



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0145454
(43) 공개일자 2024년10월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H10K 85/60 (2023.01) C09K 11/06 (2006.01)
H10K 101/10 (2023.01) H10K 50/11 (2023.01)
(52) CPC특허분류
H10K 85/658 (2023.02)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2024-7016542
(22) 출원일자(국제) 2022년12월26일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2024년05월17일
(86) 국제출원번호 PCT/KR2022/021329
(87) 국제공개번호 WO 2023/149661
국제공개일자 2023년08월10일
(30) 우선권주장
22154985.0 2022년02월03일
유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
덕 세바스티앙
독일 하이델베르크 69115 파펜그룬더 테라세 1
왕 치앙 마이크
독일 바인가르텐(바텐) 76356 뮐베르거스트라세 4
(뮐면에 계속)
(74) 대리인
리앤목특허법인

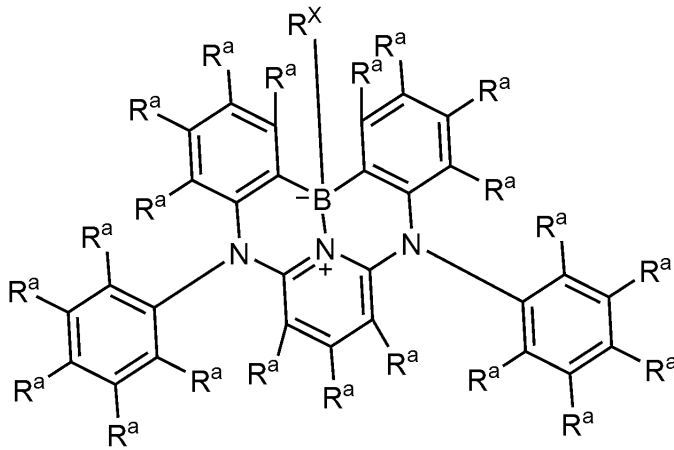
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 광전자 소자

(57) 요약

본 발명은 하기를 포함하는 발광층을 포함하는 광전자 소자에 관한 것이다:

- (i) 호스트 물질, 및
- (ii) 하기 화학식 I의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 I,

여기서

R^x는 할로겐 그룹; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알킬닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭 그룹; 또는 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

화학식 I 중 R^a에 대한 상세한 설명은 발명의 상세한 설명에 설명된 바와 동일하다.

(52) CPC특허분류

H10K 50/11 (2023.02)

H10K 85/615 (2023.02)

H10K 85/626 (2023.02)

H10K 85/6574 (2023.02)

H10K 2101/10 (2023.02)

(72) 발명자

벨라이야프판, 에이런 판디안

독일 부록살 76646 배드스트라세 20

브로제, 유진

독일 핀츠탈 76327 카르스루에 스트라세 81

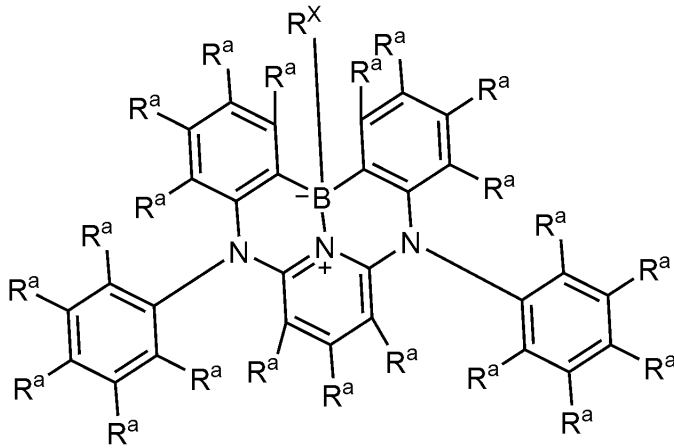
명세서

청구범위

청구항 1

하기를 포함하는 발광층을 포함하는, 광전자 소자:

- (i) 호스트 물질, 및
- (ii) 하기 화학식 I의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 I

여기서

R^X 는 할로젠 그룹; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알킬닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭 그룹; 또는 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리기;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

R^a 는 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, $N(R^5)_2$, OR^5 , $Si(R^5)_3$, $B(OR^5)_2$, $B(R^5)_2$, OSO_2R^5 , CF_3 , CN , F , Br , I ,

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_1 - C_{40} -알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_1 - C_{40} -알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_1 - C_{40} -티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2 - C_{40} -알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에

의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2-C_{40} -알킬닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_6-C_{60} -아릴기, 및

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2-C_{57} -헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

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

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1-C_{40} -알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1-C_{40} -알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1-C_{40} -티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2-C_{40} -알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2-C_{40} -알킬닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_6-C_{60} -아릴기, 및

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2-C_{57} -헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

R^6 은 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, OPh , CF_3 , CN , F ,

선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1-C_5 -알킬기,

선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1-C_5 -알콕시기,

선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1-C_5 -티오알콕시기,

선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_2-C_5 -알케닐기,

선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되는 C₂-C₅-알킬닐기,

선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환되는 C₆-C₁₈-아릴기,

선택적으로 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 치환되는 C₂-C₁₇-헤테로아릴기,

N(C₆-C₁₈-아릴기)₂,

N(C₂-C₁₇-헤테로아릴기)₂, 및

N(C₂-C₁₇-헤테로아릴기)(C₆-C₁₈-아릴기)로 이루어진 군으로부터 선택되고,

여기서 선택적으로 임의의 치환기 R^a, R⁵, 및 R⁶은 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a, R⁵, 및/또는 R⁶와 함께 단환(monocyclic) 또는 다환(polycyclic), 지방족(aliphatic), 방향족(aromatic), 헤테로방향족(heteroaromatic) 및/또는 벤조-융합된(benzo-fused) 고리 시스템을 형성한다.

청구항 2

제1항에 있어서, R^x는

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃,

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

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환된 피리디닐기로 이루어진 군으로부터 선택되는, 광전자 소자.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

R^a는 각각의 경우에 독립적으로,

수소,

중수소,

Me,

ⁱPr,

^tBu,

CN,

CF₃,

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

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

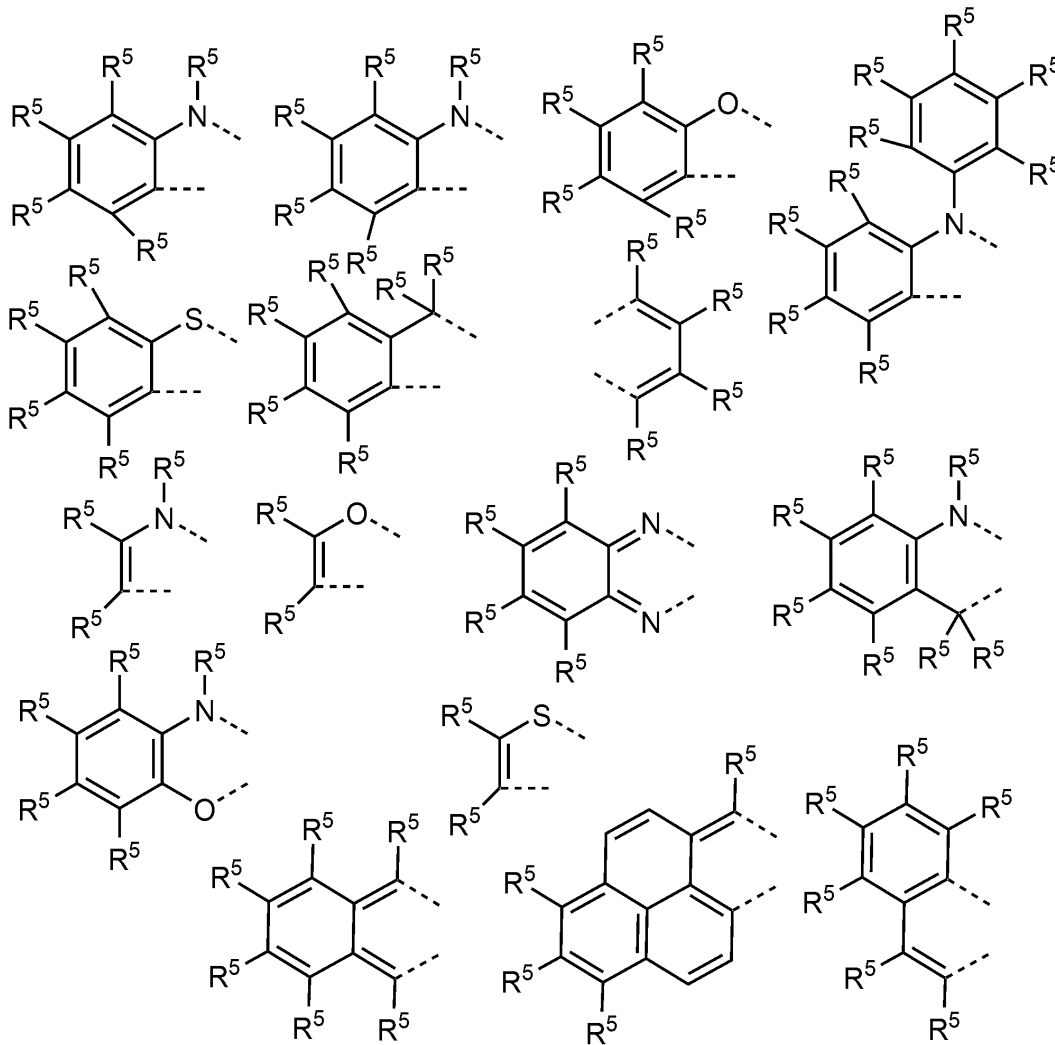
Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐기,

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂로 이루어진 군으로부터 선택되고,

여기서 선택적으로, 둘 이상의 인접한 치환기 R^a는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템에 대한 부착 지점을 형성하고:



여기서 각각의 파선은 위에 나타낸 군의 고리 시스템이 화학식 I에 나타낸 구조에 융합되도록, 위에 나타낸 고리 시스템 중 하나를 두 개의 인접한 치환기 R^a 위치로 연결하는 직접 결합을 나타내는, 광전자 소자.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로,

수소, 중수소, Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃,

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

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐기,

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

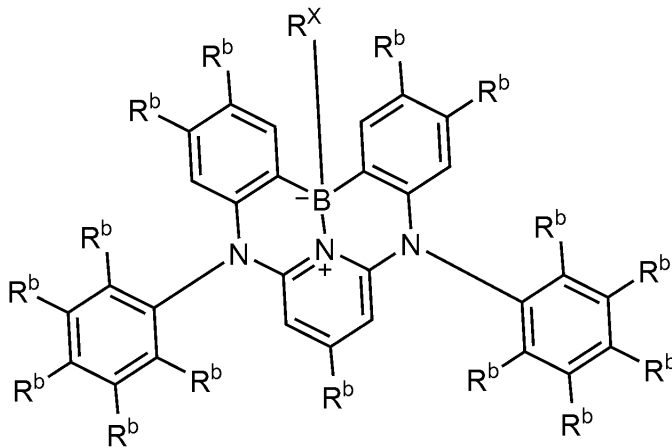
Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

N(Ph)₂로 이루어진 군으로부터 선택되는, 광전자 소자.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 유기 분자는 하기 화학식 II의 구조를 포함하는, 광전자 소자:



화학식 II,

여기서 R^b는 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, N(R⁵)₂, OR⁵, Si(R⁵)₃, B(OR⁵)₂, OSO₂R⁵, CF₃, CN, F, Br, I,

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적

으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2-C_{40} -알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2-C_{40} -알킬닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의하여 치환되고;

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_6-C_{60} -아릴기, 및

선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2-C_{57} -헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 6

제5항에 있어서, R^b 는 각각의 경우에 독립적으로,

수소, 중수소,

Me , iPr , tBu , CN , CF_3 ,

Me , iPr , tBu , CN , CF_3 , 및 Ph 로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph ,

Me , iPr , tBu , CN , CF_3 , 및 Ph 로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

Me , iPr , tBu , CN , CF_3 , 및 Ph 로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

Me , iPr , tBu , CN , CF_3 , 및 Ph 로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

$N(Ph)_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택되는, 광전자 소자.

청구항 7

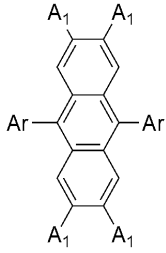
제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, 0.1 내지 30중량%, 또는 0.8 내지 15중량%, 특히 1.5 내지 5중량%의 상기 유기 분자를 포함하는, 광전자 소자.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 유기 분자는 440 nm 내지 470 nm의 최대 발광을 갖는, 광전자 소자.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트 물질은 하기 화학식 4의 구조를 포함하는, 광전자 소자:



화학식 4

여기서

각각의 Ar은 독립적으로,

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴기; 및

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴기;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

각각의 A₁은 독립적으로,

수소;

중수소;

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴기;

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴기; 및

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기;로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 10

제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 발광층은 TADF 물질 및 인광 물질로 이루어진 군으로부터 선택된 물질을 포함하는, 광전자 소자.

청구항 11

제10항에 있어서, 상기 호스트 물질은 p-호스트 물질인, 광전자 소자.

청구항 12

제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 광전자 소자는

- 유기 소자, 특히 유기 발광 소자(OLED)
- 발광 전기화학 전지,
- OLED-센서,
- 유기 태양 전지,
- 유기 트랜지스터, 특히 유기 전계 효과 트랜지스터,
- 유기 레이저, 및

· 하향-변환 소자(down-conversion element)
 로 이루어진 군으로부터 선택되는, 광전자 소자.

청구항 13

제1항 내지 제12항 중 어느 한 항에 있어서,

- 기관,
- 애노드, 및
- 캐소드, 여기서 상기 애노드 또는 상기 캐소드는 상기 기관 상에 배치되고, 및
- 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 배치되는 발광층을 포함하는, 광전자 소자.

청구항 14

- (i) 제1항 내지 제13항 중 어느 한 항에 따른 광전자 소자를 제공하는 단계; 및
- (ii) 상기 광전자 소자에 전류를 인가하는 단계를 포함하는, 440 nm 내지 470 nm의 파장을 갖는 광을 생성하는 방법.

청구항 15

제1항 내지 제13항 중 어느 한 항에 있어서,

- (i) 호스트 물질, 및
- (ii) 화학식의 구조를 포함하는 유기 분자를 포함하는, 발광층을 제공하는 단계를 포함하는, 광전자 소자를 생성하는 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 발광 소자(OLED)와 같은 광전자 소자에 관한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0002] 본 발명의 목적은 광전자 소자에 전류가 인가될 때 가시(visible) 스펙트럼 영역에서 광을 방출하는 광전자 소자를 제공하는 것이다.

[0003] 현재 광전자 소자는 색점, 수명, 또는 효율과 같은 중요한 파라미터 중 하나가 여전히 부족하다.

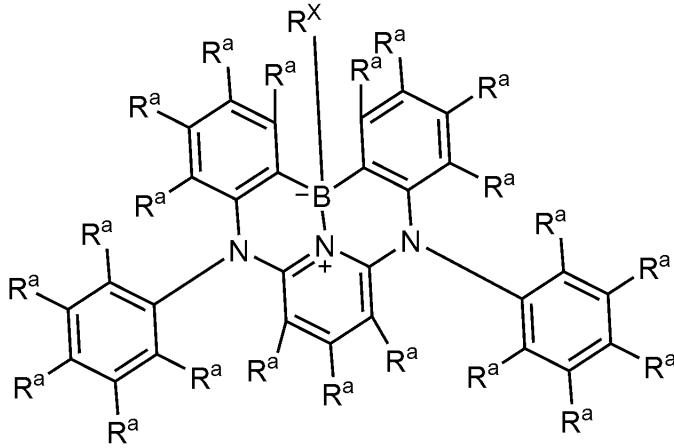
[0004] 이러한 목적은 광전자 소자의 발광층을 위한 신규한 물질 조합, 즉 호스트 물질 H^B 및 광을 방출하는 유기 분자 S^B의 조합을 제공하는 본 발명에 의해 달성된다. 유기 분자 S^B는 4배위된(tetra-coordinated) 보론 원자를 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0005] 본 발명에 따르면, 광전자 소자는 청색 또는 하늘색 스펙트럼 범위에서 최대 발광을 나타낸다. 광전자 소자는 특히 420 nm 내지 520 nm, 바람직하게는 440 nm 내지 495 nm, 더욱 바람직하게는 450 nm 내지 470 nm에서 최대 발광을 나타낸다. 본 발명에 따른 광전자 소자, 예를 들면 유기 발광 소자 (OLED)의 발광층 내 에미터 물질로서 유기 분자의 사용은 상기 소자의 더 높은 효율 또는 발광 반치폭 (full width at half maximum; FWHM)으로 표현되는 더 높은 색순도를 가져온다. 해당 OLED는 알려진 에미터 물질과 유사한 색상을 가진 OLED 보다 더 높은 안정성을 가진다. 호스트 물질, 특히 삼중항-삼중항 소멸(triplet-triplet annihilation) 호스트 물질과 함께 본 발명의 유기 분자를 포함하는 발광층을 갖는 OLED는 높은 안정성을 갖는다.

[0006] 광전자 소자는 하기를 포함하는 발광층 B를 포함한다:

[0007] (i) 호스트 물질 H^B, 및

[0008] (ii) 하기 화학식 I의 구조를 포함하는 발광 유기 분자 S^B:



[0009]

[0010] 화학식 I

[0011] 여기서

[0012] R^X는 할로젠 그룹; 시아노기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알킬닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭 그룹; 또는 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리기;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0013] R^a는 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, N(R⁵)₂, OR⁵, Si(R⁵)₃, B(OR⁵)₂, B(R⁵)₂, OSO₂R⁵, CF₃, CN, F, Br, I,

[0014] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0015] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0016] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0017] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₂-C₄₀-알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

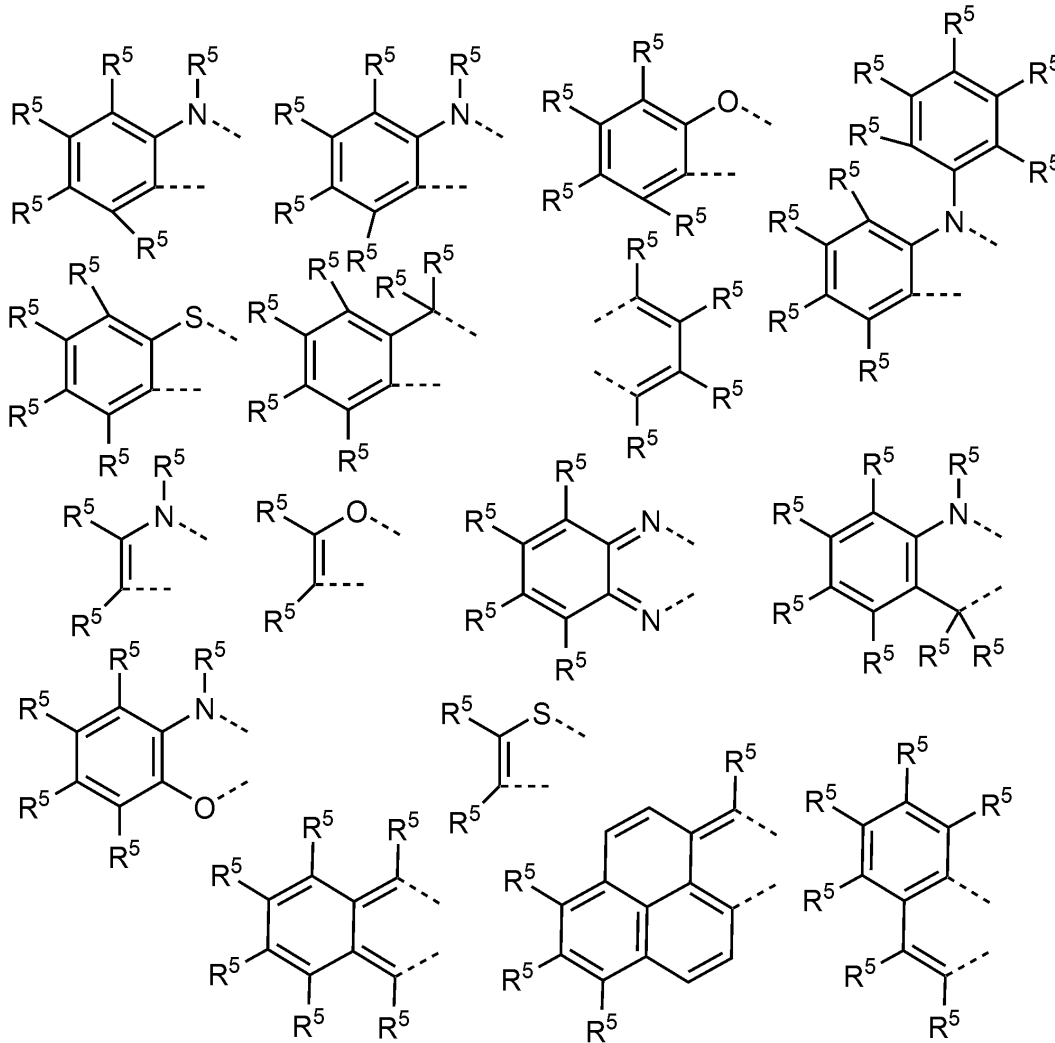
[0018] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₂-C₄₀-알킬닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0019] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₆-C₆₀-아릴기, 및

- [0020] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^5 로 치환되는 C_2 - C_{57} -헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0021] R^5 는 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, $N(R^6)_2$, OR^6 , $Si(R^6)_3$, $B(OR^6)_2$, $B(R^6)_2$, OSO_2R^6 , CF_3 , CN , F , Br , I ,
- [0022] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1 - C_{40} -알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;
- [0023] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1 - C_{40} -알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;
- [0024] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_1 - C_{40} -티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;
- [0025] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2 - C_{40} -알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;
- [0026] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2 - C_{40} -알키닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 -기는 선택적으로 $R^6C=CR^6$, $C\equiv C$, $Si(R^6)_2$, $Ge(R^6)_2$, $Sn(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^6$, $P(=O)(R^6)$, SO , SO_2 , NR^6 , O , S 또는 $CONR^6$ 에 의하여 치환되고;
- [0027] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_6 - C_{60} -아릴기, 및
- [0028] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R^6 으로 치환되는 C_2 - C_{57} -헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0029] R^6 은 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, OPh (Ph = 페닐기), CF_3 , CN , F ,
- [0030] 선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1 - C_5 -알킬기,
- [0031] 선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1 - C_5 -알콕시기,
- [0032] 선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_1 - C_5 -티오알콕시기,
- [0033] 선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_2 - C_5 -알케닐기,
- [0034] 선택적으로 하나 이상의 수소 원자가 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되는 C_2 - C_5 -알키닐기,
- [0035] 선택적으로 하나 이상의 C_1 - C_5 -알킬 치환기로 치환되는 C_6 - C_{18} -아릴기,
- [0036] 선택적으로 하나 이상의 C_1 - C_5 -알킬 치환기로 치환되는 C_2 - C_{17} -헤테로아릴기,
- [0037] $N(C_6$ - C_{18} -아릴기) $_2$,

- [0038] $N(C_2-C_{17}\text{-헤테로아릴기})_2$, 및
- [0039] $N(C_2-C_{17}\text{-헤테로아릴기})(C_6-C_{18}\text{-아릴기})$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0040] 여기서 선택적으로 임의의 치환기 R^a , R^5 , 및 R^6 은 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a , R^5 , 및/또는 R^6 와 함께 단환(monocyclic) 또는 다환(polycyclic), 지방족(aliphatic), 방향족(aromatic), 헤테로방향족(heteroaromatic) 및/또는 벤조-융합된(benzo-fused) 고리 시스템을 형성한다.
- [0041] 일 구현예에서, R^x 는
- [0042] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 ,
- [0043] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환된 Ph, 및
- [0044] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환된 피리디닐기로부터 선택된다.
- [0045] 일 구현예에서, R^x 는 페닐기 (Ph)이다.
- [0046] 본 발명의 일 구현예에서, R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로,
- [0047] 수소,
- [0048] 중수소,
- [0049] Me,
- [0050] ^iPr ,
- [0051] ^tBu ,
- [0052] CN,
- [0053] CF_3 ,
- [0054] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0055] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,
- [0056] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐기,
- [0057] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,
- [0058] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및
- [0059] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 $N(\text{Ph})_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0060] 여기서 둘 이상의 인접한 치환기 R^a 는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템에 대한 부착 지점을 형성할 수 있다:



[0061]

[0062] 여기서 각각의 파선은 위에 나타낸 군의 고리 시스템이 화학식 I에 나타낸 구조에 융합되도록, 위에 나타낸 고리 시스템 중 하나를 두 개의 인접한 치환기 R^a 위치로 연결하는 직접 결합을 나타낸다.

[0063] 일 구현예에서, 적어도 하나의 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 헤테로방향족 및/또는 벤조-융합된 고리 시스템은 R^a , R^3 , R^4 , R^5 및 R^6 치환기와 함께 하나 이상의 추가 치환기 R^a , R^3 , R^4 , R^5 및/또는 R^6 에 의해 형성된다.

