

**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)****(11) 공개번호** 10-2024-0145479  
**(43) 공개일자** 2024년10월07일

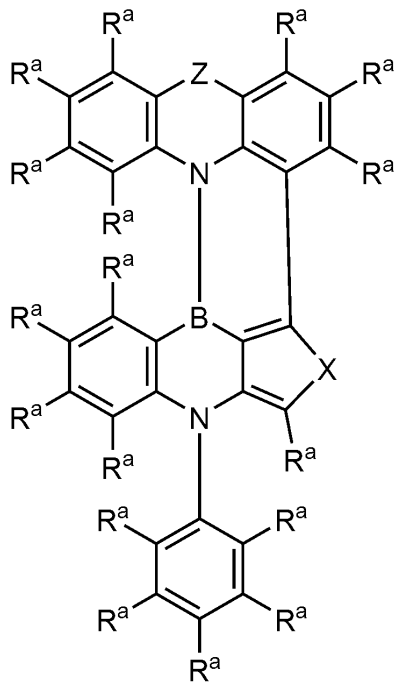
- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 5/02 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H10K 101/20 (2023.01) H10K 50/12 (2023.01)  
H10K 85/60 (2023.01)
- (52) CPC특허분류  
C07F 5/02 (2013.01)  
C09K 11/06 (2022.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7028488
- (22) 출원일자(국제) 2023년02월03일  
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년08월23일
- (86) 국제출원번호 PCT/KR2023/001612
- (87) 국제공개번호 WO 2023/149756  
국제공개일자 2023년08월10일
- (30) 우선권주장  
22155149.2 2022년02월04일  
유럽특허청(EPO)(EP)

- (71) 출원인  
삼성디스플레이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자  
덕 세바스티앙  
독일 하이델베르크 69115 파펜그룬더 테라세 1
- (74) 대리인  
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 16 항

**(54) 발명의 명칭** 광전자 소자용 유기 분자**(57) 요약**

본 발명은 광전자 소자에 적용하기 위한 유기 분자에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, 상기 유기 분자는 화학식 I의 구조를 갖고, 여기서 X는 O 또는 S이고; Z는 독립적으로 직접 결합,  $CR^3R^4$ ,  $C=CR^3R^4$ ,  $C=O$ ,  $C=NR^3$ ,  $NR^3$ , O,  $SiR^3R^4$ , S, S(O) 및 S(O)<sub>2</sub>로 이루어진 군으로부터 선택되고; 및 R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: 수소, 중수소, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, B(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알키닐, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, 및 C<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴:



화학식 I

(52) CPC특허분류

*H10K 50/12* (2023.02)

*H10K 85/615* (2023.02)

*H10K 85/6574* (2023.02)

*H10K 85/658* (2023.02)

*H10K 2101/20* (2023.02)

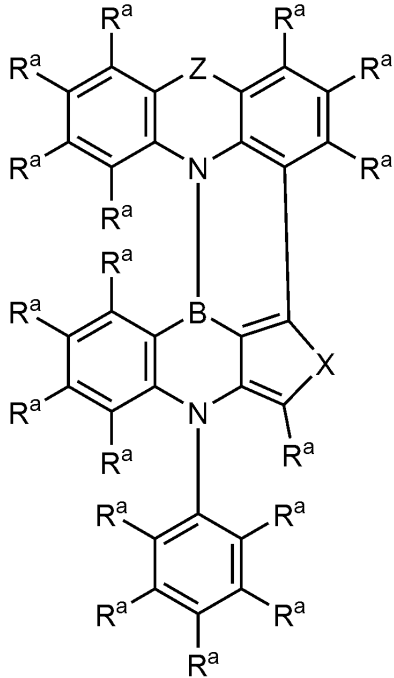
---

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 I의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 I

여기서

X는 O 또는 S이고;

Z는 각 경우에 독립적으로 직접 결합,  $CR^3R^4$ ,  $C=CR^3R^4$ ,  $C=O$ ,  $C=NR^3$ ,  $NR^3$ , O,  $SiR^3R^4$ , S,  $S(O)$  및  $S(O)_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고;

$R^a$ ,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

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

$C_1$ - $C_{40}$ -알킬,

이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

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

$C_1$ - $C_{40}$ -알콕시,

이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

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

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

C<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>-헥테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

R<sup>5</sup>는 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

수소, 중수소, N(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>6</sup>, Si(R<sup>6</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, B(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>6</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S 또는 CONR<sup>6</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S 또는 CONR<sup>6</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S 또는 CONR<sup>6</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S 또는 CONR<sup>6</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알킬닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>, C≡C, Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>6</sup>, P(=O)(R<sup>6</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>6</sup>, O, S 또는 CONR<sup>6</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

C<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>6</sup>로 선택적으로 치환되고,

R<sup>6</sup>은 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

수소, 중수소, OPh (Ph = 페닐), CF<sub>3</sub>, CN, F,

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-알킬,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소, CN, CF<sub>3</sub> 또는 F로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-알콕시,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소, CN, CF<sub>3</sub> 또는 F로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-티오알콕시,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소, CN, CF<sub>3</sub> 또는 F로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-알케닐,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소, CN, CF<sub>3</sub> 또는 F로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>-알킬닐,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소, CN, CF<sub>3</sub> 또는 F로 치환되고;

C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴,

이는 선택적으로 하나 이상의 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-알킬 치환기로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>-헤테로아릴,

이는 선택적으로 하나 이상의 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>-알킬 치환기로 치환되고;

N(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴)<sub>2</sub>;

N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>-헤테로아릴)<sub>2</sub>, 및

N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>-헤테로아릴)(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴);

여기서 임의의 치환기 R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>는 독립적으로 하나 이상의 치환기 R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup> 및/또는 R<sup>6</sup>와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족, 헤테로방향족 및/또는 벤조-융합 고리 시스템을 형성한다.

## 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 Z는 직접 결합인, 유기 분자.

## 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, 상기 X는 S인, 유기 분자.

## 청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 R<sup>a</sup>는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 분자:

수소, 중수소, Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub>,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

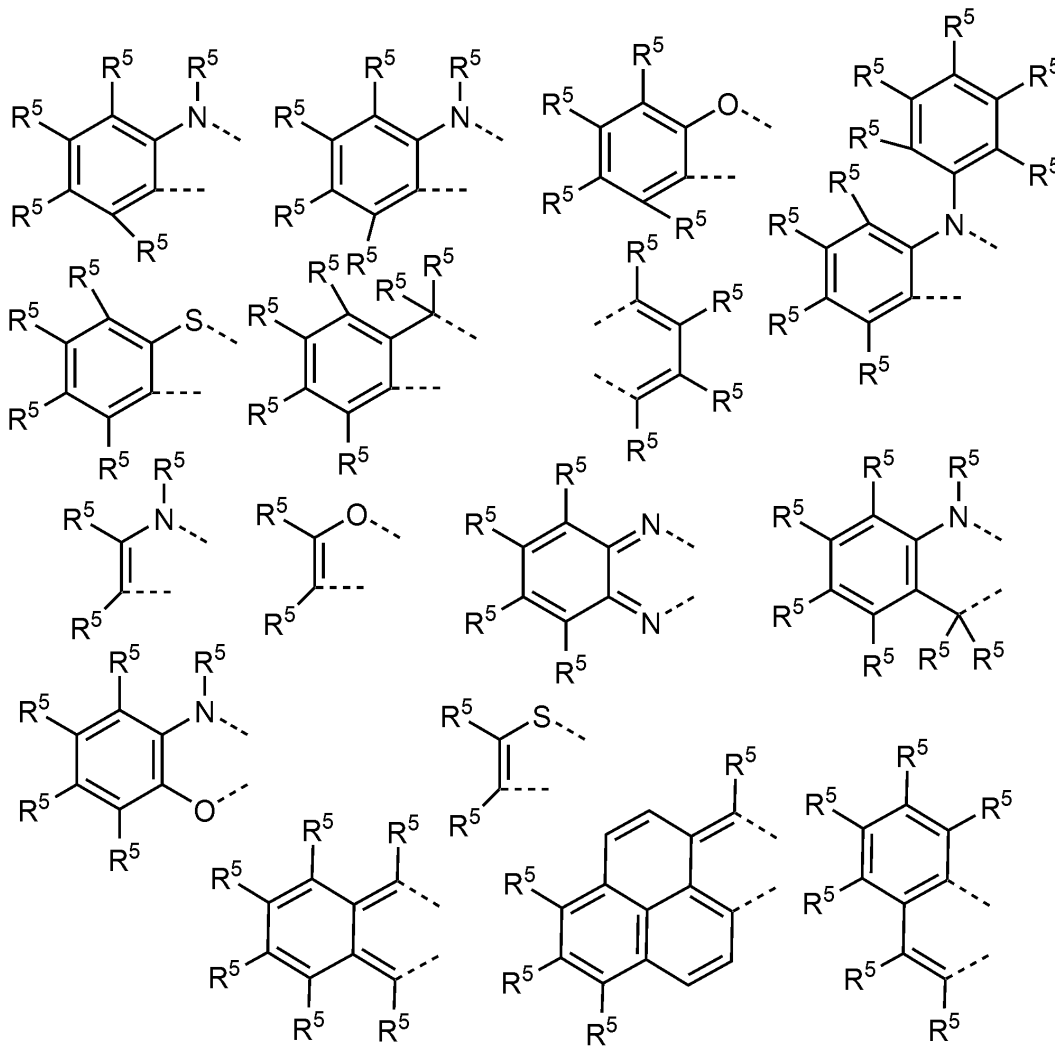
Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

및 Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)<sub>2</sub>;

여기서 선택적으로, 2개 이상의 인접한 치환기 R<sup>a</sup>는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템에 대한 부착점을 형성하고;



여기서 각각의 파선은 위에 나타낸 군의 고리 시스템이 화학식 I에 표시된 구조에 융합되도록 위에 나타낸 고리 시스템 중 하나를 2개의 인접한 치환기 R<sup>a</sup>의 위치에 연결하는 직접 결합을 나타낸다.

**청구항 5**

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 R<sup>a</sup>는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 분자:

수소, 중수소, Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub>,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

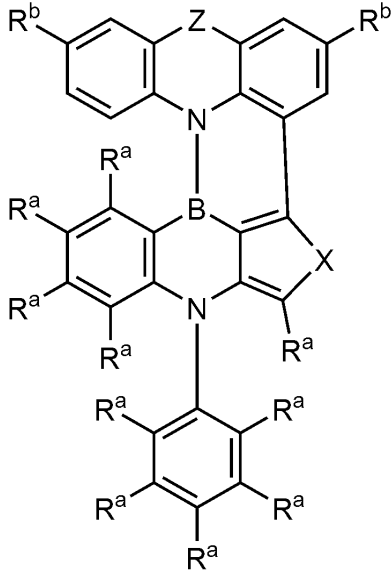
Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,  
 및 N(Ph)<sub>2</sub>.

**청구항 6**

제1항 내지 제5항 중 어느 한항에 있어서, 화학식 II의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 II

여기서, R<sup>b</sup>는 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

수소, 중수소, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>-알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고, 및

C<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환된다.

#### 청구항 7

제6항에 있어서, 상기 R<sup>b</sup>는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 분자:

수소, 중수소,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub>,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

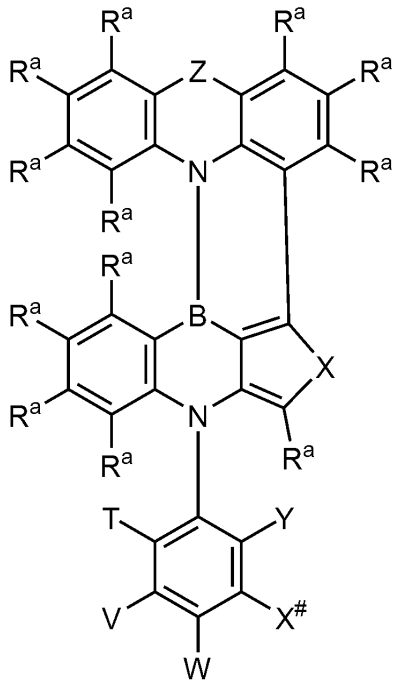
Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

및 N(Ph)<sub>2</sub>.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 III의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 III,

여기서, T, V, W, X<sup>#</sup>, 및 Y 각각은 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

수소,

Me,

<sup>i</sup>Pr,

<sup>t</sup>Bu,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.

청구항 9

하기를 포함하는 조성물:

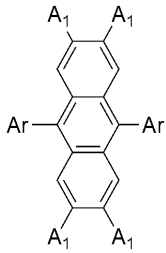
- (a) 특히 에미터의 형태로서의 제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기 분자, 및
- (b) 상기 유기 분자와 상이한, 호스트 물질, 및
- (c) 선택적으로, 염료 및/또는 용매

청구항 10

제9항에 있어서, 0.1 내지 30 중량%, 또는 0.8 내지 15 중량%, 특히 1.5 내지 5 중량%의 상기 유기 분자를 포함하는 조성물.

**청구항 11**

제9항 또는 제10항에 있어서, 상기 호스트 물질은 화학식 4의 구조를 포함하는 조성물:



화학식 4

여기서

각 Ar은 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴; 및

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴;

각 A<sub>1</sub>은 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

수소;

중수소;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴;

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴; 및

C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬.

**청구항 12**

제9항 또는 제10항에 있어서, TADF 물질 및 인광 물질로 이루어진 군으로부터 선택된 물질을 포함하는 조성물.

**청구항 13**

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기 분자를 특히 발광 에미터로서 포함하거나, 또는 제9항 내지 제12항 중 어느 한 항에 따른 조성물을 포함하는, 광전자 소자.

**청구항 14**

제13항에 있어서, 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 광전자 소자:

- 유기 다이오드, 특히, 유기 발광다이오드(OLED),
- 발광 전기화학 전지,
- OLED 센서,
- 유기 태양 전지,

- 유기 트랜지스터, 특히, 유기 전계 효과 트랜지스터,
- 유기 레이저, 및
- 하향 변환 소자(down-conversion element).

#### 청구항 15

제13항 또는 제14항에 있어서,

- 기관,
- 애노드,
- 캐소드, 및
- 발광층을 포함하고,

상기 애노드 또는 상기 캐소드는 상기 기관 상에 배치되고,

상기 발광층은 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 배치되고, 상기 유기 분자 또는 상기 조성물을 포함하는, 광전자 소자.

#### 청구항 16

(i) 제13항 내지 제15항 중 어느 한 항에 따른 광전자 소자를 제공하는 단계; 및

(ii) 상기 광전자 소자에 전류를 인가하는 단계;를 포함하는, 440nm 내지 470nm 사이의 파장을 갖는 광을 발생시키는 방법.

#### 발명의 설명

#### 기술 분야

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

#### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

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

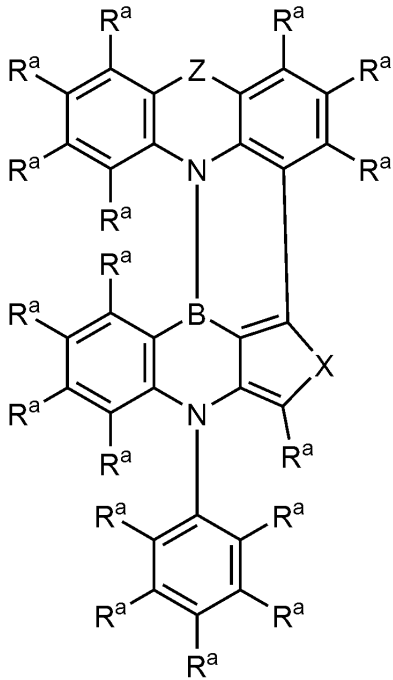
#### 과제의 해결 수단

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

[0004] 본 발명에 따르면, 상기 유기 분자는 순수한 유기 분자이고, 즉, 광전자 소자에 사용되는 것으로 알려진 금속 착물과 대조적으로 어떠한 금속 이온도 함유하지 않는다.

[0005] 본 발명에 따른 유기 분자는 바람직하게는 청색, 또는 하늘색 스펙트럼 범위, 최대 발광(emission maxima)을 나타낸다. 상기 유기 분자는 특히 420 내지 520 nm, 바람직하게는 440 내지 495 nm, 더욱 바람직하게는 450nm 내지 470nm에서 최대 발광(emission maxima)을 나타낸다. 본 발명에 따른 유기 분자의 광발광 양자 수율은, 특히, 50% 이상이다. 광전자 소자, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED)에서의 본 발명에 따른 분자의 사용은, 반치폭(full width at half maximum, FWHM)으로 표현되는, 소자의 더 높은 효율, 또는 더 높은 색순도를 가져온다. 상응하는 OLED는 공지된 에미터 물질 및 유사한 색상을 갖는 OLED보다 더 높은 안정성을 갖는다. 본 발명에 따른 유기 분자와 호스트 물질, 특히 삼중항-삼중항-소멸 호스트 물질을 포함하는 발광층을 갖는 OLED는 높은 안정성을 갖는다.

[0006] 본 발명에 따른 유기 발광 분자는 화학식 I의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다.



