



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0095544
(43) 공개일자 2024년06월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 333/06 (2006.01) C07C 49/683 (2006.01)
C07C 49/753 (2006.01) C07C 49/755 (2006.01)
C07D 307/54 (2006.01) C07D 333/24 (2006.01)
C07D 345/00 (2006.01) C07D 409/14 (2006.01)
C07D 417/14 (2006.01) C07D 421/14 (2006.01)
C07D 495/04 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 333/06 (2013.01)
C07C 49/683 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2022-0155791

(22) 출원일자 2022년11월18일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고려대학교 산학협력단

서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가)

(72) 발명자

류화숙

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

우한영

서울특별시 강남구 광평로10길 15, 110동 306호(일원동, 상록수아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리엔목특허법인

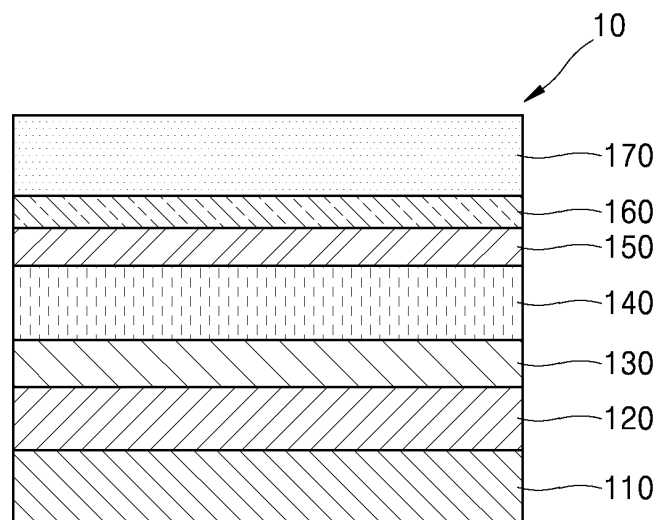
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 화합물, 이를 포함하는 유기 광검출기 및 이를 포함한 전자 장치

(57) 요약

화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 광검출기 및 이를 포함하는 전자 장치가 개시된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07C 49/753 (2013.01)
C07C 49/755 (2013.01)
C07D 307/54 (2022.08)
C07D 333/24 (2013.01)
C07D 345/00 (2013.01)
C07D 409/14 (2013.01)
C07D 417/14 (2013.01)
C07D 421/14 (2013.01)
C07D 495/04 (2013.01)

(72) 발명자

윤석규

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

이대호

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

정혜진

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

벤카타 수만 크리시나

서울특별시 성북구 고려대로26길 26, 202호(안암동5가)

오자양

서울특별시 성북구 고려대로22길 6-7(안암동5가)

지민훈

서울특별시 동대문구 무학로 202, 606호(제기동)

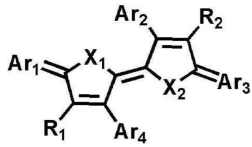
명세서

청구범위

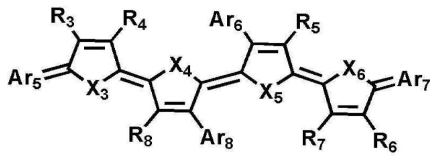
청구항 1

하기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

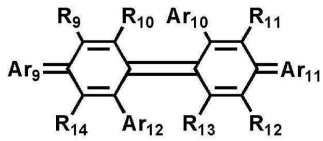
<화학식 1>



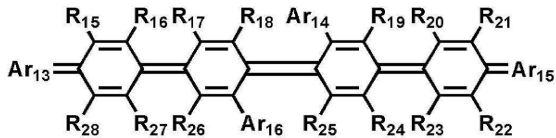
<화학식 2>



<화학식 3>



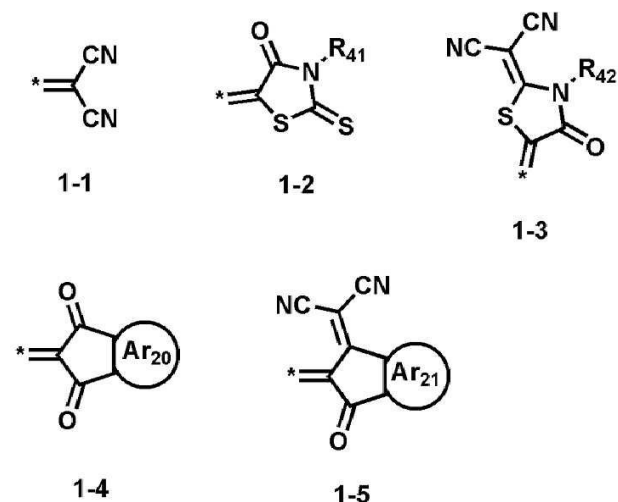
<화학식 4>



상기 화학식 1 내지 4에서,

X₁ 내지 X₆은 서로 독립적으로 O, S, Se, Te, CR₃₁R₃₂, NR₃₃, BR₃₄, SiR₃₅R₃₆ 및 GeR₃₇R₃₈ 중에서 선택되고,

Ar₁, Ar₃, Ar₅, Ar₇, Ar₉, Ar₁₁, Ar₁₃ 및 Ar₁₅는 서로 독립적으로 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중에서 선택되고,



*은 결합 이웃 원자와의 결합을 나타내며,

상기 Ar₂, Ar₄, Ar₆, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₂, Ar₁₄, Ar₁₆, Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

상기 R₁ 내지 R₂₈, R₃₁ 내지 R₃₈, R₄₁ 내지 R₄₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 또는 -P(=S)(Q₁)(Q₂)이고,

상기 R_{10a}는,

중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기 또는 니트로기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁), -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁), -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그

룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기; 또는

-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 또는 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂); 이고,

Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃, Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₇-C₆₀아릴알킬기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

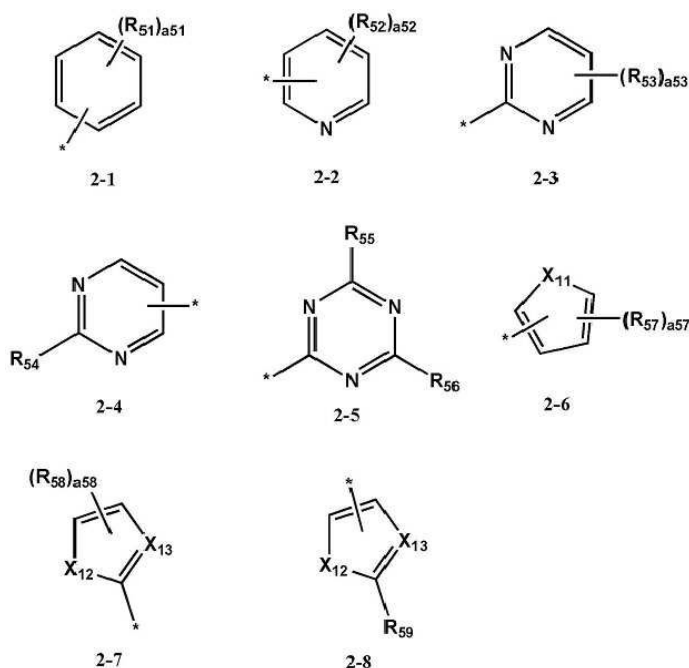
Ar₂, Ar₄, Ar₆, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₂, Ar₁₄, Ar₁₆, Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기인, 화합물:

상기 R_{10a}는 제1항에서의 정의와 동일하다.

청구항 3

제1항에 있어서,

Ar₂, Ar₄, Ar₆, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₂, Ar₁₄, Ar₁₆, Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 화학식 2-1 내지 2-8 중에서 선택되는, 화합물:



상기 화학식 2-1 내지 2-8에서, X₁₁ 내지 X₁₃은 N, O 또는 S를 나타내고, R₅₁ 내지 R₅₉는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -C(Q₁)(Q₂)(Q₃), -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

a51은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a52는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a53 및 a57은 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a58은 1 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹; C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹; C₇-C₆₀아릴알킬기; 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기;이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₂₈은 서로 독립적으로 수소 또는 중수소인, 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

R₃₁ 내지 R₃₈은 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, 또는 C₆-C₆₀아릴옥시기인, 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서

Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기인, 화합물:

상기 R_{10a}는 제1항에서의 정의와 동일하다.

청구항 7

제1항에 있어서

R₄₁ 내지 R₄₂는 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기인, 화합물:

상기 R_{10a}는 제1항에서의 정의와 동일하다.

청구항 8

제1항에 있어서

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 C2 대칭성을 갖는, 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 분자량이 1500 g/mol 이하인, 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 Highest occupied molecular orbital(HOMO) 에너지 레벨이 -6.5 내지 -4.5 eV이고, Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) 에너지 레벨이 -4.7 내지 -3.0 eV인 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 옵티컬 밴드 갭(optical bane gap)이 2.0 eV 이하인, 화합물.

청구항 12

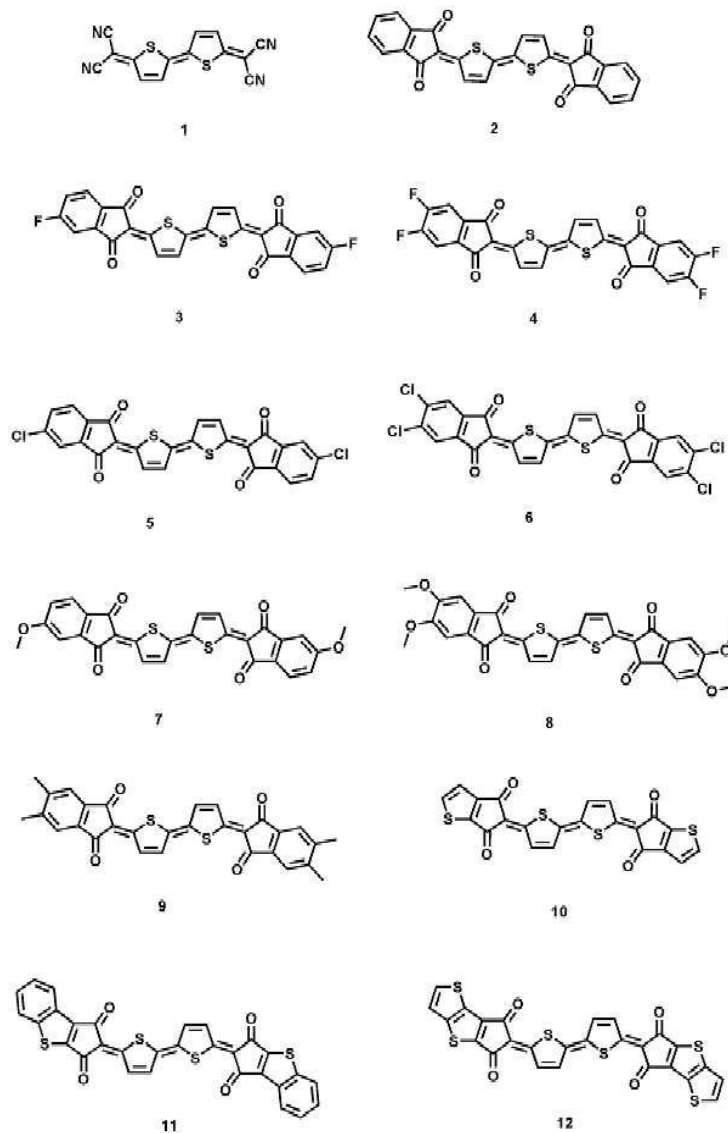
제1항에 있어서

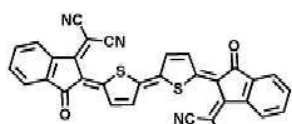
상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 분해 온도가 200℃ 이상인, 화합물.

청구항 13

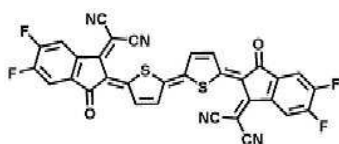
제1항에 있어서

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 다음 화합물들 중 어느 하나로부터 선택되는, 화합물:

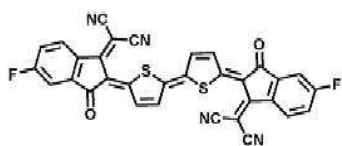




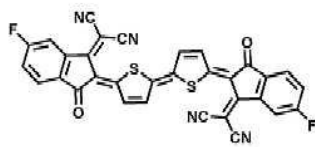
13



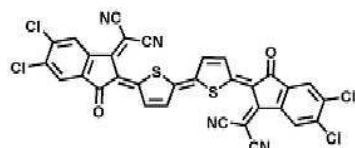
14



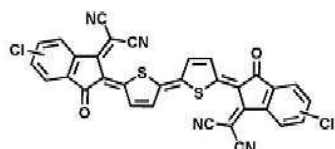
15



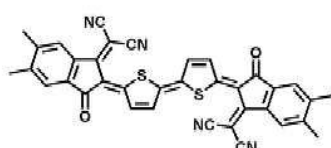
16



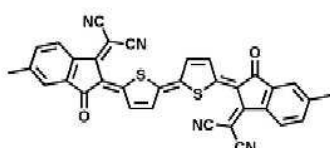
17



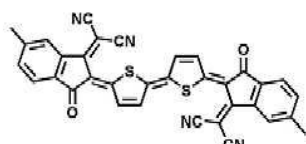
18



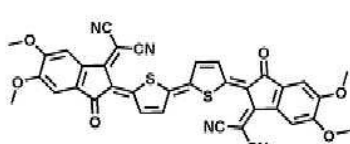
19



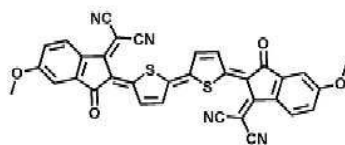
20



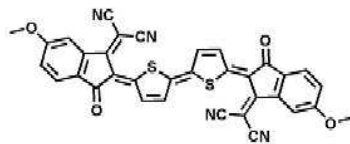
21



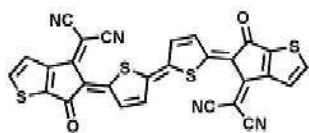
22



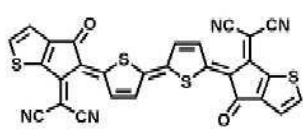
23



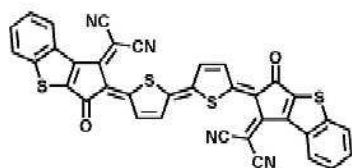
24



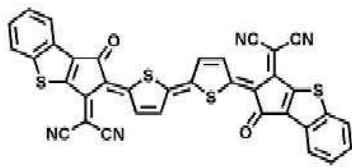
25



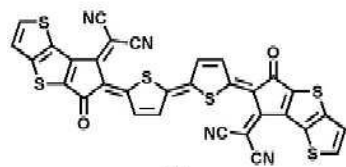
26



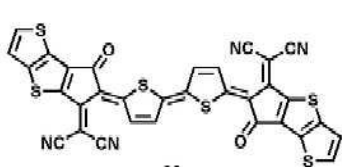
27



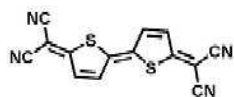
28



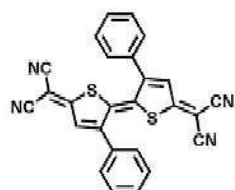
29



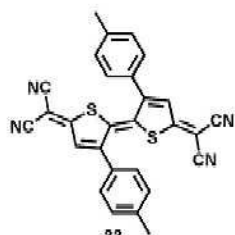
30



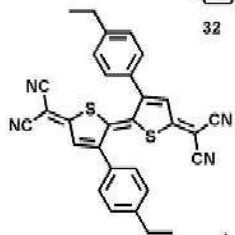
31



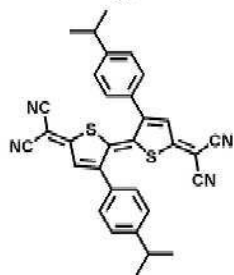
32



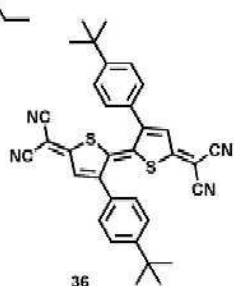
33



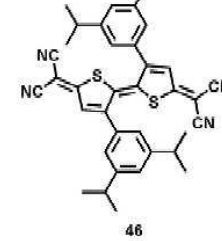
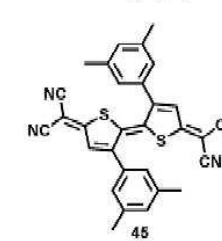
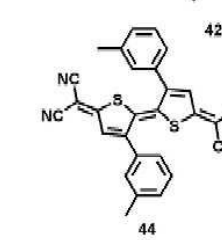
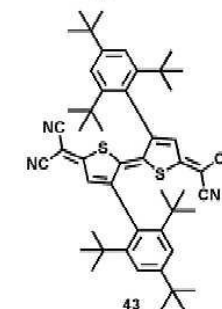
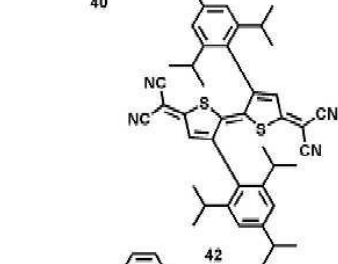
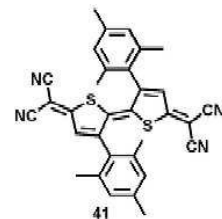
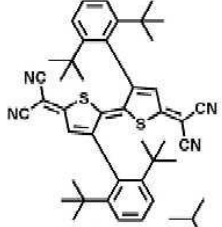
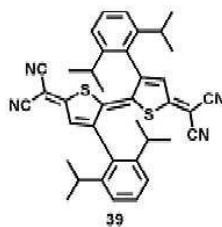
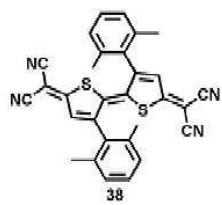
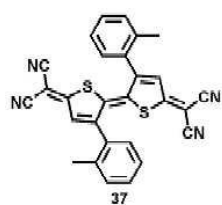
34

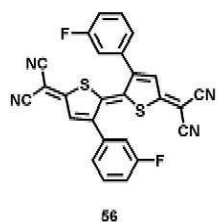
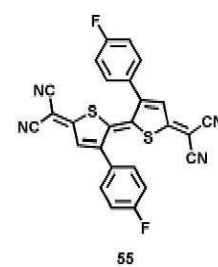
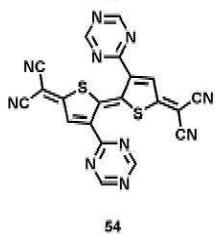
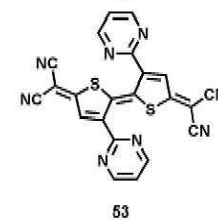
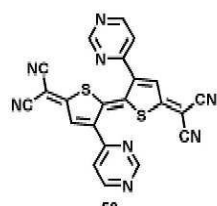
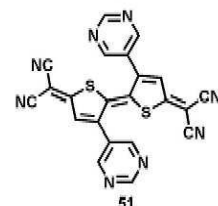
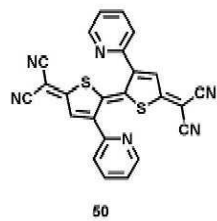
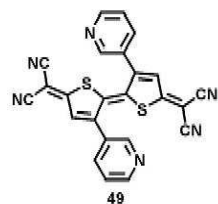
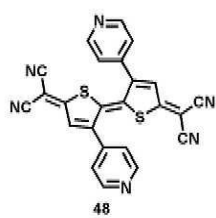
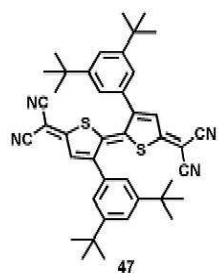


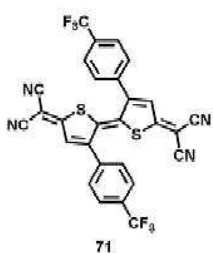
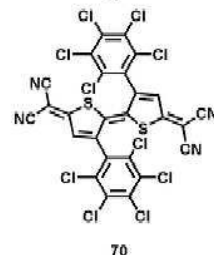
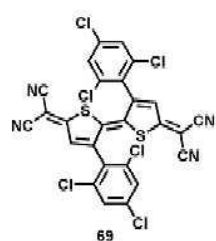
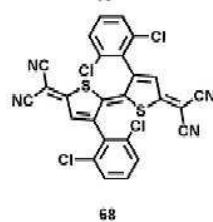
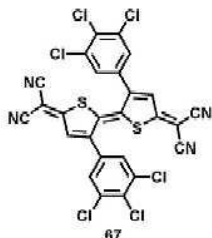
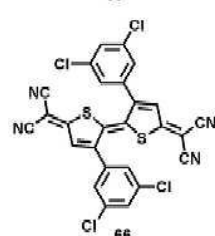
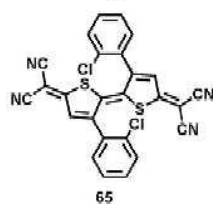
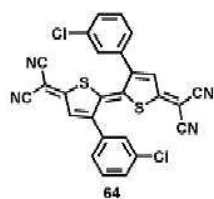
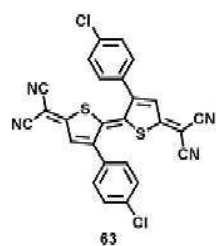
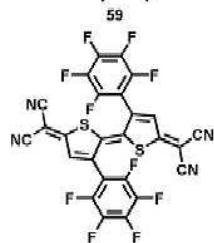
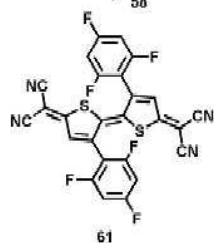
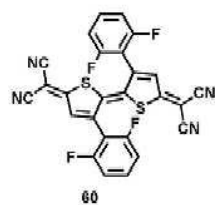
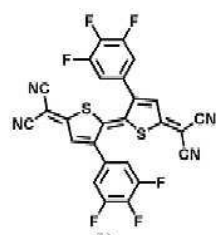
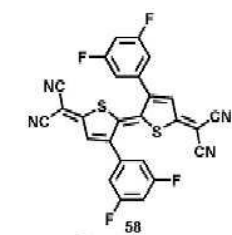
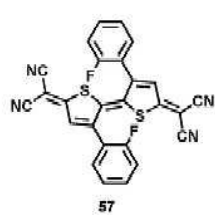
35

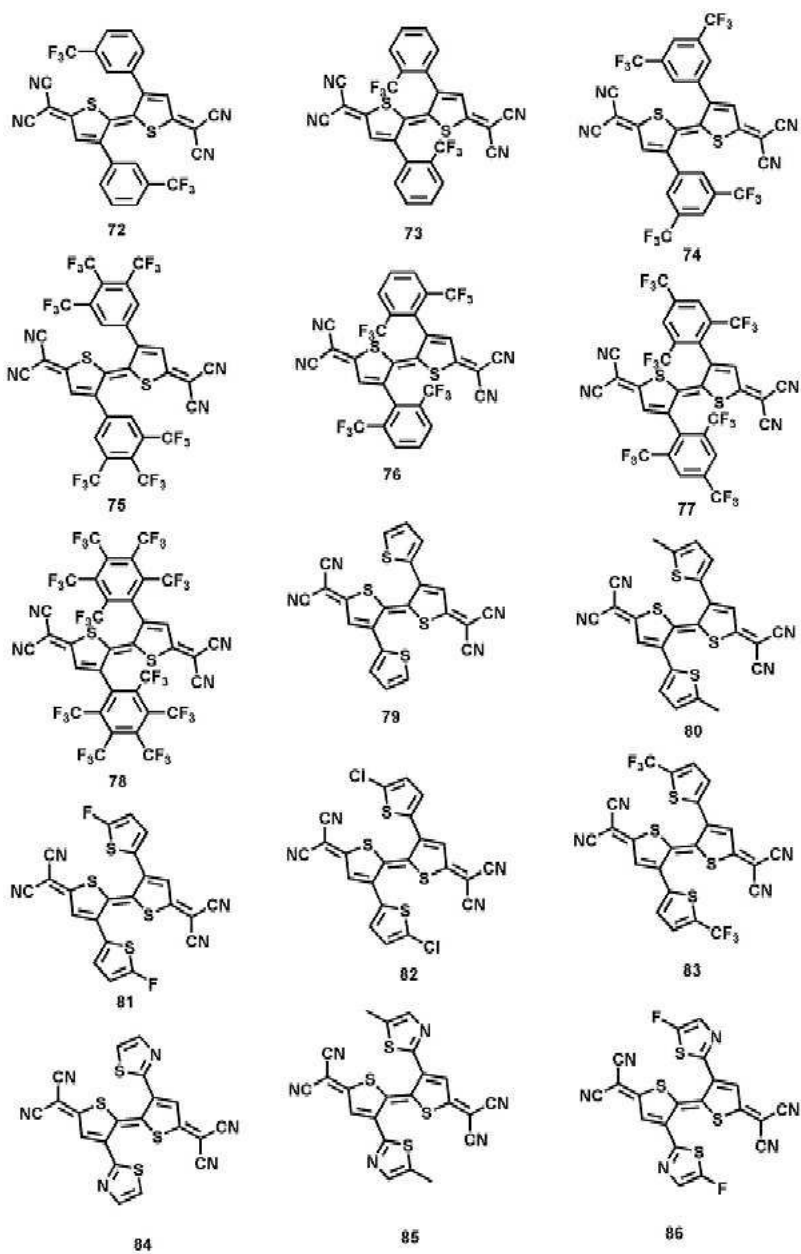


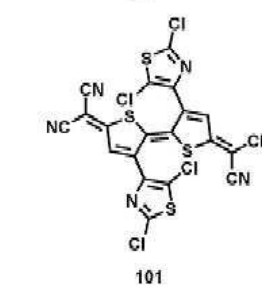
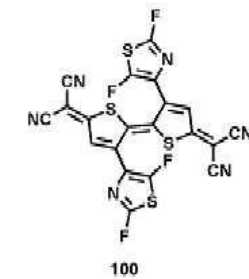
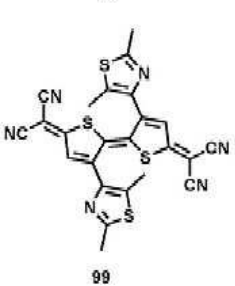
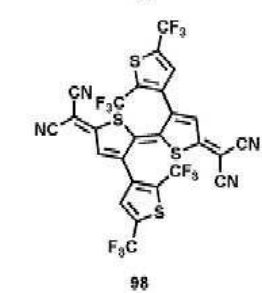
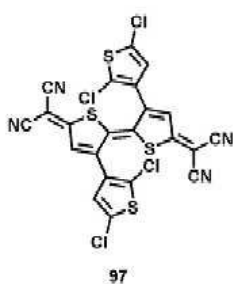
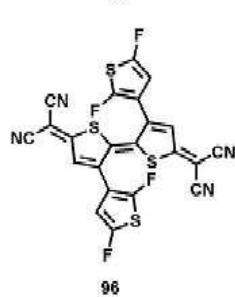
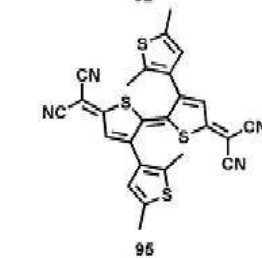
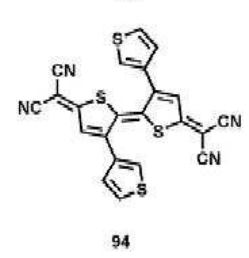
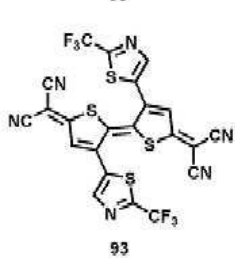
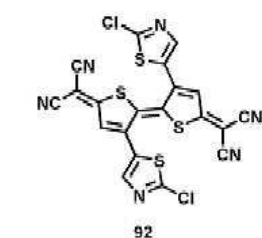
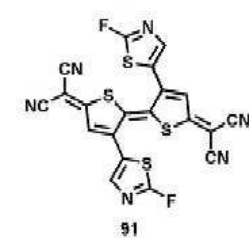
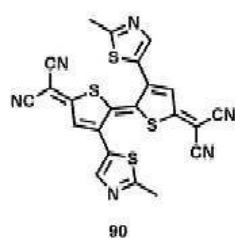
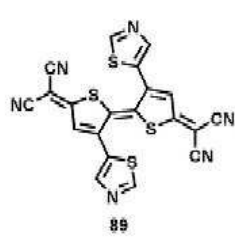
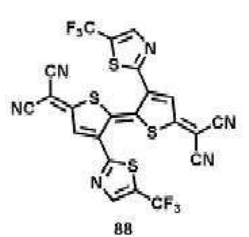
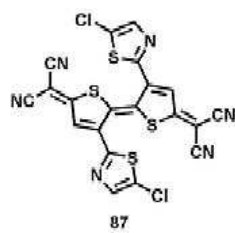
36

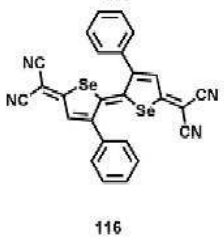
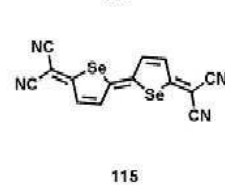
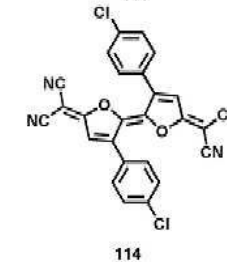
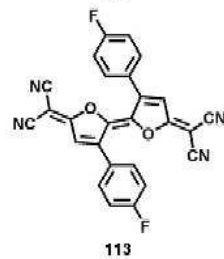
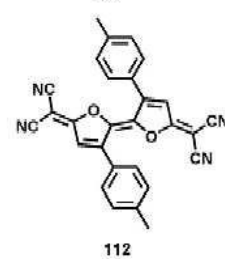
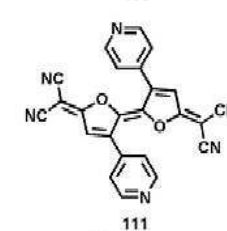
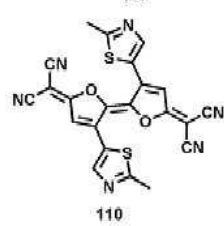
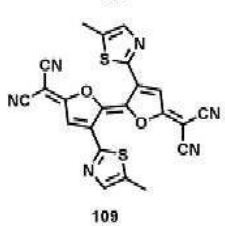
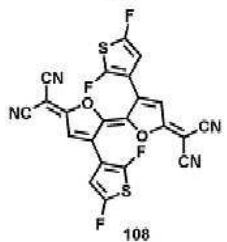
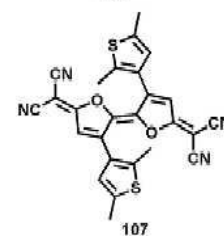
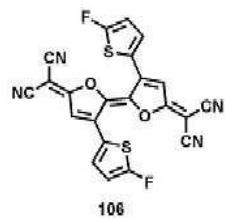
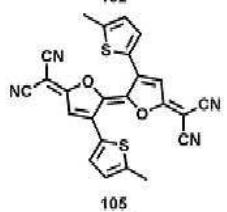
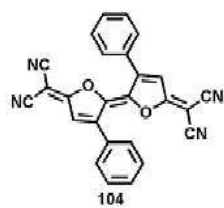
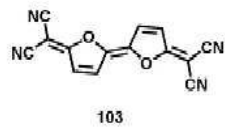
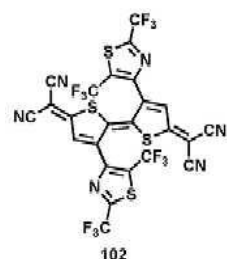