[0064] 일 구현예에서, R^6 은 각각의 경우에 서로 독립적으로, 수소 (H), 메틸기 (Me), i-프로필기 ($\text{CH}(\text{CH}_3)_2$) (^iPr), t-부틸기 (^tBu), 페닐기 (Ph), CN, CF_3 , 및 디페닐아민 (NPh_2)으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0065] 일 구현예에서, R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 수소 (H), 메틸기 (Me), i-프로필기 ($\text{CH}(\text{CH}_3)_2$) (^iPr), t-부틸기 (^tBu), 페닐기 (Ph), CN, CF_3 , 및 디페닐아민 (NPh_2)으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0066] 본 발명의 일 구현예에서, R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로,

[0067] 수소, 중수소, Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 ,

[0068] Me, ^iPr , ^tBu , CN, CF_3 , 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0069] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

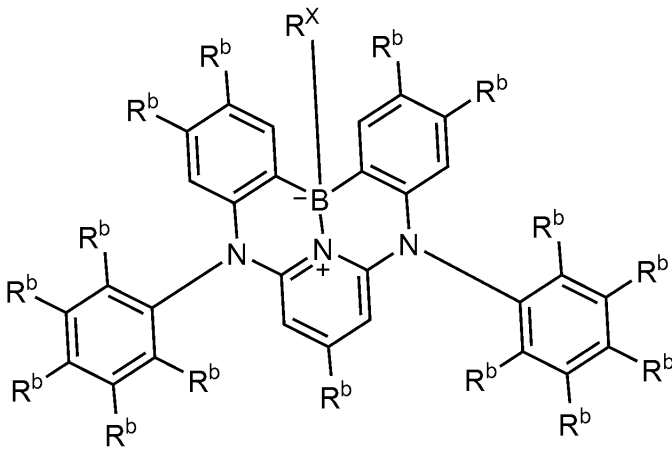
[0070] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐기,

[0071] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

[0072] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

[0073] N(Ph)₂로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0074] 일 구현예에서, 유기 분자는 하기 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0075]

[0076] 화학식 II,

[0077] 여기서 R^b는 각각의 경우에 독립적으로 수소, 중수소, N(R⁵)₂, OR⁵, Si(R⁵)₃, B(OR⁵)₂, OSO₂R⁵, CF₃, CN, F, Br, I,

[0078] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알킬기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0079] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0080] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₁-C₄₀-티오알콕시기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0081] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₂-C₄₀-알케닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에

의하여 치환되고;

[0082] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₂-C₄₀-알킬닐기, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂-기는 선택적으로 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 CONR⁵에 의하여 치환되고;

[0083] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₆-C₆₀-아릴기, 및

[0084] 선택적으로 하나 이상의 치환기 R⁵로 치환되는 C₂-C₅₇-헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0085] 일 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로,

[0086] 수소, 중수소,

[0087] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃,

[0088] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0089] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

[0090] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

[0091] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

[0092] N(Ph)₂로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0093] 일 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로,

[0094] 중수소,

[0095] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃,

[0096] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0097] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐기,

[0098] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일기,

[0099] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃, 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐기, 및

[0100] N(Ph)₂로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0101] 정의

[0102] 여기서, "층"이란 용어는 광범위하게 평면 형상을 갖는 물체를 의미한다. 광전자 소자가 여러 층으로 구성될 수

있다는 점은 당업자의 상식의 일부를 형성한다.

- [0103] 본 발명의 단락에서 발광층(EML)은 광전자 소자의 층이며, 여기서 상기 층으로부터의 발광은 상기 소자에 전압 및 전류를 인가할 때 관찰된다. 당업자는 광전자 소자로부터의 발광이 적어도 하나의 EML로부터의 발광에 기인한다고 이해한다. 숙련된 기술자는 EML로부터의 발광이 일반적으로 (주로) 상기 EML에 포함된 모든 물질에 기인하지 않고, 특정 에미터 물질에 기인하는 것을 이해한다.
- [0104] 본 발명의 단락에서 "에미터 물질" ("에미터"라고도 함)은 광전자 소자의 발광층(EML)에 포함될 때(아래 참조), 전압 및 전류가 상기 소자에 가해지는 경우 발광하는 물질이다. 당업자는 에미터 물질이 일반적으로 "발광성 도펀트" 물질이라는 것을 알고 있고, 숙련된 기술자는 도펀트 물질 (발광성일 수 있거나 아닐 수 있음)이 일반적으로 (또한 본 명세서에서) 호스트 물질로 지칭되는 매트릭스 물질에 매립되는 물질인 것을 이해한다. 여기서, 호스트 물질은 또한 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자(바람직하게는 OLED)에 포함될 때 일반적으로 H^B라고 지칭된다.
- [0105] 본 발명의 단락에서, "시클릭 그룹(cyclic group)"이라는 용어는 임의의 단환(monocyclic), 이환(bicyclic) 또는 다환(polycyclic) 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다.
- [0106] 본 발명의 단락에서, 화학 구조를 언급할 때 "고리(ring)"라는 용어는 임의의 단환 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 동일한 견지에서, 화학 구조를 언급할 때 "고리들(rings)"이란 용어는 임의의 이환 또는 다환 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다.
- [0107] 본 발명의 단락에서, "고리 시스템(ring system)"이란 용어는 임의의 단환, 이환 또는 다환 모이어티로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다.
- [0108] 본 발명의 단락에서, "고리 원자(ring atom)"라는 용어는 고리 또는 고리 시스템의 시클릭 코어의 일부이고, 선택적으로 시클릭 코어에 부착된 비-시클릭(non-cyclic) 치환기의 일부가 아닌 임의의 원자를 지칭한다.
- [0109] 본 발명의 단락에서, "카보사이클(carbocycle)"이란 용어는 시클릭 코어 구조가 오직 탄소 원자만을 포함한 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있고, 물론 상기 탄소 원자는 수소 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있다. 형용사로서 "카보시클릭(carbocyclic)"이란 용어는 시클릭 코어 구조가 오직 탄소 원자만을 포함한 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해될 수 있고, 물론 상기 탄소 원자는 수소 또는 본 발명의 특정 구현예에 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있다.
- [0110] 본 발명의 단락에서, "헤테로사이클(heterocycle)"이란 용어는 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 형용사로서 "헤테로시클릭(heterocyclic)"이란 용어는 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해된다. 헤테로 원자는 특정 구현예에서 달리 언급되지 않는 한, 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, 바람직하게는 B, Si, N, O, S, 및 Se, 더욱 바람직하게는 B, N, O 및 S, 가장 바람직하게는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 본 발명의 단락에서 헤테로사이클에 포함된 모든 탄소 원자 또는 헤테로원자는 물론 수소 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있다.
- [0111] 당업자는 임의의 시클릭 그룹(즉, 임의의 카보사이클 및 헤테로사이클)이 지방족 또는 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있음을 이해한다.
- [0112] 본 발명의 단락에서, 시클릭 그룹(즉, 고리, 고리들, 고리 시스템, 카보사이클, 헤테로사이클)을 지칭할 때 지방족이란 용어는 시클릭 코어 구조(선택적으로 부착되는 치환기는 제외)가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템의 일부가 아닌 적어도 하나의 고리 원자를 함유함을 의미한다. 바람직하게는, 지방족 시클릭 그룹 내의 대부분의 고리 원자 및 더욱 바람직하게는 모든 고리 원자는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템(예를 들어, 시클로hexan 또는 피페리딘과 같은)의 일부가 아니다. 여기서, 일반적으로 지방족 고리들 또는 고리 시스템을 지칭할 때 카보시클릭과 헤테로시클릭 그룹 사이에 구별이 이루어지지 않지만, "지방족"이란 용어가 지방족 시클릭 그룹 내에 헤테로원자가 포함되는지 여부를 나타내기 위해서 카보사이클 또는 헤테로사이클을 설명하는 형용사로 사용될 수 있다.
- [0113] 숙련된 기술자에 의해 이해되는 바와 같이, "아릴(aryl)" 및 "방향족(aromatic)"이란 용어는 임의의 단환, 이환 또는 다환 방향족 모이어티, 즉 모든 고리 원자가 방향족 고리 시스템의 일부, 바람직하게는 동일한 방향족 고리 시스템의 일부인 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 다만, 본 명세서 전체에서, "아릴"

및 "방향족"이란 용어는 모든 방향족 고리 원자가 탄소 원자인 단환, 이환 또는 다환 방향족 모이어티로 제한된다. 대조적으로, 본 명세서에서 "헤테로아릴(heteroaryl)" 및 "헤테로방향족(heteroaromatic)"이란 용어는 적어도 하나의 방향족 탄소 고리 원자가 헤테로원자(즉, 탄소가 아님)로 대체된 임의의 단환, 이환 또는 다환 방향족 모이어티를 지칭한다. 본 발명의 특정 구현예에서 달리 언급되지 않는 한, "헤테로아릴" 또는 "헤테로방향족" 내의 적어도 하나의 헤테로원자는 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 N, O, S 및 Se, 더욱 바람직하게는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 당업자는 형용사 "방향족" 및 "헤테로방향족"이 임의의 시클릭 그룹(즉, 임의의 고리 시스템)을 기술하는데 사용될 수 있음을 이해한다. 즉, 방향족 시클릭 그룹(즉, 방향족 고리 시스템)은 아릴기이고, 헤테로방향족 시클릭 그룹(즉, 헤테로방향족 고리 시스템)은 헤테로아릴기이다.

[0114] 본 발명의 특정 구현예에서 달리 나타내지 않는 한, 본 명세서에서 아릴기는 바람직하게는 6 내지 60개의 방향족 고리 원자, 더욱 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, 본 명세서에서 헤테로아릴기는 바람직하게는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자, 더욱 바람직하게는 5 내지 40개의 방향족 고리 원자, 더욱 더 바람직하게는 5 내지 20개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이 중 적어도 하나는 헤테로원자이고, 바람직하게는 N, O, S 및 Se, 더욱 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다. 하나 보다 많은 헤테로원자가 헤테로방향족 그룹에 포함되는 경우, 모든 헤테로원자는 서로 독립적으로 바람직하게는 N, O, S, 및 Se, 더욱 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다.

[0115] 본 발명의 단락에서, 방향족 및 헤테로방향족 그룹(예를 들어 아릴 또는 헤테로아릴 치환기) 모두에 대해, 방향족 고리 탄소 원자의 수는 특정 치환기의 정의에서 아래첨자 숫자로, 예를 들어 "C₆-C₆₀-아릴기"의 형태로 주어질 수 있고, 이는 각각의 아릴 치환기가 6 내지 60개의 방향족 탄소 고리 원자들을 포함함을 의미한다. 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 치환기들인지 여부에 관계없이 모든 다른 종류의 치환기에서 허용되는 탄소 원자의 수를 나타내기 위해 동일한 아래첨자 숫자가 사용된다. 예를 들어, "C₁-C₄₀-알킬기"라는 표현은 1 내지 40개의 탄소 원자들을 포함하는 알킬 치환기를 지칭한다.

[0116] 아릴기의 바람직한 예는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 파이렌, 디하이드로파이렌, 크라이센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조파이렌으로부터 유래된 그룹들 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0117] 헤테로아릴기의 바람직한 예는 퓨란, 벤조퓨란, 이소벤조퓨란, 디벤조퓨란, 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, 퀴놀살리노이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프토옥사졸, 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, 퀴놀살린, 피라진, 페나진, 나프트리딘, 카볼린, 벤조카볼린, 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 유래된 그룹들 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0118] 본 명세서 전체에서, "아릴렌(arylene)"이란 용어는 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 사이트를 보유함으로써 링커 구조로서 작용하는 2가 아릴 치환기를 지칭한다. 동일한 견지에서, "헤테로아릴렌(heteroarylene)"이란 용어는 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 사이트를 보유함으로써 링커 구조로서 작용하는 2가 헤테로아릴 치환기를 지칭한다.

[0119] 본 발명의 단락에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 지칭할 때 "융합된(fused)"이란 용어는 "융합된" 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 두 고리 시스템의 일부인 적어도 하나의 결합을 공유함을 의미한다. 예를 들어, 나프탈렌(또는 치환기로 지칭될 때 나프틸기) 또는 벤조티오펜(또는 치환기로 지칭될 때 벤조티오펜)은 본 발명의 단락에서 융합된 방향족 고리 시스템으로 간주되며, 융합된 방향족 고리 시스템은 두 개의 벤젠 고리(나프탈렌의 경우) 또는 티오펜과 벤젠(벤조티오펜의 경우)이 하나의 결합을 공유한다. 또한, 이러한 단락에서, 결합을 공유하는 것은 각각의 결합을 구축하는 두 개의 원자를 공유하는 것을 포함하고, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 하나의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이해될 수 있음이 이해된다. 또한, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템(예: 파이렌)을 구축하는 방향족 또는 헤테로방향족

고리에 의해 하나보다 많은 결합이 공유될 수 있음이 이해된다. 또한, 지방족 고리 시스템도 융합될 수 있고, 융합된 지방족 고리 시스템이 방향족이 아니라는 점을 제외하고는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는 것이 이해될 것이다. 또한, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 또한 지방족 고리 시스템에 융합(즉, 적어도 하나의 결합을 공유)할 수 있다고 이해된다.

[0120] 본 발명의 단락에서, "축합된(condensed)" 고리 시스템이란 용어는 "융합된(fused)" 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는다.

[0121] 본 발명의 특정 구현예에서, 고리 또는 고리 시스템에 결합된 인접 치환기는 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 융합된 추가적인 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수 있다. 선택적으로 그와 같이 형성된 융합된 고리 시스템은 인접 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템보다 더 클(더 많은 고리 원자를 포함함을 의미함) 것으로 이해된다. 이러한 경우(그리고 그러한 숫자가 제공되는 경우), 융합된 고리 시스템에 포함된 고리 원자의 "총" 양은 인접 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 포함된 고리 원자 및 인접 치환기에 의해 형성된 추가적인 고리 시스템의 고리 원자의 합으로 이해되어야 하지만, 융합된 고리에 의해 공유된 고리 원자는 두 번이 아니라 한 번 계산된다. 예를 들어, 하나의 벤젠 고리가 함께 다른 벤젠 고리를 형성하는 두 개의 인접 치환기를 가져서 나프탈렌 코어를 형성할 수 있다. 이러한 나프탈렌 코어는 두 개의 벤젠 고리에 의해 공유된 두 개의 탄소 원자가 두 번이 아니라 한 번만 계산되므로, 10개의 고리 원자를 포함한다.

[0122] 일반적으로, 본 발명의 단락에서, "인접 치환기(adjacent substituents)" 또는 "인접 그룹(adjacent groups)"이란 용어는 동일하거나 이웃하는 원자에 결합된 치환기 또는 그룹을 지칭한다.

[0123] 본 발명의 단락에서, "알킬기(alkyl group)"란 용어는 가장 넓은 의미에서 임의의 선형, 분지형, 또는 시클릭 알킬 치환기로 이해될 수 있다. 치환기로서 알킬기의 바람직한 예는 메틸기(Me), 에틸기(Et), n-프로필기(ⁿPr), i-프로필기(ⁱPr), 시클로프로필기, n-부틸기(ⁿBu), i-부틸기(ⁱBu), s-부틸기(^sBu), t-부틸기(^tBu), 시클로부틸기, 2-메틸부틸기, n-펜틸기, s-펜틸기, t-펜틸기, 2-펜틸기, 네오펜틸기, 시클로펜틸기, n-헥실기, s-헥실기, t-헥실기, 2-헥실기, 3-헥실기, 네오헥실기, 시클로헥실기, 1-메틸시클로펜틸기, 2-메틸펜틸기, n-헵틸기, 2-헵틸기, 3-헵틸기, 4-헵틸기, 시클로헵틸기, 1-메틸시클로헥실기, n-옥틸기, 2-에틸헥실기, 시클로옥틸기, 1-비시클로[2,2,2]옥틸기, 2-비시클로[2,2,2]-옥틸기, 2-(2,6-디메틸)옥틸기, 3-(3,7-디메틸)옥틸기, 아다만틸1,1-디메틸-n-헥스-1-일기, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일기, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일기, 1,1-디메틸-n-데크-1-일기, 1,1-디메틸-n-도데크-1-일기, 1,1-디메틸-n-테트라데크-1-일기, 1,1-디메틸-n-헥사데크-1-일기, 1,1-디메틸-n-옥타데크-1-일기, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일기, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일기, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일기, 1,1-디에틸-n-데크-1-일기, 1,1-디에틸-n-도데크-1-일기, 1,1-디에틸-n-테트라데크-1-일기, 1,1-디에틸-n-헥사데크-1-일기, 1,1-디에틸-n-옥타데크-1-일기, 1-(n-프로필)-시클로헥스-1-일기, 1-(n-부틸)-시클로헥스-1-일기, 1-(n-헥실)-시클로헥스-1-일기, 1-(n-옥틸)-시클로헥스-1-일기 및 1-(n-데실)-시클로헥스-1-일기를 포함한다.

[0124] 예를 들어, s-부틸기, s-펜틸기 및 s-헥실기에서 "s"는 "2차(secondary)"를 지칭하고; 또는 다시 말하면: s-부틸기, s-펜틸기 및 s-헥실기는 각각 sec-부틸기, sec-펜틸기 및 sec-헥실기와 동등하다. 예를 들어, t-부틸기, t-펜틸기 및 t-헥실기에서 "t"는 "3차(tertiary)"를 지칭하고; 또는 다시 말하면: t-부틸기, t-펜틸기 및 t-헥실기는 각각 tert-부틸기, tert-펜틸기 및 tert-헥실기와 동등하다.

[0125] 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "알케닐기(alkenyl)"란 용어는 선형, 분지형, 및 고리형 알케닐 치환기를 포함한다. 용어 알케닐 그룹은 예시적으로 치환기인 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 시클로펜테닐기, 헥세닐기, 시클로헥세닐기, 헵테닐기, 시클로헵테닐기, 옥테닐기, 시클로옥테닐기 또는 시클로옥타디에닐기를 포함한다.

[0126] 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "알키닐기(alkynyl)"란 용어는 선형, 분지형, 및 고리형 알키닐 치환기를 포함한다. 용어 알키닐 그룹은 예시적으로 에티닐기, 프로피닐기, 부티닐기, 펜티닐기, 헥시닐기, 헵티닐기 또는 옥티닐기를 포함한다.

[0127] 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "알콕시기(alkoxy)"란 용어는 선형, 분지형, 및 고리형 알콕시 치환기를 포함한다. 용어 알콕시 그룹은 예시적으로 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, i-프로폭시기, n-부톡시기, i-부톡시기, s-부톡시기, t-부톡시기 및 2-메틸부톡시기를 포함한다.

[0128] 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "티오알콕시(thioalkoxy)"란 용어는 선형, 분지형, 및 고리형 티오알콕시 치

환기를 포함하고, 대응되는 알콕시 그룹의 산소 원자 O는 황 S에 의해 대체된다.

- [0129] 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "할로겐(halogen)" (또는 화학 명명법에서 치환기로 지칭될 때 "할로(hal o)")이란 용어는 가장 넓은 의미에서 원소 주기율표의 7번째 주족(즉, 17족) 원소의 임의의 원자, 바람직하게는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드로 이해될 수 있다.
- [0130] 분자 단편이 치환기이거나 그렇지 않으면 다른 모이어티에 부착된 것으로 기술될 때 분자 단편의 명칭은 그것이 단편인 것처럼(예: 나프틸기, 디벤조퓨릴기) 또는 온전한 그룹인 것처럼(예: 나프탈렌, 디벤조퓨란) 기술될 수 있음이 이해된다. 본 명세서에서 사용된 바와 같이, 이러한 치환기 또는 부착된 단편을 지정하는 상이한 방식은 동등한 것으로 간주된다.
- [0131] 또한, 본 명세서에서, " C_6-C_{60} -아틸기" 또는 " C_1-C_{40} -알킬기"와 같은 치환기가 치환기 내의 결합 사이트를 나타내는 명칭 없이 언급될 때마다, 이는 각각의 치환기가 임의의 원자를 통해 결합될 수 있음을 의미한다. 예를 들어, " C_6-C_{60} -아틸기"-치환기는 6 내지 60개의 방향족 탄소 원자들 중 임의의 것을 통해 결합될 수 있고, " C_1-C_{40} -알킬기"-치환기는 1 내지 40개의 지방족 탄소 원자들 중 임의의 것을 통해 결합될 수 있다. 한편, "2-시아노페닐기"-치환기는 정확한 화학 명명법을 허용하도록 그 CN-그룹이 결합 사이트에 인접하는 방식으로만 결합될 수 있다.
- [0132] 본 발명의 단락에서, "부틸기(butyl)", "비페닐기(biphenyl)" 또는 "터페닐기(terphenyl)"와 같은 치환기는 더 상세 설명 없이 지칭될 때마다, 이는 각각의 치환기의 임의의 이성질체가 특정 치환기로 허용될 수 있음을 의미한다. 이와 관련하여, 예를 들어, 치환기로서 "부틸기"란 용어는 치환기로서 n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, 및 iso-부틸기를 포함한다. 동일한 견지에서, 치환기로서 "비페닐기"란 용어는 오르쏘-비페닐기, 메타-비페닐기, 또는 파라-비페닐기를 포함하고, 여기서 오르쏘, 메타 및 파라는 비페닐 치환기를 보유하는 각각의 화학적 모이어티에 대한 비페닐 치환기의 결합 사이트와 관련하여 정의된다. 유사하게, 치환기로서 "터페닐기"란 용어는 3-오르쏘-터페닐기, 4-오르쏘-터페닐기, 4-메타-터페닐기, 5-메타-터페닐기, 2-파라-터페닐기 또는 3-파라-터페닐기를 포함하고, 여기서 숙련된 기술자가 알다시피, 오르쏘, 메타 및 파라는 터페닐-그룹 내에 두 개의 Ph-모이어티 서로에 대한 위치를 나타내고, "2-", "3-", "4-" 및 "5-"는 터페닐기 치환기를 보유하는 각각의 화학적 모이어티에 대한 터페닐 치환기의 결합 사이트를 나타낸다.
- [0133] 위에서 정의된 모든 그룹 및 실제로 모든 화학적 모이어티는 이들이 시클릭 또는 비-시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족인지 여부에 관계없이 본 명세서에서 설명된 특정 구현예에 따라 추가로 치환될 수 있음이 이해된다.
- [0134] 본 명세서에서 지칭된 임의의 구조에 포함된 모든 수소 원자(H)는 각각의 경우에 독립적으로, 이를 구체적으로 지시함 없이, 중수소(D)로 대체될 수 있다. 중수소에 의한 수소의 대체는 당업자에게 일반적인 관행이다. 따라서, 이를 달성할 수 있는 수많은 알려진 방법과 이를 설명하는 여러 검토 논문이 있다.
- [0135] 실험 또는 계산된 데이터를 비교하는 경우, 동일한 방법론으로 값을 결정해야 한다. 예를 들어, 특정 방법에 의해 실험적 ΔE_{ST} 가 0.4 eV 미만으로 결정되면, 동일한 조건을 포함한 동일한 특정 방법을 사용하는 경우에만 비교가 타당하다. 구체적인 예를 들면, 상이한 화합물의 광발광 양자 수율(photoluminescence quantum yield; PLQY)의 비교는 PLQY 값의 결정이 동일한 반응 조건(실온에서 10% PMMA 필름에서의 측정)에서 수행된 경우에만 타당하다. 유사하게, 계산된 에너지 값은 동일한 계산 방법(동일한 범함수 및 동일한 기본 세트를 사용하여)으로 결정될 필요가 있다.
- [0136] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자
- [0137] 본 발명의 추가 측면은 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자에 관한 것이다.
- [0138] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0139] · 유기 발광 소자(OLED),
- [0140] · 발광 전기화학 전지,
- [0141] · OLED 센서, 특히 외부와 완전히 차단되지 않은 가스 및 증기 센서,
- [0142] · 유기 소자,

- [0143] · 유기 태양 전지,
- [0144] · 유기 트랜지스터,
- [0145] · 유기 전계 효과 트랜지스터,
- [0146] · 유기 레이저 및
- [0147] · 하향 변환 소자(down-conversion element).
- [0148] 발광 전기화학 전지는 캐소드, 애노드, 및 본 발명에 따른 유기 분자를 포함할 수 있는 활성층의 3개의 층으로 이루어진다.
- [0149] 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 유기 발광 소자(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC), 유기 레이저, 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0150] 보다 더 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 유기 발광 소자(OLED)이다.
- [0151] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 하기 층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다:
- [0152] 1. 기판
- [0153] 2. 애노드층 A
- [0154] 3. 정공 주입층, HIL
- [0155] 4. 정공 수송층, HTL
- [0156] 5. 전자 저지층, EBL
- [0157] 6. 발광층(또한 방출층으로 지칭됨), EML
- [0158] 7. 정공 저지층, HBL
- [0159] 8. 전자 수송층, ETL
- [0160] 9. 전자 주입층, EIL
- [0161] 10. 캐소드층 C,
- [0162] 여기서 OLED는 애노드층 A, 캐소드층 C, 및 EML을 제외하고는 선택적으로 각각의 층을 포함하고, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각각의 층 유형의 하나보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0163] 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 예를 들어, 습기, 증기 및/또는 가스를 포함한 환경에서 유해한 종에 대한 손상 노출로부터 소자를 보호하는 하나 이상의 보호층을 선택적으로 포함할 수 있다.
- [0164] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 다음의 (역전된) 층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다:
- [0165] 1. 기판
- [0166] 2. 캐소드층 C
- [0167] 3. 전자 주입층, EIL
- [0168] 4. 전자 수송층, ETL
- [0169] 5. 정공 저지층, HBL
- [0170] 6. 발광층(또한 방출층으로 지칭됨), EML
- [0171] 7. 전자 저지층, EBL
- [0172] 8. 정공 수송층, HTL

