환기로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 특히, 용어 "알킬"은 치환기 메틸(Me), 에틸(Et), n-프로필(ⁿPr), i-프로필(ⁱPr), 시클로프로필, n-부틸(ⁿBu), i-부틸(ⁱBu), s-부틸(^sBu), t-부틸(^tBu), 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오-헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로[2,2,2]옥틸, 2-비시클로[2,2,2]-옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-덱-1-일, 1,1-디메틸-n-도덱-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라덱-1-일, 1, 1-디메틸-n-헥사덱-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타덱-1-일, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-덱-1-일, 1,1-디메틸-n-도덱-1-일, 1,1- 디메틸-n-테트라덱-1-일, 1,1-디메틸-n-헥사덱-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타덱-1-일, 1-(n-프로필)-시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)-시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)-시클로헥스-1-일, 1-

(n-옥틸)-시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)-시클로헥스-1-일을 포함한다.

- [0259] 예를 들어 s-부틸, s-펜틸 및 s-헥실에서 "s"는 "2차"를 의미하고; 즉, s-부틸, s-펜틸 및 s-헥실은 각각 sec-부틸, sec-펜틸 및 sec-헥실과 같다. 예를 들어 t-부틸, t-펜틸 및 t-헥실에서 "t"는 "3차"를 의미하고; 즉, t-부틸, t-펜틸 및 t-헥실은 각각 tert-부틸, tert-펜틸 및 tert-헥실과 동일하다.
- [0260] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알케닐"은 선형, 분지형 및 환형 알케닐 치환기를 포함한다. 용어 "알케닐기"는 예를 들어 치환기인 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타다이에닐을 포함한다.
- [0261] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알킬닐"은 선형, 분지형 및 환형 알킬닐 치환기를 포함한다. 용어 "알킬닐기"는 예를 들어 에틸닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐을 포함한다.
- [0262] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알콕시"는 선형, 분지형 및 환형 알콕시 치환기를 포함한다. 용어 "알콕시기"는 예를 들어 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 및 2-메틸부톡시를 포함한다.
- [0263] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 용어 "티오알콕시"는 선형, 분지형 및 환형 티오알콕시 치환기를 포함하며, 여기서 대응되는 알콕시기의 산소 원자 O는 S로 대체된다.
- [0264] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 용어 "할로겐"(또는 화학 명명법에서 치환기를 나타낼 때 "할로")는 가장 넓은 의미에서 원소 주기율표에서 7번째 주요 그룹(즉, 17족)의 원소의 임의의 원자, 바람직하게는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드인 것으로서 이해될 수 있다.
- [0265] 분자 단편이 치환기이거나 다른 모이어티에 달리 부착된 것으로 기술될 때 그 이름은 그것이 단편(예: 나프틸, 디벤조푸릴)인 것처럼 쓰이거나 온전한 그룹인 것처럼(예: 나프탈렌, 디벤조푸란) 쓰일 수 있다. 본원에 사용된 바와 같이, 치환기 또는 부착된 단편을 지정하는 이러한 상이한 방식은 동등한 것으로 간주된다.
- [0266] 또한, 본원에서 " C_6-C_{60} -아릴" 또는 " C_1-C_{40} -알킬"과 같은 치환기가 그 치환기 내의 결합 부위를 나타내는 이름 없이 언급될 때마다, 이는 각각의 치환기가 임의의 방법으로 결합될 수 있음을 의미한다. 원자. 예를 들어, " C_6-C_{60} -아릴"-치환기는 임의의 6 내지 60개의 방향족 탄소 원자를 통해 결합될 수 있고 " C_1-C_{40} -알킬"-치환기는 임의의 1 내지 40개의 지방족 탄소 원자를 통해 결합될 수 있다. 한편, "2-시아노페닐"-치환기는 정확한 화학 명명법을 허용하도록 그의 CN-기가 결합 부위에 인접하는 방식으로만 결합될 수 있다.
- [0267] 본 발명의 단락에서, "부틸", "비페닐" 또는 "터페닐"과 같은 치환기가 추가적인 상세한 설명 없이 언급될 때마다, 이는 각각의 치환기의 임의의 이성질체가 특정 치환기로 허용될 수 있음을 의미한다. 이와 관련하여, 예를 들어 치환기로서의 용어 "부틸"은 치환기로서 n-부틸, s-부틸, t-부틸 및 이소-부틸을 포함한다. 마찬가지로, 치환기로서 용어 "비페닐"은 오르쏘-비페닐, 메타-비페닐, 또는 파라-비페닐을 포함하며, 여기서 오르쏘, 메타 및 파라는 비페닐 치환기를 갖는 각각의 화학 모이어티에 대한 비페닐 치환기의 결합 부위에 관하여 정의된다. 유사하게, 용어 "터페닐"은 치환기로서 3-오르쏘-터페닐, 4-오르쏘-터페닐, 4-메타-터페닐, 5-메타-터페닐, 2-파라-터페닐 또는 3-파라-터페닐을 포함하며, 여기서, 공지된 바와 같이 숙련된 기술자에게 오르쏘, 메타 및 파라는 서로에 대한 터페닐 그룹 내의 두 Ph-부분의 위치를 나타내고 "2-", "3-", "4-" 및 "5-"는 터페닐 치환기를 갖는 각각의 화학 모이어티에 대한 터페닐 치환기의 결합 위치를 나타낸다.
- [0268] 상기 정의된 모든 그룹 및 실제로 모든 화학 모이어티는 이들이 시클릭 또는 비(non)시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족인지 여부에 관계없이 본원에 기재된 특정 구현예에 따라 추가로 치환될 수 있는 것으로 이해된다.
- [0269] 본 실시예에서의 그룹의 정의가 위에서 주어진 일반적인 정의와 다르게 정의되는 경우에는 본 실시예에서의 정의가 적용된다.
- [0270] 본원에 언급된 임의의 구조에 포함된 모든 수소 원자(H)는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 이를 구체적으로 나타내지 않고 중수소(D)로 대체될 수 있다. 수소를 중수소로 대체하는 것은 일반적인 관행이며 당업자에게는 명백하다.
- [0271] 실험 또는 계산 데이터를 비교하는 경우 동일한 방법론으로 값을 결정해야 한다. 예를 들어, 특정 방법에 의해 실험적 ΔE_{ST} 가 0.4eV 미만으로 결정되면 동일한 조건을 포함하는 동일한 특정 방법을 사용하는 경우에만 비교가 유효하다. 구체적인 예를 들자면, 상이한 화합물의 광발광 양자 수율(PLQY)의 비교는 PLQY의 결정이 동일한

반응 조건(예: 실온, 10% PMMA 필름에서의 측정)에서 동일한 프로토콜에 의해 수행된 경우에만 유효하다. 또한 계산된 에너지 값은 동일한 계산 방법(동일한 기능 및 동일한 기준 설정)으로 결정된다.

- [0272] 초형광(hyper-fluorescence)은 광전자 소자, 특히 OLED로부터의 발광에 대한 개념으로서, 여기서 적어도 하나의 발광층은 하나 이상의 TADF 물질 및 하나 이상의 형광 에미터를 포함한다. 초형광에서 적어도 하나의 TADF 물질은 역 시스템간 교차(reverse-intersystem-crossing, RISC)를 통해 삼중항 여기 상태를 단일항 여기 상태로 변환할 수 있으며 여기 에너지를 적어도 하나의 형광 에미터로 전달하여, 빛을 발광한다. 이는 효율적인 형광 생성을 위해 삼중항 엑시톤을 수확하도록 허용할 수 있다.
- [0273] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자
- [0274] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 관한 것이다.
- [0275] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 일 구현예에서, 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0276] · 유기 발광다이오드(OLED),
- [0277] · 발광 전기화학 전지,
- [0278] · OLED 센서, 특히 주변과 완전히 차단되지 않은 가스 및 증기 센서,
- [0279] · 유기 다이오드,
- [0280] · 유기 태양 전지,
- [0281] · 유기 트랜지스터,
- [0282] · 유기 전계 효과 트랜지스터,
- [0283] · 유기 레이저, 및
- [0284] · 하향 변환 소자(down-conversion element).
- [0285] 발광 전기화학 전지는 캐소드, 애노드 및 본 발명에 따른 유기 분자를 포함할 수 있는 활성층의 3개 층으로 이루어진다.
- [0286] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC), 유기 레이저 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0287] 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED)이다.
- [0288] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 하기 층 구조를 나타낼 수 있는 OLED일 수 있다:
- [0289] 1. 기판
- [0290] 2. 애노드층 A
- [0291] 3. 정공 주입층, HIL
- [0292] 4. 정공 수송층, HTL
- [0293] 5. 전자 차단층, EBL
- [0294] 6. 발광층, EML
- [0295] 7. 정공 차단층, HBL
- [0296] 8. 전자 수송층, ETL
- [0297] 9. 전자주입층, EIL
- [0298] 10. 캐소드층 C,
- [0299] 여기서 OLED(역전된 층 구조를 가짐)는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하고, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각 층 유형의 하나 보다 많은 층

을 포함할 수 있다.

- [0300] 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 수분, 증기 및/또는 가스를 포함하는 환경에서 유해한 종에 대한 손상을 일으키는 노출로부터 장치를 보호하는 하나 이상의 보호층(protective layer)을 선택적으로 포함할 수 있다.
- [0301] 본 발명의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 다음의 역전된 층(inverted layer) 구조를 갖는 OLED이다:
- [0302] 1. 기판
- [0303] 2. 캐소드층 C
- [0304] 3. 전자주입층, EIL
- [0305] 4. 전자 수송층, ETL
- [0306] 5. 정공 차단층, HBL
- [0307] 6. 발광층, B
- [0308] 7. 전자 차단층, EBL
- [0309] 8. 정공 수송층, HTL
- [0310] 9. 정공 주입층, HIL
- [0311] 10. 애노드층 A
- [0312] 여기서 OLED는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하고, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고, OLED는 위에서 정의된 각 층 유형의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0313] 본 발명에 따른 유기 분자(위에서 나타낸 구현예에 따름)는 정확한 구조 및 치환에 따라 다양한 층에 사용될 수 있다. 사용되는 경우, 광전자 소자, 특히 OLED에서 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 비율은 0.1 내지 99 중량%(중량 백분율), 보다 특히 1% 내지 80중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0314] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 적층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다. 이 구조에서는 OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리, 개별 소자가 서로 위에 쌓인다. 혼합광은 적층 구조를 나타내는 OLED에서 생성될 수 있으며, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 선택적으로 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있으며, 이는 일반적으로 2개의 OLED 서브유닛 사이에 위치하며 일반적으로 n-도핑 및 p-도핑 층으로 구성되며, 하나의 CGL의 n-도핑 층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한다.
- [0315] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이에 2개 이상의 발광층을 포함하는 OLED이다. 특히, 이러한 소위 탠덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 발광하고, 하나의 발광층은 녹색광을 발광하고, 하나의 발광층은 청색광을 발광하고, 선택적으로 전하 생성층, 개별 발광층 사이의 차단층 또는 수송층과 같은 추가적인 층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 탠덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층이 병합될 수 있다.
- [0316] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 실질적으로 백색 광전자 소자일 수 있으며, 이는 소자가 백색광을 발광한다는 것을 의미한다. 예를 들어, 이러한 백색 발광 광전자 소자는 적어도 하나의 (심)청색 에미터 분자 및 녹색 및/또는 적색 광을 발광하는 하나 이상의 에미터 분자를 포함할 수 있다. 그런 다음 본문 뒷부분에 설명된 바와 같이, 두 개 이상의 분자 사이에 선택적으로 에너지 전달이 있을 수 있다.
- [0317] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자는 광전자 소자의 발광층(EML), 가장 바람직하게는 OLED의 EML에 포함될 수 있다. 그러나, 본 발명에 따른 유기 분자는 또한 예를 들어 전자 수송층(ETL) 및/또는 전자 차단층(EBL) 또는 엑시톤 차단층 및/또는 정공 수송층(HTL) 및/또는 정공 차단층(HBL)에서 사용될 수 있다. 사용되는 경우, 광전자 소자, 특히 OLED에서 각각의 층에서 본 발명

에 따른 유기 분자의 분율은 0.1 내지 99 중량%, 더 특히 1 내지 80 중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.

[0318] 광전자 소자, 특히 OLED의 개별 층에 적합한 재료의 선택 기준은 당업자의 상식의 일부를 형성한다. 최신 기술은 개별 층에 사용되는 많은 물질을 보여주고 또한 어떤 물질이 서로 나란히 사용하기에 적합한지 알려준다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 물질이 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에도 사용될 수 있음이 이해될 수 있다. 이하에서, 개별 층에 대한 물질의 바람직한 예가 주어질 것이다. 전술한 바와 같이, 이것은 아래에 열거된 모든 유형의 층이 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 존재해야 함을 의미하지 않는다는 것을 이해해야 한다. 추가로, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 2개 이상의 발광층(EML)과 같이 다음에 나열된 각각의 층의 하나보다 많은 층을 포함할 수 있음이 이해될 수 있다. 동일한 유형의 2개 이상의 층(예를 들어, 2개 이상의 EML 또는 2개 이상의 HTL)이 반드시 동일한 물질 또는 심지어 동일한 비율의 동일한 물질을 포함하지 않는다는 것도 이해될 수 있다. 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 다음에 열거된 모든 층 유형을 포함할 필요는 없으며, 여기에서 애노드 층, 캐소드 층 및 발광층은 일반적으로 모든 경우에 존재한다.

[0319] 상기 기판은 임의의 물질 또는 물질들의 조성물에 의해 형성될 수 있다. 가장 빈번하게는 유리 슬라이드가 기판으로서 사용된다. 대안적으로, 얇은 금속 층(예를 들어, 구리, 금, 은 또는 알루미늄 필름) 또는 플라스틱 필름이나 슬라이드가 사용될 수 있다. 이것은 더 높은 수준의 유연성(flexibility)을 허용할 수 있다. 애노드 층 A는 대부분 (실질적으로) 투명한 필름을 얻게 할 수 있는 물질로 이루어진다. OLED로부터의 발광을 허용하기 위해 두 전극 중 적어도 하나는 (실질적으로) 투명해야 하므로, 애노드 층 A 또는 캐소드 층 C 중 하나는 투명하다. 바람직하게는, 애노드 층 A는 투명 전도성 산화물(TCOs)을 다량 포함하거나 심지어 이로 이루어진다. 이러한 애노드 층 A는 예를 들어 인듐 주석 산화물, 알루미늄 아연 산화물, 불소 도핑된 주석 산화물, 인듐 아연 산화물, PbO, SnO, 지르코늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 바나듐 산화물, 텅스텐 산화물, 흑연, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 도핑된 GaAs, 도핑된 폴리아닐린, 도핑된 폴리피롤 및/또는 도핑된 폴리티오펜을 포함할 수 있다.

[0320] 바람직하게는, 애노드 층 A는 (실질적으로) 인듐 주석 산화물(ITO)(예를 들어, $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$)로 구성될 수 있다. 투명 전도성 산화물(TCO)로 인해 야기되는 애노드층(A)의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용함으로써 상쇄될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사(quasi) 전하 운반체(즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 운반체의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입 층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌 디옥시 티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설포네이트(PSS), MoO_2 , V_2O_5 , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT 및 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층(A)에서 정공 수송층(HTL)으로 금속이 확산되는 것을 방지할 수 있다. 예를 들면, HIL은 PEDOT:PSS(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜:폴리스티렌 설포네이트), PEDOT(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜), mMTDATA(4,4',4''-트리스[페닐(m-톨릴)아미노]트리페닐아민), 스피로-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-니스-(1-나프탈레닐)-N,N'-비스-페닐-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민), NPNPB(N,N'-디페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디페닐-아미노)페닐]벤지딘), MeO-TPD(N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘), HAT-CN(1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌-헥사카르보니트릴) 및/또는 스피로-NPD(N,N'-디페닐-N,N'-비스-(1-나프틸)-9,9'-스피로비플루오렌-2,7-디아민)으로 구성될 수 있다.

[0321] 애노드 층 A 또는 정공 주입 층(HIL)에 인접하여 일반적으로 정공 수송 층(HTL)이 위치한다. 여기에 임의의 정공 수송 화합물이 사용될 수 있다. 예를 들어, 트리아릴아민 및/또는 카바졸과 같은 전자가 풍부한 헤테로방향족 화합물이 정공 수송 화합물로서 사용될 수 있다. HTL은 애노드층(A)과 발광층(EML) 사이의 에너지 장벽을 감소시킬 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 또한 전자 차단층(EBL)일 수 있다. 바람직하게는, 정공 수송 화합물은 비교적 높은 에너지 준위의 삼중항 상태 T1을 갖는다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 TCTA(트리스(4-카바조일-9-일페닐)아민), poly-TPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), α -NPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), TAPC(4,4'-시클로헥실리렌-비스[N,N-비스(4-메틸페닐)벤젠아민]), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), Spiro-TAD, DNTPD, NPB, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN 및/또는 TrisPcz(9,9'-디페닐-6-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H,9'H-3,3'-비카바졸)와 같은 별 모양의 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공-수송 매트릭스 내의 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑된 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이 금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄($\text{F}_4\text{-TCNQ}$), 구리-펜타플루오로벤조에이트($\text{Cu}(\text{I})\text{pFBz}$) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

- [0322] EBL은 예를 들어 mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), TCTA, 2-TNATA, mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), tris-Pcz, CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), 및/또는 DCB(N,N'-디카바졸일-1,4-디메틸벤젠)를 포함할 수 있다.
- [0323] 정공 수송층(HTL) 또는 (존재하는 경우) 전자 차단층(EBL)에 인접하여, 전형적으로 발광층(EML)이 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 발광 분자(즉, 에미터 물질)를 포함한다. 일반적으로 EML은 하나 이상의 호스트 물질(매트릭스 물질이라고도 함)를 추가로 포함한다. 예시적으로, 호스트 물질은 CBP(4,4'-비스-(N-카바졸일)-비페닐), mCP(1,3-bis(carbazol-9-yl)benzene), mCBP(3,3- di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), CzSi(9-(4-tert-Butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-카바졸), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), DPEPO(비스[2-(디페닐포스피노)페닐]에테르 옥사이드), 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조푸라닐)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조티오펜)페닐]-9H-카바졸, T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5- 트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 중에서 선택된다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 호스트 물질은 일반적으로 각 호스트 물질에 내장된 적어도 하나의 발광 분자의 제1(즉, 가장 낮은) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 가장 낮은) 여기 단일항(S1) 에너지 준위보다 에너지적으로 높은 제1(즉, 가장 낮은) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 가장 낮은) 여기 단일항(S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택되어야 한다.
- [0324] 전술한 바와 같이, 본 발명의 단락에서 광전자 소자의 적어도 하나의 EML은 적어도 하나의 본 발명에 따른 분자를 포함하는 것이 바람직하다. 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 EML의 바람직한 조성은 본문 뒷부분(아래 참조)에서 더 자세히 설명된다.
- [0325] 발광층(EML)과 인접하여 전자 수송층(ETL)이 위치할 수 있다. 여기에 임의의 전자 수송 물질이 사용될 수 있다. 예시적으로, 벤즈이미다졸, 피리딘, 트리아졸, 트리아진, 옥사디아졸(예를 들어, 1,3,4-옥사디아졸), 포스핀옥사이드 및 설펜과 같은 전자가 부족한 화합물이 사용될 수 있다. 전자 수송 물질은 또한 1,3,5-트리(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐(TPBi)과 같은 별 모양의 헤테로시클릭 화합물일 수 있다. ETL은 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐-포스핀옥사이드), BPyTP2(2,7-디(2,2'-비피리딘-5-일)트리페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), BmPyPhB(1,3-비스[3,5-디(피리딘-3-일)페닐]벤젠) 및/또는 BTB(4,4'-비스-[2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐)]-1,1'-비페닐)를 포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq((8-hydroxyquinolinato)lithium)와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)은 또한 정공을 차단할 수 있거나 일반적으로 EML과 ETL 사이에 정공 차단층(HBL)이 도입된다.
- [0326] 정공 차단층(HBL)은 예를 들어 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 = 바토쿠프로인), 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9,9'-(5-(6-([1,1'-비페닐]-3-일)-2-페닐피리미딘-4-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸), BA1q(비스(8-하이드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐포스피록사이드), T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TCB/TCP(1,3,5-트리스(N-카바졸릴)벤졸/1,3,5-트리스(카바졸)-9-일)벤젠)을 포함할 수 있다.
- [0327] 전자 수송층(ETL)에 인접하여 캐소드층 C가 위치할 수 있다. 캐소드층 C는 예를 들어 금속(예를 들어, Al, Au, Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이들로 이루어질 수 있다. 실용적인 이유로 캐소드층은 또한 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (실질적으로) 불투명한 금속으로 구성될 수 있다. 대안적으로 또는 추가적으로, 캐소드층 C는 또한 흑연 및/또는 탄소 나노튜브(CNT)를 포함할 수 있다. 대안적으로, 캐소드층 C는 또한 나노스케일의 은 와이어를 포함하거나 이로 구성될 수 있다.
- [0328] OLED는 선택적으로 전자 수송층(ETL)과 캐소드층(C) 사이에 보호층(전자 주입층(EIL)으로 지칭될 수 있음)을 추가로 포함할 수 있다. 이 층은 불화리튬, 불화세슘, 은, Liq(8-히드록시퀴놀리놀라토 리튬), Li₂O, BaF₂, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.
- [0329] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 차단층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 화합물을 포함할 수 있다.
- [0330] 본 명세서에 사용된 바와 같이, 특정 문단에서 보다 구체적으로 정의되지 않은 경우, 발광 및/또는 흡수된 광의

색상 지정은 다음과 같다:

- [0331] 보라색: >380-420 nm의 파장 범위;
- [0332] 심청색: >420-480 nm의 파장 범위;
- [0333] 하늘색: >480-500 nm의 파장 범위;
- [0334] 녹색: >500-560 nm의 파장 범위;
- [0335] 황색: >560-580 nm의 파장 범위;
- [0336] 주황색: >580-620 nm의 파장 범위;
- [0337] 적색: >620-800 nm의 파장 범위.
- [0338] 에미터 분자와 관련하여 이러한 색상은 최대 발광을 나타낸다. 따라서 예를 들어 심청색 에미터는 >420-480nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 하늘색 에미터는 >480-500nm 범위에서 최대 발광을 가지며, 녹색 에미터는 >500-560nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 적색 에미터는 >620-800nm 범위에서 최대 발광을 갖는다.
- [0339] 심청색 에미터는 바람직하게는 475 nm 미만, 더 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만의 최대 발광을 가질 수 있다. 그것은 일반적으로 420 nm 초과, 바람직하게는 430 nm 초과, 보다 바람직하게는 440 nm 초과 또는 심지어 450 nm 초과일 것이다. 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 내에 본 발명에 따른 유기 분자 10중량%로 스핀 코팅된 필름으로부터 실온(즉, (대략) 20℃)에서 측정된 420 내지 500 nm, 보다 바람직하게는 430 내지 490 nm, 훨씬 바람직하게는 440 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 내지 470 nm의 최대 발광을 나타낸다.
- [0340] 또 다른 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에서 정의된 원색의 청색(CIE_x = 0.131 및 CIE_y = 0.046)의 CIE_x(=0.131) 및 CIE_y(=0.046)에 가까운 CIE_x 및 CIE_y 색좌표의 빛을 발광하고, 따라서 UHD(Ultra High Definition) 디스플레이(예: UHD-TV)에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 더 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 보다 바람직하게는 0.08 내지 0.18 사이 또는 심지어 0.10 내지 0.15 사이의 CIE_x 색좌표 및/또는 0.00 내지 0.45 사이, 바람직하게는 0.01 내지 0.30 사이, 보다 바람직하게는 0.02 내지 0.20 사이 또는 훨씬 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 사이 또는 심지어 0.04 내지 0.10 사이의 CIE_y 색좌표를 나타내는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED에 관한 것이다.
- [0341] 또 다른 구현예는 1000cd/m²에서 8% 초과, 더욱 바람직하게는 10% 초과, 더욱 바람직하게는 13% 초과, 더욱 더 바람직하게는 15% 초과 또는 심지어 20% 초과외의 외부 양자 효율을 나타내고/나타내거나 420 nm 내지 500 nm, 보다 바람직하게는 430 nm 내지 490 nm, 훨씬 더 바람직하게는 440 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 nm 내지 470 nm 사이의 최대 발광을 나타내고/나타내거나 500cd/m²에서 100시간 초과, 바람직하게는 200시간 초과, 더욱 바람직하게는 400시간 초과, 훨씬 더욱 바람직하게는 750시간 초과 또는 심지어 1000시간 초과외의 LT80 값을 나타내는 OLED에 관한 것이다.
- [0342] 녹색 에미터 물질은 바람직하게는 500 내지 560 nm, 보다 바람직하게는 510 내지 550 nm, 보다 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 가질 수 있다. 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트, PMMA) 내에 본 발명에 따른 유기 분자 10중량%를 포함하는 스핀 코팅된 필름으로부터 실온(즉, (대략) 20℃)에서 측정된 500 내지 560 nm, 훨씬 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 가장 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 나타낸다.
- [0343] 또 다른 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에 정의되어 있는 바와 같은 원색의 녹색(CIE_x = 0.170 및 CIE_y = 0.797)의 CIE_x(= 0.170) 및 CIE_y(= 0.797) 색좌표에 가까운 CIE_x 및 CIE_y 색좌표를 갖는 광을 발광하는 OLED에 관한 것이다. 따라서 이와 같은 소자는 초고해상도(UHD) 디스플레이, 예를 들어 UHD-TV에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 본 단락에서 상기 "가까운"이라는 용어는 본 단락의 끝에 제공된 CIE_x 및 CIE_y 좌표의 범위를 나타낸다. 상업적으로 적용될 때 전형적으로는 상부 발광 소자(상부 전극이 투명함)가 사용되는 반면, 본원 전반에 걸쳐 사용되는 테스트 소자는 하부 발광 소자(하부 전극 및 기판이 투명함)가 사용된다. 따라서 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.10 내지 0.45, 바람직하게는 0.10 내지 0.35, 보다 바람직하게는 0.10 내지 0.30, 더욱 더 바람직하게는 0.10 내지 0.25 또는 심지어 0.15 내지 0.20의 CIE_x 색좌표 및/또는 0.60 내지 0.92, 바람직하게는 0.65 내지 0.90, 보다

바람직하게는 0.70 내지 0.88, 더욱 더 바람직하게는 0.75 내지 0.86 또는 심지어 0.79 내지 0.84의 CIEy 색 좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.

[0344] 또 다른 바람직한 구현에는 14500 cd/m²에서 10% 초과, 더 바람직하게는 13% 초과, 더 바람직하게는 15% 초과, 더욱 더 바람직하게는 17% 초과 또는 심지어 20% 초과외의 외부 양자 효율을 나타내고/나타내거나 500 내지 560 nm, 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm에서 최대 발광을 나타내고/나타내거나 14500 cd/m²에서 100 h 초과, 바람직하게는 250 h 초과, 더 바람직하게는 500 h 초과, 훨씬 더 바람직하게는 750 h 초과, 또는 심지어 1000 h 초과외의 LT97 값을 나타내는 OLED에 관한 것이다.

[0345] 또 다른 바람직한 구현에는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 분명한 색점에서 발광하는 OLED에 관한 것이다. 바람직하게는, OLED는 좁은 발광 대역(작은 반치폭(FWHM))으로 빛을 발광한다. 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED는 0.50eV 미만, 바람직하게는 0.48eV 미만, 더 바람직하게는 0.45eV 미만, 더 바람직하게는 0.43eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 40eV 미만, 보다 바람직하게는 0.35eV 미만, 더욱 바람직하게는 0.30eV 미만, 또는 더욱 바람직하게는 0.25eV 미만의 주 발광 피크의 FWHM(full width at half maximum)을 갖는 빛을 발광한다.

[0346] 본 발명에 따르면, 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 디스플레이, 조명 응용 분야의 광원 및 의료 및/또는 미용 응용 분야(예: 광 요법)의 광원으로 사용될 수 있다.

[0347] 본 발명에 따른 유기 분자와 추가 물질의 조합

[0348] 광전자 소자(여기서는 바람직하게는 OLED) 내의 임의의 층, 특히 발광층(EML)이 단일 물질 또는 다른 물질들의 조합으로 이루어질 수 있다는 것은 당업자에게는 일반 지식의 일부를 형성한다.

[0349] 예를 들어, 당업자는 EML이 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광할 수 있는 단일 물질로 구성될 수 있음을 이해한다. 그러나, 당업자는 또한 광전자 소자(여기서는 바람직하게는 OLED)의 EML에서 상이한 물질들, 특히 하나 이상의 호스트 물질(들)(즉, 매트릭스 물질(들)); 여기서 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 포함될 때 호스트 물질(들) H^B로 지칭됨) 및 소자에 전압 및 전류를 인가할 때 그 중 적어도 하나가 발광하는 (즉, 에미터 물질) 하나 이상의 도펀트 물질을 결합하는 것이 유리할 수 있음을 이해한다.