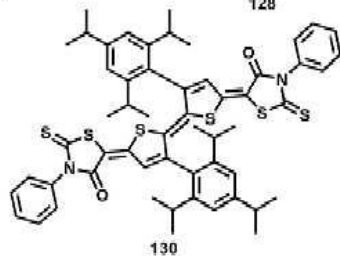
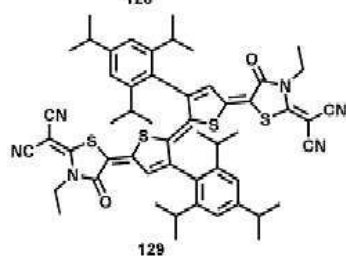
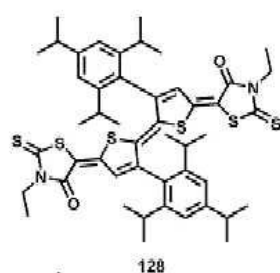
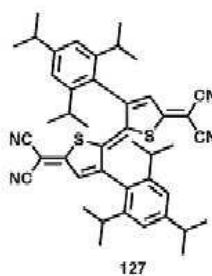
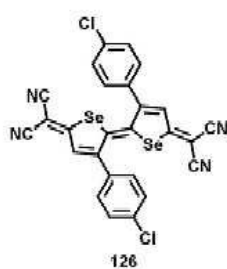
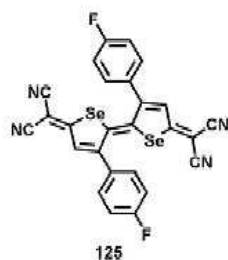
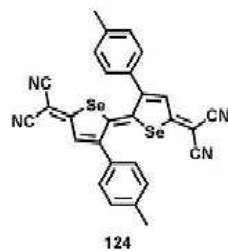
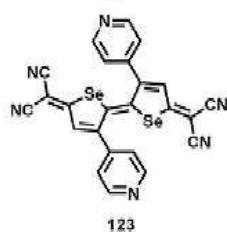
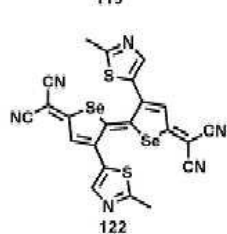
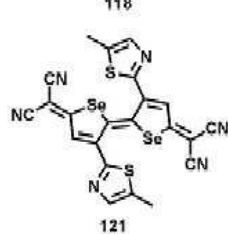
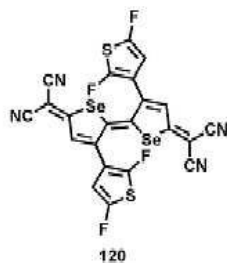
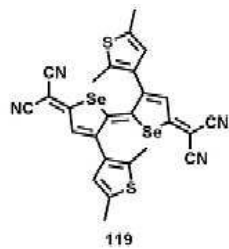
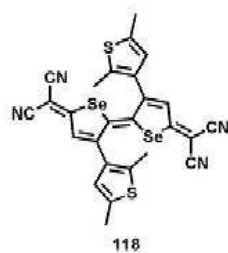
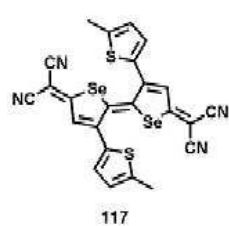


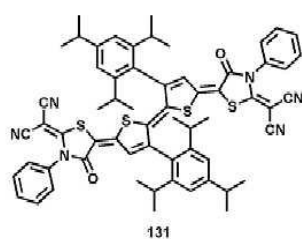




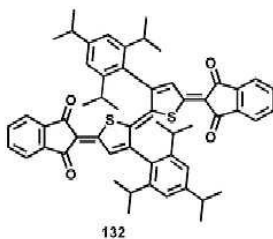




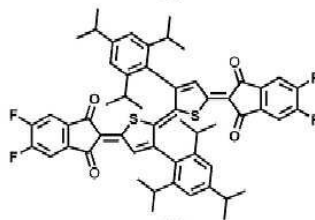




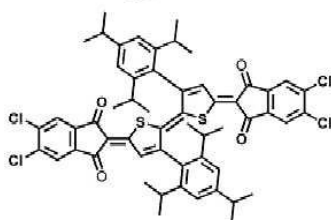
131



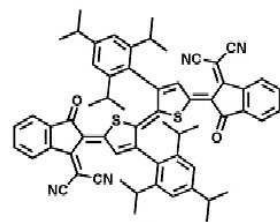
132



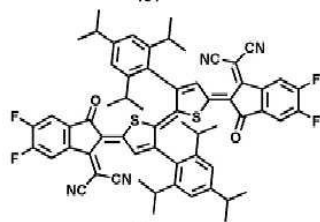
133



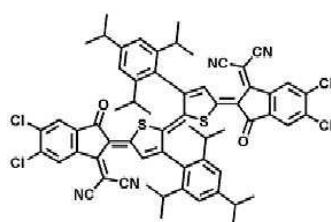
134



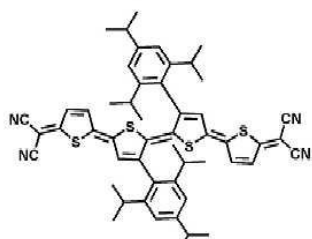
135



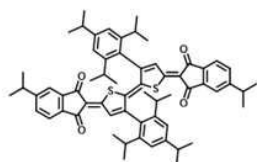
136



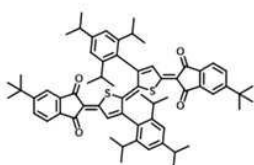
137



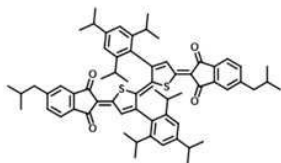
138



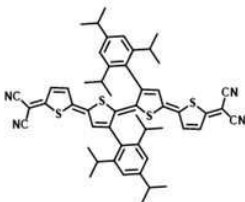
139



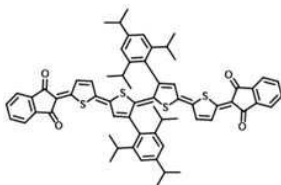
140



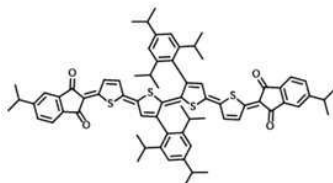
141



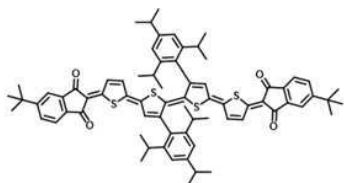
142



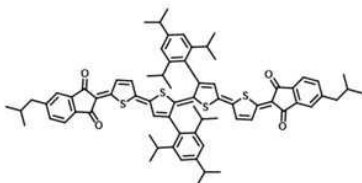
143



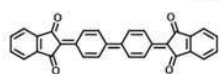
144



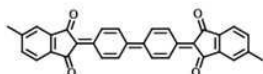
145



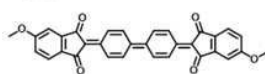
146



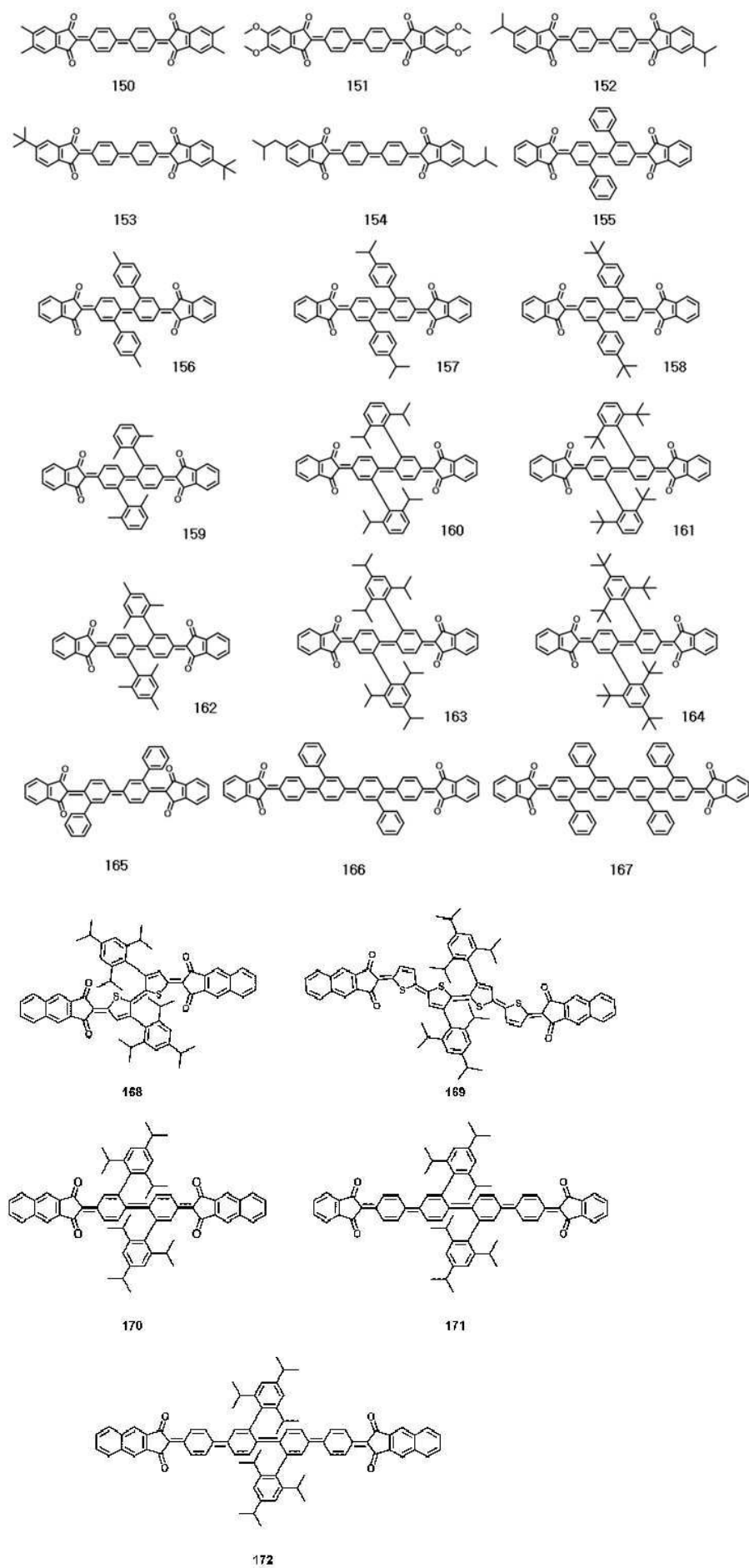
147



148



149



청구항 14

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극;

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치된 활성층;을 포함하는 유기 광검출기로서,

상기 활성층이 제1항의 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 광검출기.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 활성층이 녹색, 적색 및/또는 근적외선을 흡수하는, 유기 광검출기.

청구항 16

제14항에 있어서,

상기 활성층이 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 전자 억셉터 및/또는 전자 도너로서 포함하는, 유기 광검출기.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 활성층과 상기 제1전극 사이에 배치된 정공 수송 영역을 더 포함하고,

상기 정공 수송 영역이 정공 주입층, 정공 수송층, 보조층, 전자 저지층, 또는 이의 임의의 조합을 포함하는, 유기 광검출기.

청구항 18

제14항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 활성층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고,

상기 전자 수송 영역이 버퍼층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 또는 이의 임의의 조합을 포함하는, 유기 광검출기.

청구항 19

상기 제14항의 유기 광검출기를 포함하는, 전자 장치.

청구항 20

제19항에 있어서,

발광 소자를 더 포함하는 전자 장치.

발명의 설명**기술 분야**

화합물, 이를 포함하는 유기 광검출기 및 이를 포함한 전자 장치에 관한 것이다.

[0001]

배경 기술

- [0002] 광전 소자는 빛과 전기 신호를 변환시키는 소자로, 광 다이오드 및 광 트랜지스터 등을 포함하며, 이미지 센서, 태양 전지, 유기 발광 소자 등에 적용될 수 있다.
- [0003] 광 다이오드에 주로 사용하는 실리콘의 경우 화소의 크기가 작아지면서 흡수 면적이 줄어들기 때문에 감도 저하가 발생할 수 있다. 이에 따라 실리콘을 대체할 수 있는 유기 물질이 연구되고 있다.
- [0004] 유기 물질은 흡광 계수가 크고 분자 구조에 따라 특정 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수할 수 있으므로, 광 다이오드와 색 필터를 동시에 대체할 수 있어서 감도 개선 및 고집적에 매우 유리하다.
- [0005] 이러한 유기 물질을 포함하는 유기 광검출기(OPD)는 예컨대 표시 장치, 이미지 센서에 적용될 수 있다.

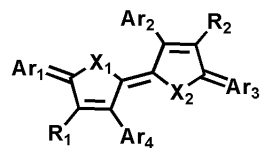
발명의 내용

해결하려는 과제

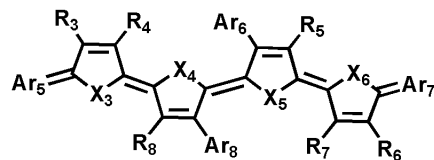
- [0006] 근적외선 영역을 흡광하는 증착 가능한 화합물, 이를 포함하는 유기 광검출기 및 이를 포함한 전자 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

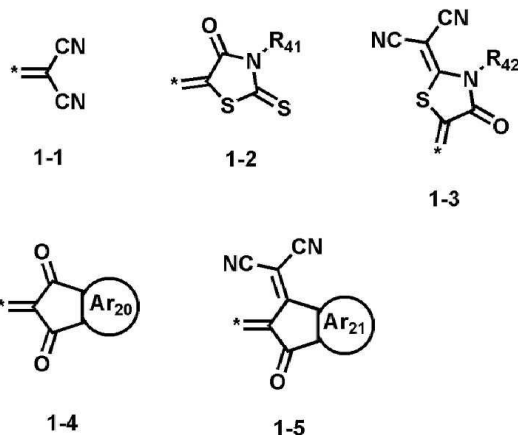
- [0007] 일 측면에 따르면,
- [0008] 하기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 제공된다:
- [0009] <화학식 1>



- [0010]
- [0011] <화학식 2>



[0019] Ar₁, Ar₃, Ar₅, Ar₇, Ar₉, Ar₁₁, Ar₁₃ 및 Ar₁₅는 서로 독립적으로 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중에서 선택되고,



[0020]

[0021] *은 결합 이웃 원자와의 결합을 나타내며,

[0022] 상기 Ar₂, Ar₄, Ar₆, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₂, Ar₁₄, Ar₁₆, Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0023] 상기 R₁ 내지 R₂₈, R₃₁ 내지 R₃₈, R₄₁ 내지 R₄₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라조노기, 히드라조노기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 또는 -P(=S)(Q₁)(Q₂)이고,

[0024] 상기 R_{10a}는,

[0025] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기 또는 니트로기;

[0026] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁), -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

[0027] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁), -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기; 또는

- [0028] $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$ 또는 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$; 이고,
- [0029] Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} , Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; $-\text{F}$; $-\text{Cl}$; $-\text{Br}$; $-\text{I}$; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기; $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기; $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기; $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기; 또는 중수소, $-\text{F}$, 시아노기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹, $\text{C}_7\text{-C}_{60}$ 아릴알킬기, 또는 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴알킬기이다.
- [0030] 다른 측면에 따르면,
- [0031] 제1전극;
- [0032] 상기 제1전극에 대향된 제2전극;
- [0033] 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치된 활성층;을 포함하는 유기 광검출기로서,
- [0034] 상기 활성층이 상기 화학식 1 내지 4중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 광검출기가 제공된다.
- [0035] 또 다른 측면에 따르면,
- [0036] 상기 유기 광검출기를 포함하는, 전자 장치가 제공된다.

발명의 효과

- [0037] 일 구현예에 따른 화합물은 근적외선 영역을 흡수하면서 증착 가능하며, 이를 활성층에 사용한 유기 광검출기 및 전자 장치는 효율이 우수하다.

도면의 간단한 설명

- [0038] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 광검출기의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 2 및 3은 일 구현예를 따르는 전자 장치의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 4a 및 4b는 일 구현예를 따르는 전자 장치를 예시한 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0039] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 본 발명의 효과 및 특징, 그리고 그것들을 달성하는 방법은 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다. 그러나 본 발명은 이하에서 개시되는 실시예들에 한정되는 것이 아니라 다양한 형태로 구현될 수 있다.
- [0040] 이하의 실시예에서, 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0041] 이하의 실시예에서, 포함하다 또는 가지다 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 또는 구성요소가 존재함을 의미하는 것이고, 하나 이상의 다른 특징들 또는 구성요소가 부가될 가능성을 미리 배제하는 것은 아니다.
- [0042] 이하의 실시예에서, 막, 영역, 구성 요소 등의 부분이 다른 부분 위에 또는 상에 있다고 할 때, 다른 부분의 바로 위에 있는 경우뿐만 아니라, 그 중간에 다른 막, 영역, 구성 요소 등이 개재되어 있는 경우도 포함한다.
- [0043] 도면을 참조하여 설명할 때 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.
- [0044] 도면에서는 설명의 편의를 위하여 구성 요소들이 그 크기가 과장 또는 축소될 수 있다. 예컨대, 도면에서 나타난 각 구성의 크기 및 두께는 설명의 편의를 위해 임의로 나타내었으므로, 본 발명이 반드시 도시된 바에 한정되지 않는다.
- [0045] [도 1에 대한 설명]
- [0046] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 광검출기(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다.
- [0047] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 광검출기(10)는 제1전극(110), 상기 제1전극(110)에 대향된 제2전극(170), 상기 제1전극(110)과 상기 제2전극(170) 사이에 배치된 활성층(140), 상기 활성층(140)과 상기 제2전극

(170) 사이에 배치된 전자 주입층(160), 전자 수송층(150), 버퍼층(미도시), 상기 제1전극(110)과 상기 활성층(140) 사이에 배치된 정공 주입층(120), 정공 수송층(130), 보조층(미도시)을 포함할 수 있다.

[0048] 도 1에서, 예를들어, 상기 전자 주입층(160), 전자 수송층(150), 버퍼층(미도시), 정공 주입층(120), 정공 수송층(130) 및 보조층(미도시) 각각은 독립적으로 경우에 따라, 있을 수도 있고 없을 수도 있다.

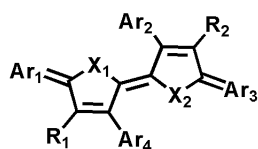
[0049] 최근, 유기 발광 소자에 유기 광검출기를 함께 형성하여 센서로 개발하는 추세이다.

[0050] 발광효율이 높은 유기 발광 소자의 빛을 흡수하는 유기 재료를 활용하여, 유기 발광 소자의 공통층(예를 들어 정공 수송층, 전자 수송층)이 적용된 유기 광검출기에서 높은 흡광 효율(EQE)을 낼 수 있는 소자를 개발하고 있다.

[0051] 증착용 단분자는 1500g/mol 이하의 분자량을 필요로 한다. 근적외선 영역을 흡광하기 위해서는 effective conjugation을 늘려 밴드 갭을 감소시켜야 한다. 하지만 제한된 분자량 내에서 effective conjugation 길이를 조절하여 근적외선 영역에 이르는 영역을 흡광하는 분자를 디자인 하기에 어렵다.

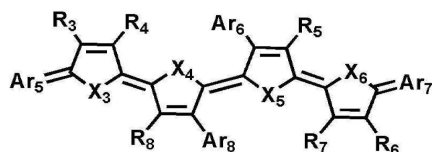
[0052] 일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)은 하기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0053] <화학식 1>



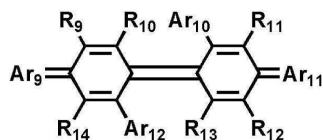
[0054]

[0055] <화학식 2>



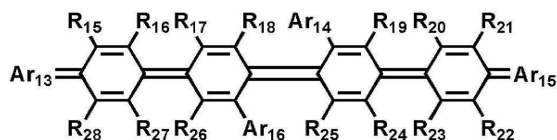
[0056]

[0057] <화학식 3>



[0058]

[0059] <화학식 4>

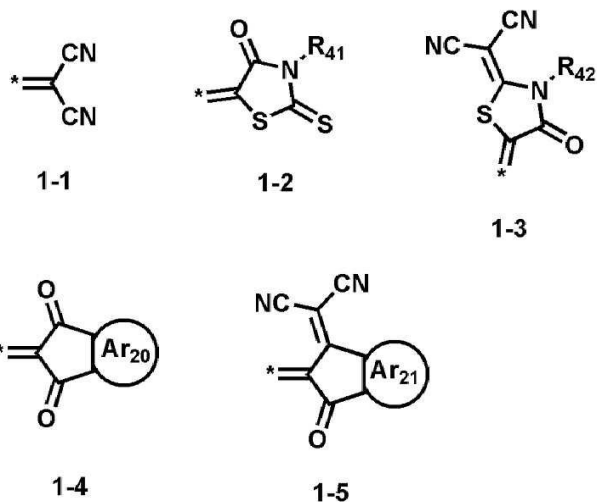


[0060]

[0061] 상기 화학식 1 내지 4에서,

[0062] X₁ 내지 X₆은 서로 독립적으로 O, S, Se, Te, CR₃₁R₃₂, NR₃₃, BR₃₄, SiR₃₅R₃₆ 및 GeR₃₇R₃₈ 중에서 선택되고,

[0063] Ar_1 , Ar_3 , Ar_5 , Ar_7 , Ar_9 , Ar_{11} , Ar_{13} 및 Ar_{15} 는 서로 독립적으로 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중에서 선택되고,



[0064]

[0065] *은 결합 이웃 원자와의 결합을 나타내며,

[0066] 상기 Ar_2 , Ar_4 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_{10} , Ar_{12} , Ar_{14} , Ar_{16} , Ar_{20} 및 Ar_{21} 은 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0067] 상기 R_1 내지 R_{28} , R_{31} 내지 R_{38} , R_{41} 내지 R_{42} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 이고,

[0068] 상기 R_{10a} 는,

[0069] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기 또는 니트로기;

[0070] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_7 - C_{60} 아릴알킬기, C_2 - C_{60} 헤테로아릴알킬기, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$, $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기 또는 C_1 - C_{60} 알콕시기;

[0071] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_7 - C_{60} 아릴알킬기, C_2 - C_{60} 헤테로아릴알킬기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$,

$-S(=O)_2(Q_{21})$, $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_7-C_{60} 아릴알킬기, 또는 C_2-C_{60} 헤테로아릴알킬기; 또는

[0072] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 또는 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;이고,

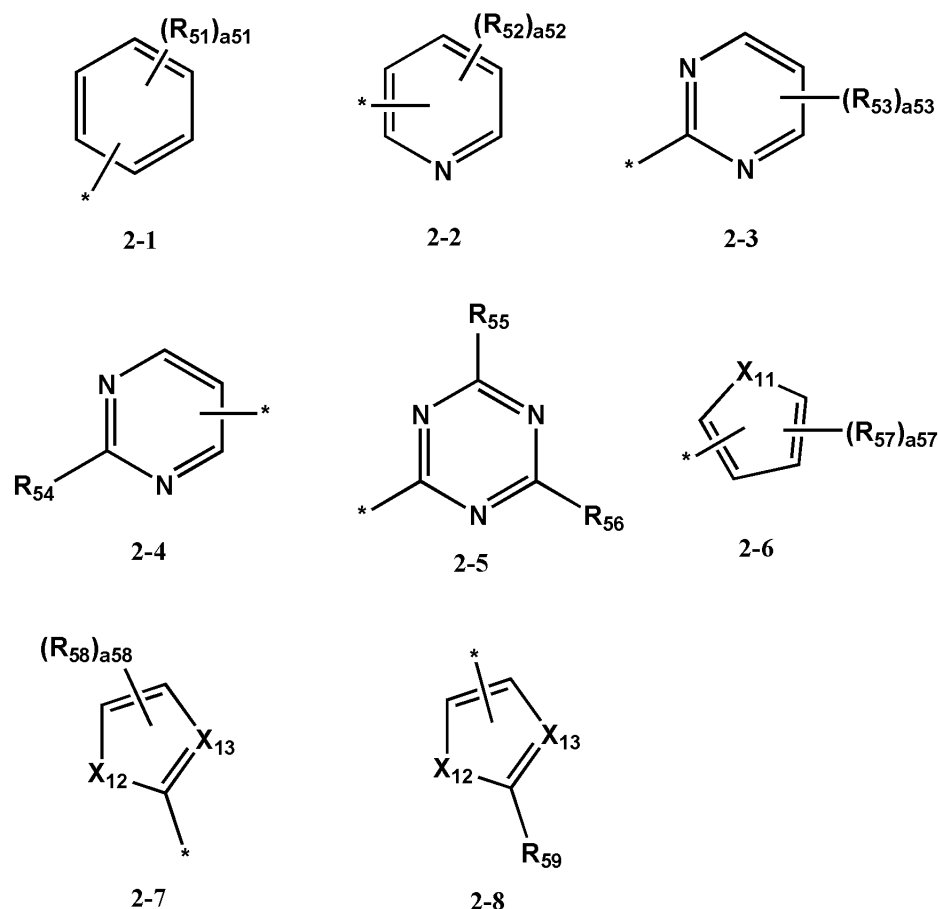
[0073] Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} , Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; $-F$; $-Cl$; $-Br$; $-I$; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{60} 알킬기; C_2-C_{60} 알케닐기; C_2-C_{60} 알키닐기; C_1-C_{60} 알콕시기; 또는 중수소, $-F$, 시아노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_7-C_{60} 아릴알킬기, 또는 C_2-C_{60} 헤테로아릴알킬기이다.

[0074] 퀴노이드 구조인 상기 화학식 1 내지 4는 아로마틱 구조 대비 밴드갭이 감소하는 특성이 있어, 상대적으로 작은 분자량으로도 근적외선 영역까지 흡광할 수 있다. 또한, 가시광선 영역에서 흡광이 없고 녹색, 적색, 및/또는 근적외선 영역만을 흡수하므로, 녹색, 적색, 및/또는 근적외 영역만 선택적으로 감지하기에 유리하다. 상기 화학식 1 내지 4의 구조는 분자 평면화에 의한 $\pi-\pi$ stacking이 강화되어 높은 결정화도 및 전하 이동도를 확보할 수 있다.

[0075] 본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1 내지 4의 화합물은 아로마틱 구조인 벤제노이드 화합물 대비 흡수 파장이 길고, 밴드 갭이 좁다는 것을 확인하였다. 이에 대해서는 후술한다.

[0076] 일 구현예에 따르면, Ar_2 , Ar_4 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_{10} , Ar_{12} , Ar_{14} , Ar_{16} , Ar_{20} 및 Ar_{21} 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기일 수 있다(상기 R_{10a} 는 제1항에서의 정의와 동일하다. 이하 같다).