- [0173] 9. 정공 주입층, HIL
- [0174] 10 애노드층 A
- [0175] 여기서 (역전된 층 구조를 갖는) OLED는 애노드층 A, 캐소드층 C, 및 EML을 제외하고는 선택적으로 각각의 층을 포함하고, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각각의 층 유형의 하나보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0176] 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 OLED 내의 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 분율은 0.1중량% 내지 99중량%, 더욱 바람직하게는 1중량% 내지 80중량%이다. 대체적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0177] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 적층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다. 이러한 구조에서, OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리 개별 유닛이 서로의 위에 적층된다. 혼합광은 적층 구조를 나타내는 OLED로 생성될 수 있고, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 선택적으로 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있고, 전하 생성층은 일반적으로 2개의 OLED 서브 유닛 사이에 배치되고 일반적으로 n-도핑층과 p-도핑층으로 구성되며, 하나의 CGL의 n-도핑층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한다.
- [0178] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이의 2개 이상의 발광층을 포함한 OLED이다. 특히, 이러한 소위 텐덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 방출하고, 하나의 발광층은 녹색광을 방출하며, 하나의 발광층은 청색광을 방출하고, 선택적으로 개별 발광층 사이에 전하 생성층, 저지층 또는 수송층과 같은 추가층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 텐덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층은 병합될 수 있다.
- [0179] 일 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 실질적으로 백색 광전자 소자일 수 있고, 이는 소자가 백색광을 방출한다는 것을 의미한다. 예시적으로, 이러한 백색 발광 광전자 소자는 적어도 하나의 (심)청색 에미터 분자 및 녹색 및/또는 적색광을 방출하는 하나 이상의 에미터 분자를 포함할 수 있다. 또한, 이 텍스트의 뒷 부분에 설명된 바와 같이 2개 이상의 분자들 사이에 에너지 전달이 선택적으로 있을 수 있다 (아래 참조).
- [0180] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자의 경우에, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자가 광전자 소자의 발광층(EML)에 포함되는 것이 바람직하고, OLED의 EML에 포함되는 것이 더욱 바람직하다. 다만, 본 발명에 따른 유기 분자는 또한 예를 들어, 전자 수송층(ETL) 및/또는 전자 저지층(EBL) 또는 엑시톤 저지층 및/또는 정공 수송층(HTL) 및/또는 정공 저지층(HBL)에 사용될 수 있다. 사용되는 경우, 광전자 소자, 특히 OLED 내의 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 분율은 0.1중량% 내지 99중량%, 더욱 바람직하게는 0.5중량% 내지 80중량%, 특히 0.5중량% 내지 10중량%이다. 대체적인 구현예에서, 각각의 층에서 상기 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0181] 광전자 소자, 특히 OLED의 개별층에 적합한 물질의 선택 기준은 당업자의 일반적인 지식이다. 최신 기술은 개별 층에 사용되는 많은 물질을 설명하고 또한 서로 함께 사용되기에 적합한 물질을 시사한다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 물질이 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자에도 사용될 수 있음이 이해된다. 이하에서, 개별층에 대한 물질의 바람직한 예가 주어질 것이다. 이는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자에 아래에 열거된 모든 종류의 층이 존재해야함을 의미하지는 않는 것으로 이해된다. 추가로, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 예를 들어, 2개 이상의 발광층들(EMLs)과 같은 아래에 열거된 각각의 층들의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있음이 이해된다. 동일한 유형의 2개 이상의 층들 (예를 들어, 2개 이상의 EML 또는 2개 이상의 HTL)이 반드시 동일한 물질 또는 심지어 동일한 비율의 동일한 물질을 포함하지 않는다는 것이 이해된다. 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 아래에 열거된 모든 층 유형을 포함할 필요가 없음이 이해되고, 여기에서 애노드층, 캐소드층, 및 발광층은 일반적으로 모든 경우에 존재할 것이다.
- [0182] 기판은 임의의 물질 또는 물질의 조성물에 의해 형성될 수 있다. 가장 빈번하게 유리 슬라이드는 기판으로서 사용된다. 대체적으로, 얇은 금속층(예를 들어, 구리, 금, 은 또는 알루미늄 필름) 또는 플라스틱 필름 또는 슬라이드가 사용될 수 있다. 이는 더 높은 유연성 정도를 허용할 수 있다. 애노드층 A은 (실질적으로) 투명 필름을

연을 수 있는 물질로 대부분 구성되어 있다. OLED로부터 발광을 허용하기 위해서 두 전극 중 적어도 하나는 (실질적으로) 투명해야 하므로, 애노드층 A 또는 캐소드층 C 중 하나는 일반적으로 투명하다. 바람직하게, 애노드층 A는 투명 전도성 산화물 (transparent conductive oxide; TCO)을 다량 포함하거나 심지어 TCO로 이루어진다. 이러한 애노드층 A는 예를 들어, 인듐 주석 산화물, 알루미늄 아연 산화물, 불소가 도핑된 주석 산화물, 인듐 아연 산화물, PbO, SnO, 지르코늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 마나듐 산화물, 텅스텐 산화물, 그라파이트, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 도핑된 GaAs, 도핑된 폴리아닐린, 도핑된 폴리피롤 및/또는 도핑된 폴리티오펜을 포함할 수 있다.

[0183] 바람직하게, 애노드층 A는 (실질적으로) 인듐 주석 산화물 (indium tin oxide; ITO) (예를 들어, $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$)로 구성된다. 투명 전도성 산화물 (TCO)에 의한 애노드층 A의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용하여 보상될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사 전하 캐리어(즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 캐리어의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌 디옥시티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설펜네이트(PSS), MoO_2 , V_2O_5 , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT와 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층 A로부터 정공 수송층(HTL)으로의 금속 확산을 방지할 수 있다. HIL은 예를 들어 PEDOT:PSS(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜:폴리스티렌 설펜네이트), PEDOT(폴리-3,4-에틸렌 디옥시 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'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(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)을 포함할 수 있다.

[0184] 애노드층 A 또는 정공 주입층(HIL)에 인접하여, 정공 수송층(HTL)이 일반적으로 위치한다. 여기서 임의의 정공 수송 물질이 사용될 수 있다. 예를 들어, 트리아릴아민 및/또는 카바졸과 같은 전자가 풍부한 헤테로방향족 화합물이 정공 수송 화합물로서 사용될 수 있다. HTL은 애노드층 A와 발광층 EML 사이의 에너지 장벽을 낮출 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 또한 전자 저지층(EBL)일 수 있다. 바람직하게, 정공 수송 화합물은 비교적 높은 에너지 준위의 최저 여기 삼중항 상태 T1을 갖는다. 예시적으로, 정공 수송층(HTL)은 TCTA(트리스(4-카바졸일-9-일페닐)아민), poly-TPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), α -NPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), TAPC(4,4'-시클로헥실리덴-비스[N,N-비스(4-메틸페닐)벤젠아민]), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), 스피로-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(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 TrisPcz(9,9'-디페닐-6-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H,9'H-3,3'-비카바졸)과 같은 별-모양 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공-수송성 매트릭스 내의 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑층을 포함할 수 있다. 마나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이 금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄(F4-TCNQ), 구리-펜타플루오로벤조에이트($\text{Cu}(\text{I})\text{pFBz}$) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

[0185] 예를 들어, EBL은 mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), TCTA(트리스(4-카바조일-9-일페닐)아민), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), tris-Pcz(9-페닐-3,6-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H-카바졸), CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), 및/또는 DCB(N,N'-디카바졸일-1,4-디메틸벤젠)을 포함할 수 있다.

[0186] 정공 수송층(HTL) 또는 (존재한다면) 전자 저지층(EBL)에 인접하여, 일반적으로 발광층(EML)이 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 발광 분자(즉, 에미터 물질)를 포함한다. 일반적으로, EML은 하나 이상의 호스트 물질 (매트릭스 물질이라고 지칭되기도 함)을 추가로 포함한다. 예시적으로, 호스트 물질은 CBP(4,4'-비스-(N-카바졸 일)-비페닐), mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), DPEPO(비스[2-(디페닐포스포노)페닐]에테르 옥사이드), 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)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)으로부터 선택될 수 있다. 당업자에게 알려진 바와 같이, 호스트 물질은 일반적으로 각각의 호스트 물질에 매립된 적어도 하나의 발광 분자의 제1(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 최저) 여기 일중항 상태(S1) 에너지 준위보다 에너지적으로 더 높은 제1(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 최저) 여기 일중항(S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택되어야 한다.

[0187] 상술한 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 포함한 광전자 소자의 EML의 바람직한 조성은 본 명세서의 뒷부분에서 더 자세히 설명된다 (아래 참조).

[0188] 발광층(EML)에 인접하여, 전자 수송층(ETL)이 위치할 수 있다. 여기서, 임의의 전자 수송 물질이 사용될 수 있다. 예시적으로, 벤즈이미다졸, 피리딘, 트리아졸, 트리아진, 옥사디아졸(예를 들어, 1,3,4-옥사디아졸), 포스핀옥사이드 및 설폰과 같은 전자가 결핍된 그룹을 갖는 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-모양 헤테로 시클릭 화합물일 수 있다. ETL은 예를 들어 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리스(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)을 포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq((8-히드록시퀴놀리놀라토) 리튬)와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)은 또한 정공을 저지할 수 있거나, 정공 저지층(HBL)이 일반적으로 EML과 ETL 사이에 도입된다.

[0189] 정공 저지층(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-히드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐-포스핀옥사이드), 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.

[0190] 캐소드층 C는 전자 수송층(ETL)에 인접하여 위치할 수 있다. 예를 들어, 캐소드층 C는 금속(예를 들어, Al, Au, Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W, 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이로 구성될 수 있다. 실용적인 이유로, 캐소드층은 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (실질적으로) 불투명 금속으로 구성될 수 있다. 대체적으로 또는 추가적으로, 캐소드층 C는 또한 그래파이트 및/또는 탄소나노튜브(CNT)를 포함할 수 있다. 대체적으로, 캐소드층 C는 또한 나노스케일의 은 와이어를 포함하거나 이로 구성될 수 있다.

[0191] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 OLED는 전자 수송층(ETL)과 캐소드층 C (전자 주입층(EIL)으로 지정될 수 있음) 사이에 보호층을 선택적으로 더 포함할 수 있다. 이 층은 리튬플루오라이드, 세슘플루오라이드, 은, Liq (8-히드록시퀴놀리놀라토 리튬), Li₂O, BaF₂, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.

[0192] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 저지층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 물질을 포함할 수 있다.

[0193] 본 명세서에서 사용되는 바와 같이, 특정 단락에서 더 구체적으로 정의되지 않는 한, 방출 및/또는 흡수된 광의 색상 지정은 하기와 같다:

[0194] 보라색: >380 내지 420 nm의 파장 범위;

[0195] 심청색: >420 내지 480 nm의 파장 범위;

[0196] 하늘색: >480 내지 500 nm의 파장 범위;

[0197] 녹색: >500 내지 560 nm의 파장 범위;

[0198] 황색: >560 내지 580 nm의 파장 범위;

[0199] 주황색: >580 내지 620 nm의 파장 범위;

[0200] 적색: >620 내지 800 nm의 파장 범위.

[0201] 발광 분자(즉, 에미터 물질)와 관련하여, 이러한 색상은 주 발광 피크의 최대 발광을 나타낸다. 따라서, 예시적으로, 심청색 에미터는 >420 내지 480 nm 범위의 최대 발광을 갖고, 하늘색 에미터는 >480 내지 500 nm 범위의

최대 발광을 갖고, 녹색 에미터는 >500 내지 560 nm 범위의 최대 발광을 갖고, 적색 에미터는 >620 내지 800 nm 범위의 최대 발광을 갖는다.

[0202] 심청색 에미터는 바람직하게 475 nm 미만, 더 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만의 최대 발광을 가질 수 있다. 이는 일반적으로 420 nm 초과, 바람직하게는 430 nm 초과, 더욱 바람직하게는 440 nm 초과 또는 심지어 450 nm 초과일 것이다. 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 420 내지 500 nm, 바람직하게는 430 내지 490 nm, 보다 바람직하게는 440 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 내지 470 nm에서 최대 발광을 나타내며, 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA, mCBP 내의 1 내지 5중량%, 바람직하게는 2중량%의 본 발명에 따른 유기 분자로 스핀-코팅된 필름 또는 대안적으로 유기 용매, 바람직하게는 DCM 또는 톨루엔 내의 0.001 mg/mL의 본 발명에 따른 유기 분자로부터 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 측정된다.

[0203] 추가 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고, ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에 의해 정의된 원 청색(CIE_x = 0.131 및 CIE_y = 0.046)의 CIE_x(= 0.131) 색좌표와 CIE_y(= 0.046) 색좌표에 가까운 CIE_x 및 CIE_y를 가진 광을 방출하고, 따라서 UHD-TV와 같은 UHD(Ultra High Definition) 디스플레이에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 더욱 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 훨씬 더 바람직하게는 0.08 내지 0.18 또는 심지어 0.10 내지 0.15의 CIE_x 색좌표를 나타내고/나타내거나, 0.00 내지 0.45, 바람직하게는 0.01 내지 0.30, 더욱 바람직하게는 0.02 내지 0.20 또는 훨씬 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 또는 심지어 0.04 내지 0.10의 CIE_y 색좌표를 나타내는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 OLED에 관한 것이다.

[0204] 추가 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 1000 cd/m²에서 8% 초과, 바람직하게는 10% 초과, 더욱 바람직하게는 13% 초과, 훨씬 더 바람직하게는 15% 초과 또는 심지어 20% 초과 외의 외부 양자 효율을 나타내는 OLED에 관한 것이고/것이거나, 420 내지 500 nm, 바람직하게는 430 내지 490 nm, 훨씬 바람직하게는 440 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 내지 470 nm의 최대 발광을 나타내고/내거나 500 cd/m²에서 100 h 초과, 바람직하게는 200 h 초과, 훨씬 바람직하게는 400 h 초과, 가장 바람직하게는 750 h 초과 또는 심지어 1000 h 초과 외의 LT80 값을 나타낸다.

[0205] 녹색 에미터 물질은 바람직하게는 500 내지 560 nm, 더욱 바람직하게는 510 내지 550 nm, 훨씬 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 가질 수 있다.

[0206] 추가의 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 분명한 색점에서 발광하는 OLED에 관한 것이다. 바람직하게, OLED는 좁은 발광 대역(작은 반치폭(FWHM))으로 광을 방출한다. 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED는 0.30 eV 미만, 바람직하게는 0.25 eV 미만, 더욱 바람직하게는 0.20 eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.1 eV 미만, 또는 심지어 0.17 eV 미만의 주 발광 피크의 FWHM을 갖는 광을 방출한다.

[0207] 본 발명에 따르면, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자는 예를 들어 디스플레이, 조명 응용분야의 광원 및 의료 및/또는 미용 응용분야 (예를 들어, 광 치료)의 광원으로 사용될 수 있다.

[0208] 본 발명에 따른 유기 분자와 추가 물질의 조합

[0209] 광전자 소자(여기서 바람직하게는 OLED) 내의 임의의 층, 특히 발광층(EML)이 단일 물질 또는 상이한 물질의 조합으로 구성될 수 있다는 것은 당업자의 상식의 일부를 형성한다.

[0210] 예를 들어, 당업자는 EML이 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광할 수 있는 단일 물질로 구성될 수 있음을 이해한다. 다만, 숙련된 기술자는 또한 광전자 소자(여기서 바람직하게는 OLED)의 EML에서 상이한 물질, 특히 하나 이상의 호스트 물질(즉, 매트릭스 물질; 여기서 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 광전자 소자에 포함될 때 호스트 물질 H^B로 지정됨) 및 전압 및 전류를 상기 소자에 인가할 때 그 중에서 적어도 하나가 발광하는 하나 이상의 도펀트 물질 (즉, 에미터 물질)을 조합하는 것이 유리할 수 있음을 이해한다.

[0211] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 EML 내에 또는 EML에 직접 인접한 층 내에, 또는 하나 보다 많은 이러한 층 내에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.

[0212] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고, EML

내에 또는 EML에 직접 인접한 층 내에, 또는 이러한 층들의 하나 이상의 층에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.

- [0213] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 더욱 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고, EML 내에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.
- [0214] 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 사용되고, 이는 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광하는 것을 의미한다.
- [0215] 당업자에게 알려진 바와 같이, 예를 들어, 유기 발광 소자(OLED)에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트)로부터의 발광은 여기 일중항 상태(일반적으로 최저 여기 일중항 상태 S1)로부터의 형광 및 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1)로부터의 인광을 포함할 수 있다.
- [0216] 형광 에미터 F는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 전자 여기시 (예를 들어 광전자 소자에서) 발광할 수 있고, 여기서 발광 여기 상태는 일중항 상태이다. 형광 에미터는 일반적으로 (예를 들어, 전자 정공 재결합에 의한) 초기 전자 여기가 에미터의 여기 일중항 상태를 제공할 때 나노초의 시간 척도에서 즉시(즉, 직접적인) 형광을 나타낸다.
- [0217] 본 발명의 단락에서, 지연 형광 물질은 역시스템간 교차(reverse intersystem crossing, RISC; 즉: 상향 시스템간 교차 또는 역전 시스템간 교차)에 의해 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1으로부터)로부터 여기 일중항 상태(일반적으로 최저 여기 일중항 상태 S1)에 도달할 수 있는 물질이고, 또한 그렇게 도달한 여기 일중항 상태(일반적으로 S1)에서 전자 기저 상태로 돌아올 때 발광할 수 있는 물질이다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1)에서 발광성 여기 일중항 상태(일반적으로 S1)로의 RISC 후에 관찰된 형광 방출은 직접적인 (즉, 즉시) 형광이 발생하는 시간 척도(일반적으로 나노초 범위)보다 느린 시간 척도(일반적으로 마이크로초 범위)에서 발생하므로, 지연 형광(delayed fluorescence; DF)이라고 지칭된다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1으로부터)로부터 여기 일중항 상태(일반적으로 S1)로의 RISC가 열 활성화를 통해 발생하고, 그렇게 채워진 여기 일중항 상태가 광을 방출(지연 형광 방출)하는 경우, 이 과정을 열 활성화 지연 형광(thermally activated delayed fluorescence; TADF)이라고 지칭한다. 따라서, TADF 물질은 위에서 설명한 바와 같이 열 활성화 지연 형광(TADF)을 방출할 수 있는 물질이다. 형광 에미터 F의 최저 여기 일중항 상태 에너지 준위 $E(S1^E)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 $E(T1^E)$ 사이의 에너지 차이 ΔE_{ST} 가 감소될 때, RISC의 수단에 의해 최저 여기 삼중항 상태로부터 최저 여기 일중항 상태의 채워짐이 고효율로 발생할 수 있음은 당업자에게 알려져 있다. 따라서, TADF 물질이 일반적으로 작은 ΔE_{ST} 값을 가질 것임은 당업자의 상식의 일부를 형성한다(아래 참조). 당업자에게 알려진 바와 같이, TADF 물질은 위에 제시된 바와 같이 최저 삼중항 상태로부터 최저 일중항 상태로 스스로 RISC하고, 후속하여 TADF를 방출할 수 있는 물질만이 아닐 수 있다. TADF 물질이 사실상 두 종류의 물질, 바람직하게는 두 개의 호스트 물질 H^B , 더욱 바람직하게는 p-호스트 물질 H^P 및 n-호스트 물질 H^N 으로부터 형성되는 엑시플렉스일 수 있음은 당업자에게 알려져 있다(아래 참조).
- [0218] (열 활성화) 지연 형광의 발생은 예를 들어 시간-분해(즉, 과도) 광발광(photoluminescence; PL) 측정으로부터 얻어진 감쇠 곡선에 기초하여 분석될 수 있다. 이를 위해, 1 내지 10중량%, 특히 10중량%의 각각의 에미터를 갖는 폴리(메틸 메타크릴레이트) (PMMA) 내의 각각의 에미터(즉, 가정된 TADF 물질)의 스핀 코팅된 필름이 샘플로 사용될 수 있다. 분석은 예를 들어 Edinburgh instruments의 FS5 형광 분광기를 사용하여 수행될 수 있다. 샘플 PMMA 필름은 큐벳에 넣어질 수 있고 측정하는 동안 질소 분위기하에서 유지될 수 있다. 데이터 수집은 잘 확립된 시간 상관 단일 광자 계수(time correlated single photon counting; TCSPC, 아래 참조) 기술을 사용하여 수행될 수 있다. 시간 및 신호 강도의 여러 자릿수의 크기에 대하여 전체 감쇠 역학을 수집하기 위하여, 네 개의 시간 창(200 ns, 1 μ s, 및 20 μ s, 및 >80 μ s 보다 더 긴 측정 범위)에서 측정이 수행되고 결합될 수 있다(아래 참조).
- [0219] TADF 물질은 상술한 전체 감쇠 역학과 관련하여 다음 두 개의 조건을 바람직하게 만족한다:
- [0220] (i) 감쇠 역학은 두 개의 시간 영역을 나타내고, 하나는 나노초(ns) 범위이고 다른 하나는 마이크로초(μ s) 범위이고; 및
- [0221] (ii) 시간 영역 모두에서 발광 스펙트럼의 형태가 일치하고;

[0222] 여기서, 첫 번째 감쇠 영역에서 방출된 광의 부분은 즉시 형광으로 간주되고 두 번째 감쇠 영역에서 방출된 광의 부분은 지연 형광으로 간주된다.

[0223] 지연 형광 및 즉시 형광의 비율은 소위 n-값(n-value)의 형태로 표현될 수 있으며, 이는 다음 방정식에 의하여 각각의 광발광 감쇠를 시간에 따라 적분하여 계산될 수 있다:

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

[0224]

[0225] 본 발명의 단락에서, TADF 물질은 바람직하게 0.05 보다 크거나($n > 0.05$), 더욱 바람직하게는 0.1 보다 크거나($n > 0.1$), 훨씬 더욱 바람직하게는 0.15 보다 크거나($n > 0.15$), 특히 바람직하게는 0.2 보다 크거나 ($n > 0.20$), 또는 심지어 0.25 보다 큰 ($n > 0.25$) n-값(지연 형광 대 즉시 형광의 비율)을 나타낸다.

[0226] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 0.05 보다 큰 ($n > 0.05$) n-값(지연 형광 대 즉시 형광의 비율)을 나타낸다.

[0227] 본 발명의 단락에서, TADF 물질 E^B는 최저 여기 일중항 상태 에너지 준위 E(S1^E)와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 E(T1^E) 사이의 에너지 차이에 대응되는 ΔE_{ST} 값이 0.4 eV 미만, 바람직하게는 0.3 eV 미만, 더욱 바람직하게는 0.2 eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.1 eV 미만, 또는 심지어 0.05 eV 미만의 값을 나타내는 것을 특징으로 한다. TADF 물질 E^B의 ΔE_{ST} 값을 결정하는 방법은 본문 뒷부분에 설명되어 있다.

[0228] 일반적으로 TADF 물질의 설계를 위한 하나의 접근법은 HOMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 공여 모이어티(donor moieties)와 LUMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 수용 모이어티(acceptor moieties)를 본 명세서에서 링커 그룹이라고 지칭되는 동일한 브릿지에 공유 결합시키는 것이다. 예를 들어 TADF 물질 E^B는 또한 동일한 수용 모이어티에 결합된 2개 또는 3개의 링커 그룹을 포함할 수 있고 추가적인 공여 모이어티 및 수용 모이어티가 2개 또는 3개의 링커 그룹 각각에 결합될 수 있다.

[0229] 하나 이상의 공여 모이어티 및 하나 이상의 수용 모이어티는 또한 서로 직접 (링커 그룹의 존재 없이) 결합될 수 있다.

[0230] 전형적인 공여 모이어티는 디페닐아민, 인돌, 카바졸, 아크리딘, 페녹사진, 및 관련 구조의 유도체이다. 특히, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이 전술한 공여 모티프에 융합되어 예를 들어 인돌로카바졸에 도달할 수 있다.

[0231] 벤젠 유도체, 비페닐 유도체, 및 어느 정도는 터페닐 유도체도 일반적인 링커 그룹이다.