[0350] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 EML 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나 보다 많은 층에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.

[0351] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나보다 많은 층에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.

[0352] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다. 당업자는 이것이 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자가 예를 들어 각각의 EML의 호스트 물질 H^B(즉, 매트릭스 물질) 또는 적어도 하나의 호스트 물질 H^B(즉, 매트릭스 물질)에 매립된 도펀트(물질)로서 사용될 수 있음을 의미하는 것으로 이해한다. 당업자는 또한 도펀트(물질)가 발광성(즉, 에미터 물질) 또는 비발광성(즉, 전압 및 전류가 광전자 소자에 인가될 때 발광하지 않음)일 수 있음을 이해한다.

[0353] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 일 구현예에서, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의, 본 발명에 따른 유기 분자는 발광층 EML에서 에미터 물질로서 사용된다. 즉, 전압(및 전류)이 해당 소자에 인가될 때 발광한다.

[0354] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 또 다른 구현예에서, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의, 본 발명에 따른 유기 분자는 발광층 EML에 존재하지만, 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광하지 않는다. 즉, 그러한 경우에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자는 호스트 물질 H^B 또는 비발광성 도펀트일 것이고, 둘 다 당업자에게 알려져 있다.

[0355] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 일 구현예에서, 하나 보다 많은 본 발명에 따른 유기 분자가 적어도 하나의 EML에 포함된다. 당업자는 이것이 하나 보다 많은

본 발명에 따른 유기 분자가 모두 상기 EML에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트 물질)일 수 있거나 모두 상기 EML에서 호스트 물질 H^B 일 수 있거나 또는 모두 상기 EML에서 비발광 도펀트 물질일 수 있거나, 상기 유기 분자는 서로 독립적으로 호스트 물질 H^B , 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트 물질) 또는 비발광성 도펀트 물질로부터 선택될 수 있음을 의미한다고 이해한다.

[0356] 당업자에게 공지된 바와 같이, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED)에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트)로부터의 발광은 여기된 단일항 상태(전형적으로 최저 여기 단일항 상태 S1) 및 여기된 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1)로부터의 인광을 포함한다.

[0357] 형광 에미터 F는 전자 여기(예를 들어 광전자 소자에서) 시 실온(즉, (대략) 20°C)에서 빛을 발광할 수 있으며, 발광 여기 상태는 단일항 상태이다. 형광 에미터는 일반적으로 초기 전자 여기(예: 전자 정공 재결합에 의한)가 에미터의 여기 단일항 상태를 제공할 때 나노초의 시간 척도에서 즉시(즉, 직접적인) 형광을 나타낸다.

[0358] 본 발명의 단락에서, 지연 형광 물질은 역 시스템간 교차(RISC; 즉, 업 시스템간 교차 또는 역 시스템간 교차)에 의해 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1에서)로부터 여기 단일항 상태(전형적으로 최저 여기 단일항 상태 S1)에 도달할 수 있는 물질이고, 또한 그렇게 도달한 여기 단일항 상태(일반적으로 S1)에서 전자 기저 상태로 돌아올 때 발광할 수 있다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1)에서 발광 여기 단일항 상태(일반적으로 S1)로의 RISC 후에 관찰된 형광 발광은 직접적인(즉, 즉시) 형광이 일어나는(일반적으로 나노초 범위) 시간 척도 보다 느린 시간 척도(일반적으로 마이크로초 범위)에서 발생하고, 따라서 지연 형광(DF)이라고 한다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1에서)에서 여기 단일항 상태(일반적으로 S1까지)로의 RISC가 열 활성화를 통해 발생하고 이렇게 채워진 여기 단일항 상태가 발광하는 경우(지연형광 발광), 그 과정을 열 활성화 지연 형광(TADF)과 같이 표현한다. 따라서 TADF 물질은 앞서 설명한 바와 같이 TADF(Thermally Activated Delayed Fluorescent)를 발광할 수 있는 물질이다. 형광 에미터 F의 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위 $E(S1^E)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 $E(T1^E)$ 사이의 에너지 차이 ΔE_{ST} 가 감소하면, RISC에 의한 최저 여기 단일항 상태에서부터 최저 여기 삼중항 상태의 전환은 고효율로 일어날 수 있음이 당업자에게 알려져 있다. 따라서, TADF 물질이 일반적으로 작은 ΔE_{ST} 값을 가질 것(아래 참조)이라는 것은 당업자의 일반적인 지식의 일부를 형성한다. 당업자에게 공지된 바와 같이, TADF 물질은 위에 제시된 바와 같이 단지 그 자체가 여기 삼중항 상태에서 여기 단일항 상태로의 RISC를 하고, 후속하여 TADF를 방출할 수 있는 물질이 아닐 수 있다. TADF 물질은 사실상 두 종류의 물질, 바람직하게는 두 호스트 물질 H^B , 더 바람직하게는 p-호스트 물질 H^P 및 n-호스트 물질 H^N 로부터 형성되는 엑시플렉스일 수 있음이 당업자에게 알려져 있다 (아래 참조).

[0359] (열적으로 활성화된) 지연 형광의 발생은 예를 들어 시간 분해(즉, 과도) 광발광(PL) 측정으로부터 얻은 감쇠 곡선에 기초하여 분석될 수 있다. 이를 위해, 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 내에서 1-10 중량%, 특히 10 중량%의 각 에미터(즉, 가정된 TADF 물질)의 스핀 코팅된 필름이 샘플로서 사용될 수 있다. 분석은 예를 들어 Edinburgh Instruments의 FS5 형광 분광기를 사용하여 수행될 수 있다. 샘플 PMMA 필름을 큐벳에 넣고 측정하는 동안 질소 분위기가 유지될 수 있다. 데이터 수집은 잘 확립된 시간 상관 단일 광자 계수(TCSPC, vide infra) 기술을 사용하여 수행될 수 있다. 시간 및 신호 강도의 여러 자릿수에 걸쳐 전체 감쇠 역학을 수집하기 위해 4개의 시간 창(200ns, 1µs 및 20µs 및 > 80µs보다 더 긴 측정 범위)에서 측정을 수행하고 결합할 수 있다(아래 참조).

[0360] TADF 물질은 앞서 언급한 전체 감쇠 역학과 관련하여 다음 두 가지 조건을 충족하는 것이 바람직하다.

[0361] (i) 감쇠 역학은 나노초(ns) 범위와 마이크로초(µs) 범위의 두 가지 시간 영역을 나타냄; 및

[0362] (ii) 두 가지 시간 영역에서 발광 스펙트럼의 모양이 일치함.

[0363] 여기서, 첫 번째 감쇠 영역에서 발광된 광의 부분은 즉시 형광으로 간주되고, 두 번째 감쇠 영역에서 발광된 일부는 지연 형광으로 간주된다.

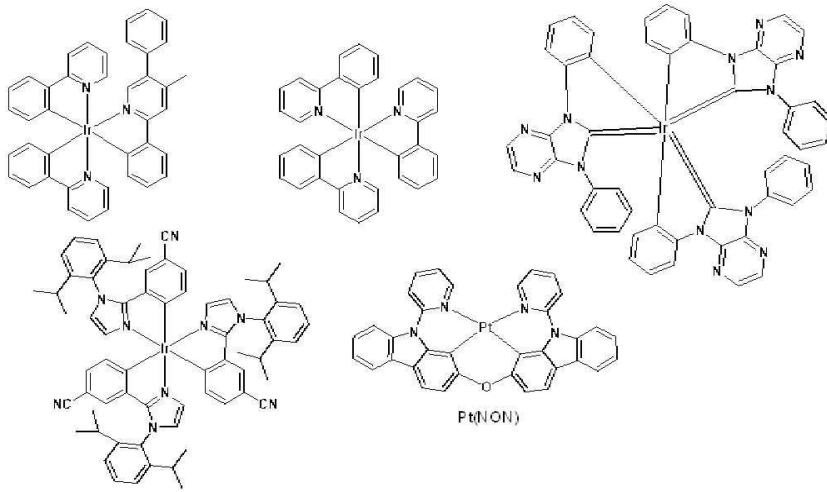
[0364] 지연 형광과 즉시 형광의 비율은 소위 n-값의 형태로 표현될 수 있으며, 이는 다음 방정식에 의하여 각각의 광 발광 감쇠를 시간에 따라 적분하여 계산할 수 있다.

[0365]
$$\frac{\int I_{DF}(t) dt}{\int I_{PF}(t) dt} = n$$

- [0366] 본 발명의 단락에서, TADF 물질은 바람직하게는 0.05보다 크거나($n > 0.05$), 보다 바람직하게는 0.1보다 크거나($n > 0.1$), 훨씬 더 바람직하게는 0.15 보다 크거나($n > 0.15$), 특히 바람직하게는 0.2보다 크거나($n > 0.20$), 또는 심지어 0.25보다 크다($n > 0.25$).
- [0367] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 0.05보다 큰($n > 0.05$) n-값(즉시 형광에 대한 지연 형광의 비율)을 나타낸다.
- [0368] 본 발명의 단락에서, TADF 물질 E^B 는 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위 $E(S1^E)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 $E(T1^E)$ 사이의 에너지 차이에 해당하는 ΔE_{ST} 값을 나타내는 것을 특징으로 하고, 0.4eV 미만, 바람직하게는 0.3eV 미만, 더 바람직하게는 0.2eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.1eV 미만, 또는 심지어 0.05eV 미만의 값을 나타낸다. TADF 물질 E^B 의 ΔE_{ST} 값을 결정하는 방법은 본문 뒷부분에 설명되어 있다.
- [0369] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 본 명세서에서 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B 이고 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 사이의 에너지 차이에 상응하는 ΔE_{ST} 값인, 0.4eV 미만, 바람직하게는 0.3eV 미만, 더 바람직하게는 0.2eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.13eV 미만, 또는 심지어 0.07eV 미만을 나타낸다.
- [0370] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물의 단락에서(아래 참조), 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 하나 이상의 TADF 물질 E^B 를 포함하는 조성물이 언급된다. 당업자는 최신 기술에 개시된 임의의 TADF 물질이 이와 관련하여 적합한 TADF 물질 E^B 로 간주될 수 있음을 이해한다. 당업자는 또한 TADF 물질 E^B 가 일반적으로 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 및 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)가 각각 (전자-) 도너 및 (전자-) 억셉터 그룹에서 공간적으로 크게 분리되도록 설계될 것임을 이해한다. 이러한 그룹은 일반적으로 부피가 크거나(즉, 입체적으로 요구됨) 스파이로 접합을 통해 연결되어 비틀어지고 HOMO와 LUMO의 공간적 중첩이 감소한다. 그러나 HOMO와 LUMO의 공간적 중첩을 최소화하면 TADF 물질의 PLQY(Photoluminescence Quantum Yield)도 낮아지는 단점이 있다. 따라서 실제로 이 두 가지 효과를 모두 고려하여 ΔE_{ST} 를 줄이고 높은 PLQY를 달성해야 한다.
- [0371] 일반적으로 TADF 물질 설계를 위한 한 가지 접근 방식은 HOMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 도너 부분과 LUMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 억셉터 모이어티를 본 명세서에서 링커 그룹으로 지칭되는, 동일한 브리지에 공유 결합하는 것이다. TADF 물질 E^B 는 또한 예를 들어 동일한 억셉터 모이어티에 결합된 2개 또는 3개의 링커 그룹을 포함할 수 있고 추가적인 도너 및 억셉터 모이어티가 이들 2개 또는 3개의 링커 그룹 각각에 결합될 수 있다.
- [0372] 하나 이상의 도너 모이어티 및 하나 이상의 억셉터 모이어티는 또한 서로 직접 결합될 수 있다(링커 그룹의 존재 없이).
- [0373] 전형적인 도너 모이어티는 디페닐 아민, 인돌, 카바졸, 아크리딘, 페녹사진 및 관련 구조의 유도체이다. 특히, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 예를 들어 인돌로카바졸에 도달하기 위해 전술한 도너 전구체에 융합될 수 있다.
- [0374] 벤젠-, 비페닐- 및 어느 정도까지 또한 터페닐- 유도체가 일반적인 링커 그룹이다.
- [0375] 니트릴 그룹은 TADF 물질에서 매우 일반적인 억셉터 모이어티이며 알려진 예는 다음과 같다.
- [0376] (i) 카바졸일 디시아노벤젠 화합물
- [0377] 2CzPN(4,5-디(9H-카바졸-9-일)프탈로니트릴), DCzIPN(4,6-디(9H-카바졸-9-일)이소프탈로니트릴), 4CzPN(3,4,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)프탈로니트릴), 4CzIPN(2,4,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)이소프탈로니트릴), 4CzTPN(2,4,5,6-테트라(9H- 카바졸-9-일)테레프탈로니트릴) 및 이의 유도체;
- [0378] (ii) 카바졸일 시아노피리딘 화합물
- [0379] 4CzCNPY(2,3,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)-4-시아노피리딘) 및 이의 유도체;
- [0380] (iii) 카바졸일 시아노비페닐 화합물

- [0381] CNBPCz(4,4',5,5'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-2,2'-디카르보니트릴), CzBPCN(4,4',6,6'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-3,3'-디카르보니트릴), DDCzIPN(3,3',5,5'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-2,2',6,6'-테트라카르보니트릴) 및 그 유도체;
- [0382] 이들 물질에서 하나 이상의 니트릴 그룹은 액셉터 모이어티로서 불소(F) 또는 트리플루오로메틸(CF₃)로 대체될 수 있다.
- [0383] 트리아진-, 피리미딘-, 트리아졸-, 옥사디아졸-, 티아디아졸-, 헵타진-, 1,4-디아자트리페닐렌-, 벤조티아졸-, 벤즈옥사졸-, 퀴놀살린- 및 디아자플루오렌 유도체와 같은 질소-헤테로시클도 TADF 분자 구성에 사용되는 잘 알려진 액셉터 모이어티이다. 예를 들어 트리아진 액셉터를 포함하는 TADF 분자의 공지된 예는 PIC-TRZ(7,7'-(6-([1,1'-비페닐]-4-일)-1,3,5-트리아진-2,4-디일)비스(5-페닐-5,7-디하이드로인돌로[2,3-b]카바졸)), mBFCzTrz(5-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸), 및 DCzTrz (9,9'-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸))가 있다.
- [0384] TADF 물질의 또 다른 그룹은 벤조페논과 같은 디아릴 케톤 또는 4-벤조일피리딘, 9,10-안트라퀴논, 9H-크산텐-9-온 및 이들의 유도체와 같은 (헤테로아릴)아릴 케톤을 액셉터 모이어티로서 포함하고, 액셉터 모이어티에는 도너 모이어티(보통 카바졸일 치환기)가 결합되어 있다. 이러한 TADF 분자의 예는 각각 BPBCz(비스(4-(9'-페닐-9H,9'H-[3,3'-비카바졸]-9-일)페닐)메탄온), mDCBP((3,5-디(9H-카바졸-9-일)페닐)(피리딘-4-일)메탄온), AQ-DTBu-Cz(2,6-비스(4-(3,6-디-tert-부틸-9H-카바졸-9-일)페닐)안트라센-9,10-디온) 및 MCz-XT(3-(1,3,6,8-테트라메틸-9H-카바졸-9-일)-9H-크산텐-9-온)가 있다.
- [0385] 설폭사이드, 특히 디페닐 설폭사이드는 또한 TADF 물질의 구성을 위한 액셉터 모이어티로서 일반적으로 사용되며 공지된 예로는 4-PC-DPS(9-페닐-3-(4-(페닐설폰닐)페닐)-9H-카바졸), DitBu-DPS(9,9'-(술폰닐비스(4,1-페닐렌))비스(9H-카바졸)), 및 TXO-PhCz(2-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H-티오크산텐-9-온 10,10-디옥사이드)가 있다.
- [0386] 형광 에미터 F는 또한 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF를 표시할 수 있고 심지어 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B일 수 있다는 것이 이해될 수 있다. 결과적으로, 여기에 정의된 작은 FWHM 에미터 S^B는 또한 여기서 정의된 TADF 물질 E^B일 수도 있고 아닐 수도 있다.
- [0387] 인광, 즉 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1로부터)로부터의 발광은 스핀-금지된 과정이다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 인광은 (분자내) 스핀-궤도 상호작용(소위 (내부) 중원자 효과)을 이용함으로써 촉진(향상)될 수 있다. 본 발명의 단락에서 인광 물질(P^B)은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 인광을 발광할 수 있는 인광 에미터이다.
- [0388] 여기서, 인광 발광 물질(P^B)는 칼슘(Ca)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소 중 적어도 하나의 원자를 포함하는 것이 바람직하다. 훨씬 더 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 인광 물질(P^B)은 전이 금속 원자, 특히 아연(Zn)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소의 전이 금속 원자를 포함한다. 인광 발광 물질(P^B)에 바람직하게 포함되는 전이 금속 원자는 임의의 산화 상태로 존재할 수 있다(및 각 원소의 이온으로서 존재할 수도 있다).
- [0389] 발광에 사용되는 인광 물질 P^B가 종종 Ir, Pd, Pt, Au, Os, Eu, Ru, Re, Ag 및 Cu, 본 발명의 단락에서 바람직하게는 Ir, Pt 및 Pd, 보다 바람직하게는 Ir 및 Pt의 착물이라는 것은 당업자에게 잘 알려진 사실이다. 당업자는 광전자 소자에서 어떤 물질이 인광 물질(P^B)로 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 또한, 당업자는 광전자 소자에서 인광 물질로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0390] 당업자는 광전자 소자에 사용되는 인광 물질(P^B)로 어떤 물질이 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 이와 관련하여, 당업자는 특히 광전자 소자에서 인광 물질(P^B)로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0391] 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질(P^B)의 비제한적 예(예를 들어, 조성물의 형태 또는

광전자 소자의 EML에서, 이하 참조)는 최신 기술에 개시되어 있다. 예를 들어, 다음 금속 착물은 본 발명에 따라 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질 P^B이다:



[0392]

[0393] 본 발명의 단락에서 작은 반치폭(FWHM) 에미터 S^B는 0.35eV 이하(≤0.35eV)의 FWHM을 나타내는 발광 스펙트럼을 갖는 임의의 에미터(즉, 에미터 물질)이고, 바람직하게는 0.30 eV 이하(≤0.30 eV), 특히 0.25 eV 이하(≤0.25 eV)이다. 달리 명시되지 않는 한, 이는 실온(즉, (대략) 20℃)에서 각 에미터의 발광 스펙트럼을 기준으로 판단되며, 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트) (PMMA) 내에서 1-5중량%, 특히 2중량%의 에미터 중량으로 측정된다. 또는 작은 FWHM 에미터 S^B의 발광 스펙트럼은 일반적으로 실온(즉, (대략) 20℃)에서 디클로로메탄 또는 톨루엔에 0.001-0.2 mg/mL의 에미터 S^B가 있는 용액에서 측정할 수 있다.

[0394] 작은 FWHM 에미터 S^B는 형광 에미터 F, 인광 에미터(예를 들어 인광 물질 P^B) 및/또는 TADF 에미터(예를 들어 TADF 물질 E^B)일 수 있다. 본 발명에 따른 유기 분자, 상기 언급된 TADF 물질 E^B 및 인광 물질 P^B의 경우, 발광 스펙트럼은 실온(즉, (대략) 20℃)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트) (PMMA) 내에서 10 중량%의 각각의 분자, E^B 또는 P^B의 각각의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된다.

[0395] 당업자에게 공지된 바와 같이, 에미터(예를 들어 작은 FWHM 에미터 S^B)의 반치폭(FWHM)은 각각의 발광 스펙트럼(형광 에미터에 대한 형광 스펙트럼 및 인광 에미터에 대한 인광 스펙트럼)으로부터 쉽게 결정된다. 보고된 모든 FWHM 값은 일반적으로 주요 발광 피크(즉, 강도가 가장 높은 피크)를 참조한다. FWHM(여기서 바람직하게는 전자 볼트, eV로 기록됨)을 결정하는 수단은 당업자의 상식의 일부이다. 예를 들어 발광 스펙트럼의 주요 발광 피크가 발광 스펙트럼에서 나노미터(nm)로 얻은 두 파장 λ₁ 및 λ₂에서 최대 발광의 절반(즉, 최대 발광 강도의 50%)에 도달하는 경우 전자 볼트(eV) 단위의 FWHM은 일반적으로 다음 방정식을 사용하여 결정된다.

[0396]
$$\text{FWHM [eV]} = \left| \frac{1239.84 [\text{eV} \cdot \text{nm}]}{\lambda_2 [\text{nm}]} - \frac{1239.84 [\text{eV} \cdot \text{nm}]}{\lambda_1 [\text{nm}]} \right|$$

[0397] 본 발명의 단락에서, 작은 FWHM 에미터 S^B는 유기 에미터이며, 이는 본 발명의 단락에서 어떤 전이 금속도 포함하지 않는다는 것을 의미한다. 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B는 주로 수소(H), 탄소(C), 질소(N) 및 보론(B) 원소로 구성되지만, 예를 들어 산소(O), 규소(Si), 불소(F) 및 브롬(Br)도 포함할 수 있다.

[0398] 또한, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B는 추가로 TADF를 나타내거나 나타내지 않을 수 있는 형광 에미터 F인 것이 바람직하다.

[0399] 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B는 바람직하게는 다음 요건 중 적어도 하나를 충족시킨다:

[0400] (i) 보론(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론(B)임을 의미한다.

[0401] (ii) 적어도 2개의 방향족 고리가 함께 융합된 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조를 포함한다(예를 들어, 안트라센, 피렌 또는 이의 아자-유도체).

[0402] 훨씬 더 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 다음 요건 중 적어도 하나를 충족시킨다:

[0403] (i) 보론(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론(B)임을 의미한다.

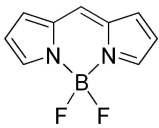
[0404] (ii) 피렌 코어 구조를 포함한다.

[0405] 가장 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 보론(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론(B)임을 의미한다.

[0406] 당업자는 상기 언급된 요건 또는 바람직한 특징을 충족시키는 작은 FWHM 에미터(SB)를 설계하는 방법을 알고 있다.

[0407] 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로 적합한 형광 에미터 F의 부류는 잘 알려진 4,4-디플루오로-4-보라-3a,4a-디아자-s-인다센(BODIPY) 기반 물질이며, 그의 광전자 소자의 구조적 특징 및 응용이 상세하게 검토되어 왔으며 당업자에게 일반적인 지식이다. 최신 기술은 또한 이러한 물질이 합성되는 방법과 특정 발광 색상을 가진 에미터에 도달하는 방법을 보여준다.

[0408] 당업자는 또한 하기에 나타낸 바와 같은 BODIPY 기본 구조가

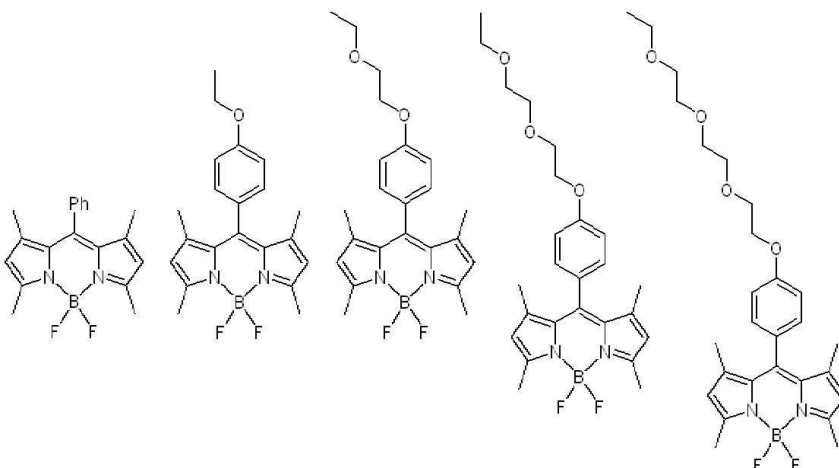


[0409]

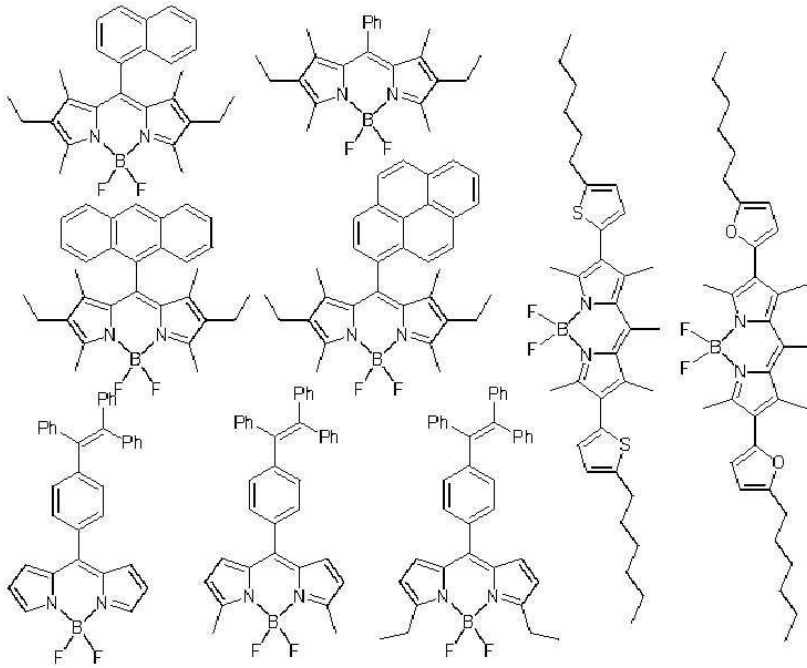
[0410] 예를 들어 분자간 π - π 상호 작용 및 관련된 자체 소광으로 인해 광전자 소자의 에미터로 이상적으로 적합하지 않다는 것에 익숙하다.

[0411] 광전자 소자용 대안적인 에미터 물질은 위에 표시된 BODIPY 코어 구조에 부착된 치환기로서 부피가 큰(즉, 입체적으로 요구되는) 그룹을 가지고 있다. 이러한 부피가 큰 기는 예를 들어 (많은 다른 것들 중에서도) 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 알콕시 치환기 또는 축합된 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있으며, 이들 모두는 선택적으로 치환될 수 있다. BODIPY 코어에서 적합한 치환기의 선택은 당업자에게 명백하고 최신 기술로부터 쉽게 유도될 수 있다. 이는 그러한 분자들의 합성 및 후속 변경을 위해 확립된 다수의 합성 경로에 대해서도 마찬가지이다.

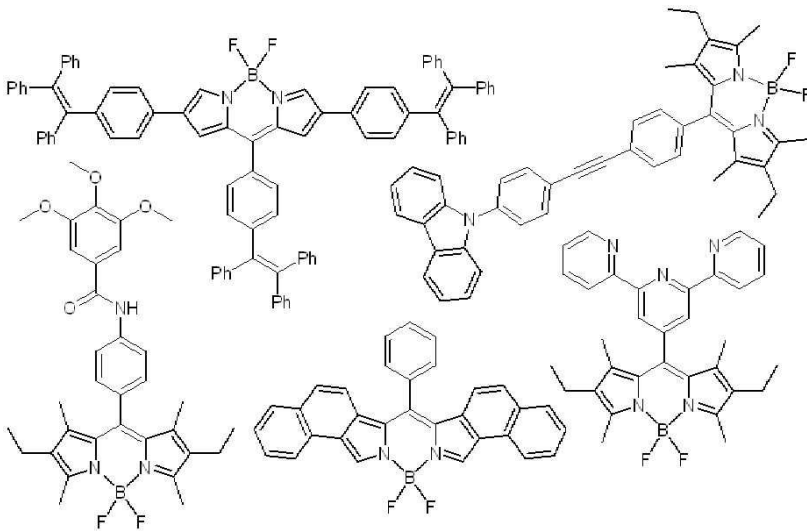
[0412] 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로서 적합할 수 있는 BODIPY 기반 에미터의 예는 다음과 같다.