[0007]

[0008] 화학식 I

[0009] 여기서

[0010] X는 O 또는 S이고;

[0011] Z는 각 경우에 독립적으로 직접 결합, CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, C=O, C=NR<sup>3</sup>, NR<sup>3</sup>, O, SiR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>, S, S(O) 및 S(O)<sub>2</sub>로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0012] R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

[0013] 수소, 중수소, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, B(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

[0014] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬,

[0015] 이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

[0016] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

[0017] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알콕시,

[0018] 이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

[0019] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>에 의해 선택적으로 치환되고;

[0020] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시,

[0021] 이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

[0022] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se,

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

[0023]  $C_2-C_{40}$ -알케닐,

[0024] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

[0025] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^5)_2$ ,  $Ge(R^5)_2$ ,  $Sn(R^5)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;

[0026]  $C_2-C_{40}$ -알키닐,

[0027] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

[0028] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^5)_2$ ,  $Ge(R^5)_2$ ,  $Sn(R^5)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;

[0029]  $C_6-C_{60}$ -아릴,

[0030] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

[0031]  $C_2-C_{57}$ -헥테로아릴,

[0032] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,

[0033]  $R^5$ 는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:

[0034] 수소, 중수소,  $N(R^6)_2$ ,  $OR^6$ ,  $Si(R^6)_3$ ,  $B(OR^6)_2$ ,  $B(R^6)_2$ ,  $OSO_2R^6$ ,  $CF_3$ ,  $CN$ ,  $F$ ,  $Br$ ,  $I$ ,

[0035]  $C_1-C_{40}$ -알킬,

[0036] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,

[0037] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^6C=CR^6$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^6)_2$ ,  $Ge(R^6)_2$ ,  $Sn(R^6)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^6$ ,  $P(=O)(R^6)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^6$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^6$ 에 의해 선택적으로 치환되고;

[0038]  $C_1-C_{40}$ -알콕시,

[0039] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,

[0040] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^6C=CR^6$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^6)_2$ ,  $Ge(R^6)_2$ ,  $Sn(R^6)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^6$ ,  $P(=O)(R^6)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^6$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^6$ 에 의해 선택적으로 치환되고;

[0041]  $C_1-C_{40}$ -티오알콕시,

[0042] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,

[0043] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^6C=CR^6$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^6)_2$ ,  $Ge(R^6)_2$ ,  $Sn(R^6)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^6$ ,  $P(=O)(R^6)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^6$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^6$ 에 의해 선택적으로 치환되고;

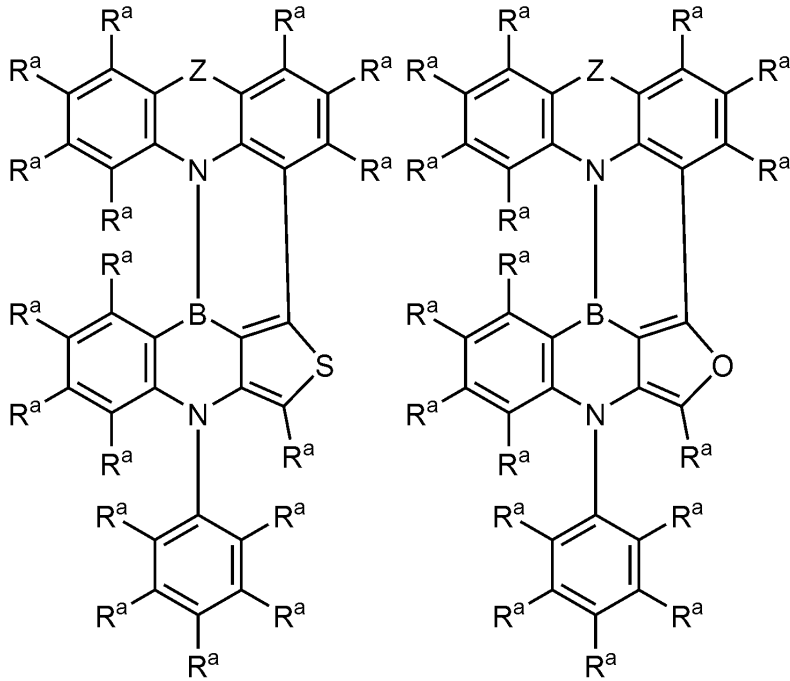
[0044]  $C_2-C_{40}$ -알케닐,

- [0045] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0046] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^6C=CR^6$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^6)_2$ ,  $Ge(R^6)_2$ ,  $Sn(R^6)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^6$ ,  $P(=O)(R^6)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^6$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^6$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0047]  $C_2$ - $C_{40}$ -알키닐,
- [0048] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0049] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^6C=CR^6$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^6)_2$ ,  $Ge(R^6)_2$ ,  $Sn(R^6)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^6$ ,  $P(=O)(R^6)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^6$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^6$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0050]  $C_6$ - $C_{60}$ -아릴,
- [0051] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0052]  $C_2$ - $C_{57}$ -헤테로아릴,
- [0053] 이는 하나 이상의 치환기  $R^6$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0054]  $R^6$ 은 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고:
- [0055] 수소, 중수소,  $OPh$  ( $Ph$  = 페닐),  $CF_3$ ,  $CN$ ,  $F$ ,
- [0056]  $C_1$ - $C_5$ -알킬,
- [0057] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소,  $CN$ ,  $CF_3$  또는  $F$ 로 치환되고;
- [0058]  $C_1$ - $C_5$ -알콕시,
- [0059] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소,  $CN$ ,  $CF_3$  또는  $F$ 로 치환되고;
- [0060]  $C_1$ - $C_5$ -티오알콕시,
- [0061] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소,  $CN$ ,  $CF_3$  또는  $F$ 로 치환되고;
- [0062]  $C_2$ - $C_5$ -알케닐,
- [0063] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소,  $CN$ ,  $CF_3$  또는  $F$ 로 치환되고;
- [0064]  $C_2$ - $C_5$ -알키닐,
- [0065] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 독립적으로, 중수소,  $CN$ ,  $CF_3$  또는  $F$ 로 치환되고;
- [0066]  $C_6$ - $C_{18}$ -아릴,
- [0067] 이는 선택적으로 하나 이상의  $C_1$ - $C_5$ -알킬 치환기로 치환되고;
- [0068]  $C_2$ - $C_{17}$ -헤테로아릴,
- [0069] 이는 선택적으로 하나 이상의  $C_1$ - $C_5$ -알킬 치환기로 치환되고;
- [0070]  $N(C_6-C_{18}\text{-아릴})_2$ ;
- [0071]  $N(C_2-C_{17}\text{-헤테로아릴})_2$ , 및

[0072]  $N(C_2-C_{17}\text{-헤테로아릴})(C_6-C_{18}\text{-아릴})$ ;

[0073] 여기서 선택적으로 임의의 치환기  $R^a$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 는 독립적으로 하나 이상의 치환기  $R^a$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  및/또는  $R^6$ 와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족, 헤테로방향족 및/또는 벤조-융합 고리 시스템을 형성한다.

[0074] 특정 구현예에서, 본 발명에 따른 상기 유기 분자는 화학식 I-1 또는 I-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:

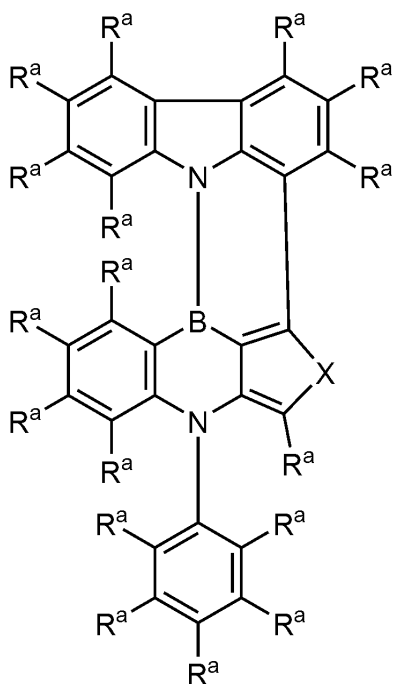


[0075]

[0076] 화학식 I-1 화학식 I-2.

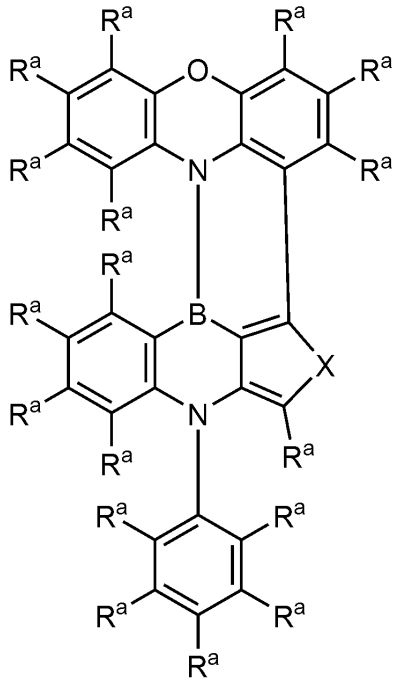
[0077] 바람직한 구현예에서, 상기 유기분자는 화학식 I-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다.

[0078] 일 구현예에서, 상기 유기분자는 화학식 Ia, 화학식 Ib, 화학식 Ic, 화학식 Id, 화학식 Ie, 화학식 If, 화학식 Ig, 화학식 Ih, 화학식 Ii, 화학식 Ij 또는 화학식 Ik의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



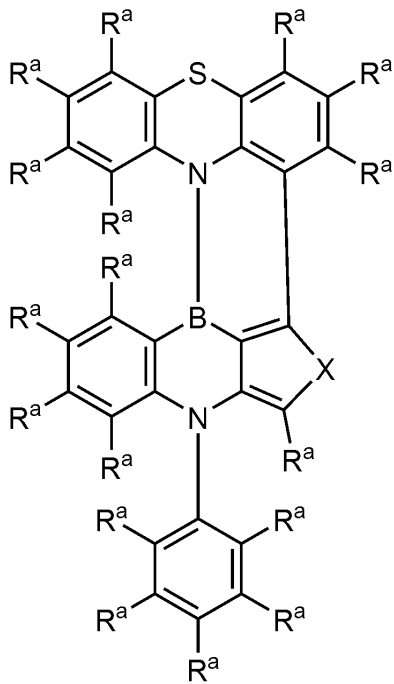
[0079]

[0080] 화학식 Ia



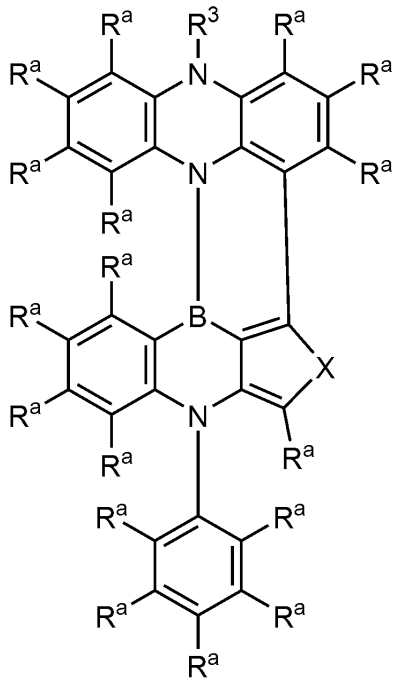
[0081]

[0082] 화학식 Ib



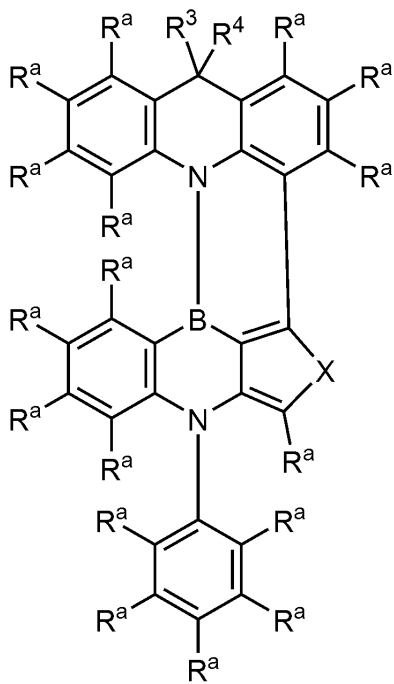
[0083]

[0084] 화학식 Ic



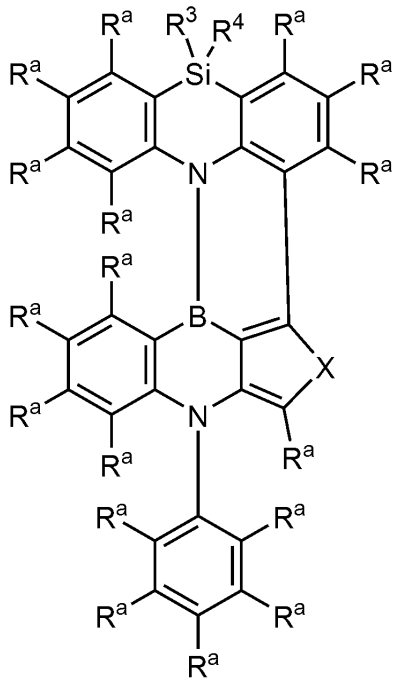
[0085]

[0086] 화학식 Id



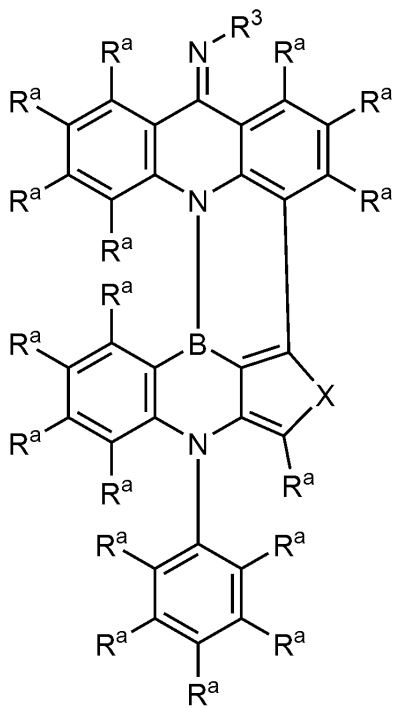
[0087]

[0088] 화학식 Ie



[0089]

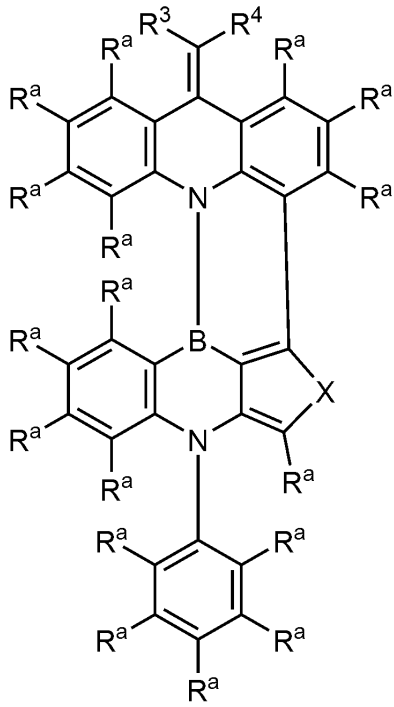
[0090] 화학식 If



[0091]

[0092]

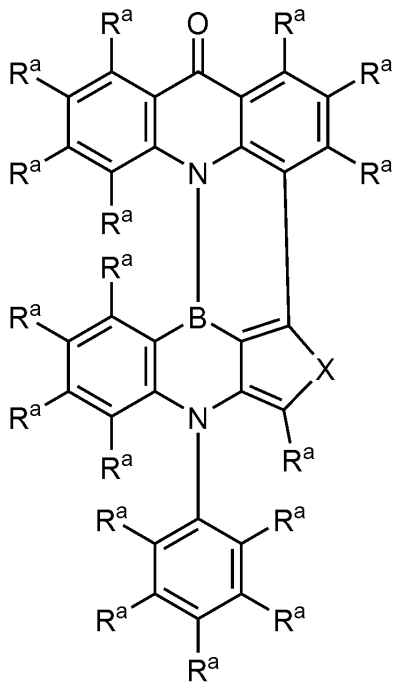
화학식 Ig



[0093]

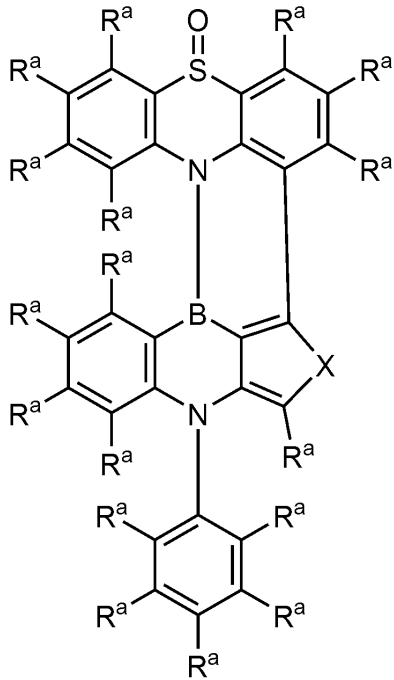
[0094]

화학식 Ih



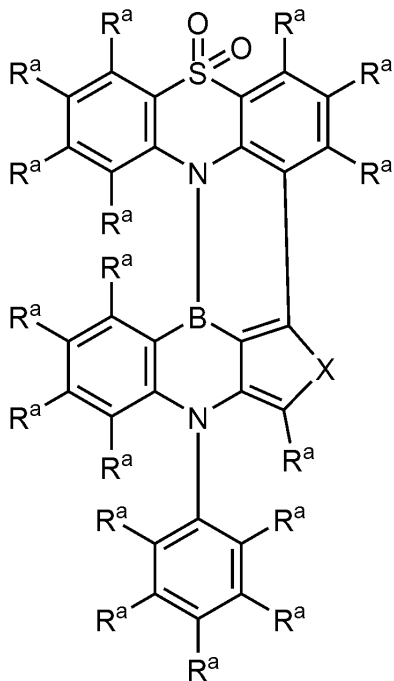
[0095]

[0096] 화학식 Ii



[0097]

[0098] 화학식 Ij



[0099]

[0100] 화학식 Ik.

[0101] 바람직한 구현예에서 상기 유기분자는 화학식 Ia의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다.

[0102] 본 발명의 일 구현예에서, R<sup>a</sup>는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

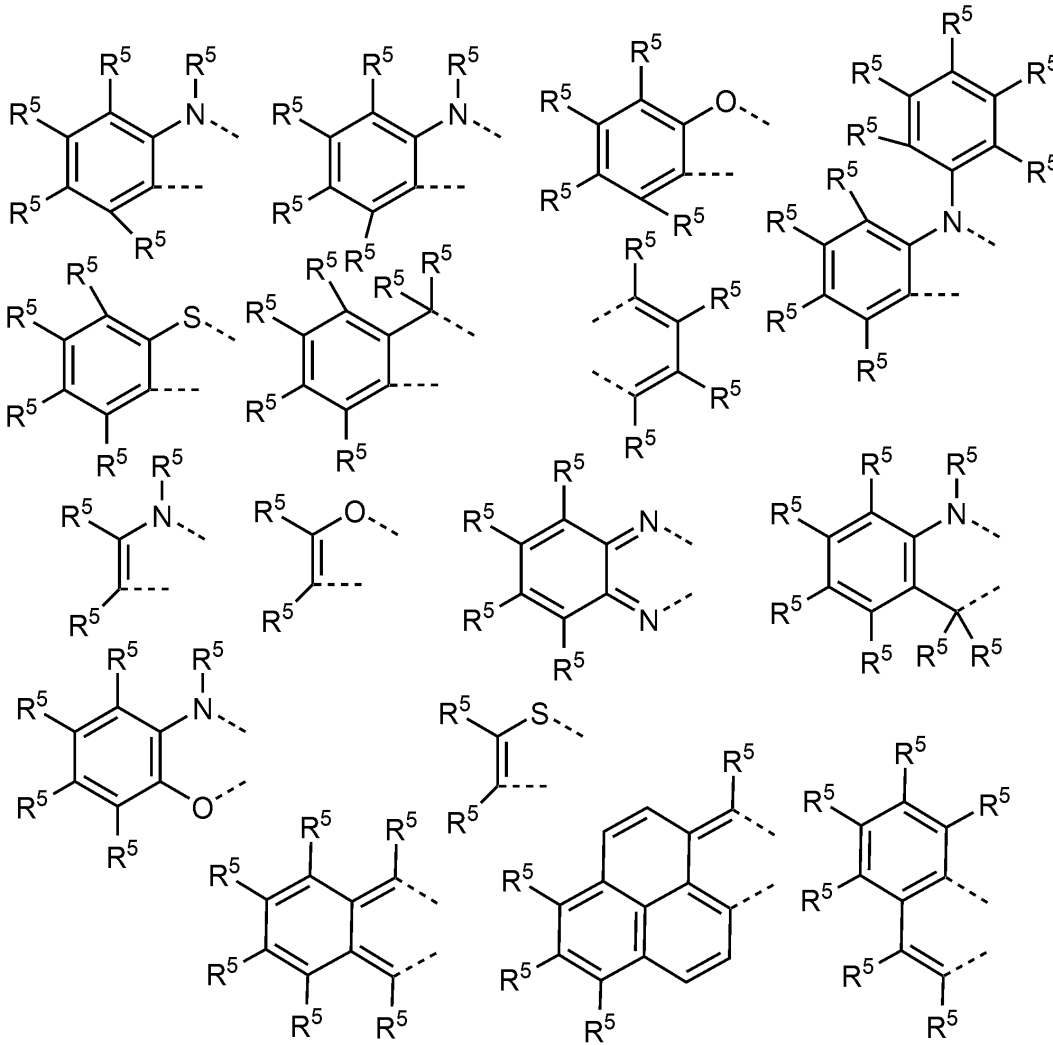
[0103] 수소,

[0104] 중수소,

[0105] Me,

[0106] <sup>i</sup>Pr,

- [0107]  $t$ Bu,
- [0108] CN,
- [0109] CF<sub>3</sub>,
- [0110] Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0111] Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0112] Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0113] Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0114] Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0115] 및 Me,  $i$ Pr,  $t$ Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)<sub>2</sub>;
- [0116] 여기서 2개 이상의 인접한 치환기 R<sup>a</sup>는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템에 대한 부착점을 형성할 수 있다:



[0117]

[0118]

[0119]

[0120]

[0121]

[0122]

[0123]

[0124]

[0125]

여기서 각각의 파선은 위에 나타낸 군의 고리 시스템이 화학식 I에 표시된 구조에 융합되도록 위에 나타낸 고리 시스템 중 하나를 2개의 인접한 치환기 R<sup>a</sup>의 위치에 연결하는 직접 결합을 나타낸다.