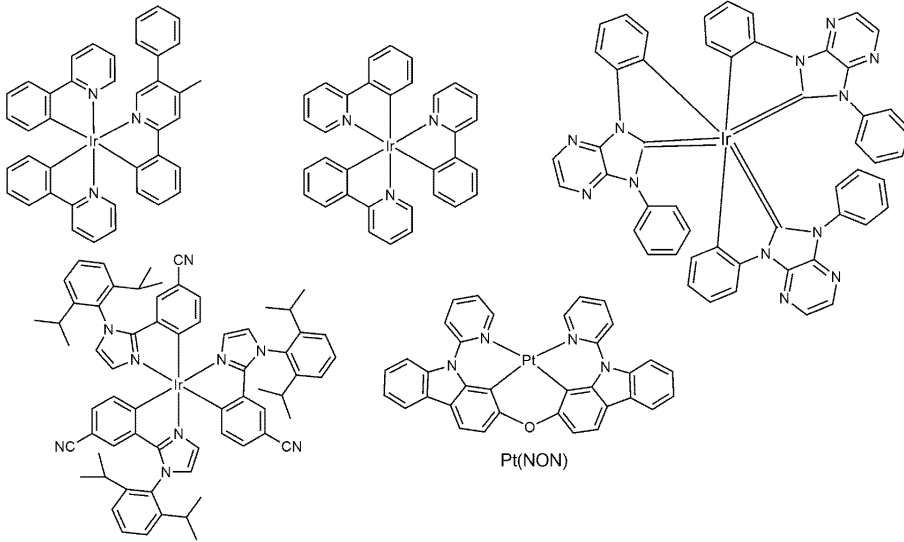
[0232] 니트릴 그룹은 TADF 물질에서 일반적인 수용 모이어티이고 알려진 예는 다음을 포함한다:

[0233] (i) 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 이들의 유도체와 같은 카바졸일 디시아노벤젠 화합물;

[0234] (ii) 4CzCNPY(2,3,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)-4-시아노피리딘) 및 이들의 유도체와 같은 카바졸일 시아노피리딘 화합물;

[0235] (iii) 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 이들의 유도체와 같은 카바졸일 시아노비페닐 화합물;

- [0236] 이러한 물질에서, 하나 이상의 니트릴 그룹은 수용 모이어티로서 불소 (F) 또는 트리플루오로메틸 (CF₃)로 대체될 수 있다.
- [0237] 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 트리아졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 티아디아졸 유도체, 헵타진 유도체, 1,4-디아자트리페닐렌 유도체, 벤조티아졸 유도체, 벤조옥사졸 유도체, 퀴놀살린 유도체, 및 디아자플루오렌 유도체와 같은 질소-헤테로사이클은 TADF 분자의 구성에 사용되는 잘 알려진 수용 모이어티이다. 예를 들어, 트리아진 수용체를 포함한 TADF 물질의 알려진 예는 PIC-TRZ(7,7'-(6-([1,1'-비페닐]-4-일)-1,3,5-트리아진-2,4-다이일)비스(5-페닐-5,7-디하이드로인돌로[2,3-b]카바졸)), mBFCzTrz(5-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸), 및 DCzTrz (9,9'-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸))를 포함한다.
- [0238] TADF 물질의 다른 그룹은 벤조페논과 같은 디아릴 케톤 또는 4-벤조일피리딘, 9,10-안트라퀴논, 9H-크산텐-9-온 및 이들의 유도체와 같은 (헤테로아릴)아릴 케톤을 수용 모이어티로서 포함하고, 여기에 공여 모이어티(일반적으로 카바졸일 치환기)가 결합되어 있다. TADF 물질의 예는 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) 각각을 포함한다.
- [0239] 선폭사이드, 특히 디페닐 선폭사이드는 일반적으로 TADF 물질의 구성을 위한 수용 모이어티로서 사용되고 알려진 예는 4-PC-DPS(9-페닐-3-(4-(페닐설폰닐)페닐)-9H-카바졸), DitBu-DPS(9,9'-(설폰닐비스(4,1-페닐렌))비스(9H-카바졸)), 및 TXO-PhCz(2-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H-티오크산텐-9-온 10,10-디옥사이드)를 포함한다.
- [0240] 형광 에미터 F가 또한 본 명세서에서 정의된 바와 같이 TADF를 나타낼 수 있고 심지어 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B일 수 있음이 이해된다. 결과적으로, 본 명세서에 정의된 바와 같이 작은 FWHM 에미터 S^B는 또한 본 명세서에 정의된 TADF 물질 E^B일 수도 있고 아닐 수도 있다.
- [0241] 인광, 즉 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1)로부터의 발광은 스핀-금지 과정(spin-forbidden process)이다. 당업자에게 알려진 바와 같이, 인광은 (분자내) 스핀-궤도 상호작용(spin-orbit interaction) (소위 (내부) 중원자 효과(heavy atom effect))을 이용함으로써 촉진(향상)될 수 있다. 본 발명의 단락에서 인광 물질 P^B는 실온(즉, 대략 20 °C)에서 인광을 방출할 수 있는 인광 에미터이다.
- [0242] 본 명세서에서, 인광 물질 P^B는 칼슘(Ca)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소 중 적어도 하나의 원자를 포함하는 것이 바람직하다. 더욱 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 인광 물질 P^B는 전이 금속 원자, 특히 아연(Zn)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 전이 금속 원자를 포함한다. 인광 물질 P^B에 바람직하게 포함된 전이 금속 원자는 임의의 산화 상태로 존재할 수 있다 (그리고 각 원소의 이온으로서 또한 존재할 수도 있음).
- [0243] 광전자 소자에 사용되는 인광 물질 P^B가 종종 본 발명의 단락에서 Ir, Pd, Pt, Au, Os, Eu, Ru, Re, Ag 및 Cu, 바람직하게는 Ir, Pt 및 Pd, 더욱 바람직하게는 Ir 및 Pt의 착체라는 것은 당업자에게 상식이다. 숙련된 기술자는 광전자 소자에서 어떤 물질이 인광 물질 P^B로서 적합한지와 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 또한, 숙련된 기술자는 광전자 소자에서 인광 물질로 사용하기 위한 인광 착체의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변경을 통해 착체의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0244] 숙련된 기술자는 광전자 소자에 사용되는 인광 물질 P^B로서 어떤 물질이 적합한지와 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 이와 관련하여, 숙련된 기술자는 광전자 소자에서 인광 물질로 사용하기 위한 인광 착체의 설계 원리에 특히 익숙하고 구조적 변경을 통해 착체의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0245] (예를 들어 조성물의 형태 또는 광전자 소자의 EML에서) 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질 P^B의 예가 최신 기술에 개시되어 있다(이하 참조). 예를 들어, 다음의 금속 착체는 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질 P^B이다:



[0246]

[0247]

본 발명의 단락에서 작은 반치폭(FWHM) 에미터 S^B 는 0.35 eV 이하 (≤ 0.35 eV), 바람직하게는 0.30 eV 이하 (≤ 0.30 eV), 특히 0.25 eV 이하 (≤ 0.25 eV)의 FWHM을 나타내는 발광 스펙트럼을 갖는 임의의 에미터(즉, 에미터 물질)이다. 달리 명시되지 않는 한, 이는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 각각의 에미터의 발광 스펙트럼을 기초로 판단되며, 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트) PMMA 또는 mCBP 내의 에미터 1 내지 5중량%, 바람직하게 2중량%로 측정된다. 대체적으로, 작은 FWHM 에미터 S^B 의 발광 스펙트럼은 일반적으로 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 디클로로메탄 또는 톨루엔 내의 에미터 S^B 0.001 내지 0.2 mg/mL 용액으로 측정될 수 있다.

[0248]

작은 FWHM 에미터 S^B 는 형광 에미터 F, 인광 에미터(예를 들어 인광 물질 P^B) 및/또는 TADF 에미터(예를 들어 TADF 물질 E^B)일 수 있다. 위에서 설명한 TADF 물질 E^B 및 인광 물질 P^B 의 경우, 발광 스펙트럼은 실온(즉, 대략 20°C)에서 본 발명의 각 분자 E^B 또는 P^B 의 10중량%를 포함한 폴리(메틸 메타크릴레이트) PMMA 내의 각각의 물질의 스핀 코팅된 필름으로부터 측정된다.

[0249]

당업자에게 알려진 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 용이하게 결정된다. 보고된 모든 FWHM 값은 일반적으로 주 발광 피크(즉, 강도가 가장 높은 피크)로 지칭된다. FWHM(본 명세서에서 바람직하게는 전자 볼트, eV로 보고됨)을 결정하는 수단은 당업자의 상식의 일부이다. 예를 들어, 발광 스펙트럼의 주 발광 피크가 발광 스펙트럼에서 나노미터 (nm)로 얻은 두 파장 λ_1 및 λ_2 모두에서 최대 발광의 절반(즉, 최대 발광 강도의 50%)에 도달한 경우, 전자 볼트 (eV) 단위의 FWHM은 일반적으로(그리고 본 명세서에서) 다음 방정식을 사용하여 결정된다:

[0250]

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

[0251]

본 발명의 단락에서, 작은 FWHM 에미터 S^B 는 유기 에미터이고, 이는 본 발명의 단락에서 임의의 전이 금속을 포함하지 않는다는 것을 의미한다. 바람직하게, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 대부분 수소 (H), 탄소 (C), 질소 (N), 및 보론 (B) 원소로 구성되지만, 예를 들어 또한 산소 (O), 규소(Si), 불소(F), 및 브롬 (Br)도 포함할 수 있다.

[0252]

또한, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 추가로 TADF를 나타내거나 나타내지 않을 수 있는 형광 에미터 F인 것이 바람직하다.

[0253]

바람직하게, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 다음 요건 중 적어도 하나를 만족한다:

[0254] (i) 보론(B)-함유 에미터이고, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론 (B)임을 의미한다;

[0255] (ii) 적어도 두 개의 방향족 고리가 서로 융합된 다환 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조를 포함한다(예를 들어, 안트라센, 파이렌 또는 이들의 아자-유도체).

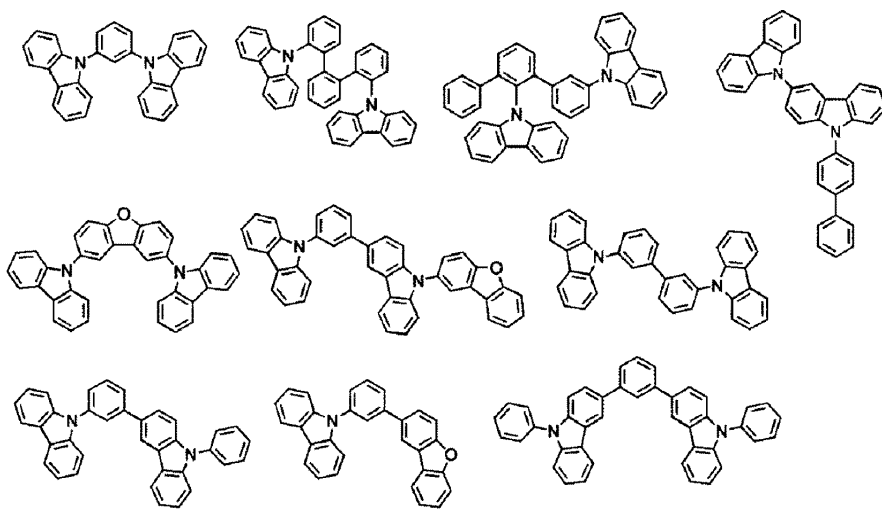
[0256] 당업자에게 알려진 바와 같이, EML의 호스트 물질 H^B 는 상기 EML을 통해 전자 또는 양전하를 수송할 수 있고 또한 호스트 물질 H^B 에 도핑된 적어도 하나의 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있다. 숙련된 기술자는 광전자 소자(즉, OLED)의 EML에 포함된 호스트 물질 H^B 는 일반적으로 전압 및 전류를 인가할 때 상기 소자로부터 발광에 특별히 관여하지 않는다는 것을 이해한다. 당업자는 또한 임의의 호스트 물질 H^B 가 높은 정공 이동도를 나타내는 p-호스트 H^P , 높은 전자 이동도를 나타내는 n-호스트 H^N , 또는 높은 정공 이동도 및 높은 전자 이동도 모두를 나타내는 양극성 호스트 물질 H^{BP} 일 수 있다는 사실에 익숙하다.

[0257] 당업자에게 알려진 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 물질을 포함할 수 있고 n-호스트 H^N 로서 T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진)와 p-호스트 H^P 로서 CBP, mCP, mCBP, 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오펜)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트를 포함한 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다.

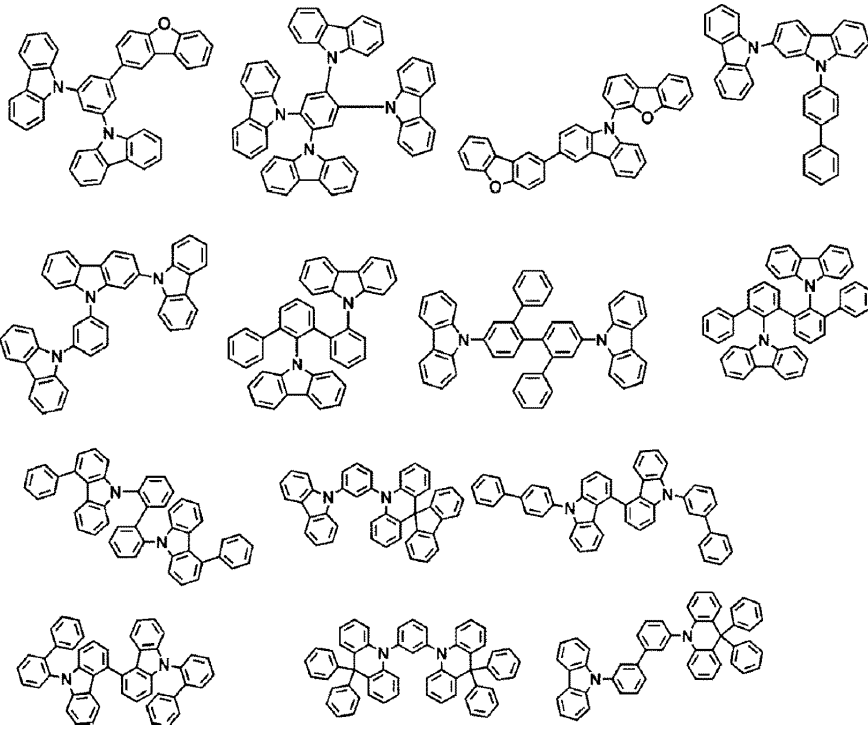
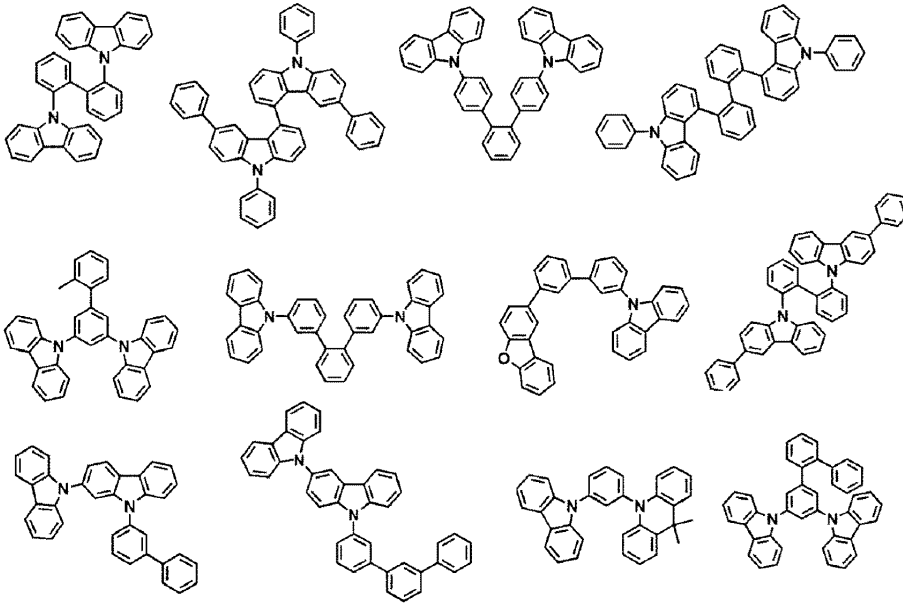
[0258] EML은 적어도 하나의 p-호스트 H^P 와 하나의 n-호스트 H^N 을 갖는 소위 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있고; 여기서 n-호스트 H^N 은 피리딘, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 및 1,2,3-트리아진으로부터 유래된 그룹을 포함하고, p-호스트 H^P 는 인돌, 이소인돌, 및 바람직하게는 카바졸에서 유래된 그룹을 포함한다.

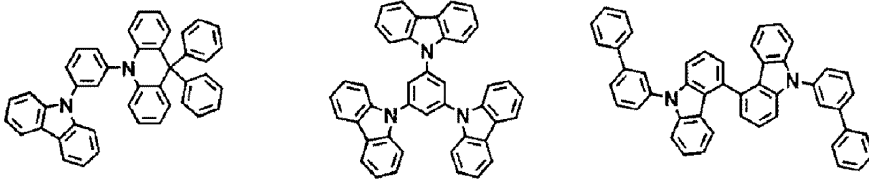
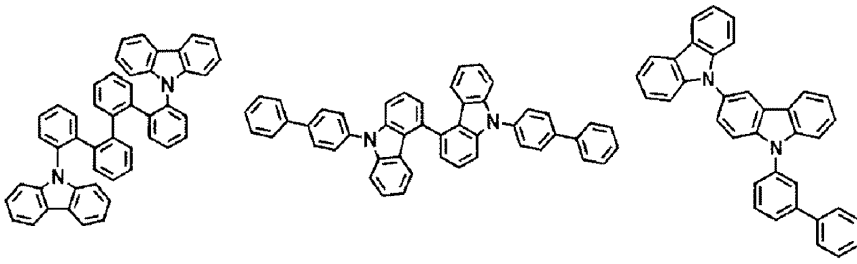
[0259] 당업자는 어떤 물질이 광전자 소자에 사용하기에 적합한 호스트 물질인지 알고 있다. 최신 기술에서 사용된 임의의 호스트 물질이 본 발명의 단락에서 적합한 호스트 물질 H^B 일 수 있음이 이해된다.

[0260] 본 발명의 단락에서 p-호스트 물질 H^P 인 물질 H^B 의 예는 하기에 열거되어 있다:

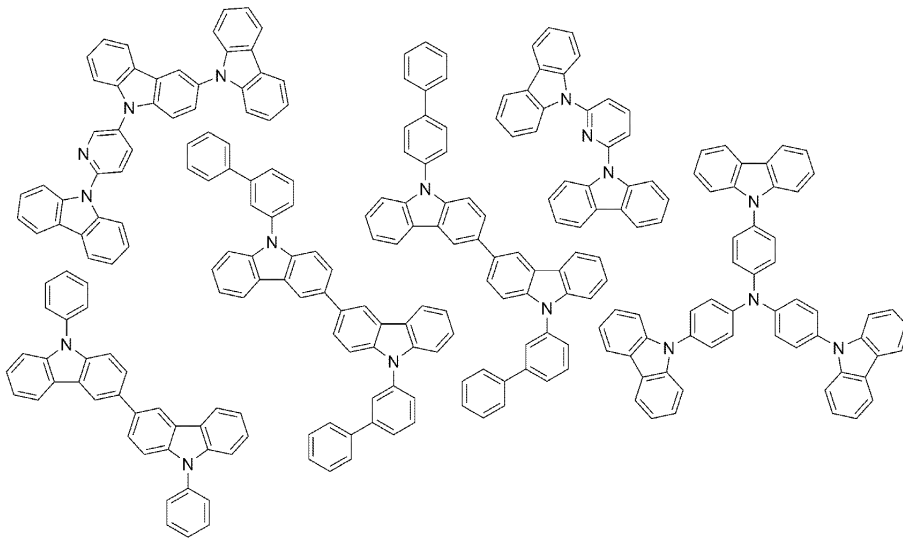


[0261]

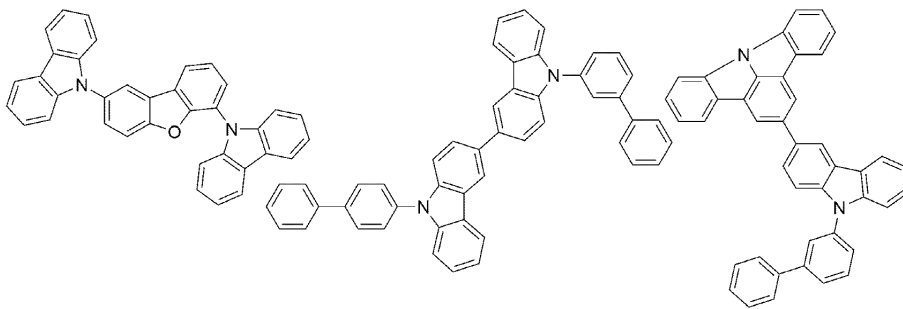




[0264]



[0265]



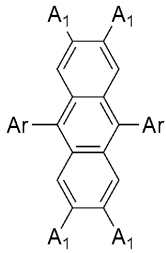
[0266]

- [0271] 당업자는 동일한 층, 특히 동일한 EML에 포함된 임의의 물질뿐만 아니라 인접한 층 내에 있고 인접한 층 사이의 계면에서 매우 근접하게 되는 물질은 함께 엑시플렉스를 형성할 수 있음을 이해한다. 당업자는 엑시플렉스를 형성하는 물질의 쌍, 특히 p-호스트 H^P 와 n-호스트 H^N 의 쌍을 선택하는 방법 및 HOMO-에너지 준위 요건 및/또는 LUMO-에너지 준위 요건을 포함하는 상기 물질의 쌍의 두 성분에 대한 선택 기준을 알고 있다. 즉, 엑시플렉스 형성이 요구되는 경우, 한 성분, 예를 들어 p-호스트 물질 H^P 의 최고 점유 분자 궤도(HOMO)가 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N 의 HOMO보다 에너지가 적어도 0.20 eV 더 높을 수 있고, 한 성분, 예를 들어 p-호스트 물질 H^P 의 최저 비점유 분자 궤도(LUMO)가 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N 의 LUMO보다 에너지가 적어도 0.20 eV 더 높을 수 있다. 엑시플렉스가 광전자 소자, 특히 OLED의 EML 내에 존재하는 경우, 에미터 물질의 기능을 가질 수 있고, 전압 및 전류가 상기 소자에 인가될 때 발광할 수 있음은 당업자의 상식에 속한다. 또한 최신 기술로부터 일반적으로 알려진 바와 같이, 엑시플렉스는 또한 비발광성일 수 있고 예를 들어 광전자 소자의 EML에 포함되는 경우 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있다.
- [0272] 당업자에게 알려진 바와 같이, 삼중항-삼중항 소멸(triplet-triplet annihilation; TTA) 물질은 호스트 물질 H^B 로 사용될 수 있다. TTA 물질은 삼중항-삼중항 소멸을 가능하게 한다. 삼중항-삼중항 소멸은 광자 상향 변환(photon up-conversion)을 바람직하게 야기할 수 있다. 따라서, 2개, 3개 또는 심지어 더 많은 광자가 TTA 물질 H^{TTA} 의 최저 여기 삼중항 상태($T1^{TTA}$)로부터 제1 여기 일중항 상태 $S1^{TTA}$ 로의 광자 상향 변환을 용이하게 할 수 있다. 바람직한 구현예에서, 두 개의 광자가 $T1^{TTA}$ 로부터 $S1^{TTA}$ 로 광자 상향 변환을 용이하게 한다. 따라서 삼중항-삼중항 소멸은 다수의 에너지 전달 단계를 통해 2개(또는 선택적으로 2개 초과)의 저진동수 광자를 1개의 고진동수 광자로 결합할 수 있는 과정일 수 있다.
- [0273] 선택적으로, TTA 물질은 흡수 모이어티, 센서타이저 모이어티, 및 발광 모이어티(또는 소멸제 모이어티)를 포함할 수 있다. 이러한 단락에서, 예를 들어 에미터 모이어티는 벤젠, 비페닐, 터페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 파이렌, 크라이센, 페릴렌, 아줄렌과 같은 다환 방향족 모이어티일 수 있다. 바람직한 구현예에서, 다환 방향족 모이어티는 안트라센 모이어티 또는 이의 유도체를 포함한다. 센서타이저 모이어티 및 발광 모이어티는 2개의 상이한 화학적 화합물(즉, 분리된 화학적 실체)에 위치될 수 있거나 또는 하나의 화학적 화합물에 포함된 두 모이어티일 수 있다.
- [0274] 본 발명에 따르면, 삼중항-삼중항 소멸(TTA) 물질은 삼중항-삼중항 소멸에 의해 제1 여기 삼중항 상태 $T1^N$ 으로부터 제1 여기 일중항 상태 $S1^N$ 으로 에너지를 변환한다.
- [0275] 본 발명에 따르면, TTA 물질은 최저 여기 삼중항 상태 ($T1^N$)로부터 삼중항-삼중항 소멸을 나타내어 $T1^N$ 에너지의 최대 2배의 에너지를 갖는 삼중항-삼중항 소멸된 제1 여기 일중항 상태 $S1^N$ 을 생성하는 것을 특징으로 한다.
- [0276] 본 발명의 일 구현예에서, TTA 물질은 $T1^N$ 으로부터 삼중항-삼중항 소멸을 나타내어 $T1^N$ 에너지의 1.01 내지 2배, 1.1 내지 1.9배, 1.2 내지 1.5배, 1.4 내지 1.6배, 또는 1.5 내지 2배의 에너지를 갖는 $S1^N$ 을 생성하는 것을 특징으로 한다.
- [0277] 본 명세서에서 사용되는 "TTA 물질" 및 "TTA 화합물"이란 용어는 서로 혼용되어 이해될 수 있다.
- [0278] 일반적인 "TTA 물질"은 Kondakov (Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2015, 373:20140321)가 설명한 바와 같이 청색 형광 OLED와 관련된 최신 기술에서 발견될 수 있다. 이러한 청색 형광 OLED는 EML의 주성분(호스트)으로 안트라센 유도체와 같은 방향족 탄화수소를 사용한다.
- [0279] 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 감응된(sensitized) 삼중항-삼중항 소멸을 가능하게 한다. 선택적으로, TTA 물질은 하나 이상의 다환 방향족 구조를 포함할 수 있다. 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 적어도 하나의 다환 방향족 구조 및 적어도 하나의 추가 방향족 잔기를 포함한다.
- [0280] 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 적어도 1.1배, 적어도 1.2배, 적어도 1.3배, 적어도 1.5배 및 바람직하게는 2배 이하의 더 큰 일중항-삼중항 에너지 분할, 즉 제1 여기 일중항 상태 $S1^N$ 과 최저 여기 삼중항 상태 $T1^N$ 의 에너

지 차이를 갖는다.

[0281] 본 발명의 바람직한 구현예에서, TTA 물질 H^{TTA} 는 안트라센 유도체이다.