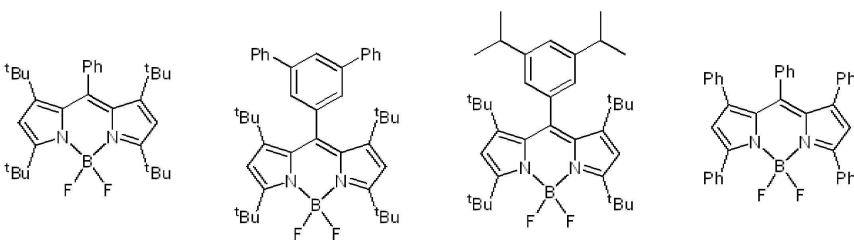
[0413]



[0414]



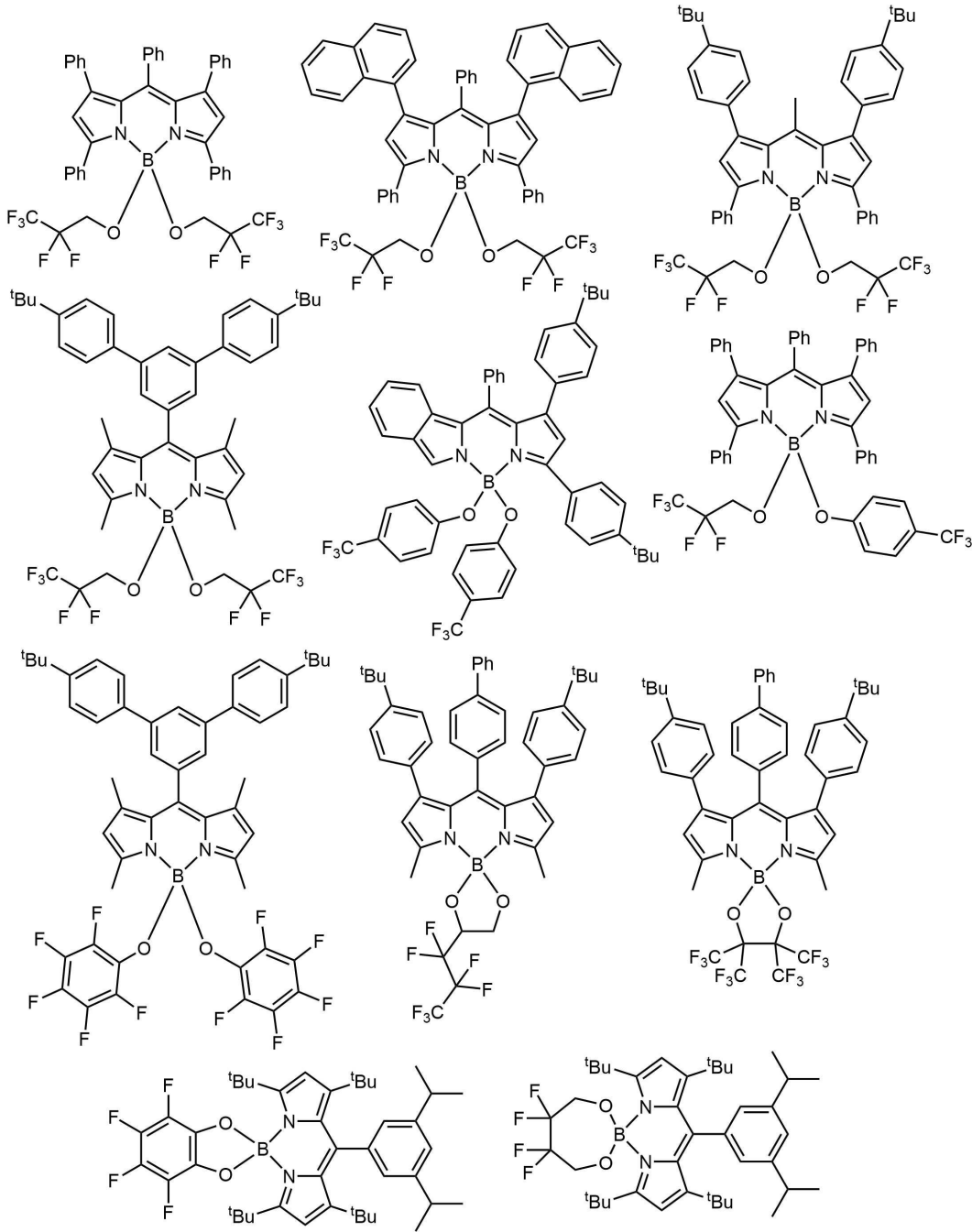
[0415]



[0416]

[0417]

또한, BODIPY 코어 구조의 중심 보론 원자에 부착된 불소 치환기 중 하나 또는 둘 모두를, 산소 원자를 통해 부착되고 바람직하게는 불소(F) 또는 트리플루오로메틸(CF₃)과 같은 전자 끄는 치환기로 선택적으로 치환될 수 있는 알콕시 또는 아릴옥시기로 대체함으로써 광전자 소자용 에미터에 도달할 수 있다는 것은 당업자에게 공지되어 있다. 이러한 에미터 물질의 예가 하기에 나타나 있으며, 이는 도시된 구조만이 본 발명의 단락에서 적합한 작은 FWHM 에미터 S^B일 수 있음을 의미하지는 않는다.



[0418]

[0419] 당업자는 사실, 최신 기술에서 사용되는 모든 BODIPY 유형의 에미터 및 그의 유도체가 예를 들어 형광 에미터 S^B 로서, 특히 작은 FWHM 에미터 S^B 로서, 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있음을 이해한다.

[0420] 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 를 제공하기에 적합한 또 다른 부류의 분자는 NRCT(near-range-charge-transfer) 에미터이다.

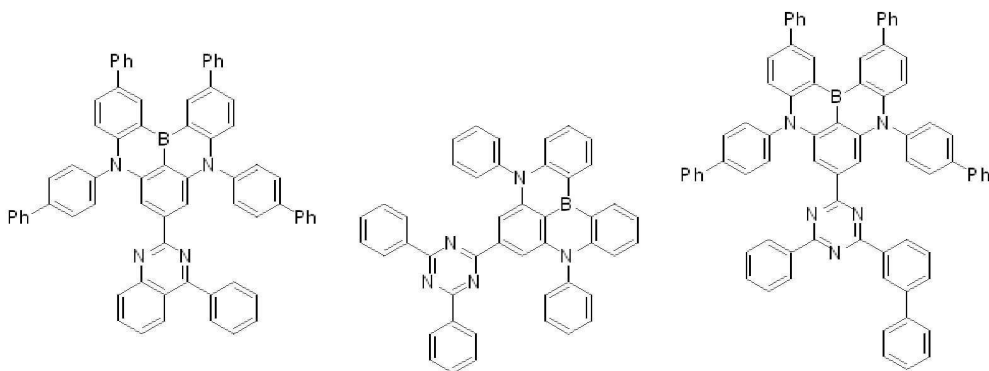
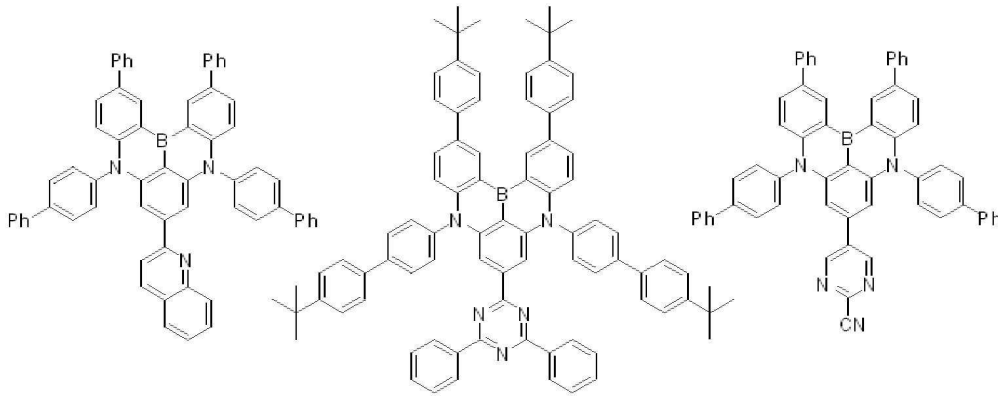
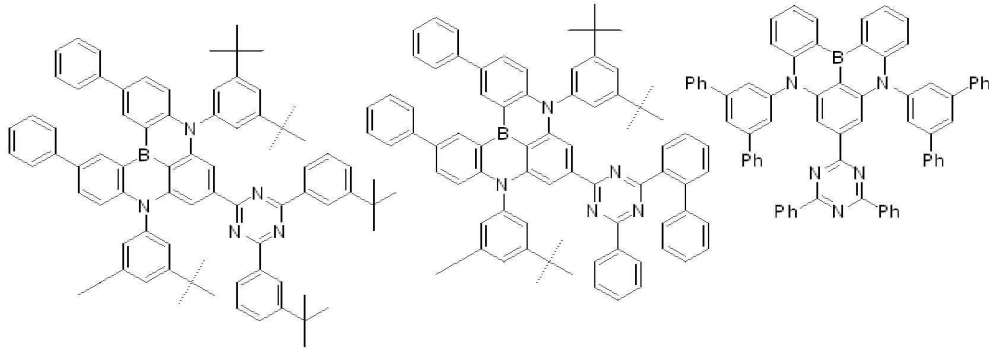
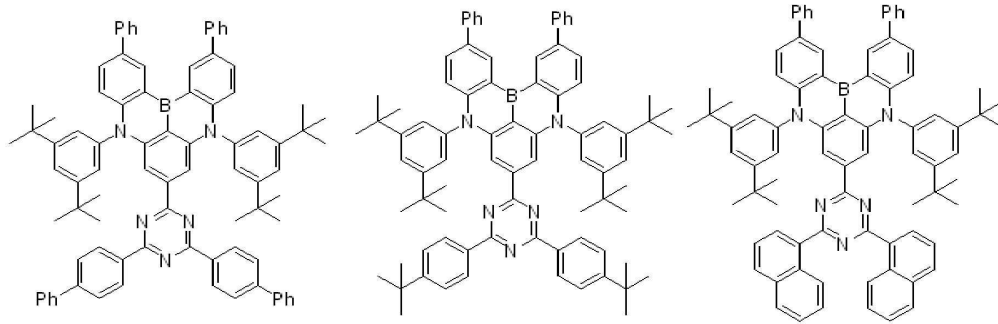
[0421] 일반적인 NRCT 에미터는 시간 분해 광발광 스펙트럼에서 지연된 성분을 보여주고 근거리 HOMO-LUMO 분리를 나타내는 것으로 문헌에 설명되어 있다.

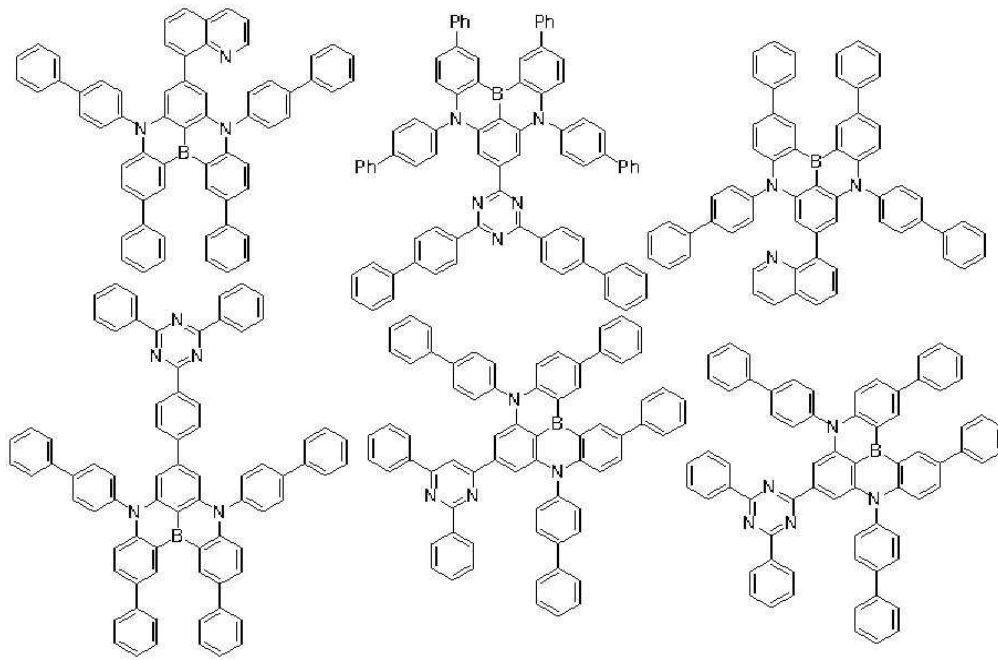
[0422] 일반적인 NRCT 에미터는 발광 스펙트럼에서 하나의 발광 대역만 나타내며, 일반적인 형광 에미터는 진동 진행으로 인해 여러 개의 고유한 발광 대역을 나타낸다.

[0423] 당업자는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로서 적합할 수 있는 NRCT 에미터를 설계하고 합성하는 방법을 알고 있다.

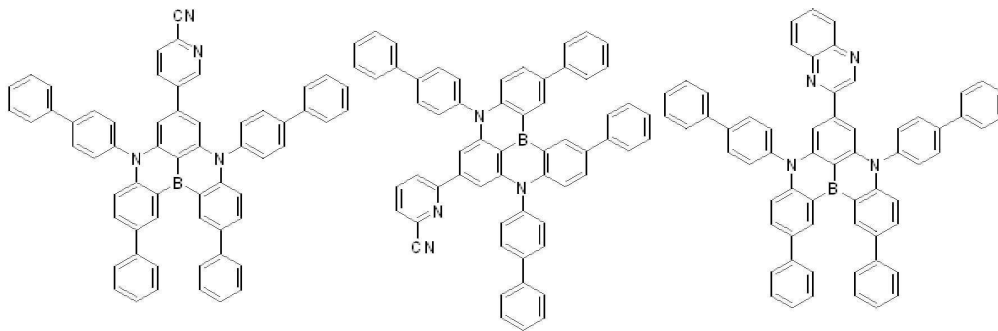
[0424] 본 명세서에 정의된 바와 같은 작은 FWHM 에미터 S^B 이고 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 추가

형광 에미터 F(아래 참조)는 하기에 나타낸 보론 함유 에미터이다:

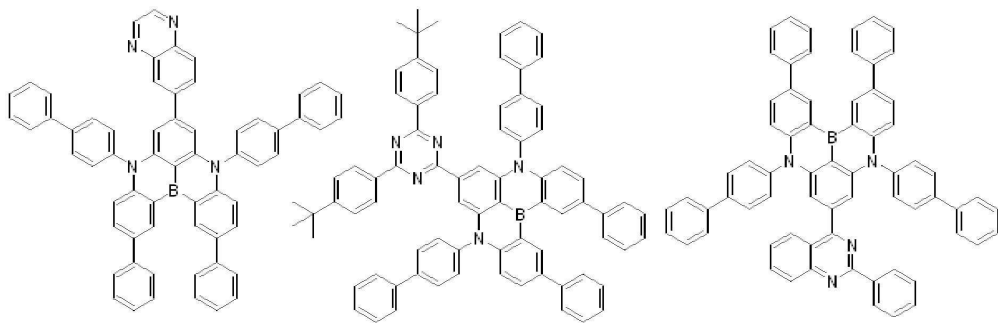




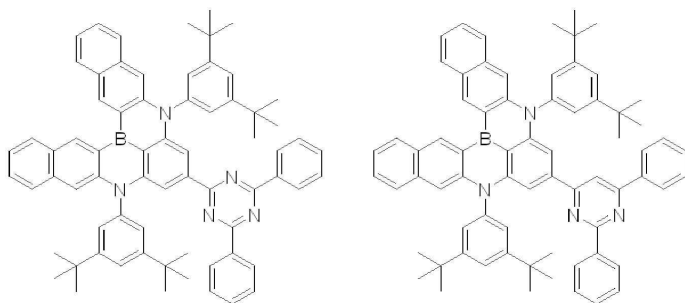
[0429]



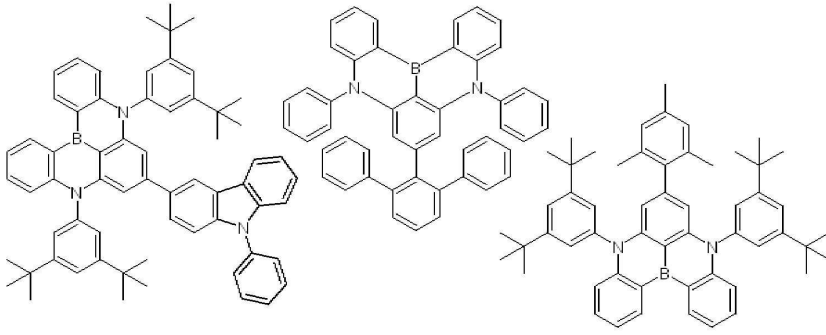
[0430]



[0431]



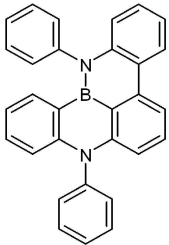
[0432]



[0433]

[0434] 여기서 이것은 도시된 물질만이 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로서 사용될 수 있음을 의미하지 않는다.

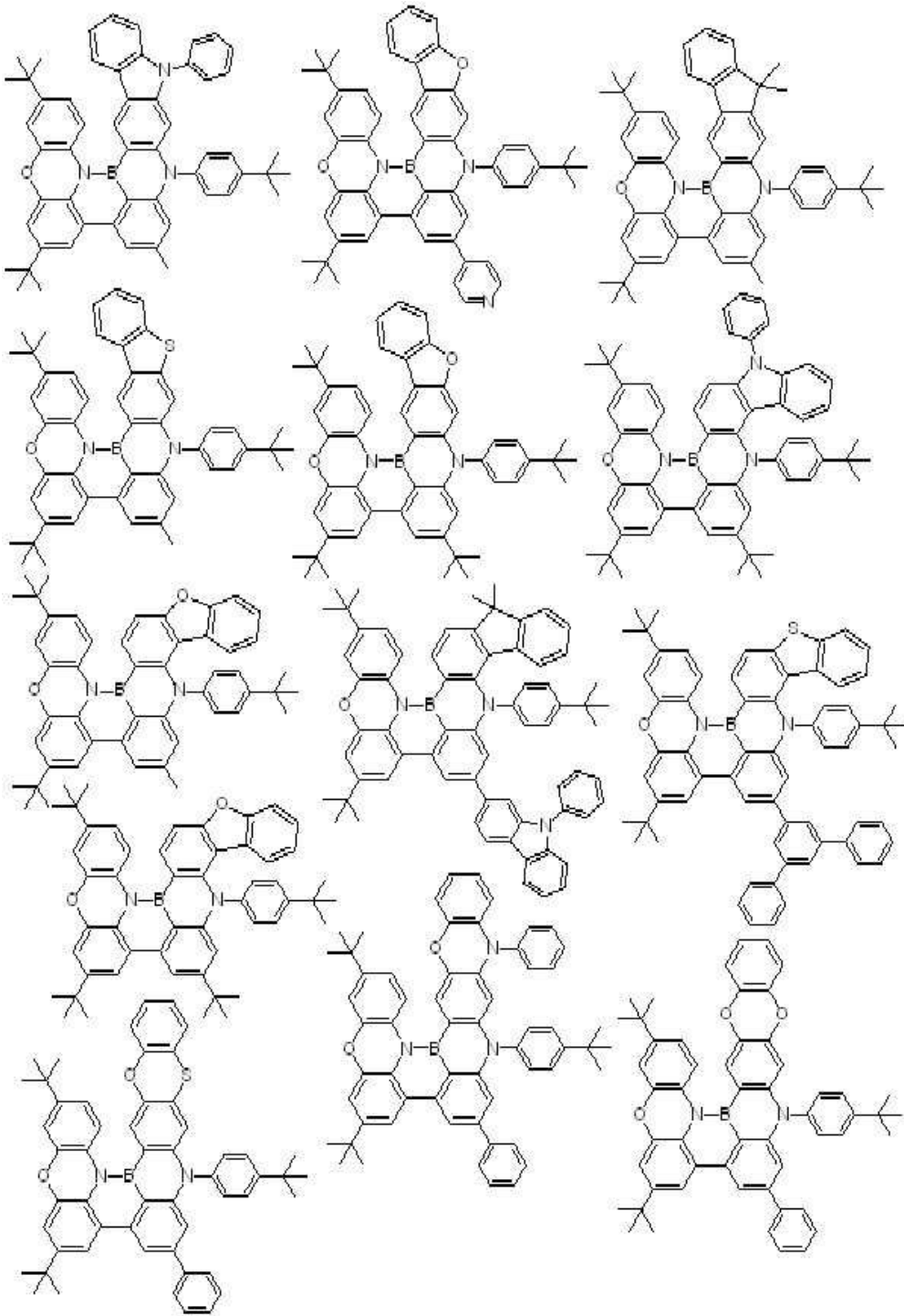
[0435] 작은 FWHM 에미터 S^B 로 사용될 수 있는 형광 에미터 F의 또 다른 그룹은 정확히 하나의 직접 B-N 결합을 포함하는 보론 함유 에미터이다. 당업자는 구조적으로 관련된 화합물이 또한 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로서 동등하게 적합할 수 있음을 이해한다. 작은 FWHM 에미터 S^B 에 대한 제한되지 않는 예는 하기 구조를 포함하거나 구성되는 정확히 하나의 직접 B-N 결합을 포함하는 보론 함유 에미터이다:



[0436]

[0437] 이 구조는 추가로 치환될 수 있고 구조 단위 및/또는 치환기가 결합되어 융합된 고리 시스템을 형성할 수 있다.

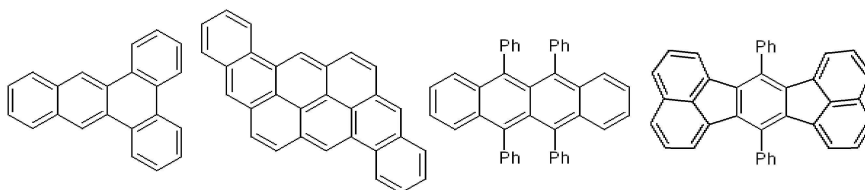
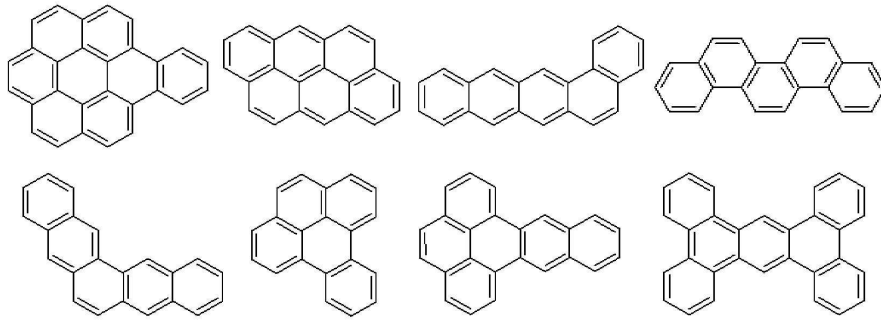
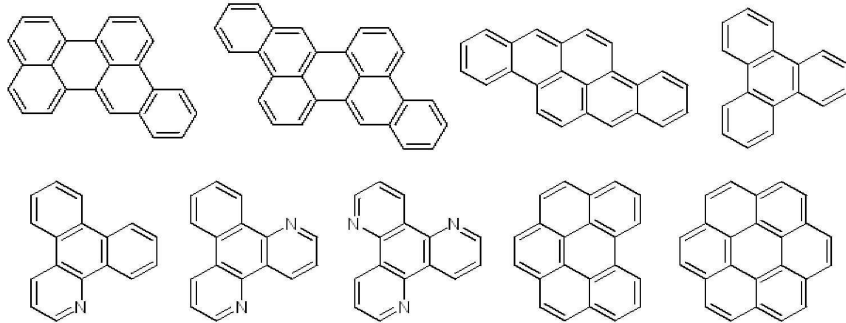
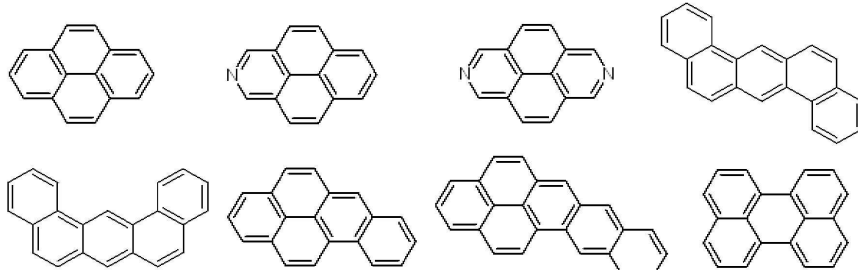
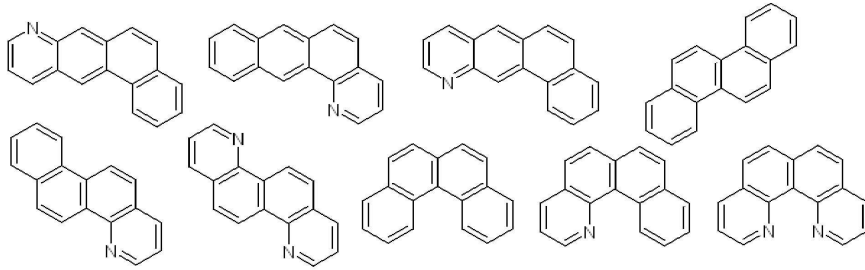
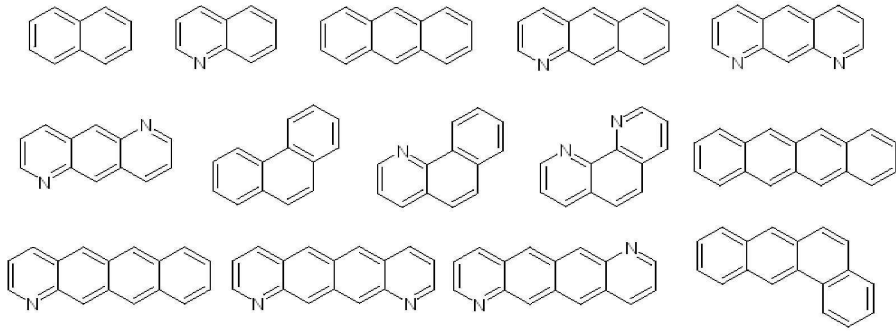
[0438] 작은 FWHM 에미터(S^B)로 사용될 수 있는 에미터의 특정 예(제한적이지 않음)는 다음과 같다.

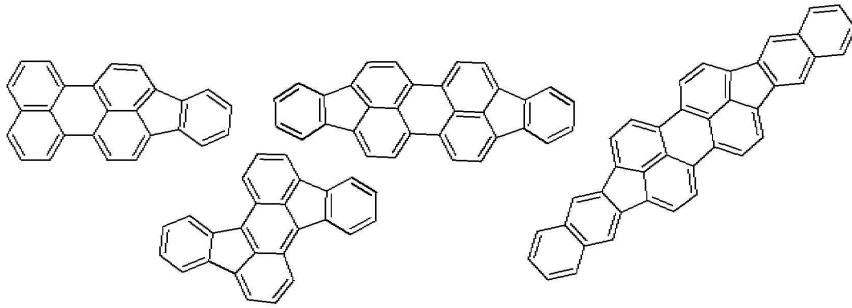


[0439]

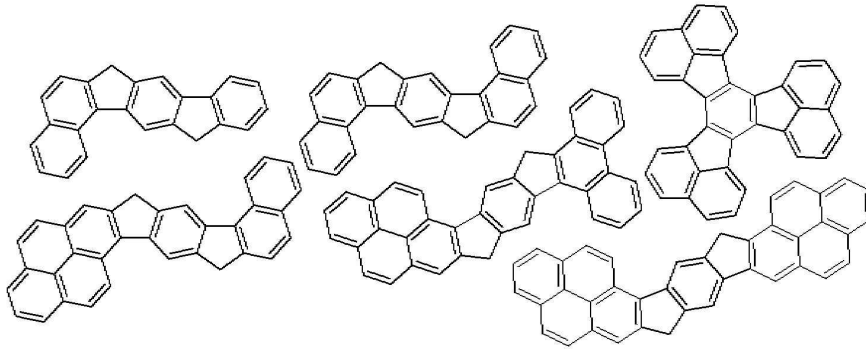
[0440] 형광 에미터 F를 설계하는 한 가지 접근 방식은 형광성 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조의 사용에 의존한다. 후자는 본 발명의 단락에서, 하나 보다 많은 방향족 또는 헤테로방향족 고리, 바람직하게는 2개 보다 많은 이러한 고리를 포함하는 임의의 구조이며, 더욱 더 바람직하게는 서로 융합되거나 하나 보다 많은 직접 결합 또는 링커 원자를 통해 연결된 구조이다. 즉, 형광 코어 구조는 적어도 하나, 바람직하게는 단 하나의 강성의 공액 π -시스템을 포함한다.

[0441] 당업자는 형광 에미터 F를 위한 형광 코어 구조를 선택하는 방법을 알고 있다. 형광 에미터 F의 일반적인 형광 코어 구조의 비제한적 예는 하기와 같다:

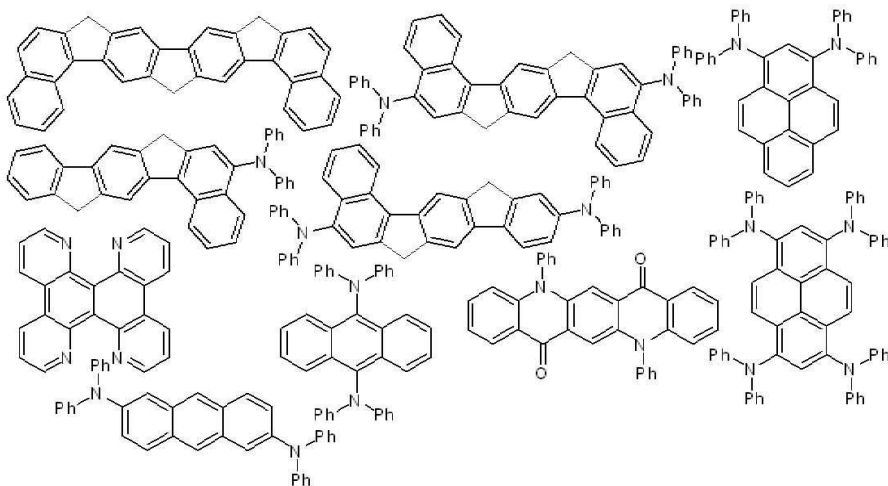




[0448]



[0449]



[0450]

[0451]

이 단락에서 "형광 코어 구조"라는 용어는 상기 코어를 포함하는 임의의 분자가 잠재적으로 형광 에미터 F로 사용될 수 있음을 나타낸다. 당업자는 이러한 형광 에미터 F의 코어 구조가 임의로 치환될 수 있고 어떤 치환기가 이와 관련하여 적합하다는 것을 알고 있다.