일 구현예에서, 적어도 하나의 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족, 헤테로방향족 및/또는 벤조-융합 고리 시스템이 하나 이상의 추가적인 치환기 R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup> 및/또는 R<sup>6</sup>와 함께 치환기 R<sup>a</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>에 의해 형성된다.

일 구현예에서, R<sup>6</sup>은 각 경우에 수소(H), 메틸(Me), i-프로필(CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)(<sup>i</sup>Pr), t-부틸(<sup>t</sup>Bu), 페닐(Ph), CN, CF<sub>3</sub> 및 디페닐아민(NPh<sub>2</sub>)로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된다.

일 구현예에서, R<sup>5</sup>는 각 경우에 수소(H), 메틸(Me), i-프로필(CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)(<sup>i</sup>Pr), t-부틸(<sup>t</sup>Bu), 페닐(Ph), CN, CF<sub>3</sub> 및 디페닐아민(NPh<sub>2</sub>)로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된다.

본 발명의 일 구현예에서, R<sup>a</sup>는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

수소, 중수소, Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub>,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로

치환되는 피리디닐,

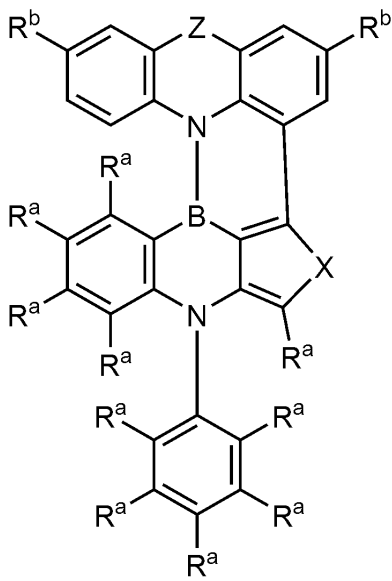
[0126] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0127] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0128] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0129] 및 N(Ph)<sub>2</sub>.

[0130] 일 구현예에서, 상기 유기 분자는 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0131]

[0132] 화학식 II,

[0133] 여기서 R<sup>b</sup>는 각 경우에 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0134] 수소, 중수소, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OR<sup>5</sup>, Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>, B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>, CF<sub>3</sub>, CN, F, Br, I,

[0135] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬,

[0136] 이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

[0137] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

[0138] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알콕시,

[0139] 이는 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup>로 선택적으로 치환되고,

[0140] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH<sub>2</sub>-그룹은 R<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>, C≡C, Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>5</sup>, P(=O)(R<sup>5</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>5</sup>, O, S 또는 CONR<sup>5</sup>;에 의해 선택적으로 치환되고;

[0141] C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-티오알콕시,

- [0142] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0143] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^5)_2$ ,  $Ge(R^5)_2$ ,  $Sn(R^5)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0144]  $C_2$ - $C_{40}$ -알케닐,
- [0145] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0146] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^5)_2$ ,  $Ge(R^5)_2$ ,  $Sn(R^5)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0147]  $C_2$ - $C_{40}$ -알킬닐,
- [0148] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고,
- [0149] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은  $CH_2$ -그룹은  $R^5C=CR^5$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^5)_2$ ,  $Ge(R^5)_2$ ,  $Sn(R^5)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0150]  $C_6$ - $C_{60}$ -아릴,
- [0151] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환되고, 및
- [0152]  $C_2$ - $C_{57}$ -헤테로아릴,
- [0153] 이는 하나 이상의 치환기  $R^5$ 로 선택적으로 치환된다.
- [0154] 일 구현예에서,  $R^b$ 는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0155] 수소, 중수소,
- [0156]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$ ,
- [0157]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  및  $Ph$ 로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는  $Ph$ ,
- [0158]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  및  $Ph$ 로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0159]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  및  $Ph$ 로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0160]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$  및  $Ph$ 로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0161] 및  $N(Ph)_2$ .
- [0162] 일 구현예에서,  $R^b$ 는 각 경우에 서로 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0163] 중수소,
- [0164]  $Me$ ,  $^iPr$ ,  $^tBu$ ,  $CN$ ,  $CF_3$ ,

[0165] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

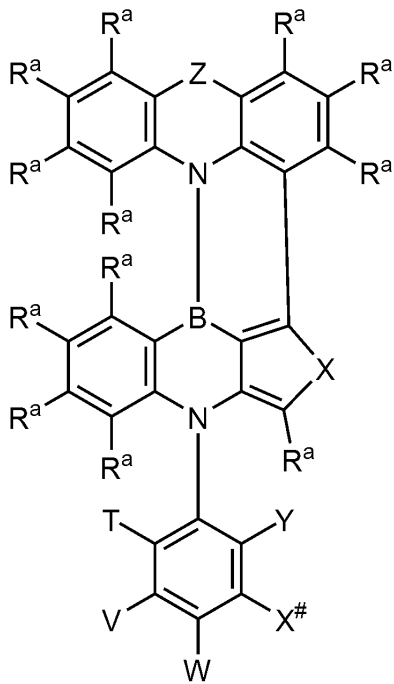
[0166] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

[0167] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0168] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0169] 및 N(Ph)<sub>2</sub>.

[0170] 일 구현에 있어서, 상기 유기분자는 화학식 III의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0171]

[0172] 화학식 III,

[0173] 여기서 T, V, W, X<sup>#</sup>, 및 Y 각각은 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0174] 수소,

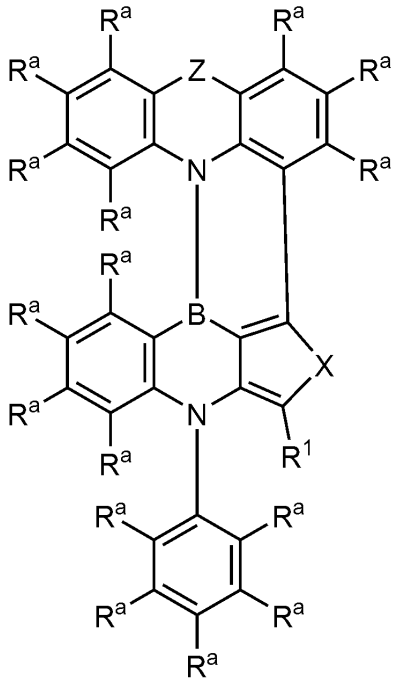
[0175] Me,

[0176] <sup>i</sup>Pr,

[0177] <sup>t</sup>Bu,

[0178] Me, <sup>i</sup>Pr, <sup>t</sup>Bu, CN, CF<sub>3</sub> 및 Ph로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.

[0179] 일 구현예에서, 상기 유기 분자는 화학식 IV의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0180]

[0181] 화학식 IV,

[0182] 여기서  $R^1$ 은 수소,  $C_1$ - $C_6$ -알킬, 및 하나 이상의  $C_1$ - $C_6$ -알킬 치환기로 선택적으로 치환되는  $C_6$ - $C_{12}$ -아릴로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0183] 일 구현예에서, 적어도 3개(즉, 3, 4, 5 또는 초과) 치환기  $R^a$ 는 수소가 아니다.

[0184] 일 구현예에서, 적어도 3개 치환기  $R^a$ 는  $C_1$ - $C_6$ -알킬, 및 하나 이상의  $C_1$ - $C_6$ -알킬 치환기로 선택적으로 치환되는  $C_6$ - $C_{12}$ -아릴로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0185] 바람직한 구현예에서, 적어도 4개의 치환기  $R^a$ 는 수소가 아니다.

[0186] 바람직한 구현예에서, 적어도 4개의 치환기  $R^a$ 는  $C_1$ - $C_6$ -알킬, 및 하나 이상의  $C_1$ - $C_6$ -알킬 치환기로 선택적으로 치환되는  $C_6$ - $C_{12}$ -아릴로 이루어진 군으로부터 선택된다.



- [0199] 본 발명의 단락에서, 용어 "카보시클"은 시클릭 코어 구조가 수소는 물론 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있는 탄소 원자만을 포함하는 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 용어 "카보시클릭"은 형용사로서 시클릭 코어 구조가 수소는 물론 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있는, 탄소 원자만을 포함하는 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해될 수 있다.
- [0200] 본 발명의 단락에서, 용어 "헤테로시클"은 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 임의의 시클릭 그룹으로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 용어 "헤테로시클릭"은 형용사로서 시클릭 코어 구조가 탄소 원자뿐만 아니라 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 시클릭 그룹을 지칭하는 것으로 이해된다. 헤테로원자는 특정 실시예에서 달리 언급되지 않는 한, 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 B, Si, N, O, S 및 Se, 더 바람직하게는 B, N, O 및 S, 가장 바람직하게는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 본 발명의 단락에서 헤테로시클에 포함된 모든 탄소 원자 또는 헤테로원자는 물론 수소 또는 본 발명의 특정 구현예에서 정의된 임의의 다른 치환기로 치환될 수 있다.
- [0201] 당업자는 임의의 시클릭 그룹(즉 임의의 카보시클 및 헤테로시클)이 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있음을 이해한다.
- [0202] 본 발명의 단락에서, 시클릭 그룹(즉, 고리, 고리들, 고리 시스템, 카보시클, 헤테로시클)을 언급할 때 용어 지방족은 시클릭 코어 구조(선택적으로 부착된 치환기는 포함하지 않음) 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템의 일부가 아닌 하나 이상의 고리 원자를 포함한다. 바람직하게는, 지방족 시클릭 그룹 내의 대부분의 고리 원자 및 보다 바람직하게는 모든 고리 원자는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템(예를 들어, 시클로hexan 또는 피페리딘에서)의 일부가 아니다. 여기서, 일반적으로 지방족 고리 또는 고리 시스템을 언급할 때 카보시클릭 그룹과 헤테로시클릭 그룹 사이에 구별이 이루어지지 않으며, 용어 "지방족"은 지방족 고리 그룹 내에서 헤테로원자가 포함되는지 여부를 나타내기 위해 카보시클 또는 헤테로시클을 설명하는 형용사로 사용될 수 있다.
- [0203] 숙련된 기술자에 의해 이해되는 바와 같이, "아릴" 및 "방향족"이라는 용어는 가장 넓은 의미에서 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이어티, 즉 모든 고리 원자가 방향족 고리 시스템의 일부인 고리 그룹, 바람직하게는 동일한 방향족 고리 시스템의 일부로 이해될 수 있다. 그러나, 본 출원 전체에 걸쳐 용어 "아릴" 및 "방향족"은 모든 방향족 고리 원자가 탄소 원자인 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이어티로 제한된다. 대조적으로, 본원에서 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로방향족"은 하나 이상의 방향족 탄소 고리 원자가 헤테로원자(즉, 탄소가 아님)로 대체된 임의의 모노-, 바이- 또는 폴리시클릭 방향족 모이어티를 지칭한다. 본 발명의 특정 구현예에서 달리 언급되지 않는 한, "헤테로아릴" 또는 "헤테로방향족" 내의 적어도 하나의 헤테로원자는 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로 이루어진 그룹으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 당업자는 형용사 "방향족" 및 "헤테로방향족"이 임의의 시클릭 그룹(즉, 임의의 고리 시스템)을 기술하는 데 사용될 수 있음을 이해한다. 즉, 방향족 시클릭 그룹(즉, 방향족 고리 시스템)은 아릴기이고 헤테로방향족 시클릭 그룹(즉, 헤테로방향족 고리 시스템)은 헤테로아릴기이다.
- [0204] 본 발명의 특정 구현예에서 다르게 나타내지 않는 한, 본원에서 아릴기는 바람직하게는 6 내지 60개의 방향족 고리 원자, 더 바람직하게는 6 내지 40개의 방향족 고리 원자, 더욱 더 바람직하게는 6 내지 18개의 방향족 고리 원자를 포함한다. 본 발명의 특정 구현예에서 달리 나타내지 않는 한, 본원의 헤테로아릴 그룹은 바람직하게는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 40개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 5 내지 20개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이 중 적어도 하나는 헤테로원자이고, 바람직하게는 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다. 하나 보다 많은 헤테로원자가 헤테로방향족 그룹을 포함하는 경우, 모든 헤테로원자는 바람직하게는 서로 독립적으로 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다.
- [0205] 본 발명의 단락에서, 방향족 및 헤테로방향족 그룹(예를 들어, 아릴 또는 헤테로아릴 치환기) 모두에 대해, 방향족 고리 탄소 원자의 수는 특정 치환기의 정의에서 아래 첨자 숫자로, 예를 들어 "C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴"의 형태로 주어질 수 있다. 이는 각각의 아릴 치환기가 6 내지 60개의 방향족 탄소 고리 원자를 포함함을 의미한다. 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 치환기인지 여부에 관계없이 모든 다른 종류의 치환기에서 허용되는 탄소 원자의 수를 나타내기 위해 동일한 아래 첨자 숫자가 또한 사용된다. 예를 들어 "C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬"이라는 표현은 1 내지 40개의 탄소 원자를 포함하는 알킬 치환기를 의미한다.
- [0206] 아릴기의 바람직한 예는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디하이드로피렌, 크라이센, 페릴렌, 플루

오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0207] 헤테로아릴기의 바람직한 예는 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜; 피롤, 인돌, 이소인돌, 카바졸, 인돌로카바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프토이미다졸, 페난트로이미다졸, 피리도이미다졸, 피라지노이미다졸, 퀴녹살리노이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프토옥사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 카르볼린, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,4,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0208] 본 출원 전반에 걸쳐 사용되는 용어 "아릴렌"은 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 부위를 보유함으로써 링커 구조로서 작용하는 2가 아릴 치환기를 지칭한다. 같은 단락에서 용어 "헤테로아릴렌"은 다른 분자 구조에 대한 2개의 결합 부위를 보유하여 링커 구조로 작용하는 2가 아릴 치환기를 의미한다.

[0209] 본 발명의 단락에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 언급할 때 "융합된(fused)"이라는 용어는 "융합된" 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 양쪽 고리 시스템의 일부인 적어도 하나의 결합을 공유함을 의미한다. 예를 들어, 나프탈렌(또는 치환기로 언급될 때 나프틸) 또는 벤조티오펜(또는 치환기로 언급될 때 벤조티오펜)은 본 발명의 단락에서 융합된 방향족 고리 시스템으로 간주되며, 여기에서 두 개의 벤젠 고리(나프탈렌의 경우) 또는 티오펜 및 벤젠(벤조티오펜의 경우)은 하나의 결합을 공유한다. 또한, 이러한 단락에서 결합을 공유하는 것은 각각의 결합을 구축하는 2개의 원자를 공유하는 것을 포함하는 것으로 이해될 수 있고, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 하나의 방향족 또는 헤테로방향족 시스템으로 이해될 수 있다. 또한, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템(예: 피렌에서)을 구성하는 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 의해 하나 보다 많은 결합이 공유될 수 있는 것으로 이해될 수 있다. 또한, 지방족 고리 시스템도 융합될 수 있으며, 이는 융합된 지방족 고리 시스템이 방향족이 아니라는 점을 제외하고는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는 것으로 이해될 수 있을 것이다. 또한, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 또한 지방족 고리 시스템과 융합(즉, 최소한 하나의 결합을 공유)될 수 있다.

[0210] 본 발명의 단락에서, 용어 "축합된(condensed)" 고리 시스템은 "융합된(fused)" 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는다.

[0211] 본 발명의 특정 구현예에서, 고리 또는 고리 시스템에 결합된 인접한 치환기는 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 융합되는 추가적인 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있다. 임의로 그렇게 형성된 융합된 고리 시스템은 인접한 치환기가 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템보다 더 클(더 많은 고리 원자를 포함함을 의미함) 것으로 이해된다. 이러한 경우(및 그러한 숫자가 제공되는 경우), 융합된 고리 시스템에 포함된 고리 원자의 "총" 양은 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리 시스템에 포함된 고리 원자의 합으로 이해되어야 한다. 인접한 치환기는 결합되고 추가적인 고리 시스템의 고리 원자는 인접한 치환기에 의해 형성되지만, 융합된 고리에 의해 공유되는 고리 원자는 한 번으로 계산되며 두 번은 계산되지 않는다. 예를 들어, 벤젠 고리는 나프탈렌 코어가 형성되도록 함께 다른 벤젠 고리를 형성하는 2개의 인접한 치환기를 가질 수 있다. 이 나프탈렌 코어는 2개의 탄소 원자가 2개의 벤젠 고리에 의해 공유되므로 10개의 고리 원자를 포함하므로 두 번이 아니라 한 번만 계산된다.

[0212] 일반적으로, 본 발명의 단락에서, 용어 "인접한 치환기" 또는 "인접한 그룹"는 동일하거나 이웃하는 원자에 결합된 치환기 또는 그룹을 지칭한다.

[0213] 본 발명의 단락에서, 용어 "알킬기"는 임의의 선형, 분지형 또는 환형 알킬 치환기로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 특히, 치환기로서 알킬기의 바람직한 예는 메틸(Me), 에틸(Et), n-프로필(<sup>n</sup>Pr), i-프로필(<sup>i</sup>Pr), 시클로프로필, n-부틸(<sup>n</sup>Bu), i-부틸(<sup>i</sup>Bu), s-부틸(<sup>s</sup>Bu), t-부틸(<sup>t</sup>Bu), 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오-헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로헥실, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로[2,2,2]옥틸, 2-비시클로[2,2,2]-옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-

1-일, 1,1-디메틸-n-텍-1-일, 1,1-디메틸-n-도텍-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라텍-1-일, 1, 1-디메틸-n-헥사텍-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타텍-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-텍-1-일, 1,1-디에틸-n-도텍-1-일, 1,1- 디에틸-n-테트라텍-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사텍-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타텍-1-일, 1-(n-프로필)-시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)-시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)-시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)-시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)-시클로헥스-1-일을 포함한다.