[0282] 일 구현예에서, TTA 물질 H^{TTA} 는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이다:



[0283]

화학식 4

[0284]

여기서

[0285]

각각의 Ar은 서로 독립적으로, C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴기; 및

[0286]

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴기;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0287]

각각의 A₁은 서로 독립적으로,

[0288]

수소;

[0289]

중수소;

[0290]

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴기;

[0291]

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴기; 및

[0292]

C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기;로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0293]

일 구현예에서, TTA 물질 H^{TTA} 는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서

[0294]

각각의 Ar은 서로 독립적으로, C₆-C₂₀-아릴기, C₃-C₂₀-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₁₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₂₀-아릴기; 및

[0295]

C₆-C₂₀-아릴기, C₃-C₂₀-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₁₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₂₀-헤테로아릴기;로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0296]

각각의 A₁은 서로 독립적으로,

[0297]

수소;

[0298]

중수소;

[0299]

C₆-C₂₀-아릴기, C₃-C₂₀-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₁₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₆-C₂₀-아릴기;

[0300]

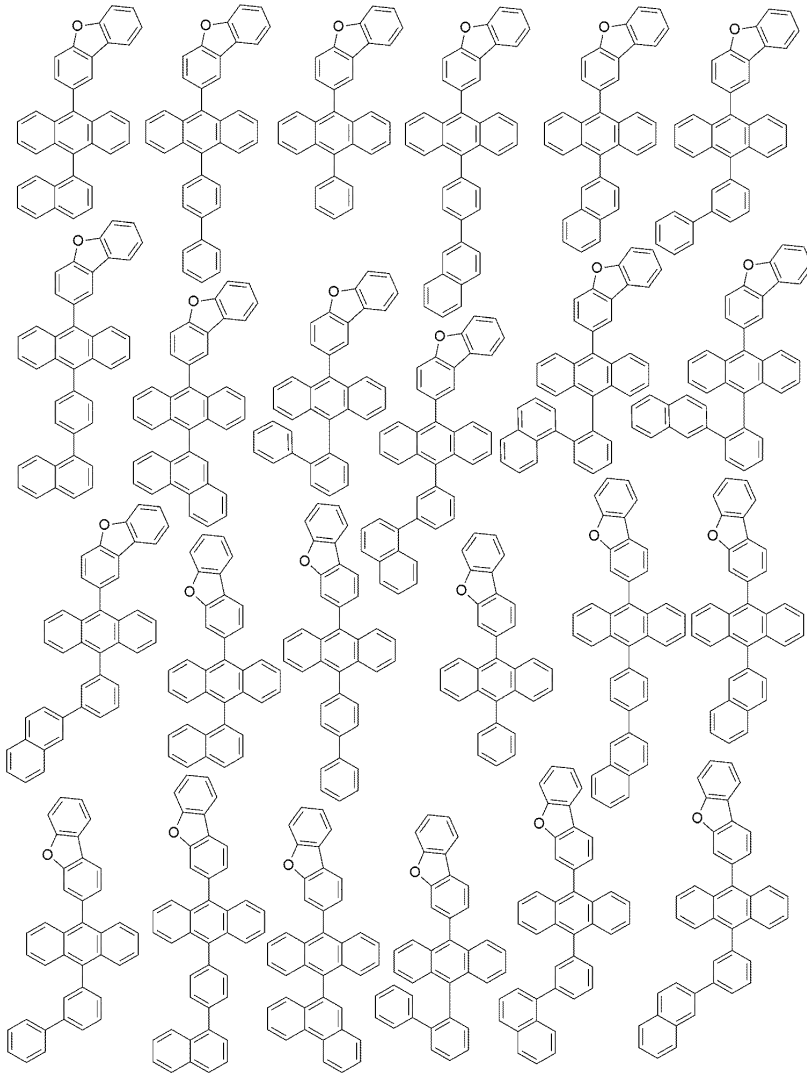
C₆-C₂₀-아릴기, C₃-C₂₀-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₁₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상

[0301]

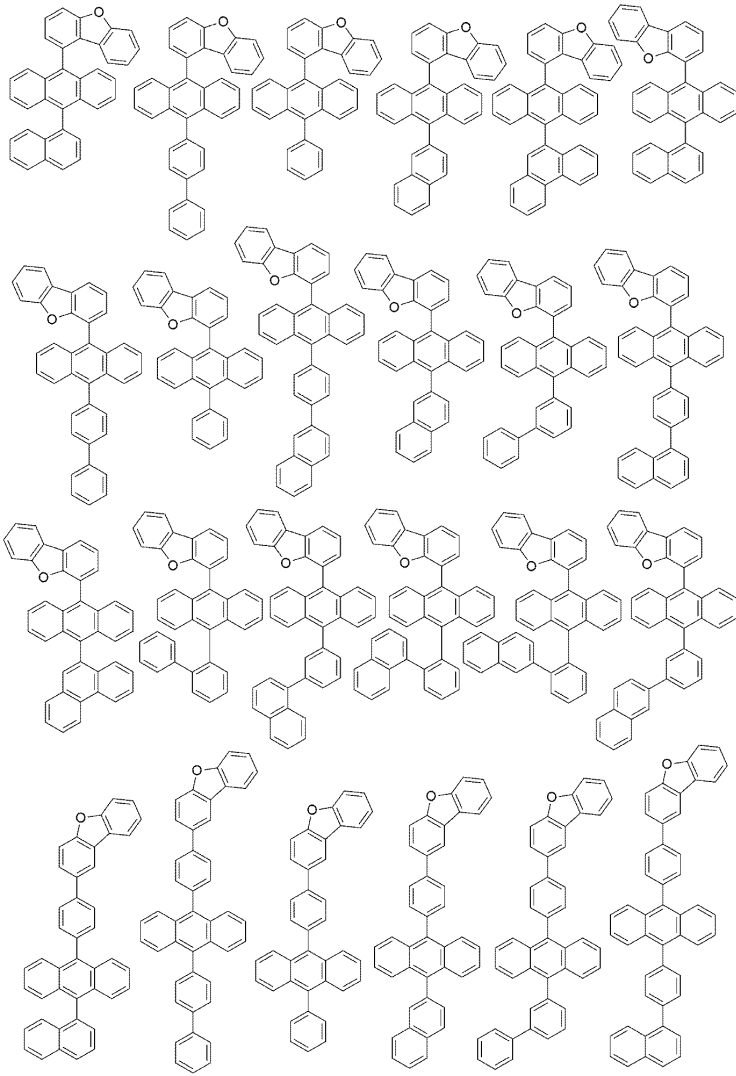
의 잔기로 선택적으로 치환된 C₃-C₂₀-헤테로아릴기; 및

- [0302] C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C₁-C₁₀-(헤테로)알킬기;로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0303] 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 적어도 하나의 A₁은 수소이다. 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 적어도 둘의 A₁은 수소이다. 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 적어도 셋의 A₁은 수소이다. 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 모든 A₁은 각각 수소이다.
- [0304] 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 하나의 Ar은 페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 파이레닐기, 트리페닐레닐기, 디벤조안트라세닐기, 플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 벤조나프토피라닐기, 벤조나프토티오페닐기, 디벤조피라닐기, 디벤조티오페닐기로 이루어진 군으로부터 선택된 잔기이고,
- [0305] 이러한 잔기는 C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0306] 일 구현예에서, H^{TTA}는 화학식 4의 안트라센 유도체이고, 여기서 두 개의 Ar은 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 파이레닐기, 트리페닐레닐기, 디벤조안트라세닐기, 플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 벤조나프토피라닐기, 벤조나프토티오페닐기, 디벤조피라닐기, 디벤조티오페닐기로 이루어진 군으로부터 선택된 잔기이고,
- [0307] 이러한 잔기는 C₆-C₆₀-아릴기, C₃-C₅₇-헤테로아릴기, 할로젠, 및 C₁-C₄₀-(헤테로)알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환될 수 있다.

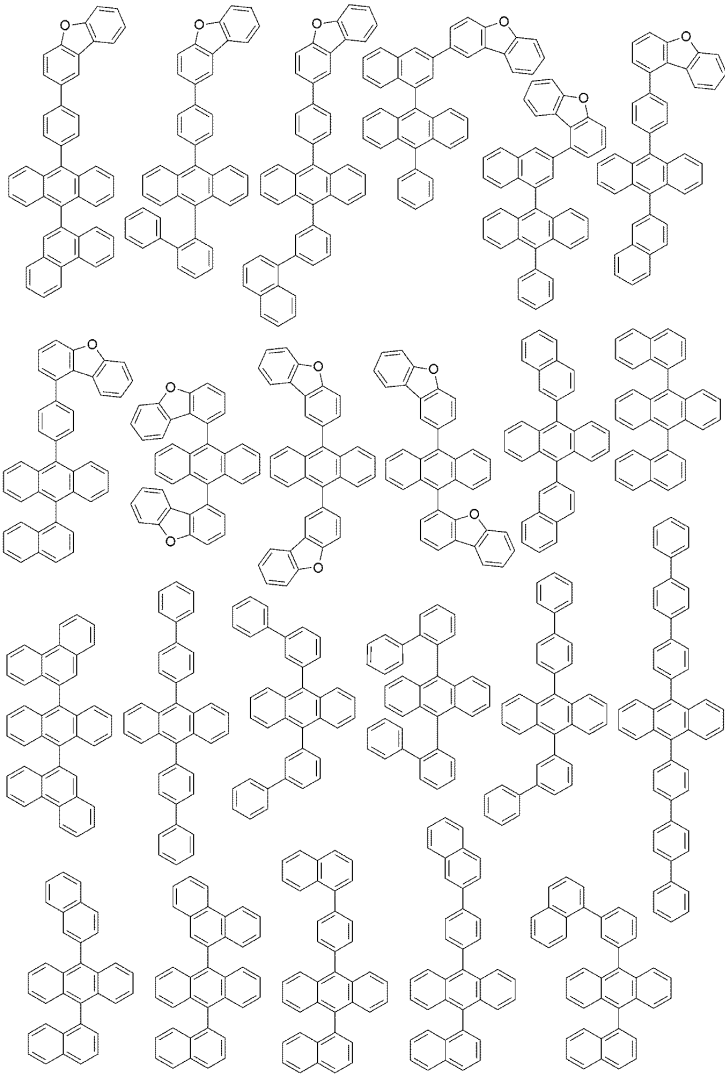
[0308] 일 구현예에서, TTA 물질 H^{TTA} 는 하기로부터 선택된 안트라센 유도체이다:



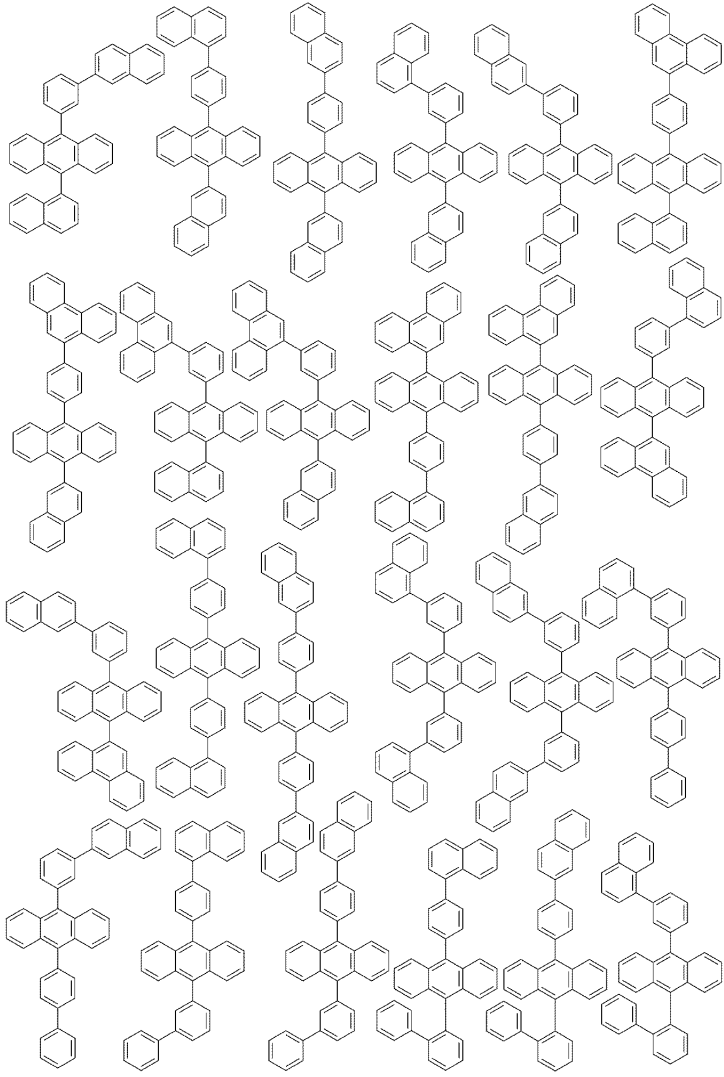
[0309]



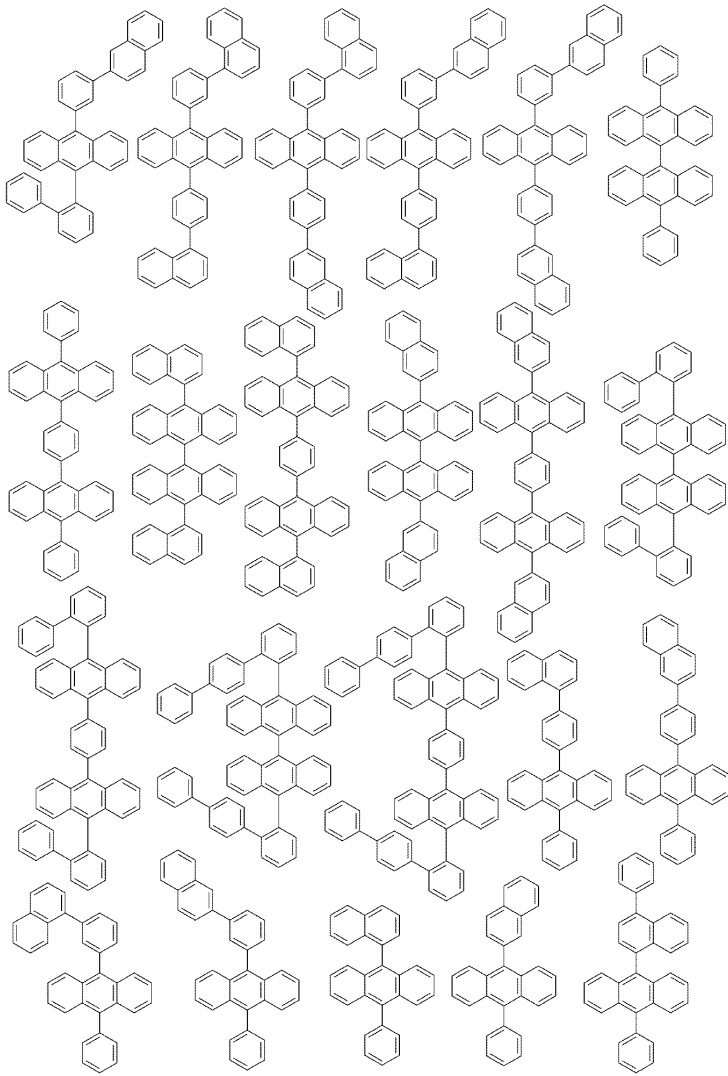
[0310]



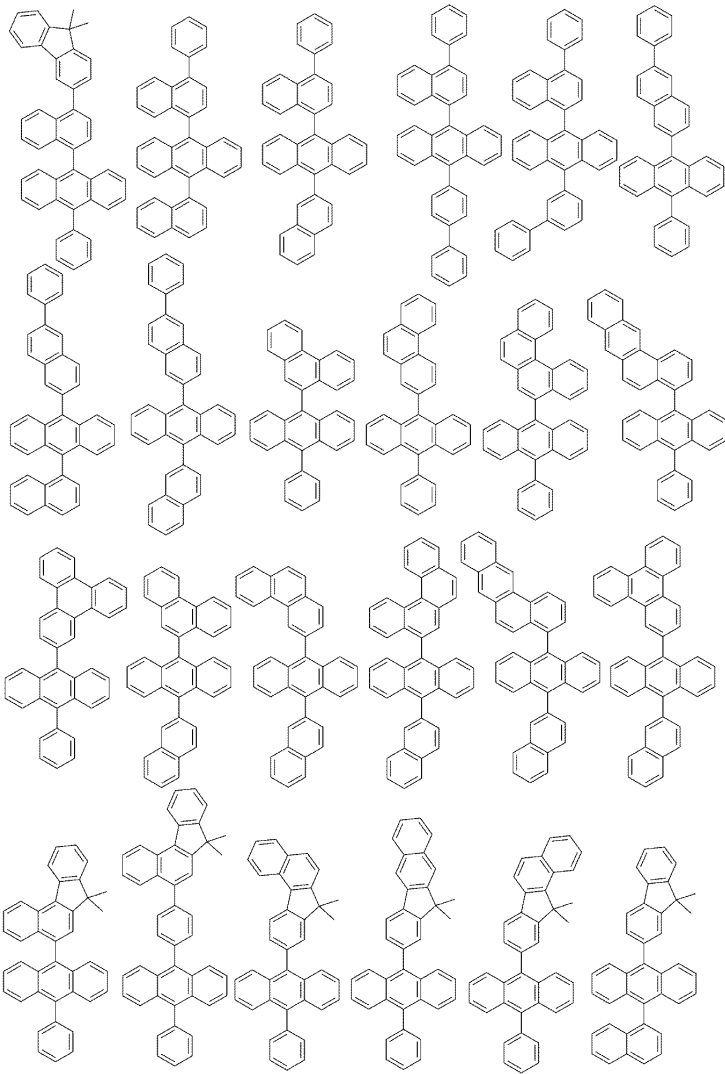
[0311]



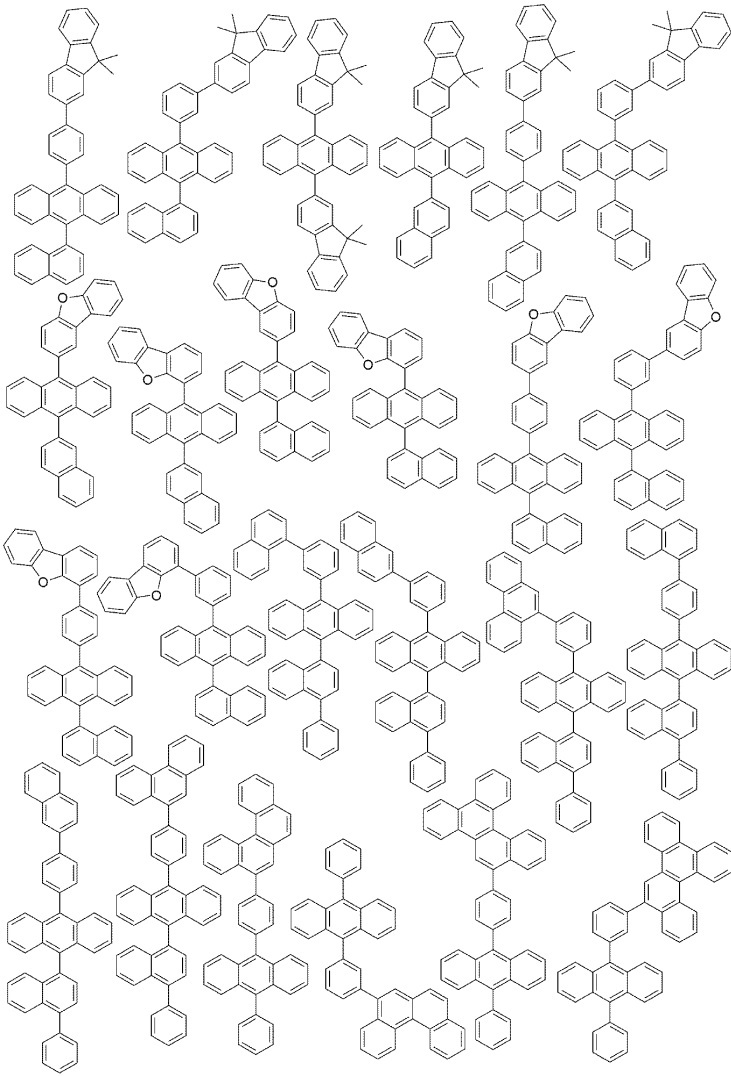
[0312]



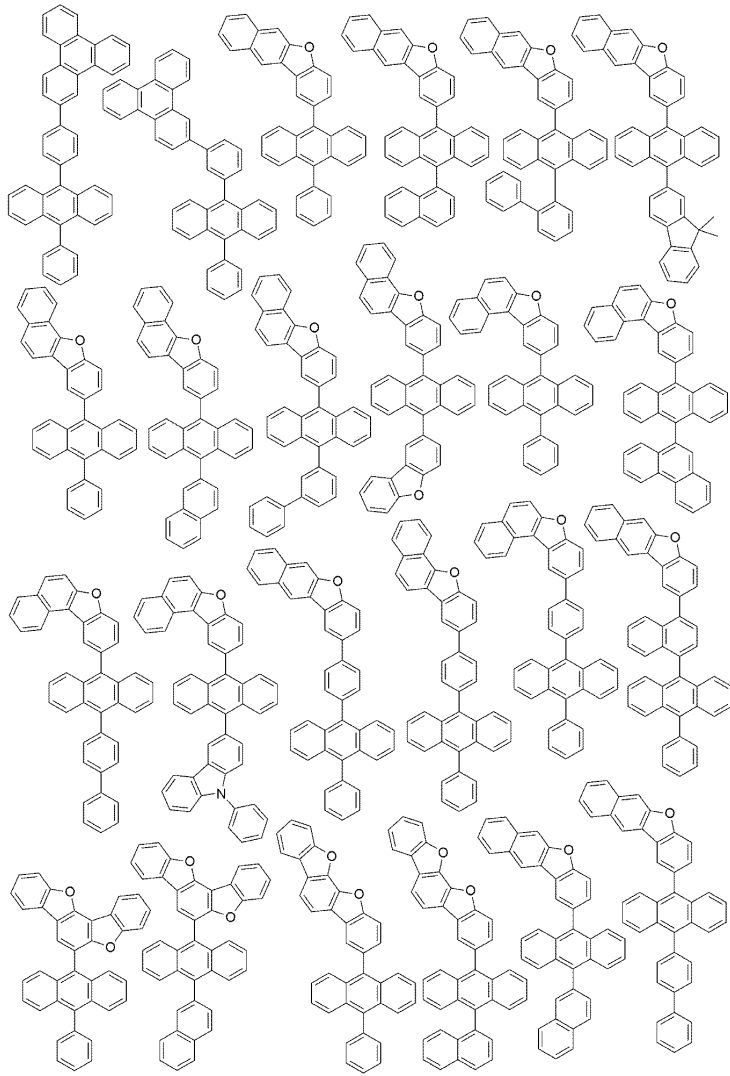
[0313]



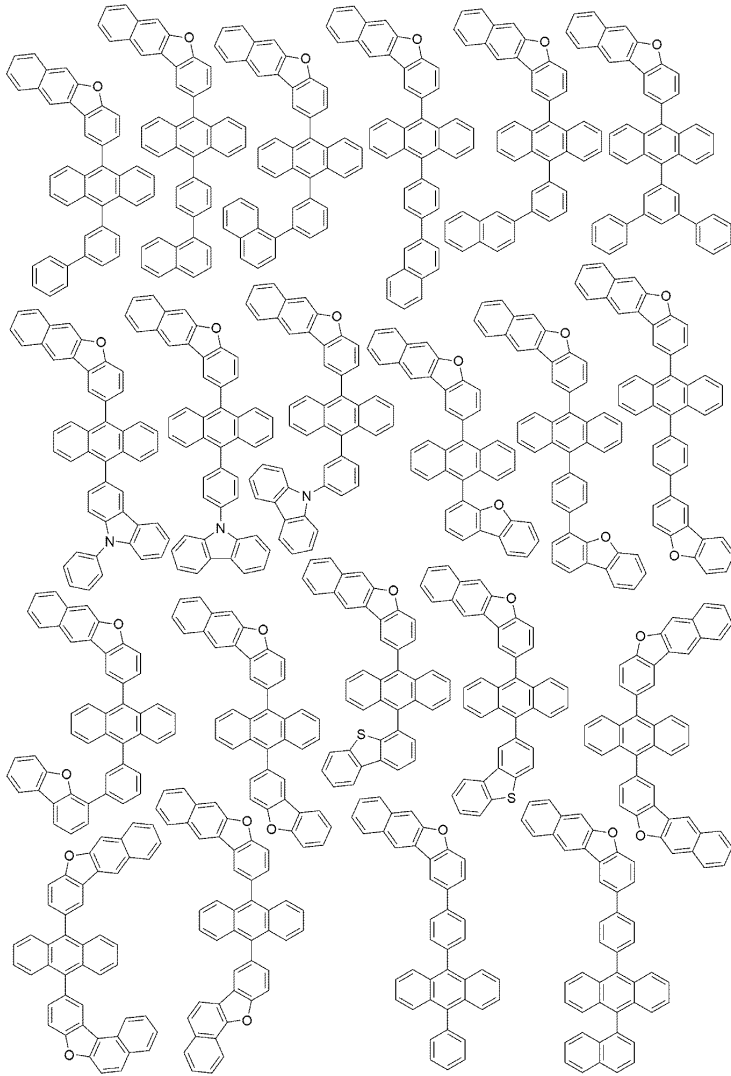
[0314]



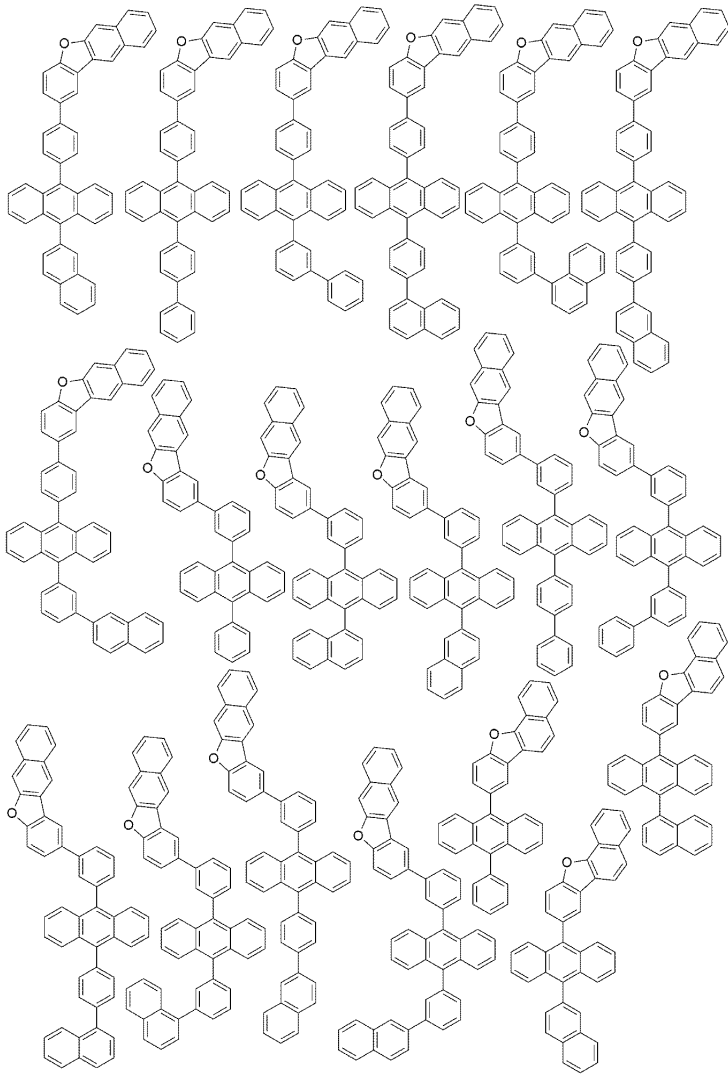
[0315]