[0452]

당업자에게 공지된 바와 같이, EML의 호스트 물질(H^B)은 상기 EML을 통과하여 전자 또는 양전하를 수송할 수 있고 또한 호스트 물질(들)(H^B)에 도핑된 적어도 하나의 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있다. 당업자는 광전자 소자(예를 들어, OLED)의 EML에 포함된 호스트 물질 H^B 가 일반적으로 전압 및 전류를 인가할 때 상기 소자로부터의 발광에 크게 관여하지 않는다는 것을 이해한다. 당업자는 또한 임의의 호스트 물질 H^B 가 높은 정공 이동도를 나타내는 p-호스트 H^P , 높은 전자 이동도를 나타내는 n-호스트 H^N 또는 높은 정공 이동도 및 높은 전자 이동도를 모두 나타내는 양극성 호스트 물질 H^{BP} 일 수 있다는 사실을 잘 알고 있다.

[0453]

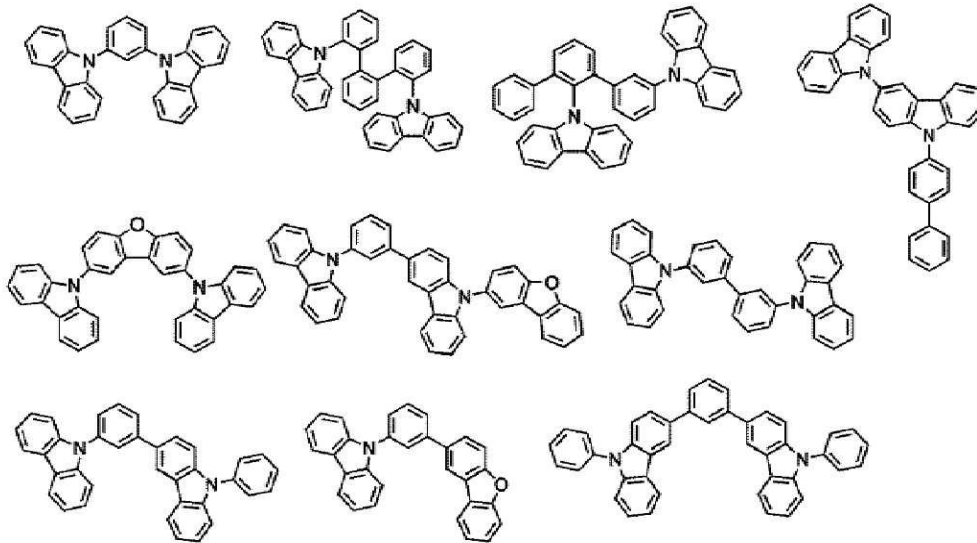
당업자에게 공지된 바와 같이, EML은 또한 적어도 하나의 p-호스트 H^P 및 하나의 n-호스트 H^N 을 갖는 소위 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다. 특히, EML은 본 발명에 따른 정확히 하나의 에미터 물질 및 n-호스트 H^N 로서의 T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진)과 p-호스트 H^P 로서의 CBP, mCP, mCBP, 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조푸라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-

[3,5-비스(2-디벤조티오펜일)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트를 포함하는 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다.

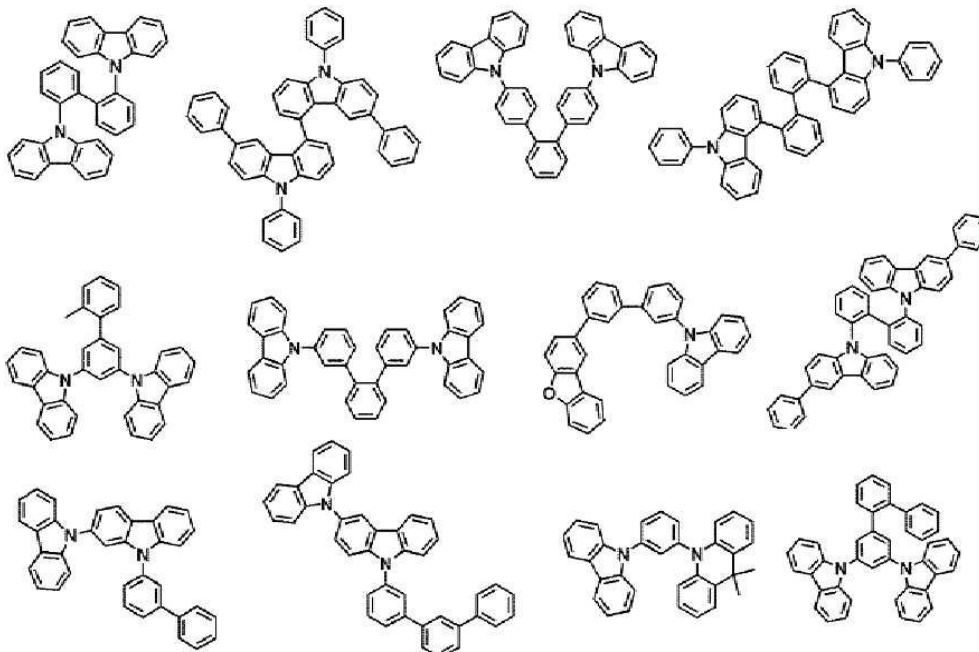
[0454] EML은 적어도 하나의 p-호스트 H^P 와 하나의 n-호스트 H^N 이 있는 소위 혼합 호스트 시스템을 포함할 수 있다. 여기서 n-호스트 H^N 은 피리딘, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진 및 1,2,3-트리아진으로부터 유도된 기를 포함하고, p-호스트 H^P 는 인돌, 이소인돌, 바람직하게는 카바졸로부터 유도된 기를 포함한다.

[0455] 당업자는 어떤 물질이 발광 소자에 사용하기에 적합한 호스트 물질인지 알고 있다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 호스트 물질이 본 발명의 단락에서 적합한 호스트 물질 H^B 일 수 있음이 이해된다.

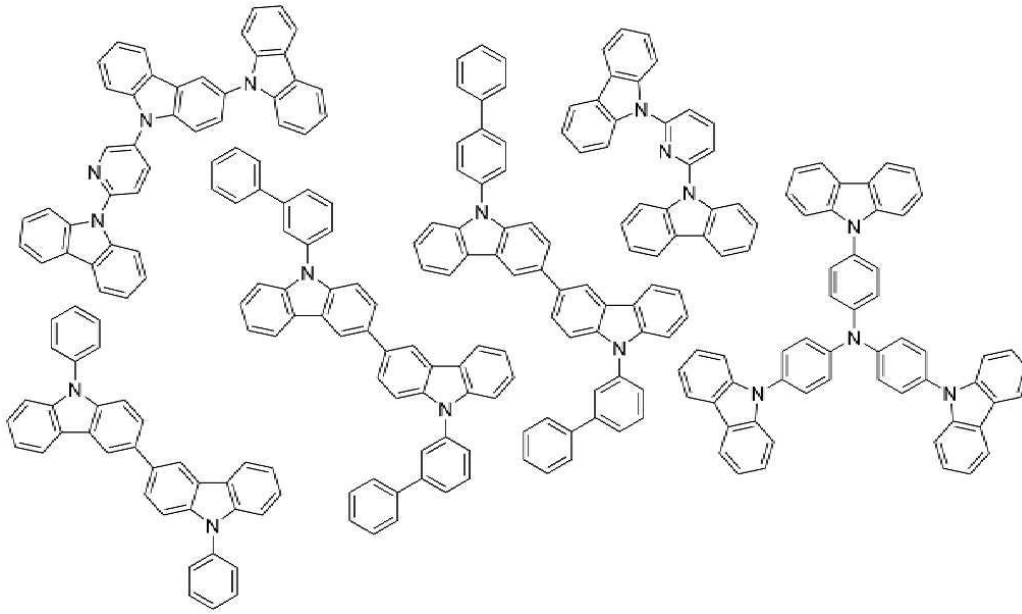
[0456] 본 발명의 단락에서의 p-호스트 물질 H^P 인 물질 H^B 의 비제한적 예는 하기에 열거되어 있다:



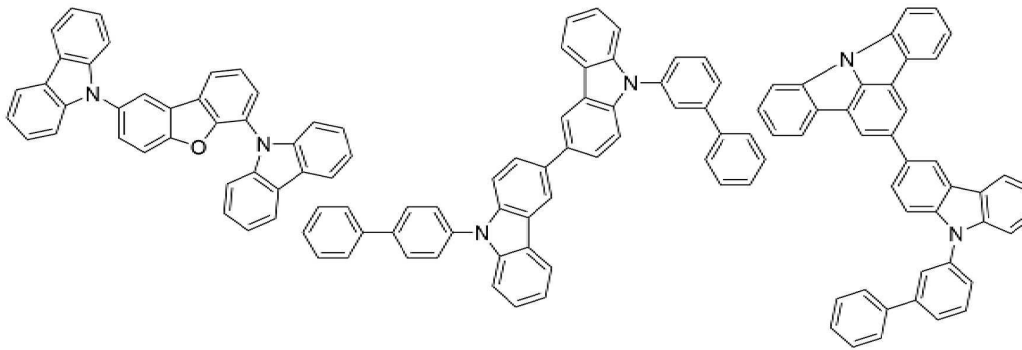
[0457]



[0458]

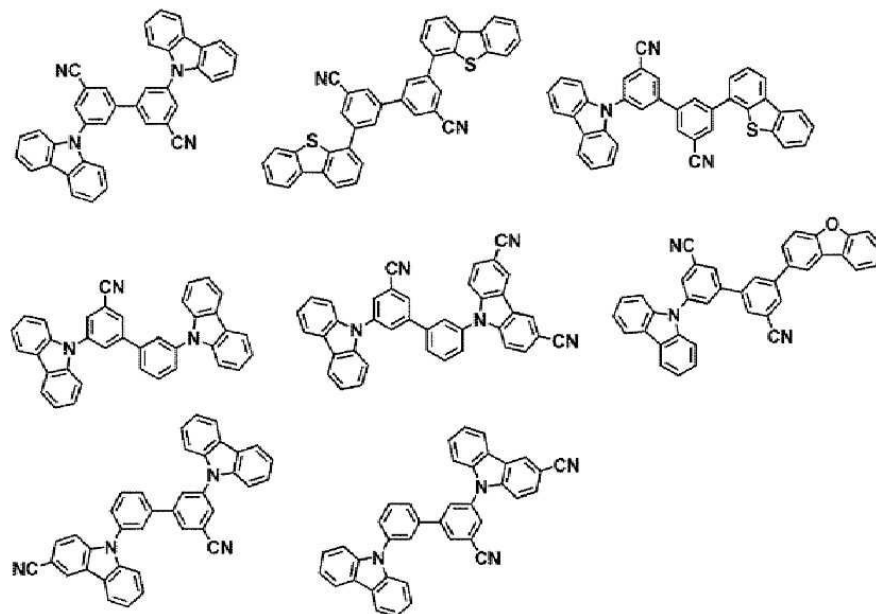


[0461]

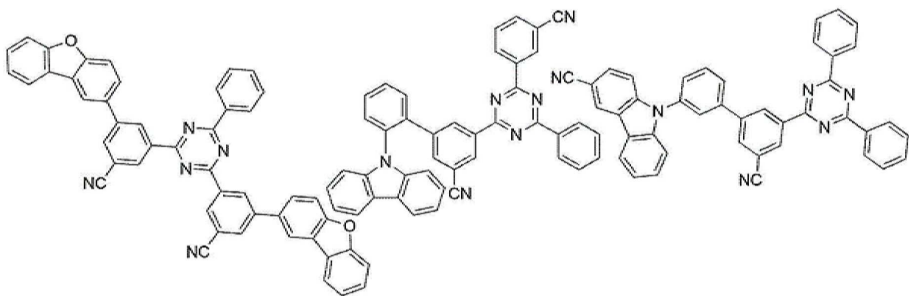
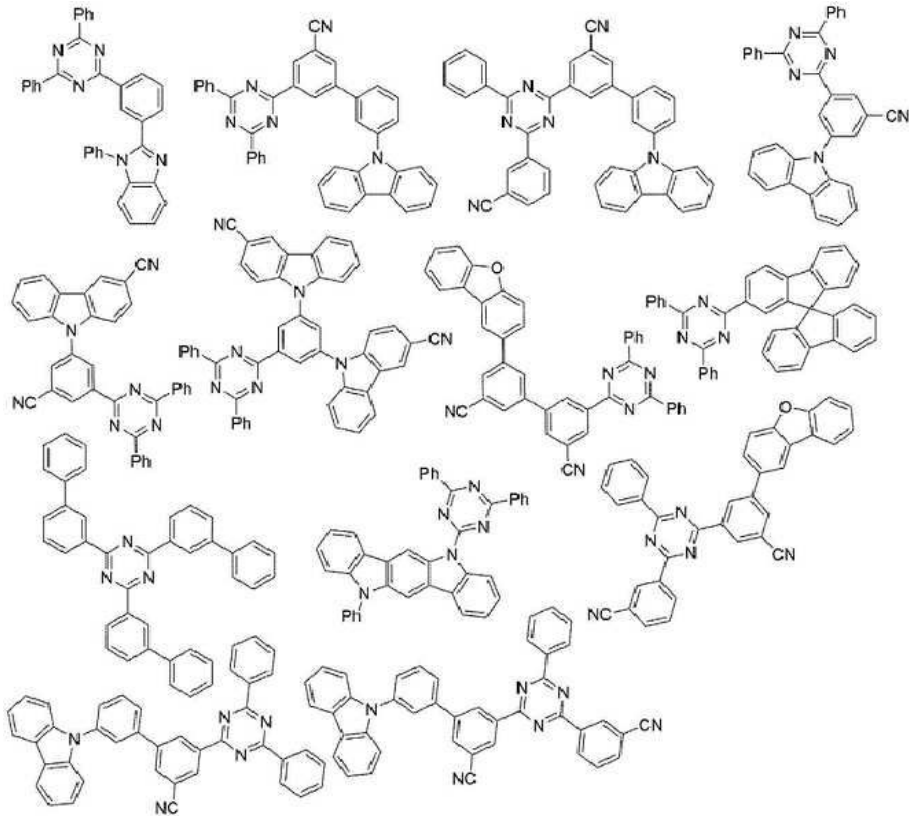


[0462]

[0463] 본 발명의 단락에서 n-호스트 물질 H^N인 물질 H^B의 비제한적 예는 하기에 열거되어 있다:



[0464]



[0467]

당업자는 동일한 층, 특히 동일한 EML에 포함된 임의의 물질들뿐만 아니라 인접 층들 내에 있고 이들 인접 층들 사이의 계면에서 매우 근접하게 있는 물질들이 함께 엑시플렉스를 형성할 수 있음을 이해한다. 당업자는 엑시플렉스를 형성하는 물질 쌍, 특히 p-호스트 H^P 및 n-호스트 H^N 의 쌍을 선택하는 방법 및 HOMO- 및/또는 LUMO- 에너지 준의 요구를 포함하는 상기 물질 쌍의 두 성분에 대한 선택 기준을 알고 있다. 즉, 엑시플렉스 형성이 요구될 수 있는 경우, 한 성분, 예를 들어 p-호스트 물질 H^P 의 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)는 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N 의 HOMO보다 에너지가 적어도 0.20eV 더 높을 수 있고, 하나의 성분, 예를 들어 p-호스트 물질 H^P 의 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)는 예를 들어 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N 의 LUMO보다 에너지가 적어도 0.20eV 더 높을 수 있다. 엑시플렉스가 광전자 소자, 특히 OLED의 EML에 존재하면, 엑시플렉스가 에미터 물질의 기능을 갖고 전압과 전류가 해당 소자에 가해지면 발광할 수 있다는 것은 당업자의 상식에 속한다. 최신 기술로부터 또한 일반적으로 알려진 바와 같이, 엑시플렉스는 또한 비발광성일 수 있고, 예를 들어 광전자 소자의 EML에 포함되는 경우 여기 에너지를 발광 물질에 전달할 수 있다.

[0468]

적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물

[0469]

본 발명의 한 측면은 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명의 한 측면은 광전자 소자, 바람직하게는 OLED, 특히 상기 소자의 EML에서 상기 조성물의 용도에 관한 것이다.

[0470]

하기에서, 전술한 조성물을 설명할 때, 경우에 따라 각각의 조성물 중 특정 물질의 함량을 백분율 형태로 언급한다. 특정 구현예에 대해 달리 언급하지 않는 한, 모든 백분율은 중량 백분율을 나타내며, 이는 중량 백분율

또는 중량 %((중량/중량), (w/w), 중량%와 동일한 의미를 갖는다는 점에 유의해야 한다). 예를 들어 특정 조성에서 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의 함량이 예시적으로 30%라고 언급하는 경우, 이는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의 (즉, 결합된 이들 모든 분자의) 총 중량이 30중량%, 즉 각각의 조성물의 총 중량의 30%를 차지하는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 성분의 바람직한 함량을 중량%로 제공함으로써 조성물이 특정 될 때마다, 모든 성분의 총 함량은 100중량%(즉, 조성물의 총 중량)까지 합산되는 것으로 이해된다.

[0471] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물에 관한 본 발명의 구현예를 설명하는 하기 설명에서, 광전자 소자, 바람직하게는 광전자 소자의 EML에서, 가장 바람직하게는 OLED의 EML에서 상기 조성물을 사용할 때 이들 조성물 내의 성분 사이에서 발생할 수 있는 에너지 전달 프로세스를 언급할 것이다. 당업자는 이러한 여기 에너지 전달 과정이 광전자 소자의 EML에서 조성물을 사용할 때 발광 효율을 향상시킬 수 있음을 이해한다.

[0472] 당업자는 여기 에너지 전달이 (효율적으로) 발생하기 위해 바람직하게는 에너지 도너의 발광 스펙트럼과 에너지 억셉터의 흡수 스펙트럼 사이에 스펙트럼 중첩이 있음을 이해한다. 또한 당업자는 의도된 에너지 도너가 의도된 에너지 억셉터에 비해 더 높은 여기 상태 에너지 준위를 가져야 함을 이해하며, 이는 에너지 도너의 최저 여기 단일항 상태 S1(도너)의 에너지 준위 E(S1)(도너) 및/또는 에너지 도너의 최저 여기 삼중항 상태 T1(도너)의 에너지 준위 E(T1)(도너)는, 에너지 억셉터의 최저 여기 단일항 상태 S1(억셉터)의 에너지 준위 E(S1)(억셉터) 및/또는 에너지 억셉터의 최저 여기 삼중항 상태 T1(억셉터)의 에너지 준위 E(T1)(억셉터)보다 에너지가 높은 것이 바람직한 것이다. 앞서 언급한 바람직한 기준을 충족하는 물질을 선택하는 것은 발명 단계 없이 당업자의 일반 지식을 기반으로 쉽게 달성된다. 여기 상태 에너지를 결정하는 방법과 흡수 및 발광 스펙트럼을 기록하는 방법에 대한 실험적 세부 사항은 본문 뒷부분에서 제공된다.

[0473] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물을 기술할 때, 특정 물질이 다른 물질과 "다르다"는 점도 지적될 것이다. 이것은 서로 "다른" 물질이 동일한 화학 구조를 갖지 않는다는 것을 의미한다.

[0474] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0475] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0476] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

[0477] (c) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및

[0478] (d) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및

[0479] (e) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다르고 또한 (c)의 TADF 물질 E^B 와 다른 하나 이상의 형광 에미터 F, 및

[0480] (f) 선택적으로 하나 이상의 용매 및/또는 염료,

[0481] 여기서 (a) 내지 (e)의 임의의 이들 물질(상기 정의된 바와 같은 동일한 그룹의 물질 및/또는 상기 정의된 바와 같은 상이한 그룹의 물질)은 선택적으로 하나 이상의 엑시플렉스를 형성하고;

[0482] 여기서 (e)의 형광 에미터 F가 조성물에 존재하지 않는 경우, (a) 및/또는 (c) 및/또는 (d) 중 적어도 하나의 물질 및/또는 적어도 하나의 엑시플렉스는 에미터 물질이다.

[0483] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 (선택적으로) 적어도 하나의 호스트 물질 H^B 를 포함하는 조성물

[0484] 본 발명에 따른 조성물의 일 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 선택적으로 본 발명의 분자와 구조적으로 상이한 적어도 하나의 호스트 물질 H^B 를 포함하는 조성물에 관한 것이다.

[0485] 바람직하게는 상기 조성물의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 에미터 물질은 실온(즉, (약) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 내 10 중량%의 각 에미터의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm 최대 발광으로 빛을 발광한다. 존재하는 경우, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질(H^B)는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 에미터 물질의 최저 여기 단일항 상태보다 에너지가 더 높은 최저 여기 단일항 상태 S1(H^B)를 갖는 것이 바람직하다. 존재하는 경우, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질(H^B)이 적어도 하나, 바람직

하계는 각각의 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있는 것이 바람직하다. 여기 에너지는 또한 본 발명에 따른 상이한 유기 분자들 사이에서 전달될 수 있으며, 여기서 여기 에너지가 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 에미터 물질로 전달될 수 있는 것이 다시 특히 바람직하다.

[0486] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0487] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0488] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

[0489] (c) 선택적으로, 하나 이상의 용매.

[0490] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0491] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0492] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B ,

[0493] 여기서 조성물 중 호스트 물질 H^B 의 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 호스트 물질 H^B 의 조성물 중 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 2배 더 높다.

[0494] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0495] (a) 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0496] (b) 5-99 중량%, 바람직하게는 30-95 중량%, 특히 40-90 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

[0497] (c) 0-94중량%, 바람직하게는 0-65중량%, 특히 0-50중량%의 하나 이상의 용매.

[0498] 여기서 그룹 (a) 내지 (c)의 물질은 특정 구현예에서 합하면 100중량%이다.

[0499] 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F와 함께 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물

[0500] 조성물의 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물에 관한 것이고 적어도 하나의 형광 에미터 F(상기 정의된 바와 같음)는 본 발명의 분자가 아니다(즉, 본 발명에 따른 유기 분자가 형광 에미터이면, 추가 형광 에미터 F가 조성물에 존재할 수 있음).

[0501] 이 경우, 본 발명에 따른 임의의 유기 분자 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F는 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있지만, 바람직하게는 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우 조성물로부터의 발광은 주로(즉, 50% 초과, 바람직하게는 60% 초과, 더 바람직하게는 70% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 80% 초과, 또는 심지어 90% 초과) 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의, 본 발명의 분자와 구조적으로 다른 (추가) 형광 에미터 F에 기인한다. 추가로, 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 간에서, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B (존재하는 경우)로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 로, 및 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의, (추가) 형광 에미터 F 물질로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 다음으로부터 선택된 조성물 내의 물질들 간에 전달될 수 있는 것이 바람직하다: 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로. 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의, (추가) 형광 에미터 F가 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내의 1-5 중량%, 바람직하게는 2 중량%의 각 S^B의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B인 것이 특히 바람직하다.

[0502] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0503] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및

[0504] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

- [0505] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 형광 에미터 F, 및
- [0506] (d) 선택적으로 하나 이상의 용매,
- [0507] 여기서 그룹 (c)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내의 1-5 중량%, 바람직하게는 2 중량%의 각 S^B의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 >500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색광을 바람직하게 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B이다.
- [0508] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0509] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및
- [0510] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 형광 에미터 F,
- [0511] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(c)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹 (c)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 5배 더 높다.
- [0512] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0513] (a) 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0514] (b) 30-98.9 중량%, 바람직하게는 48-94.5 중량%, 특히 65-89 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B, 및
- [0515] (c) 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F, 및
- [0516] (d) 선택적으로 0-68.9 중량%, 바람직하게는 0-46.5 중량%, 특히 0-24 중량%의 하나 이상의 용매,
- [0517] 여기서 (c)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 각각의 2 중량%의 SB의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 >500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색광을 바람직하게 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B이고,
- [0518] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (d)의 물질의 총 중량은 100중량%이다.
- [0519] 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B와 함께 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물
- [0520] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌, 즉 구조적으로 상이한 적어도 하나의 TADF 물질 E^B(상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [0521] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 TADF 물질(E^B)로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있다. 추가로, 여기 에너지는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이에서, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B로 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자와 적어도 하나의 TADF 물질 E^B로부터 선택되는 조성물 내의 물질들 사이에서, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 에미터 물질로 전달될 수 있는 것이 바람직하다. 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 TADF 물질로부터 선택된, 에미터 물질로서 작용하는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 물질은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 10중량%의 각각의 에미터의 스핀 코팅 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 500 내지 560 nm, 보다 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색광을 발광하는 것이 특히 바람직하다.
- [0522] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0523] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

- [0524] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0525] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [0526] (d) 선택적으로, 하나 이상의 용매.
- [0527] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0528] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0529] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B ,
- [0530] 여기서 그룹 (c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹 (a)의 유기 분자 분율(중량%)보다 적어도 2배 이상 높다.
- [0531] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0532] (a) 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0533] (b) 0-98.9 중량%, 바람직하게는 20-94.5 중량%, 특히 40-89 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0534] (c) 0.1-50 중량%, 바람직하게는 0.5-40 중량%, 특히 1-30 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [0535] (d) 0-98.9 중량%, 바람직하게는 20-74.5 중량%, 특히 30-49 중량%의 하나 이상의 용매,
- [0536] 여기서 (a) 및/또는 (c) 중 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이고,
- [0537] 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (c)의 물질은 100 중량%까지 합산된다.
- [0538] 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F와 함께 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물
- [0539] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 유기 분자가 아닌 하나 이상의 TADF 물질 E^B (상기 정의된 바와 같음) 및 하나 이상의 본 발명의 분자가 아닌 (추가) 형광 에미터 F(위에서 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [0540] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F로부터 선택된 임의의 물질(들)은 에미터 물질(들)로 작용할 수 있다, 그러나 바람직하게는 광전자 소자의 EML에 사용되는 경우 조성물로부터의 발광은 주로(즉, 50% 초과, 바람직하게는 60% 초과, 더 바람직하게는 70% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 80% 초과, 또는 심지어 90% 초과) 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의 (추가) 형광 에미터 F에 기인한다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F가 실온(즉, (대략) 20 °C에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 2 중량%의 각 S^B 의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색 광을 발광하는 본 발명의 단락의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 특히 바람직하다. 추가로, 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B (존재하는 경우)로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 로 및 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 물질 F로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 다음으로부터 선택된 조성물 내의 물질들 사이에서 전달되는 것이 바람직하다: 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B , 및 적어도 하나 (추가) 형광 에미터 F, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) TADF 물질 E^B 로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F으로의 전달.

- [0541] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0542] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0543] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0544] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 (추가) TADF 물질 E^B , 및
- [0545] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 (c)의 TADF 물질 E^B 와도 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F, 및
- [0546] (e) 선택적으로, 하나 이상의 용매,
- [0547] 여기서 (d)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 2 중량%의 각 S^B 의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 >500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 갖는 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 이다.
- [0548] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0549] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0550] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [0551] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 (c)의 TADF 물질 E^B 와도 다른 하나 이상의 형광 에미터 F,
- [0552] 여기서 그룹 (c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹 (a)의 유기 분자 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높고,
- [0553] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높다.
- [0554] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0555] (a) 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0556] (b) 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-94 중량%, 특히 0-88 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0557] (c) 0.1-98.9 중량%, 바람직하게는 0.5-94.5 중량%, 특히 1-89 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [0558] (d) 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%의 (a) 및 또한 유기 분자와 다르고, (c)의 TADF 물질 E^B 와 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F,
- [0559] (e) 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-94 중량%, 특히 0-88 중량%의 하나 이상의 용매,
- [0560] 여기서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 실온(즉, (대략) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 2중량%의 각 S^B 의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 최대 발광이 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm 인 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 이다.
- [0561] 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (e)의 물질은 100중량%까지 합산된다.
- [0562] 적어도 하나의 인광 물질 P^B 와 함께 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물
- [0563] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 인광 물질 P^B (상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이다.