[0077] 예를 들어, Ar_2 , Ar_4 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_{10} , Ar_{12} , Ar_{14} , Ar_{16} , Ar_{20} 및 Ar_{21} 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 화학식 2-1 내지 2-8 중에서 선택될 수 있다:

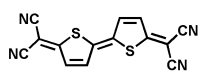


[0078]

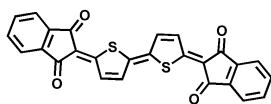
[0079] 상기 화학식 2-1 내지 2-8에서, X_{11} 내지 X_{13} 은 N, O 또는 S를 나타내고, R_{51} 내지 R_{59} 는 서로 독립적으로 수소,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -C(Q₁)(Q₂)(Q₃), -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

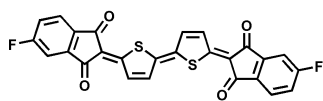
- [0080] a51은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0081] a52는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
- [0082] a53 및 a57은 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0083] a58은 1 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
- [0084] 상기 Q₁ 내지 Q₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹; C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹; C₇-C₆₀아릴알킬기; 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기;이다.
- [0085] 일 구현예에 따르면, R₁ 내지 R₂₈은 서로 독립적으로 수소 또는 중수소일 수 있다.
- [0086] 일 구현예에 따르면, R₃₁ 내지 R₃₈은 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, 또는 C₆-C₆₀아릴옥시기일 수 있다.
- [0087] 일 구현예에 따르면, Ar₂₀ 및 Ar₂₁은 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기일 수 있다.
- [0088] 일 구현예에 따르면, R₄₁ 내지 R₄₂는 서로 독립적으로 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기일 수 있다.
- [0089] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 C₂ 대칭성을 가질 수 있다. 'C₂ 대칭성을 가진다'는 것은 화합물의 중심 축에서 화합물을 180도 회전했을 때, 회전하기 전과 회전한 후가 동일한 것을 말한다.
- [0090] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 분자량은 1500 g/mol 이하일 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1 내지 4로 표시되는 화합물의 분자량은 250 내지 1500 g/mol일 수 있다. 분자량이 1500 g/mol 이하이므로, 증착에 어려움이 없다.
- [0091] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 Highest occupied molecular orbital(HOMO) 에너지 레벨은 -6.5 내지 -4.5 eV이고, Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) 에너지 레벨은 -4.7 내지 -3.0 eV일 수 있다.
- [0092] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 옵티컬 밴드 갭(optical bane gap)은 2.0 eV 이하일 수 있다. 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 아로마틱 구조의 화합물과 비교할 때 옵티컬 밴드 갭이 감소하여 작은 분자량으로도 근적외선 영역까지의 흡광할 수 있다.
- [0093] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 분해 온도가 200℃ 이상일 수 있다. 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 분자 평면화에 의한 π-π stacking이 강화되어 높은 결정화도를 가지므로 분해 온도가 높아(예를 들어, 200 ~ 350℃) 증착 공정에 문제가 없다. 예를 들어, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물의 분해 온도가 290℃ 이상일 수 있다.
- [0094] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물이 다음 화합물들 중 어느 하나로부터 선택될 수 있다:



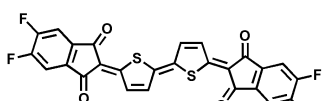
1



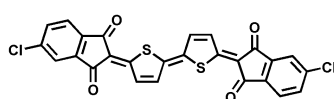
2



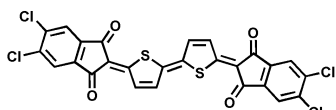
3



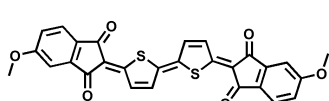
4



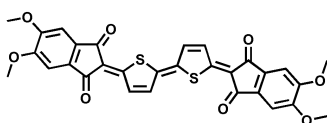
5



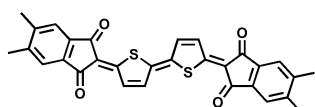
6



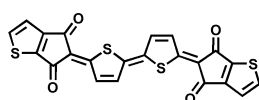
7



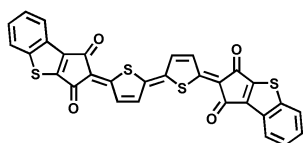
8



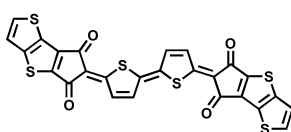
9



10

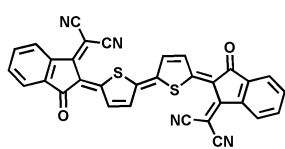


11

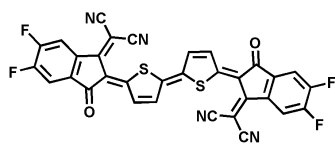


12

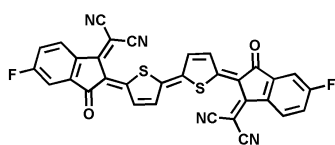
[0095]



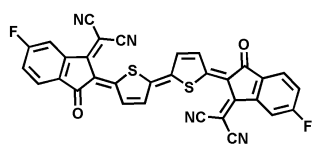
13



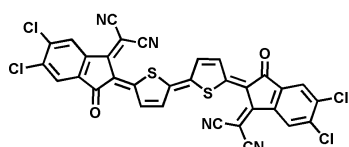
14



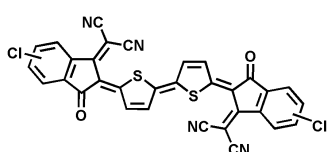
15



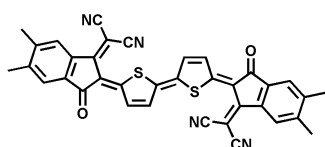
16



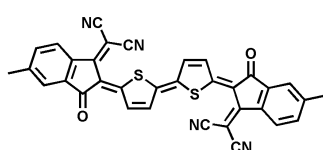
17



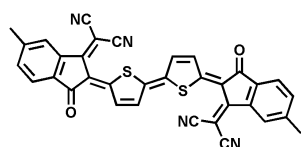
18



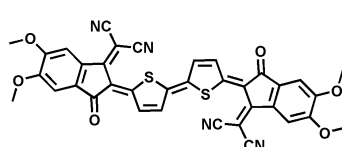
19



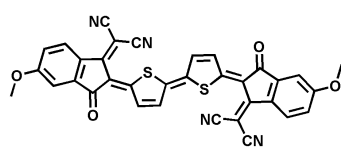
20



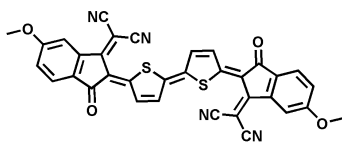
21



22

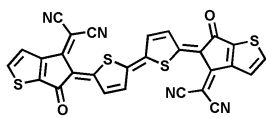


23

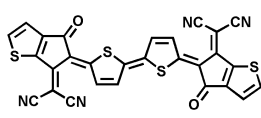


24

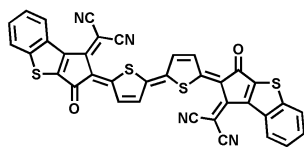
[0096]



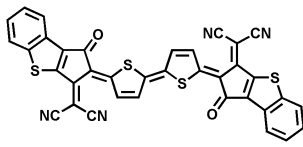
25



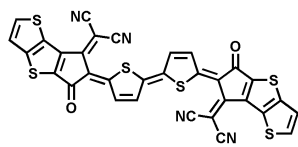
26



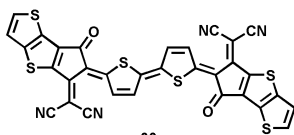
27



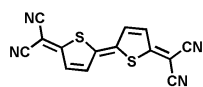
28



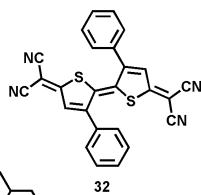
29



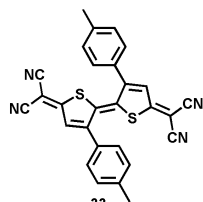
30



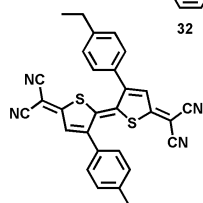
31



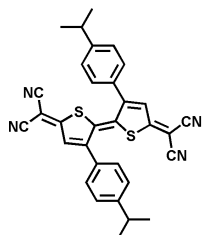
32



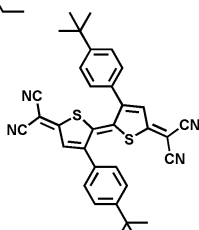
33



34

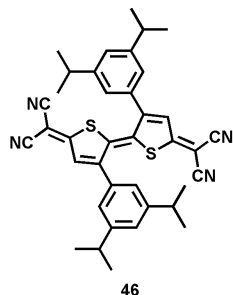
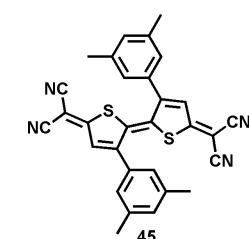
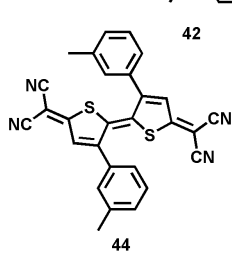
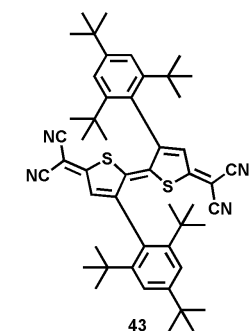
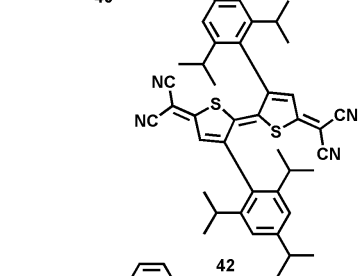
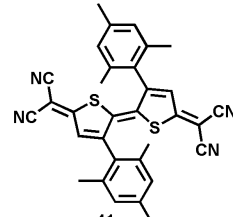
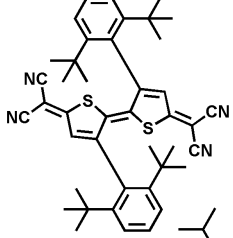
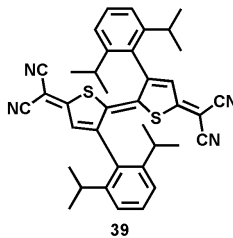
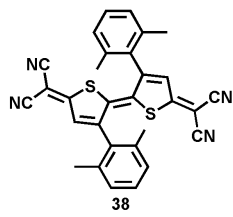
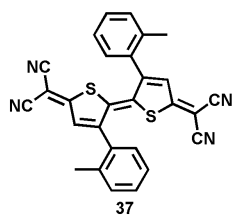


35

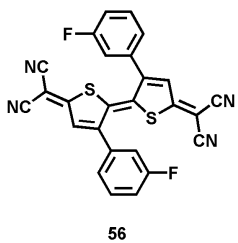
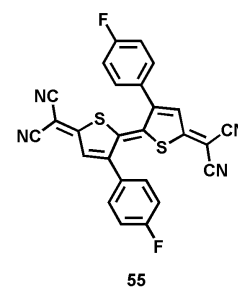
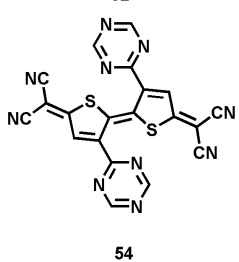
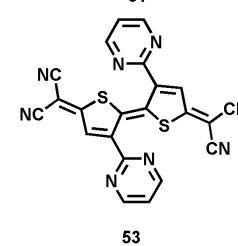
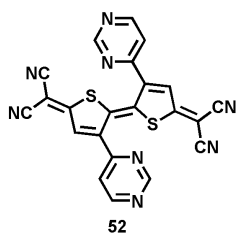
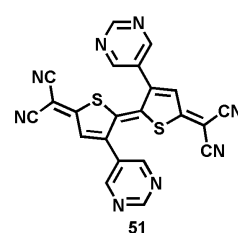
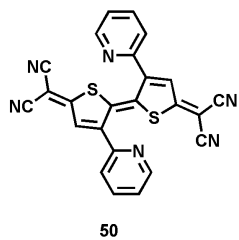
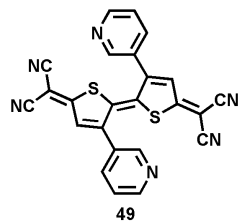
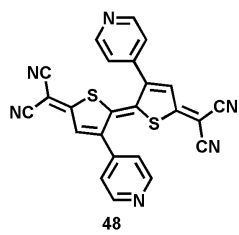
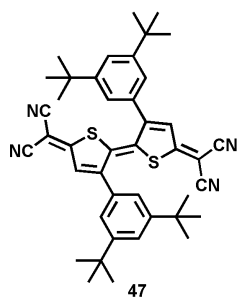


36

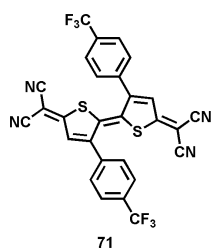
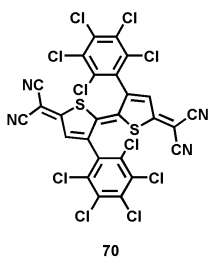
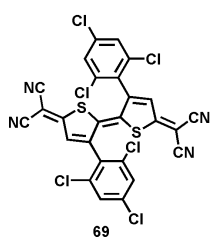
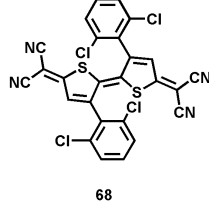
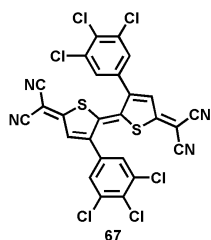
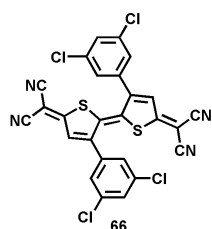
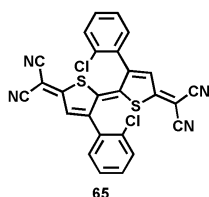
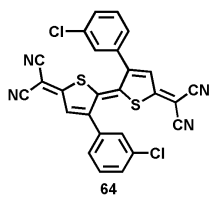
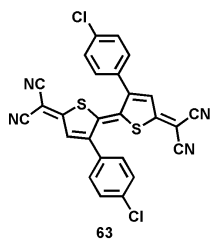
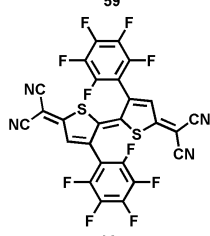
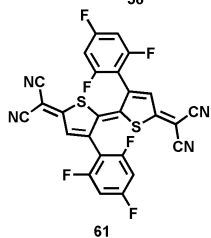
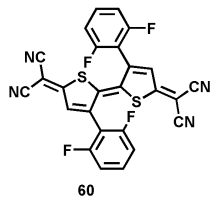
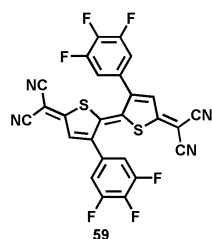
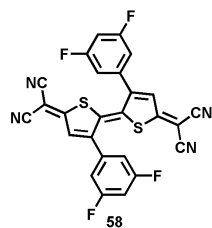
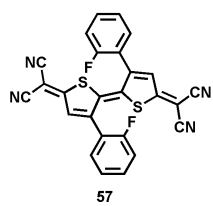
[0097]



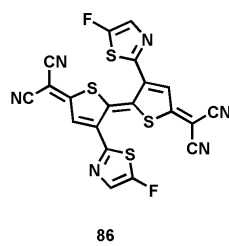
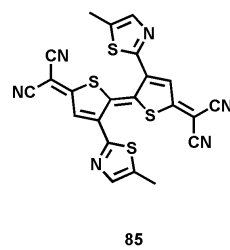
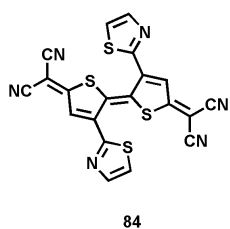
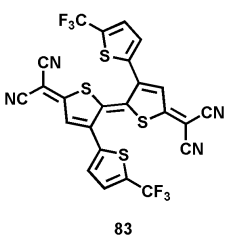
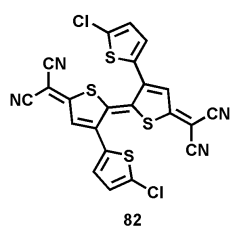
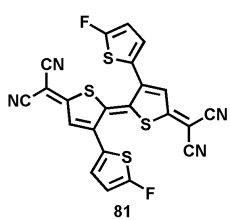
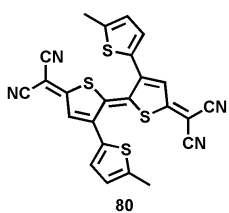
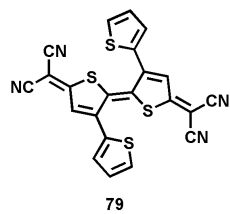
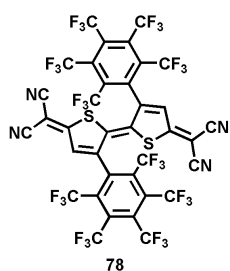
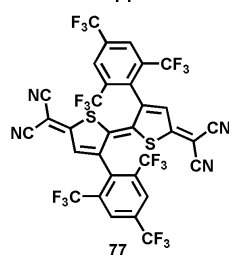
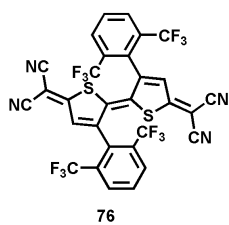
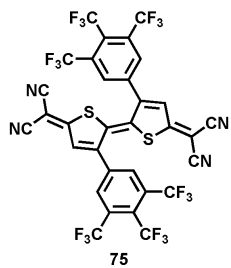
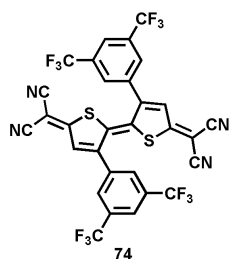
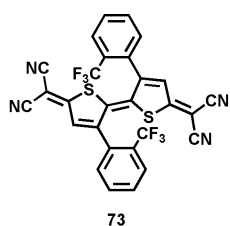
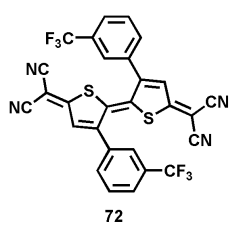
[0098]



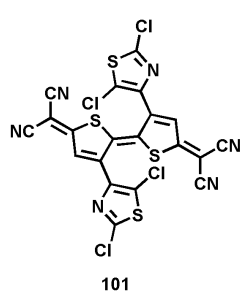
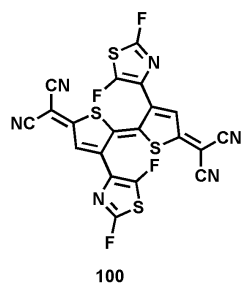
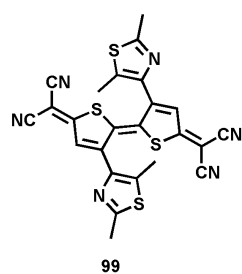
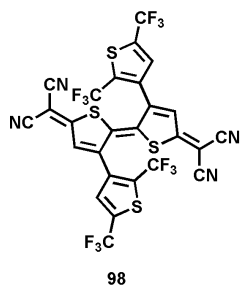
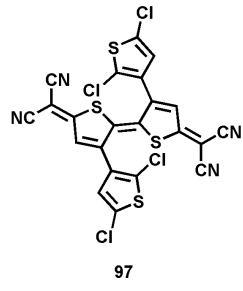
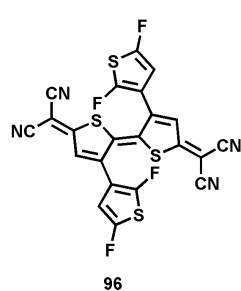
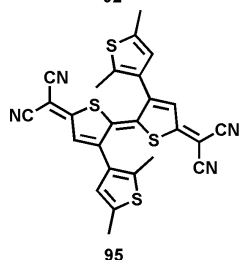
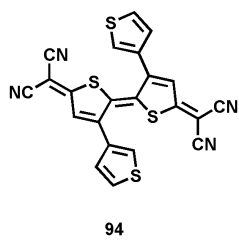
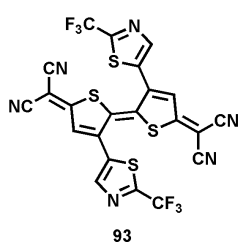
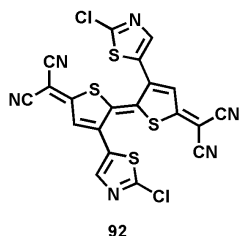
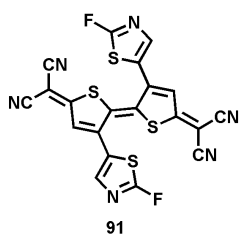
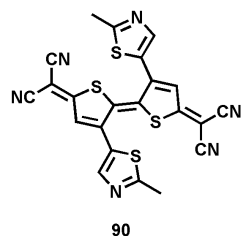
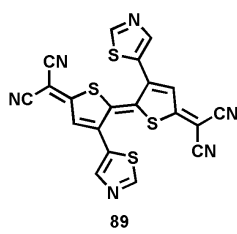
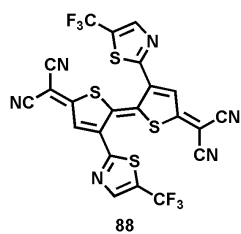
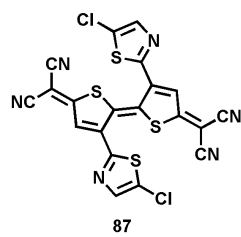
[0099]



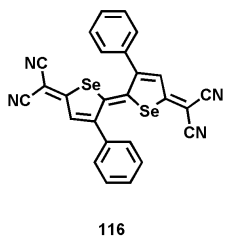
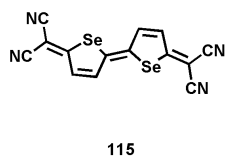
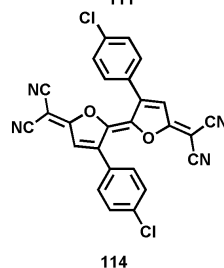
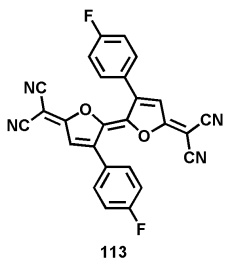
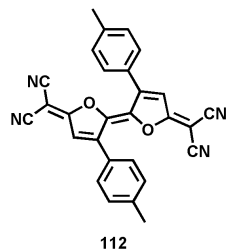
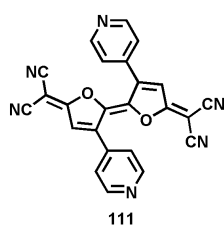
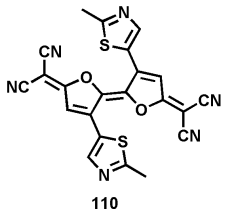
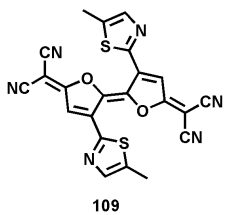
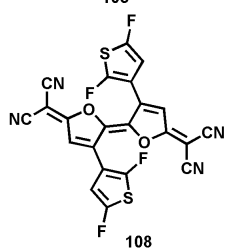
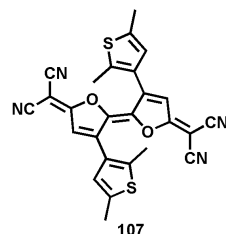
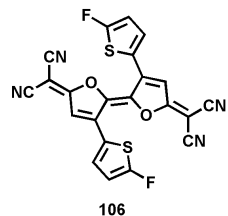
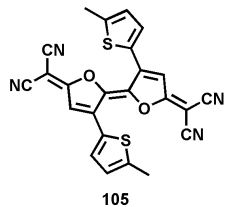
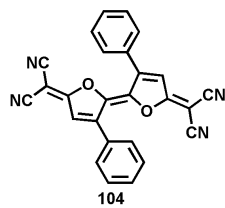
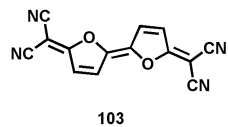
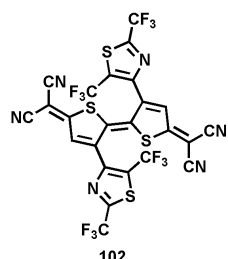
[0100]



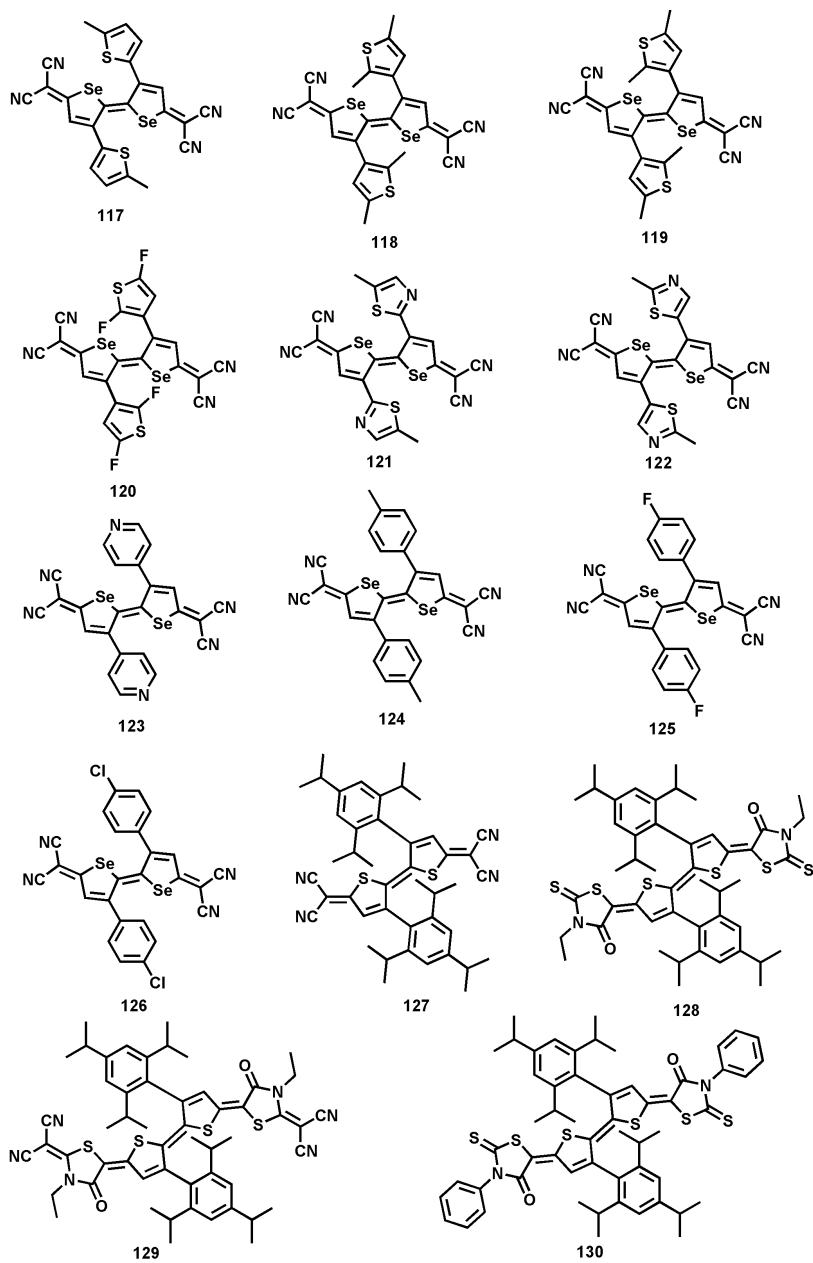
[0101]



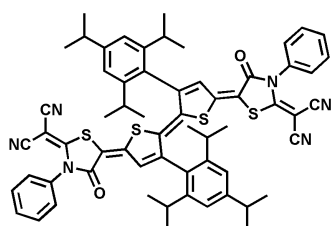
[0102]



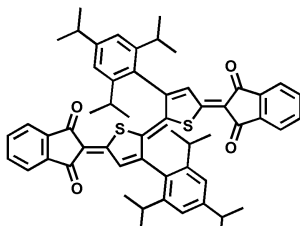
[0103]



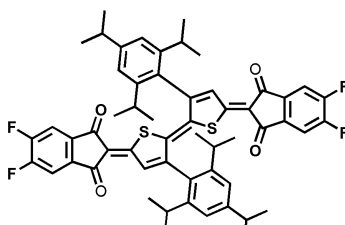
[0104]



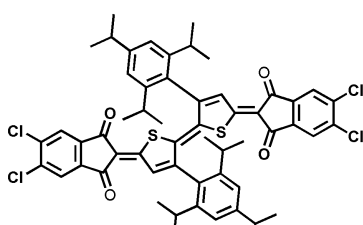
131



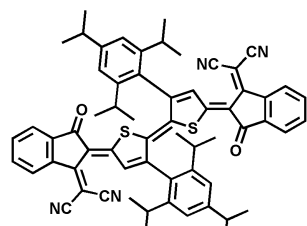
132



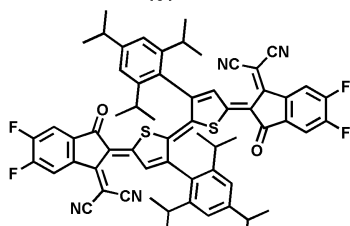
133



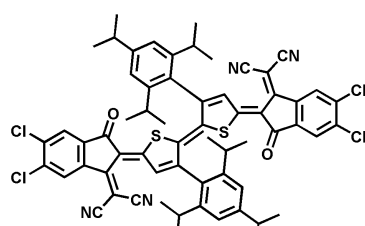
134



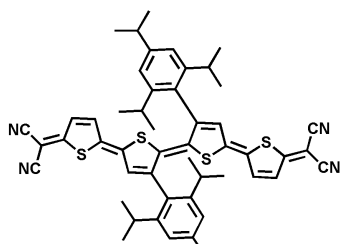
135



136

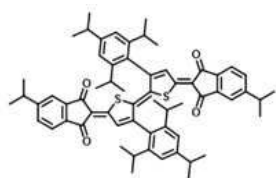


137

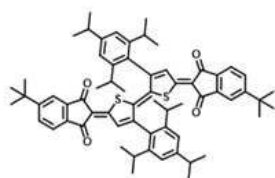


138

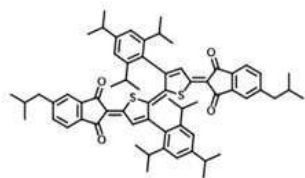
[0105]