[0214] 예를 들어 s-부틸, s-펜틸 및 s-헥실에서 "s"는 "2차"를 의미하고; 즉, s-부틸, s-펜틸 및 s-헥실은 각각 sec-부틸, sec-펜틸 및 sec-헥실과 같다. 예를 들어 t-부틸, t-펜틸 및 t-헥실에서 "t"는 "3차"를 의미하고; 즉, t-부틸, t-펜틸 및 t-헥실은 각각 tert-부틸, tert-펜틸 및 tert-헥실과 동일하다.

[0215] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알케닐"은 선형, 분지형 및 환형 알케닐 치환기를 포함한다. 용어 알케닐기는 예를 들어 치환기인 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타다이에닐을 포함한다.

[0216] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알킬닐"은 선형, 분지형 및 환형 알킬닐 치환기를 포함한다. 용어 알킬닐기는 예를 들어 에틸닐, 프로피닐, 부틸닐, 펜틸닐, 헥시닐, 헵틸닐 또는 옥틸닐을 포함한다.

[0217] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알콕시"는 선형, 분지형 및 환형 알콕시 치환기를 포함한다. 용어 알콕시기는 예를 들어 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 및 2-메틸부톡시를 포함한다.

[0218] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 용어 "티오알콕시"는 선형, 분지형 및 환형 티오알콕시 치환기를 포함하며, 여기서 대응되는 알콕시기의 산소 원자 O가 S로 대체된다.

[0219] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 용어 "할로젠" (또는 화학 명명법에서 치환기를 나타낼 때 "할로")는 가장 넓은 의미에서 원소 주기율표에서 다음의 7번째 주요 그룹(즉, 17족)의 원소의 임의의 원자, 바람직하게는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드인 것으로서 이해될 수 있다.

[0220] 분자 단편이 치환기이거나 다른 부분에 달리 부착된 것으로 기술될 때 그 이름은 그것이 단편(예: 나프틸, 디벤조푸틸)인 것처럼 쓰이거나 온전한 그룹인 것처럼(예: 나프탈렌, 디벤조푸란) 쓰일 수 있다. 본원에 사용된 바와 같이, 치환기 또는 부착된 단편을 지정하는 이러한 상이한 방식은 동등한 것으로 간주된다.

[0221] 또한, 본원에서 "C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아틸" 또는 "C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬"과 같은 치환기가 그 치환기 내의 결합 부위를 나타내는 이름 없이 언급될 때마다, 이는 각각의 치환기가 임의의 방법으로 결합될 수 있음을 의미한다. 원자. 예를 들어, "C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아틸"-치환기는 임의의 6 내지 60개의 방향족 탄소 원자를 통해 결합될 수 있고 "C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-알킬"-치환기는 임의의 1 내지 40개의 지방족 탄소 원자를 통해 결합될 수 있다. 한편, "2-시아노페닐"-치환기는 정확한 화학 명명법을 허용하도록 그의 CN-기가 결합 부위에 인접하는 방식으로만 결합될 수 있다.

[0222] 본 발명의 단락에서, "부틸", "비페닐" 또는 "터페닐"과 같은 치환기가 추가 상세 없이 언급될 때마다, 이는 각각의 치환기의 임의의 이성질체가 특정 치환기로 허용될 수 있음을 의미한다. 이와 관련하여, 예를 들어 치환기로서의 용어 "부틸"은 치환기로서 n-부틸, s-부틸, t-부틸 및 이소-부틸을 포함한다. 마찬가지로, 치환기로서 용어 "비페닐"은 오르쏘-비페닐, 메타-비페닐, 또는 파라-비페닐을 포함하며, 여기서 오르쏘, 메타 및 파라는 비페닐 치환기를 갖는 각각의 화학 모이어티에 대한 비페닐 치환기의 결합 부위에 관하여 정의된다. 유사하게, 용어 "터페닐"은 치환기로서 3-오르쏘-터페닐, 4-오르쏘-터페닐, 4-메타-터페닐, 5-메타-터페닐, 2-파라-터페닐 또는 3-파라-터페닐을 포함하며, 여기서, 공지된 바와 같이 숙련된 기술자에게 오르쏘, 메타 및 파라는 서로에 대한 터페닐 그룹 내의 두 Ph-부분의 위치를 나타내고 "2-", "3-", "4-" 및 "5-"는 터페닐 치환기를 갖는 각각의 화학 모이어티에 대한 터페닐 치환기의 결합 위치를 나타낸다.

[0223] 상기 정의된 모든 그룹 및 실제로 모든 화학 모이어티는 이들이 시클릭 또는 비(non)시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족인지 여부에 관계없이 본원에 기재된 특정 구현예에 따라 추가로 치환될 수 있는 것으로 이해된다.

[0224] 본원에 언급된 임의의 구조에 포함된 모든 수소 원자(H)는 각각의 경우에 서로 독립적일 수 있으며, 이를 구체적으로 나타내지 않고 중수소(D)로 대체될 수 있다. 수소를 중수소로 대체하는 것은 일반적인 관행이며 당업자에게는 명백하다. 따라서 이를 달성할 수 있는 수많은 알려진 방법과 이를 설명하는 여러 리뷰 논문이 있다.

[0225] 실험 또는 계산 데이터를 비교하는 경우 동일한 방법론으로 값을 결정해야 한다. 예를 들어, 특정 방법에 의해

실험적  $\Delta\text{EST}$ 가 0.4eV 미만으로 결정되면 동일한 조건을 포함하는 동일한 특정 방법을 사용하는 경우에만 비교가 유효하다. 구체적인 예를 들자면, 상이한 화합물의 광발광 양자 수율(PLQY)의 비교는 PLQY 값의 결정이 동일한 반응 조건(예: 실온, 10% PMMA 필름에서의 측정)에서 동일한 프로토콜에 의해 수행된 경우에만 유효하다. 유사하게, 계산된 에너지 값은 동일한 계산 방법(동일한 기능 및 동일한 기준 설정)으로 결정되어야 한다.

[0226] 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자

[0227] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자에 관한 것이다.

[0228] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 상기 광전자 소자는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0229] · 유기 발광다이오드(OLED),

[0230] · 발광 전기화학 전지,

[0231] · OLED 센서, 특히 주변과 완전히 차단되지 않은 가스 및 증기 센서,

[0232] · 유기 다이오드,

[0233] · 유기 태양 전지,

[0234] · 유기 트랜지스터,

[0235] · 유기 전계 효과 트랜지스터,

[0236] · 유기 레이저, 및

[0237] · 하향 변환 소자(down-conversion element).

[0238] 발광 전기화학 전지는 캐소드, 애노드 및 본 발명에 따른 유기 분자를 포함할 수 있는 활성층의 3개 층으로 이루어진다.

[0239] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC), 유기 레이저 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0240] 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED)이다.

[0241] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 하기 층 구조를 나타낼 수 있는 OLED일 수 있다:

[0242] 1. 기판

[0243] 2. 애노드층 A

[0244] 3. 정공 주입층, HIL

[0245] 4. 정공 수송층, HTL

[0246] 5. 전자 저지층, EBL

[0247] 6. 발광층, EML

[0248] 7. 정공 저지층, HBL

[0249] 8. 전자 수송층, ETL

[0250] 9. 전자주입층, EIL

[0251] 10. 캐소드층 C,

[0252] 여기서 OLED는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하고, 여기서 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각 레이어 유형의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있다.

[0253] 또한, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 수분, 증기 및/또는 가스를 포함하는 환경에서 유해한 증에 대한 손상을 일으키는 노출로부터 소자를 보호하는 하나 이상의 보호층

(protective layer)을 선택적으로 포함할 수 있다.

- [0254] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 상기 광전자 소자는 다음의 (역전된) 층 구조를 갖는 OLED이다:
- [0255] 1. 기관
- [0256] 2. 캐소드층 C
- [0257] 3. 전자주입층, EIL
- [0258] 4. 전자 수송층, ETL
- [0259] 5. 정공 저지층, HBL
- [0260] 6. 발광층, EML
- [0261] 7. 전자 저지층, EBL
- [0262] 8. 정공 수송층, HTL
- [0263] 9. 정공 주입층, HIL
- [0264] 10. 애노드층 A
- [0265] 여기서 OLED는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하고, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고 OLED는 위에서 정의된 각 층 유형의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0266] 본 발명에 따른 유기 분자(위에서 나타낸 구현예에 따름)는 정확한 구조 및 치환에 따라 다양한 층에 사용될 수 있다. 용도의 경우, 광전자 소자, 특히 OLED에서 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 분율은 0.1 내지 99 중량%(중량 퍼센트), 보다 특히 1% 내지 80중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0267] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 적층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다. 이 구조에서는 OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리, 개별 소자가 서로 위에 쌓인다. 혼합 광은 적층 구조를 나타내는 OLED에서 생성될 수 있으며, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 있으며, 특히 백색광이 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 선택적으로 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있으며, 이는 일반적으로 2개의 OLED 서브유닛 사이에 위치하고, 일반적으로 n-도핑 및 p-도핑 층으로 구성되며, 하나의 CGL의 n-도핑 층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한다.
- [0268] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이에 2개 이상의 발광층을 포함하는 OLED이다. 특히, 이러한 소위 탠덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 방출하고, 하나의 발광층은 녹색광을 방출하고, 하나의 발광층은 청색광을 방출하고, 선택적으로 전하 생성층, 개별 발광층 사이의 저지층 또는 수송층과 같은 추가적인 층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 탠덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층이 병합될 수 있다.
- [0269] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 실질적으로 백색 광전자 소자일 수 있으며, 이는 소자가 백색광을 방출한다는 것을 의미한다. 예를 들어, 이러한 백색 발광 광전자 소자는 적어도 하나의 (심)청색 에미터 분자 및 녹색 및/또는 적색 광을 방출하는 하나 이상의 에미터 분자를 포함할 수 있다. 그런 다음 본문 뒷부분(아래 참조)에 설명된 바와 같이, 두 개 이상의 분자 사이에 선택적으로 에너지 전달이 있을 수 있다.
- [0270] 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자의 경우, 본 발명에 따른 적어도 하나의 유기 분자는 광전자 소자의 발광층(EML), 가장 바람직하게는 OLED의 EML에 포함될 수 있다. 그러나, 본 발명에 따른 유기 분자는 또한 예를 들어 전자 수송층(ETL) 및/또는 전자 저지층(EBL) 또는 엑시톤 저지층 및/또는 정공 수송층(HTL) 및/또는 정공 저지층(HBL)에서 사용될 수 있다. 사용되는 경우, 광전자 소자, 특히 OLED에서 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 분율은 0.1 내지 99 중량%, 더 특히 0.5% 내지 80 중량%, 특히 0.5% 내지 10 중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.

[0271] 광전자 소자, 특히 OLED의 개별 층에 적합한 물질의 선택 기준은 당업자의 상식이다. 최신 기술은 개별 층에 사용되는 많은 물질을 보여주고 또한 어떤 물질이 서로 함께 사용하기에 적합한지 설명한다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 물질이 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에도 사용될 수 있음이 이해될 수 있다. 이하에서, 개별 층에 대한 물질의 바람직한 예가 주어질 것이다. 전술한 바와 같이, 이것은 아래에 열거된 모든 유형의 층이 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자에 존재해야 함을 의미하지 않는다는 것을 이해해야 한다. 추가로, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 2개 이상의 발광층(EML)과 같이 다음에 나열된 각각의 층 중 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있음이 이해될 수 있다. 동일한 유형의 2개 이상의 층(예를 들어, 2개 이상의 EML 또는 2개 이상의 HTL)이 반드시 동일한 물질 또는 심지어 동일한 비율의 동일한 물질을 포함하지 않는다는 것도 이해될 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 다음에 열거된 모든 층 유형을 포함할 필요는 없으며, 여기에서 애노드 층, 캐소드 층 및 발광층은 일반적으로 모든 경우에 존재한다.

[0272] 상기 기판은 임의의 물질 또는 물질들의 조성물에 의해 형성될 수 있다. 가장 빈번하게는 유리 슬라이드가 기판으로서 사용된다. 대안적으로, 얇은 금속 층(예를 들어, 구리, 금, 은 또는 알루미늄 필름) 또는 플라스틱 필름이나 슬라이드가 사용될 수 있다. 이것은 더 높은 수준의 유연성(flexibility)을 허용할 수 있다. 애노드 층 A는 대부분 (실질적으로) 투명한 필름을 얻게 할 수 있는 물질로 이루어진다. OLED로부터의 발광을 허용하기 위해 두 전극 중 적어도 하나는 (실질적으로) 투명해야 하므로, 애노드 층 A 또는 캐소드 층 C 중 하나는 투명하다.

[0273] 바람직하게는, 애노드 층 A는 투명 전도성 산화물(TCOs)을 다량 포함하거나 심지어 이로 이루어진다. 이러한 애노드 층 A는 예를 들어 인듐 주석 산화물, 알루미늄 아연 산화물, 불소 도핑된 주석 산화물, 인듐 아연 산화물, PbO, SnO, 지르코늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 바나듐 산화물, 텅스텐 산화물, 흑연, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 도핑된 GaAs, 도핑된 폴리아닐린, 도핑된 폴리피롤 및/또는 도핑된 폴리티오펜을 포함할 수 있다.

[0274] 바람직하게는, 애노드 층 A는 (실질적으로) 인듐 주석 산화물(ITO)(예를 들어,  $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$ )로 구성될 수 있다. 투명 전도성 산화물(TCO)로 인해 야기되는 애노드층(A)의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용함으로써 상쇄될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사(quasi) 전하 운반체(즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 운반체의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입 층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌 디옥시 티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설포네이트(PSS),  $\text{MoO}_2$ ,  $\text{V}_2\text{O}_5$ , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT 및 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층(A)에서 정공 수송층(HTL)으로 금속이 확산되는 것을 방지할 수 있다. 예를 들면, HIL은 PEDOT:PSS(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜:폴리스티렌 설포네이트), PEDOT(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜), mMTDATA(4,4',4''-트리스[페닐(m-톨릴)아미노]트리페닐아민), 스피로-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(1-나프탈레닐)-N,N'-비스-페닐-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민), NPNPB(N,N'-디페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디페닐-아미노)페닐]벤지딘), MeO-TPD(N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘), HAT-CN(1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌-헥사카보니트릴) 및/또는 스피로-NPD(N,N'-디페닐-N,N'-비스-(1-나프틸)-9,9'-스피로비플루오렌-2,7-디아민)으로 구성될 수 있다.

[0275] 애노드 층 A 또는 정공 주입 층(HIL)에 인접하여 일반적으로 정공 수송 층(HTL)이 위치한다. 여기에 임의의 정공 수송 화합물이 사용될 수 있다. 예를 들어, 트리아릴아민 및/또는 카바졸과 같은 전자가 풍부한 헤테로방향족 화합물이 정공 수송 화합물로서 사용될 수 있다. HTL은 애노드층(A)과 발광층(EML) 사이의 에너지 장벽을 감소시킬 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 또한 전자 저지층(EBL)일 수 있다. 바람직하게는, 정공 수송 화합물은 비교적 높은 에너지 준위의 삼중항 상태 T1을 갖는다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 TCTA(트리스(4-카바졸일-9-일페닐)아민), poly-TPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)),  $\alpha$ -NPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), TAPC(4,4'-시클로헥실리렌-비스[N,N-비스(4-메틸페닐)벤젠아민]), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), Spiro-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(1-나프탈레닐)-N,N'-비스-페닐-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민), NPNPB(N,N'-디페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디페닐-아미노)페닐]벤지딘), MeO-TPD(N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘), HAT-CN(1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌-헥사카보니트릴) 및/또는 TrisPcz(9,9'-디페닐-6-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H,9'H-3,3'-비카바졸)와 같은 별 모양의 헤테로환 화합물을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공-수송 매트릭스 내의 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑된 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이

금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄(F<sub>4</sub>-TCNQ), 구리-펜타플루오로벤조에이트(Cu(I)pFBz) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

[0276] EBL은 예를 들어 mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), TCTA(트리스(4-카르바조일-9-일페닐)아민), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), tris-Pcz(9-페닐-3,6-비스(9-페닐)-9H카르바졸-3-일)-9H-카르바졸), CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), 및/또는 DCB(N,N'-디카바졸일-1,4-디메틸벤젠)를 포함할 수 있다.

[0277] 정공 수송층(HTL) 또는 (존재하는 경우) 전자 저지층(EBL)에 인접하여, 전형적으로 발광층(EML)이 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 발광 분자(즉, 에미터 물질)를 포함한다. 일반적으로 EML은 하나 이상의 호스트 물질(매트릭스 물질이라고도 함)을 추가로 포함한다. 예시적으로, 호스트 물질은 CBP(4,4'-비스-(N-카바졸일)-비페닐), mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), DPEPO(비스[2-(디페닐포스피노)페닐]에테르 옥사이드), 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조티오펜)페닐]-9H-카바졸, T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로 비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 중에서 선택된다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 호스트 물질은 일반적으로 호스트 물질(들) 내에 매립된 적어도 하나의 발광 분자의 제1(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 최저) 여기 단일항 상태(S1) 에너지 준위 보다 더 높은 제1(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 및 제1(즉, 최저) 여기 단일항 상태(S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택되어야 한다.

[0278] 전술한 바와 같이, 본 발명의 단락에서 광전자 소자의 적어도 하나의 EML은 본 발명에 따른 분자를 적어도 하나 포함하는 것이 바람직하다. 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자의 EML의 바람직한 조성은 본문 뒷부분(아래 참조)에서 더 자세히 설명된다.

[0279] 발광층(EML)과 인접하여 전자 수송층(ETL)이 위치할 수 있다. 여기에 임의의 전자 수송체가 사용될 수 있다. 예시적으로, 벤즈이미다졸, 피리딘, 트리아졸, 트리아진, 옥사디아졸(예를 들어, 1,3,4-옥사디아졸), 포스핀옥사이드 및 설펜과 같은 전자가 부족한 화합물이 사용될 수 있다. 전자 수송체는 또한 1,3,5-트리(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐(TPBi)과 같은 별 모양의 헤테로환 화합물일 수 있다. ETL은 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq<sub>3</sub>(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴 페닐-포스핀옥사이드), BPyTP2(2,7-디(2,2'-비피리딘-5-일)트리페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), BmPyPhB(1,3-비스[3,5-디(피리딘-3-일)페닐]벤젠) 및/또는 BTB(4,4'-비스-[2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐)]-1,1'-비페닐)를 포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq((8-히드록시퀴놀리나토)리튬)와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)은 또한 정공을 차단할 수 있거나 일반적으로 EML과 ETL 사이에 정공 저지층(HBL)이 도입된다.