- [0564] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 인광 물질(P^B)로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있다.
- [0565] 상기 조성물로부터의 발광이, 상기 조성물이 광전자 소자의 EML에 사용되는 경우, 주로 (즉, 50% 초과, 바람직하게는 60% 초과, 더 바람직하게는 70% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 80% 초과, 또는 심지어 90% 초과) 적어도 하나의 인광 물질 P^B 에 기인하는 경우, 적어도 하나의, 바람직하게는 본 발명에 따른 각각의 유기 분자의 최저 여기 단일항 상태 $S1$ 이 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 인광 물질(P^B)의 최저 여기 삼중항 상태 $T1$ 보다 더 높은 것이 바람직하다. 그러면 본 발명에 따른 하나 이상, 바람직하게는 각각의 유기 분자가 여기 에너지를 하나 이상, 바람직하게는 각각 인광 물질(P^B)로 전달할 수 있는 것이 또한 바람직하다.
- [0566] 상기 조성물로부터의 발광이, 상기 조성물이 광전자 소자의 EML에 사용되는 경우, 주로 (즉, 50% 초과, 바람직하게는 60% 초과, 더 바람직하게는 70% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 80% 초과, 또는 심지어 90% 초과) 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자에 기인하는 경우, 적어도 하나, 바람직하게는 각각 인광 물질 P^B 의 최저 여기 삼중항 상태 $T1$ 이 본 발명에 따른 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 유기 분자의 최저 여기 삼중항 상태 $T1$ 보다 더 에너지가 더 높은 것이 바람직하다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 가 여기 에너지를 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로 전달할 수 있는 것이 또한 바람직하다. 전술한 바와 같이, 본 발명에 따른 유기 분자는 본원에서 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B 인 것이 일반적으로 바람직하다(상기 참조). 이 경우 및 상기 조성물에서, 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 는 외부 중원자 효과에 의해 조성물에 포함된 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 내에서 RISC 프로세스의 효율을 향상시킬 수 있고, 이것은 당업자의 상식의 일부를 형성한다.
- [0567] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0568] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0569] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0570] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [0571] (d) 선택적으로 하나 이상의 용매,
- [0572] 여기서 (a) 및/또는 (c)의 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이다.
- [0573] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0574] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및
- [0575] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 인광 물질 P^B ,
- [0576] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (c)의 인광 물질 P^B 의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (c)의 인광 물질 P^B 의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높다.
- [0577] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0578] (a) 1-99.5 중량%, 바람직하게는 5-50 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0579] (b) 0-98.5 중량%, 바람직하게는 35-94 중량%, 특히 60-88 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0580] (c) 0.5-20 중량%, 바람직하게는 1-15 중량%, 특히 2-10 중량%의 (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [0581] (d) 0-98.5 중량%, 바람직하게는 0-59 중량%, 특히 0-28 중량%의 하나 이상의 용매,
- [0582] 여기서 (a) 및/또는 (c) 중 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이고,

- [0583] 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (d)의 물질의 총 중량은 100중량%이다.
- [0584] 적어도 하나의 인광 물질 P^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F와 함께 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물
- [0585] 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 인광 물질 P^B (상기 정의된 바와 같음) 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F(상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물이다.
- [0586] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 인광 물질(P^B) 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터(F)로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)로 작용할 수 있다. 그러나 바람직하게는 상기 조성물이 광전자 소자의 EML에 사용되는 경우 상기 조성물로부터의 발광은 주로 (즉, 50% 초과, 바람직하게는 60% 초과, 더 바람직하게는 70% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 80% 초과, 또는 심지어 90% 초과) 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의 (추가) 형광 에미터 F에 기인한다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F가 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 2 중량%의 각 S^B 의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 바람직하게는 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm 사이의 최대 발광을 갖는 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 특히 바람직하다. 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이, 특히 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B (존재하는 경우)로부터 적어도 하나, 바람직하게는 각각 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나, 바람직하게는 각각 인광 물질 P^B , 및 적어도 하나, 바람직하게는 각각 (추가) 형광 에미터 F로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 다음으로부터 선택되는 조성물 내의 물질들 사이에서 전달될 수 있는 것이 바람직하다: 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 인광 물질 P^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로의 전달. 바람직하게 여기 에너지는 또한 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로부터 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 로 전달될 수 있다.
- [0587] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0588] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0589] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0590] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [0591] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 또한 (c)의 인광 물질 P^B 와도 다른 하나 이상의 형광 에미터 F, 및
- [0592] (e) 선택적으로, 하나 이상의 용매,
- [0593] 여기서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 실온(즉, (대략) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게 2중량%의 각 S^B 의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 최대 발광이 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm인 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 이다.
- [0594] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0595] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0596] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [0597] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 또한 (c)의 인광 물질 P^B 와도 다른 하나 이상의 형광 에미터 F,

- [0598] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (c)의 인광 물질 P^B의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (c)의 인광 물질 P^B의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높고,
- [0599] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹 (d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 5배 더 높다.
- [0600] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0601] (a) 1-99.8 중량%, 바람직하게는 5-50 중량%, 특히 10-30 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0602] (b) 0-98.8 중량%, 바람직하게는 35-94 중량%, 특히 60-88 중량%의 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 호스트 물질 H^B, 및
- [0603] (c) 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-10 중량%, 특히 1-3 중량%의 (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 인광 물질 P^B, 및
- [0604] (d) 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%의 (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F, 및
- [0605] (e) 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-59 중량%, 특히 0-28 중량%의 하나 이상의 용매,
- [0606] 여기서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 실온(즉, (대략) 20℃)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 1-5 중량%, 바람직하게는 2중량%의 각 S^B의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된 발광 스펙트럼에서 최대 발광이 500 내지 560 nm, 더 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm인 녹색광을 발광하는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B이고,
- [0607] 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (e)의 물질은 100중량%까지 합산된다.
- [0608] 본 발명의 추가적인 측면 및 구현예
- [0609] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 광발광 양자 수율(PLQY)이 20% 이상, 더 바람직하게는 30% 이상, 더욱 더 바람직하게는 40% 이상, 특히 50% 이상, 특히 60% 이상, 특히 70% 이상 또는 심지어 80% 이상이며, 여기서 본 발명에 따른 유기 분자의 PLQY는 본문 뒷부분에 설명된 바와 같이, 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내 10 중량%의 유기 분자가 있는 스핀 코팅된 필름으로부터 실온(즉, (대략) 20℃)에서 결정된다.
- [0610] 본 발명의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 10 중량%의 유기 분자의 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 필름에서 실온(즉, (대략) 20℃)에서 측정 시 50 μs 이하, 바람직하게는 25 μs 이하, 보다 바람직하게는 15 μs 이하, 보다 더 바람직하게는 10 μs 이하, 특히 8 μs 이하, 특히 6 μs 이하, 특히 바람직하게는 4 μs 이하의 지연된 여기 상태 수명을 갖는다.
- [0611] 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 실온(즉, (대략) 20℃)에서 10 중량%의 유기 분자를 포함하는 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 필름에서 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.45 eV 미만, 보다 더 바람직하게는 0.43 eV 미만, 또는 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [0612] 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 실온(즉, (대략) 20℃)에서 10 중량%의 유기 분자를 포함하는 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 필름에서 50μs 이하, 바람직하게는 25μs 이하, 더 바람직하게는 15μs 이하, 더욱 더 바람직하게는 10μs 이하, 특히 8 μs 이하, 특히 6 μs 이하, 특히 바람직하게는 4 μs 이하의 지연된 여기 상태 수명 및 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV, 더 바람직하게는 0.45 eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.43 eV, 또는 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [0613] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 가시광선 또는 가장 가까운 자외선 범위, 즉 380 내지 800nm의 파장 범위에서 실온(즉, (대략) 20℃)에서 10 중량%의 유기 분자를 포함하는 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA) 필름에서 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV 미만, 더 바람직하게는 0.45 eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.43 eV 미만 또는 심지어 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [0614] 본 발명의 추가적인 측면은 광전자 부품 또는 소자, 바람직하게는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제조하는 방법에 관한 것이다.

- [0615] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자 또는 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물이 사용되는 광전자 소자의 제조 방법에 관한 것이다.
- [0616] 광전자 소자, 특히 적어도 하나의 본 발명에 따른 분자를 포함하는 OLED는 임의의 증착 및/또는 액체 처리 수단에 의해 제조될 수 있다.
- [0617] OLED의 개별 층을 형성하기 위한 공지된 방법은 다음을 포함한다:
- [0618] - 승화 공정에 의한 증착,
- [0619] - 유기 기상 증착 공정에 의한 증착,
- [0620] - 캐리어 가스 승화 공정에 의한 증착,
- [0621] - 용액 공정 또는 인쇄.
- [0622] 본 발명의 추가적인 측면은 광전자 소자를 제조하는 방법에 관한 것이고, 여기서 본 발명에 따른 유기 분자 또는 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물이 사용되고, 특히 진공 증발 방법을 사용하여 또는 용액으로부터 유기 분자를 처리하는 것을 포함한다.
- [0623] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED와 같은 광전자 소자를 제조하는 데 사용되는 방법은 당업자에게 공지되어 있다. 상이한 층은 개별적이고 연속적으로 후속 증착 공정에 의해 적합한 기판 상에 연속적으로 증착된다. 개별 층은 동일하거나 상이한 증착 방법을 사용하여 증착될 수 있다.
- [0624] 기상 증착 공정은 열적 (공)증발, 화학적 기상 증착 및 물리적 기상 증착을 포함할 수 있다. 액티브 매트릭스 OLED 디스플레이의 경우 AMOLED 백플레인이 기판으로 사용된다. 개별 층은 적절한 용매를 사용하는 용액 또는 분산액으로부터 처리될 수 있다. 용액 증착 공정은 대표적으로 스핀 코팅, 딥 코팅 및 제트 프린팅을 포함한다. 액체 처리는 선택적으로 불활성 분위기(예를 들어, 질소 분위기)에서 수행될 수 있으며 용매는 선택적으로 최신 기술에 알려진 수단에 의해 완전히 또는 부분적으로 제거될 수 있다.
- [0625] 하나 이상의 층이 OVPD(유기 기상 증착) 공정에 의해 또는 물질이 10^{-5} mbar와 1 bar 사이의 압력에서 적용되는 캐리어-가스 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는, 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자가 바람직하다. 이 공정의 특별한 경우는 재료가 노즐을 통해 직접 적용되어 구조화되는 OVJP(유기 기상 제트 프린팅) 공정이다.
- [0626] 또한, 하나 이상의 층이 예를 들어 스핀-코팅에 의한 것과 같은 용액으로부터 생성되는 것 또는 예를 들어, 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 노즐 인쇄 또는 오프셋 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI(광유도 열화상, 열전사 인쇄) 또는 잉크젯 인쇄와 같은 임의의 바람직한 인쇄 공정에 의한 것을 특징으로 하는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자가 바람직하다. 이를 위해서는 용해성 화합물이 필요하다. 화합물의 적절한 치환을 통해 높은 용해도를 달성할 수 있다.
- [0627] 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가 층이 기상 증착에 의해 적용되는 하이브리드 공정도 가능하다. 따라서, 예를 들어 용액으로부터 발광층을 적용하고 증착에 의해 전자 수송층을 적용하는 것이 가능하다.
- [0628] 이들 공정/방법은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있고, 발명의 단계 없이 적어도 하나의 본 발명에 따른 분자를 포함하는 발광 소자에 적용될 수 있다.
- [0629] 추가적인 측면에서, 본 발명은 하기 단계를 포함하는, 광, 특히 500 내지 560 nm의 파장의 녹색광을 생성하는 방법에 관한 것이다:
- [0630] (i) 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제공하는 단계; 및
- [0631] (ii) 상기 소자에 전류를 인가하는 단계
- [0632] 빛을 발생시키는 발광 소자의 핵심 요소는 일반적으로 양극과 음극 사이에 위치한 적어도 하나의 발광층(EML)이다. 발광 소자에 양극과 음극에 전압(및 전류)을 가하면 양극과 음극에서 각각 정공과 전자가 주입된다. 정공 수송층(HTL)은 일반적으로 발광층(EML)과 양극 사이에 위치하며 전자 수송층(ETL)은 일반적으로 발광층(EML)과 음극 사이에 위치한다. 상이한 층들이 순차적으로 배치된다. 그러면 EML에서 정공과 전자의 재결합에 의해 높은

에너지의 엑시톤이 생성된다. 이러한 여기 상태(예를 들어, S1과 같은 단일항 상태 및/또는 T1과 같은 삼중항 상태)의 바닥 상태(S0)로의 감쇠는 바람직하게는 광 발광을 야기한다.

- [0633] *궤도 및 여기 상태 에너지와 ΔE_{ST} 의 결정*
- [0634] 궤도 및 여기 상태 에너지는 실험적인 방법 또는 양자 화학 방법을 사용하는 계산, 특히 밀도 범함수 이론 계산을 통해 결정될 수 있다. 최고준위 점유 분자 궤도 E^{HOMO} 의 에너지는 0.1eV의 정확도로 순환 전압전류법 측정으로부터 당업자에게 공지된 방법에 의해 결정된다.
- [0635] 최저준위 비점유 분자 궤도 E^{LUMO} 의 에너지는 0.1eV의 정확도로 순환 전압전류법 측정으로부터 당업자에게 공지된 방법에 의해 결정될 수 있다. E^{LUMO} 가 순환 전압전류법 측정으로 결정되면 E_{CV}^{LUMO} 로 표시된다. 대안적으로, 여기서 바람직하게는, E^{LUMO} 는 $E^{HOMO} + E^{gap}$ 으로 계산되며, 여기서 E^{gap} 은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내의 각 물질로 스핀 코팅된 필름으로부터 측정된 광발광(PL) 스펙트럼(정상 상태 스펙트럼)의 개시로부터 결정된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적으로 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는 달리 언급되지 않는 한 10중량%이다. 본 발명의 일부를 형성하지 않고, 본 발명의 분자와 상이하고(즉, 일반식 X로 표시되지 않음) 본원에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대하여, PL 스펙트럼은 일반적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 순수한 필름으로부터 기록된다. 본 발명의 분자와 상이한(즉, 일반식 X로 표시되지 않는) 형광 에미터 F의 경우, 특히 이들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, PL 스펙트럼은 전형적으로 PMMA내 1-5%, 바람직하게는 2중량%의 F 농도를 갖는 각각의 에미터 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된다.
- [0636] 흡수 스펙트럼은 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA내의 각 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 실온(즉, (대략) 20°C)에서 기록된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적으로 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는 달리 언급되지 않는 한 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본원에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대해, 흡수 스펙트럼은 전형적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 순수한 필름으로부터 기록된다. 본 발명의 분자가 아닌 형광 에미터 F의 경우, 특히 그들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, 흡수 스펙트럼은 전형적으로 PMMA 내의 F의 농도가 1-5%, 바람직하게는 2중량%인 PMMA내의 각각의 에미터 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된다. 대안적으로, 흡수 스펙트럼은 또한 예를 들어 디클로로메탄 또는 톨루엔에서 각 분자의 용액으로부터 기록될 수 있으며, 여기서 용액의 농도는 일반적으로 최대 흡광도가 바람직하게는 0.1 내지 0.5 범위가 되도록 선택된다.
- [0637] 달리 언급하지 않는 한, 제1 여기 삼중항 상태 T1의 에너지는 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA내의 각각의 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 77K(정상 상태 스펙트럼)에서의 인광 스펙트럼 개시(onset)로부터 결정된다. 인광 물질 P^B 에 대해서만, 인광 스펙트럼은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 기록된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적으로 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름 내의 각각의 물질의 농도는 달리 언급되지 않는 한 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본원에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대해, 흡수 스펙트럼은 전형적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 순수한 필름으로부터 기록된다. 본 발명의 분자가 아닌 형광 에미터 F의 경우, 특히 그들이 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, 흡수 스펙트럼은 전형적으로 PMMA 내의 F의 농도가 1-5%, 바람직하게는 2중량%인 PMMA 내의 각각의 에미터 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된다. ΔE_{ST} 값이 작은 TADF 물질 E^B 의 경우 시스템 간 교차 및 역 시스템 간 교차가 모두 저온에서도 발생할 수 있다. 결과적으로, 77K에서의 발광 스펙트럼은 S1 및 T1 상태 모두로부터의 발광을 포함할 수 있다. 그러나 삼중항 에너지의 기여/값이 일반적으로 우세한 것으로 간주된다.
- [0638] 달리 언급하지 않는 한, 제1 여기 단일항 상태 S1의 에너지는 실온(즉, (대략) 20°C)에서의 형광 스펙트럼의 개시로부터 결정되고(정상 상태 스펙트럼), 전형적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내의 각각의 물질의 스핀-코팅된 필름으로부터 결정된다. 본 발명에 따른 유기 분자 및 일반적으로 TADF 물질 E^B 의 경우, 스핀 코팅

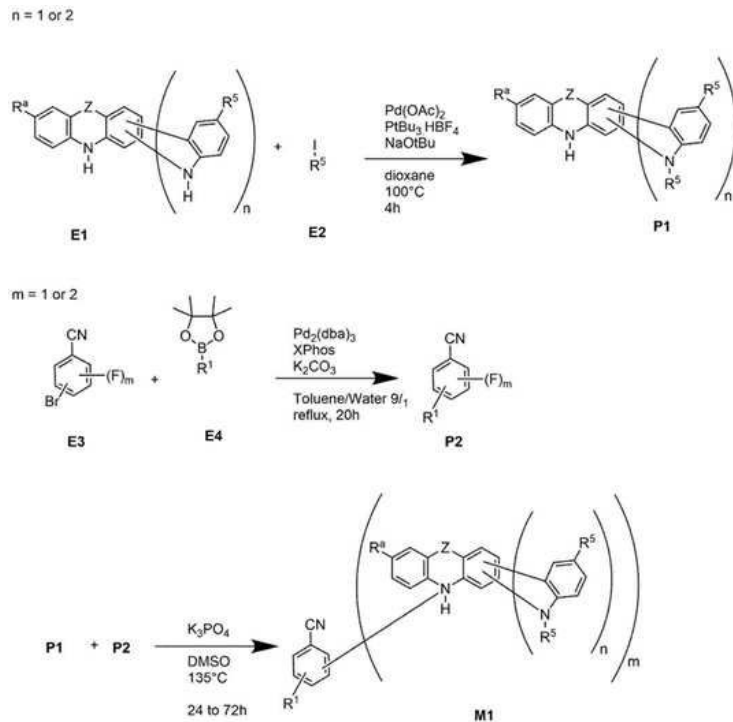
된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는 달리 언급되지 않는 한 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본원에 정의된 TADF 물질 E^B가 아닌 호스트 물질 H^B에 대해, 흡수 스펙트럼은 전형적으로 각각의 호스트 물질 H^B의 순수한 필름으로부터 기록된다. 본 발명의 분자가 아닌 형광 에미터 F의 경우, 특히 그들이 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B인 경우, 흡수 스펙트럼은 일반적으로 PMMA 내의 F의 농도가 1-5%, 바람직하게는 2중량%인 PMMA내의 각각의 에미터 물질의 스핀-코팅된 필름으로부터 기록된다. 그러나 효율적인 시스템간 교차를 나타내는 인광 물질 P^B의 경우, 실온 발광(일반적으로 에미터의 10중량%를 갖는 PMMA내의 P^B의 스핀 코팅된 필름으로부터 측정됨)은 (대부분) 형광이 아닌 인광일 수 있다. 이 경우, 상온(즉, (대략) 20°C)에서 발광 스펙트럼의 개시는 상기 언급한 제1 여기 삼중항 상태 T1의 에너지를 결정하는 데 사용되며 제1 여기 단일항 상태 S1의 에너지를 결정하는 데 사용되지 않는다.

[0639] 별도의 언급이 없는 한, 제1(즉, 최저) 여기 단일항 상태(S1)와 제1(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 사이의 에너지 차이에 해당하는 ΔE_{ST} 값은 제1 여기 단일항 상태 에너지 및 제1 여기 삼중항 상태 에너지를 기준으로 결정되고, 이들은 상기 설명한 바와 동일하다.

[0640] 예

[0641] 일반 합성 방식 I

[0642] 예시적으로, 일반 합성 방식 I은 본 발명에 따른 유기 분자 M1을 위한 합성 방식을 제공한다,



[0643]

[0644] 합성을 위한 일반 절차

[0645] AAV1

[0646] 질소 분위기 하에서 건조 다이옥산을 E1(1.00 당량, 예: CAS 109005-10-9), 아릴 아이오다이드 E2(2.20 당량, 예: CAS 591-50-4), 트리-tert-부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트(0.24 당량; CAS 131274-22-1), 팔라듐(II)아세테이트(0.08 당량, CAS 3375-31-3) 및 소듐 tert-부톡사이드(3.00 당량, CAS 865-48-5)에 첨가하고, 10분 동안 질소를 살포한다. 반응 혼합물을 100° C에서 4시간 동안 교반한다. 실온으로 냉각한 후 활성탄과 셀라이트®(키켈구르)를 혼합물에 첨가하고 15분간 교반한 다음 진공 흡입으로 여과한다. 여과액을 에틸 아세테이트와 염수로 추출한다. 유기 추출물을 감압 하에 농축시킨다. 결과적인 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 고체로서 P1을 얻는다.

[0647] AAV2

[0648] 질소 분위기 하에서 톨루엔/물 혼합물을 **E3**(1.00 당량, 예: CAS 123843-67-4), 보론산염 **E4**(1.10 당량, 예: CAS 24388-23-6), 탄산칼륨(2.00 당량, CAS 584-08-7), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(0.03 당량, CAS 51364-51-3) 및 X-PHOS(0.12 당량, CAS 564483-18-7)에 첨가하고, 10분 동안 질소를 살포한다. 반응 혼합물을 100° C에서 20시간 동안 교반한다. 실온으로 냉각한 후 활성탄과 셀라이트®(키젤구르)를 혼합물에 첨가하고 15분간 교반한 다음 진공 흡입으로 여과한다. 여과액을 에틸 아세테이트와 염수로 추출한다. 유기 추출물을 감압 하에 농축시킨다. 결과적인 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 고체로서 **P2**을 얻는다.

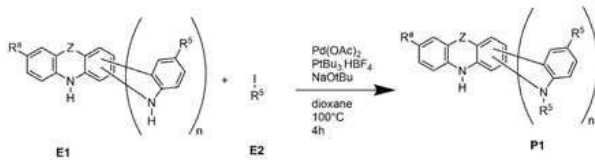
[0649] **AAV3**

[0650] **P1**(2.2 당량, 절차 1의 생성물), **P2**(1.00 당량) 및 제삼인산칼륨(5.00 당량)을 질소 분위기 하에서 건조 DMSO에 용해시키고 135° C에서 24-72시간 동안 교반한다(LC/MS 및 TLC를 통해 반응을 모니터링함). 그 후, 반응 혼합물을 물과 얼음이 섞인 교반 혼합물에 붓는다. 결과적인 침전물을 여과하고 물과 에탄올로 세척한다. 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피 또는 재결정화를 통해 정제하여 고체로서 **M1**을 얻는다.

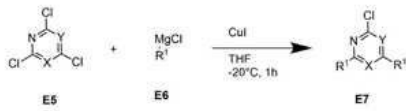
[0651] **일반 합성 방식 II**

[0652] 예시적으로, 일반 합성 방식 I은 본 발명에 따른 유기 분자 **M2**을 위한 합성 방식을 제공한다,

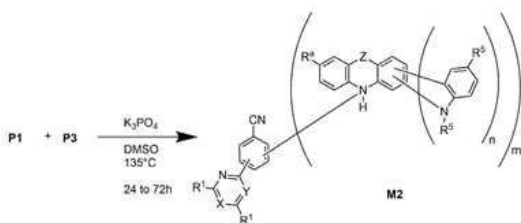
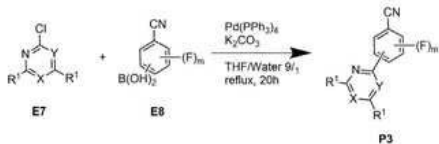
n = 1 or 2



m = 1 or 2 X, Y = N or CH



m = 1 or 2



[0653]

[0654] **합성을 위한 일반 절차**

[0655] **AAV1**

[0656] 질소 분위기 하에서 건조 다이옥산을 **E1**(1.00 당량, 예: CAS 109005-10-9), 비스(피나콜라토)디보론 **E2**(2.20 당량, 예: CAS 591-50-4), 트리-tert-부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트(0.24 당량; CAS 131274-22-1), 팔라듐(II)아세테이트(0.08 당량, CAS 3375-31-3) 및 소듐 tert-부톡사이드(3.00 당량, CAS 865-48-5)에 첨가하고, 10분 동안 질소를 살포한다. 반응 혼합물을 100° C에서 4시간 동안 교반한다. 실온으로 냉각한 후 활성탄과 셀라이트®(키젤구르)를 혼합물에 첨가하고 15분간 교반한 다음 진공 흡입으로 여과한다. 여과액을 에틸 아세테이트와 염수로 추출한다. 유기 추출물을 감압 하에 농축시킨다. 결과적인 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 고체로서 **P1**을 얻는다.

[0657] **AAV4**

- [0658] 질소 분위기 하에서 건조 THF를 **E5**(1.00 당량, 예: CAS 108-77-0)와 구리 아이오다이드(0.05 당량, CAS 7681-65-4)에 첨가한 후 10분 동안 질소를 살포한다. 용액을 -20° C로 냉각한 다음 염화마그네슘 **E6**(2.20 당량, 예: CAS 677-22-5)을 첨가한다. 반응 혼합물을 -20° C에서 1시간 동안 교반한다. 에탄올을 첨가하고 혼합물을 실온에 도달하도록 한 다음 실리카 패드를 통해 진공 흡입하고 시클로헥산과 디클로로메탄으로 세척하여 여과한다. 여과액을 감압 하에 농축시킨다. 결과적인 미정제 생성물을 헵탄과 에탄올로부터 재결정화를 통해 정제하여 고체로서 **E7**을 얻는다.
- [0659] **AAV5**
- [0660] 질소 분위기 하에서 THF/물 혼합물을 **E8**(1.00 당량, 예: CAS 123843-67-4), 염화 아릴 **E7**(1.10 당량, 절차 4의 생성물), 탄산칼륨(2.00 당량, CAS 584-08-7), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(0.05 당량, CAS 14221-01-3)에 추가하고 10분 동안 질소를 살포한다. 반응 혼합물을 20시간 동안 환류 교반한다. 실온으로 냉각한 후 활성탄과 셀라이트®(키젤구르)를 혼합물에 첨가하고 15분 동안 교반한 다음 진공 흡입으로 여과한다. 여과액을 에틸 아세테이트와 염수로 추출한다. 유기 추출물을 감압 하에 농축시킨다. 결과적인 미정제 생성물을 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 고체로서 **P3**를 얻는다.
- [0661] **AAV6**
- [0662] **P1**(1.15 당량, 절차 1의 생성물), **P3**(1.00 당량) 및 제삼인산칼륨(2.00 당량)을 질소 분위기 하에서 건조 DMSO에 용해시키고 120° C에서 14시간 동안 교반한다(LC/MS 및 TLC를 통해 반응을 모니터링함). 그 후, 반응 혼합물을 물과 얼음이 섞인 교반 혼합물에 붓는다. 결과적인 침전물을 여과하고 물, 에탄올 및 헵탄으로 세척한다. 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피 또는 재결정화를 통해 정제하여 고체로서 **M2**를 얻는다.
- [0663] 순환 전압전류법
- [0664] 순환 전압전류도가 디클로로메탄 또는 적절한 용매 및 적절한 보조 전해질(예: 0.1mol/L의 테트라부틸암모늄 헥사플루오로포스페이트) 내에서 각 화합물(예: 본 발명에 따른 유기 분자, 일반적인 TADF 물질 E^B, 일반적인 호스트 물질 H^B, 일반적인 인광 물질 P^B, 일반적인 형광 물질 F)의 농도가 10⁻³ mol/L인 용액에서 측정된다. 측정은 3전극 조립체(작업 및 상대 전극: Pt 와이어, 기준 전극: Pt 와이어)를 사용하여 질소 분위기에서 실온(즉, (대략적으로) 20 ° C)에서 수행하고, 내부 표준으로서 FeCp₂/FeCp₂⁺를 사용하여 보정한다.
- [0665] 내부 표준으로서 페로센을 사용하여 HOMO 및 LUMO 데이터를 교정하고, 위 목적을 위해 페로센의 문헌 값을 사용한다.
- [0666] 밀도 범함수 이론 계산
- [0667] 분자 구조가 BP86 범함수 및 RI(Resolution of identity) 접근법을 사용하여 최적화된다. 여기 에너지는 (BP86) 최적화된 구조를 사용하고 시간의존 DFT(Time-Dependent DFT, TD-DFT) 방법을 채용하여 계산된다. 궤도 및 여기 상태 에너지는 B3LYP 범함수로 계산된다. Def2-SVP 기본 세트 및 수치 적분을 위한 m4-grid가 사용된다. Turbomole 프로그램 패키지가 모든 계산에 사용된다.
- [0668] 광물리적 측정
- [0669] 시료 전처리: 스핀 코팅
- [0670] 달리 언급하지 않는 한, 성분의 광물리적 측정은 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내의 각각의 성분(예를 들어, 본 발명에 따른 유기 분자, 일반적으로 TADF 물질 E^B, 일반적으로 호스트 물질 H^B, 일반적으로 인광 물질 P^B, 및 일반적으로 형광 에미터 F)의 스핀-코팅된 필름으로부터 수행된다. 달리 언급하지 않는 한, 이러한 스핀 코팅된 PMMA 필름의 성분 농도는 다음과 같다.
- [0671] · 본 발명에 따른 모든 유기 분자: PMMA 중 10중량%
- [0672] · 본원에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B: PMMA 중 10중량%
- [0673] · 본원에 정의된 바와 같은 인광 물질 P^B: PMMA 중 10중량%
- [0674] · 본 발명에 따른 유기 분자의 일부를 형성하지 않는 본원에 정의된 바와 같은 형광 에미터 F, 특히 그들이 본

발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우: PMMA 중 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%.