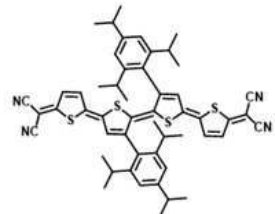
139



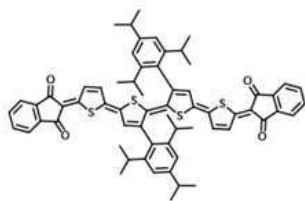
140



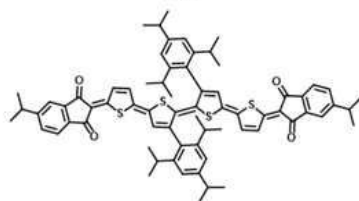
141



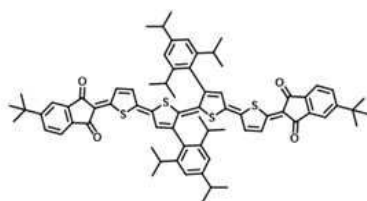
142



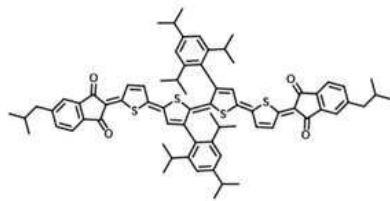
143



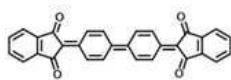
144



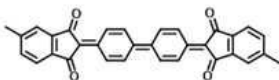
145



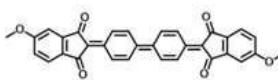
146



147

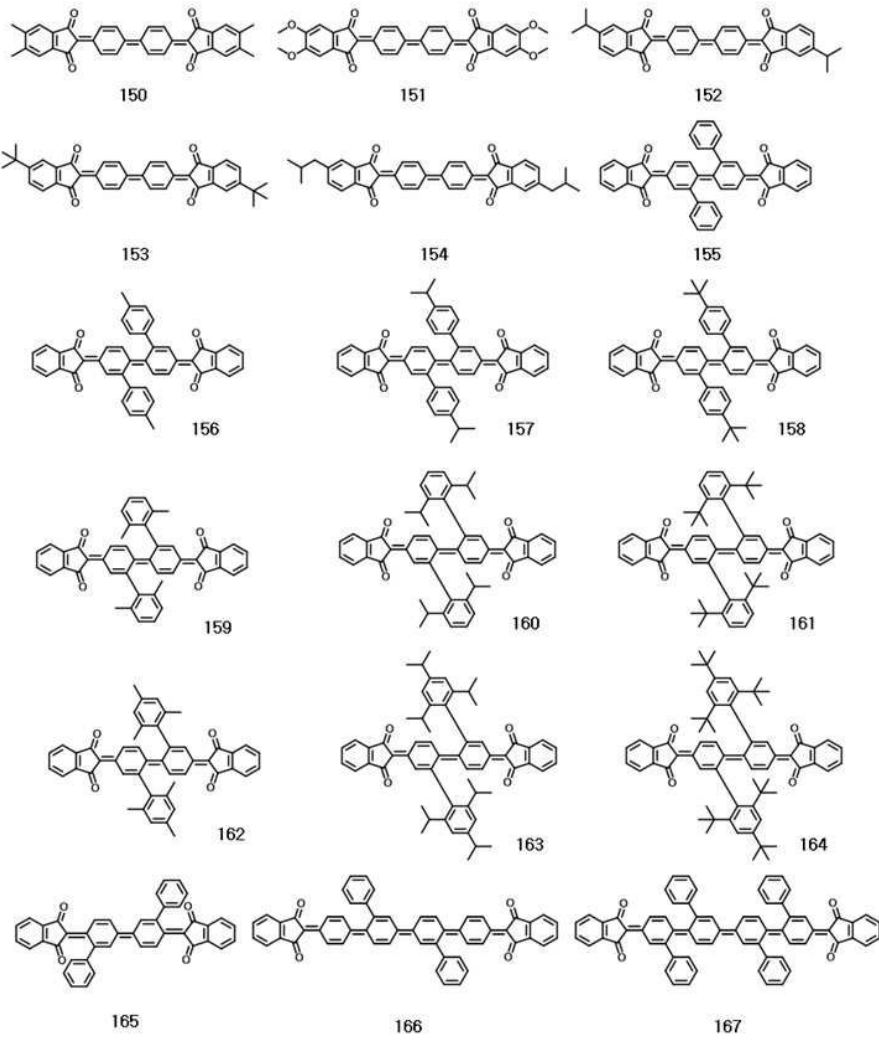


148

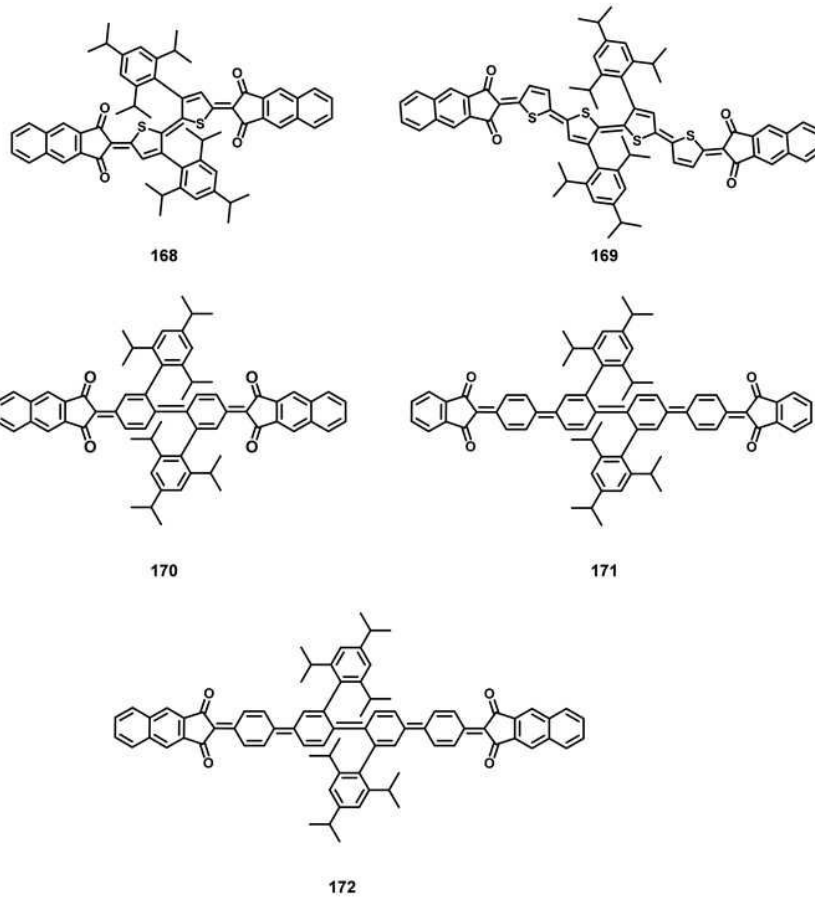


149

[0106]



[0107]



[0108]

[0109]

상기 활성층(140)은 외부에서 빛을 받아 엑시톤(exciton)을 생성한 후 생성된 엑시톤을 정공과 전자로 분리하는 층이다. 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 활성층(140)은 추가적인 전자 도너 및/또는 전자 억셉터를 포함할 수도 있다.

[0110]

일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)이 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 전자 억셉터 또는 전자 도너로서 포함할 수 있다.

[0111]

일 구현예에 따르면, 상기 활성층은 녹색, 적색 및/또는 근적외선을 흡수할 수 있다. 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 밴드 갭이 좁아 녹색, 적색 및/또는 근적외선을 흡수할 수 있으므로, 이를 포함하는 상기 활성층은 녹색, 적색 및/또는 근적외선을 흡수할 수 있다.

[0112]

상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 전자 억셉터 또는 전자 도너로서 작용할 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터;를 포함할 수 있다.

[0113]

예를 들어, 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 층; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터를 포함하는 층;을 포함할 수 있다. 이 경우, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 전자 억셉터 또는 전자 도너로서 작용할 수 있다.

[0114]

예를 들어, 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 상기 층; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터를 포함하는 상기 층;은 접할 수 있다. 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 상기 층; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터;를 포함하는 상기 층;은 물리적으로 직접 접할 수 있다.

[0115]

예를 들어, 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 상기 층; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터를 포함하는 상기 층;은 PN 접합(PN junction)을 형성할 수 있다. 이들 층의 계면에서 발생하는 광유도 전하 분리에 의하여 엑시톤이 정공 및 전자로 효율적으로 분리될 수 있다. 더불어, 상기 활성층(140)이 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 상기 층; 및 전자 도너를 포함하는 상기 층;으로 분리됨에 의해, 계면에서 생성된 정공 및 전자의 포획 및 이동이 용이할 수 있다.

[0116]

일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물; 및 전자

도너, 또는 전자 억셉터;의 혼합물을 포함하는 층을 포함할 수 있다. 이 경우, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 전자 억셉터 또는 전자 도너로서 작용할 수 있다. 이 경우, 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터;를 공증착하여 형성할 수 있다. 상기 활성층(140)이 혼합층일 경우, 엑시톤이 도너-억셉터 인터페이스로부터의 확산 길이 내에 생성될 수 있으므로, 유기 광검출기의 외부 양자 효율이 향상될 수 있다. 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물; 및 전자 도너, 또는 전자 억셉터;의 비는 예를 들어, 10:90 내지 90:10(중량비)일 수 있다.

[0117] 일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)은 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어진 층을 포함할 수 있다. 이 경우, 상기 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 전자 억셉터 및/또는 전자 도너로 작용할 수 있다.

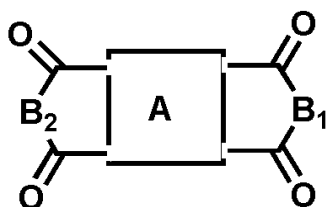
[0118] 일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140)이 p-도펀트를 포함할 수 있다. 상기 p-도펀트는 상기 활성층(140)에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 활성층(140)이 p-도펀트로 도핑됨으로써 전계에 의한 전하 주입 원리에 의하여 외부 양자 효율이 향상될 수 있다. P-도펀트에 대해서는 후술한다.

[0119] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 도너는 LUMO 에너지 level이 -2eV 보다 deep하고, HOMO 에너지 level이 -3eV 보다 deep한 유기 또는 무기 재료일 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 도너는 LUMO 에너지 level이 -3eV 내지 -5eV이고, HOMO 에너지 level이 -4eV 내지 -7eV인 유기 또는 무기 재료일 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 도너는 보론 서브프탈로시아닌 클로라이드(SubPc), 구리(II)프탈로시아닌(CuPc), 테트라페닐디벤조페리플란텐(DBP), 또는 이의 임의의 조합일 수 있다.

[0120] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 억셉터는 LUMO 에너지 level이 -3eV 보다 deep하고, HOMO 에너지 level이 -4eV 보다 deep한 유기 또는 무기 재료일 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 억셉터는 LUMO 에너지 level이 -4eV 내지 -6eV이고, HOMO 에너지 level이 -5eV 내지 -8eV인 유기 또는 무기 재료일 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 억셉터는 C60 풀러렌, HATCN, TCNQ, 또는 diimides 계열의 논풀러렌(nonfullerene) 등일 수 있다.

[0121] Diimide 계열의 논풀러렌(nonfullerene) 화합물로서 예를 들어, 하기 화학식 5로 표현되는 화합물을 사용할 수 있다.

[0122] <화학식 5>



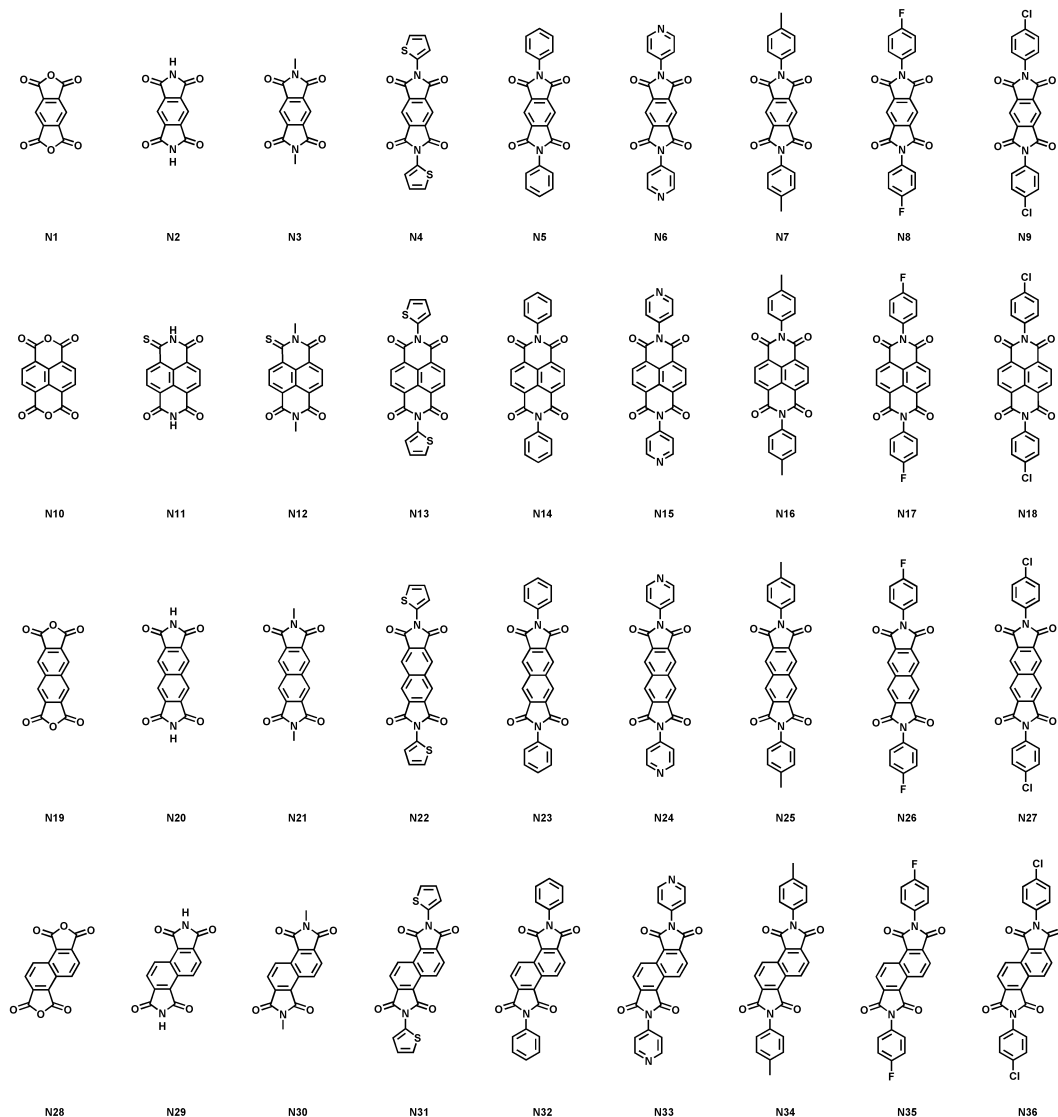
[0123]

[0124] 화학식 5에서,

[0125] A는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹일 수 있고,

[0126] B₁ 및 B₂는 서로 독립적으로 산소 또는 -NR₁₀-일 수 있고, 여기서 R₁₀은 수소, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 할로겐 원자, 또는 할로겐 함유기일 수 있다.

[0127] 화학식 5의 예는 하기와 같지만 이에 한정하는 것은 아니다.



[0128]

[0129] 상기 제1전극(110) 및 제2전극(170) 중 하나는 애노드이고, 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)이 애노드이고, 상기 제2전극(170)이 캐소드일 수 있다.

[0130]

상기 유기 광검출기(10)의 정공 수송 영역은 상기 제1전극(110) 상부에 정공 주입층(120), 정공 수송층(130), 보조층(미도시), 전자 저지층(미도시), 또는 또는 이의 임의의 조합이 배치된 구조를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 보조층은 정공 수송층(130) 및 활성층(140) 사이에 위치할 수 있다.

[0131]

상기 유기 광검출기(10)의 전자 수송 영역은 상기 활성층(140) 상부에 버퍼층(미도시), 정공 저지층(미도시), 전자 수송층(150), 전자 주입층(160), 또는 또는 이의 임의의 조합이 배치된 구조를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 버퍼층은 전자 수송층(150) 및 활성층(140) 사이에 위치할 수 있다.

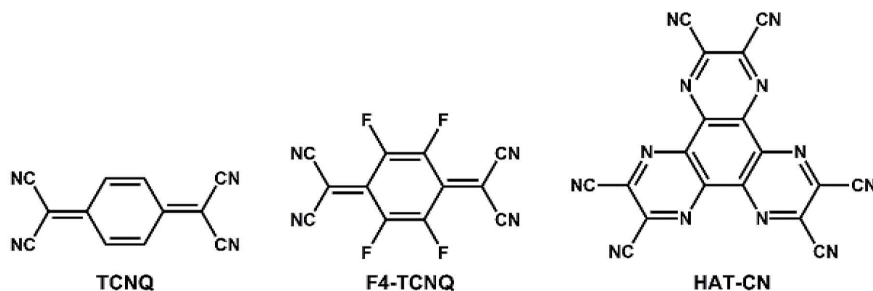
[0132]

일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 시아노기-함유 화합물, 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

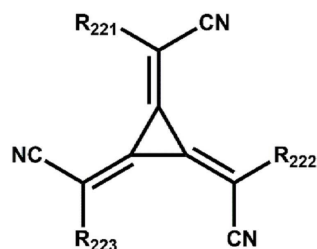
[0133]

상기 퀴논 유도체의 예는, TCNQ, F4-TCNQ 등을 포함할 수 있다.

[0134] 상기 시아노기-함유 화합물의 예는 HAT-CN, 하기 화학식 221로 표시된 화합물 등을 포함할 수 있다.



[0135]



[0136]

[0137] <화학식 221>

[0138] 상기 화학식 221 중,

[0139] R_{221} 내지 R_{223} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0140] 상기 R_{221} 내지 R_{223} 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, 시아노기; -F; -Cl; -Br; -I; 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, 또는 이의 임의의 조합으로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기; 또는 이의 임의의 조합으로 치환된, C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

[0141] 상기 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물 중, 원소 EL1은 금속, 준금속, 또는 이의 조합이고, 원소 EL2는 비금속, 준금속, 또는 이의 조합일 수 있다.

[0142] 상기 금속의 예는, 알칼리 금속(예를 들면, 리튬(Li), 나트륨(Na), 칼륨(K), 루비듐(Rb), 세슘(Cs) 등); 알칼리 토금속(예를 들면, 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr), 바륨(Ba) 등); 전이 금속(예를 들면, 티타늄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 바나듐(V), 니오브(Nb), 탄탈(Ta), 크롬(Cr), 몰리브덴(Mo), 텅스텐(W), 망간(Mn), 테크네튬(Tc), 레늄(Re), 철(Fe), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 코발트(Co), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 니켈(Ni), 팔라듐(Pd), 백금(Pt), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au) 등); 전이후 금속(예를 들면, 아연(Zn), 인듐(In), 주석(Sn) 등); 란타나이드 금속(예를 들면, 란타넘(La), 세륨(Ce), 프라세오디뮴(Pr), 네오디뮴(Nd), 프로메튬(Pm), 사마륨(Sm), 유로퓸(Eu), 가돌리늄(Gd), 터븀(Tb), 디스프로슘(Dy), 홀뮴(Ho), 어븀(Er), 툴륨(Tm), 이터븀(Yb), 루테튬(Lu) 등); 등을 포함할 수 있다.

[0143] 상기 준금속의 예는, 실리콘(Si), 안티모니(Sb), 텔루륨(Te) 등을 포함할 수 있다.

[0144] 상기 비금속의 예는, 산소(O), 할로젠(예를 들면, F, Cl, Br, I 등) 등을 포함할 수 있다.

[0145] 예를 들어, 상기 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물은, 금속 산화물, 금속 할로겐화물(예를 들면, 금속 불화물, 금속 염화물, 금속 브롬화물, 금속 요오드화물 등), 준금속 할로겐화물(예를 들면, 준금속 불화물, 준금속 염화물, 준금속 브롬화물, 준금속 요오드화물 등), 금속 텔루라이드, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0146] 상기 금속 산화물의 예는, 텅스텐 옥사이드(예를 들면, WO , W_2O_3 , WO_2 , WO_3 , W_2O_5 등), 바나듐 옥사이드(예를 들면, VO , V_2O_3 , VO_2 , V_2O_5 등), 몰리브덴 옥사이드(MoO , Mo_2O_3 , MoO_2 , MoO_3 , Mo_2O_5 등), 레늄 옥사이드(예를 들면, ReO_3 등) 등을 포함할 수 있다.

[0147] 상기 금속 할로겐화물의 예는, 알칼리 금속 할로겐화물, 알칼리 토금속 할로겐화물, 전이 금속 할로겐화물, 전이후 금속 할로겐화물, 란타나이드 금속 할로겐화물 등을 포함할 수 있다.

- [0148] 상기 알칼리 금속 할로겐화물의 예는, LiF, NaF, KF, RbF, CsF, LiCl, NaCl, KCl, RbCl, CsCl, LiBr, NaBr, KBr, RbBr, CsBr, LiI, NaI, KI, RbI, CsI 등을 포함할 수 있다.
- [0149] 상기 알칼리 토금속 할로겐화물의 예는, BeF₂, MgF₂, CaF₂, SrF₂, BaF₂, BeCl₂, MgCl₂, CaCl₂, SrCl₂, BaCl₂, BeBr₂, MgBr₂, CaBr₂, SrBr₂, BaBr₂, BeI₂, MgI₂, CaI₂, SrI₂, BaI₂ 등을 포함할 수 있다.
- [0150] 상기 전이 금속 할로겐화물의 예는, 티타늄 할로겐화물(예를 들면, TiF₄, TiCl₄, TiBr₄, TiI₄ 등), 지르코늄 할로겐화물(예를 들면, ZrF₄, ZrCl₄, ZrBr₄, ZrI₄ 등), 하프늄 할로겐화물(예를 들면, HfF₄, HfCl₄, HfBr₄, HfI₄ 등), 바나듐 할로겐화물(예를 들면, VF₃, VCl₃, VBr₃, VI₃ 등), 니오브 할로겐화물(예를 들면, NbF₃, NbCl₃, NbBr₃, NbI₃ 등), 탄탈 할로겐화물(예를 들면, TaF₃, TaCl₃, TaBr₃, TaI₃ 등), 크롬 할로겐화물(예를 들면, CrF₃, CrCl₃, CrBr₃, CrI₃ 등), 몰리브덴 할로겐화물(예를 들면, MoF₃, MoCl₃, MoBr₃, MoI₃ 등), 텅스텐 할로겐화물(예를 들면, WF₃, WCl₃, WBr₃, WI₃ 등), 망간 할로겐화물(예를 들면, MnF₂, MnCl₂, MnBr₂, MnI₂ 등), 테크네튬 할로겐화물(예를 들면, TcF₂, TcCl₂, TcBr₂, TcI₂ 등), 레늄 할로겐화물(예를 들면, ReF₂, ReCl₂, ReBr₂, ReI₂ 등), 철 할로겐화물(예를 들면, FeF₂, FeCl₂, FeBr₂, FeI₂ 등), 루테튬 할로겐화물(예를 들면, RuF₂, RuCl₂, RuBr₂, RuI₂ 등), 오스뮴 할로겐화물(예를 들면, OsF₂, OsCl₂, OsBr₂, OsI₂ 등), 코발트 할로겐화물(예를 들면, CoF₂, CoCl₂, CoBr₂, CoI₂ 등), 로듐 할로겐화물(예를 들면, RhF₂, RhCl₂, RhBr₂, RhI₂ 등), 이리듐 할로겐화물(예를 들면, IrF₂, IrCl₂, IrBr₂, IrI₂ 등), 니켈 할로겐화물(예를 들면, NiF₂, NiCl₂, NiBr₂, NiI₂ 등), 팔라듐 할로겐화물(예를 들면, PdF₂, PdCl₂, PdBr₂, PdI₂ 등), 백금 할로겐화물(예를 들면, PtF₂, PtCl₂, PtBr₂, PtI₂ 등), 구리 할로겐화물(예를 들면, CuF, CuCl, CuBr, CuI 등), 은 할로겐화물(예를 들면, AgF, AgCl, AgBr, AgI 등), 금 할로겐화물(예를 들면, AuF, AuCl, AuBr, AuI 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0151] 상기 전이후 금속 할로겐화물의 예는, 아연 할로겐화물(예를 들면, ZnF₂, ZnCl₂, ZnBr₂, ZnI₂ 등), 인듐 할로겐화물(예를 들면, InI₃ 등), 주석 할로겐화물(예를 들면, SnI₂ 등), 등을 포함할 수 있다.
- [0152] 상기 란타나이드 금속 할로겐화물의 예는, YbF, YbF₂, YbF₃, SmF₃, YbCl, YbCl₂, YbCl₃, SmCl₃, YbBr, YbBr₂, YbBr₃, SmBr₃, YbI, YbI₂, YbI₃, SmI₃ 등을 포함할 수 있다.
- [0153] 상기 준금속 할로겐화물의 예는, 안티모니 할로겐화물(예를 들면, SbCl₅ 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0154] 상기 금속 텔루라이드의 예는, 알칼리 금속 텔루라이드(예를 들면, Li₂Te, Na₂Te, K₂Te, Rb₂Te, Cs₂Te 등), 알칼리 토금속 텔루라이드(예를 들면, BeTe, MgTe, CaTe, SrTe, BaTe 등), 전이 금속 텔루라이드(예를 들면, TiTe₂, ZrTe₂, HfTe₂, V₂Te₃, Nb₂Te₃, Ta₂Te₃, Cr₂Te₃, Mo₂Te₃, W₂Te₃, MnTe, TcTe, ReTe, FeTe, RuTe, OsTe, CoTe, RhTe, IrTe, NiTe, PdTe, PtTe, Cu₇Te, CuTe, Ag₂Te, AgTe, Au₂Te 등), 전이후 금속 텔루라이드(예를 들면, ZnTe 등), 란타나이드 금속 텔루라이드(예를 들면, LaTe, CeTe, PrTe, NdTe, PmTe, EuTe, GdTe, TbTe, DyTe, HoTe, ErTe, TmTe, YbTe, LuTe 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0155] 일 구현예에 따르면, 상기 활성층(140) 중 p-도펀트의 함량은 약 0.1 부피% 내지 약 10 부피%, 예를 들어 약 0.5 부피% 내지 약 5 부피%일 수 있다.
- [0156] 상기 활성층(140)의 두께는 약 200Å 내지 약 2000Å, 예를 들면, 약 400Å 내지 약 600Å일 수 있다.
- [0157] [제1전극(110)]
- [0158] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(170)의 상부에는 기관이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기관으로는, 유리 기관 또는 플라스틱 기관을 사용할 수 있다. 또는, 상기 기관은 가요성 기관일 수 있으며, 예를 들어, 폴리이미드(polyimide), 폴리에틸렌 테레프탈레이트(PET; polyethylene terephthalate), 폴리카보네이트(polycarbonate), 폴리에틸렌 나프탈레이트(polyethylene naphthalate), 폴리아릴레이트(PAR; polyarylate), 폴리에테리미드(polyether imide), 또는 이의 임의의 조합과 같이, 내열성 및 내구성이 우수한 플라스틱을 포함할 수 있다.
- [0159] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 상기 기관 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여

제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 제1전극용 물질로서 고일함수 물질을 이용할 수 있다.

[0160] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극(110)용 물질로서, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO), 또는 이의 임의의 조합을 이용할 수 있다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극(110)용 물질로서, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), 또는 이의 임의의 조합을 이용할 수 있다.

[0161] 상기 제1전극(110)은 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 복수의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있다.

[0162] [전하 보조층]

[0163] 일 구현예에 따른 유기 광검출기(10)는 활성층(140)에서 분리된 정공과 전자의 이동을 용이하게 하는 전하 보조층을 포함할 수 있다.

[0164] 상기 전하 보조층은 정공의 이동을 용이하게 하는 정공 주입층(120) 및 정공 수송층(130)을 포함하고, 전자의 이동을 용이하게 하는 전자 수송층(150), 전자 주입층(160) 등을 포함할 수 있다.

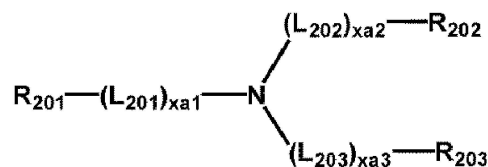
[0165] [정공 수송 영역]

[0166] 상기 제1전극(110)과 상기 활성층(140) 사이에 배치된 전하 보조층을 통틀어 정공 수송 영역으로 일컬을 수 있다.

[0167] 상기 정공 수송 영역은 전술한 정공 주입층(120), 정공 수송층(130), 보조층, 전자 저지층 등을 포함할 수 있다.