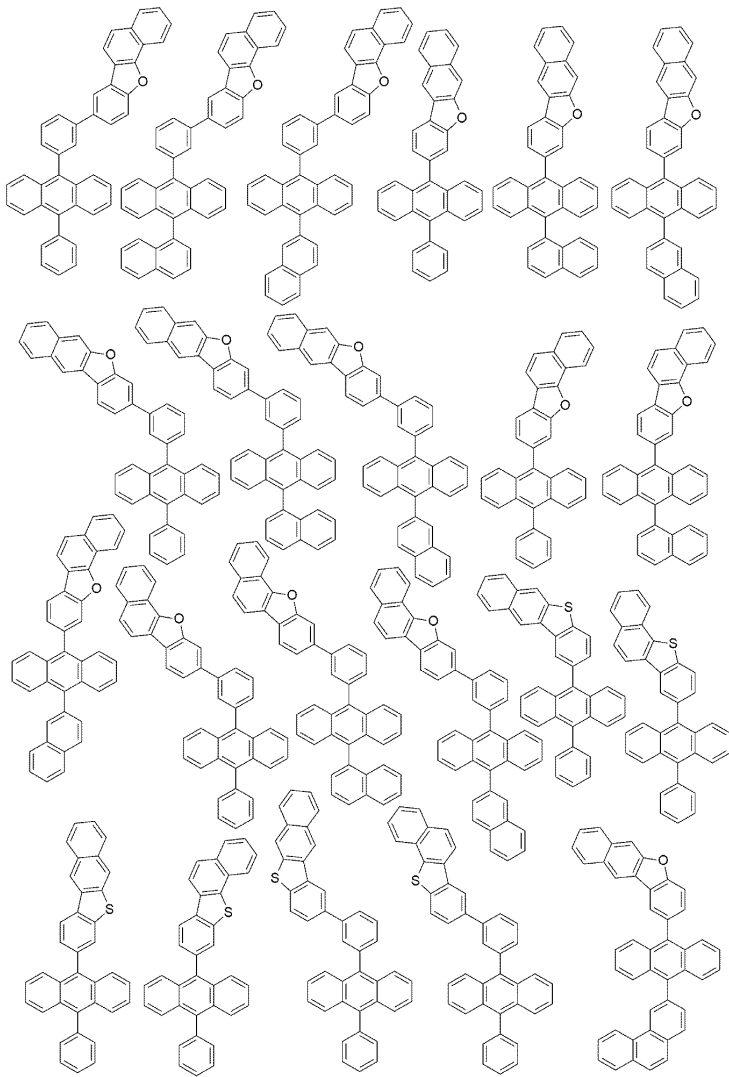
[0316]



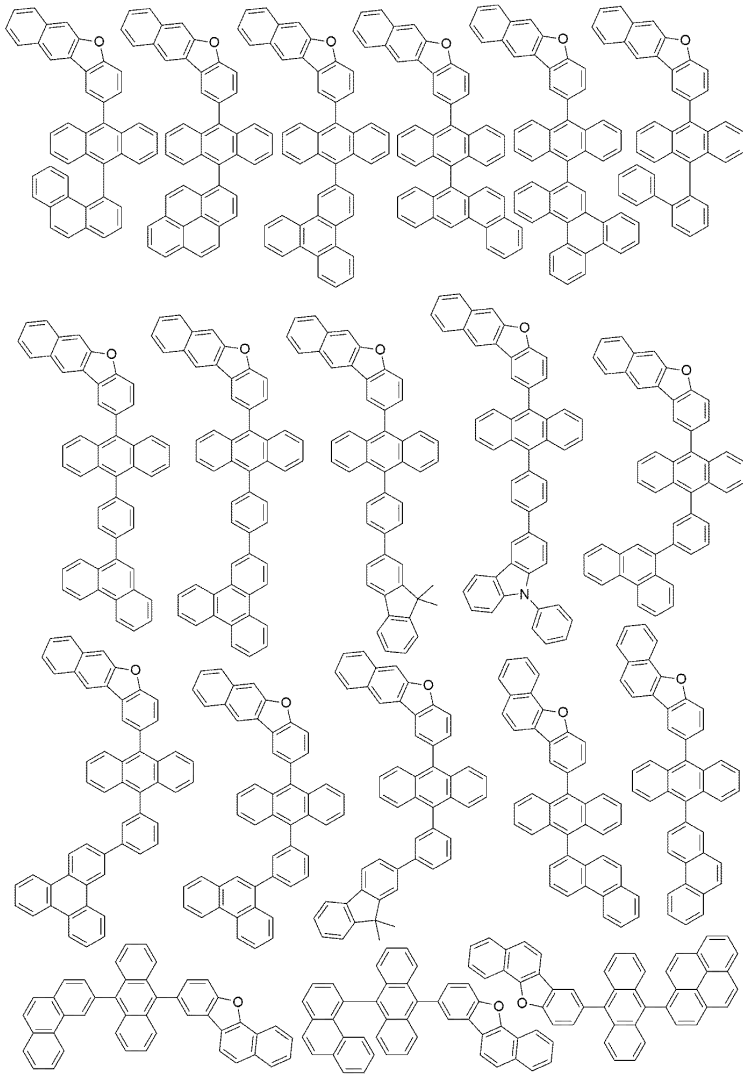
[0317]



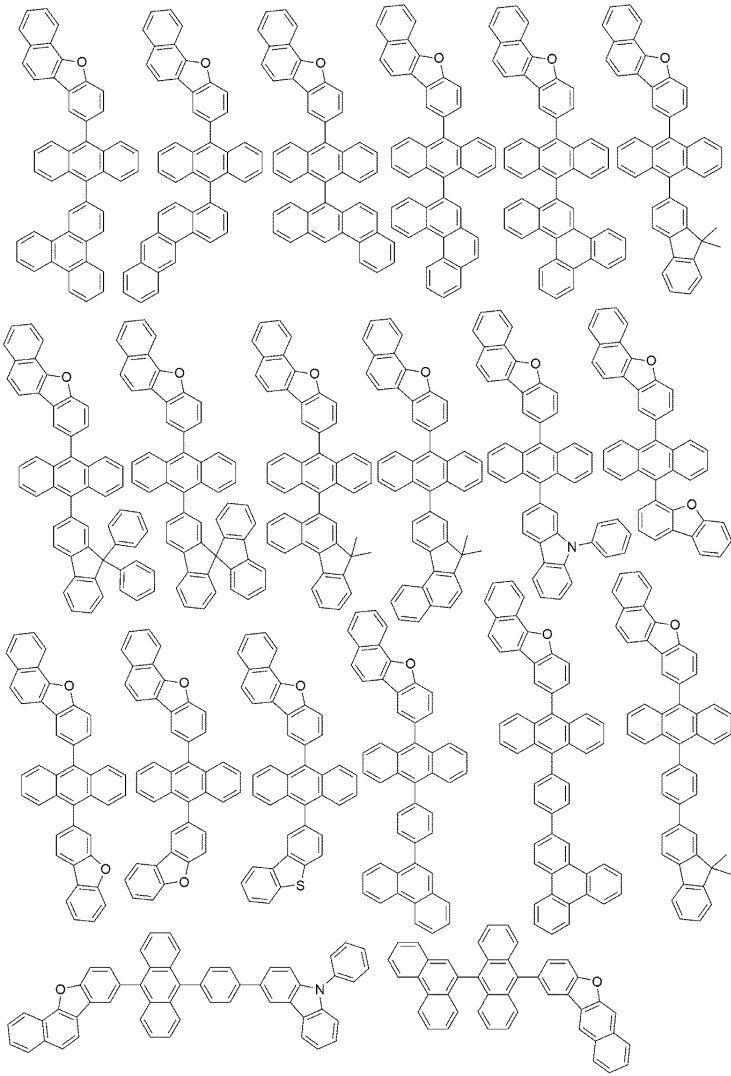
[0318]



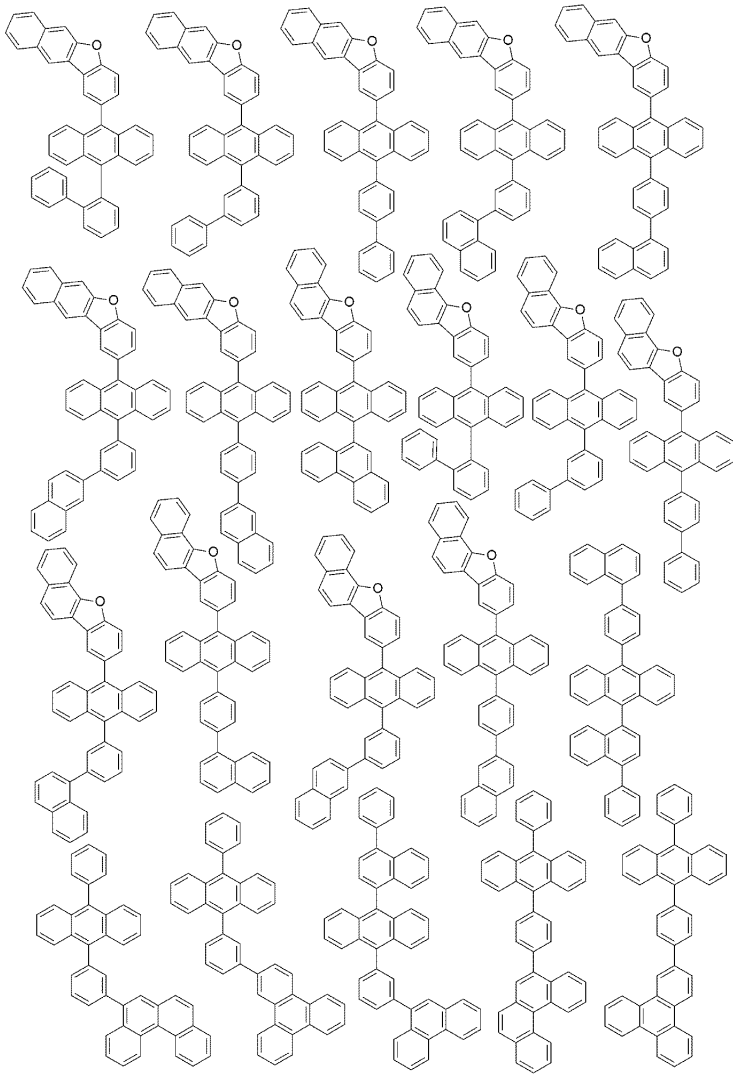
[0319]



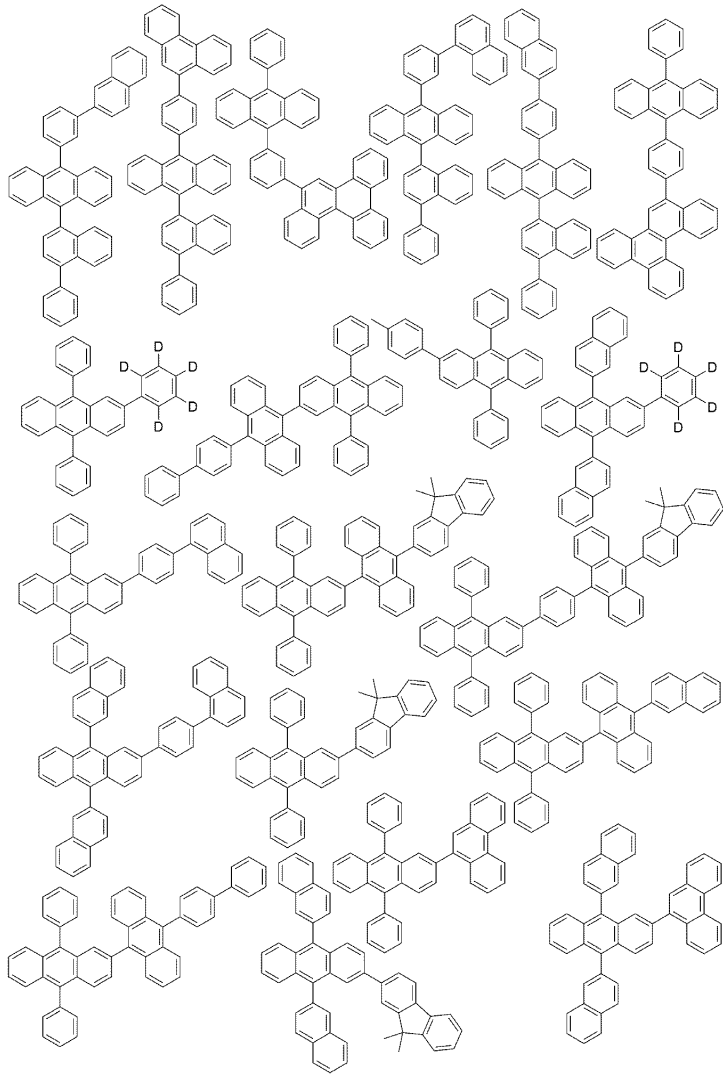
[0320]



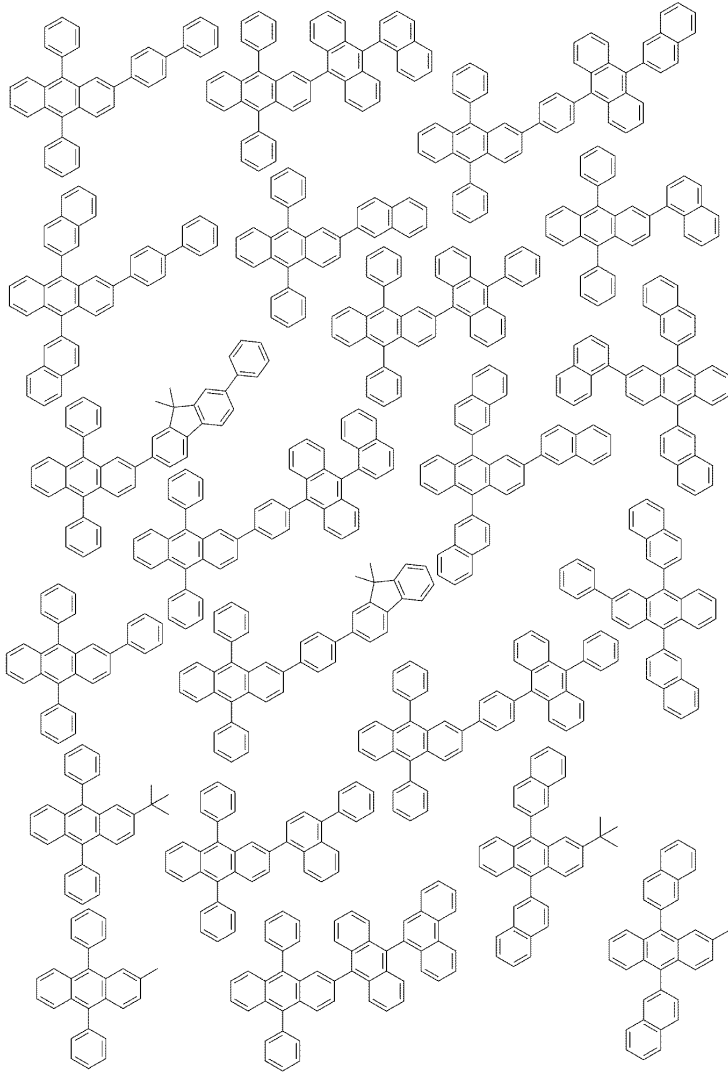
[0321]



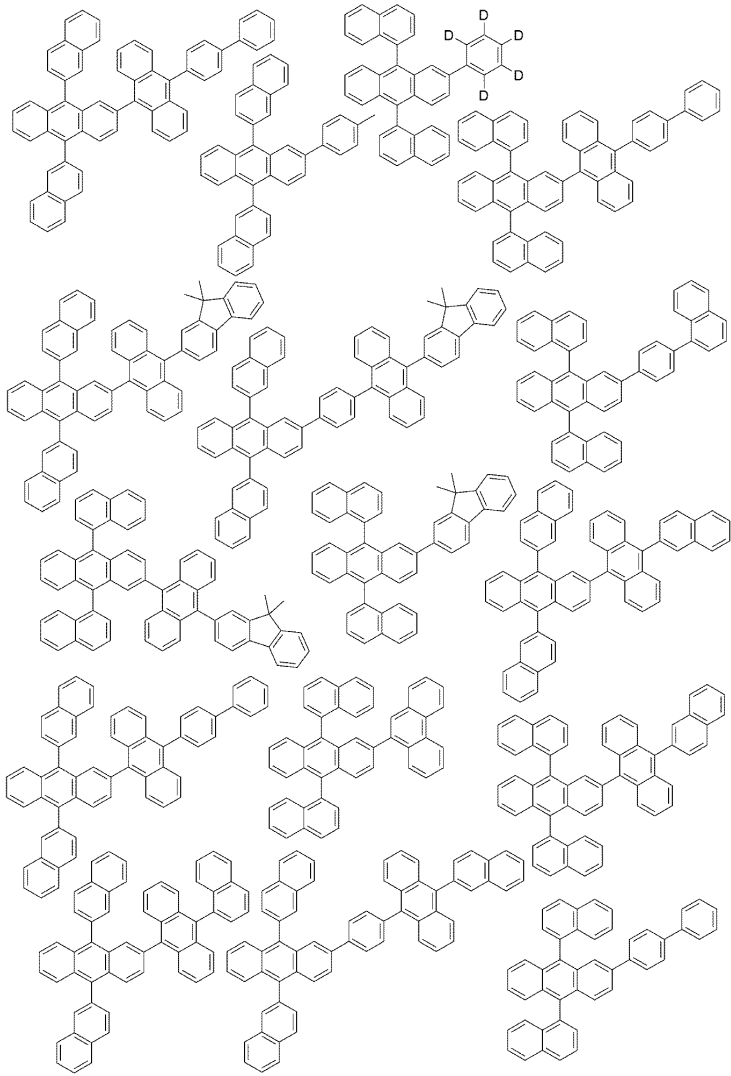
[0322]



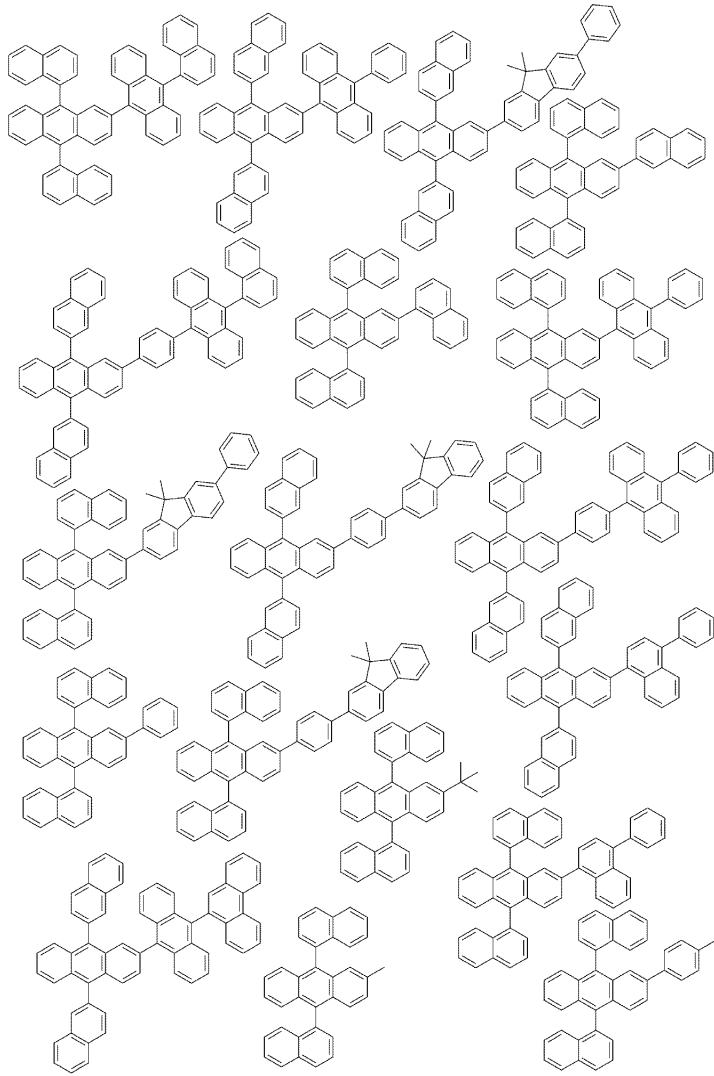
[0323]



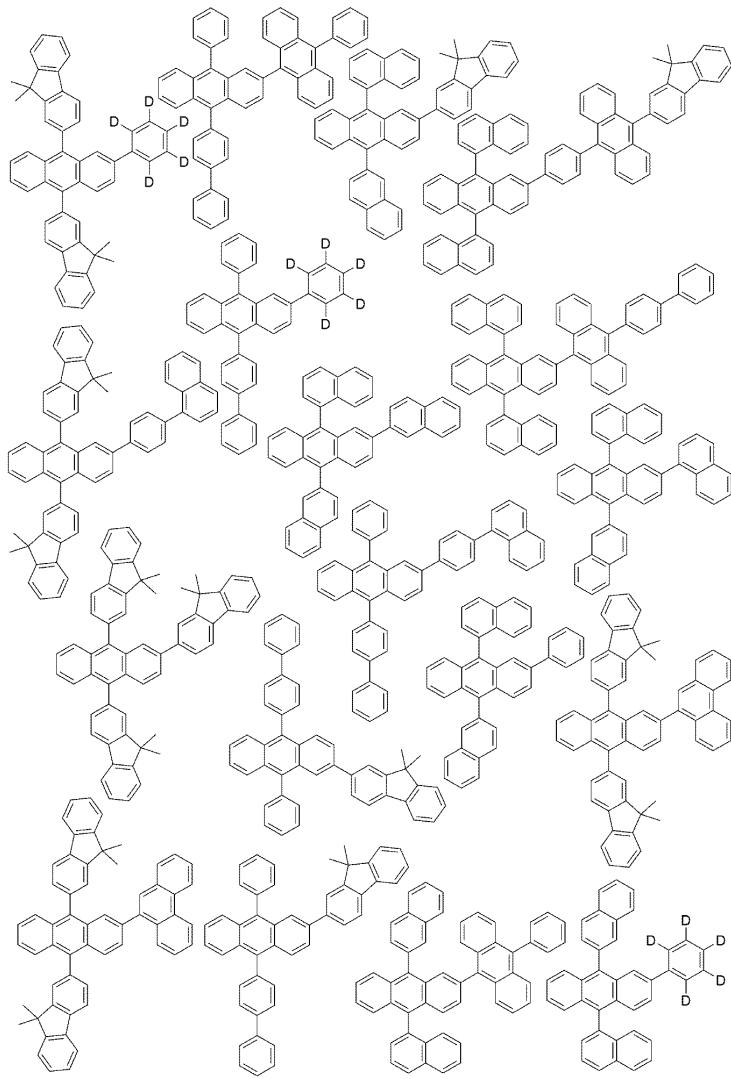
[0324]



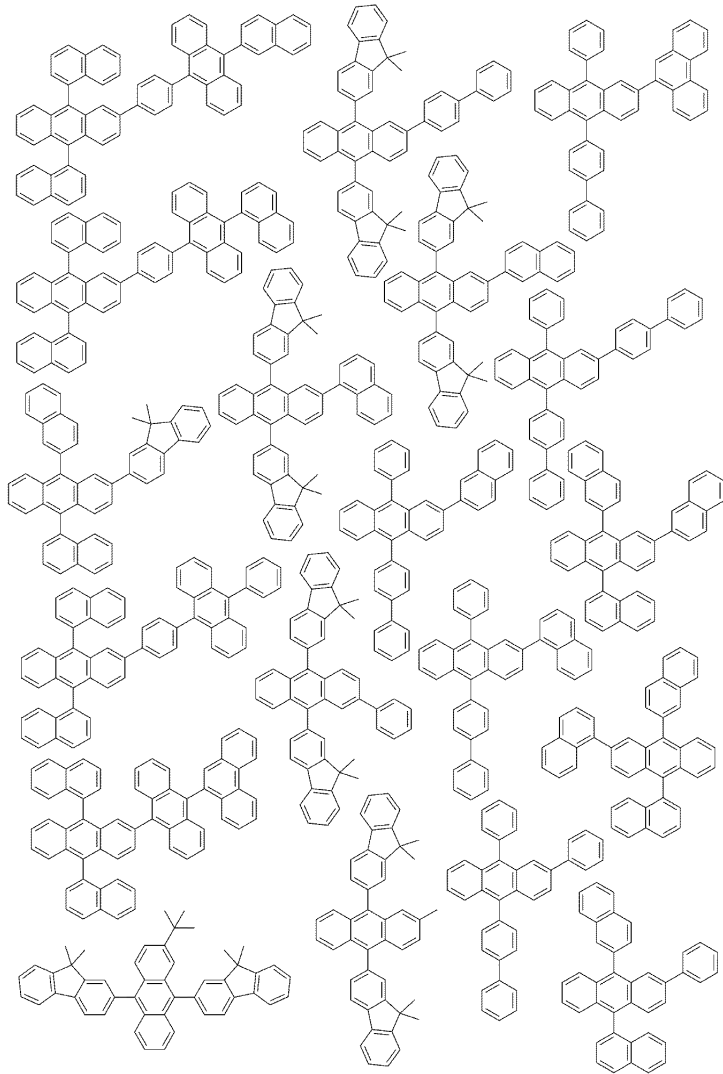
[0325]