[0675] 그러나, 호스트 물질 H^B 는 본 발명에 따른 유기 분자가 아니며 본원에 정의된 바와 같이 TADF 물질 E^B 또는 인광 물질 P^B 또는 형광 에미터 F가 아닌 H^B 의 스핀 코팅된 순수 필름이 PMMA 필름 대신에 사용된다.

[0676] 장치: Spin150, SPS euro.

[0677] 시료 농도는 1.0 mg/ml이고, 전형적으로 적절한 용매인 톨루엔/DCM에 용해된다.

[0678] 프로그램: 2000U/min에서 7-30초. 코팅 후, 필름은 70°C에서 1분 동안 건조된다.

[0679] 흡수 측정

[0680] Thermo Scientific Evolution 201 UV-Visible Spectrophotometer는 270nm 위의 파장 영역에서 샘플의 최대 흡수 파장을 결정하는 데 사용된다. 이 파장은 광발광 스펙트럼 및 양자 수율 측정을 위한 여기 파장으로 사용된다.

[0681] 광발광 분광법

[0682] 광발광 분광법의 측정을 위해 Horiba의 형광 분광계 "Fluoromax 4P"가 사용된다.

[0683] 인광 에미터로부터의 정상 상태 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼은 실온에서 기록된다. 기본 작동 방식은 다음과 같다: 연속 광원(제논 아크 램프)이 적절한 파장 대역을 선택하는 여기 모노크로메이터에 비춘다. 이 단색 여기광은 발광을 발광하는 시료로 향한다. 샘플이 스핀 코팅 또는 증착 필름인 경우 측정하는 동안 이를 큐벳에 넣고 질소 분위기를 유지한다. 발광은 측정 중에 변경되는 파장 대역을 선택하고 광자 계수 검출기(R928P 광전자 증배관)에 비추는 두 번째 발광 모노크로메이터로 향한다. 감지기의 신호는 시스템 컨트롤러와 호스트 컴퓨터로 보고되며, 여기에서 데이터를 처리하고 표시할 수 있다.

[0684] TADF 에미터의 인광 스펙트럼은 77K에서 기록된다. 기본 작동 방식은 다음과 같다: 여기에는 펄스 광원(펄스 크세논 램프)이 사용되며 25Hz에서 작동한다. 게이트 및 지연 생성기를 포함하는 제어 모듈은 여기와 감지 사이의 타이밍을 제어하는 데 사용된다. 일반적인 데이터 수집 시퀀스는 제어 모듈이 감지하는 펄스 램프의 플래시로 시작된다. 빛이 여기 모노크로메이터로 들어가서 분산된다. 모노크로메이터의 단색광은 샘플을 여기서 쬐는다. 샘플은 측정하는 동안 액체 질소로 채워진 유리 듀어 용기에 배치된다. 샘플의 발광 발광은 발광 모노크로메이터를 통해 광자 계수 광전자 증배관-튜브 검출기로 전달된다. 제어 모듈은 탐지기에서 신호를 가로채고 사전 결정된 샘플링 시간 길이(샘플 창) 동안 플래시(초기 지연)만 신호의 게이트된 부분만 수집한다. 게이팅 전후에 도착하는 모든 신호는 무시된다. 초기 지연은 0에서 10000ms 사이에서 변경될 수 있으며 초기 형광 발광 및 램프 감쇠, 바람직하게는 50ms의 영향을 배제하도록 설정된다. 샘플 윈도우는 0.01과 10000ms 사이에서 변할 수 있고 인광 발광을 수집하도록 설정되며, 바람직하게는 40ms이다.

[0685] μs 범위 및 ns 범위의 시간 분해(과도) 광발광(PL) 분광법(FS5)

[0686] 시간 분해 PL 측정이 Edinburgh Instruments의 FS5 형광 분광기로 수행되었다. HORIBA 설정에서의 측정과 비교할 때, 더 나은 집광이 최적화된 신호 대 노이즈 비율을 가능하게 하며, 특히 지연 형광 특성의 과도 PL 측정에 있어서 FS5 시스템이 유리하다. 연속적인 광원으로서 분광기는 150W 크세논 아크 램프를 포함하고, 특정 파장이 Czerny-Turner 모노크로메이터에 의해 선택될 수 있다. 그러나, 표준 측정은 대신 발광 파장이 310nm인 외부 VPLED 가변 펄스 LED를 사용하여 수행된다. 시료의 발광이 민감한 R928P 광전자 증배관(PMT)을 향하여, 200nm에서 870nm 사이의 스펙트럼 범위에서 최대 25%의 피크 양자 효율로 단일 광자를 감지할 수 있도록 한다. 검출기는 300 cps(초당 카운트) 미만의 다크 카운트를 제공하는 온도 안정화 PMT이다.

[0687] 데이터 수집은 잘 정립된 시간 상관 단일 광자 계수(TCSPC) 기술을 사용하여 이루어진다. FS5에는 발광 모노크로메이터, 검출기 장치로서 온도 안정화 광증배기 및 여기 소스로서 펄스 LED(310 nm 중심 파장, 910 ps 펄스 폭)가 장착되어 있다. 시료가 스핀 코팅 또는 증착 필름인 경우 큐벳에 넣고 측정하는 동안 질소 분위기 하에 보관한다.

[0688] 지연형광의 과도 감쇠 수명(transient decay time) τ 을 결정하기 위해 n 지수 함수의 적분을 통해 데이터가 보정된다:

$$\sum_{i=1}^n A_i \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right)$$

[0689]

[0690] 여기서 n은 1 내지 3이다. 특정 수명 τ_i 에 그에 대응되는 진폭 A_i 가중치를 부여함으로써 지연 형광 수명 τ_{DF} 이 결정된다:

$$\tau_{DF} = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \tau_i}{\sum_{i=1}^n A_i}$$

[0691]

[0692] TCSPC(시간 상관 단일 광자 계수)

[0693] 여기 상태 모집단 동역학은 발광 모노크로메이터, 검출기 장치로서 온도 안정화 광전자 증배관 및 여기 소스로서 펄스 LED(310nm 중심 파장, 910ps 펄스 폭)가 장착된 Edinburgh Instruments FS5 Spectrofluorometers를 사용하여 결정된다. 샘플을 큐벳에 넣고 측정하는 동안 질소로 플라싱한다.

[0694] 전체 감쇠 역학

[0695] 200ns, 1 μ s 및 20 μ s 및 > 80 μ s에 이르는 더 긴 측정의 4개 시간 창에서 TCSPC 측정을 수행하여 시간 및 신호 강도에서 여러 자릿수에 걸친 전체 여기 상태 모집단 감쇠 역학을 달성한다. 측정된 시간 곡선은 다음과 같은 방식으로 처리된다.

[0696] 1. 배경 보정은 여기 전에 평균 신호 레벨을 결정하고 뺄으로써 적용된다.

[0697] 2. 주 신호의 초기 상승을 기준으로 시간 축을 정렬한다.

[0698] 3. 곡선은 겹치는 측정 시간 영역을 사용하여 서로 크기가 조정된다.

[0699] 4. 처리된 곡선이 하나의 곡선으로 병합된다.

[0700] 데이터 분석

[0701] 데이터 분석은 즉시 형광(PF)(일반적으로 나노초 정도) 및 지연 형광(DF)(일반적으로 마이크로초 정도) 감쇠의 단일 지수 및 이중 지수 피팅을 사용하여 수행된다. 지연 형광 및 즉시 형광의 비율(n-값)은 각각의 광발광 감쇠를 시간에 따라 적분하여 계산된다.

$$\frac{\int I_{DF}(t) dt}{\int I_{PF}(t) dt} = n$$

[0702]

[0703] 평균 여기 상태 수명은 PF 및 DF의 각각의 기여도와 함께 가중된 즉시 및 지연된 형광 감쇠 시간의 평균을 취하여 계산된다.

[0704] 광발광 양자 수율 측정

[0705] 광발광 양자 수율(PLQY) 측정을 위해 Absolute PL 양자 수율 측정 C9920-03G 시스템(Hamamatsu Photonics)이 사용된다. 양자 수율 및 CIE 좌표는 소프트웨어 U6039-05 버전 3.6.0을 사용하여 결정된다.

[0706] 최대 발광은 nm로, 양자 수율 Φ 은 %로, CIE 좌표는 x,y 값으로 표시된다.

[0707] PLQY는 다음의 프로토콜을 사용하여 결정된다.

[0708] 1) 품질 보증: (알려진 농도의) 에탄올 중 안트라센이 기준(reference)으로서 사용된다.

[0709] 2) 여기 파장: 유기 분자의 최대 흡수가 결정되고, 이 파장을 사용하여 분자가 여기된다.

[0710] 3) 측정

[0711] 양자 수율은 질소 분위기에서 전술한 스핀 코팅된 필름으로부터 실온(즉, (약) 20 $^{\circ}$ C에서 측정된다. PLQY는 다음 방정식을 사용하여 계산된다.

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{유기 분자 발광}}}{n_{\text{유기 분자 흡수}}} = \frac{\int_{\lambda_2}^{\lambda_1} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{시료}}(\lambda) - I_{\text{기준}}(\lambda)] d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{기준}}(\lambda) - I_{\text{시료}}(\lambda)] d\lambda}$$

[0712]

[0713] 여기서 $n_{\text{광자}}$ 은 광자 수를 나타내고 I 는 강도를 나타낸다. 표시 '기준'은 발광 샘플이 없는 기준 측정을 나타내고 표시 '샘플'은 발광 샘플이 있는 측정을 나타낸다. 파장 λ_1 및 λ_2 는 여기광 영역을 표시하고 파장 λ_3 및 λ_4 는 샘플 발광 영역을 표시한다.

[0714] 광전자 소자의 제조 및 특징화

[0715] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 특히 OLED 소자는 진공 증착 방법을 통해 제조될 수 있다. 층이 하나보다 많은 화합물을 포함하는 경우, 하나 이상의 화합물의 중량 백분율은 %로 표시된다. 총 중량 백분율은 100%가 되므로, 값이 지정되지 않은 경우 이 화합물의 분율은 지정된 값과 100% 간의 차이와 같다.

[0716] 완전히 최적화되지 않은 OLED가 표준 방법을 사용하여, 전계발광 스펙트럼 및 광다이오드에 의해 검출된 광을 사용하여 계산된 세기 및 전류에 의존하는 외부 양자 효율(%)을 측정하여 특징화된다. OLED 소자의 수명은 일정한 전류 밀도에서 동작하는 동안 휘도의 변화로부터 추출된다. LT50 값은 측정 휘도가 초기 휘도의 50%로 감소한 시간에 해당하고, 유사하게 LT80은 측정 휘도가 초기 휘도의 80%로 감소한 시점에 해당하고, LT97는 측정 휘도가 초기 휘도의 97%로 감소한 시점에 해당하는 등이다.

[0717] 가속 수명 측정이 수행된다(예: 증가된 전류 밀도가 적용됨). 예를 들어, 500cd/m^2 에서 LT80 값은 다음의 식을 사용하여 결정된다.

$$LT80\left(500 \frac{\text{cd}}{\text{m}^2}\right) = LT80(L_0) \left(\frac{L_0}{500 \frac{\text{cd}}{\text{m}^2}}\right)^{1.6}$$

[0718] 여기서 L_0 는 인가된 전류 밀도에서의 초기 휘도를 나타낸다.

[0720] 값들은 여러 픽셀(일반적으로 2-8개)의 평균에 해당하며, 이러한 픽셀 간의 표준 편차가 제공된다. 도면은 하나의 OLED 픽셀에 대한 데이터 시리즈를 보여준다.

[0721] HPLC-MS

[0722] 유기 화합물의 순도는 질량 분석법(MS)과 결합된 고압 액체 크로마토그래피(HPLC)를 사용하여 평가할 수 있다. 이러한 HPLC-MS 분석은 단일 사중극자 MS 검출기가 장착된 Agilent의 HPLC1260 infinity HPLC-MS system을 사용하여 수행된다. 예를 들어, 일반적인 HPLC 방법은 다음과 같다: 역상 컬럼 3.0mm x 100mm, 입자 크기 2.7 μm Agilent(Poroshell 120EC-C18, 3.0 x 100mm, 2.7 μm HPLC 컬럼)가 HPLC에 사용된다. HPLC-MS 측정은 45°C에서 수행되며 일반적인 구배는 다음과 같다:

표 1

유속[mL/분]	시간[분]	A[%]	B[%]	C[%]
2.1	0.0	40	50	10
2.1	1.00	40	50	10
2.1	3.50	10	65	25
2.1	6.00	10	40	50
2.1	8.00	10	10	80
2.1	11.50	10	10	80
2.1	11.51	40	50	10
2.1	12.50	40	50	10

[0724] 또한, 다음 용매 혼합물(모든 용매는 0.1%(V/V)의 포름산을 함유함):

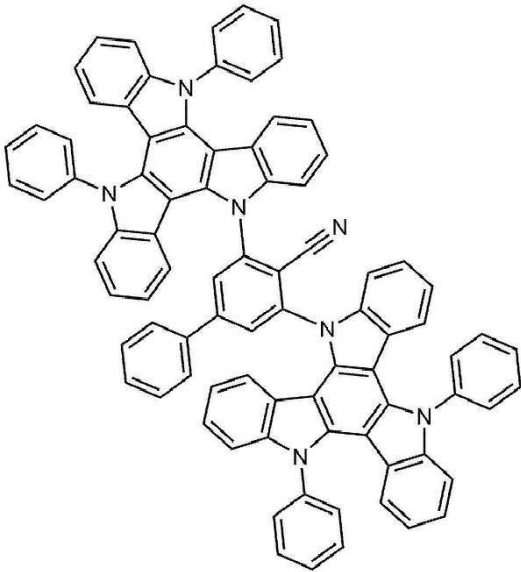
표 2

용매 A:	H ₂ O (10%)	MeCN(90%)
용매 B:	H ₂ O (90%)	MeCN(10%)
용매 C:	THF(50%)	MeCN(50%)

[0726] 0.5 mg/mL 농도의 분석물 용액에서 주입 부피 2 μ L 이 측정을 위해 사용된다.

[0727] 프로브의 이온화는 양성(APCI +) 또는 음성(APCI -) 이온화 모드 에서 대기압 화학적 이온화(APCI) 소스 또는 대기압 광이온화(APPI) 소스를 사용하여 수행된다.

[0728] 실시예 1



[0729]

[0730] 실시예 1은 하기에 따라 합성되었다:

[0731] **AAV1**(수율 36%), 여기서 반응물 **E1**으로서 10,15-디하이드로-5H- 디인돌로[3,2-a:3',2'-c]카바졸 (CAS 109005-10-9)을 사용하고, 반응물 **E2**로서 아이오도벤젠(CAS 591-50-4)를 사용하였다.

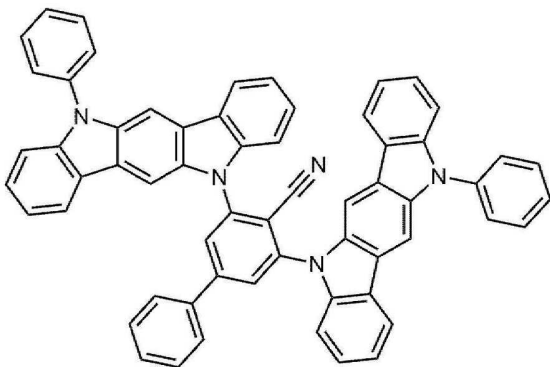
[0732] **AAV2**(수율 46%), 여기서 반응물 **E3**으로서 4-브로모-2,6-디플루오로벤조니트릴 (CAS: 123843-67-4)을 사용하고, 반응물 **E4**로서 페닐보론산 피나콜 에스터 (CAS: 24388-23-6)를 사용하였다.

[0733] **AAV3**(수율 19%).

[0734] MS (HPLC-MS), m/z (머무름 시간): 1170 (6.3 분).

[0735] 실온(즉, 약 20° C)에서 실시예 1(PMMA 내 10 중량%)의 발광 스펙트럼은 520 nm에서 최대 발광(λ_{max})을 가진다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 57%이고, 20 μ s 측정 창에서 결정된 지연 형광 수명은 1.8 μ s이다. 결과의 CIEx 좌표는 0.31에서, CIEy 좌표는 0.52에서 결정된다.

[0736] 실시예 2



[0737]

[0738] 실시예 2은 하기에 따라 합성되었다:

[0739] **AAV2**(수율 46%), 여기서 반응물 **E3**으로서 4-브로모-2,6- 디플루오로벤조니트릴 (CAS: 123843-67-4)을 사용하고, 반응물 **E4**로서 페닐보론산 피나콜 에스터 (CAS: 24388-23-6)를 사용하였다.

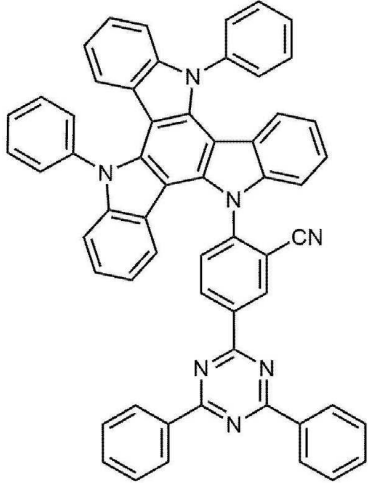
[0740] **AAV3**(수율 33%), 여기서 반응물 **P2**로서 5,11-디하이드로-5-페닐인돌로[3,2-b]카바졸 (CAS 1316311-27-9)을 사

용하였다.

[0741] MS (HPLC-MS), m/z (머무름 시간): 841 (4.9 분).

[0742] 실온(즉, 약 20° C)에서 실시예 2(PMMA 내 10 중량%)의 발광 스펙트럼은 492 nm에서 최대 발광(λ_{max})을 가진다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 64%이고, 20 μ s 측정 창에서 결정된 지연 형광 수명은 6.6 μ s이다. 결과의 CIE_x 좌표는 0.22에서, CIE_y 좌표는 0.38에서 결정된다.

[0743] 실시예 3



[0744]

[0745] AAV1(수율 36%), 여기서 반응물 E1으로서 10,15-디하이드로-5H-디인돌로[3,2-a:3',2'-c]카바졸 (CAS 109005-10-9)을 사용하고, 반응물 E2로서 아이오도벤젠(CAS 591-50-4)을 사용하였다.

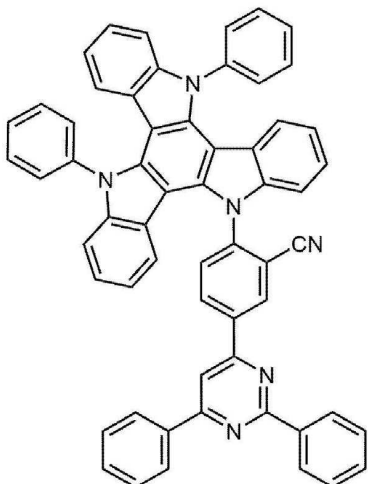
[0746] AAV5(수율 81%), 여기서 반응물 E8로서 3-시아노-4-플루오로페닐보론산 (CAS: 214210-21-6)을 사용하고 반응물 E7로서 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (CAS: 3842-55-5)을 사용하였다.

[0747] AAV6(수율 53%).

[0748] MS (HPLC-MS), m/z (머무름 시간): 830 (5.8 분).

[0749] 실온(즉, 약 20° C)에서 실시예 3(PMMA 내 10 중량%)의 발광 스펙트럼은 548 nm에서 최대 발광(λ_{max})을 가진다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 31%이고, 20 μ s 측정 창에서 결정된 지연 형광 수명은 1.1 μ s이다. 결과의 CIE_x 좌표는 0.41에서, CIE_y 좌표는 0.45에서 결정된다.

[0750] 실시예 4



[0751]

[0752] AAV1(수율 36%), 여기서 반응물 E1으로서 10,15-디하이드로-5H- 디인돌로[3,2-a:3',2'-c]카바졸 (CAS 109005-10-9)을 사용하고, 반응물 E2로서 아이오도벤젠(CAS 591-50-4)를 사용하였다.

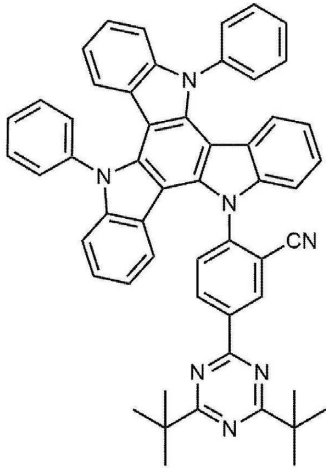
[0753] **AAV5**(수율 90%), 여기서 반응물 **E8**로서 3-시아노-4-플루오로페닐보론산 (CAS: 214210-21-6)을 사용하고 반응물 **E7**로서 4-클로로-2,6-디페닐피리미딘 (CAS: 29509-91-9)을 사용하였다.

[0754] **AAV3**(수율 33%).

[0755] MS(HPLC-MS), m/z(머무름 시간): 830(5.7분).

[0756] 실온(즉, 약 20° C)에서 실시예 4(PMMA 내 10 중량%)의 발광 스펙트럼은 522 nm에서 최대 발광(λ_{max})을 가진다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 59%이고, 20 μ s 측정 창에서 결정된 지연 형광 수명은 2.0 μ s이다. 결과의 CIE_x 좌표는 0.32에서, CIE_y 좌표는 0.53에서 결정된다.

[0757] **실시예 5**



[0758]

[0759] **AAV1**(수율 36%), 여기서 반응물 **E1**으로서 10,15-디하이드로-5H- 디인돌로[3,2-a:3',2'-c]카바졸 (CAS 109005-10-9)을 사용하고, 반응물 **E2**로서 아이오도벤젠(CAS 591-50-4)를 사용하였다.

[0760] **AAV4**(수율 62%), 여기서 반응물 **E5**으로서 염화시아누르 (CAS 108-77-0)를 사용하고, 반응물 **E6**로서 염화 tert-부틸마그네슘 (CAS 677-22-5)를 사용하였다.

[0761] **AAV5**(수율 95%), 여기서 반응물 **E8**로서 3-시아노-4-플루오로페닐보론산 (CAS: 214210-21-6)를 사용하고 반응물 **E7**로서 **AAV4**(62%)의 생성물을 사용하였다.

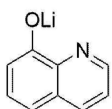
[0762] **AAV6**(수율 82%).

[0763] MS(HPLC-MS), m/z(머무름 시간): 791(6.5분).

[0764] 실온(즉, 약 20° C)에서 실시예 5(PMMA 내 10 중량%)의 발광 스펙트럼은 524 nm에서 최대 발광(λ_{max})을 가진다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 48%이고, 20 μ s 측정 창에서 결정된 지연 형광 수명은 1.4 μ s이다. 결과의 CIE_x 좌표는 0.34에서, CIE_y 좌표는 0.53에서 결정된다.

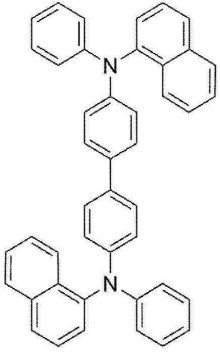
[0765] OLED 소자예

[0766] 스택 물질



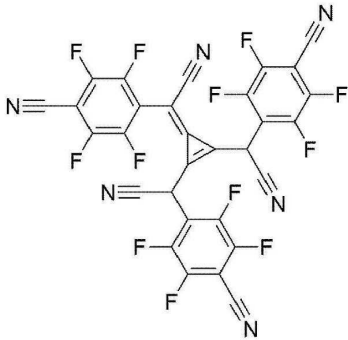
[0767]

[0768] Liq



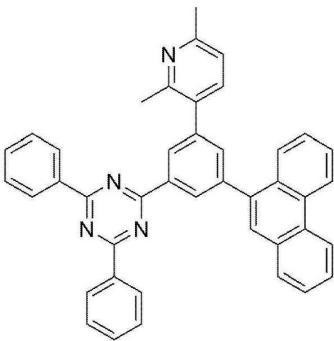
[0769]

[0770] NPB



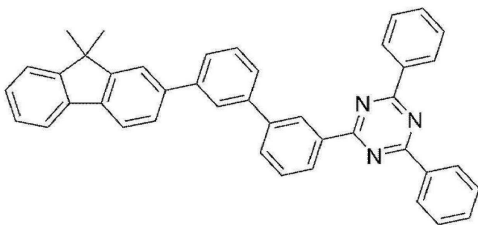
[0771]

[0772] NDP-9



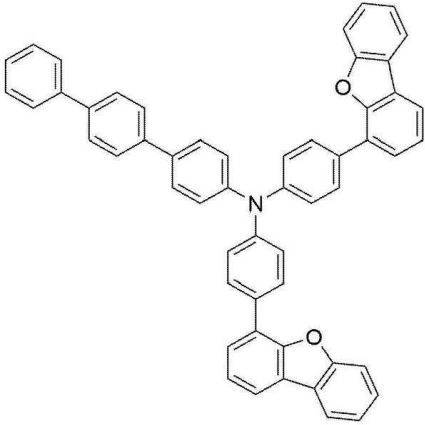
[0773]

[0774] ETM1(전자 수송 물질)



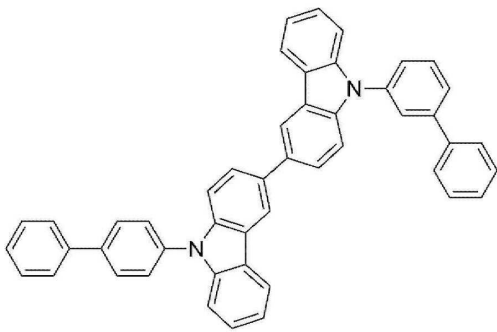
[0775]

[0776] ETM2(전자 수송 물질)



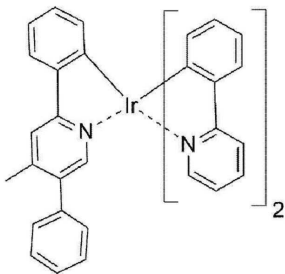
[0777]

[0778] EBM1(전자 차단 물질)



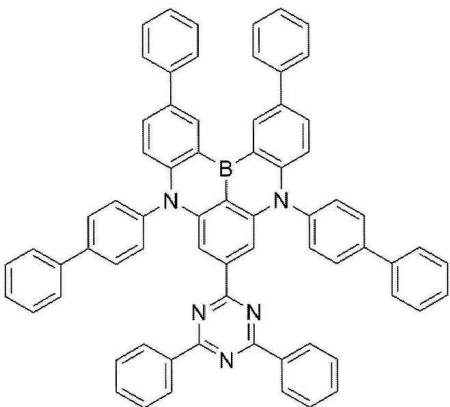
[0779]

[0780] Host1(호스트 물질)



[0781]

[0782] Phos1(인광 물질)



[0783]

[0784] Fluo1(형광 물질)

[0785] 실시예 4가 하기 층 구조에 따라 제조된 OLED D1 및 OLED D2에서 테스트되었다:

표 3

층 #	두께	D1	D2
9	100 nm	Al	Al
8	2 nm	Liq	Liq
7	20 nm	ETM1 (50%) : Liq (50%)	ETM1 (50%) : Liq (50%)
6	10 nm	ETM2	ETM2
5	50 nm	Host1 (70%) : 실시예 4 (30%)	Host1 (67%) : Phos1 (3%) : 실시예 4 (30%)
4	10 nm	EBM1	EBM1
3	60 nm	NPB	NPB
2	9 nm	NPB (95%) : NDP-9 (5%)	NPB (95%) : NDP-9 (5%)
1	50 nm	ITO	ITO
기판		유리	유리

[0786]

[0787]

OLED D1은 1000cd/m²에서 21.9%의 외부 양자 효율(EQE)을 냈다. 최대 발광은 4.0V에서 532 nm이고, 92nm의 FWHM를 가졌다. 해당 CIE_x 값은 0.351이고 CIE_y 값은 0.581이었다. 1200cd/m²에서의 상대적인 수명 LT97 값은 1.0시간이었다.