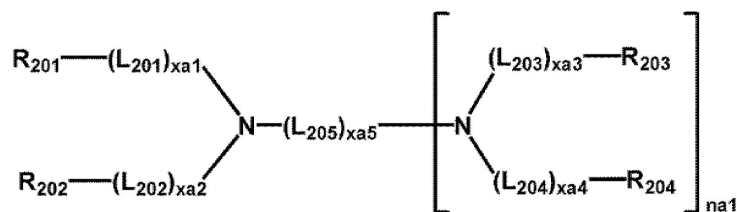
[0168] 상기 정공 수송 영역은 정공 수송 물질을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 정공 수송 물질은 하기 화학식 201로 표시되는 화합물, 하기 화학식 202로 표시되는 화합물, 또는 이의 임의의 조합(any combination thereof)을 포함할 수 있다:

[0169] <화학식 201>



[0170]

[0171] <화학식 202>



[0172]

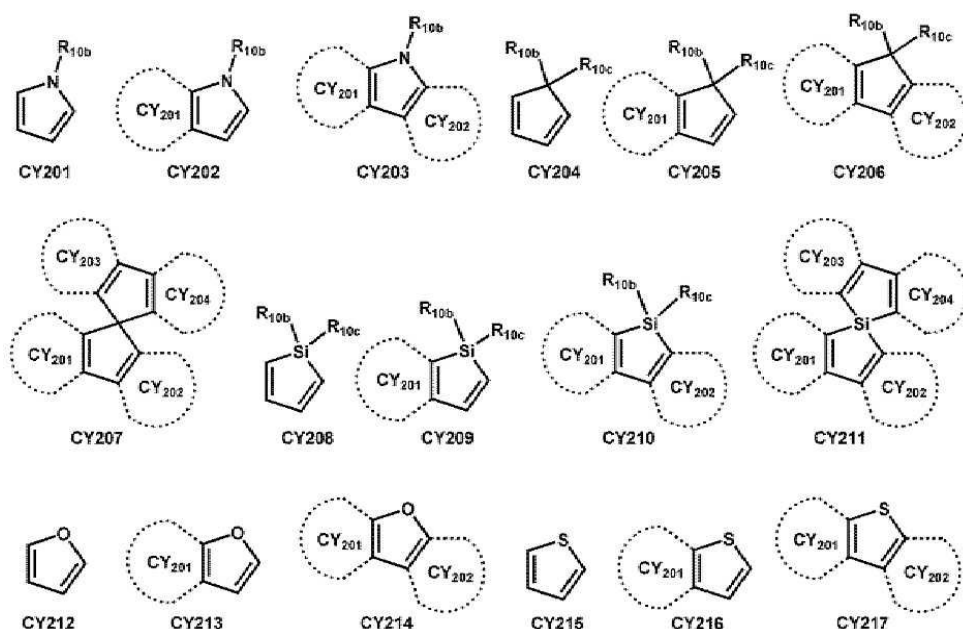
[0173] 상기 화학식 201 및 202 중,

[0174] L₂₀₁ 내지 L₂₀₄는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0175] L₂₀₅은, *-O-*, *-S-*, *-N(Q₂₀₁)-*, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬렌기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₂₀알케닐렌기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0176] x_{a1} 내지 x_{a4}는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중 하나이고,

- [0177] xa5는 1 내지 10의 정수 중 하나이고,
- [0178] R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0179] R₂₀₁과 R₂₀₂는, 선택적으로(optionally) 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅알킬렌기 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₅알케닐렌기를 통하여 서로 연결되어, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₈-C₆₀ 폴리시클릭 그룹(예를 들면, 카바졸 그룹 등)을 형성할 수 있고(예를 들면, 하기 화합물 HT16 등을 참조함),
- [0180] R₂₀₃과 R₂₀₄는, 선택적으로(optionally) 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅알킬렌기, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₅알케닐렌기를 통하여 서로 연결되어, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₈-C₆₀ 폴리시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0181] na1은 1 내지 4의 정수 중 하나일 수 있다.
- [0182] 예를 들어, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 하기 화학식 CY201 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



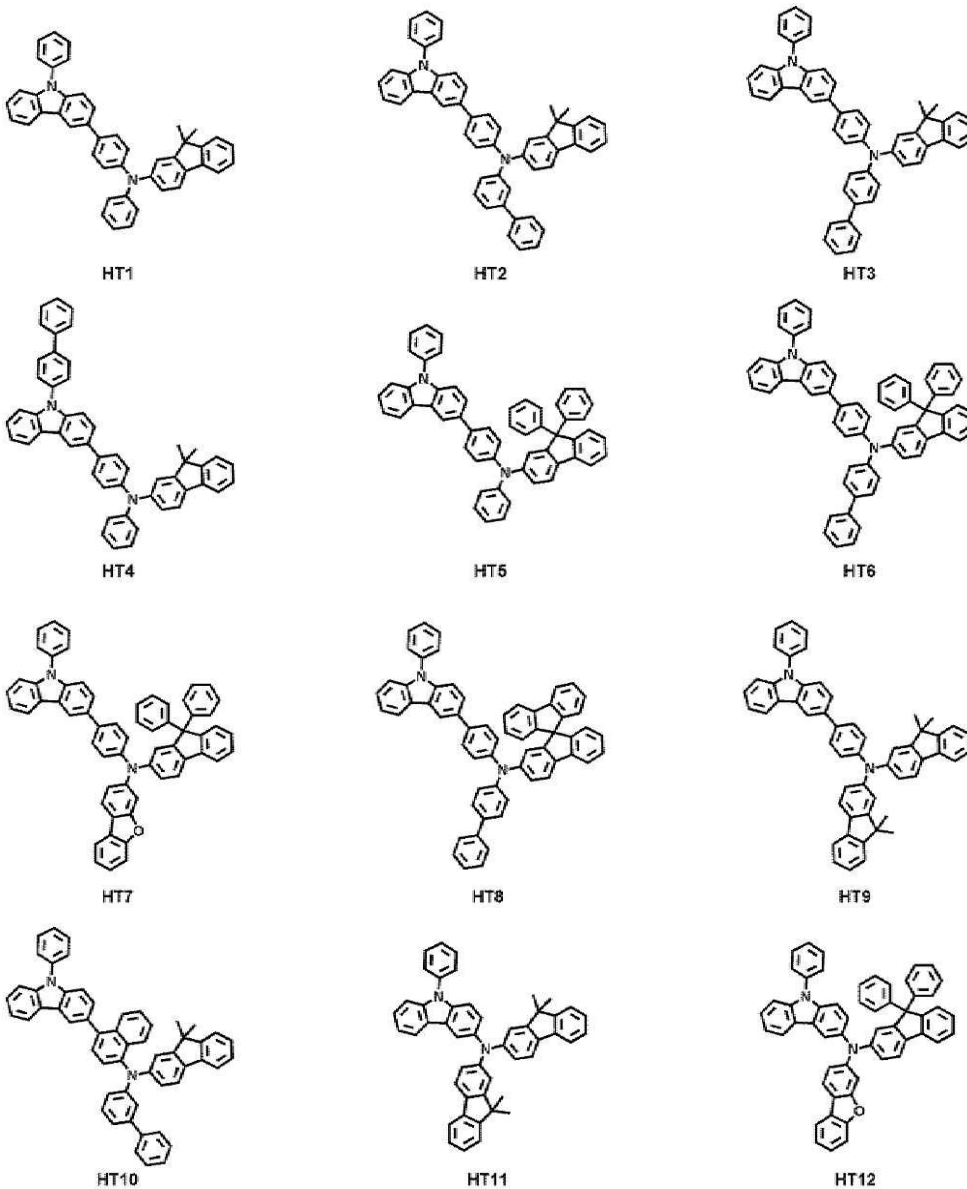
- [0183]
- [0184] 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중, R_{10b} 및 R_{10c}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_{10a}에 대한 설명을 참조하고, 고리 CY₂₀₁ 내지 고리 CY₂₀₄는 서로 독립적으로, C₃-C₂₀카보시클릭 그룹, 또는 C₁-C₂₀헤테로시클릭 그룹이고, 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중 적어도 하나의 수소는 본 명세서에 기재된 바와 같은 R_{10a}로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [0185] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중 고리 CY₂₀₁ 내지 고리 CY₂₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 또는 안트라센 그룹일 수 있다.
- [0186] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0187] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹 중 적어도 하나 및 상기 화학식 CY204 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 각각 포함할 수 있다.
- [0188] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 xa1은 1이고, R₂₀₁은 상기 화학식 CY201 내지 CY203 중 하나로 표시된 그룹이고, xa2는 0이고, R₂₀₂는 상기 화학식 CY204 내지 CY207 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다.

[0189] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹을 비포함할 수 있다.

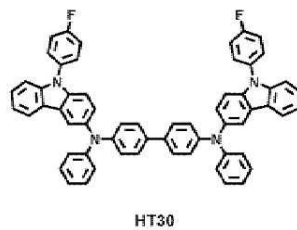
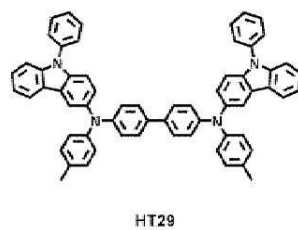
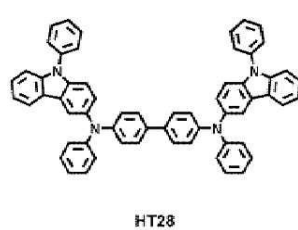
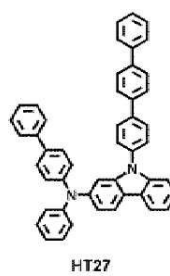
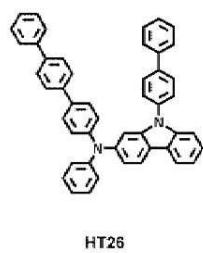
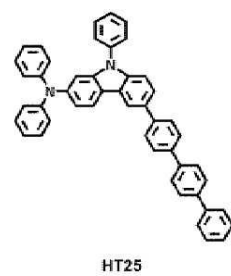
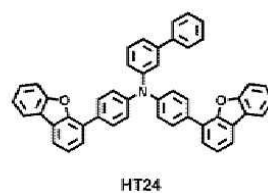
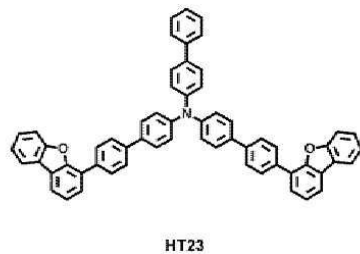
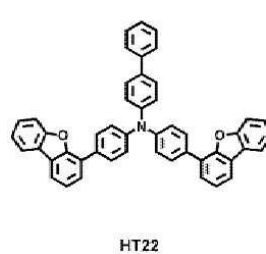
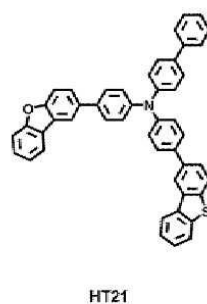
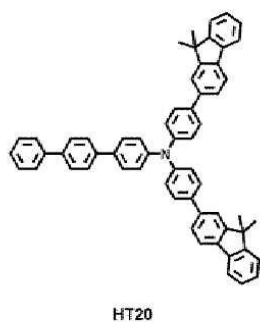
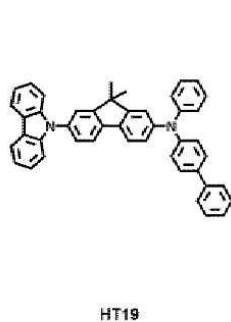
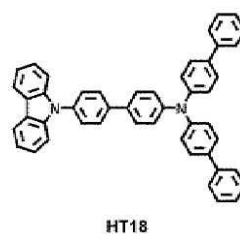
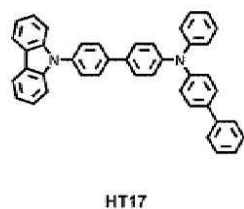
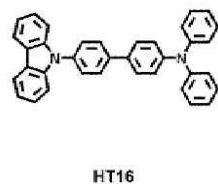
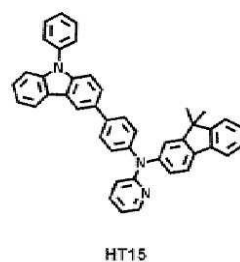
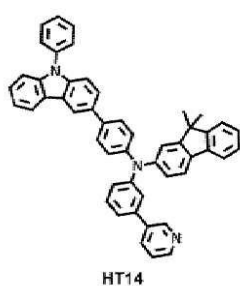
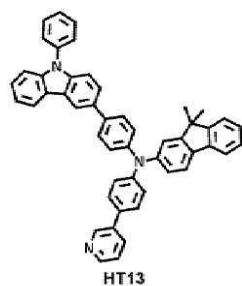
[0190] 또 다른 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹을 비포함하고, 상기 화학식 CY204 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

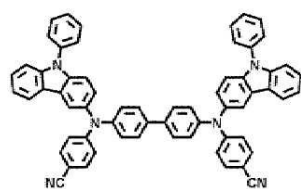
[0191] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY217로 표시된 그룹을 비포함할 수 있다.

[0192] 예를 들어, 상기 정공 수송 물질은 하기 화합물 HT1 내지 HT46 중 하나, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β -NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠설포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르설포산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:

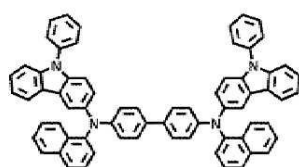


[0194]

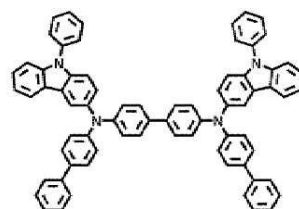




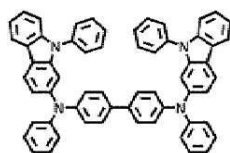
HT31



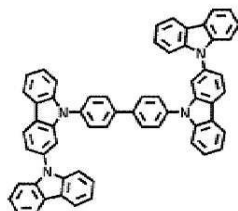
HT32



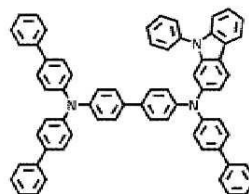
HT33



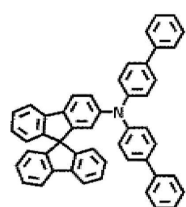
HT34



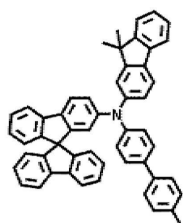
HT35



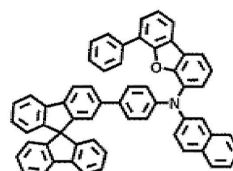
HT36



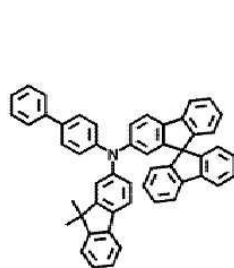
HT37



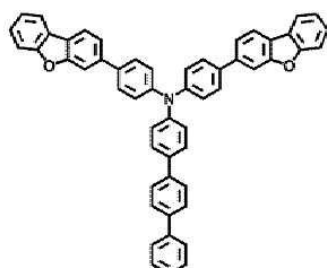
HT38



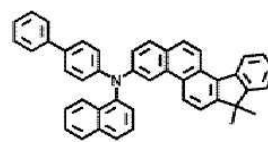
HT39



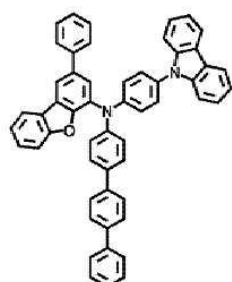
HT40



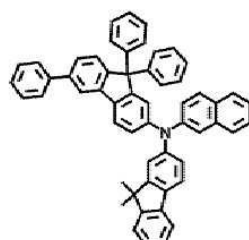
HT41



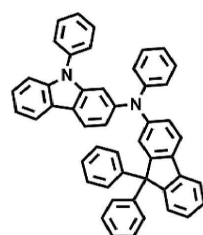
HT42



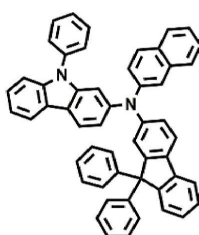
HT43



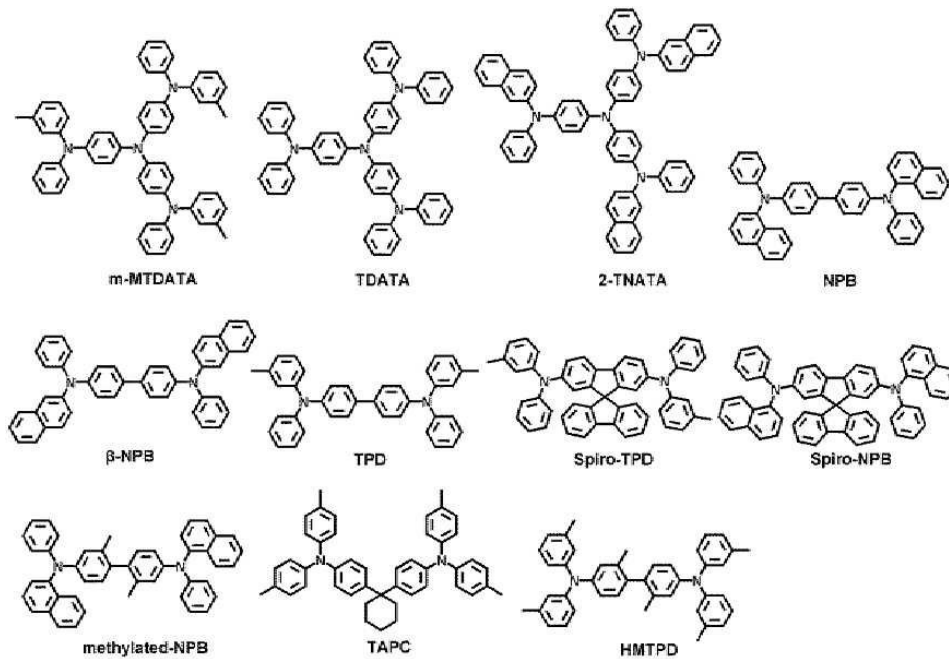
HT44



HT45



HT46



[0202]

[0203]

상기 정공 수송 영역의 두께는 약 50Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 4000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 경우, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 9000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0204]

상기 보조층은 활성층(140)에 유입되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 유입 효율을 증가시키는 역할을 한다. 상기 전자 저지층은 활성층(140)으로부터 정공 수송 영역으로의 전자 유출(leakage)을 방지하는 역할을 하는 층이다. 상술한 정공 수송 물질이 보조층 및 전자 저지층에 포함될 수 있다.

[0205]

[전자 수송 영역]

[0206]

상기 활성층(140)과 상기 제2전극(170) 사이에 배치된 전하 보조층을 통틀어 전자 수송 영역으로 일컬을 수 있다.

[0207]

상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진(consist of) 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조, ii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 복수의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0208]

상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 수송층(150), 전자 주입층(160), 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0209]

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 활성층(140)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를 가질 수 있다.

[0210]

상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 또는 전자 수송층)은, 적어도 하나의 π 전자-결핍성 합질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-deficient nitrogen-containing C_1 - C_{60} cyclic group)을 포함한 금속-비함유 (metal-free) 화합물을 포함할 수 있다.

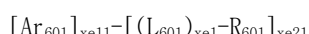
[0211]

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 하기 화학식 601로 표시된 화합물을 포함할 수 있다.

[0212]

<화학식 601>

[0213]



[0214]

상기 화학식 601 중,

[0215]

Ar_{601} , 및 L_{601} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 또는 적어도

하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0216]

xe11은 1, 2 또는 3이고,

[0217]

xe1는 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이고,

[0218]

R_{601} 은 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹, $-\text{Si}(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$, $-\text{C}(=\text{O})(Q_{601})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(Q_{601})$, 또는 $-\text{P}(=\text{O})(Q_{601})(Q_{602})$ 이고,

[0219]

상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 Q_1 에 대한 설명을 참조하고,

[0220]

xe21는 1, 2, 3, 4, 또는 5이고,

[0221]

상기 Ar_{601} , L_{601} 및 R_{601} 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 π 전자-결핍성 합질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹일 수 있다.

[0222]

예를 들어, 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{601} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0223]

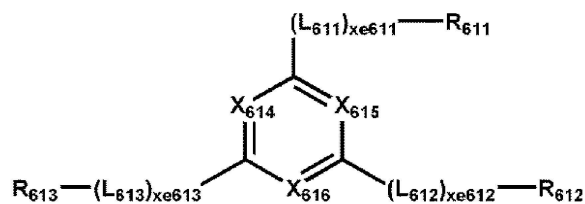
다른 예로서, 상기 화학식 601 중 Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 안트라센 그룹일 수 있다.

[0224]

또 다른 예로서, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601-1로 표시된 화합물을 포함할 수 있다:

[0225]

<화학식 601-1>



[0226]

상기 화학식 601-1 중,

[0228]

X_{614} 는 N 또는 $\text{C}(R_{614})$ 이고, X_{615} 는 N 또는 $\text{C}(R_{615})$ 이고, X_{616} 은 N 또는 $\text{C}(R_{616})$ 이고, X_{614} 내지 X_{616} 중 적어도 하나는 N이고,

[0229]

L_{611} 내지 L_{613} 에 대한 설명은 각각 상기 L_{601} 에 대한 설명을 참조하고,

[0230]

xe611 내지 xe613에 대한 설명은 각각 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0231]

R_{611} 내지 R_{613} 에 대한 설명은 각각 상기 R_{601} 에 대한 설명을 참조하고,

[0232]

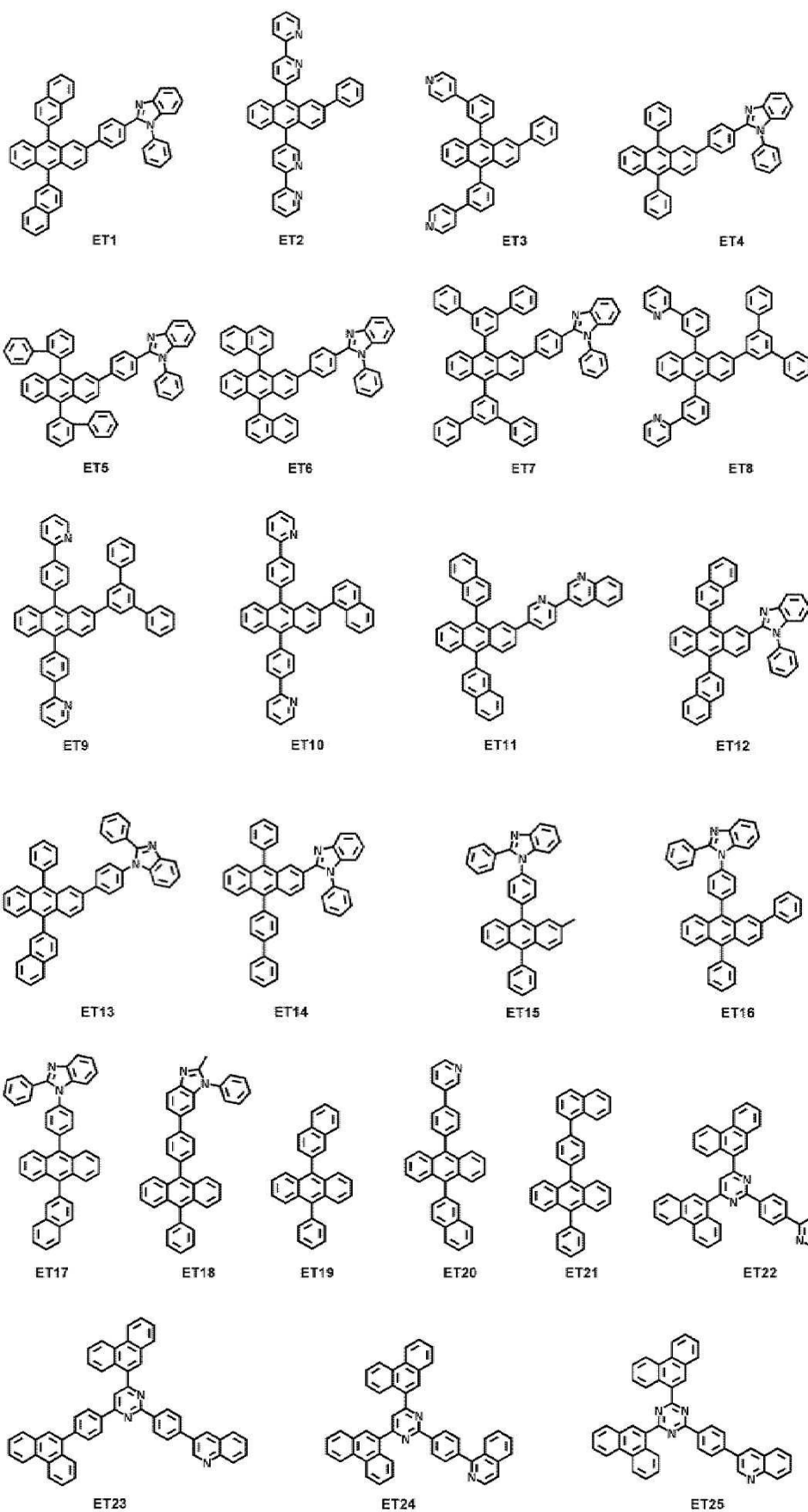
R_{614} 내지 R_{616} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

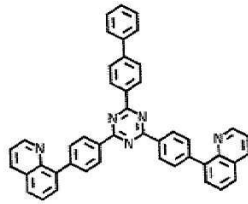
[0233]

예를 들어, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

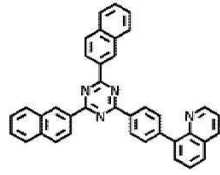
[0234]

상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET45 중 하나, BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ, NTAZ, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:

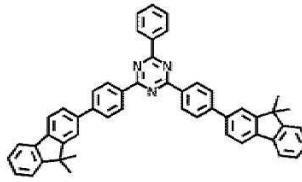




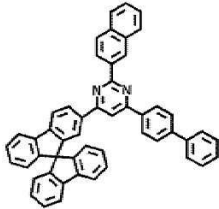
ET26



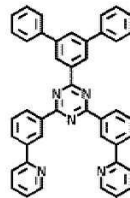
ET27



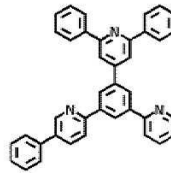
ET28



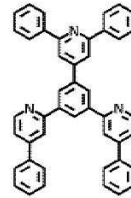
ET29



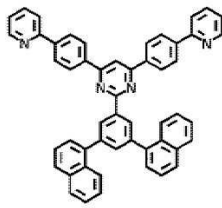
ET30



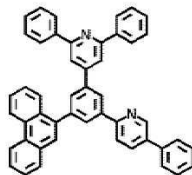
ET31



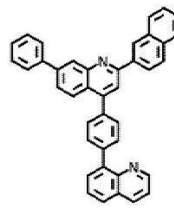
ET32



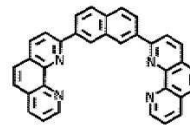
ET33



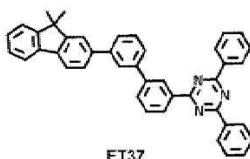
ET34



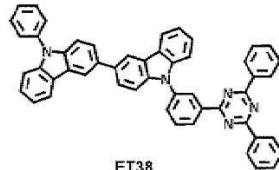
ET35



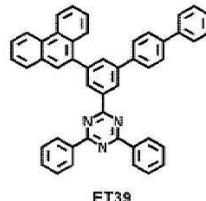
ET36



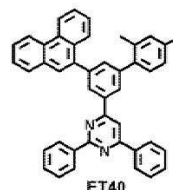
ET37



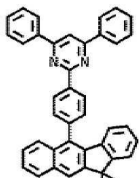
ET38



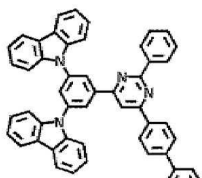
ET39



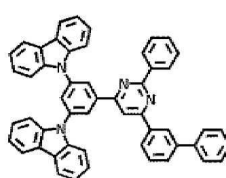
ET40



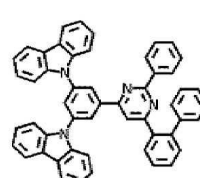
ET41



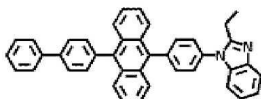
ET42



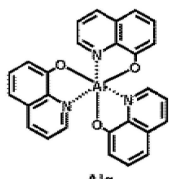
ET43



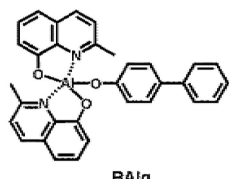
ET44



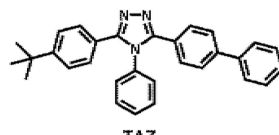
ET45



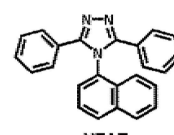
Alq₃



BAlq



TAZ



NTAZ

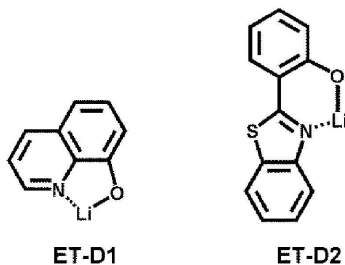
상기 전자 수송 영역의 두께는 약 50Å 내지 약 5000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 4000Å일 수 있다. 상기 전자 수송 영역이 버퍼층, 정공 저지층, 전자 수송층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 경우, 상기 버퍼층 및 정공 저지층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å이고, 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정

공 저지층 및/또는 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0243] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0244] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 또는 Cs 이온일 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 또는 Ba 이온일 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시페닐옥사디아졸, 히드록시페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린, 시클로펜타다이엔, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0245] 예를 들어, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다:



[0246] 상기 전자 수송 영역은 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(170)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.

[0248] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진(consist of) 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조, ii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0249] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0250] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb, Cs, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, Ba, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb, Gd, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

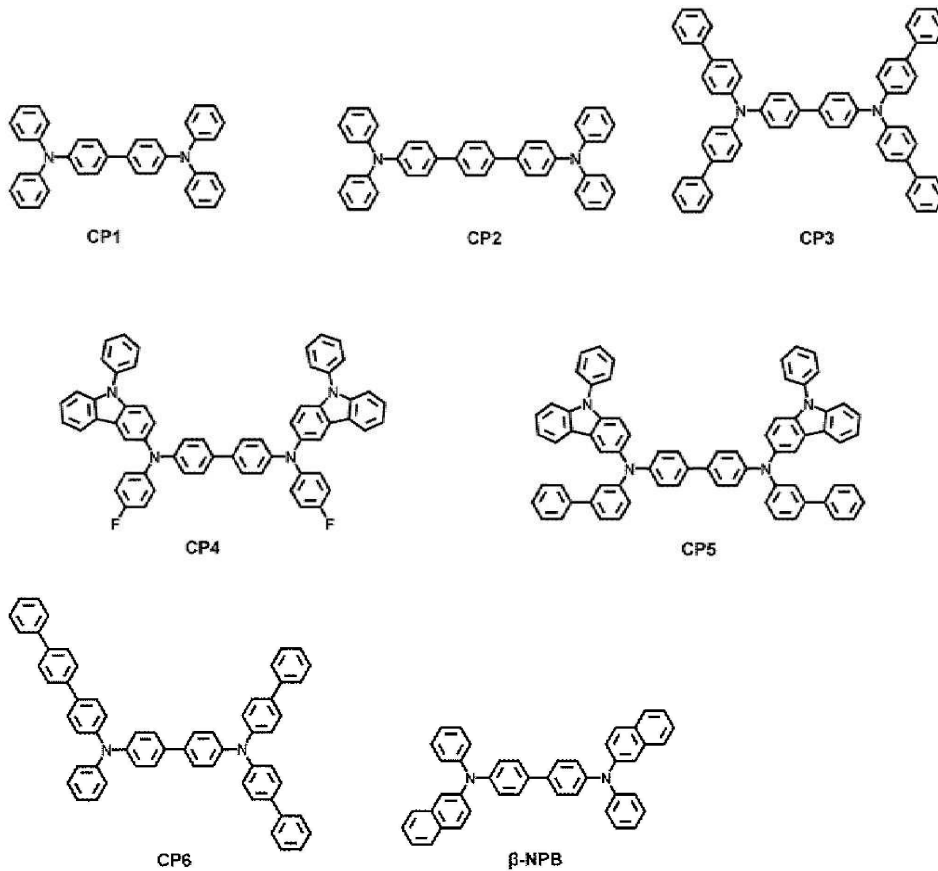
[0251] 상기 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물 및 상기 희토류 금속-함유 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속 각각의, 산화물, 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등), 텔루라이드, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0252] 상기 알칼리 금속-함유 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물, LiF , NaF , CsF , KF , LiI , NaI , CsI , KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 토금속-함유 화합물은, BaO , SrO , CaO , $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ (x 는 $0 < x < 1$ 를 만족하는 실수임), $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ (x 는 $0 < x < 1$ 를 만족하는 실수임) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물을 포함할 수 있다. 상기 희토류 금속-함유 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , Sc_2O_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 , 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 또는, 상기 희토류 금속-함유 화합물은, 란타나이드 금속 텔루라이드를 포함할 수 있다. 상기 란타나이드 금속 텔루라이드의 예는, LaTe , CeTe , PrTe , NdTe , PmTe , SmTe , EuTe , GdTe , TbTe , DyTe , HoTe , ErTe , TmTe , YbTe , LuTe , La_2Te_3 , Ce_2Te_3 , Pr_2Te_3 , Nd_2Te_3 , Pm_2Te_3 , Sm_2Te_3 , Eu_2Te_3 , Gd_2Te_3 , Tb_2Te_3 , Dy_2Te_3 , Ho_2Te_3 , Er_2Te_3 , Tm_2Te_3 , Yb_2Te_3 , Lu_2Te_3 등을 포함할 수 있다.