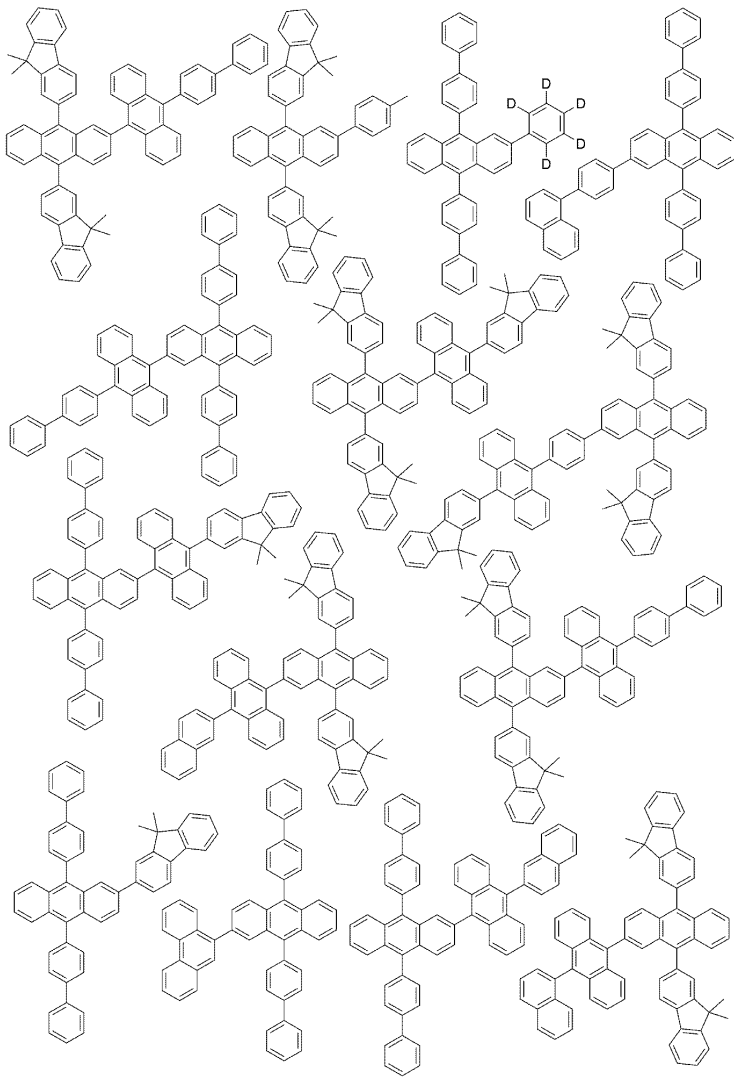
[0326]



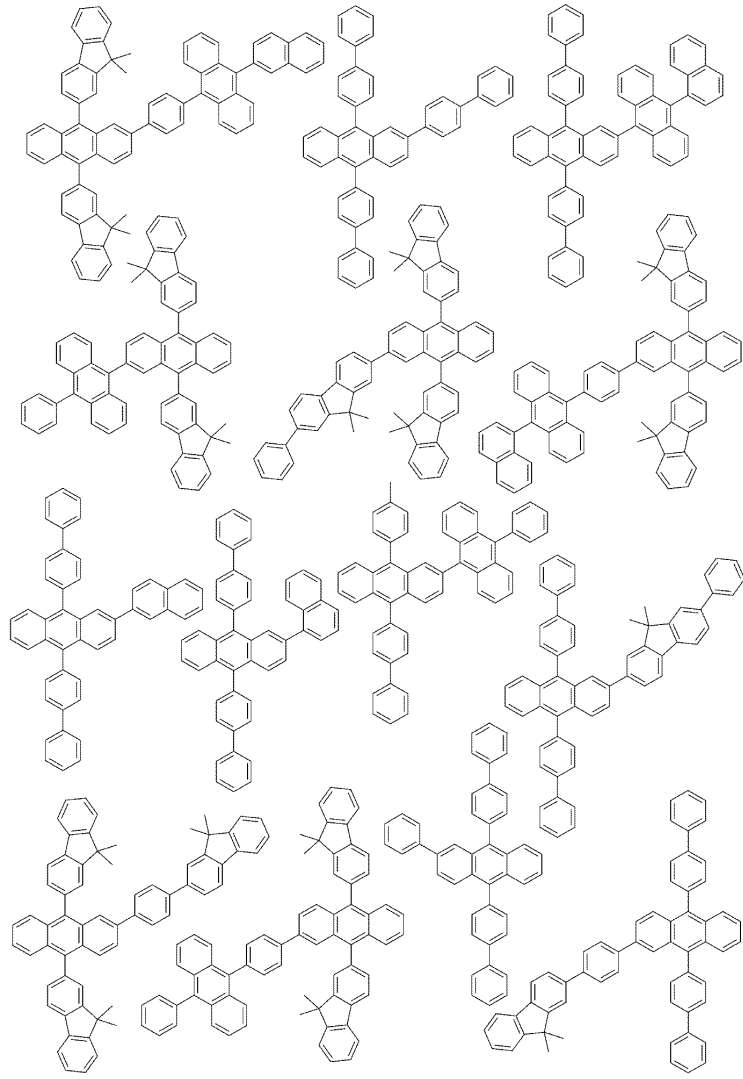
[0327]



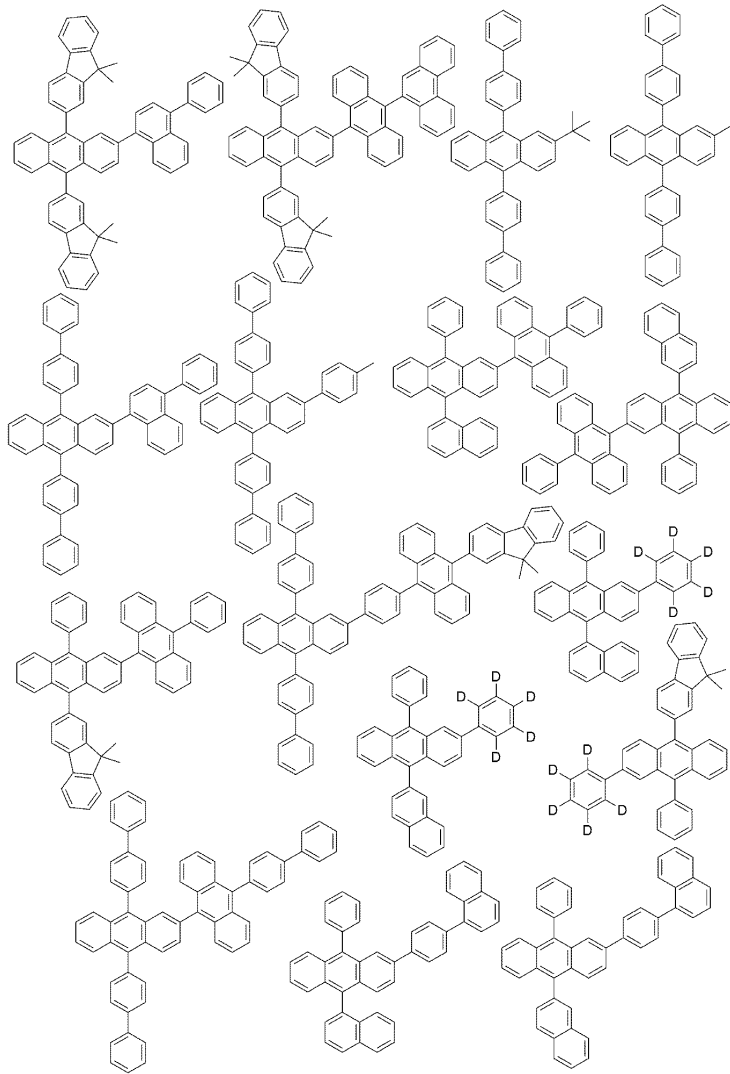
[0328]



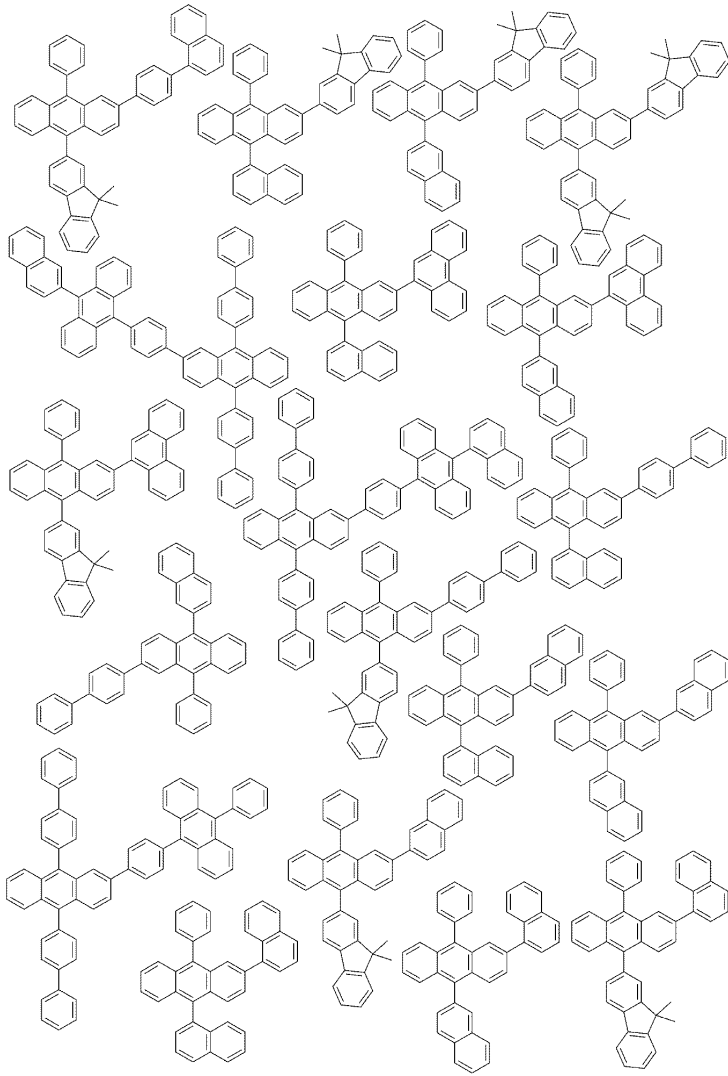
[0329]



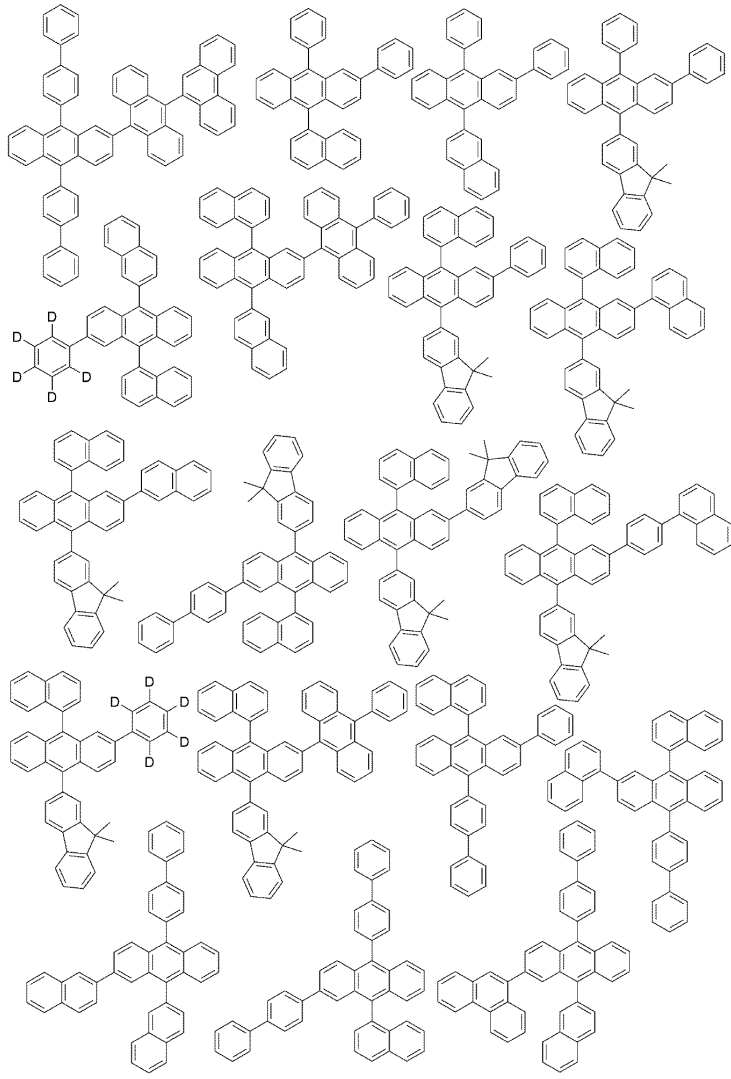
[0330]



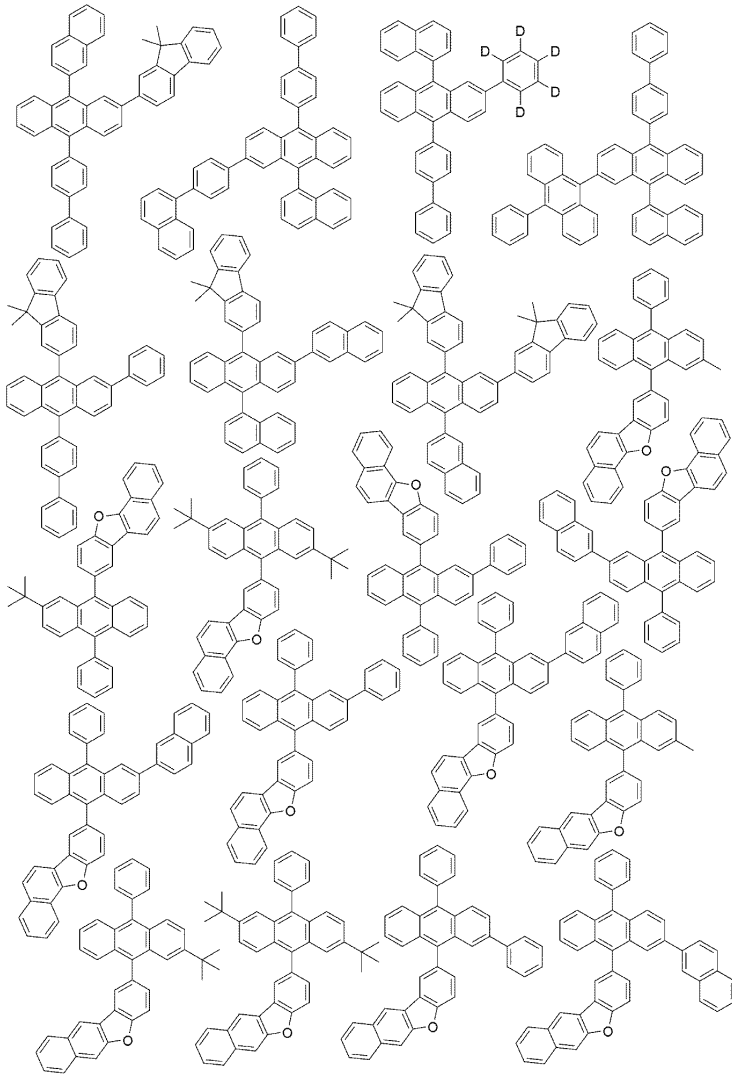
[0331]



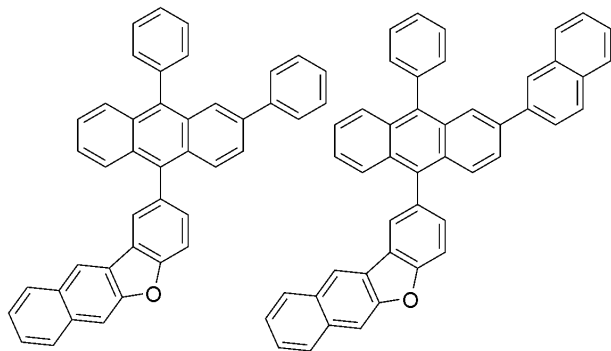
[0332]



[0333]



[0334]



[0335]

[0336]

본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 조성물

[0337]

본 발명의 일 측면은 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 조성물에 관한 것이다. 본 발명의 일 측면은 광전자 소자, 바람직하게는 OLED, 특히 상기 소자의 EML에서 이러한 조성물의 사용에 관한 것이다.

[0338]

하기에서, 전술한 조성물을 설명할 때, 일부 경우에는 백분율의 형태로 각각의 조성물에서 특정 물질의 함량에 대한 참조가 이루어진다. 특정 구현예에 대해 달리 언급되지 않는 한, 모든 백분율은 중량 백분율을 지칭하고, 이는 중량 백분율 또는 중량에 의한 % ((중량/중량), (w/w), 중량%)와 동일한 의미를 갖는다는 점에 유의해야 한다. 예를 들어 특정 조성물에서 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자의 함량이 예시적으로 30%라고 언급하는 경우, 이는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의(즉, 결합된 이러한 분자 모두의) 총 중량이 30중량%, 즉 각각의 조성물의 총 중량의 30%를 차지하는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 성분의 바람직한 함량을 중량%로 제공함으로써 조성물이 특정될 때마다, 모든 성분의 총 함량을 합산하면 100중량%(즉, 조성물의 총 중량)가 되

는 것으로 이해된다.

[0339] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 조성물에 관련된 본 발명의 구현예를 설명하는 다음에서, 광전자 소자, 바람직하게는 광전자 소자의 EML, 더욱 바람직하게는 OLED의 EML에서 상기 조성물이 사용될 때 이러한 조성물 내의 성분 사이에서 발생할 수 있는 에너지 전달 과정에 대해 언급될 것이다. 당업자는 이러한 여기 에너지 전달 과정이 광전자 소자의 EML에서 조성물을 사용할 때 발광 효율을 향상시킬 수 있음을 이해한다.

[0340] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한 조성물을 기술할 때, 특정 물질이 다른 물질과 "상이하다"는 점이 또한 지적될 것이다. 이는 서로 "상이"한 물질이 동일한 화학 구조를 갖지 않는다는 것을 의미한다.

[0341] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 이로 이루어진다:

[0342] (a) 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자, 및

[0343] (b) (a)의 유기 분자와는 상이한 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

[0344] (c) 선택적으로, 하나 이상의 용매.

[0345] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 이로 이루어진다:

[0346] (a) 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자, 및

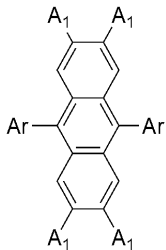
[0347] (b) (a)의 유기 분자와는 상이한 하나 이상의 호스트 물질 H^B ,

[0348] 여기서 조성물 중 호스트 물질 H^B 의 중량% 분율은 본 발명에 따른 유기 분자의 중량% 분율보다 더 높고, 바람직하게는 조성물 중 호스트 물질 H^B 의 중량% 분율은 본 발명에 따른 유기 분자의 중량% 분율보다 두 배 보다 더 높다.

[0349] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 이로 이루어진다:

[0350] (a) 0.1 내지 30중량%, 바람직하게는 0.8 내지 15중량%, 특히 1.5 내지 5중량%의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0351] (b) 하기 화학식 4에 따른 호스트 물질 H^B 로서의 TTA 물질:



[0352]

[0353] 화학식 4,

[0354] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 이로 이루어진다:

[0355] (a) 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0356] (b) (a)의 유기 분자와 상이한 호스트 물질 H^B ,

[0357] (c) TADF 물질 E^B 및/또는 인광 물질 P^B .

[0358] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 이로 이루어진다:

[0359] (a) 0.1 내지 20중량%, 바람직하게는 0.5 내지 12중량%, 특히 1 내지 5중량%의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0360] (b) 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 0 내지 98.8중량%, 바람직하게는 35 내지 94중량%, 특히 60 내지 88중량%의 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및

[0361] (c) (a)의 유기 분자와 상이한 0.1 내지 20중량%, 바람직하게는 0.5 내지 10중량%, 특히 1 내지 3중량%의 하나

이상의 인광 물질 P^B, 및

- [0362] (d) (a)의 유기 분자와 상이한 1 내지 99.8중량%, 바람직하게는 5 내지 50중량%, 특히 10 내지 30중량%의 하나 이상의 TADF 물질 E^B, 및
- [0363] (e) 0 내지 98.8중량%, 바람직하게는 0 내지 59중량%, 특히 0 내지 28중량%의 하나 이상의 용매.
- [0364] 추가적인 측면에서, 본 발명은 본 명세서에서 설명된 유형의 유기 분자 또는 조성물을 포함한 광전자 소자, 더욱 바람직하게는 유기 발광 소자(OLED), 발광 전기화학 전지, OLED 센서, 특히 외부와 완전히 차단되지 않은 가스 및 증기 센서, 유기 소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 전계 효과 트랜지스터, 유기 레이저 및 하향 변환 소자로 이루어진 군으로부터 선택된 소자의 형태에 관한 것이다.
- [0365] 바람직한 구현예에서, 광전자 소자는 유기 발광 소자(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC), 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된 소자이다.
- [0366] 본 발명의 광전자 소자의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자 E는 발광층 EML에서 발광 물질로 사용된다.
- [0367] 본 발명의 광전자 소자의 일 구현예에서, 발광층 EML은 본 명세서에 설명된 본 발명에 따른 조성물로 이루어진다.
- [0368] 광전자 소자가 OLED일 때, 이는 예를 들어 하기 층 구조를 가질 수 있다:
- [0369] 1. 기판
- [0370] 2. 애노드층 A
- [0371] 3. 정공 주입층, HIL
- [0372] 4. 정공 수송층, HTL
- [0373] 5. 전자 저지층, EBL
- [0374] 6. 발광층, EML
- [0375] 7. 정공 저지층, HBL
- [0376] 8. 전자 수송층, ETL
- [0377] 9. 전자 주입층, EIL
- [0378] 10. 캐소드층,
- [0379] 여기서 OLED는 오직 선택적으로 HIL, HTL, EBL, HBL, ETL, 및 EIL로 이루어진 군으로부터 선택된 각각의 층을 포함하고, 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 상기 정의된 각각의 층 유형의 하나보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0380] 또한, 일 구현예에서 광전자 소자는 예를 들어, 습기, 증기 및/또는 가스를 포함한 환경에서 유해한 종에 대한 손상 노출로부터 소자를 보호하는 하나 이상의 보호층을 포함할 수 있다.
- [0381] 본 발명의 일 구현예에서, 광전자 소자는 하기 역전된 층 구조를 갖는 OLED이다:
- [0382] 1. 기판
- [0383] 2. 캐소드층
- [0384] 3. 전자 주입층, EIL
- [0385] 4. 전자 수송층, ETL
- [0386] 5. 정공 저지층, HBL
- [0387] 6. 발광층, B
- [0388] 7. 전자 저지층, EBL
- [0389] 8. 정공 수송층, HTL

- [0390] 9. 정공 주입층, HIL
- [0391] 10 애노드층 A
- [0392] 여기서 OLED는 오직 선택적으로 HIL, HTL, EBL, HBL, ETL, 및 EIL로 이루어진 군으로부터 선택된 각각의 층을 포함하고, 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 상기 정의된 각각의 층 유형의 하나보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0393] 본 발명의 일 구현예에서, 광전자 소자는 적층 구조를 가질 수 있는 OLED이다. 이 구조에서, OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리 개별 유닛이 서로의 위에 적층된다. 혼합광은 적층 구조를 나타내는 OLED로 생성될 수 있고, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있고, 전하 생성층은 일반적으로 두 개의 OLED 서브 유닛 사이에 배치되고 일반적으로 n-도핑층과 p-도핑층으로 구성되며, 하나의 CGL의 n-도핑층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한다.
- [0394] 본 발명의 일 구현예에서, 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이에 2개 이상의 발광층을 포함한 OLED이다. 특히, 이러한 소위 탠덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 방출하고, 하나의 발광층은 녹색광을 방출하며 하나의 발광층은 청색광을 방출하고, 선택적으로 개별 발광층 사이에 전하 생성층, 저지층 또는 수송층과 같은 추가층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층들은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 탠덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층은 병합될 수 있다.
- [0395] 기판은 임의의 물질 또는 물질의 조성에 의해 형성될 수 있다. 가장 빈번하게 유리 슬라이드는 기판으로서 사용된다. 대체적으로, 얇은 금속층(예를 들어, 구리, 금, 은 또는 알루미늄 필름) 또는 플라스틱 필름 또는 슬라이드가 사용될 수 있다. 이는 더 높은 유연성 정도를 허용할 수 있다. 애노드층 A는 (실질적으로) 투명 필름을 얻을 수 있는 물질로 대부분 구성되어 있다. OLED로부터 발광을 허용하기 위해서 두 개의 전극 중 적어도 하나는 (실질적으로) 투명해야 하므로, 애노드층 A 또는 캐소드층 C 중 하나는 투명하다. 바람직하게, 애노드층 A는 투명 전도성 산화물 (TCO)을 다량으로 포함하거나 심지어 TCO로 이루어진다. 이러한 애노드층 A는 예를 들어, 인듐 주석 산화물, 알루미늄 아연 산화물, 불소가 도핑된 주석 산화물, 인듐 아연 산화물, PbO, SnO, 지르코늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 바나듐 산화물, 텅스텐 산화물, 그라파이트, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 도핑된 GaAs, 도핑된 폴리아닐린, 도핑된 폴리피롤 및/또는 도핑된 폴리티오펜을 포함할 수 있다.
- [0396] 애노드층 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)에 의한 애노드층 A의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용하여 보상될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사 전하 캐리어 (즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 캐리어의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌디옥시티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설포네이트(PSS), MoO_2 , V_2O_5 , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT와 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층 A로부터 정공 수송층(HTL)으로의 금속 확산을 방지할 수 있다. HIL은 예를 들어 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'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4'-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(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)을 포함할 수 있다.
- [0397] 애노드층 A 또는 정공 주입층(HIL)에 인접하여, 정공 수송층(HTL)이 일반적으로 위치한다. 여기서 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 A와 발광층 EML 사이에 에너지 장벽을 낮출 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 또한 전자 저지층(EBL)일 수 있다. 바람직하게, 정공 수송 화합물은 삼중항 상태 T1의 비교적 높은 에너지 준위를 갖는다. 예시적으로, 정공 수송층(HTL)은 TCTA(트리스(4-카바졸일-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), 스피로-TAD, DNTPD, NPB, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN 및/또는 TrisPcz(9,9'-디

페닐-6-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H,9'H-3,3'-비카바졸)과 같은 별-모양 헤테로사이클을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공-수송성 매트릭스에서 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이 금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄(F₄-TCNQ), 구리-펜타플루오로벤조에이트(Cu(I)pFBz) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

[0398] 예를 들어, EBL은 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)을 포함할 수 있다.