[0788]

OLED D2은 1000cd/m²에서 20.5%의 외부 양자 효율(EQE)을 냈다. 최대 발광은 4.9V에서 526 nm이고, 80nm의 FWHM를 가졌다. 해당 CIE_x 값은 0.349이고 CIE_y 값은 0.603이었다. 1200cd/m²에서의 상대적인 수명 LT97 값은 31.2시간이었다.

[0789]

실시예 4가 하기 층 구조에 따라 제조된 OLED D3에서 테스트되었다:

표 4

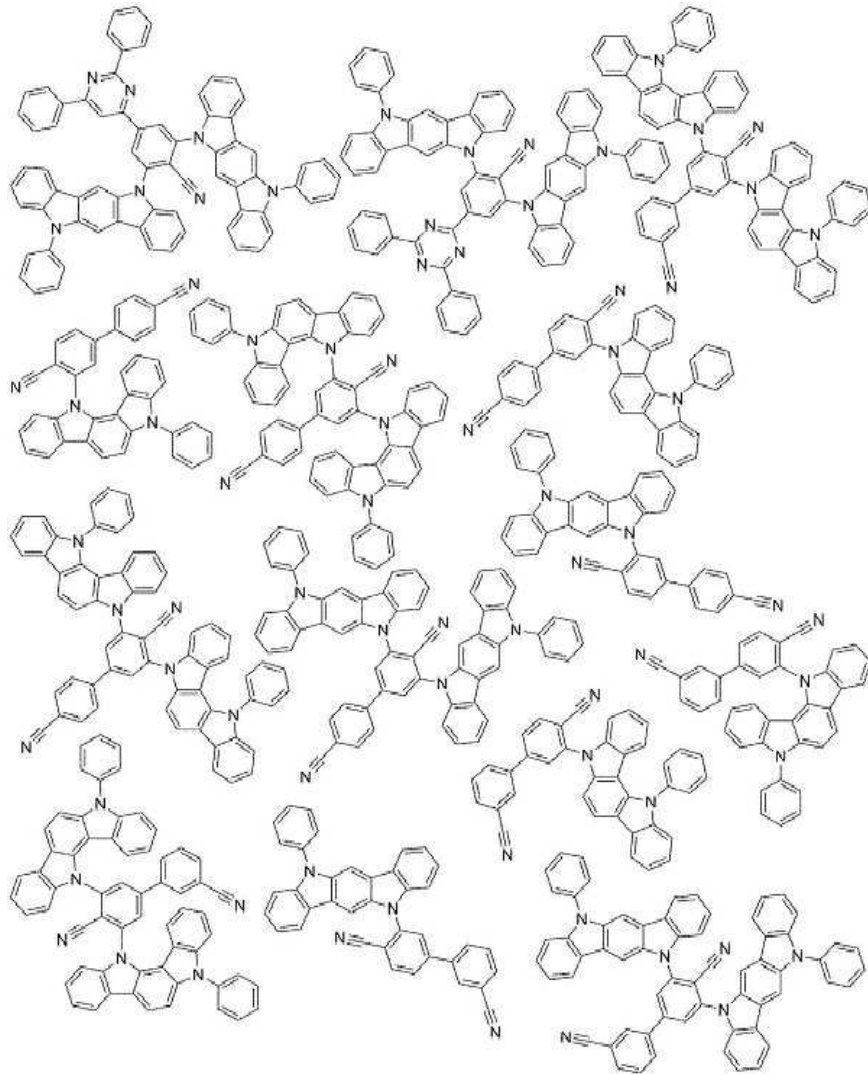
[0790]

층 #	두께	D3
9	100 nm	Al
8	2 nm	Liq
7	27 nm	ETM1 (50%) : Liq (50%)
6	5 nm	ETM2
5	60 nm	Host1 (66.3%) : Phos1 (3%) : 실시예 4 (30%) : Fluol (0.7%)
4	10 nm	EBM1
3	48 nm	NPB
2	9 nm	NPB (95%) : NDP-9 (5%)
1	50 nm	ITO
기판		유리

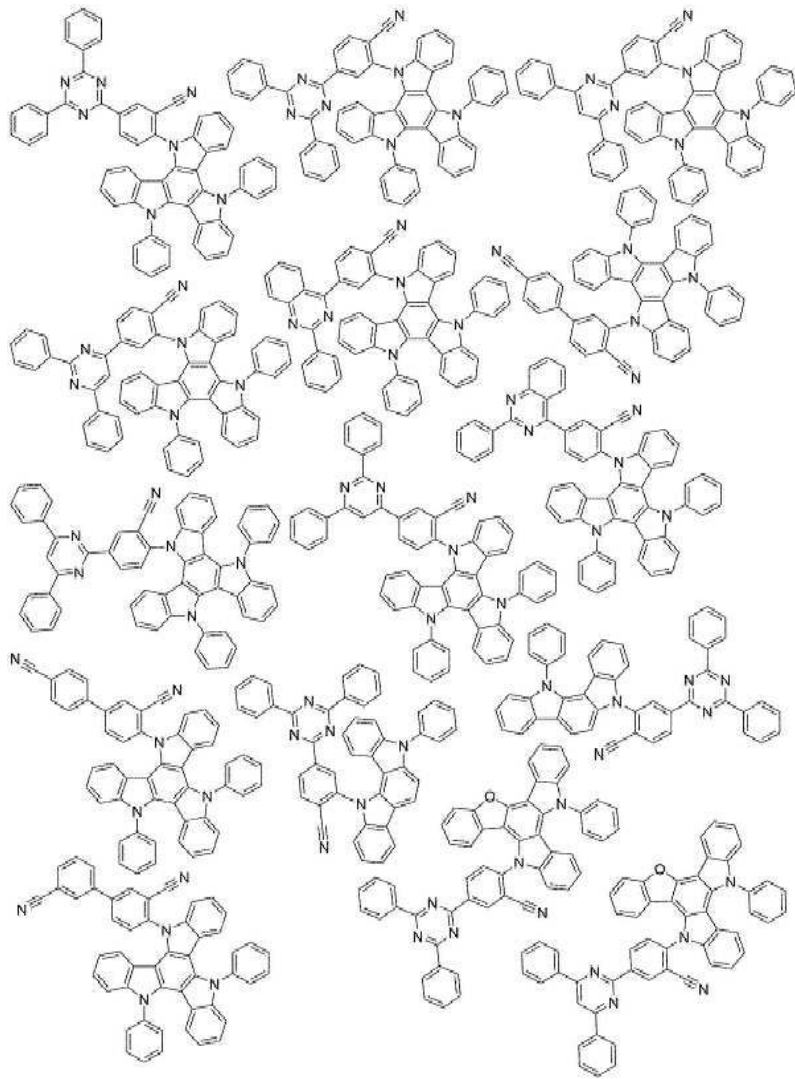
[0791]

OLED D3은 1000cd/m²에서 26.1%의 외부 양자 효율(EQE)을 냈다. 최대 발광은 4.9V에서 532 nm이고, 42nm의 FWHM를 가졌다. 해당 CIE_x 값은 0.323이고 CIE_y 값은 0.641이었다. 1200cd/m²에서의 상대적인 수명 LT97 값은 59.8시간이었다.

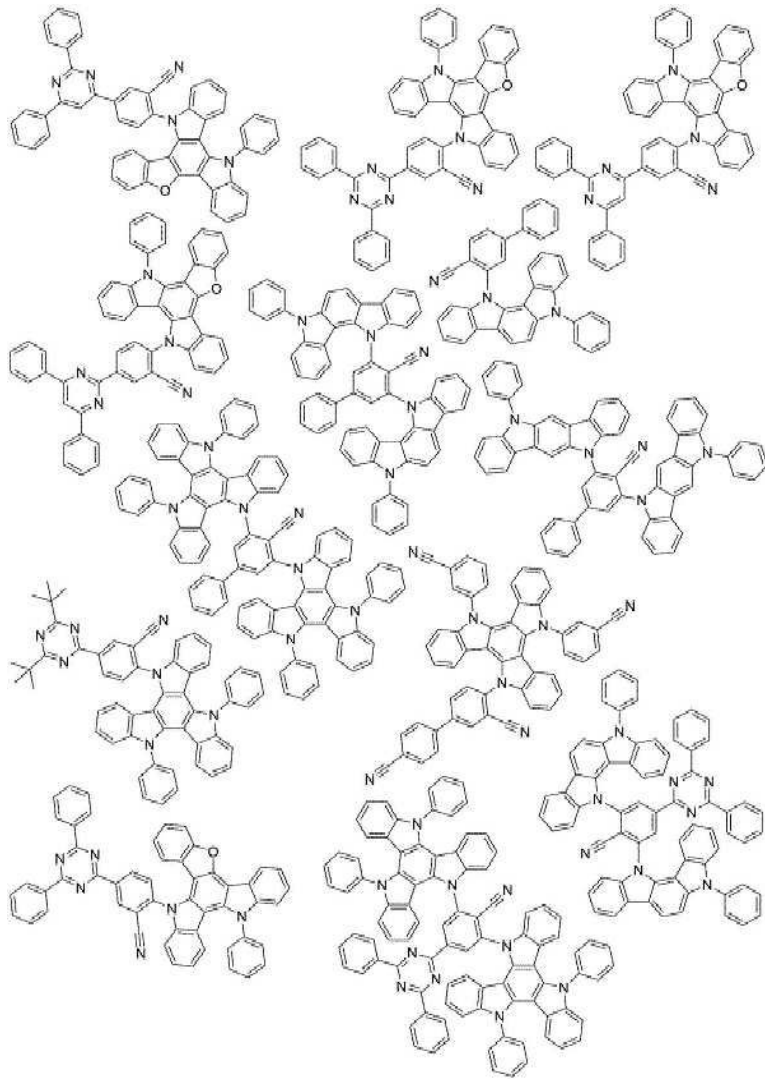
[0792] 본 발명의 유기 분자의 추가 예



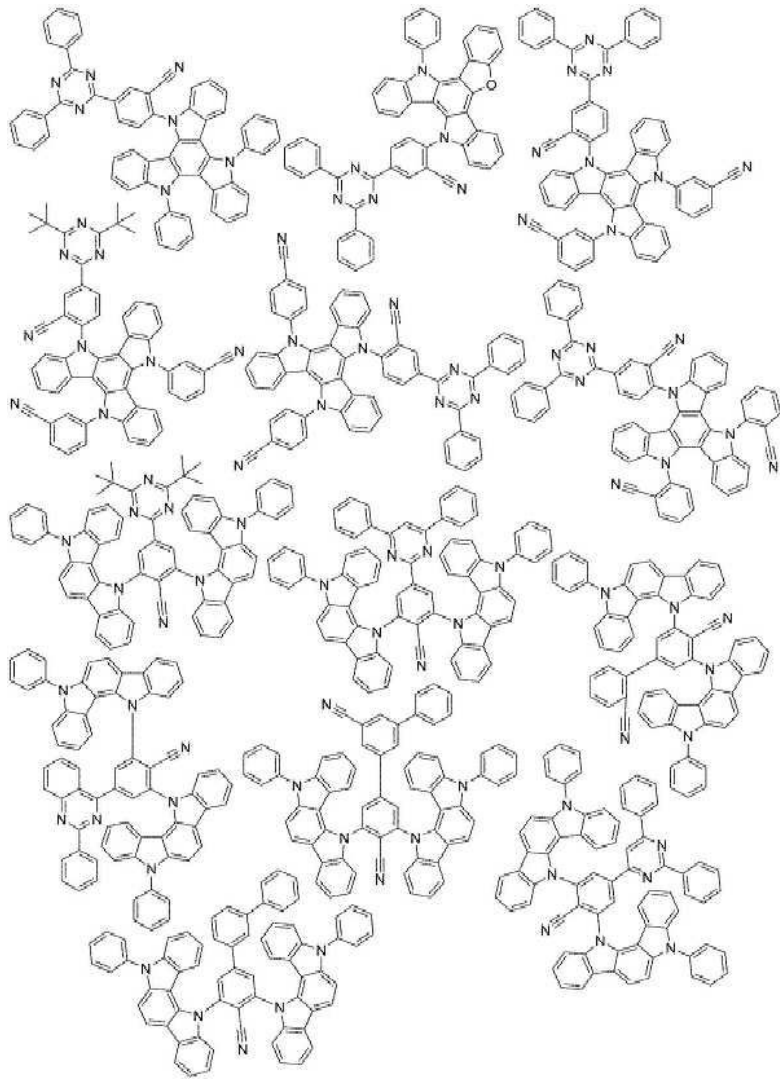
[0793]



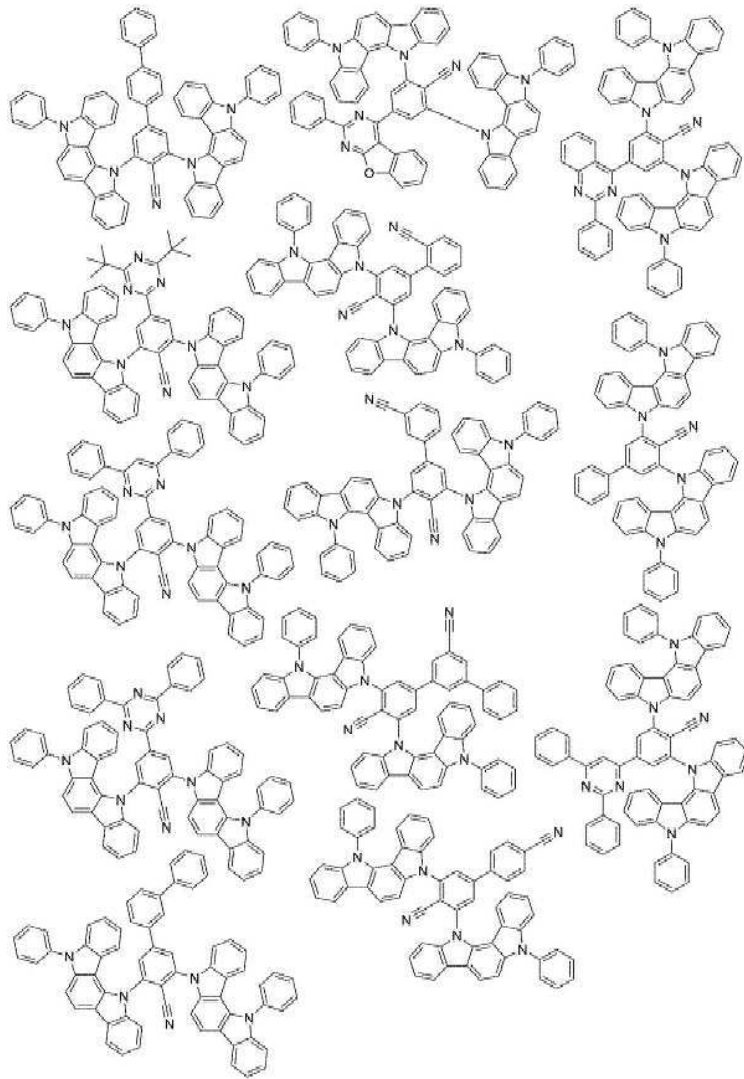
[0794]



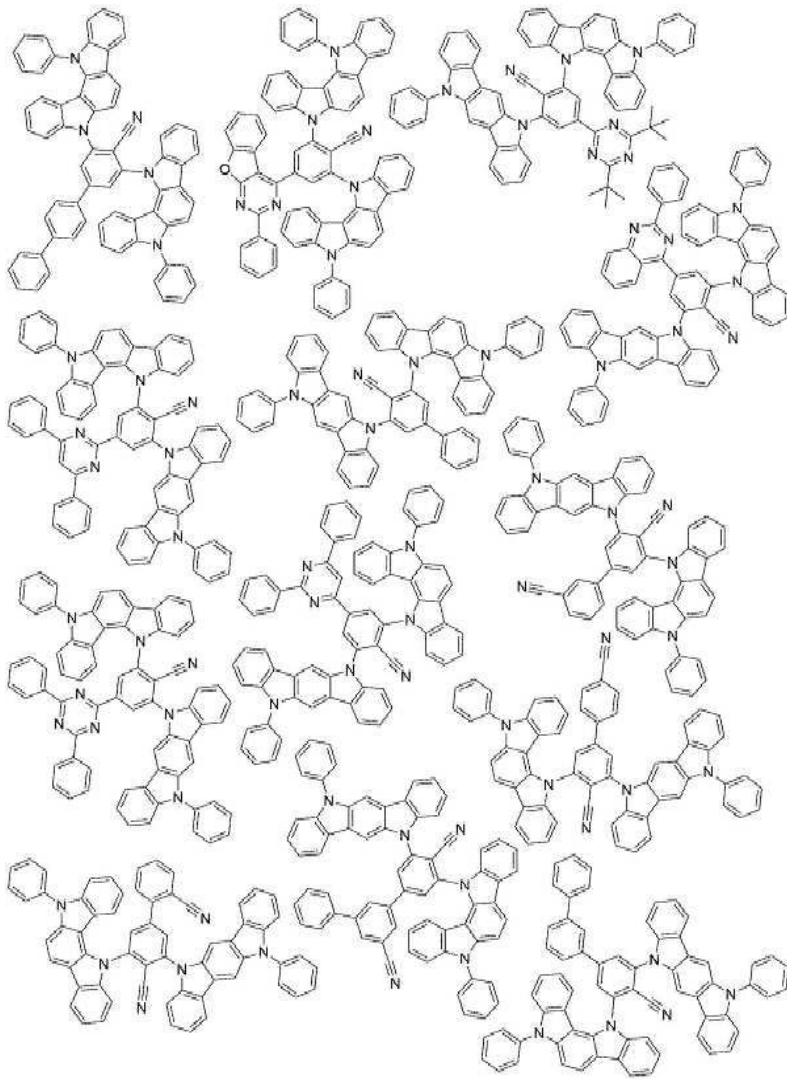
[0795]



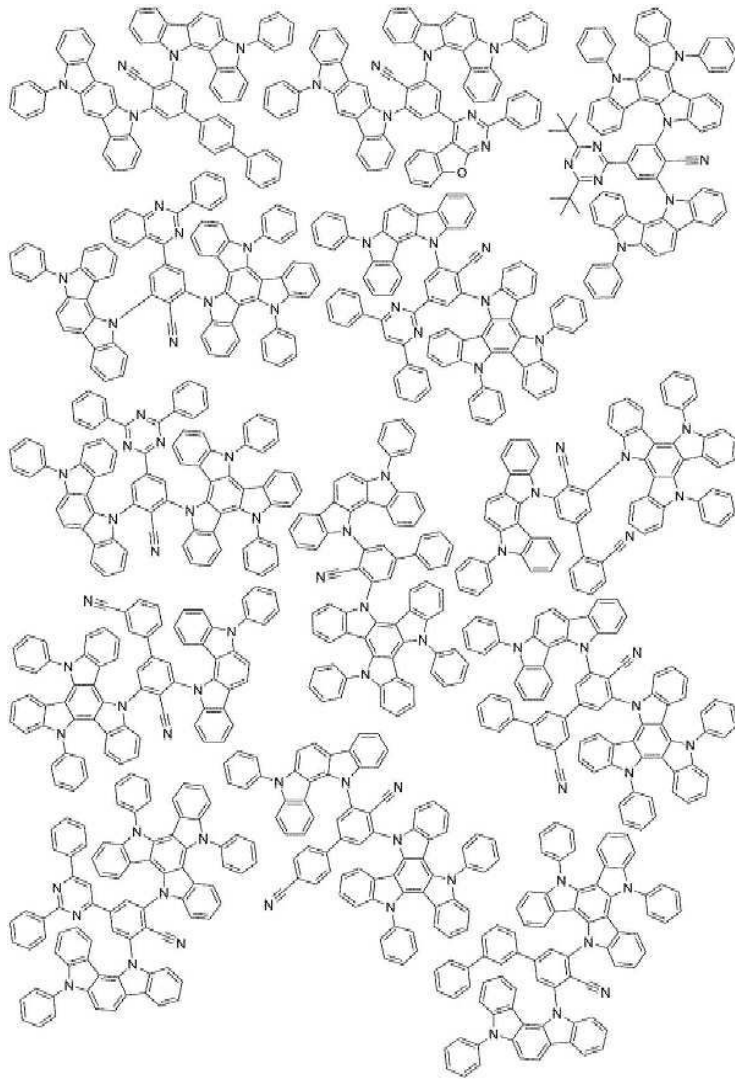
[0796]



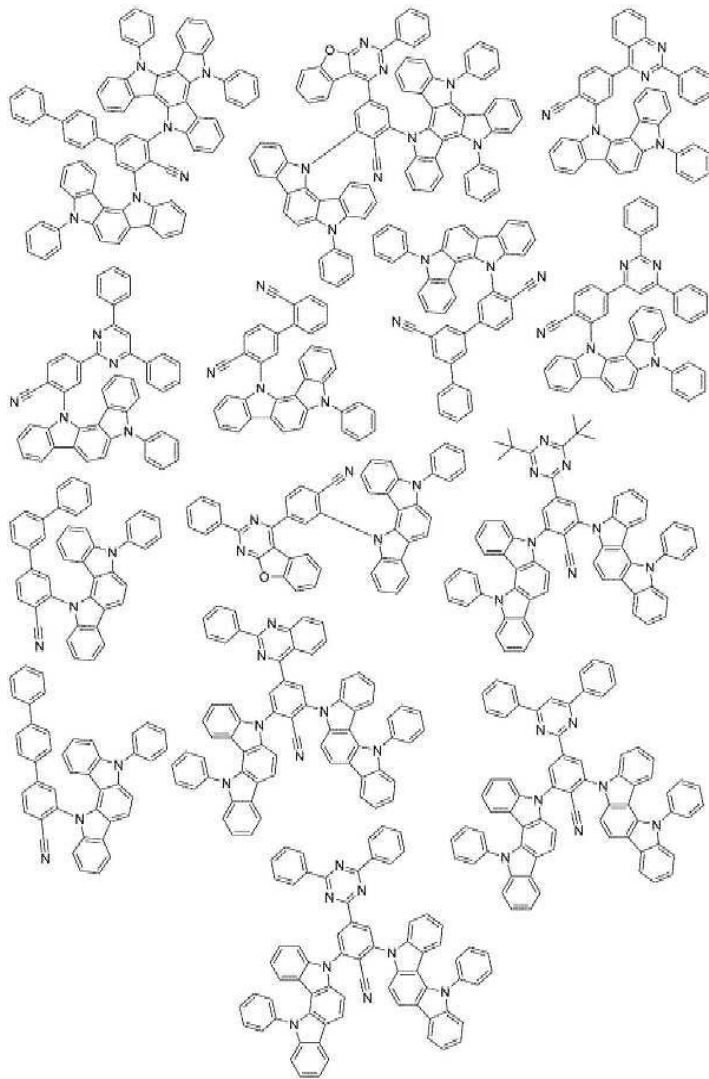
[0797]



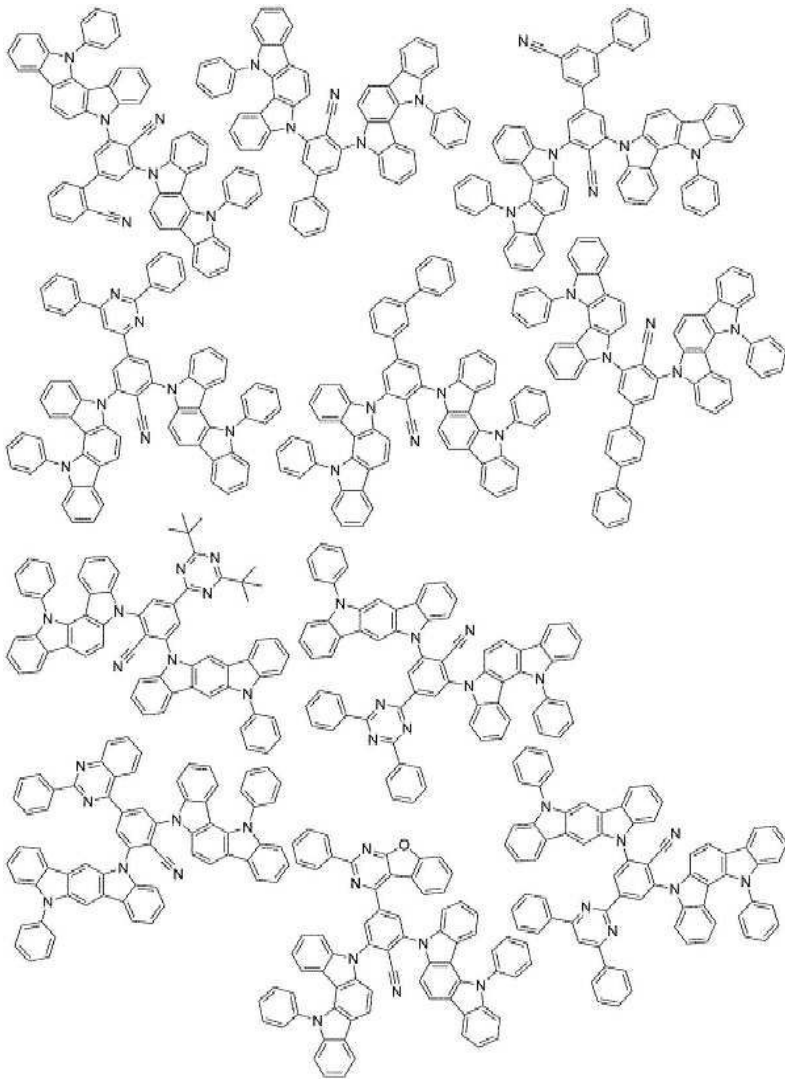
[0798]



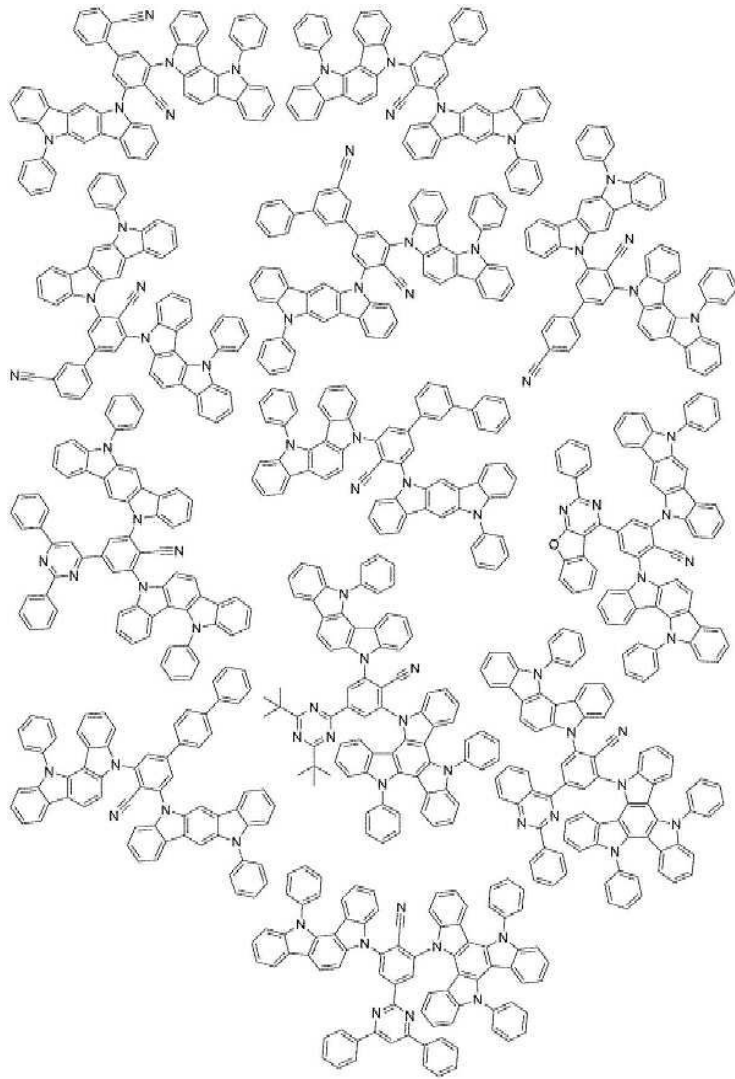
[0799]