[0280] 정공 저지층(HBL)은 예를 들어 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 = 바토쿠프로인), 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9,9'-(5-(6-([1,1'-비페닐]-3-일)-2-페닐피리미딘-4-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸), BA1q(비스(8-히드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐)페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq<sub>3</sub>(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐포스피록사이드), T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로 비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TCB/TCP(1,3,5-트리스(N-카바졸일)벤졸/1,3,5-트리스(카바졸)-9-일)벤젠)을 포함할 수 있다.

[0281] 전자 수송층(ETL)에 인접하여 캐소드층 C가 위치할 수 있다. 캐소드층 C는 예를 들어 금속(예를 들어, Al, Au, Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이들로 이루어질 수 있다. 실용적인 이유로 캐소드층은 또한 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (실질적으로) 불투명한 금속으로 구성될 수 있다. 대안적으로 또는 추가적으로, 캐소드층 C는 또한 흑연 및/또는 탄소 나노튜브(CNT)를 포함할 수 있다. 대안적으로, 캐소드층 C는 또한 나노스케일의 은 와이어를 포함하거나 이로 구성될 수 있다.

[0282] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED는 선택적으로 전자 수송층(ETL)과 캐소드층(C) 사이에 보호층(전자 주입층(EIL)으로 지칭될 수 있음)을 추가로 포함할 수 있다. 이 층은 불화리튬, 불화세슘, 은, Liq(8-히드록시퀴놀리나토 리튬), Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.

- [0283] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 저지층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 물질을 포함할 수 있다.
- [0284] 본 명세서에 사용된 바와 같이, 특정 문단에서 보다 구체적으로 정의되지 않은 경우, 방출 및/또는 흡수된 광의 색상 지정은 다음과 같다:
- [0285] 보라색: >380-420 nm의 파장 범위;
- [0286] 심청색: >420-480 nm의 파장 범위;
- [0287] 하늘색: >480-500 nm의 파장 범위;
- [0288] 녹색: >500-560 nm의 파장 범위;
- [0289] 황색: >560-580 nm의 파장 범위;
- [0290] 주황색: >580-620 nm의 파장 범위;
- [0291] 적색: >620-800 nm의 파장 범위.
- [0292] 에미터 분자(즉, 에미터 물질)와 관련하여 이러한 색상은 주 발광 피크의 최대 발광을 나타낸다. 따라서 예를 들어 심청색 에미터는 >420-480nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 하늘색 에미터는 >480-500nm 범위에서 최대 발광을 가지며, 녹색 에미터는 >500-560nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 적색 에미터는 >620-800nm 범위에서 최대 발광을 갖는다.
- [0293] 심청색 에미터는 바람직하게는 475 nm 미만, 더 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만의 최대 발광을 가질 수 있다. 그것은 일반적으로 420 nm 초과, 바람직하게는 430 nm 초과, 보다 바람직하게는 440 nm 초과 또는 심지어 450 nm 초과일 것이다. 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는, 폴리(메틸 메타크릴레이트)(PMMA), mCBP 내에 1-5중량%, 바람직하게는 2 중량% 또는 대안적으로 바람직하게는 DCM 또는 톨루엔의 유기 용매 내의 0.001 mg/mL의 본 발명에 따른 유기 분자를 갖는 실온(즉, (대략) 20 °C)에서 측정시, 420 내지 500 nm, 보다 바람직하게는 430 내지 490 nm, 훨씬 더 바람직하게는 440 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 내지 470 nm의 최대 발광을 나타낸다.
- [0294] 또 다른 구현예는 본 발명에 따른 적어도 하나의 유기 분자를 포함하고 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에서 정의된 원 청색(CIE<sub>x</sub> = 0.131 및 CIE<sub>y</sub> = 0.046)의 CIE<sub>x</sub>(=0.131) 및 CIE<sub>y</sub>(=0.046) 색좌표에 가까운 CIE<sub>x</sub> 및 CIE<sub>y</sub> 색좌표의 빛을 발광하고, 따라서 초고해상도(UHD) 디스플레이(예: UHD-TV)에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 더 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 보다 바람직하게는 0.08 내지 0.18 또는 심지어 0.10 내지 0.15의 CIE<sub>x</sub> 색좌표 및/또는 0.00 내지 0.45, 바람직하게는 0.01 내지 0.30, 보다 바람직하게는 0.02 내지 0.20 또는 훨씬 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 또는 심지어 0.04 내지 0.10의 CIE<sub>y</sub> 색좌표를 나타내는 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 OLED에 관한 것이다.
- [0295] 또 다른 구현예는 1000cd/m<sup>2</sup>에서 8% 초과, 더욱 바람직하게는 10% 초과, 더욱 바람직하게는 13% 초과, 더욱 더 바람직하게는 15% 초과 또는 심지어 20% 초과외의 외부 양자 효율을 나타내고/나타내거나 420 nm 내지 500 nm, 바람직하게는 430 nm 내지 490 nm, 훨씬 더욱 바람직하게는 440 nm 내지 480 nm, 가장 바람직하게는 450 nm 내지 470 nm의 최대 발광을 나타내고/나타내거나 500cd/m<sup>2</sup>에서 100시간 초과, 바람직하게는 200시간 초과, 더욱 바람직하게는 400시간 초과, 훨씬 더욱 바람직하게는 750시간 초과 또는 심지어 1000시간 초과외의 LT80 값을 나타내는 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 OLED에 관한 것이다.
- [0296] 녹색 에미터 물질은 바람직하게는 500 내지 560 nm, 보다 바람직하게는 510 내지 550 nm, 보다 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 가질 수 있다.
- [0297] 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 분명한 색점에서 발광하는 OLED에 관한 것이다. 바람직하게는, OLED는 좁은 발광 대역(작은 반치폭(FWHM))으로 빛을 방출한다. 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 OLED는 0.30eV 미만, 바람직하게는 0.25eV 미만, 더 바람직하게는 0.20eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.1eV 미만, 또는 심지어 0.17 eV 미만의 주 발광 피크의 FWHM(full width at half maximum)을 갖는 빛을 발광한다.
- [0298] 본 발명에 따르면, 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 디스플레이, 조

명 응용 분야의 광원 및 의료 및/또는 미용 응용 분야(예: 광 요법)의 광원으로 사용될 수 있다.

- [0299] 본 발명에 따른 유기 분자와 추가 물질의 조합
- [0300] 광전자 소자(여기서는 바람직하게는 OLED) 내의 임의의 층, 특히 발광층(EML)이 단일 물질 또는 다른 물질들의 조합으로 이루어질 수 있다는 것은 당업자에게는 일반 지식의 일부를 형성한다.
- [0301] 예를 들어, 당업자는 EML이 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광할 수 있는 단일 물질로 구성될 수 있음을 이해한다. 그러나, 숙련된 기술자는 또한 광전자 소자(여기서는 바람직하게는 OLED)의 EML에서 상이한 물질들, 특히 하나 이상의 호스트 물질(들)(즉, 매트릭스 물질(들)); 여기서 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 포함될 때 호스트 물질(들)  $H^B$ 로 지칭됨) 및 소자에 전압 및 전류를 인가할 때 그 중 적어도 하나가 발광하는 (즉, 에미터 물질) 하나 이상의 도펀트 물질을 결합하는 것이 유리할 수 있음을 이해한다.
- [0302] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 EML 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나 보다 많은 층에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.
- [0303] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나 보다 많은 층에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.
- [0304] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함한다.
- [0305] 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 일 구현예에서, 본 발명에 따른 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 유기 분자는 발광층 EML에서 에미터 물질로서 사용된다. 즉, 전압(및 전류)이 해당 소자에 인가될 때 발광한다.
- [0306] 당업자에게 공지된 바와 같이, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED)에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트)로부터의 발광은 여기된 단일항 상태(전형적으로 최저 여기 단일항 상태 S1)로부터의 형광 및 여기된 삼중항 상태(전형적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1)로부터의 인광을 포함한다.
- [0307] 형광 에미터 F는 전자 여기(예를 들어 광전자 소자에서) 시 실온(즉, (대략) 20°C)에서 발광할 수 있으며, 발광 여기 상태는 단일항 상태이다. 형광 에미터는 일반적으로 초기 전자 여기(예: 전자 정공 재결합에 의한)가 에미터의 여기 단일항 상태를 제공할 때 나노초의 시간 척도에서 즉시(즉, 직접적인) 형광을 나타낸다.
- [0308] 본 발명의 단락에서, 지연 형광 물질은 역 시스템간 교차(RISC; 즉, 업 시스템간 교차 또는 역전 시스템간 교차)에 의해 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1에서)로부터 여기 단일항 상태(전형적으로 최저 여기 단일항 상태 S1)에 도달할 수 있는 물질이고, 또한 그렇게 도달한 여기 단일항 상태(일반적으로 S1)에서 전자 기저 상태로 돌아올 때 발광할 수 있다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1)에서 발광 여기 단일항 상태(일반적으로 S1)로의 RISC 후에 관찰된 형광 방출은 직접적인(즉, 즉시) 형광이 일어나는(일반적으로 나노초 범위) 시간 척도 보다 느린 시간 척도(일반적으로 마이크로초 범위)에서 발생하고, 따라서 지연 형광(DF)이라고 한다. 여기 삼중항 상태(일반적으로 T1에서)에서 여기 단일항 상태(일반적으로 S1까지)로의 RISC가 열 활성화를 통해 발생하고 이렇게 채워진 여기 단일항 상태가 발광하는 경우(지연형광 발광), 그 과정을 열 활성화 지연 형광(TADF)과 같이 표현한다. 따라서 TADF 물질은 앞서 설명한 바와 같이 TADF(Thermally Activated Delayed Fluorescent)를 발광할 수 있는 물질이다. 형광 에미터 F의 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위  $E(S1^F)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위  $E(T1^F)$  사이의 에너지 차이  $\Delta E_{ST}$ 가 감소하면, RISC에 의한 최저 여기 단일항 상태에서부터 최저 여기 삼중항 상태의 전환은 고효율로 일어날 수 있음이 당업자에게 알려져 있다. 따라서, TADF 물질이 일반적으로 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 가질 것(아래 참조)이라는 것은 당업자의 일반적인 지식의 일부를 형성한다. 당업자에게 공지된 바와 같이, TADF 물질은 단순히 위에 제시된 바와 같이 그 자체가 여기 삼중항 상태에서 여기 단일항 상태로 RISC를 하고, 후속하여 TADF를 방출할 수 있는 물질이 아닐 수 있다. TADF 물질은 사실상 두 종류의 물질, 바람직하게는 두 호스트 물질  $H^B$ , 더 바람직하게는 p-호스트 물질  $H^P$  및 n-호스트 물질  $H^N$ 로부터 형성되는 엑시플렉스일 수 있음이 당업자에게 알려져 있다 (아래 참조).
- [0309] (열적으로 활성화된) 지연 형광의 발생은 예를 들어 시간 분해(즉, 과도) 광발광(PL) 측정으로부터 얻은 감쇠

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

[0310] TADF 물질은 앞서 언급한 전체 감쇠 역학과 관련하여 다음 두 가지 조건을 충족하는 것이 바람직하다.

[0311] (i) 감쇠 역학은 나노초(ns) 범위와 마이크로초(μs) 범위의 두 가지 시간 영역을 나타냄; 및

[0312] (ii) 두 가지 시간 영역에서 발광 스펙트럼의 모양이 일치함.

[0313] 여기서, 첫 번째 감쇠 영역에서 방출된 광의 부분은 즉시 형광으로 간주되고, 두 번째 감쇠 영역에서 방출된 부분은 지연 형광으로 간주된다.

[0314] 지연 형광과 즉시 형광의 비율은 소위  $n$ -값의 형태로 표현될 수 있으며, 이는 다음 방정식에 의하여 각각의 광 발광 감쇠를 시간에 따라 적분하여 계산할 수 있다.

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

[0315]

[0316] 본 발명의 단락에서, TADF 물질은 바람직하게는 0.05보다 크거나( $n > 0.05$ ), 보다 바람직하게는 0.1보다 크거나( $n > 0.1$ ), 훨씬 더 바람직하게는 0.15 보다 크거나( $n > 0.15$ ), 특히 바람직하게는 0.2보다 크거나( $n > 0.20$ ), 또는 심지어 0.25보다 큰( $n > 0.25$ )  $n$ -값(즉시 형광에 대한 지연 형광의 비율)을 나타낸다.

[0317] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 0.05보다 큰( $n > 0.05$ )  $n$ -값(즉시 형광에 대한 지연 형광의 비율)을 나타낸다.

[0318] 본 발명의 단락에서, TADF 물질  $E^B$ 는 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위  $E(S1^E)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위  $E(T1^E)$  사이의 에너지 차이에 해당하는  $\Delta E_{ST}$  값을 나타내는 것을 특징으로 하고, 0.4eV 미만, 바람직하게는 0.3eV 미만, 더 바람직하게는 0.2eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.1eV 미만, 또는 심지어 0.05eV 미만의 값을 나타낸다. TADF 물질  $E^B$ 의  $\Delta E_{ST}$  값을 결정하는 방법은 본문 뒷부분에 설명되어 있다.

[0319] 일반적으로 TADF 물질 설계를 위한 한 가지 접근 방식은 HOMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 도너 부분과 LUMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 억셉터 부분을 본 명세서에서 링커 그룹으로 지칭되는, 동일한 브리지에 공유 결합하는 것이다. TADF 물질  $E^B$ 는 또한 예를 들어 동일한 억셉터 모이어티에 결합된 2개 또는 3개의 링커 그룹을 포함할 수 있고 추가적인 도너 및 억셉터 모이어티가 이들 2개 또는 3개의 링커 그룹 각각에 결합될 수 있다.

[0320] 하나 이상의 도너 모이어티 및 하나 이상의 억셉터 모이어티는 또한 서로 직접 결합될 수 있다(링커 그룹의 존재 없이).

[0321] 전형적인 도너 모이어티는 디페닐 아민, 인돌, 카바졸, 아크리딘, 페녹사진 및 관련 구조의 유도체이다. 특히, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 예를 들어 인돌로카바졸에 도달하기 위해 전술한 도너 전구체에 융합될 수 있다.

[0322] 벤젠-, 비페닐- 및 어느 정도까지 또한 터페닐- 유도체가 일반적인 링커 그룹이다.

[0323] 니트릴 그룹은 TADF 물질에서 매우 일반적인 억셉터 부분이며 알려진 예는 다음과 같다.

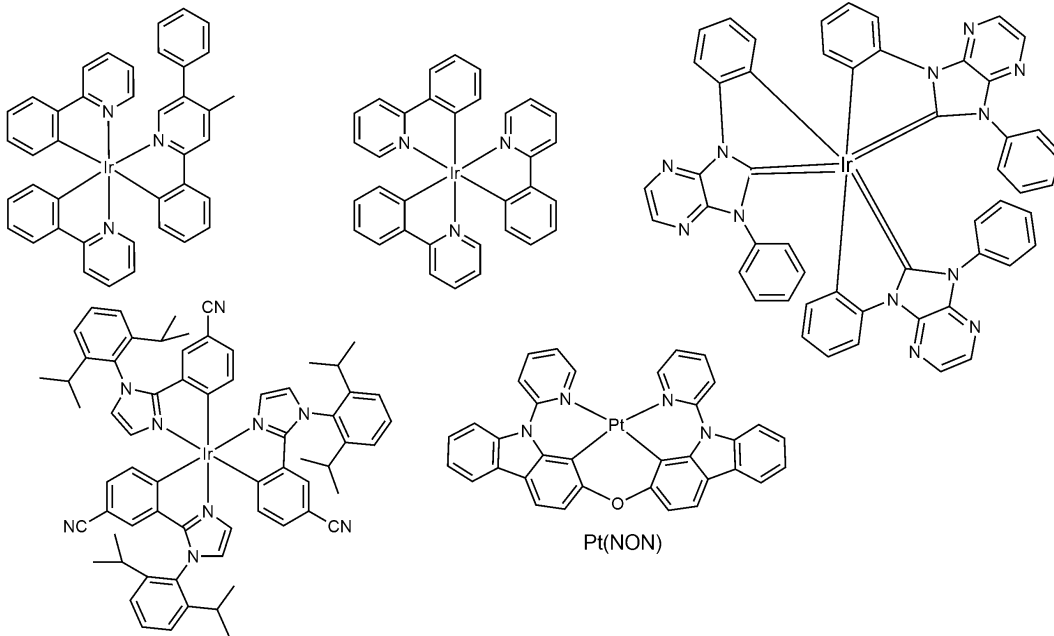
[0324] (i) 카바졸일 디시아노벤젠 화합물

[0325] 2CzPN(4,5-디(9H-카바졸-9-일)프탈로니트릴), DCzIPN(4,6-디(9H-카바졸-9-일)이소프탈로니트릴), 4CzPN(3,4,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)프탈로니트릴), 4CzIPN(2,4,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)이소프탈로니트릴), 4CzTPN(2,4,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)테레프탈로니트릴) 및 이의 유도체;