- [0253] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, i) 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온 중 하나 및 ii) 상기 금속 이온과 결합한 리간드로서, 예를 들면, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시페닐옥사디아졸, 히드록시페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린, 시클로펜타다이엔, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0254] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 유기물(예를 들면, 상기 화학식 601로 표시된 화합물)을 더 포함할 수 있다.
- [0255] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 주입층은 i) 알칼리 금속-함유 화합물(예를 들면, 알칼리 금속 할로겐화물)로 이루어지거나(consist of), ii) a) 알칼리 금속-함유 화합물(예를 들면, 알칼리 금속 할로겐화물); 및 b) 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 또는 이의 임의의 조합;으로 이루어질 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 주입층은, KI:Yb 공증착층, RbI:Yb 공증착층 등일 수 있다.
- [0256] 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합은 상기 유기물을 포함한 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0257] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0258] [제2전극(170)]
- [0259] 상술한 바와 같은 활성층(140) 또는 전자 수송 영역 상부에는 제2전극(170)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(170)은 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(170)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 사용할 수 있다.
- [0260] 상기 제2전극(170)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), 이터븀(Yb), 은-이터븀(Ag-Yb), ITO, IZO, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 제2전극(170)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0261] 상기 제2전극(170)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0262] [캐핑층]
- [0263] 제1전극(110)의 외측에는 제1캐핑층이 배치되거나, 및/또는 제2전극(170)의 외측에는 제2캐핑층이 배치될 수 있다.
- [0264] 상기 제1캐핑층 및/또는 제2캐핑층은 유기 광검출기(10, 20, 30)에 물, 산소 등의 불순물이 들어가는 것을 억제하여 유기 광검출기(10, 20, 30)의 신뢰성을 높일 수 있다.
- [0265] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 각각은, 1.6 이상의 굴절율(at 589nm)을 갖는 물질을 포함할 수 있다.
- [0266] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층은 서로 독립적으로, 유기물을 포함한 유기 캐핑층, 무기물을 포함한 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 유-무기 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0267] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민 그룹-함유 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민 그룹-함유 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br, I, 또는 이의 임의의 조합을 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민 그룹-함유 화합물을 포함할 수 있다.

[0268] 예를 들어, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시된 화합물, 상기 화학식 202로 표시된 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0269] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 중 하나, 상기 화합물 CP1 내지 CP6 중 하나, β -NPB 또는 이의 임의의 화합물을 포함할 수 있다:



[0271]

[0272] [전자 장치]

[0273] 상술한 유기 광검출기를 포함하는 전자 장치가 제공될 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 장치는 발광 소자를 더 포함할 수 있다.

[0274] 이에 따라, 일 구현예에 따른 전자 장치는 광검출 영역 및 발광 영역을 포함한 기판;

[0275] 상기 광검출 영역 상에 배치된 유기 광검출기; 및

[0276] 상기 발광 영역 상에 배치된 발광 소자를 포함하고,

[0277] 상기 유기 광검출기는 제1화소 전극, 상기 제1화소 전극에 대향된 대향 전극, 상기 제1화소 전극과 상기 대향 전극 사이에 차례로 배치된 정공 수송 영역, 활성층 및 전자 수송 영역을 포함하고,

[0278] 상기 발광 소자는 제2화소 전극, 상기 제2화소 전극에 대향된 상기 대향 전극, 상기 제2화소 전극과 상기 대향 전극 사이에 차례로 배치된 상기 정공 수송 영역, 발광층 및 상기 전자 수송 영역을 포함하고,

[0279] 상기 제1화소 전극 및 상기 활성층은 상기 광검출 영역에 대응하여 배치되고,

[0280] 상기 제2화소 전극 및 상기 발광층은 상기 발광 영역에 대응하여 배치되고,

[0281] 상기 정공 수송 영역, 상기 전자 수송 영역 및 상기 대향 전극은 상기 광검출 영역과 상기 발광 영역 전체에 배치되며,

[0282] 상기 활성층이 하기 화학식 1로 표현되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0283] 상기 정공 수송 영역 및 상기 전자 수송 영역은 상술한 바를 참조한다.

[0284] 예를 들어, 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층, 상기 전자 수송층 및/또는 상기 전자 주입층; 및 상기 대향

전극;은 상기 광검출 영역과 상기 발광 영역 전체에 배치될 수 있다.

- [0285] 상기 전자 장치는 각종 디스플레이, 광원, 조명, 퍼스널 컴퓨터(예를 들면, 모바일형 퍼스널 컴퓨터), 휴대 전화, 디지털 사진기, 전자 수첩, 전자 사전, 전자 게임기, 의료 기기(예를 들면, 전자 체온계, 혈압계, 혈당계, 맥박 계측 장치, 맥파 계측 장치, 심전표시 장치, 초음파 진단 장치, 내시경용 표시 장치), 어군 탐지기, 각종 측정 기기, 계기류(예를 들면, 차량, 항공기, 선박의 계기류), 프로젝터 등으로 응용될 수 있다.
- [0286] [도 2 및 3에 대한 설명]
- [0287] 도 2는 일 구현예에 따른 전자 장치(100)의 개략적인 단면도를 도시한 도면이다.
- [0288] 도 2를 참조하면, 상기 전자 장치(100)는 기관(601) 및 기관(602) 사이에 유기 광검출기(400) 및 발광 소자(500)를 포함한다.
- [0289] 상기 기관(601) 및 기관(602)은 가요성 기관, 유리 기관, 또는 금속 기관일 수 있다. 상기 기관(601) 상에는 버퍼층(미도시) 및 박막 트랜지스터(미도시)가 배치될 수 있다.
- [0290] 상기 버퍼층은 기관(601)을 통한 불순물의 침투를 방지하며 기관(601) 상부에 평탄한 면을 제공하는 역할을 할 수 있다. 상기 박막 트랜지스터는 상기 버퍼층 상에 배치되고, 활성층, 게이트 전극, 소스 전극 및 드레인 전극을 포함할 수 있다.
- [0291] 이와 같은 박막 트랜지스터는 발광 소자(500)에 전기적으로 연결되어 발광 소자를 구동시킬 수 있다. 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 어느 하나와 상기 발광 소자(500)의 제2화소 전극(510)이 전기적으로 연결될 수 있다.
- [0292] 또 다른 박막 트랜지스터는 유기 광검출기(400)에 전기적으로 연결될 수 있다. 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 어느 하나와 상기 유기 광검출기(400)의 제1화소 전극(410)이 전기적으로 연결될 수 있다.
- [0293] 상기 유기 광검출기(400)는 제1화소 전극(410), 정공 주입층(420), 정공 수송층(432), 활성층(440), 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)을 포함할 수 있다.
- [0294] 일 실시예에서, 상기 제1화소 전극(410)은 애노드이고, 상기 대향 전극(470)은 캐소드일 수 있다. 즉, 상기 제1화소 전극(410)과 상기 대향 전극(470) 사이에 역 바이어스를 인가하여 유기 광검출기(400)를 구동함으로써, 전자 장치(100)가 유기 광검출기(400)에 입사되는 광을 검출하고, 전하를 발생시키고, 전류로서 추출할 수 있다.
- [0295] 상기 발광 소자(500)는 제2화소 전극(510), 정공 주입층(420), 정공 수송층(432), 발광층(540), 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)을 포함할 수 있다.
- [0296] 일 실시예에서, 상기 제2화소 전극(510)은 양극이고, 상기 대향 전극(470)은 음극일 수 있다. 즉, 상기 발광 소자(500)는 제2화소 전극(510)에서 주입된 정공과 대향 전극(470)에서 주입된 전자가 발광층(540)에서 재결합하여 엑시톤을 형성하고, 상기 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변하면서 광이 형성될 수 있다.
- [0297] 상기 제1화소 전극(410) 및 상기 제2화소 전극(510)에 대한 설명은 본 명세서 중 제1전극(110)에 대한 설명을 참조할 수 있다.
- [0298] 상기 제1화소 전극(410) 및 상기 제2화소 전극(510)의 에지부에는 화소 정의막(405)이 형성되어 있다. 상기 화소 정의막(405)은 화소 영역을 정의하며, 상기 제1화소 전극(410)과 제2화소 전극(510)을 전기적으로 절연할 수 있다. 상기 화소 정의막(405)은 예를 들어, 공지된 각종 유기 절연 물질(예를 들면, 실리콘계 물질 등), 무기 절연 물질 또는 유/무기 복합 절연 물질을 포함할 수 있다. 상기 화소 정의막(405)은 가시광을 투과시키는 투과형 막이거나, 가시광을 차단하는 차단형 막일 수 있다.
- [0299] 상기 제1화소전극(410) 및 제2화소전극(510) 상에는 공통층으로서 정공 주입층(420) 및 정공 수송층(432)이 차례대로 형성되어 있다. 상기 정공 주입층(420) 및 정공 수송층(432)에 대한 설명은 본 명세서 중의 설명을 참조할 수 있다.
- [0300] 정공 수송층(432) 상부에 상기 광검출 영역에 대응하여 활성층(440)이 형성되어 있다. 상기 활성층(440)에 대한 설명은 본 명세서 중의 설명을 참조할 수 있다.
- [0301] 상기 정공 수송층(432) 상부에, 상기 발광 영역에 대응하여 발광층(540)이 형성되어 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 발광 소자(500)는 상기 제2화소 전극(510)과 상기 발광층(540) 사이에, 상기 발광 영역에 대응하여 배치되

는 전자 저지층(미도시)을 더 포함할 수 있다.

- [0302] 상기 활성층(440) 및 발광층(540) 상부에 상기 광검출 영역 및 제1발광 영역 전체에 대하여 공통층으로서 형성된 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)이 차례로 형성되어 있다. 상기 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 전자 수송층 및 제2전극(170)에 대한 설명을 참조할 수 있다.
- [0303] 상기 정공 주입층(420), 정공 수송층(432) 및 전자 수송층(450) 각각은 상기 광검출 영역 및 상기 발광 영역 전체에 걸쳐 배치될 수 있다.
- [0304] 이와 같이, 상기 전자 장치(100)는 유기 광검출기(400)와 발광 소자(500)에 공통층을 배치시킴으로서 제작 공정을 간소화할 수 있고, 기존의 발광 소자(500)에 사용되는 기능층 재료를 유기 광검출기(400)에도 사용할 수 있어, 유기 광검출기(400)를 전자 장치에 인-픽셀(in-pixel)로 배치할 수 있다.
- [0305] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 수송층(450)과 대향 전극(470) 사이에 전자 주입층(미도시)을 더 포함할 수 있다.
- [0306] 상기 대향 전극(470) 상에는 캡핑층(미도시)이 배치될 수 있다. 상기 캡핑층에 사용될 수 있는 물질은 전술한 유기물 및/또는 무기물을 포함할 수 있다. 상기 캡핑층은 유기 광검출기(400) 및 발광 소자(500)를 보호하는 기능 이외에 발광 소자(500)로부터 발생한 광이 효율적으로 방출될 수 있도록 도와주는 역할을 한다.
- [0307] 상기 캡핑층 상에는 봉지부(490)가 배치될 수 있다. 봉지부(490)는 유기 광검출기(400) 및 발광 소자(500) 상에 배치되어, 수분이나 산소로부터 유기 광검출기(400) 및 발광 소자(500)를 보호하는 역할을 할 수 있다. 봉지부(490)는 실리콘 질화물(SiN_x), 실리콘 산화물(SiO_x), 인듐주석산화물, 인듐아연산화물, 또는 이의 임의의 조합을 포함한 무기막, 폴리에틸렌테레프탈레이트, 폴리에틸렌나프탈레이트, 폴리카보네이트, 폴리이미드, 폴리에틸렌설포네이트, 폴리옥시메틸렌, 폴리아릴레이트, 헥사메틸디실록산, 아크릴계 수지(예를 들면, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리아크릴산 등), 에폭시계 수지(예를 들면, AGE(aliphatic glycidyl ether) 등) 또는 이의 임의의 조합을 포함한 유기막, 또는 무기막과 유기막의 조합을 포함할 수 있다.
- [0308] 상기 전자 장치(100)는 예를 들어, 표시 장치일 수 있다. 상기 전자 장치(100)는 유기 광검출기(400)와 발광 소자(500)를 모두 구비함으로써, 광 검출 기능을 갖는 표시 장치일 수 있다.
- [0309] 도 2에는 상기 전자 장치(100)가 하나의 발광 소자(500)를 포함하는 것으로 도시되었으나, 도 3에 도시된 바와 같이, 일 실시예에 따른 전자 장치(100a)는 유기 광검출기(400), 제1발광 소자(501), 제2발광 소자(502) 및 제3발광 소자(503)를 포함할 수 있다.
- [0310] 도 3과 동일한 구성 요소는 전자 장치(100)에 대한 설명을 참조할 수 있다.
- [0311] 상기 제1발광 소자(501)는 제2화소 전극(511), 정공 주입층(420), 정공 수송층(432), 제1발광층(541), 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)을 포함할 수 있다.
- [0312] 상기 제2발광 소자(502)는 제3화소 전극(512), 정공 주입층(420), 정공 수송층(432), 제2발광층(542), 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)을 포함할 수 있다.
- [0313] 상기 제3발광 소자(503)는 제4화소 전극(513), 정공 주입층(420), 정공 수송층(432), 제3발광층(543), 전자 수송층(450) 및 대향 전극(470)을 포함할 수 있다.
- [0314] 상기 제2화소 전극(511), 제3화소 전극(512), 및 제4화소 전극(513)는 각각 제1발광 영역, 제2발광 영역 및 제3발광 영역에 대응하여 배치되고, 본 명세서 중 제1전극(110)에 대한 설명을 참조할 수 있다.
- [0315] 상기 제1발광층(541)은 상기 제1발광 영역에 대응하여 배치되고, 제1색광을 방출하고, 상기 제2발광층(542)은 상기 제2발광 영역에 대응하여 배치되고, 제2색광을 방출하고, 상기 제3발광층(543)은 상기 제3발광 영역에 대응하여 배치되고, 제3색광을 방출할 수 있다.
- [0316] 상기 제1색광의 최대 발광 파장, 상기 제2색광의 최대 발광 파장, 상기 제3색광의 최대 발광 파장은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, 상기 제1색광의 최대 발광 파장 및 상기 제2색광의 최대 발광 파장 각각이 상기 제3색광의 최대 발광 파장보다 길 수 있다.
- [0317] 예를 들어, 상기 제1색광은 적색광이고, 상기 제2색광은 녹색광이고, 상기 제3색광은 청색광일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 따라서, 전자 장치(100a)는 풀 컬러(full color) 발광이 가능하다. 상기 제1색광, 제2색광 및 제3색광은, 이들의 혼합광이 백색광이 될 수 있는 조합이라면, 각각 적색광, 녹색광 및 청색광에 한정되

지는 않는다.

- [0318] 상기 유기 광검출기(400), 제1발광 소자(501), 제2발광 소자(502) 및 제3발광 소자(503)은 각각 하나의 화소를 구성하는 부화소일 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 하나의 화소는 상기 유기 광검출기(400)를 1 이상 포함할 수 있다.
- [0319] 상기 전자 장치(100a)는 표시 장치일 수 있다. 상기 전자 장치(100a)는 유기 광검출기(400)와 제1발광 소자(501), 제2발광 소자(502) 및 제3발광 소자(503)를 모두 구비하여, 광 검출 기능을 갖는 풀 컬러 표시 장치일 수 있다.
- [0320] [도 4a 및 도 4b에 대한 설명]
- [0321] 도 4a에 도시된 전자 장치(100a)는 기관(601)과 기관(602) 사이에, 유기 광검출기(400) 및 발광 소자(501, 502, 503)가 배치된다.
- [0322] 예를 들어, 상기 발광 소자(501), 발광 소자(502) 및 발광 소자(503)로부터 적색광, 녹색광 및 청색광이 각각 방출될 수 있다.
- [0323] 일 구현예에 따른 전자 장치(100a)는 상기 전자 장치에 접촉되어 있는 대상물, 예를 들어 손가락의 지문을 검출하는 기능을 가질 수 있다. 예를 들어, 도 4a에 도시된 바와 같이, 발광 소자(502)에서 방출된 광 중 사용자의 지문에서 반사된 반사광의 적어도 일부가 유기 광검출기(400)로 재입사됨으로써 유기 광검출기(400)가 그 반사광을 검출할 수 있다. 손가락의 지문 패턴 중에서 융선은 기관(602)과 밀착되므로, 상기 유기 광검출기(400)는 사용자의 지문 패턴, 예를 들어 융선의 이미지 정보를 선택적으로 획득할 수 있다. 도 4a에는 발광 소자(502)에서 방출된 광을 이용하여 전자 장치(100a)에 접촉된 대상물의 정보를 얻는 예를 도시하였지만, 발광 소자(501) 및/또는 발광 소자(503)에서 방출된 광을 이용하여 정보를 얻는 경우에도 동일하게 적용할 수 있다.
- [0324] 한편, 도 4b에 도시된 바와 같이, 일 구현예에 따른 전자 장치(100a)는 전자 장치(100a)에 접촉해 있지 않은 대상물을 검출할 수 있다.
- [0325] [제조 방법]
- [0326] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 활성층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.
- [0327] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 활성층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0328] [용어의 정의]
- [0329] 본 명세서 중 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹은 고리-형성 원자로서 탄소로만 이루어진 탄소수 3 내지 60의 시클릭 그룹을 의미하고, C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹은, 탄소 외에, 고리-형성 원자로서 헤테로 원자를 더 포함한 탄소수 1 내지 60의 시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 각각은, 1개의 고리로 이루어진 모노시클릭 그룹 또는 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 예를 들어, 상기 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹의 고리-형성 원자수는 3 내지 61개일 수 있다.
- [0330] 본 명세서 중 시클릭 그룹은 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 모두를 포함한다.
- [0331] 본 명세서 중 π 전자-과잉 C_3 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-rich C_3 - C_{60} cyclic group)은 고리 형성 모이어티로서 $*-N=*$ 를 비포함한 탄소수 3 내지 60의 시클릭 그룹을 의미하고, π 전자-결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-deficient nitrogen-containing C_1 - C_{60} cyclic group)은 고리 형성 모이어티로서 $*-N=*$ 를 포함한 탄소수 1 내지 60의 헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0332] 예를 들어,

- [0333] 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹은, i) 그룹 T1 또는 ii) 2 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 시클로헥타디엔 그룹, 아다만탄 그룹, 노르보르난 그룹, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타켄 그룹, 헵탈렌 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타센 그룹, 루비센 그룹, 코로넨 그룹, 오발렌 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 인데노페난트렌 그룹, 또는 인데노안트라센 그룹)일 수 있고,
- [0334] 상기 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹은 i) 그룹 T2, ii) 2 이상의 그룹 T2가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 iii) 1 이상의 그룹 T2와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조인돌 그룹, 나프토인돌 그룹, 이소인돌 그룹, 벤조이소인돌 그룹, 나프토이소인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 벤조인돌로카바졸 그룹, 벤조카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조나프토실롤 그룹, 벤조퓨로디벤조퓨란 그룹, 벤조퓨로디벤조티오펜 그룹, 벤조티에노디벤조티오펜 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조이속사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조이소티아졸 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 시놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 이미다조트리아진 그룹, 이미다조피라진 그룹, 이미다조피리다진 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹 등)일 수 있고,
- [0335] 상기 π 전자-과잉 C_3 - C_{60} 시클릭 그룹은 i) 그룹 T1, ii) 2 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹, iii) 그룹 T3, iv) 2 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 v) 1 이상의 그룹 T3와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 보롤(borole) 그룹, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조인돌 그룹, 나프토인돌 그룹, 이소인돌 그룹, 벤조이소인돌 그룹, 나프토이소인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 벤조인돌로카바졸 그룹, 벤조카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조나프토실롤 그룹, 벤조퓨로디벤조퓨란 그룹, 벤조퓨로디벤조티오펜 그룹, 벤조티에노디벤조티오펜 그룹 등)일 수 있고,
- [0336] 상기 π 전자-결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹은 i) 그룹 T4, ii) 2 이상의 그룹 T4가 서로 축합된 축합환 그룹, iii) 1 이상의 그룹 T4와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹, iv) 1 이상의 그룹 T4와 1 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 v) 1 이상의 그룹 T4, 1 이상의 그룹 T1 및 1 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조이속사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조이소티아졸 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 시놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 이미다조트리아진 그룹, 이미다조피라진 그룹, 이미다조피리다진 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹 등)일 수 있고,
- [0337] 상기 그룹 T1은, 시클로프로판 그룹, 시클로부탄 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 시클로옥탄 그룹, 시클로부텐 그룹, 시클로펜텐 그룹, 시클로헥센 그룹, 시클로헥사디엔 그룹, 시클로헵텐 그룹, 아다만탄(adamantane) 그룹, 노르보르난(norbornane) (또는, 비시클로[2.2.1]헵탄(bicyclo[2.2.1]heptane)) 그룹, 노르보르넨(norbornene) 그룹, 비시클로[1.1.1]펜탄(bicyclo[1.1.1]pentane) 그룹, 비시클로[2.1.1]헥산(bicyclo[2.1.1]hexane) 그룹, 비시클로[2.2.2]옥탄 그룹, 또는 벤젠 그룹이고,
- [0338] 상기 그룹 T2는, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 보롤(borole) 그룹, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸(isoxazole)

그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 아자실롤 그룹, 아자보롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 테트라진 그룹, 피롤리딘 그룹, 이미다졸리딘 그룹, 디히드로피롤 그룹, 피페리딘 그룹, 테트라히드로피리딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 헥사히드로피리미딘 그룹, 테트라히드로피리미딘 그룹, 디히드로피리미딘 그룹, 피페라진 그룹, 테트라히드로피라진 그룹, 디히드로피라진 그룹, 테트라히드로피리다진 그룹, 또는 디히드로피리다진 그룹이고,

[0339] 상기 그룹 T3는, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 또는 보롤(borole) 그룹이고,

[0340] 상기 그룹 T4는, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소자졸(isoxazole) 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 아자실롤 그룹, 아자보롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹 또는 테트라진 그룹일 수 있다.

[0341] 본 명세서 중 시클릭 그룹, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, π 전자-과잉 C₃-C₆₀ 시클릭 그룹 또는 π 전자-결핍성 함질소 C₁-C₆₀ 시클릭 그룹이란 용어는, 당해 용어가 사용된 화학식의 구조에 따라, 임의의 시클릭 그룹에 속함되어 있는 그룹, 1가 그룹 또는 다가 그룹(예를 들면, 2가 그룹, 3가 그룹, 4가 그룹 등)일 수 있다. 예를 들어, "벤젠 그룹"은 벤조 그룹, 페닐기, 페닐렌기 등일 수 있는데, 이는 "벤젠 그룹"이 포함된 화학식의 구조에 따라, 당업자가 용이하게 이해할 수 있는 것이다.

[0342] 예를 들어, 1가 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 및 1가 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹의 예는, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹을 포함할 수 있고, 2가 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 및 2가 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹의 예는, C₃-C₁₀시클로알킬렌기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, C₆-C₆₀아릴렌기, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 및 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹을 포함할 수 있다.

[0343] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 메틸기, 에틸기, *n*-프로필기, 이소프로필기, *n*-부틸기, *sec*-부틸기, 이소부틸기, *tert*-부틸기, *n*-펜틸기, *tert*-펜틸기, 네오펜틸기, 이소펜틸기, *sec*-펜틸기, 3-펜틸기, *sec*-이소펜틸기, *n*-헥실기, 이소헥실기, *sec*-헥실기, *tert*-헥실기, *n*-헵틸기, 이소헵틸기, *sec*-헵틸기, *tert*-헵틸기, *n*-옥틸기, 이소옥틸기, *sec*-옥틸기, *tert*-옥틸기, *n*-노닐기, 이소노닐기, *sec*-노닐기, *tert*-노닐기, *n*-데실기, 이소데실기, *sec*-데실기, *tert*-데실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0344] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 1가 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0345] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알킬닐기는, C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 1가 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 에티닐기, 프로피닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알킬닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알킬닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

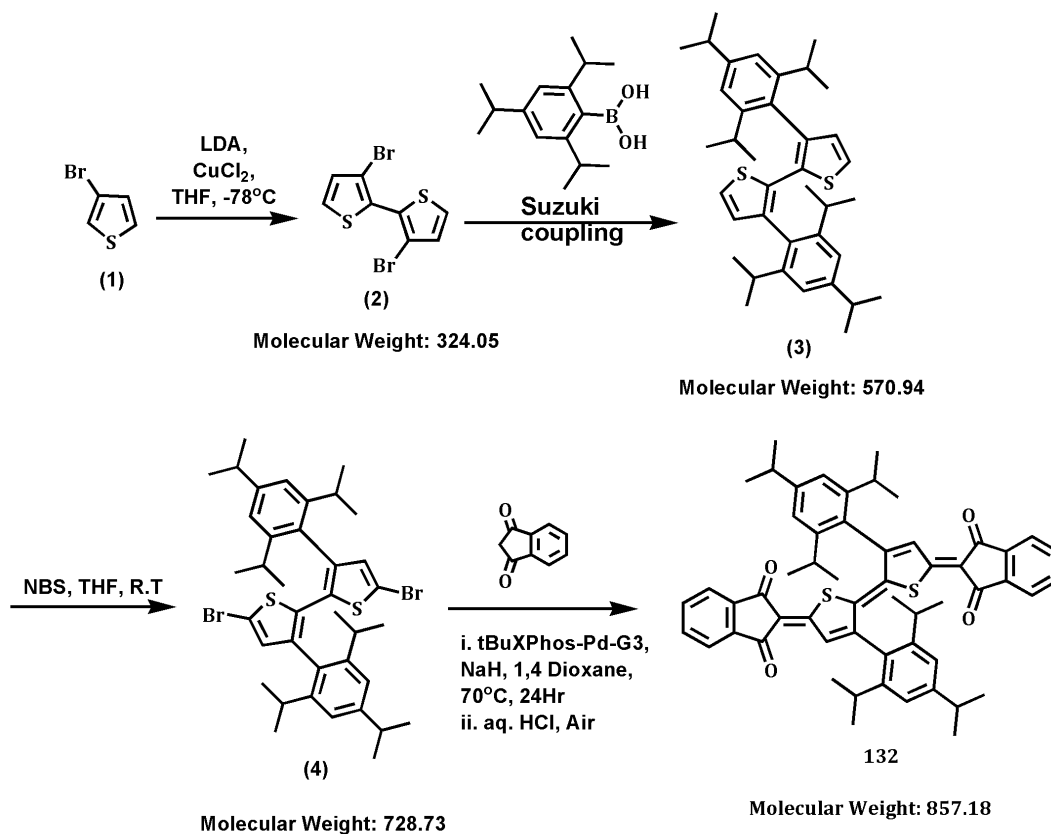
[0346] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0347] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만틸기(adamantyl), 노르보닐기(norbornyl)(또는, 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl)), 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0348] 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기는, 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리디닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기는 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0349] 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기는 상기 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0350] 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오펜일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0351] 본 명세서 중 C_6 - C_{60} 아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C_6 - C_{60} 아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C_6 - C_{60} 아릴기의 구체예에는, 페닐기, 펜탈레닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헵탈레닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기 등을 포함된다. 상기 C_6 - C_{60} 아릴기 및 C_6 - C_{60} 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0352] 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트롤리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기 등이 포함된다. 상기 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기 및 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0353] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 가짐)하고, 분자 구조 전체로 고려할 때 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는, 인데닐기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 인데노페난트레닐기, 인데노안트라세닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0354] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 원자(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐) 외에 적어도 하나의 헤테로 원자를 더 포함하고, 분자 구조 전체로 고려할 때 비-방향족성을 갖는 1가 그룹을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 9,9-디히드로아크리디닐기, 9H-크산테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0355] 본 명세서 중 C_6 - C_{60} 아릴옥시기는 $-OA_{102}$ (여기서, A_{102} 는 상기 C_6 - C_{60} 아릴기임)를 가리키고, 상기 C_6 - C_{60} 아릴티오기(arylthio)는 $-SA_{103}$ (여기서, A_{103} 은 상기 C_6 - C_{60} 아릴기임)를 가리킨다.

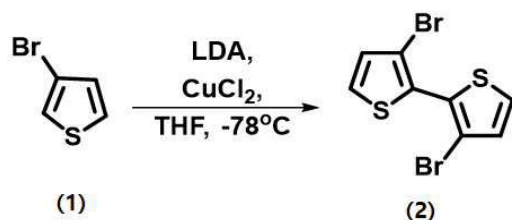
- [0356] 본 명세서 중 C₇-C₆₀아릴알킬기는 -A₁₀₄A₁₀₅(여기서, A₁₀₄는 C₁-C₅₄알킬렌기이고, A₁₀₅는 C₆-C₅₉아릴기임)를 가리키고, 본 명세서 중 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기는 -A₁₀₆A₁₀₇(여기서, A₁₀₆은 C₁-C₅₉알킬렌기이고, A₁₀₇은 C₁-C₅₉헤테로아릴기임)를 가리킨다.
- [0357] 본 명세서 중 "R_{10a}"는,
- [0358] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 또는 니트로기;
- [0359] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁), -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂), 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0360] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁), -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂), 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기; 또는
- [0361] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁), 또는 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0362] 일 수 있다.
- [0363] 본 명세서 중 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹; C₇-C₆₀아릴알킬기; 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기;일 수 있다.
- [0364] 본 명세서 중 헤테로 원자는, 탄소 원자를 제외한 임의의 원자를 의미한다. 상기 헤테로 원자의 예는, O, S, N, P, Si, B, Ge, Se, 또는 이의 임의의 조합을 포함한다.
- [0365] 본 명세서 중 제3열 전이 금속(third-row transition metal)은 하프늄(Hf), 탄탈럼(Ta), 텅스텐(W), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 이리듐(Ir), 백금(Pt) 및 금(Au) 등을 포함한다.
- [0366] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.
- [0367] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0368] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0369] [실시예]
- [0370] **합성예**

[0371] 화합물 132의 합성



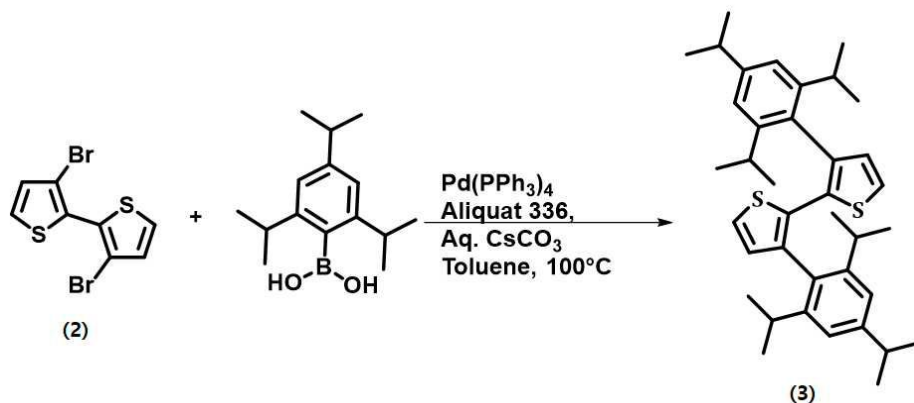
[0372]

[0374] 중간체 (2) (3,3'-dibromo-2,2'-bithiophene) 합성



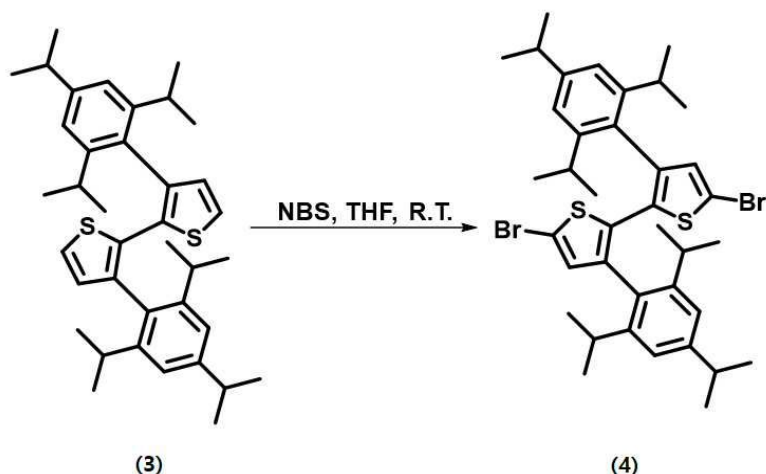
[0375]

[0376] 둥근형 플라스크에 anhydrous THF (150 mL)로 녹인 중간체 (1) (30g, 181.01mmol)을 -78°C 에서 15분간 교반을 시킨 후, 동일 온도에서 LDA (184.01mmol)를 한방울씩 떨어뜨려준다. LDA를 첨가한 후에 한시간 정도 교반을 시키고, CuCl_2 를 넣어 한시간 교반을 해준다. 이후, 실온에서 6시간 반응을 한다. 반응 후, ammonium chloride 수용액으로 quenching한 후 DCM[dichloromethane]과 H_2O 로 유기용매에 녹아있는 물질을 추출한다. MgSO_4 를 가하여 추출에 남아있는 수분을 제거하고, 필터한 용액을 DCM으로 녹인 후, 로터리를 이용하여 용매를 제거한다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 하얀색의 고체물질인 중간체 (2)를 얻을 수 있다. (Yield = 19%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 7.44 (d, 2H), 7.12 (d, 2H).