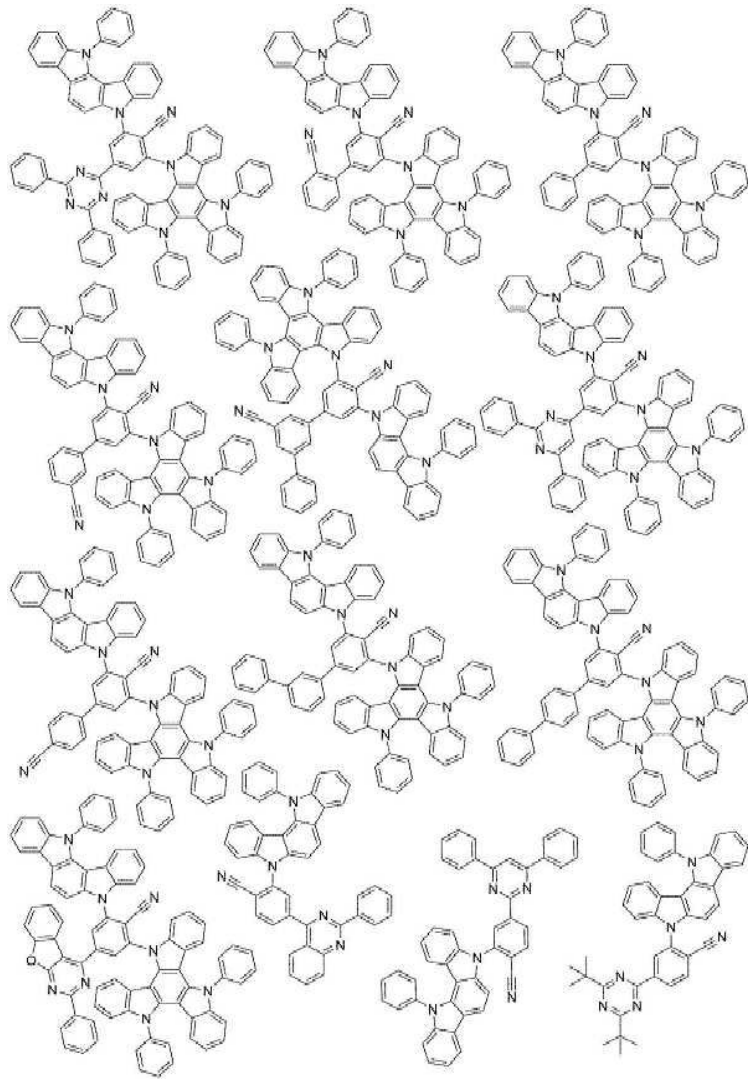
[0800]



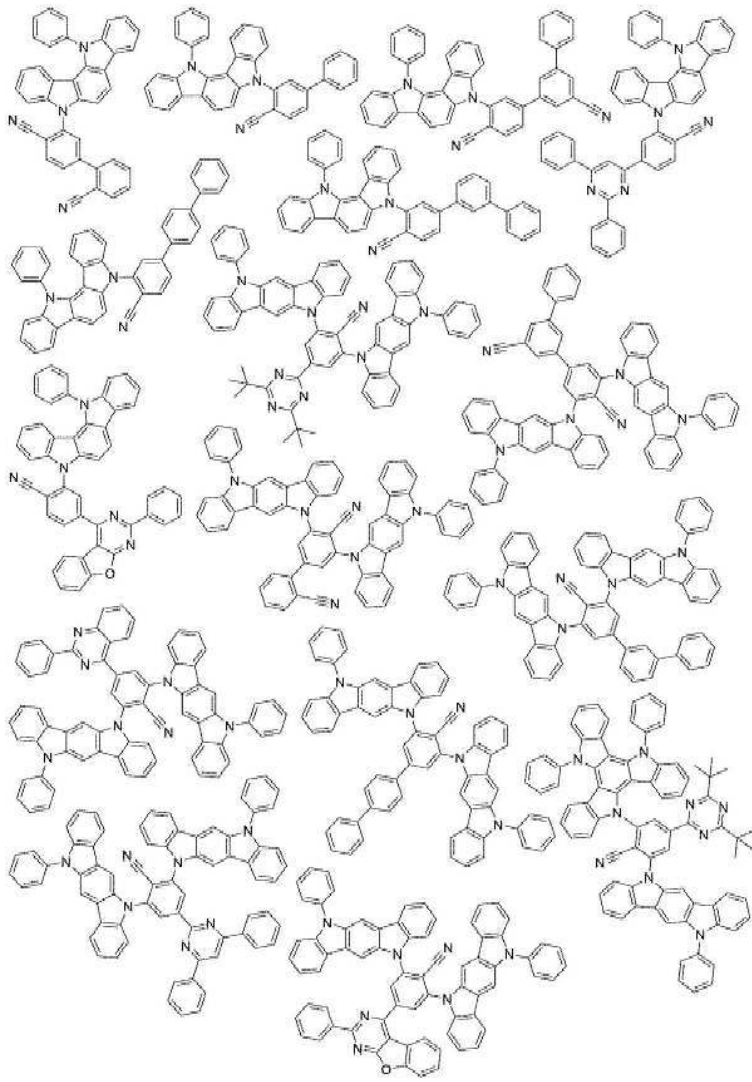
[0801]



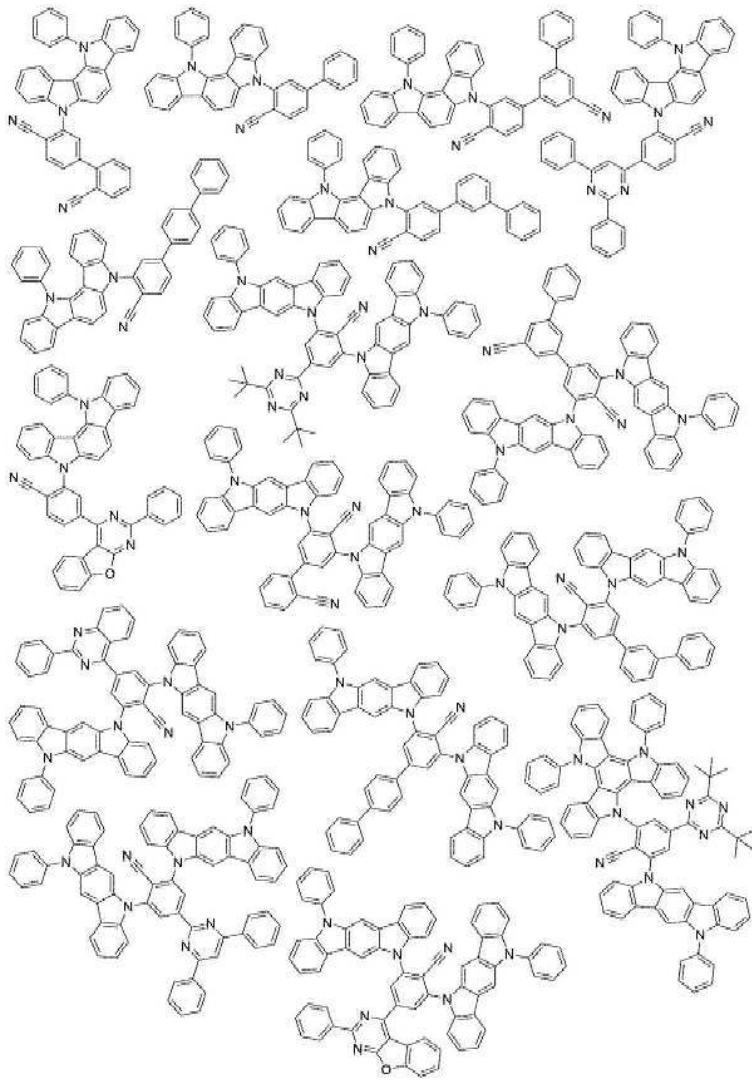
[0802]



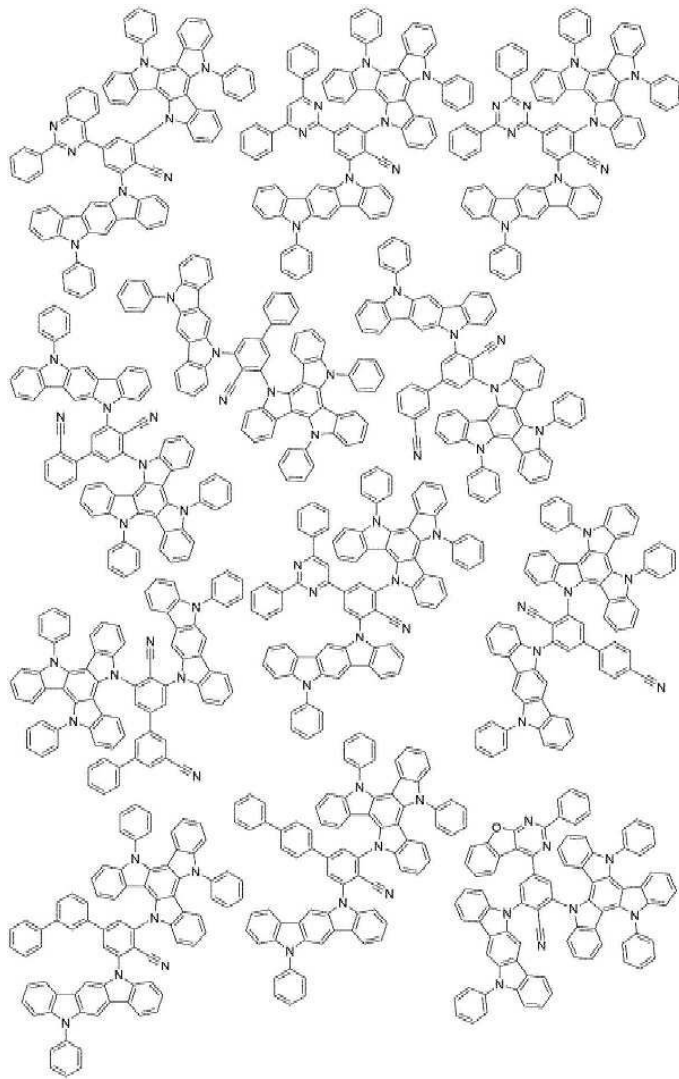
[0803]



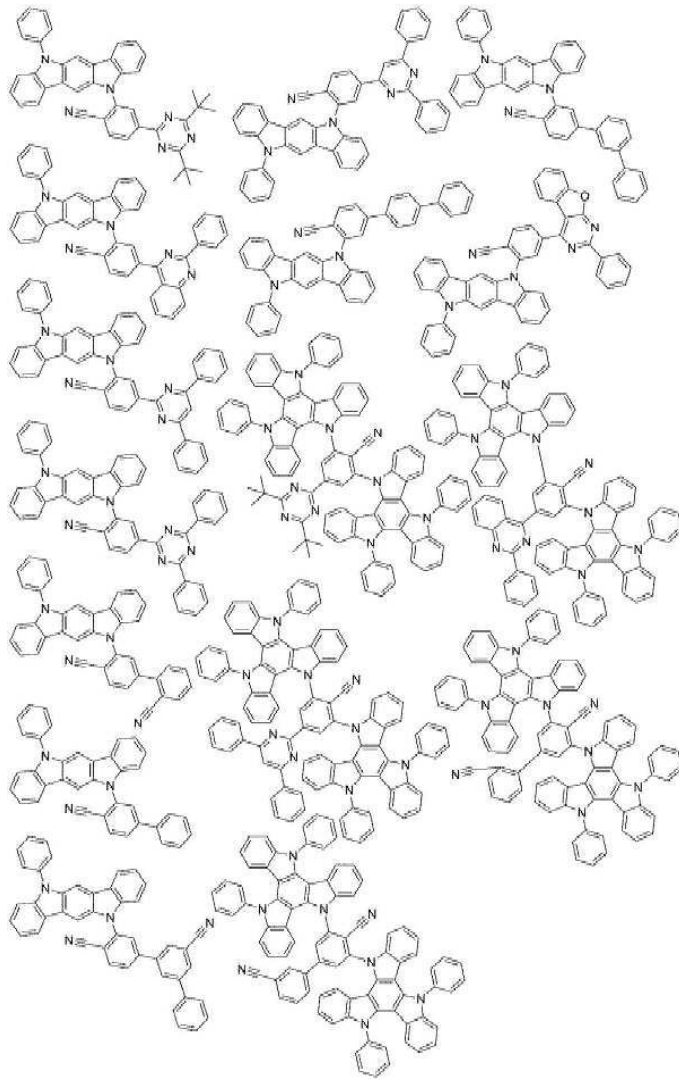
[0804]



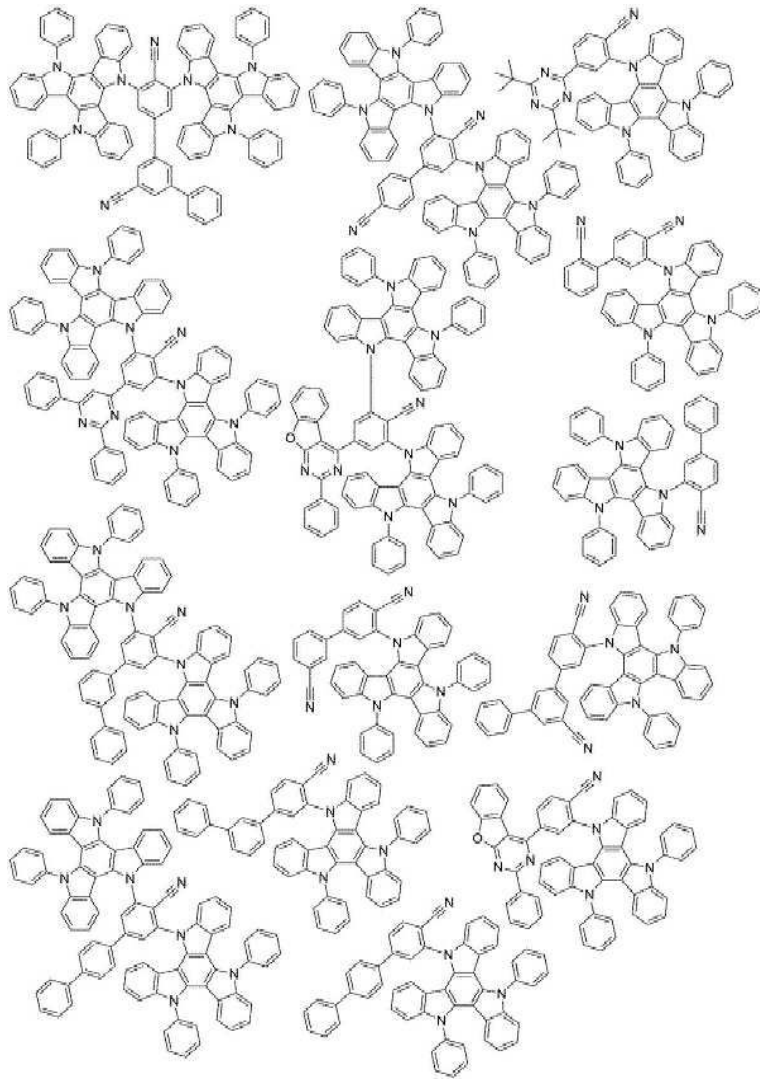
[0805]



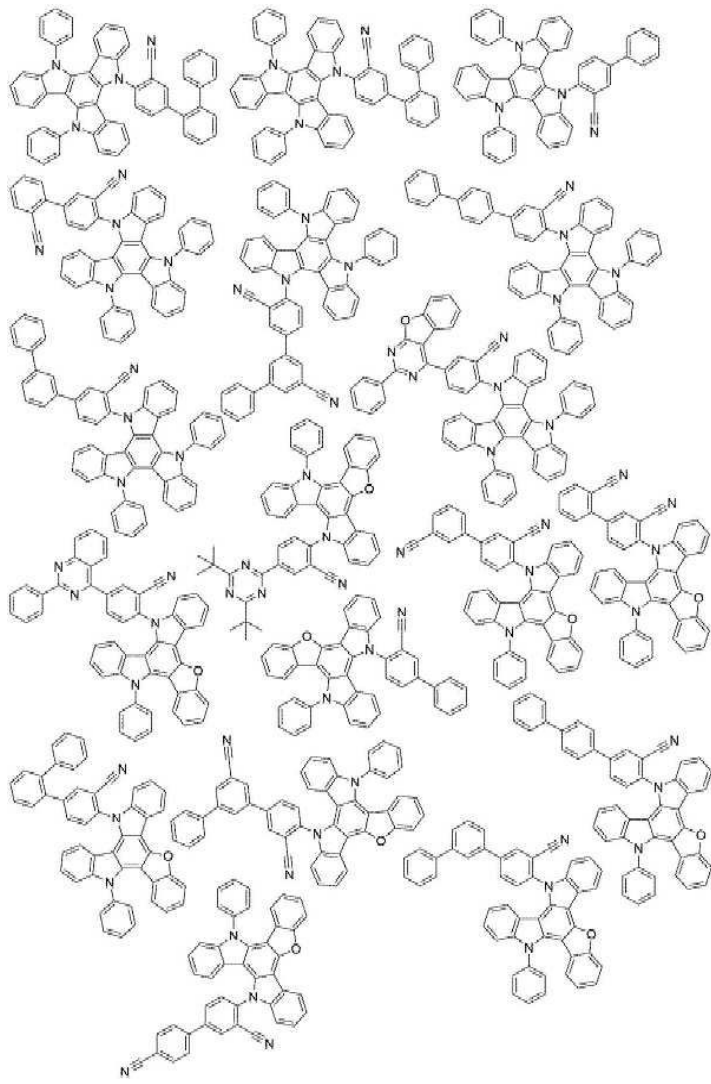
[0806]



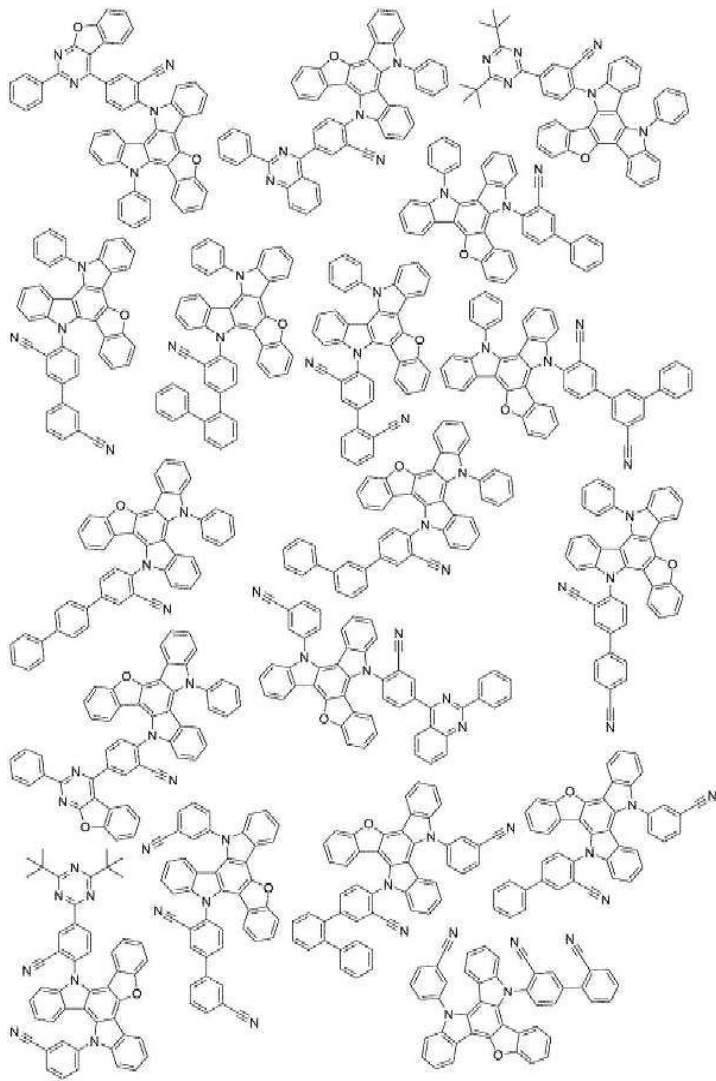
[0807]



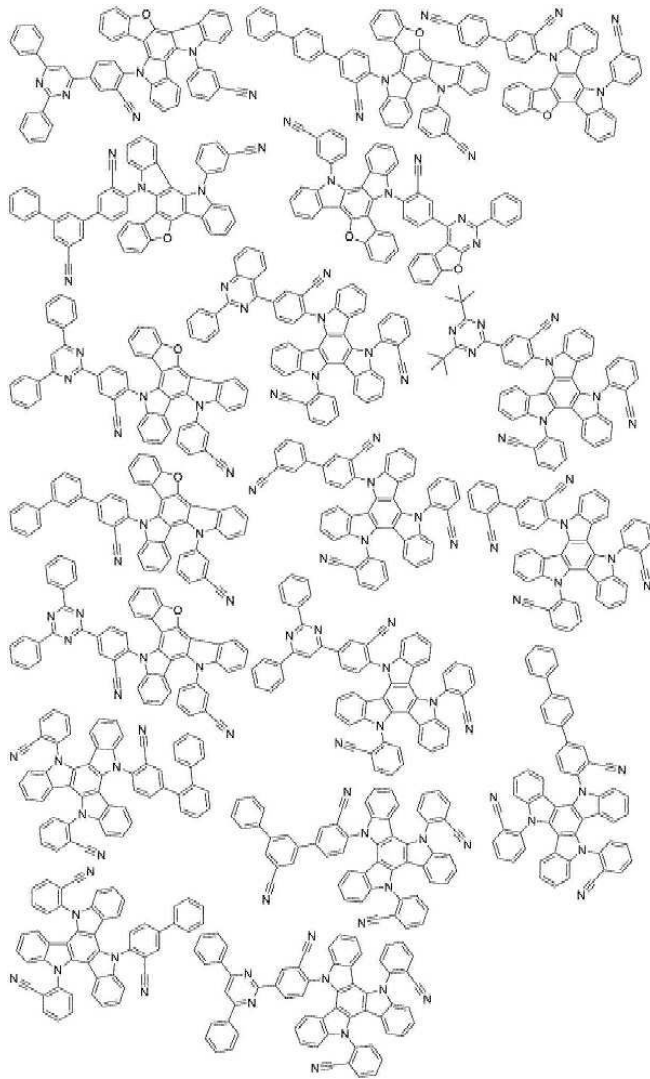
[0808]



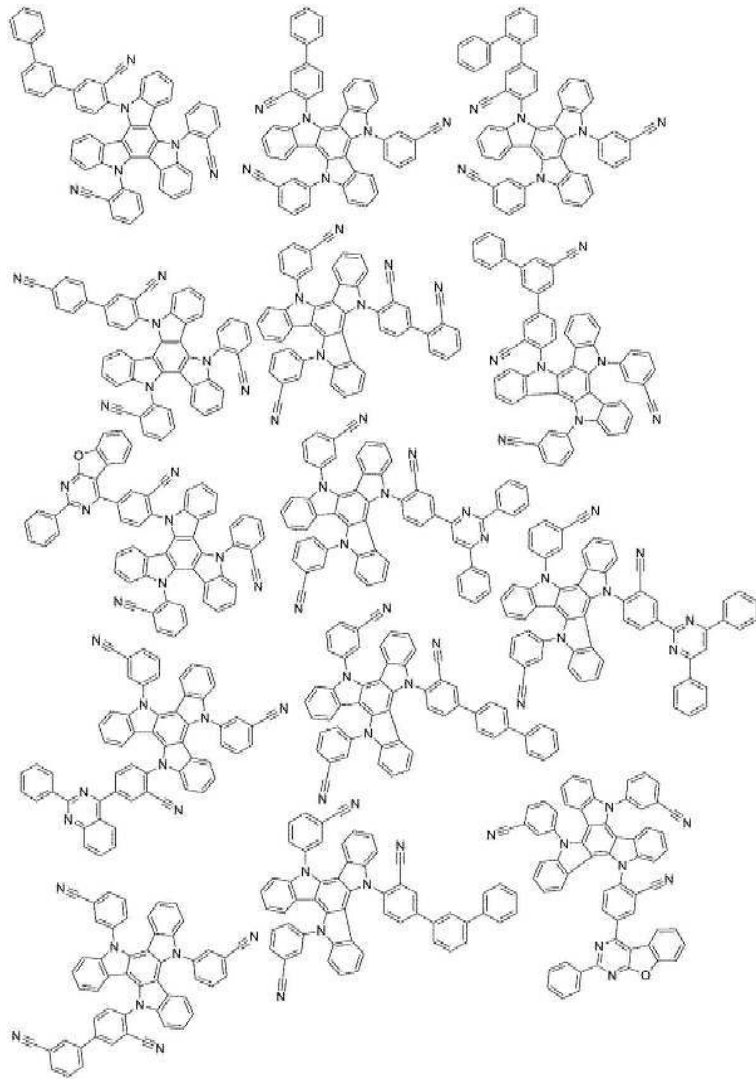
[0809]



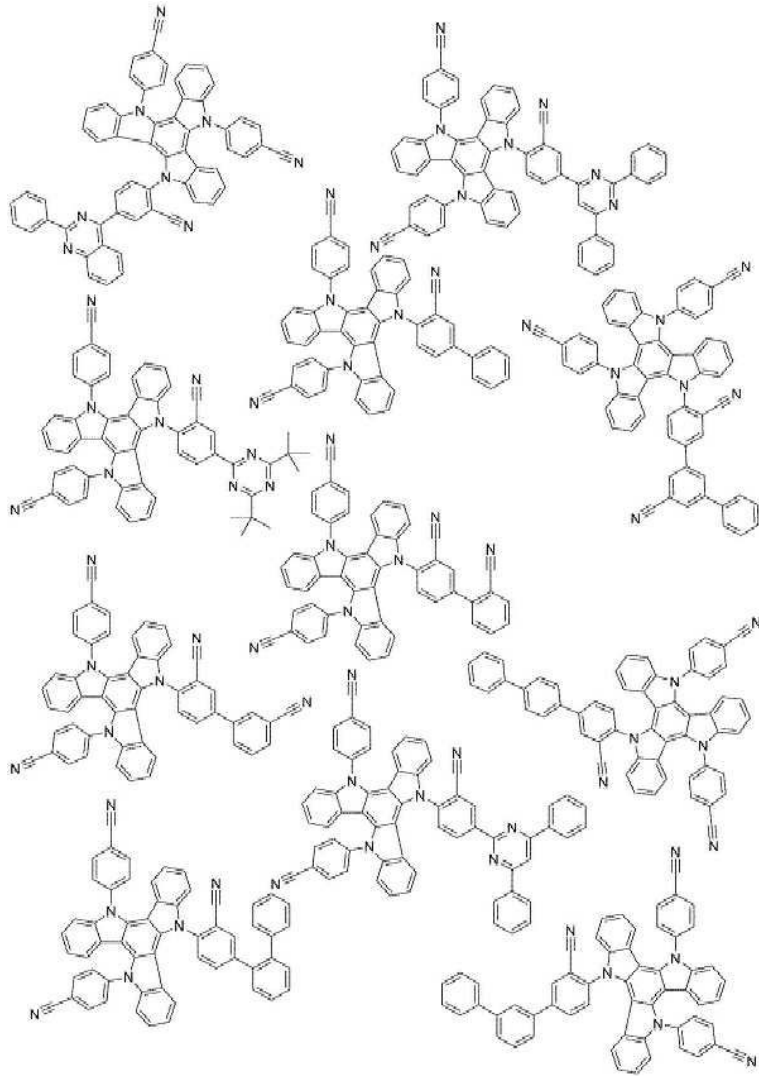
[0810]



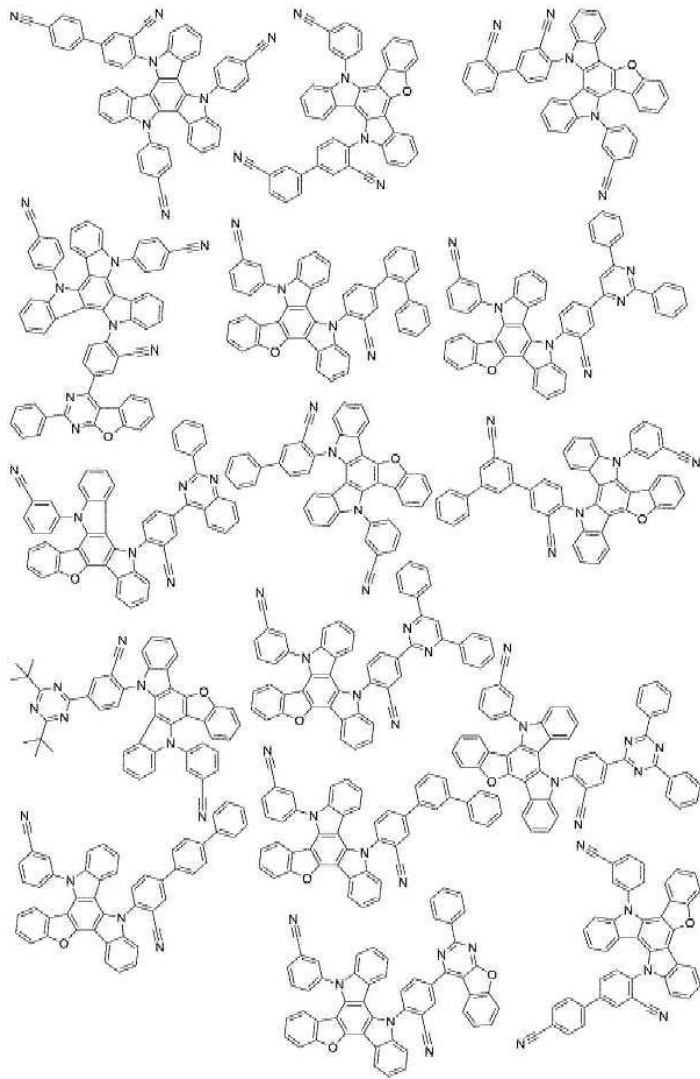
[0811]



[0812]



[0813]



[0814]