- [0326] (ii) 카바졸일 시아노피리딘 화합물
- [0327] 4CzCNPY(2,3,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)-4-시아노피리딘) 및 이의 유도체;
- [0328] (iii) 카바졸일 시아노비페닐 화합물
- [0329] CNBPCz(4,4',5,5'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-2,2'-디카르보니트릴), CzBPCN(4,4',6,6'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-3,3'-디카르보니트릴), DDCzIPN(3,3',5,5'-테트라(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-2,2',6,6'-테트라카르보니트릴) 및 그 유도체;
- [0330] 이들 물질에서 하나 이상의 니트릴 그룹은 액셉터 모이어티로서 불소(F) 또는 트리플루오로메틸(CF<sub>3</sub>)로 대체될 수 있다.
- [0331] 트리아진-, 피리미딘-, 트리아졸-, 옥사디아졸-, 티아디아졸-, 헵타진-, 1,4-디아자트리페닐렌-, 벤조티아졸-, 벤즈옥사졸-, 퀴놀살린- 및 디아자플루오렌 유도체와 같은 질소-헤테로시클도 TADF 분자 구성에 사용되는 잘 알려진 액셉터 모이어티이다. 예를 들어 트리아진 액셉터를 포함하는 TADF 분자의 공지된 예는 PIC-TRZ(7,7'-(6-([1,1'-비페닐]-4-일)-1,3,5-트리아진-2,4-디일)비스(5-페닐-5,7-디하이드로인돌로[2,3-b]카바졸)), mBFCzTrz(5-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸), 및 DCzTrz (9,9'-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸))가 있다.
- [0332] TADF 물질의 또 다른 그룹은 벤조페논과 같은 디아릴 케톤 또는 4-벤조일피리딘, 9,10-안트라퀴논, 9H-크산텐-9-온 및 이들의 유도체와 같은 (헤테로아릴)아릴 케톤을 액셉터 모이어티로서 포함하고, 액셉터 모이어티에는 도너 모이어티(보통 카바졸일 치환기)가 결합되어 있다. 이러한 TADF 분자의 예는 각각 BPBCz(비스(4-(9'-페닐-9H,9'H-[3,3'-비카바졸]-9-일)페닐)메탄온), mDCBP((3,5-디(9H-카바졸-9-일)페닐)(피리딘-4-일)메탄온), AQ-DTBu-Cz(2,6-비스(4-(3,6-디-tert-부틸-9H-카바졸-9-일)페닐)안트라센-9,10-디온) 및 MCz-XT(3-(1,3,6,8-테트라메틸-9H-카바졸-9-일)-9H-크산텐-9-온)가 있다.
- [0333] 설폭사이드, 특히 디페닐 설폭사이드는 또한 TADF 물질의 구성을 위한 액셉터 모이어티로서 일반적으로 사용되며 공지된 예로는 4-PC-DPS(9-페닐-3-(4-(페닐설폰닐)페닐)-9H-카바졸), DitBu-DPS(9,9'-(술폰닐비스(4,1-페닐렌))비스(9H-카바졸)), 및 TXO-PhCz(2-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H-티오크산텐-9-온 10,10-디옥사이드)가 있다.
- [0334] 형광 에미터 F는 또한 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF를 표시할 수 있고 심지어 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E<sup>B</sup>일 수 있다는 것이 이해될 수 있다. 결과적으로, 여기에 정의된 작은 FWHM 에미터 S<sup>B</sup>는 또한 여기서 정의된 TADF 물질 E<sup>B</sup>일 수도 있고 아닐 수도 있다.
- [0335] 인광, 즉 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1로부터)로부터의 발광은 스핀-금지된 과정이다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 인광은 (분자내) 스핀-궤도 상호작용(소위 (내부) 중원자 효과)을 이용함으로써 촉진(향상)될 수 있다. 본 발명의 단락에서 인광 물질(P<sup>B</sup>)은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 인광을 방출할 수 있는 인광 에미터이다.
- [0336] 여기서, 인광 발광 물질(P<sup>B</sup>)는 칼슘(Ca)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소 중 적어도 하나의 원자를 포함하는 것이 바람직하다. 훨씬 더 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 인광 물질(P<sup>B</sup>)은 전이 금속 원자, 특히 아연(Zn)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소의 전이 금속 원자를 포함한다. 인광 발광 물질(P<sup>B</sup>)에 바람직하게 포함되는 전이 금속 원자는 임의의 산화 상태로 존재할 수 있다(및 각 원소의 이온으로서 존재할 수도 있다).
- [0337] 유기 전계발광 소자에 사용되는 인광 물질 P<sup>B</sup>가 종종 Ir, Pd, Pt, Au, Os, Eu, Ru, Re, Ag 및 Cu, 본 발명의 단락에서 바람직하게는 Ir, Pt 및 Pd, 보다 바람직하게는 Ir 및 Pt의 착물이라는 것은 당업자에게 잘 알려진 사실이다. 당업자는 광전자 소자에서 어떤 물질이 인광 물질(P<sup>B</sup>)로 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 또한, 당업자는 광전자 소자에서 인광 물질로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0338] 숙련된 기술자는 광전자 소자에 사용되는 인광 물질(P<sup>B</sup>)로 어떤 물질이 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알

고 있다. 이와 관련하여, 당업자는 특히 광전자 소자에서 인광 물질(P<sup>B</sup>)로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.

[0339] 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질(P<sup>B</sup>)의 비제한적인 예(예를 들어, 조성물의 형태 또는 광전자 소자의 EML에서, 이하 참조)는 최신 기술에 개시되어 있다. 예를 들어, 다음 금속 착물은 본 발명에 따라 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질 P<sup>B</sup>이다:



[0340]

[0341] 본 발명의 단락에서 작은 반치폭(FWHM) 에미터 S<sup>B</sup>는 0.35eV 이하(≤0.35eV)의 FWHM을 나타내는 발광 스펙트럼을 갖는 임의의 에미터(즉, 에미터 물질)이고, 바람직하게는 0.30 eV 이하(≤0.30 eV), 특히 0.25 eV 이하(≤0.25 eV)이다. 달리 명시되지 않는 한, 이는 실온(즉, (대략) 20°C)에서 각 에미터의 발광 스펙트럼을 기준으로 판단되며, 폴리(메틸 메타크릴레이트) (PMMA) 또는 mCBP 내에서 1-5중량%, 특히 2중량%의 에미터 중량으로 측정된다. 대안적으로, 작은 FWHM 에미터 S<sup>B</sup>의 발광 스펙트럼은 일반적으로 실온(즉, (대략) 20°C)에서 디클로로메탄 또는 톨루엔에 0.001-0.2 mg/mL의 에미터 S<sup>B</sup>가 있는 용액에서 측정할 수 있다.

[0342] 작은 FWHM 에미터 S<sup>B</sup>는 형광 에미터 F, 인광 에미터(예를 들어 인광 물질 P<sup>B</sup>) 및/또는 TADF 에미터(예를 들어 TADF 물질 E<sup>B</sup>)일 수 있다. 본 발명에 따른 유기 분자, 상기 언급된 TADF 물질 E<sup>B</sup> 및 인광 물질 P<sup>B</sup>의 경우, 발광 스펙트럼은 실온(즉, 대략 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트) (PMMA) 내에서 10 중량%의 각각의 분자, E<sup>B</sup> 또는 P<sup>B</sup>의 각각의 스핀 코팅된 필름으로부터 기록된다.

[0343] 당업자에게 공지된 바와 같이, 에미터(예를 들어 작은 FWHM 에미터 S<sup>B</sup>)의 반치폭(FWHM)은 각각의 발광 스펙트럼(형광 에미터에 대한 형광 스펙트럼 및 인광 에미터에 대한 인광 스펙트럼)으로부터 쉽게 결정된다. 기록된 모든 FWHM 값은 일반적으로 주요 발광 피크(즉, 강도가 가장 높은 피크)를 나타낸다. FWHM(여기서 바람직하게는 전자 볼트, eV로 기록됨)을 결정하는 수단은 당업자의 상식의 일부이다. 예를 들어 발광 스펙트럼의 주요 발광 피크가 발광 스펙트럼에서 나노미터(nm)로 얻은 두 파장 λ<sub>1</sub> 및 λ<sub>2</sub>에서 최대 발광의 절반(즉, 최대 발광 강도의 50%)에 도달하는 경우 전자 볼트(eV) 단위의 FWHM은 일반적으로 다음 방정식을 사용하여 결정된다.

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

[0344]

[0345] 본 발명의 단락에서, 작은 FWHM 에미터 S<sup>B</sup>는 유기 에미터이며, 이는 본 발명의 단락에서 어떤 전이 금속도 포함

하지 않는다는 것을 의미한다. 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터  $S^B$ 는 주로 수소(H), 탄소(C), 질소(N) 및 붕소(B) 원소로 구성되지만, 예를 들어 산소(O), 규소(Si), 불소(F) 및 브롬(Br)도 포함할 수 있다.

[0346] 또한, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터  $S^B$ 는 추가로 TADF를 나타내거나 나타내지 않을 수 있는 형광 에미터 F인 것이 바람직하다.

[0347] 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터  $S^B$ 는 바람직하게는 다음 요건 중 적어도 하나를 충족시킨다:

[0348] (i) 붕소(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터  $S^B$  내의 적어도 하나의 원자가 붕소(B)임을 의미한다.

[0349] (ii) 적어도 2개의 방향족 고리가 함께 융합된 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조를 포함한다(예를 들어, 안트라센, 피렌 또는 이의 아자-유도체).

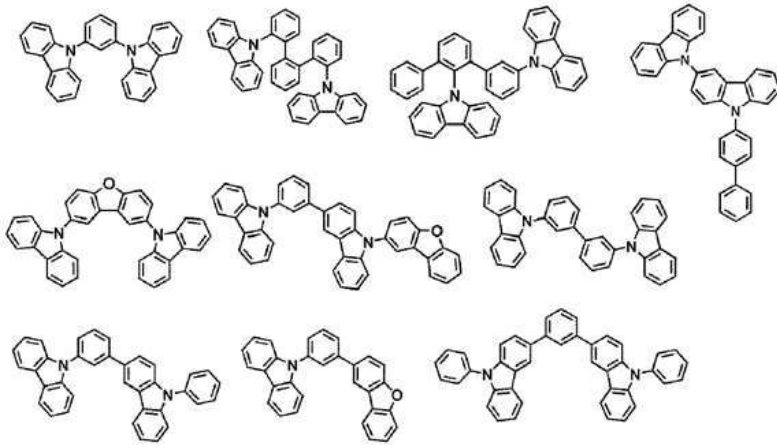
[0350] 당업자에게 공지된 바와 같이, EML의 호스트 물질( $H^B$ )은 상기 EML을 통과하여 전자 또는 양전하를 수송할 수 있고 또한 호스트 물질(들)( $H^B$ )에 도핑된 적어도 하나의 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있다. 당업자는 광전자 소자(예를 들어, OLED)의 EML에 포함된 호스트 물질  $H^B$ 가 일반적으로 전압 및 전류를 인가할 때 상기 소자로부터의 발광에 크게 관여하지 않는다는 것을 이해한다. 당업자는 또한 임의의 호스트 물질  $H^B$ 가 높은 정공 이동도를 나타내는 p-호스트  $H^P$ , 높은 전자 이동도를 나타내는 n-호스트  $H^N$  또는 높은 정공 이동도 및 높은 전자 이동도를 모두 나타내는 양극성 호스트 물질  $H^{BP}$ 일 수 있다는 사실을 잘 알고 있다.

[0351] 당업자에게 공지된 바와 같이, EML은 또한 적어도 하나의 p-호스트  $H^P$  및 하나의 n-호스트  $H^N$ 을 갖는 소위 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다. 특히, EML은 본 발명에 따른 정확히 하나의 에미터 물질 및 n-호스트  $H^N$ 로서의 T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진)과 p-호스트  $H^P$ 로서의 CBP, mCP, mCBP, 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조푸란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조푸라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오펜)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트를 포함하는 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다.

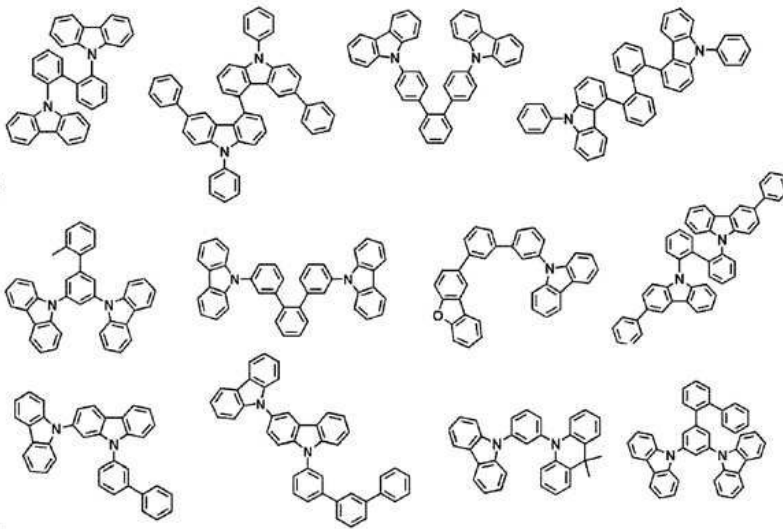
[0352] EML은 적어도 하나의 p-호스트  $H^P$ 와 하나의 n-호스트  $H^N$ 이 있는 소위 혼합 호스트 시스템을 포함할 수 있다. 여기서 n-호스트  $H^N$ 은 피리딘, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진 및 1,2,3-트리아진으로부터 유도된 기를 포함하고, p-호스트  $H^P$ 는 인돌, 이소인돌, 바람직하게는 카바졸로부터 유도된 기를 포함한다.

[0353] 당업자는 어떤 물질이 유기 전계 발광 소자에 사용하기에 적합한 호스트 물질인지 알고 있다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 호스트 물질이 본 발명의 단락에서 적합한 호스트 물질  $H^B$ 일 수 있음이 이해된다.

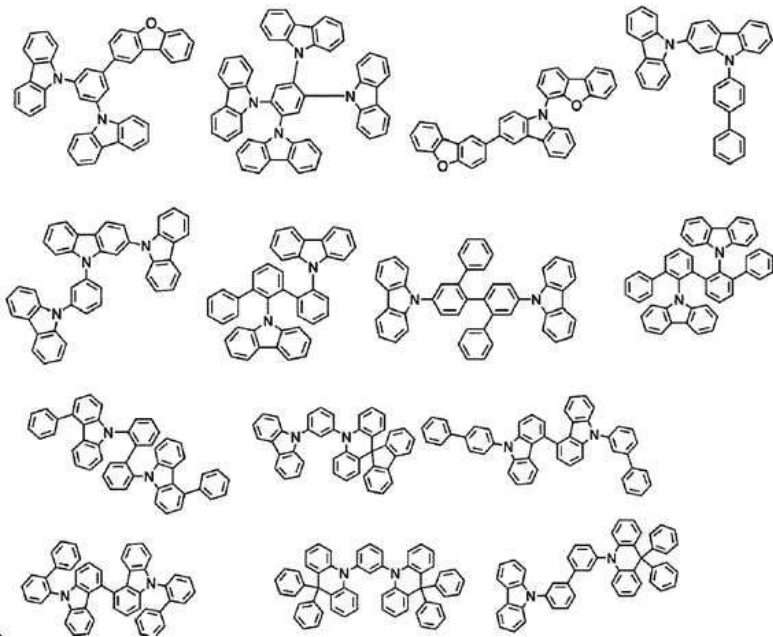
[0354] 본 발명의 단락에서의 p-호스트 물질 H<sup>P</sup>인 물질 H<sup>B</sup>의 비제한적 예가 하기에 열거되어 있다:



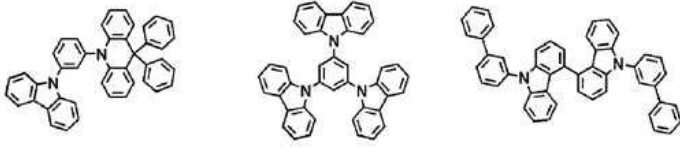
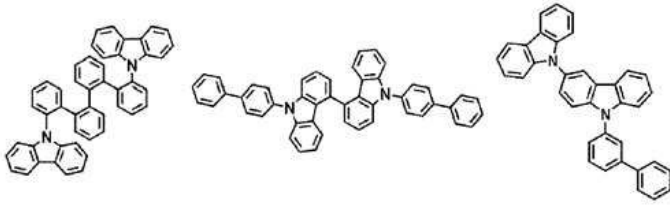
[0355]



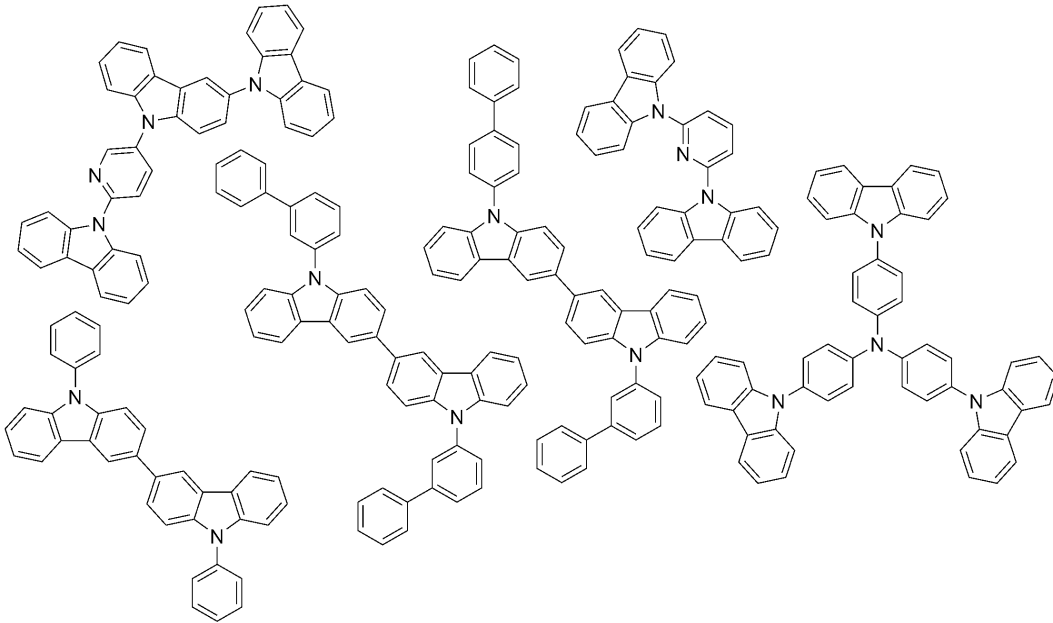
[0356]



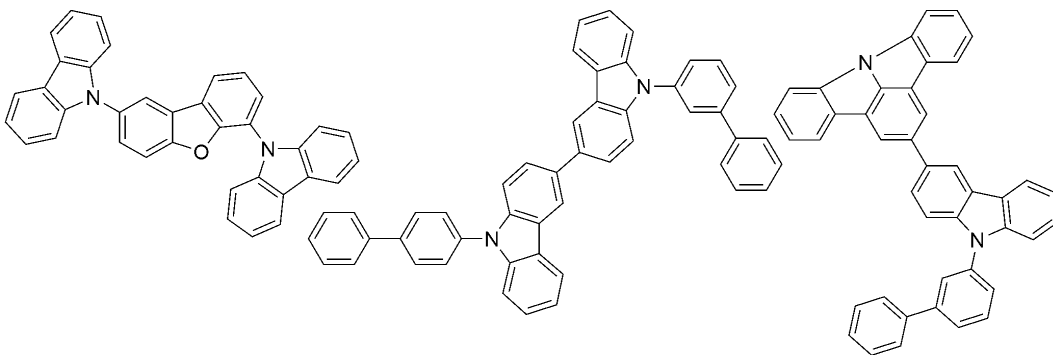
[0357]



[0358]

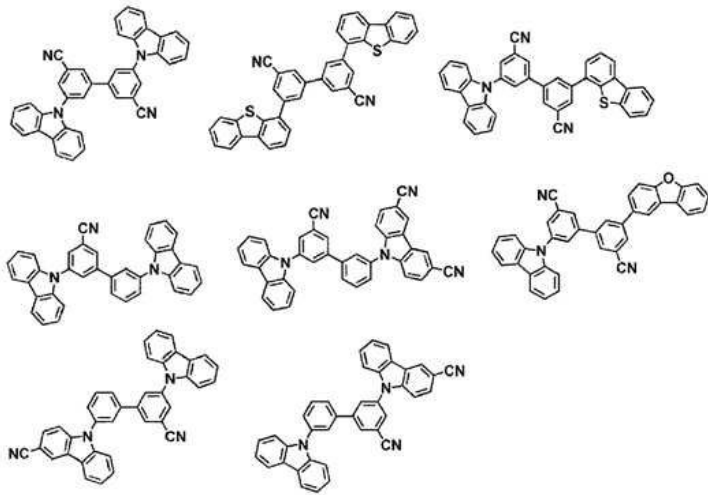


[0359]