중간체 (3) (3,3'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-2,2'-bithiophene) 합성

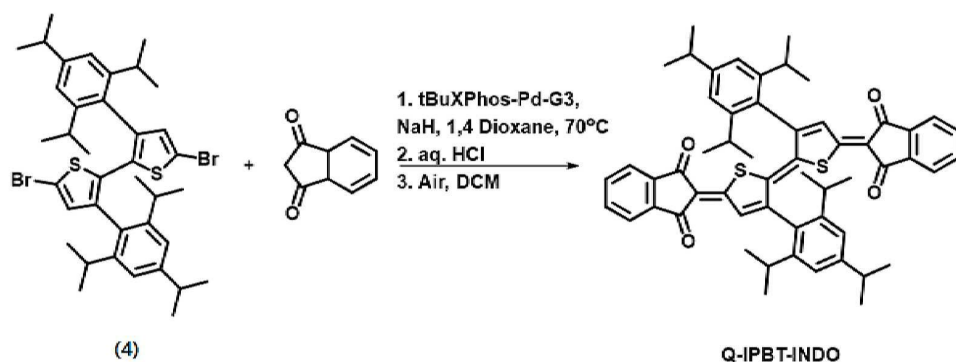
마이크로웨이브 바이알에 중간체 (2) (200 mg, 0.61 mmol), 2,4,6-triisopropyl phenyl boronic acid (612.6 mg, 2.46 mmol)과 Aliquot 336 (3 drops)을 넣은 후, 글로브 박스에서 Pd(PPh₃)₄ (35 mg, 0.03 mmol)을 넣어준다. Anhydrous toluene (5 mL)와 2M CsCO₃ (3 mL)을 넣어서 녹인 후, 100°C에서 12시간 교반한다. 반응 후 용매를 로터리를 이용하여 제거하고 Diethyl ether와 H₂O를 이용하여 추출한다. MgSO₄을 통해 남은 수분을 제거한 후, 필터된 용액의 용매를 로터리를 이용하여 제거하여준다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 하얀색의 고체물질인 화합물 (3)을 얻을 수 있다. (Yield = 45%) ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.12 (s, 4H), 7.02 (d, 2H), 6.73 (d, 2H), 3.04-2.99 (m, 2H), 2.68-2.62 (m, 4H), 1.38 (d, 12H), 1.10-1.05 (dd, 24H).



중간체 (4) (5,5'-dibromo-3,3'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-2,2'-bithiophene) 합성

화합물 (3) (100 mg, 0.175 mmol)을 THF (150 mL)에 녹인 후, 실온에서 10분 동안 교반시킨다. NBS (37.4 mg, 0.210 mmol)를 첨가하고, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 질소 조건으로 6시간 동안 교반시켜준다. 반응 후에 용매를 로터리를 이용하여 제거한 후, DCM과 H₂O로 유기용매에 녹아있는 물질을 추출한다. MgSO₄를 가하여 추출에 남아있는 수분을 제거한 후, 필터한 용액을 로터리를 이용하여 용매를 제거한다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 연노란색의 고체물질인 화합물 (4)를 얻을 수 있다. (Yield = 95%) ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.13 (s, 4H), 6.67 (s, 2H), 3.06-2.98 (m, 2H), 2.67-2.60 (m, 4H), 1.37 (d, 12H), 1.13-1.07 (dd, 24H).

화합물 132 (Q-IPBT-INDO, 2,2'-(3,3'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-5H,5'H-[2,2'-bithiophenylidene]-5,5'-diylidene)bis(1H-indene-1,3(2H)-dione)) 합성



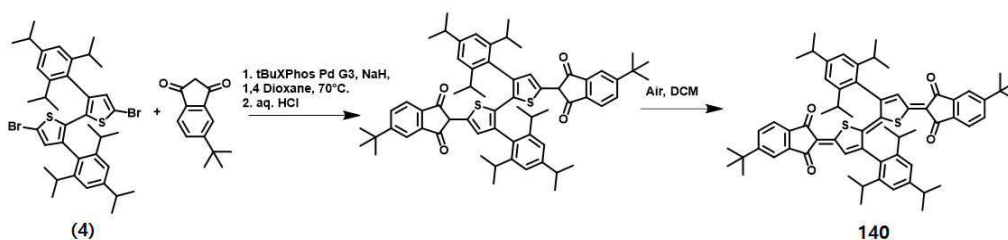
[0385]

[0386]

중간체 (4), 1H-indene-1,3(2H)-dione, NaH를 microwave vial에 넣은 후, 글로브박스에서 tBuXPhos Pd G3(10.8 mg, 0.013 mmol) 첨가 후, 동봉한다. 1,4-dioxane (5 mL)을 넣은 후, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 70°C로 열을 가하여 교반시켜준다. 반응 후 용매를 제거하고, 0.1 M의 HCl 15 mL를 가한다. 필터된 물질을 DCM에 녹여 공기중에 교반시켜준다. 상온에 충분히 노출시켜 퀴노이드 물질이 합성된 것을 TLC를 통해 확인하고, 해당 혼합물을 DCM:Hexane (1:1) eluent로 사용하여 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 파란색 고체 물질 Q-IPBT-INDO가 얻어진다. (Yield = 40%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.46 (s, 2H), 7.84-7.79 (m, 4H), 7.68-7.64 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

[0387]

화합물 140의 합성



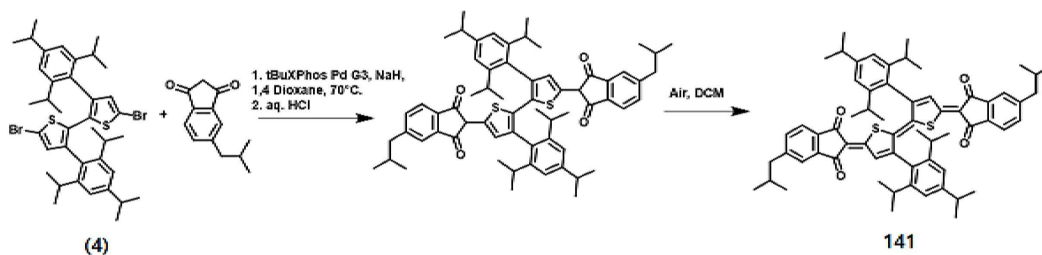
[0388]

[0389]

화합물 132의 합성 단계에서, 1H-indene-1,3(2H)-dione이 아닌 5-tert-butyl-1H-indene-1,3(2H)-dione을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 132의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 140를 합성하였다. 생성된 화합물 140는 ^1H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 38%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.45 (s, 2H), 7.78 (d, 2H), 7.71-7.70 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 3.16-3.12 (m, 2H), 2.60-2.54 (m, 4H), 1.49 (t, 12H), 1.36-1.35 (d, 18H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

[0391]

화합물 141의 합성

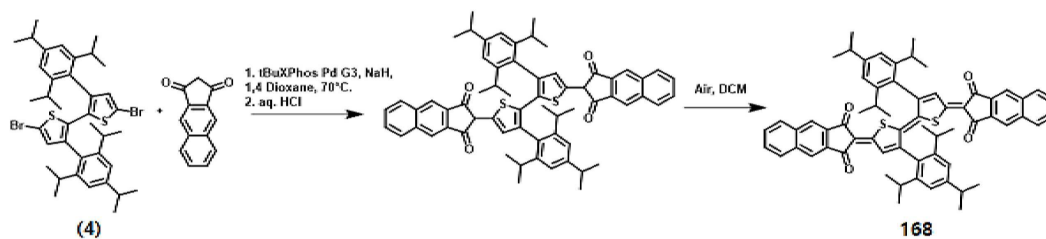


[0392]

[0393]

화합물 132의 합성 단계에서, 1H-indene-1,3(2H)-dione이 아닌 5-isobutyl-1H-indene-1,3(2H)-dione을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 132의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 141를 합성하였다. 생성된 화합물 141는 ^1H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 38%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.45 (s, 2H), 7.72 (d, 4H), 7.60-7.52 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 3.16-3.12 (m, 2H), 2.60-2.54 (m, 8H), 1.49 (t, 12H), 1.21-1.35 (dd, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

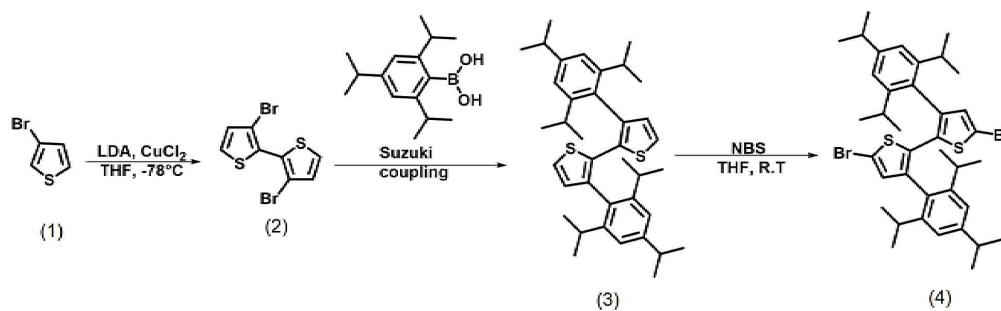
[0395] 화합물 168의 합성



[0396]

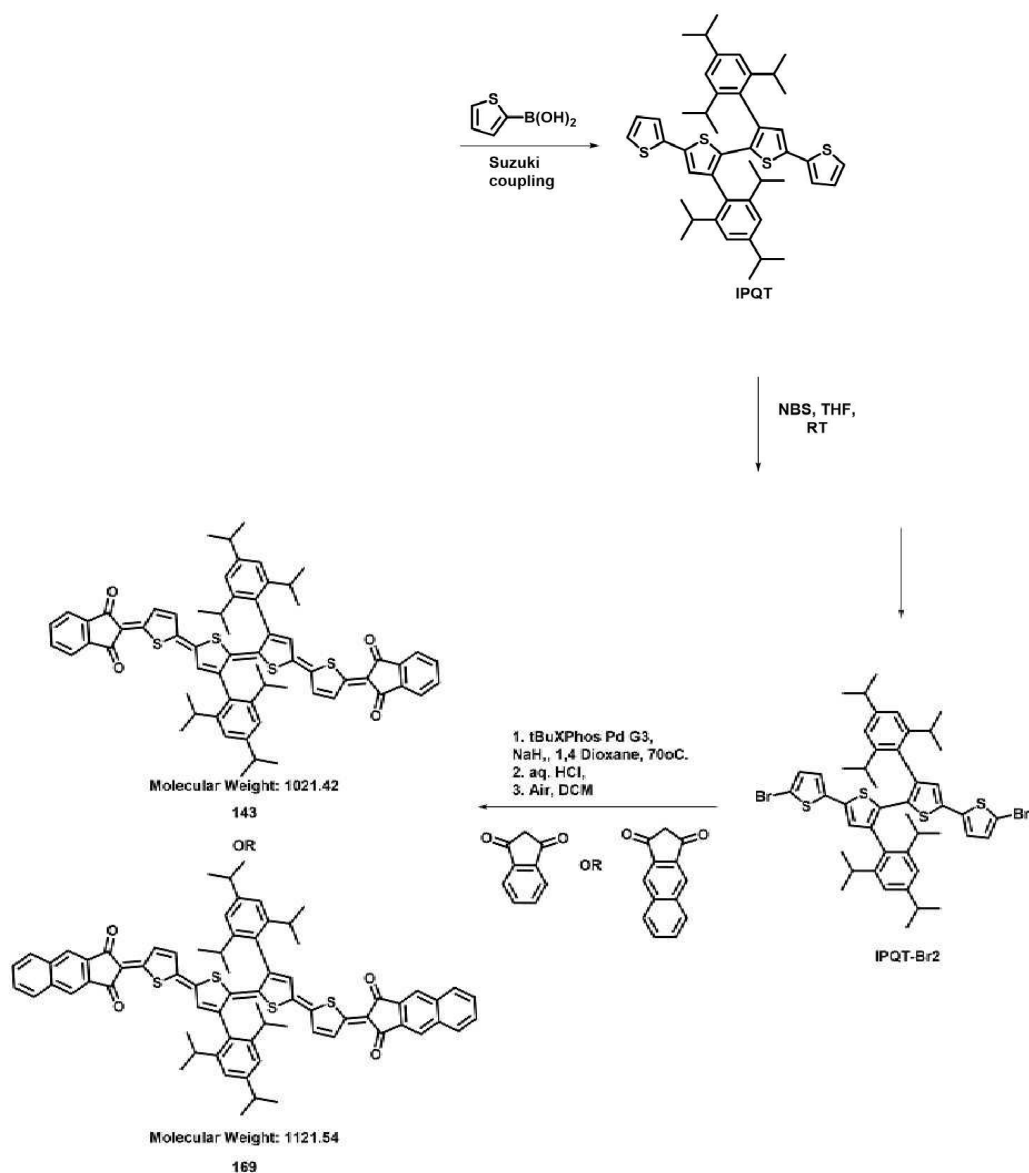
[0397] 화합물 132의 합성 단계에서, 1H-indene-1,3(2H)-dione 대신 1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 132의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 168를 합성하였다. 생성된 화합물 168은 ^1H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 38%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.59 (s, 2H), 8.33-8.28 (d, 4H), 8.02-8.01 (m, 4H), 7.64-7.63 (m, 4H), 7.31 (s, 4H) 3.20-3.14 (m, 2H), 2.62-2.56 (m, 4H), 1.53 (d, 12H), 1.22-1.17 (dd, 24H).

[0398] 화합물 143, 169의 합성



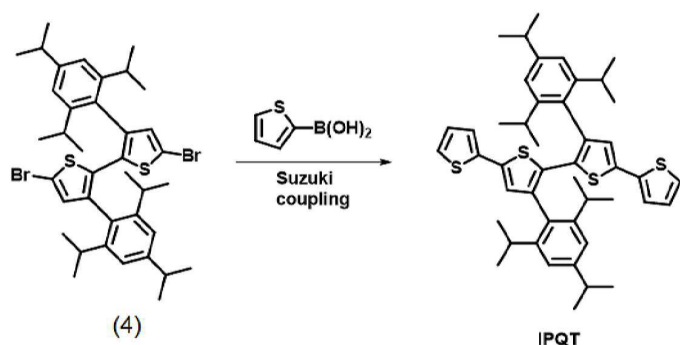
[0399]

[0400]



[0401]

[0402] 중간체 IPQT (IPQT, 3'', 4'-bis (2, 4, 6-triisopropylphenyl)-2, 2':5', 2'':5'', 2'''-quaterthiophene) 합성

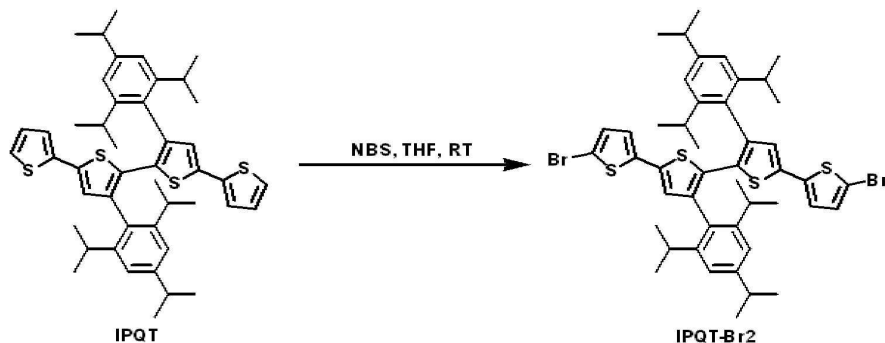


[0403]

[0404] 중간체 (4), thiophen-2-yl boronic acid (131.6mg, 1.02 mmol)를 마이크로웨이브 바이알에 넣은 후, 글로브박스에서 Pd(dppf)₂Cl₂ (29.9 mg, 0.04 mmol) 첨가하고 동봉한다. Anhydrous toluene (4 mL), Anhydrous THF (2 mL), 2M Na₂CO₃ (3mL)를 넣은 후 100℃에서 12시간 교반 한다. 물질이 합성된 것을 TLC를 통해 확인하고, 로터리로 혼합물의 용매를 제거한다. 그 후 Diethyl ether와 H₂O를 이용해 추출하고 MgSO₄를 가하여 수분을 제거한다. 로터리로 용매를 제거한 뒤 Hexane으로 컬럼 크로마토그래피를 하면 노란색 고체 물질인 IPQT가 얻어

진다. (Yield = 59%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 7.15 (s, 4H), 7.11 (d, 2H), 6.93 (t, 2H), 6.87 (d, 2H), 6.85 (s, 2H), 3.04-2.99 (m, 2H), 2.75-2.70 (m, 4H), 1.38 (d, 12H), 1.11-1.05 (dd, 24H).

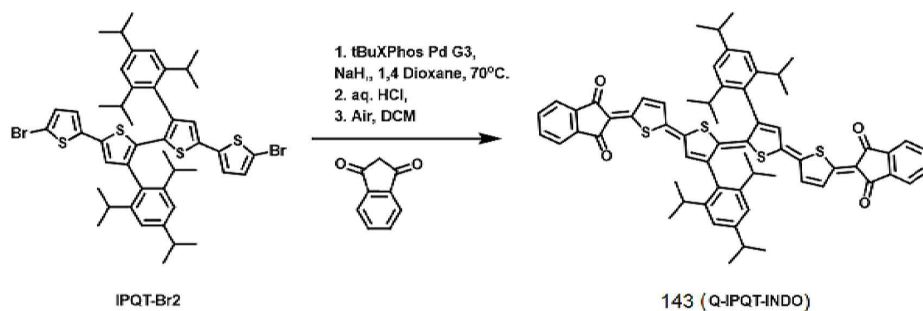
[0406] 화합물 IPQT-Br2 (IPQT-Br2, 5,5'''-dibromo-3'',4'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-2,2':5',2'':5'',2'''-quaterthiophene)의 합성.



[0407]

[0408] 질소 조건에서, 화합물 IPQT (200mg, 0.27 mmol)를 Anhydrous THF (250 mL)에 넣고 0 ° C에서 10분동안 교반 해준다. 그 후, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 NBS (96.3 mg, 0.54 mmol)를 첨가하고 동일 온도에서 15 분 간 교반시켜준다. 반응이 끝나면, 로터리로 용매를 제거한 뒤 DCM과 H_2O 로 추출하고 MgSO_4 로 남은 물을 제거 한다. 유기층을 로터리로 용매를 제거한 뒤에 Hexane을 이용하여 컬럼 크로마토그래피를 하면 연노랑색 고체 물질인 IPQT-Br2가 얻어진다. (Yield = 62%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 7.13 (s, 4H), 6.87 (d, 2H), 6.77 (s, 2H), 6.60 (d, 2H), 3.04-2.98 (m, 2H), 2.69-2.64 (m, 4H), 1.37 (d, 12H), 1.10-1.06 (dd, 24H).

[0410] 화합물 143 (Q-IPQT-INDO, 2,2'-((2,2'',2''')-3'',4'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-5H,5'''H-[2,2':5',2'':5'',2'''-quaterthiophene]-5,5'''-diylidene)bis(1H-indene-1,3(2H)-dione)) 합성

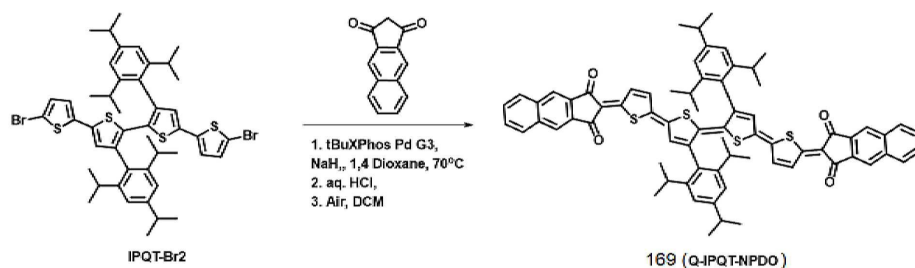


[0411]

[0412] 화합물 132의 합성 단계에서, 중간체 (4)가 아닌 IPQT-Br2를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 132의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 143을 합성하였다. 생성된 화합물 143는 ^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz) 를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 34%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.50 (m, 4H), 8.46 (s, 2H), 7.84-7.79 (m, 4H), 7.68-7.64 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

[0413]

[0414] 화합물 169 (Q-IPQT-NPDO, 2,2'-((2,2'',2''')-3'',4'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-5H,5'''H-[2,2':5',2'':5'',2'''-quaterthiophene]-5,5'''-diylidene)bis(1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione)) 합성



[0415]

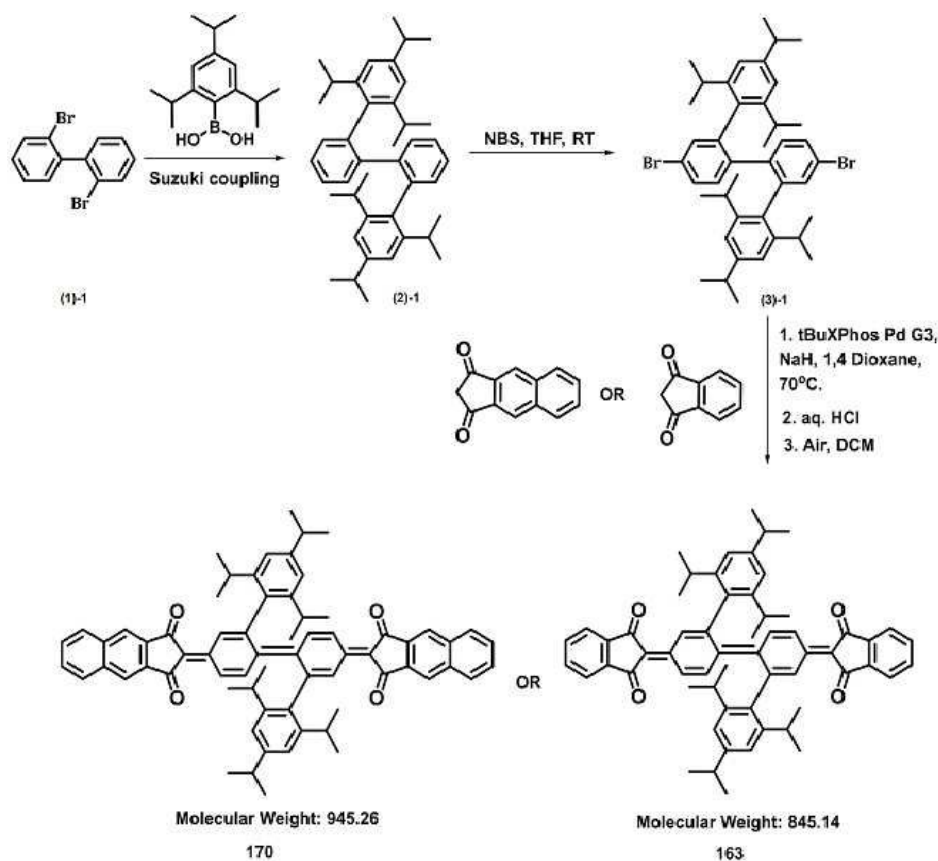
[0416]

화합물 132의 합성 단계에서, 중간체 (4)가 아닌 IPQT-Br2, 말단기를 1H-indene-1,3(2H)-dione이 아닌 1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 169의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 169를 합성하였다. 생성된 화합물 169는 ^1H NMR (CDCl_3 , 500 MHz) 를 통해 확인되었다.

(Blue solid, Yield = 36%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.95 (s, 4H), 8.50 (m, 4H), 8.46 (s, 2H), 8.25 (d, 4H), 7.86 (d, 4H), 7.27 (s, 4H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

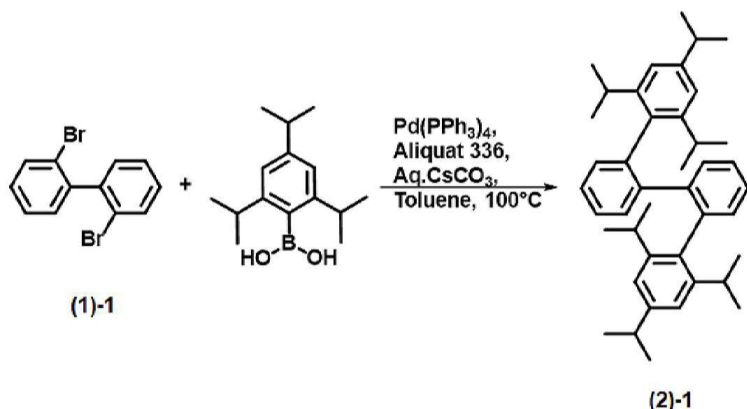
[0418]

화합물 163, 170의 합성



[0419]

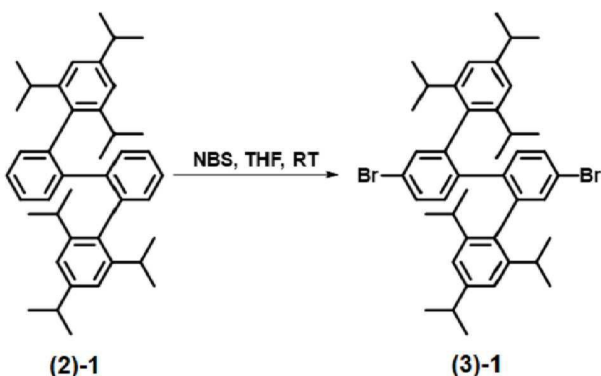
[0420] 중간체 (2)-1 (2,2'',4,4'',6,6''-hexaisopropyl-1,1':2',1'':2'',1'''-quaterphenyl의 합성)



[0421]

[0422] 마이크로웨이브 바이알에 중간체 (1)-1 (200 mg, 0.64 mmol), 2,4,6 tri-isopropyl phenyl boronic acid (636.3 mg, 2.56 mmol), Aliquat 336 (3 drops) 을 넣은 후, 글로브 박스에서 Pd(PPh₃)₄ (34.7 mg, 0.03 mmol) 을 넣어준다. Anhydrous toluene (5mL)와 2M CsCO₃ (3mL)을 넣어서 녹인 후, 100℃ 에서 12시간 교반한다. TLC 로 반응이 진행된 것을 확인하고, 용매를 로터리를 이용하여 제거하고 Diethyl ether와 H₂O를 이용하여 추출한다. MgSO₄을 통해 남은 수분을 제거한 후, 필터된 용액의 용매를 로터리를 이용하여 제거하여준다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 중간체 (2)-1을 얻을 수 있다. ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.94 (s, 2H), 7.73 (m, 2H), 7.61 (m, 4H), 7.31 (s, 4H) 3.20-3.14 (m, 2H), 2.62-2.56 (m, 4H), 1.53 (d, 12H), 1.22-1.17 (dd, 24H).

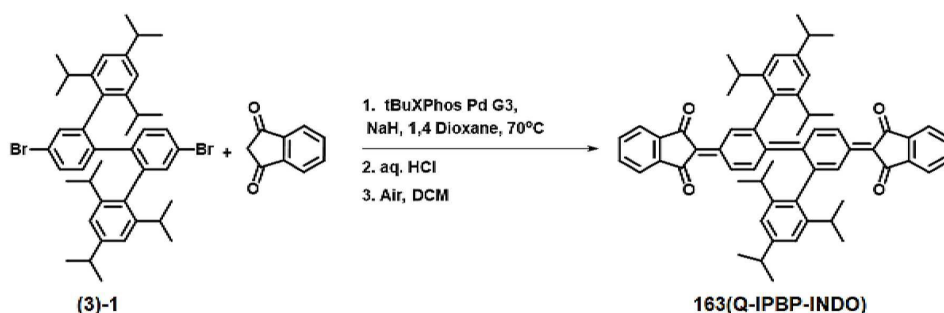
[0424] 중간체 (3)-1 (4'',5'-dibromo-2,2'',4,4'',6,6''-hexaisopropyl-1,1':2',1'':2'',1'''-quaterphenyl) 합성



[0425]

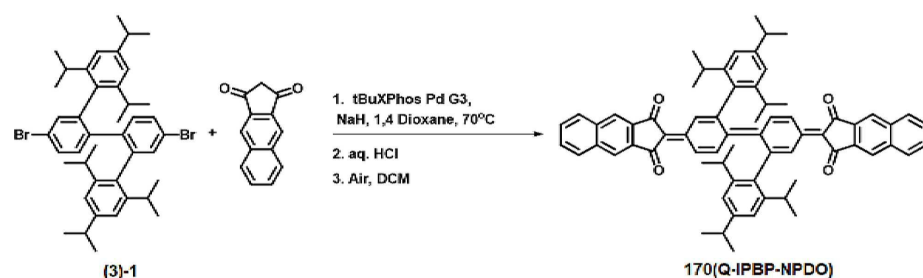
[0426] 중간체 (2)-1 (100mg, 0.179mmol)를 THF (150 mL)에 녹인 후, 실온에서 10분 동안 교반한다. NBS (38.2 mg, 0.214 mmol)를 첨가하고, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 질소 조건으로 6시간 동안 교반한다. 반응이 완결된 후, DCM과 H₂O로 유기용매에 녹아있는 물질을 추출한다. MgSO₄를 가하여 추출 후 남아있는 수분을 제거한다. 필터 후, 로터리를 이용하여 용매를 제거한다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통해 분리하면 중간체 (3)-1을 얻을 수 있다. ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.92 (d, 2H), 7.83 (s, 2H), 7.63 (d, 2H), 7.31 (s, 4H) 3.20-3.14 (m, 2H), 2.62-2.56 (m, 4H), 1.53 (d, 12H), 1.22-1.17 (dd, 24H).