[0399] 정공 수송층(HTL)에 인접하여, 발광층(EML)이 일반적으로 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 발광 분자를 포함한다. 특히, EML은 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 E를 포함한다. 일 구현예에서, 발광층은 본 발명에 따른 유기 분자만을 포함한다. 일반적으로, EML은 하나 이상의 호스트 물질 H를 추가로 포함한다. 예시적으로, 호스트 물질 H는 CBP(4,4'-비스-(N-카바졸일)-비페닐), mCP, mCBP, Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), CzSi, Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), DPEPO(비스[2-(디페닐포스포노)페닐]에테르 옥사이드), 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)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)으로부터 선택된다. 호스트 물질 H는 일반적으로 상기 유기 분자의 제1 삼중항 (T1) 및 제1 일중항 (S1) 에너지 준위보다 에너지적으로 더 높은 제1 삼중항 (T1) 및 제1 일중항 (S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택되어야 한다.

[0400] 본 발명의 일 구현예에서, EML은 적어도 하나의 정공 지배적 호스트(hole-dominant host) 및 하나의 전자 지배적 호스트(electron-dominant host)를 갖는 소위 혼합-호스트 시스템을 포함한다. 바람직한 구현예에서, EML은 본 발명에 따른 정확히 하나의 발광 유기 분자를 포함하고 전자 지배적 호스트로서 T2T 및 정공 지배적 호스트로서 CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트를 포함한 혼합-호스트 시스템을 포함한다. 추가적인 구현예에서, EML은 CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 50 내지 80중량%, 바람직하게는 60 내지 75중량%의 호스트; 10 내지 45중량%, 바람직하게는 15 내지 30중량%의 T2T; 및 5 내지 40중량%, 바람직하게는 10 내지 30중량%의 본 발명에 따른 발광 분자를 포함한다.

[0401] 발광층 EML에 인접하여, 전자 수송층(ETL)이 위치할 수 있다. 여기서, 임의의 전자 수송 물질이 사용될 수 있다. 예시적으로, 벤즈이미다졸, 피리딘, 트리아졸, 옥사디아졸(예를 들어, 1,3,4-옥사디아졸), 포스핀옥사이드 및 설폰과 같은 전자가 결합된 화합물이 사용될 수 있다. 전자 수송체는 또한 1,3,5-트리(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐(TPBi)과 같은 별-모양 헤테로 사이클일 수 있다. ETL은 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리스(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)포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)은 또한 정공을 저지할 수 있거나 정공 저지층(HBL)이 도입될 수 있다.

[0402] HBL은 예를 들어, BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 = 바토쿠프로인), BA1q(비스(8-히드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq₃(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐-포스핀옥사이드), 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-카바졸일)벤졸/1,3,5-트리스(카바졸)-9-일)벤젠)을 포함할 수 있다.

[0403] 캐소드층 C은 전자 수송층(ETL)에 인접하여 위치할 수 있다. 예를 들어, 캐소드층 C은 금속(예를 들어, Al, Au,

Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W, 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이로 구성될 수 있다. 실제적인 이유로, 캐소드층은 또한 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (실질적으로) 불투명 금속으로 구성될 수 있다. 대체적으로 또는 추가적으로, 캐소드층 C는 또한 그래파이트 및/또는 탄소나노튜브(CNT)를 포함할 수 있다. 대체적으로, 캐소드층 C는 또한 나노스케일 은 와이어로 구성될 수 있다.

- [0404] OLED는 전자 수송층(ETL)과 캐소드층 C (전자 주입층(EIL)으로 지정될 수 있음) 사이에 보호층을 선택적으로 더 포함할 수 있다. 이 층은 리튬플루오라이드, 세슘플루오라이드, 은, Liq (8-히드록시퀴놀리놀라토리튬), Li₂O, BaF₂, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.
- [0405] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 저지층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 화합물 H을 포함할 수 있다.
- [0406] 발광층 EML의 발광 스펙트럼 및/또는 흡수 스펙트럼을 조정하기 위해서, 발광층 EML은 하나 이상의 추가 에미터 분자 F를 더 포함할 수 있다. 이러한 에미터 분자 F는 본 기술 분야에 알려진 임의의 에미터 분자일 수 있다. 바람직하게 이러한 에미터 분자 F는 본 발명에 따른 분자 E의 구조와 상이한 구조를 갖는 분자이다. 에미터 분자 F는 선택적으로 TADF 에미터일 수 있다. 대체적으로, 에미터 분자 F는 선택적으로 발광층 EML의 발광 스펙트럼 및/또는 흡수 스펙트럼을 이동시킬 수 있는 형광 및/또는 인광 에미터 분자일 수 있다. 예시적으로, 삼중항 및/또는 일중항 엑시톤이 기저 상태 S0로 완화되기 전에 본 발명에 따른 유기 에미터 분자로부터 에미터 분자 F로 전달되어 상기 유기 분자에 의해 방출된 광과 비교하여 전형적으로 적색 편이된 광을 방출할 수 있다. 선택적으로, 에미터 분자 F는 2광자 효과(즉, 흡수 최대 에너지의 절반의 두 개의 광자 흡수)를 유발할 수 있다.
- [0407] 선택적으로, 광전자 소자(즉, OLED)는 예를 들어 실질적으로 백색 광전자 소자일 수 있다. 예를 들어, 이러한 백색 광전자 소자는 적어도 하나의 (심)청색 에미터 분자 및 녹색 및/또는 적색 광을 방출하는 하나 이상의 에미터 분자를 포함할 수 있다. 그리고, 상술한 바와 같이 2개 이상의 분자 사이에 에너지 전달이 또한 선택적으로 있을 수 있다.
- [0408] 여기서 사용되는 바와 같이, 특정 단락에서 더 구체적으로 정의되지 않는 한, 방출 및/또는 흡수된 광의 색상 지정은 하기와 같다:
- [0409] 보라색: >380 내지 420 nm의 파장 범위;
- [0410] 심청색: >420 내지 480 nm의 파장 범위;
- [0411] 하늘색: >480 내지 500 nm의 파장 범위;
- [0412] 녹색: >500 내지 560 nm의 파장 범위;
- [0413] 황색: >560 내지 580 nm의 파장 범위;
- [0414] 주황색: >580 내지 620 nm의 파장 범위;
- [0415] 적색: >620 내지 800 nm의 파장 범위.
- [0416] 발광 분자(즉, 에미터 물질)와 관련하여, 이러한 색상은 주 발광 피크의 최대 발광을 나타낸다. 따라서, 예를 들어, 심청색 에미터는 >420 내지 480 nm 범위의 최대 발광을 갖고, 하늘색 에미터는 >480 내지 500 nm 범위의 최대 발광을 가지며, 녹색 에미터는 >500 내지 560 nm 범위의 최대 발광을 갖고, 적색 에미터는 >620 내지 800 nm 범위의 최대 발광을 갖는다.
- [0417] 심청색 에미터는 바람직하게 480 nm 미만, 더욱 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더욱 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만의 최대 발광을 가질 수 있다. 이는 일반적으로 420 nm 초과, 바람직하게는 430 nm 초과, 더욱 바람직하게는 440 nm 초과 또는 심지어 450 nm 초과일 것이다.
- [0418] 녹색 에미터는 560 nm 미만, 바람직하게는 550 nm 미만, 훨씬 더욱 바람직하게는 545 nm 미만 또는 심지어 540 nm 미만의 최대 발광을 가진다. 이는 일반적으로 500 nm 초과, 바람직하게는 510 nm 초과, 더욱 바람직하게는 515 nm 초과 또는 심지어 520 nm 초과일 것이다.
- [0419] 또한, 본 발명의 추가적인 측면은 1000 cd/m²에서 8% 초과, 바람직하게는 10% 초과, 더욱 바람직하게는 13% 초과, 훨씬 더욱 바람직하게는 15% 초과 또는 심지어 20% 초과외부 양자 효율을 나타내고/내거나 420 nm 내지 500 nm, 바람직하게는 430 nm 내지 490 nm, 훨씬 바람직하게는 440 nm 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 nm

내지 470 nm의 최대 발광을 나타내고/내거나, 500 cd/m²에서 100 h 초과, 바람직하게는 200 h 초과, 훨씬 바람직하게는 400 h 초과, 가장 바람직하게는 750 h 초과 또는 심지어 1000 h 초과, LT80 값을 나타내는 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.45 미만, 바람직하게는 0.30 미만, 더욱 바람직하게는 0.20 미만 또는 훨씬 더욱 바람직하게는 0.15 미만 또는 심지어 0.10 미만의 CIEy 색좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.

[0420] 본 발명의 추가적인 측면은 분명한 색점에서 발광하는 OLED에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, OLED는 좁은 발광 대역(작은 반치폭(FWHM))으로 광을 방출한다. 일 측면에서, 본 발명에 따른 OLED는 0.25 eV 미만, 바람직하게는 0.20 eV 미만, 더욱 바람직하게는 0.17 eV 미만, 훨씬 더욱 바람직하게는 0.15 eV 미만 또는 심지어 0.13 eV 미만의 주 발광 피크의 FWHM을 갖는 광을 방출한다.

[0421] 본 발명의 추가적인 측면은 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에 의해 정의된 원 청색(CIEx = 0.131 및 CIEy = 0.046)의 CIEx(= 0.131) 색좌표와 CIEy(= 0.046) 색좌표에 가까운 CIEx 및 CIEy를 가진 광을 방출하고, 따라서 UHD-TV와 같은 UHD(Ultra High Definition) 디스플레이에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 더욱 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 훨씬 더 바람직하게는 0.08 내지 0.18 또는 심지어 0.10 내지 0.15의 CIEx 색좌표를 나타내고/내거나, 0.00 내지 0.45, 바람직하게는 0.01 내지 0.30, 더욱 바람직하게는 0.02 내지 0.20 또는 훨씬 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 또는 심지어 0.04 내지 0.10의 CIEy 색좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.

[0422] 본 발명의 추가 구현예에서, 조성물은 실온에서 20% 초과, 바람직하게는 30% 초과, 보다 바람직하게는 35% 초과, 보다 바람직하게는 40% 초과, 보다 바람직하게는 45% 초과, 보다 바람직하게는 50% 초과, 보다 바람직하게는 55% 초과, 보다 더 바람직하게는 60% 초과 또는 훨씬 더 바람직하게는 70% 초과, 광발광 양자 수율(PLQY)을 갖는다.

[0423] 추가적인 측면에서, 본 발명은 광전자 성분을 제조하는 방법에 관한 것이다. 이 경우에 본 발명의 유기 분자가 사용된다.

[0424] 추가적인 측면에서, 본 발명은 하기 단계를 포함하는 440 nm 내지 470 nm의 파장 범위에서 광을 생성하는 방법에 관한 것이다:

[0425] (i) 본 명세서에서 정의된 유기 분자 S^B를 포함하는 광전자 소자를 제공하는 단계, 및

[0426] (ii) 상기 광전자 소자에 전류를 인가하는 단계.

[0427] 광전자 소자, 특히 본 발명에 따른 OLED는 기상 증착 및/또는 액체 처리의 임의의 수단에 의해 제조될 수 있다. 따라서, 적어도 하나의 층은

[0428] - 승화 공정에 의해 준비되고,

[0429] - 유기 기상 증착 공정에 의해 준비되고,

[0430] - 캐리어 기체 승화 공정에 의해 준비되고,

[0431] - 용액 처리되거나 또는 프린트된다.

[0432] 광전자 소자, 특히 본 발명에 따른 OLED를 제조하기 위해 사용된 방법은 당업계에 알려져 있다. 상이한 층은 후속 증착 공정에 의해 개별적으로 그리고 적합한 기판 상에 연속적으로 증착된다. 개별 층은 동일하거나 상이한 증착 방법을 사용하여 증착될 수 있다.

[0433] 예를 들어, 기상 증착 공정은 열적 (공)증발, 화학 기상 증착 및 물리 기상 증착을 포함한다. 액티브 매트릭스 OLED 디스플레이의 경우, AMOLED 백플레인인 기판으로 사용된다. 개별 층은 적절한 용매를 사용하는 용액 또는 분산액으로부터 처리될 수 있다. 예를 들어, 용액 증착 공정은 스핀코팅(spin coating), 딥코팅(dip coating) 및 제트프린팅(jet printing)을 포함한다. 액체 처리는 선택적으로 불활성 분위기(예를 들어 질소 분위기)에서 수행될 수 있고 용매는 최신 기술에 알려진 수단에 의해 완전히 또는 부분적으로 제거될 수 있다.

[0434] 순환 전압전류법

[0435] 순환 전압전류도는 디클로로메탄 또는 적합한 용매 및 적합한 지지 전해질(예: 0.1 mol/L의 테트라부틸암모늄 헥사플루오로포스페이트) 내의 유기 분자의 농도가 10⁻³ mol/L인 용액에서 측정된다. 측정은 3전극 조립체(작업

및 상대 전극: Pt 와이어, 기준 전극: Pt 와이어)를 사용하여 질소 분위기 하 실온에서 수행하고, 내부 표준으로서 $\text{FeCp}_2/\text{FeCp}_2^+$ 를 사용하여 보정한다. 포화 칼로멜 전극(saturated calomel electrode; SCE)에 대하여 내부 표준으로서 페로센(ferrocene)을 사용하여 HOMO 데이터를 교정하였다.

- [0436] 필도 범함수 이론 계산
- [0437] 분자 구조가 BP86 범함수 및 RI(Resolution of identity) 접근법을 사용하여 최적화된다. 여기 에너지는 시간의존 DFT(Time-Dependent DFT, TD-DFT) 방법을 채용하여 (BP86) 최적화된 구조를 사용하여 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.
- [0438] 광물리적 측정
- [0439] 샘플 전처리: 스핀 코팅
- [0440] 장치: Spin150, SPS euro.
- [0441] 샘플 농도는 10 mg/ml이고, 적절한 용매에 용해된 것이다.
- [0442] 프로그램: 1) 400U/min에서 3초; 2) 1000 U/min에서 20초(1000 Upm/s). 3) 4000 U/min에서 10초(1000 Upm/s). 코팅 후, 필름을 70°C에서 1분 동안 건조한다.
- [0443] 광발광 분광법 및 시간 상관 단일 광자 계수(TCSPC)
- [0444] 정상 상태 발광 분광법은 150W의 Xenon-Arc 램프, 여기 및 발광 단색기, Hamamatsu R928 광전자 증배관 및 시간 상관 단일 광자 계수 옵션이 장착된 Horiba Scientific, Modell FluoroMax-4를 사용하여 측정된다. 발광 및 여기 스펙트럼은 표준 보정 맞춤(standard correction fits)을 사용하여 결정된다.
- [0445] 여기 상태 수명은 FM-2013 장비 및 Horiba Yvon TCSPC 허브와 함께 TCSPC 방법을 사용하는 동일한 시스템을 사용하여 결정된다.
- [0446] 여기 소스:
- [0447] NanoLED 370(파장: 371 nm, 펄스 지속 시간: 1.1 ns)
- [0448] NanoLED 290(파장: 294 nm, 펄스 지속 시간: <1ns)
- [0449] SpectraLED 310(파장: 314 nm)
- [0450] SpectraLED 355(파장: 355 nm).
- [0451] 데이터 분석(지수 맞춤(exponential fit))이 소프트웨어 제품군 DataStation 및 DAS6 분석 소프트웨어를 사용하여 수행된다. 맞춤은 카이제곱 검정(chi-squared-test)을 사용하여 특정된다.
- [0452] 광발광 양자 수율 측정
- [0453] 광발광 양자 수율(PLQY) 측정을 위해 *Absolute PL Quantum Yield Measurement C9920-03G 시스템(Hamamatsu Photonics)*이 사용된다. 양자 수율 및 CIE 좌표는 소프트웨어 U6039-05 버전 3.6.0을 사용하여 결정된다.
- [0454] 최대 발광은 nm로, 양자 수율 Φ 은 %로, CIE 좌표는 x, y 값으로 제공된다.
- [0455] PLQY는 다음 프로토콜을 사용하여 결정된다:
- [0456] 1) 품질 보증: 에탄올 내의 안트라센(알려진 농도)이 기준(reference)으로서 사용된다.
- [0457] 2) 여기 파장: 유기 분자의 최대 흡수가 결정되고, 이 파장을 사용하여 분자가 여기된다.
- [0458] 3) 측정
- [0459] 양자 수율은 질소 분위기에서 용액 또는 필름 샘플에 대해 측정된다. 수율은 다음 식을 사용하여 계산된다:

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{광자 발광}}}{n_{\text{광자 흡수}}} = \frac{\int \frac{\lambda}{hc} \left[\text{Int}_{\text{발광}}^{\text{시료}}(\lambda) - \text{Int}_{\text{흡수}}^{\text{시료}}(\lambda) \right] d\lambda}{\int \frac{\lambda}{hc} \left[\text{Int}_{\text{발광}}^{\text{기준}}(\lambda) - \text{Int}_{\text{흡수}}^{\text{기준}}(\lambda) \right] d\lambda}$$

[0460]

[0461] 여기서 $n_{\text{광자}}$ 는 광자의 수를 나타내고, I_{nt} 는 강도를 나타낸다.

[0462] **광전자 소자의 제조 및 특징화**

[0463] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED 소자와 같은 광전자 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 화합물의 분율은 지정된 값들과 100% 간의 차이와 같다.

[0464] 완전히 최적화되지 않은 OLED는 표준 방법을 사용하여 전계발광 스펙트럼, 광소자에 의해 검출된 광을 사용하여 계산된 강도에 따른 외부 양자 효율(%), 및 전류를 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, LT95는 측정 휘도가 초기 휘도의 95%로 감소한 시점에 해당하는 등이다.

[0465] 가속 수명 측정이 수행된다(예: 증가된 전류 밀도가 적용됨). 예를 들어, 500cd/m^2 에서 LT80 값은 다음의 식을 사용하여 결정된다:

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

[0466] 여기서 L_0 는 인가된 전류 밀도에서의 초기 휘도를 나타낸다.

[0468] 값들은 여러 픽셀(일반적으로 2-8개)의 평균에 해당하며, 이러한 픽셀 간의 표준 편차가 제공된다.

[0469] **HPLC-MS:**

[0470] HPLC-MS 분석이 MS-검출기(Thermo LTQ XL)가 구비된 Agilent(1100 시리즈)의 HPLC에서 수행된다.

[0471] 예시적으로 일반적인 HPLC 방법은 다음과 같다. Agilent (ZORBAX Eclipse Plus 95Å C18, $4.6 \times 150\text{ mm}$, $3.5\ \mu\text{m}$ HPLC 컬럼)으로부터, 역상 컬럼 $4.6\text{mm} \times 150\text{mm}$, 및 입자 크기 $3.5\ \mu\text{m}$ 가 HPLC에 사용된다. HPLC-MS 측정은 하기 표 1에 나타난 구배에 따라 실온에서 수행된다.

표 1

유속[mL/분]	시간[분]	A[%]	B[%]	C[%]
2.5	0	40	50	10
2.5	5	40	50	10
2.5	25	10	20	70
2.5	35	10	20	70
2.5	35.01	40	50	10
2.5	40.01	40	50	10
2.5	41.01	40	50	10

[0473] 하기 표 2에 나타난 용매 혼합물이 사용된다:

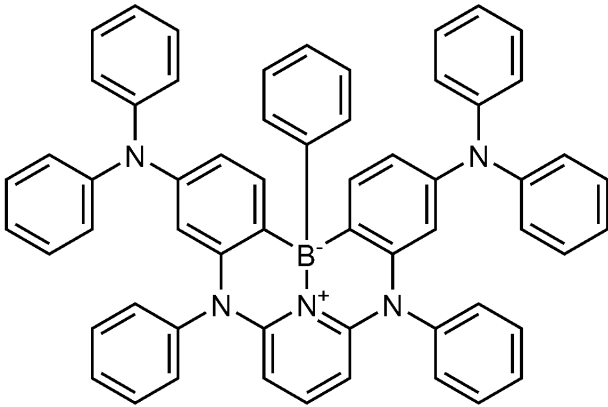
표 2

용매 A:	H2O (90%)	MeCN (10%)
용매 B:	H2O (10%)	MeCN (90%)
용매 C:	THF (50%)	MeCN (50%)

[0475] 측정을 위해 $0.5\ \text{mg/mL}$ 농도의 분석물 용액에서 $5\ \mu\text{L}$ 의 주입량을 취한다.

[0476] 프로브의 이온화가 대기압 화학적 이온화(atmospheric pressure chemical ionization: APCI) 소스를 사용하여 양성(APCI +) 또는 음성(APCI -) 이온화 모드로 수행된다.

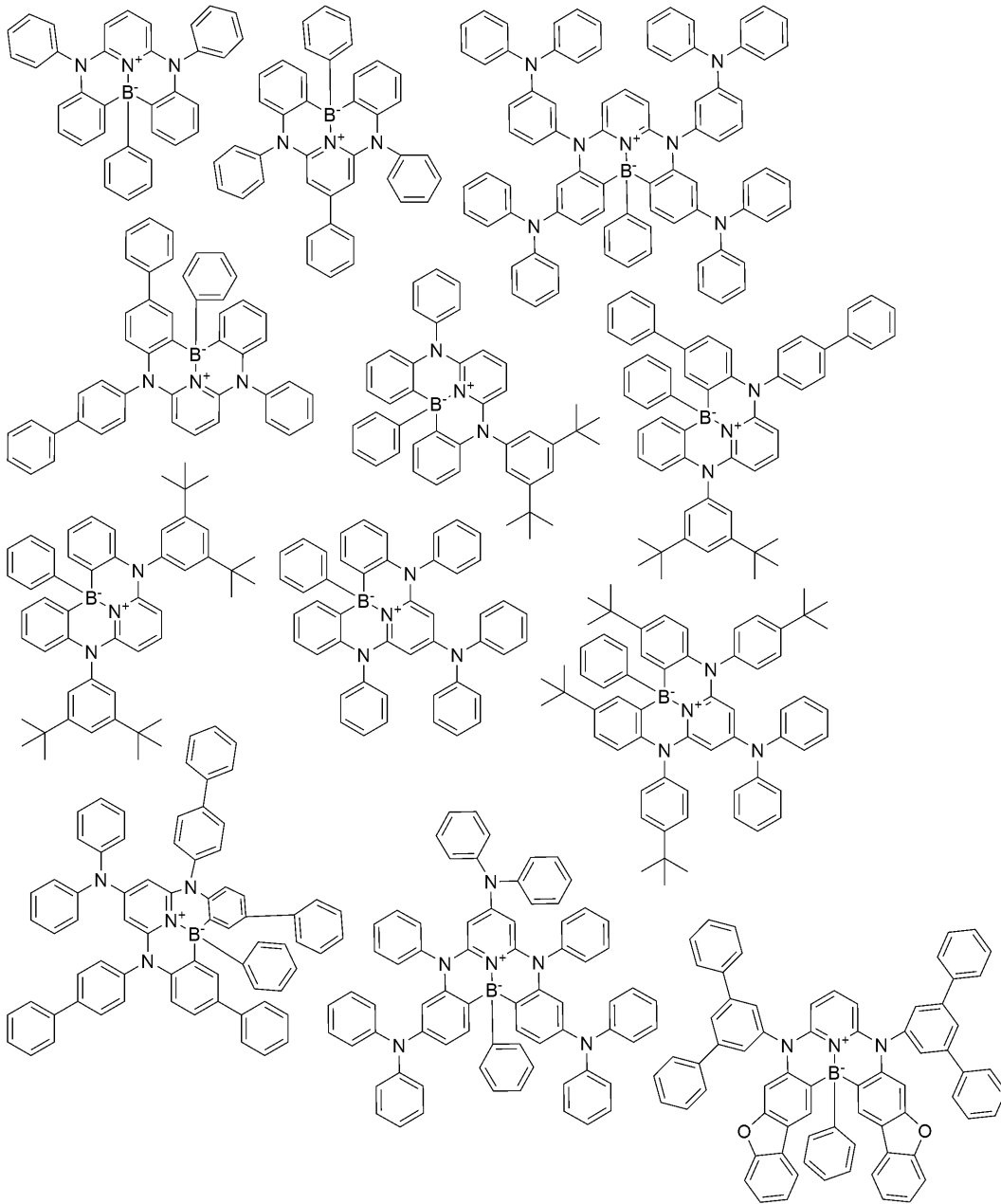
[0477] 실시예 1 - S^B



[0478]

[0479] 실시예 1(톨루엔 내의 0.01 mg/mL)의 최대 발광은 495 nm에서 있고, CIE_x 좌표는 0.16이고, CIE_y 좌표는 0.56이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 47%이다.

[0480] 본 발명의 유기 분자 S^B의 추가 예



[0481]