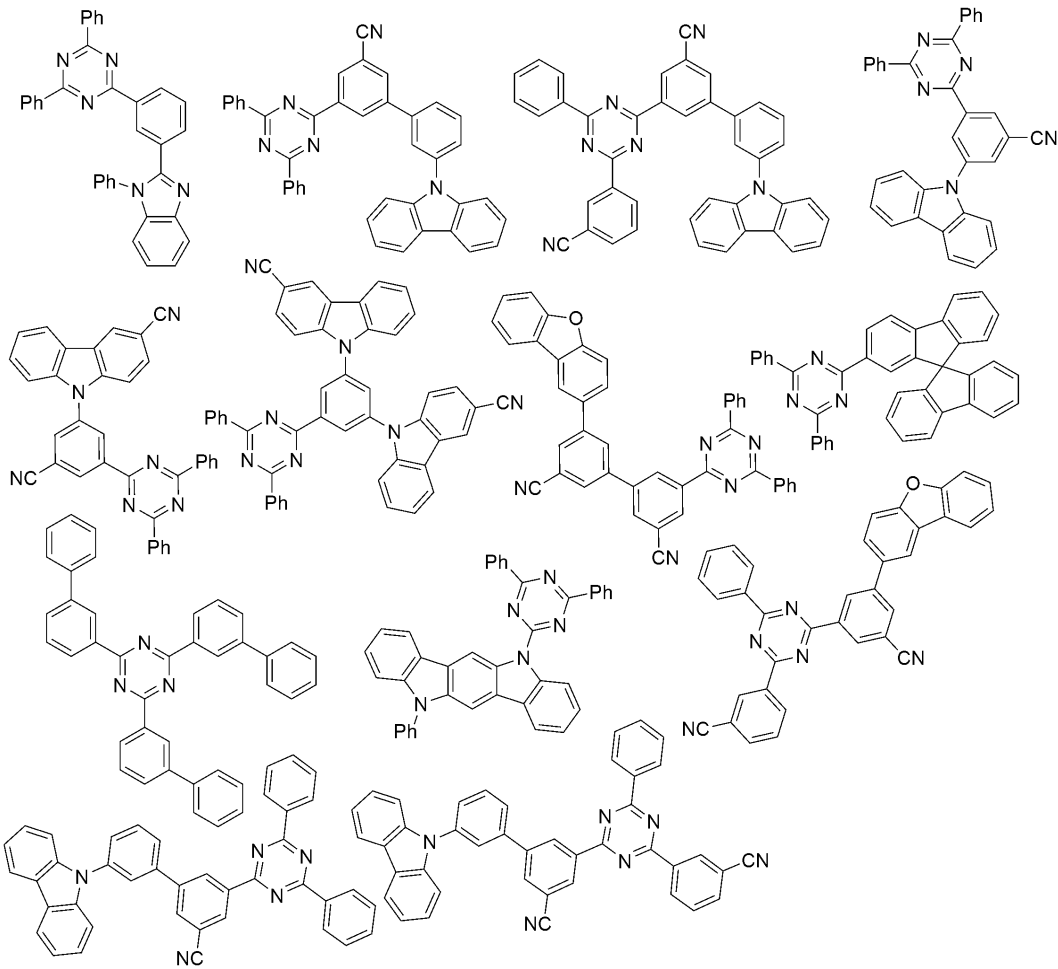


[0360]

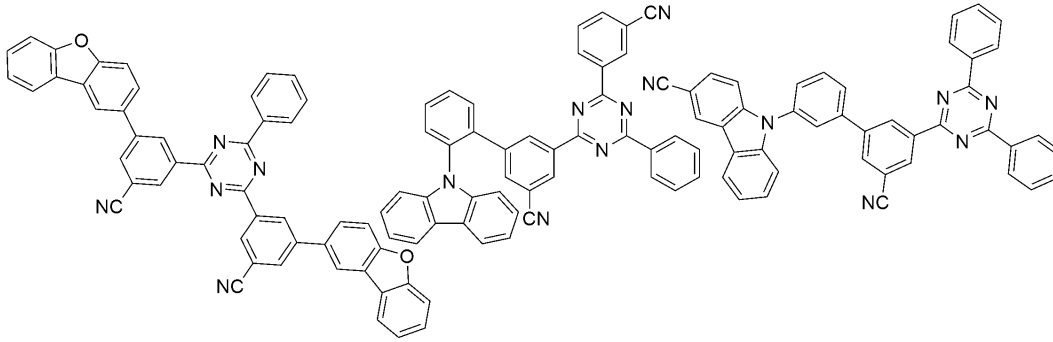
[0361] 본 발명의 단락에서의 n-호스트 물질 H<sup>N</sup>인 물질 H<sup>B</sup>의 비제한적인 예가 하기에 열거되어 있다:



[0362]



[0363]



[0364]

[0365]

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

[0366]

당업자에게 공지된 바와 같이, TTA(삼중항-삼중항 소멸) 물질이 호스트 물질  $H^B$ 로 사용될 수 있다. TTA 물질은 삼중항-삼중항 소멸을 가능하게 한다. 삼중항-삼중항 소멸은 바람직하게는 광자 상향 변환을 야기할 수 있다. 따라서, 2개, 3개 또는 그 이상의 광자가 TTA 물질  $H^{TTA}$ 의 최저 여기 삼중항 상태( $T1^{TTA}$ )에서 제1 여기 단일항 상태  $S1^{TTA}$ 로의 광자 상향 변환을 용이하게 할 수 있다. 바람직한 구현예에서, 2개의 광자는  $T1^{TTA}$ 에서  $S1^{TTA}$ 로의 광자 상향 변환을 용이하게 한다. 따라서 삼중항-삼중항 소멸은 다수의 에너지 전달 단계를 통해 2개(또는 선택적으로 2개 이상)의 저주파수 광자를 고주파수 1개의 광자로 결합할 수 있는 단계일 수 있다.

[0367]

선택적으로, TTA 물질은 흡수 모이어티, 센시타이저 모이어티 및 에미터 모이어티(또는 소멸 모이어티)를 포함할 수 있다. 이와 관련하여, 에미터 모이어티는 예를 들어 벤젠, 비페닐, 트리페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 아줄렌과 같은 폴리시클릭 방향족 모이어티일 수 있다. 바람직한 구현예에서, 폴리시클릭 방향족 모이어티는 안트라센 모이어티 또는 이의 유도체를 포함한다. 센시타이저 모이어티 및 에미터 모이어티는 2개의 상이한 화학적 화합물(즉, 분리된 화학적 실체)에 위치할 수 있거나 하나의 화합물에 포함된 두 모이어티일 수 있다.

[0368]

본 발명에 따르면, 삼중항-삼중항 소멸(TTA) 물질은 삼중항-삼중항 소멸에 의해 제1 여기 삼중항 상태  $T1^N$ 에서 제1 여기 단일항 상태  $S1^N$ 으로 에너지를 변환한다.

[0369]

본 발명에 따르면, TTA 물질은 최저 여기 삼중항 상태( $T1^N$ )로부터 삼중항-삼중항 소멸을 나타내어 삼중항-삼중항 소멸된 제1 여기 단일항 상태  $S1^N$ 을 형성하고,  $T1^N$ 의 에너지의 최대 2배의 에너지를 갖는 것을 특징으로 한다.

[0370]

본 발명의 일 구현예에서, TTA 물질은  $T1^N$ 으로부터 삼중항-삼중항 소멸을 나타내어  $S1^N$ 을 생성하고, 에너지가 1.01 내지 2배, 1.1 내지 1.9배, 1.2 내지 1.5배, 1.4 내지 1.6배, 또는  $T1^N$  에너지의 1.5 내지 2배를 나타내는 것을 특징으로 한다.

[0371]

본 명세서에서 "TTA 물질" 및 "TTA 화합물"이라는 용어는 서로 혼용되어 사용될 수 있다.

[0372]

전형적인 "TTA 물질"은 Kondakov(Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical,

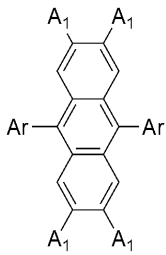
Physical and Engineering Sciences, 2015, 373:20140321)가 설명한 바와 같이 청색 형광 OLED와 관련된 최신 기술에서 찾을 수 있다. 이러한 청색 형광 OLED는 EML의 주성분(호스트)으로 안트라센 유도체와 같은 방향족 탄화수소를 사용한다.

[0373] 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 감응(sensitized) 삼중항-삼중항 소멸을 가능하게 한다. 선택적으로, TTA 물질은 하나 이상의 폴리시클릭 방향족 구조를 포함할 수 있다. 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 적어도 하나의 폴리시클릭 방향족 구조 및 적어도 하나의 추가적인 방향족 잔기를 포함한다.

[0374] 바람직한 구현예에서, TTA 물질은 더 큰 단일항-삼중항 에너지 분할, 즉 적어도 1.1배, 적어도 1.2배, 적어도 1.3배, 적어도 1.5배, 바람직하게는 2배 이하의 제1 여기 단일항 상태  $S1^N$ 과 최저 여기 삼중항 상태  $T1^N$  사이의 에너지 차이를 갖는다.

[0375] 본 발명의 바람직한 구현예에서, TTA 물질  $H^{TTA}$ 는 안트라센 유도체이다.

[0376] 일 구현예에서, 상기 TTA 물질  $H^{TTA}$ 는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이다.



화학식 4,

[0377] 여기서

[0379] 각각의 Ar은 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴;

[0380] 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴;로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0381] 각각의 A<sub>1</sub>은 서로 독립적으로

[0382] 수소;

[0383] 중수소;

[0384] C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴; C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴; 및

[0385] C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬;로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0386] 일 구현예에서, 상기 TTA 물질  $H^{TTA}$ 는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이며, 여기서

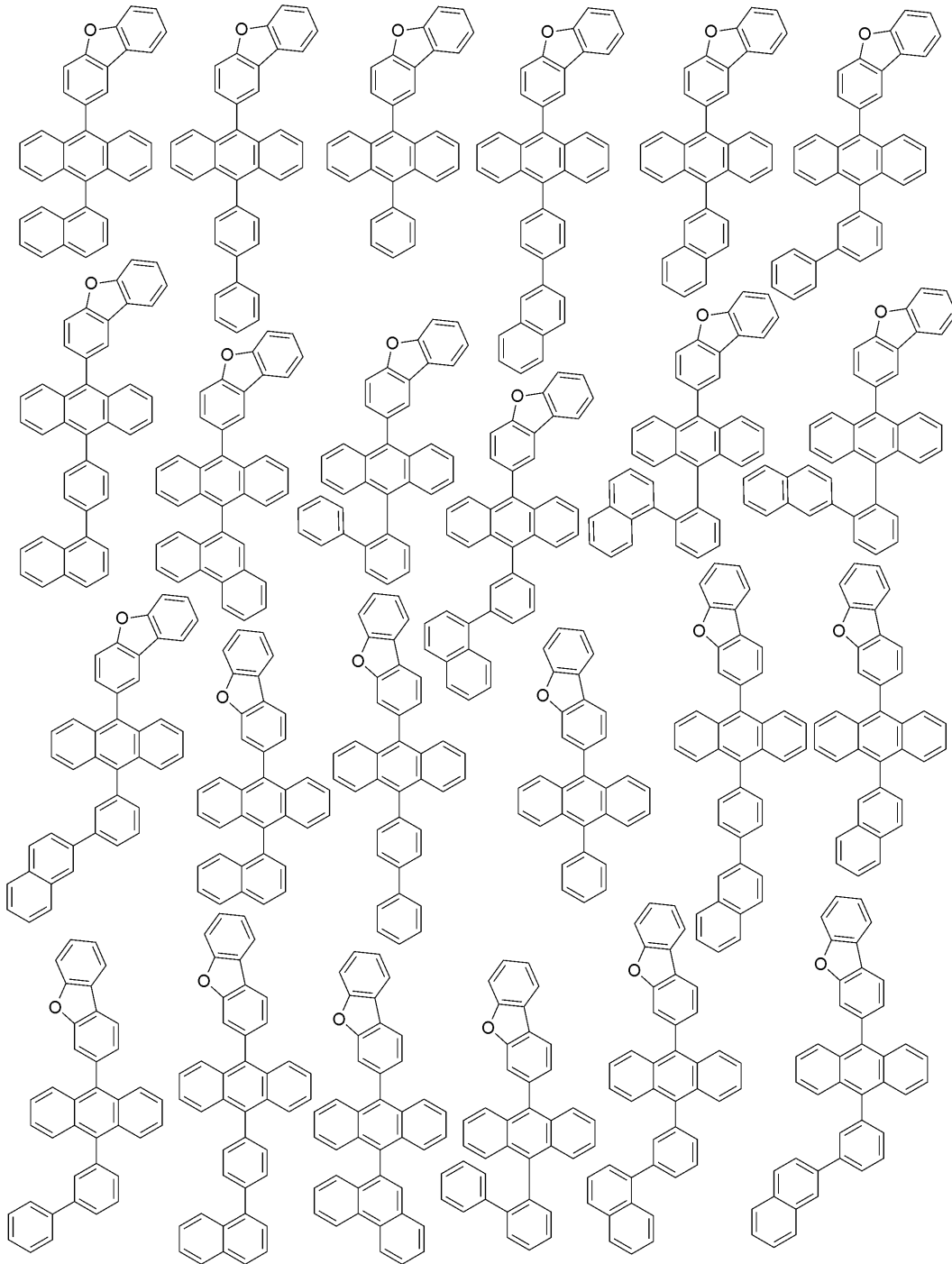
[0387] 각각의 Ar은 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴;

[0388] 및 C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴;로 이루어진 군으로부터 선택되고;

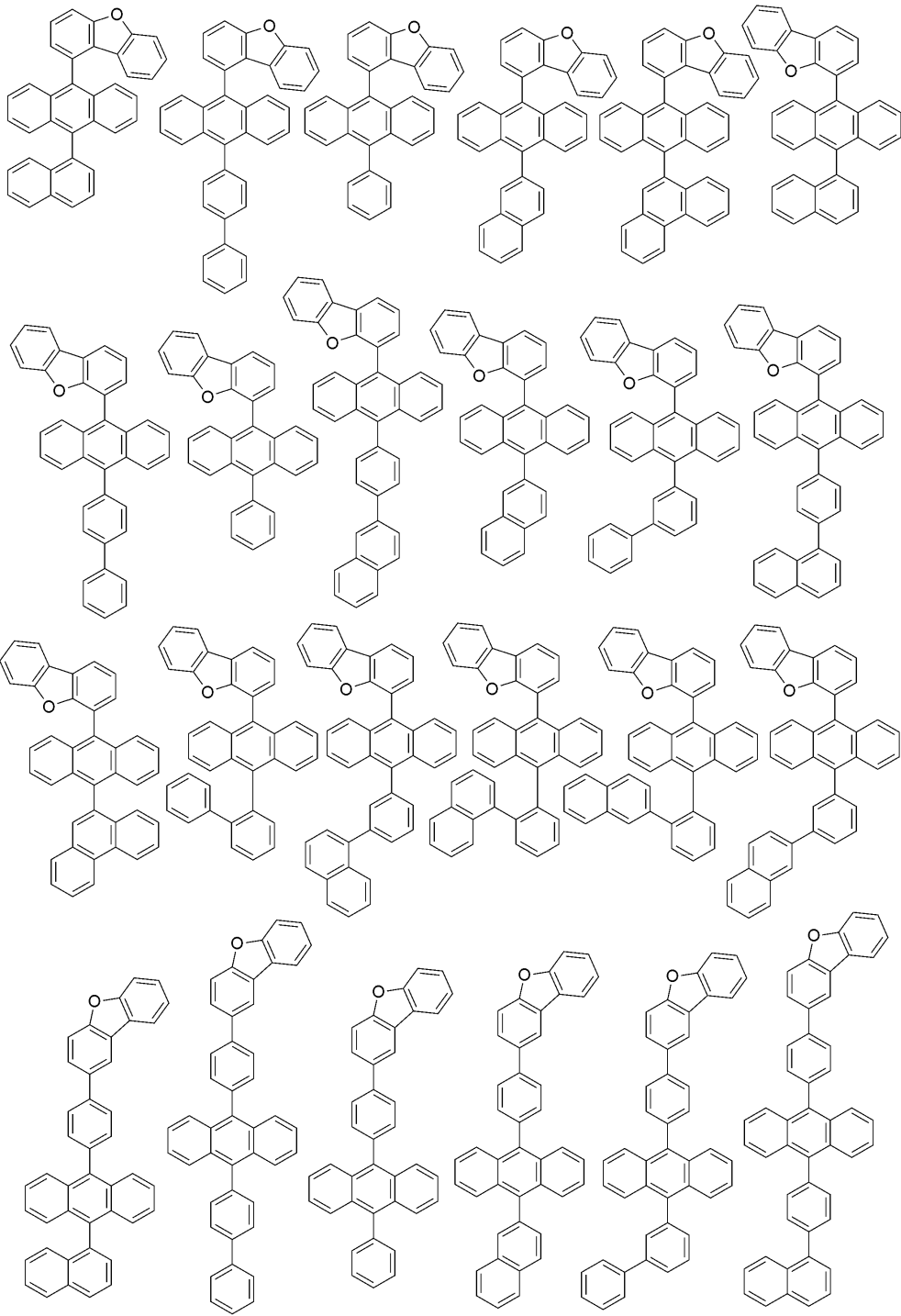
[0389] 각각의 A<sub>1</sub>은 서로 독립적으로

- [0390] 수소,
- [0391] 중수소,
- [0392] C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴,
- [0393] C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>-헤테로아릴; 및
- [0394] C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 선택적으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-(헤테로)알킬;로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0395] 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 적어도 하나의 A<sub>1</sub> 가 수소이다. 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 적어도 2개의 A<sub>1</sub> 이 수소이다. 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 적어도 3개의 A<sub>1</sub> 이 수소이다. 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 각각의 A<sub>1</sub> 이 수소이다.
- [0396] 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 Ar 중 하나는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 피레닐, 트리페닐레닐, 디벤조안트라세닐, 플루오레닐, 벤조플루오레닐, 안트라세닐, 페난트레닐, 벤조나프토푸라닐, 벤조나프토티오펜일, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜일로 이루어진 군으로부터 선택된 잔기이고, 이는 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 각각 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0397] 일 구현예에서, H<sup>TTA</sup>는 하기 화학식 4의 안트라센 유도체이이고, 여기서 두 Ar은 각각 서로 독립적으로 페닐, 나프틸, 페난트릴, 피레닐, 트리페닐레닐, 디벤조안트라세닐, 플루오레닐, 벤조플루오레닐, 안트라세닐, 페난트레닐, 벤조나프토푸라닐, 벤조나프토티오펜일, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜일로 이루어진 군으로부터 선택된 잔기이고, 이는 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>-아릴, C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>-헤테로아릴, 할로젠 및 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>-(헤테로)알킬로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 각각 선택적으로 치환될 수 있다.