[0428] 화합물 163 (Q-IPBP-INDO, 2,2'-(2,2'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-[1,1'-bi(cyclohexylidene)]-2,2',5,5'-tetraenylidene-4,4'-diylidene)bis(1H-indene-1,3(2H)-dione) 합성



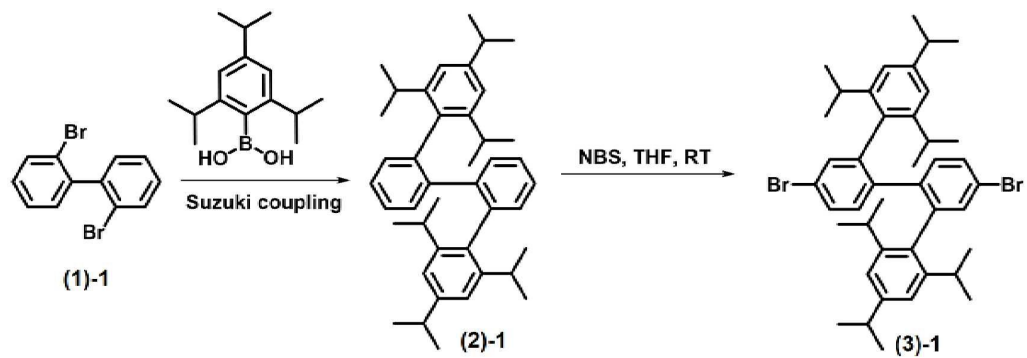
중간체 (3)-1 (100mg, 0.139 mmol), 1H-indene-1,3(2H)-dione (159.9 mg, 1.09 mmol)과 NaH (13.2 mg, 0.552 mmol)를 마이크로웨이브 바이알에 넣은 후, 글로브박스에서 tBuXPhos Pd G3(10.4 mg, 0.013 mmol) 첨가하여 동봉한다. 1,4-dioxane (3 mL)을 넣은 후, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 70℃로 열을 가하여 12시간 동안 교반한다. 반응 후 용매를 제거하고, 0.1M의 HCl 15 mL를 가하여 10분간 교반한다. 반응 후에 DCM과 H₂O로 유기용매에 녹아있는 물질을 추출한다. MgSO₄ 를 가한 후 공기중에서 20분 교반한다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 분리하면 화합물 163(Q-IPBP-INDO)를 얻을 수 있다. 생성된 화합물 163는 ¹H NMR (CDCl₃, 500 MHz)를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 36%) ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.84-7.79 (m, 4H), 7.68-7.64 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 6.51 (s, 2H), 5.94 (m, 4H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

화합물 170 (Q-IPBP-NPDO, 2,2'-(2,2'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-[1,1'-bi(cyclohexylidene)]-2,2',5,5'-tetraenylidene-4,4'-diylidene)bis(1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione) 합성

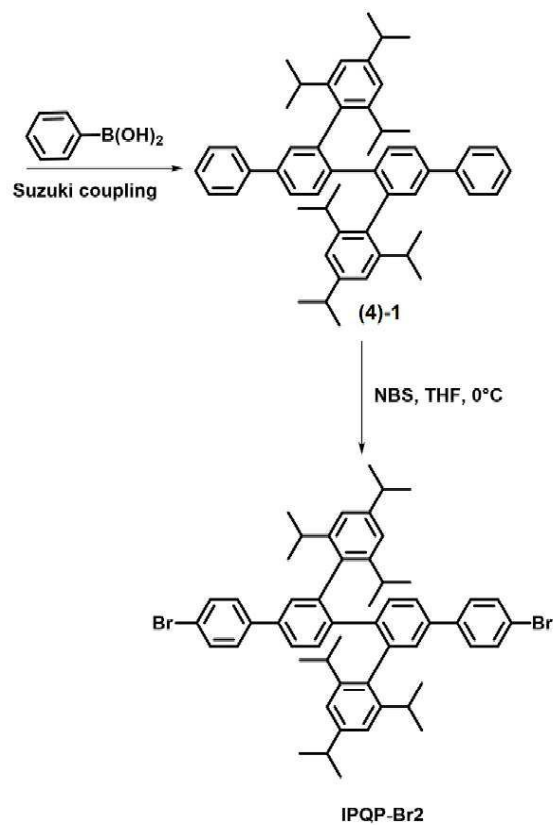


화합물 163의 합성 단계에서, 1H-indene-1,3(2H)-dione 대신 1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 163의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 170을 합성하였다. 생성된 화합물 170는 ¹H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 30%) ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 8.95 (s, 4H), 8.25 (d, 4H), 7.86 (d, 4H), 7.27 (s, 4H), 6.51 (s, 2H), 5.94 (m, 4H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

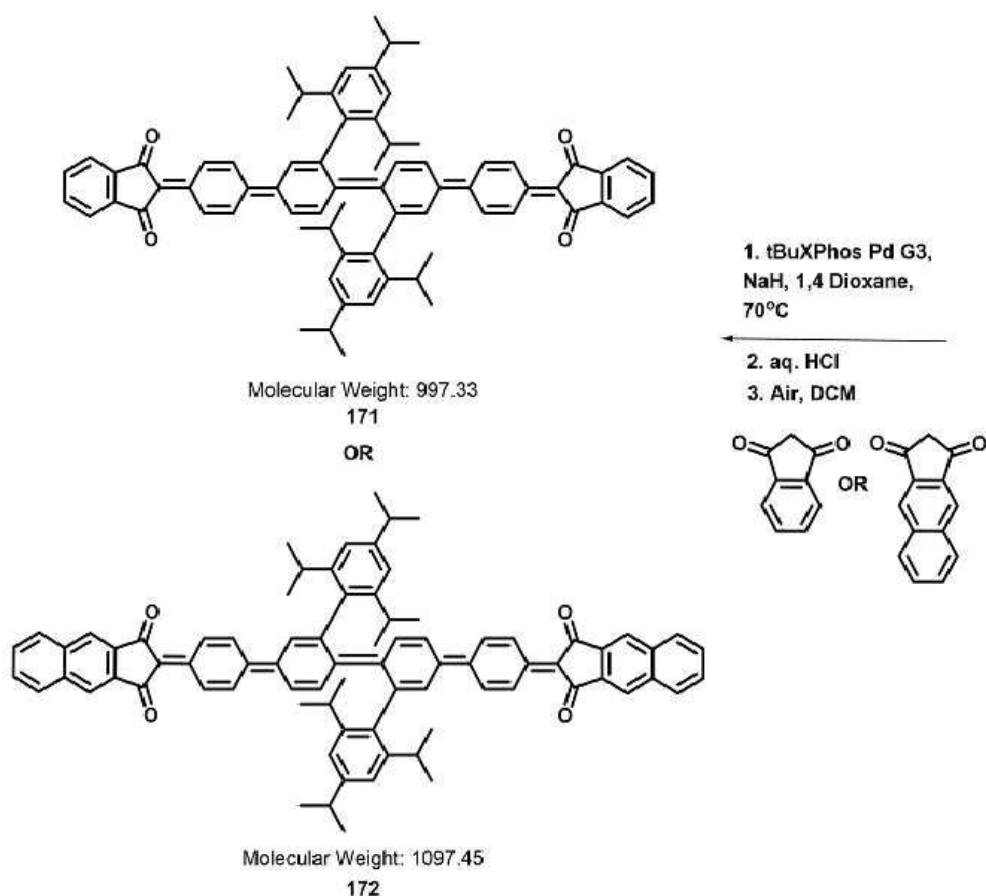
[0436] 화합물 171, 172의 합성



[0437]



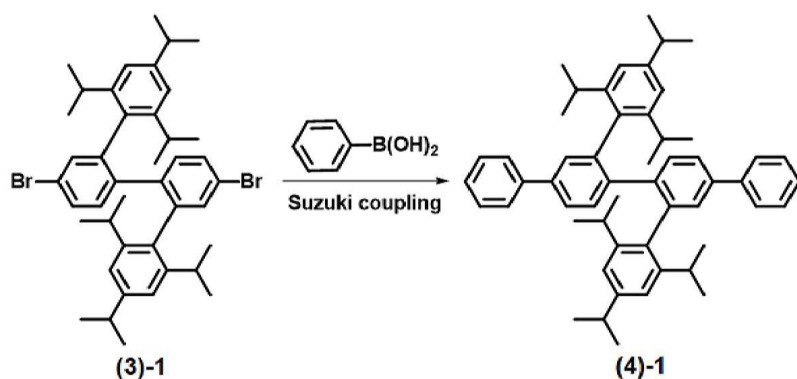
[0438]



[0439]

[0440]

중간체 (4)-1 (2,2''',4,4''',6,6'''-hexaisopropyl-1,1':2',1'':2'',1'''-quaterphenyl) 합성



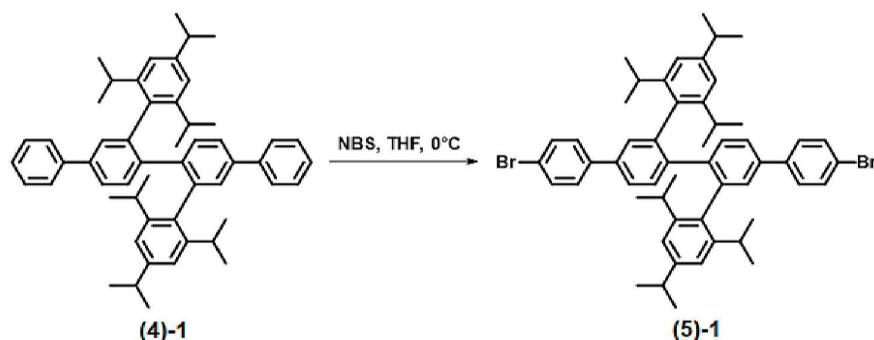
[0441]

[0442]

마이크로웨이브 바이알에 중간체 (3)-1 (300mg, 0.42mmol), phenylboronic acid (123.95mg, 1.02 mmol)을 넣은 후, 글로브 박스에서 Pd(dppf)₂Cl₂ (29.2 mg, 0.04 mmol)을 넣어준다. Anhydrous toluene (4mL), Anhydrous THF (2mL)와 2M Na₂CO₃ (3mL)을 넣어서 녹인 후, 100°C에서 12시간 교반한다. 반응 후 용매를 로터리를 이용하여 제거하고 Diethyl ether와 H₂O를 이용하여 추출한다. MgSO₄을 통해 남은 수분을 제거한 후, 필터한 용액의 용매를 로터리를 이용하여 제거하여 준다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 분리하면 중간체 (4)-1을 얻을 수 있다. ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 8.15 (d, 2H), 8.13 (s, 2H), 7.79 (d, 4H), 7.46 (m, 4H), 7.41 (m, 2H), 7.35 (d, 2H), 7.31 (s, 4H), 3.20-3.14 (m, 2H), 2.62-2.56 (m, 4H), 1.53 (d, 12H), 1.22-1.17(dd, 24H).

[0444]

중간체 (5)-1 (4'',5'-bis(4-bromophenyl)-2,2''',4,4''',6,6'''-hexaisopropyl-1,1':2',1'':2'',1'''-quaterphenyl)의 합성



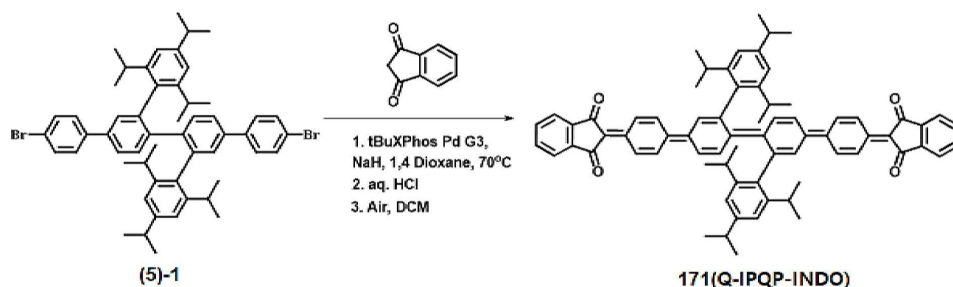
[0445]

[0446]

중간체 (4)-1 (200mg, 0.28 mmol)를 THF (250mL)에 녹인 후, 0°C에서 10분 동안 교반 시킨다. NBS (96.1 mg, 0.54 mmol)를 첨가하고 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태에서 질소 조건으로 0°C에서 15분간 교반 시킨다. 반응 후에 용매를 로터리를 이용하여 제거한 후, DCM과 H₂O로 유기용매에 녹아있는 물질을 추출한다. MgSO₄를 가하여 추출 후 남아있는 수분을 제거한 후, 필터한 용액을 로터리를 이용하여 용매를 제거한다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 분리하면 중간체 (5)-1을 얻을 수 있다. ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 8.15 (d, 2H), 8.13 (s, 2H), 7.56 (d, 4H), 7.53 (d, 4H), 7.35 (d, 2H), 7.31 (s, 4H), 3.20-3.14 (m, 2H), 2.62-2.56 (m, 4H), 1.53 (d, 12H), 1.22-1.17 (dd, 24H).

[0448]

화합물 171 (Q-IPQP-INDO, 2,2'-(2'',3'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-[1,1':4',1''':4'',1''''-quatercyclohexan]-1(1'),1''(4'),1''''(4''),2,2',2'',2''',5,5',5'',5'''-undecaene-4,4''''-diylidene)bis(1H-indene-1,3(2H)-dione) 합성



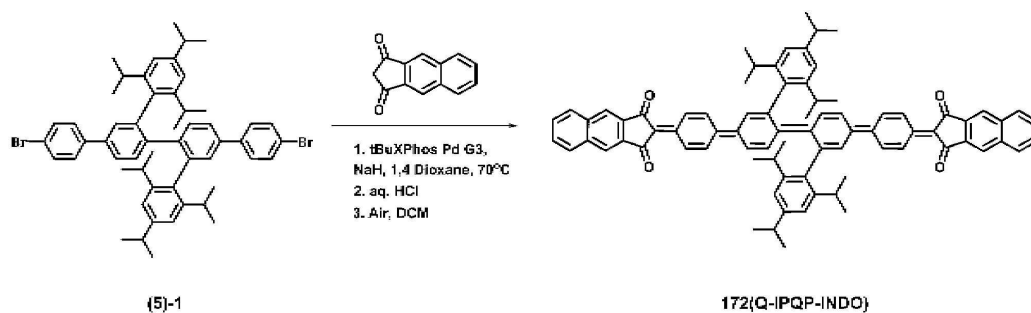
[0449]

[0450]

화합물 163의 합성 단계에서, 중간체 (3)-1 대신 (5)-1 중간체를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 163의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 171을 합성하였다. 생성된 화합물 170는 ¹H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 34%) ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) 7.84-7.79 (m, 4H), 7.68-7.64 (m, 4H), 7.27 (s, 4H), 6.51 (s, 2H), 5.94 (m, 12H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

[0452]

화합물 172 (Q-IPQP-NPDO, 2,2'-(2'',3'-bis(2,4,6-triisopropylphenyl)-[1,1':4',1''':4'',1''''-quatercyclohexan]-1(1'),1''(4'),1''''(4''),2,2',2'',2''',5,5',5'',5'''-undecaene-4,4''''-diylidene)bis(1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione) 합성



화합물 163의 합성 단계에서, 중간체 (3)-1 대신 (5)-1 중간체, 말단기를 1H-indene-1,3(2H)-dione 대신 1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 163의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 172를 합성하였다. 생성된 화합물 172는 ^1H NMR를 통해 확인되었다. (Blue solid, Yield = 32%) ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) 8.95 (s, 4H), 8.25 (d, 4H), 7.86 (d, 4H), 7.27 (s, 4H), 6.51 (s, 2H), 5.94 (m, 12H), 3.16-3.11 (m, 2H), 2.59-2.52 (m, 4H), 1.50 (d, 12H), 1.22-1.14 (dd, 24H).

흡광 파장, HOMO 에너지 레벨, LUMO 에너지 레벨 및 밴드 갭

화합물 132, 140, 141, 143, 163, 168, 169-172 및 B-IPBT-INDO의 흡광 파장, HOMO 에너지 레벨, LUMO 에너지 레벨, 분해 온도, 밴드 갭 및 흡광 계수를 측정하여 하기 표 1에 나타내었다.

Cyclic voltammetry(CV)을 이용하여 HOMO 에너지 레벨을 측정하였다. 흡광 파장, LUMO 에너지 레벨, 밴드 갭, 흡광 계수 값은 UV-vis spectroscopy을 이용하여 측정하였다. 분해 온도는 Thermogravimetric Analyzer(TGA)을 이용하여 측정하였다.

표 1

	$\lambda_{\text{max}}(\text{film})[\text{nm}]$	$\text{HOMO}^{\text{CV}}(\text{eV})$	$\text{LUMO}^{\text{OPT}}(\text{eV})$	$E_{\text{g}}^{\text{opt}}(\text{eV})$	$T_{\text{d}}(^{\circ}\text{C})$	$\epsilon \times 10^5 (\text{cm}^{-1}) @ \lambda_{\text{max}}$
화합물 132	676	-5.58	-3.89	1.69	290	4.83
화합물 140	666	-5.64	-3.93	1.71	261	3.01
화합물 141	670	-5.68	-3.97	1.71	255	2.77
화합물 168	743	-5.74	-4.21	1.53	296	4.10
화합물 143	883	-4.89	-3.96	0.93	317	3.78
화합물 163	714	-5.52	-4.3	1.22	279	3.42
화합물 169	958	-5.08	-4.29	0.79	282	3.11
화합물 170	789	-5.68	-4.61	1.07	287	2.76
화합물 171	921	-4.83	-4.37	0.46	304	2.68
화합물 172	1004	-5.02	-4.69	0.33	273	2.09
B-IPBT-INDO	569	-5.84	-3.83	2.01	287	1.32

$\lambda_{\text{max}}(\text{film})$: 화합물을 필름 300 Å으로 제조하여 측정한 흡수광의 최대 파장

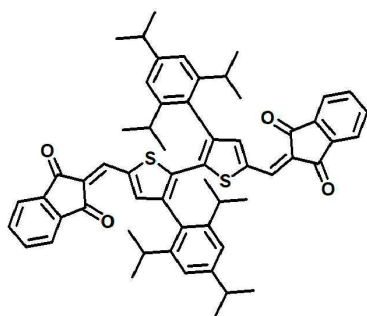
HOMO^{CV} : Cyclic voltammetry(CV)의 산화 온셋(oxidation onset)으로부터 계산된 HOMO 에너지 레벨

LUMO^{OPT} : 수식 $\text{HOMO}^{\text{CV}} + E_{\text{g}}^{\text{opt}}(\text{eV})$ 으로부터 계산된 LUMO 에너지 레벨

$E_{\text{g}}^{\text{opt}}(\text{eV})$: 옵티컬 밴드갭

$T_{\text{d}}(^{\circ}\text{C})$: 분해 온도

[0465] $\varepsilon \times 10^5 \text{ (cm}^{-1}\text{)} @ \lambda_{\text{max}}$: 최대 파장에서 흡광 계수



Molecular Weight: 883.22

[0466]

[0467]

B-IPBT-INDO

[0469] 벤제노이드 화합물인 B-IPBT-INDO는 화합물 132는 유사한 구조를 가진다. 하지만, 표 1을 참조하면, 화합물 132는 벤제노이드 화합물인 B-IPBT-INDO보다 분자량이 작음에도 불구하고, 더 장파장을 흡수하며 밴드 갭도 작은 것을 알 수 있다.

[0471] 비교예 1

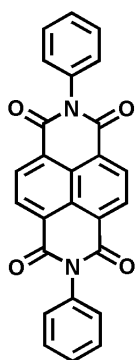
[0472] ITO 유리 기판(애노드)을 50 mm x 50 mm x 0.5 mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 10분 동안 초음파 세정한 후, 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다. 상기 애노드 상부에 HAT-CN를 진공 증착하여 100Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상부에 HT3를 진공 증착하여 1250Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0473] 상기 정공 수송층 상부에 m-MTDATA를 진공 증착하여 200Å 두께의 보조층을 형성하였다.

[0474] 상기 보조층 상부에 B-IPBT-INDO 80Å, N14 340Å를 차례로 증착하여 활성층을 형성하였다.

[0475] 이어서, BA1q를 진공 증착하여 50Å 두께의 버퍼층을 형성하고, 상기 버퍼층 상부에 ET1를 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다.

[0476] 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 10Å로 진공 증착하여 전자 주입층을 형성하였고, 계속해서 MgAg 100Å를 차례로 증착하여 캐소드를 형성함으로써 유기 광검출기를 제작하였다.



N14

[0477]

[0478] 실시예 1

[0479] 상기 활성층 형성시 화합물 132 및 N14를 각각 80Å, 340Å 두께로 활성층을 형성한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.

[0480] 실시예 2

- [0481] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 140을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0482] **실시예 3**
- [0483] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 141을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0484] **실시예 4**
- [0485] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 168을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0486] **실시예 5**
- [0487] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 143을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0488] **실시예 6**
- [0489] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 163을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0490] **실시예 7**
- [0491] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 169을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0492] **실시예 8**
- [0493] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 170을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0494] **실시예 9**
- [0495] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 171을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0496] **실시예 10**
- [0497] 상기 활성층 형성시 화합물 132 대신 화합물 172을 사용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 광검출기를 제작하였다.
- [0499] 상기 비교예 1 및 실시예 1 내지 10에서 제조된 유기 광검출기의 피크 파장인 580~700 nm 파장에 대한 외부 양자 효율(EQE)을 측정하여, 결과를 표 2에 나타내었다.

표 2

[0500]

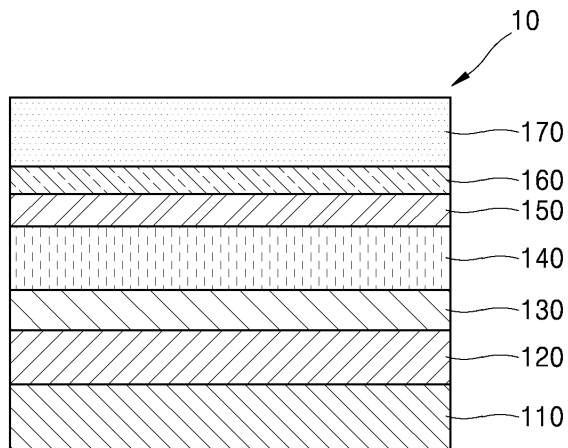
	EQE(%) @580~700nm
비교예 1	24.1%
실시예 1	47.0%
실시예 2	29.6%
실시예 3	27.5%
실시예 4	43.2%
실시예 5	37.5%
실시예 6	36.7%
실시예 7	33.3%
실시예 8	31.8%
실시예 9	29.3%
실시예 10	24.5%

[0502] 표 2를 참조하면, 동일 소자 구조에서 비교예 1 보다 실시예 1 내지 10가 우수한 외부 양자 효율을 보인다는 것을 알 수 있다.

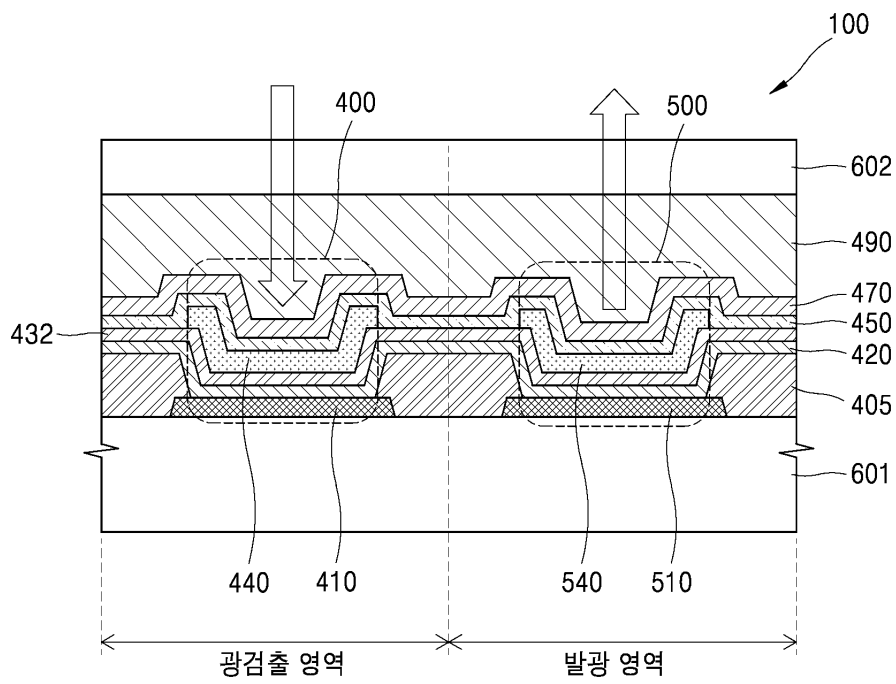
[0504] 이와 같이 본 발명은 도면에 도시된 실시예를 참고로 설명되었으나 이는 예시적인 것에 불과하며, 당해 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 다른 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의하여 정해져야 할 것이다.

도면

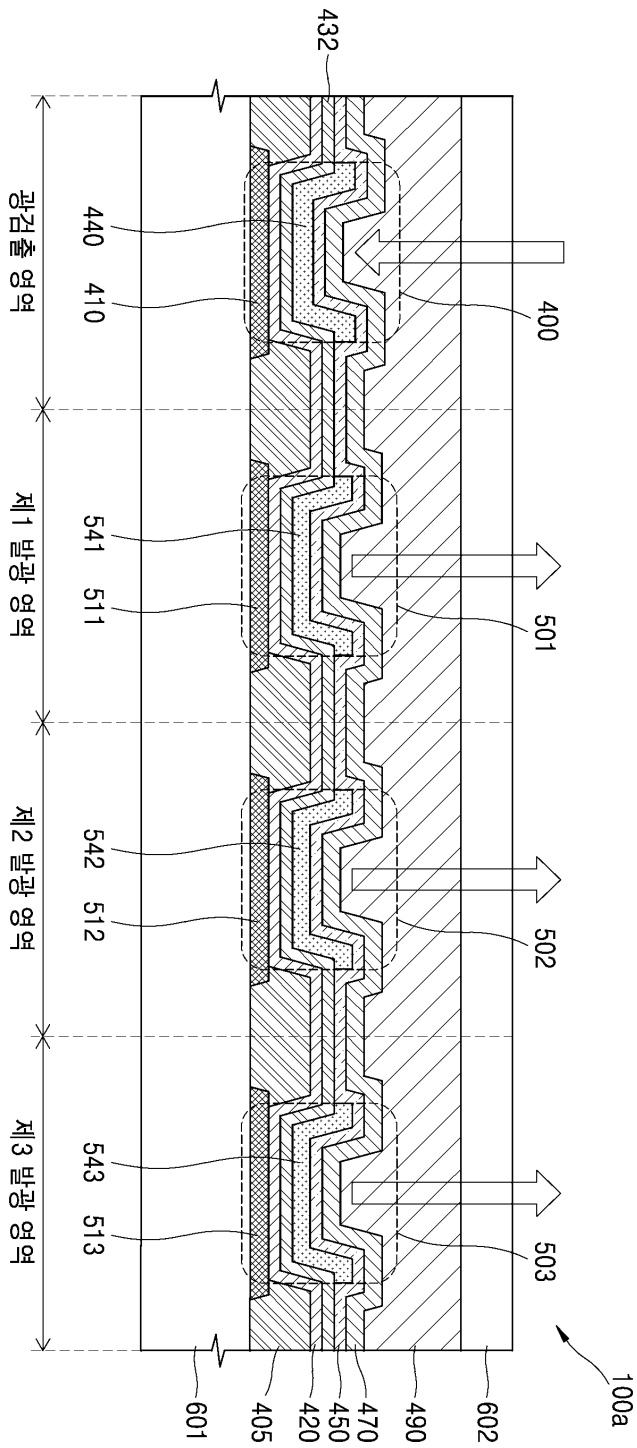
도면1



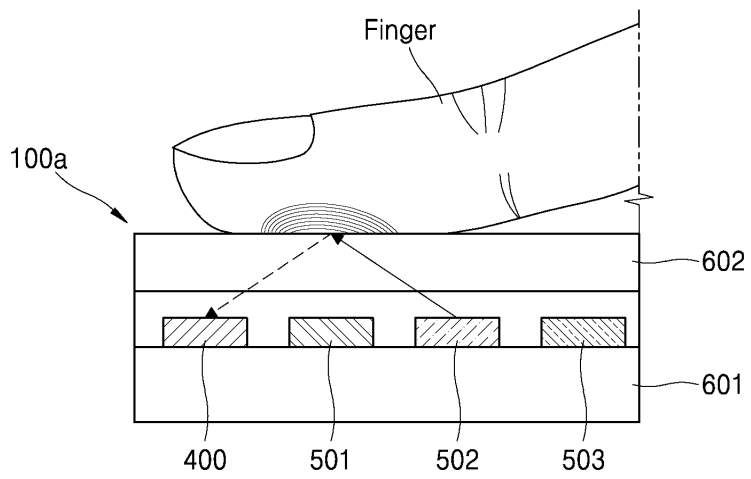
도면2



도면3



도면4a



도면4b