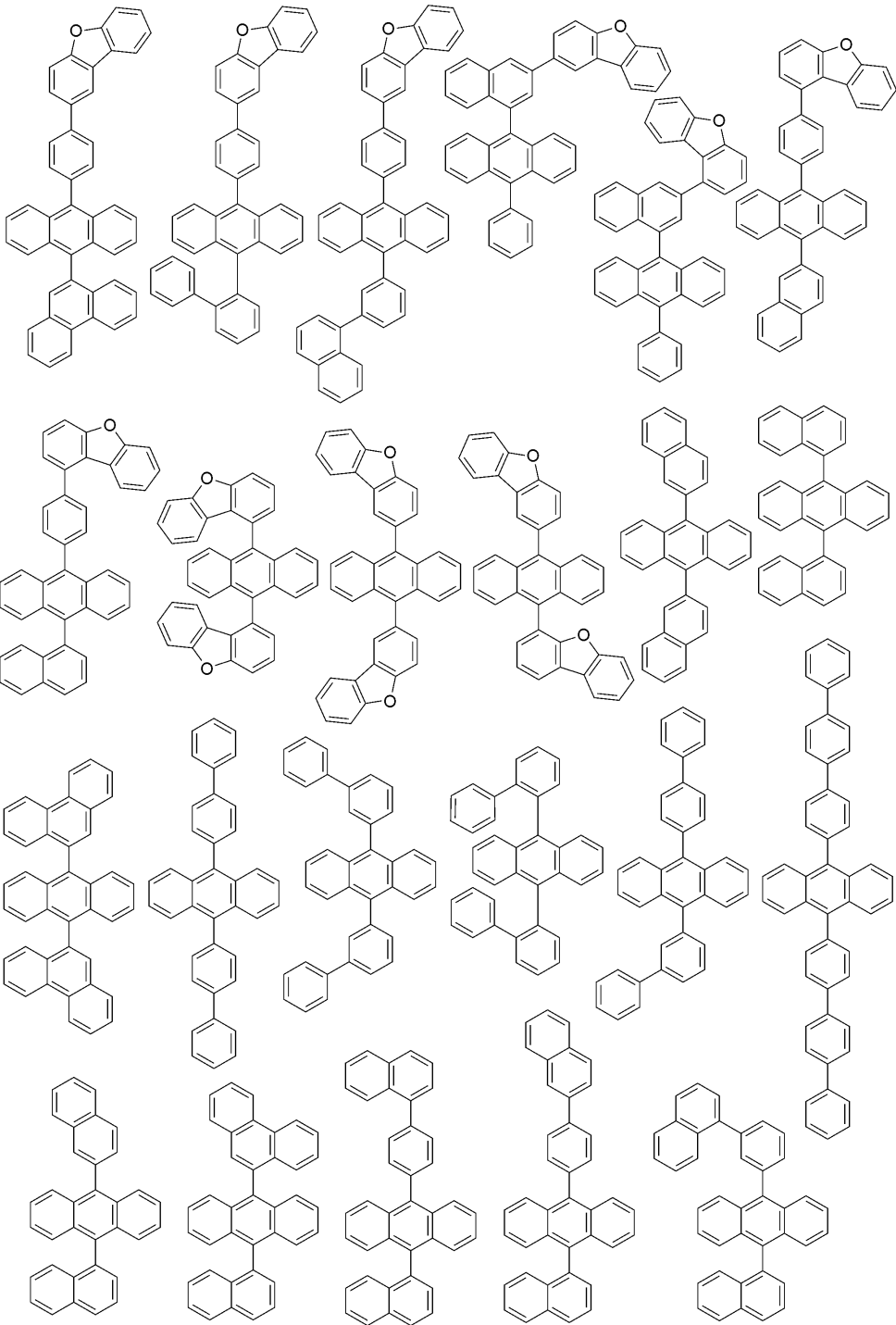
[0398] 일 구현예에서, TTA 물질  $H^{TTA}$ 는 다음으로부터 선택되는 안트라센 유도체이다:



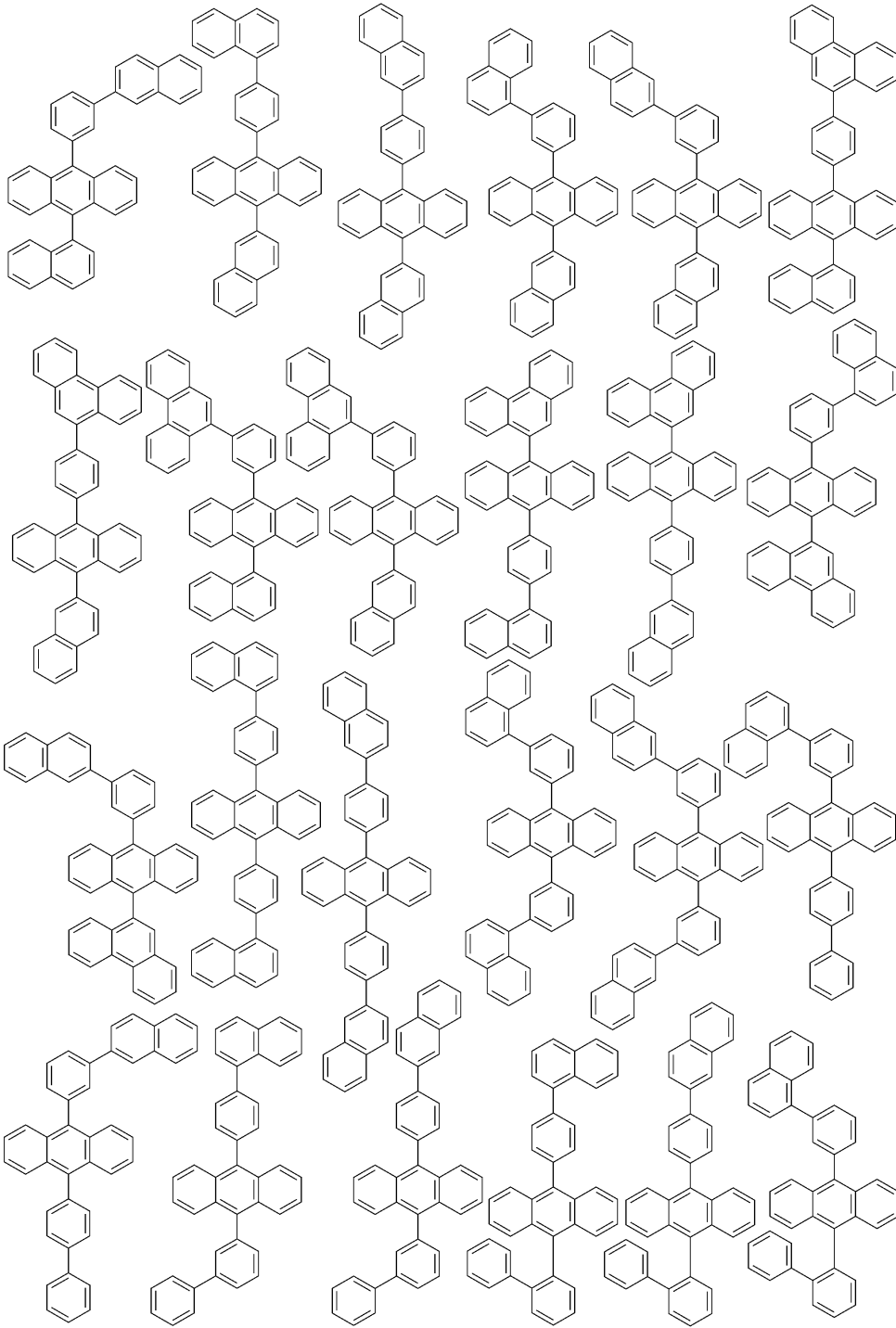
[0399]



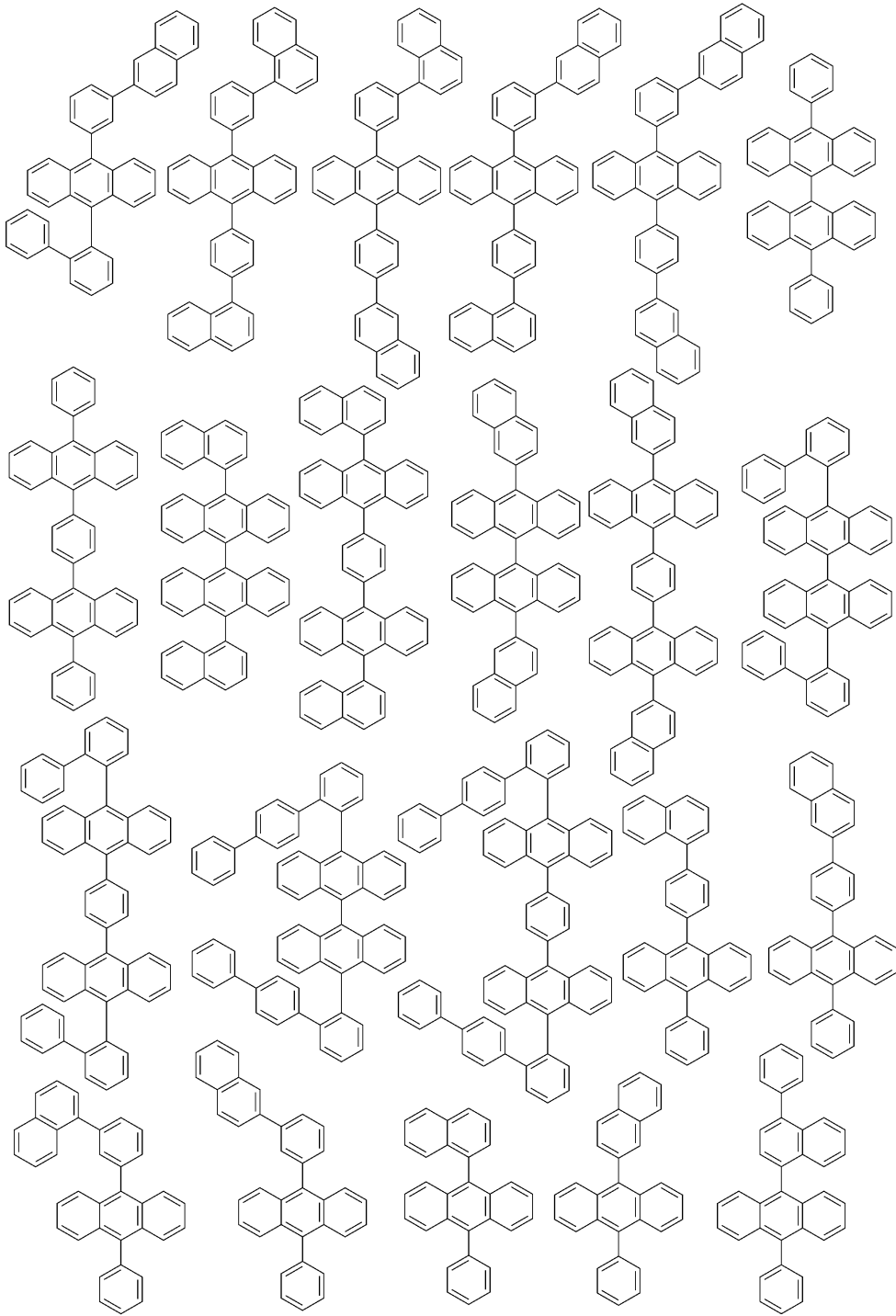
[0400]



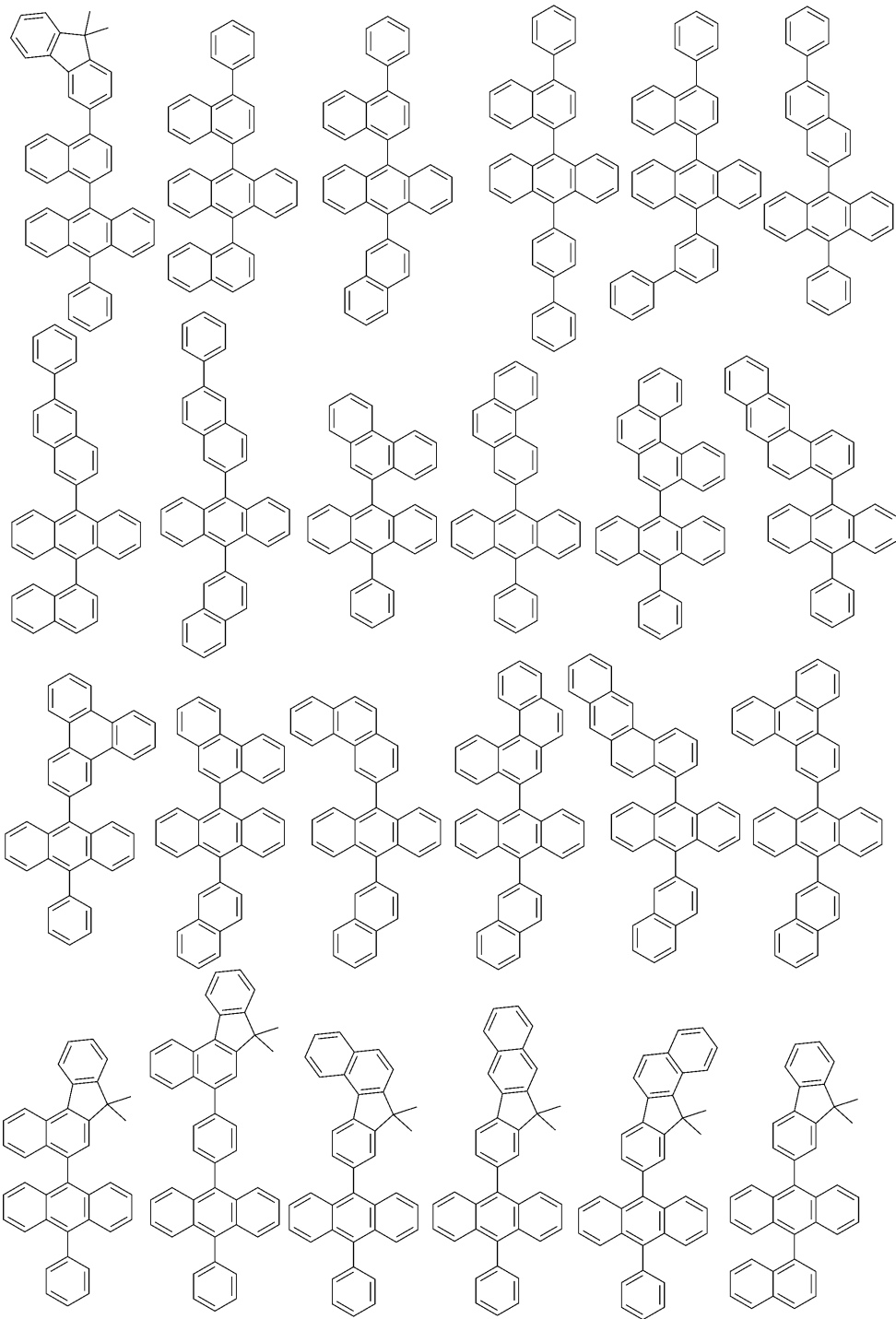
[0401]



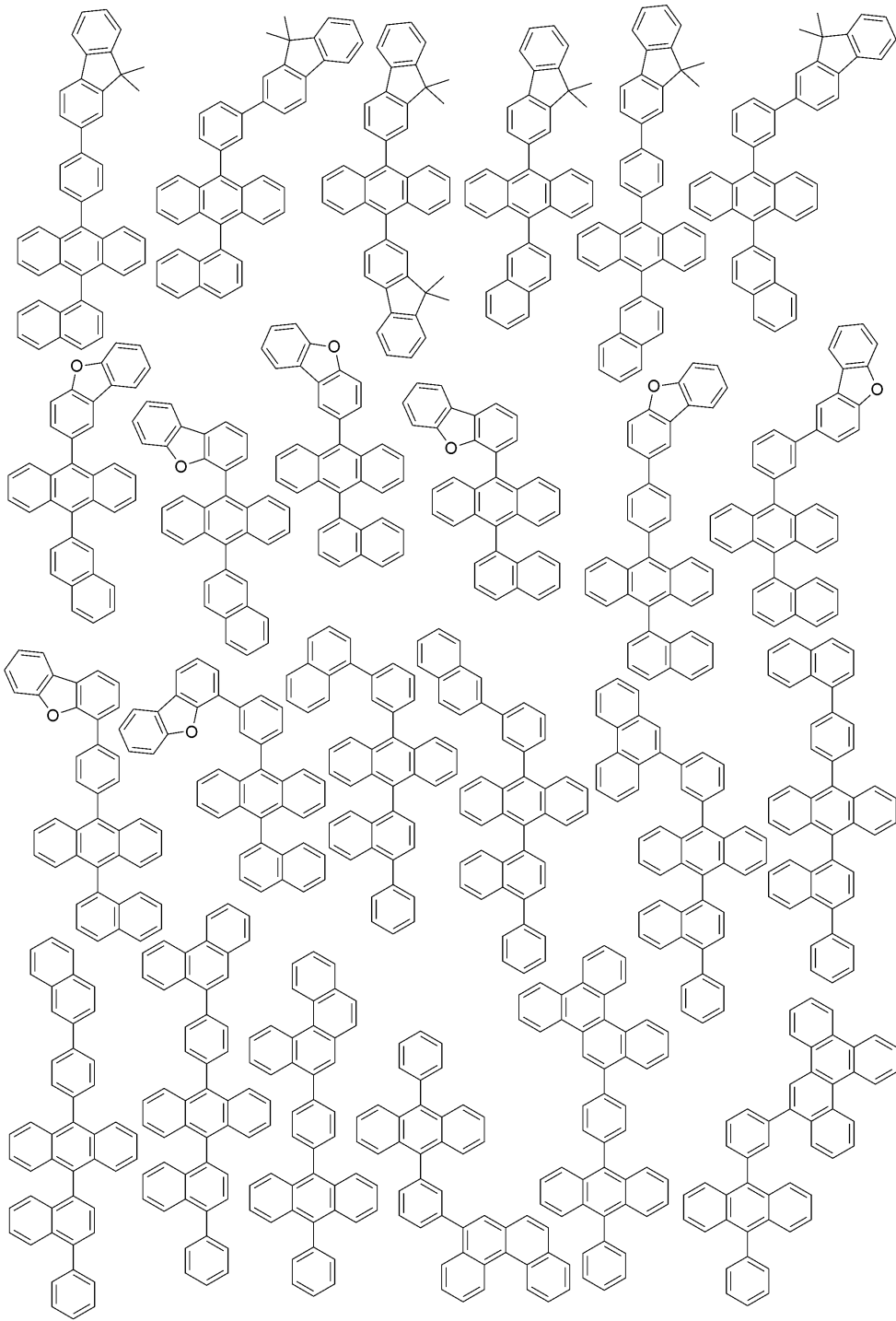
[0402]



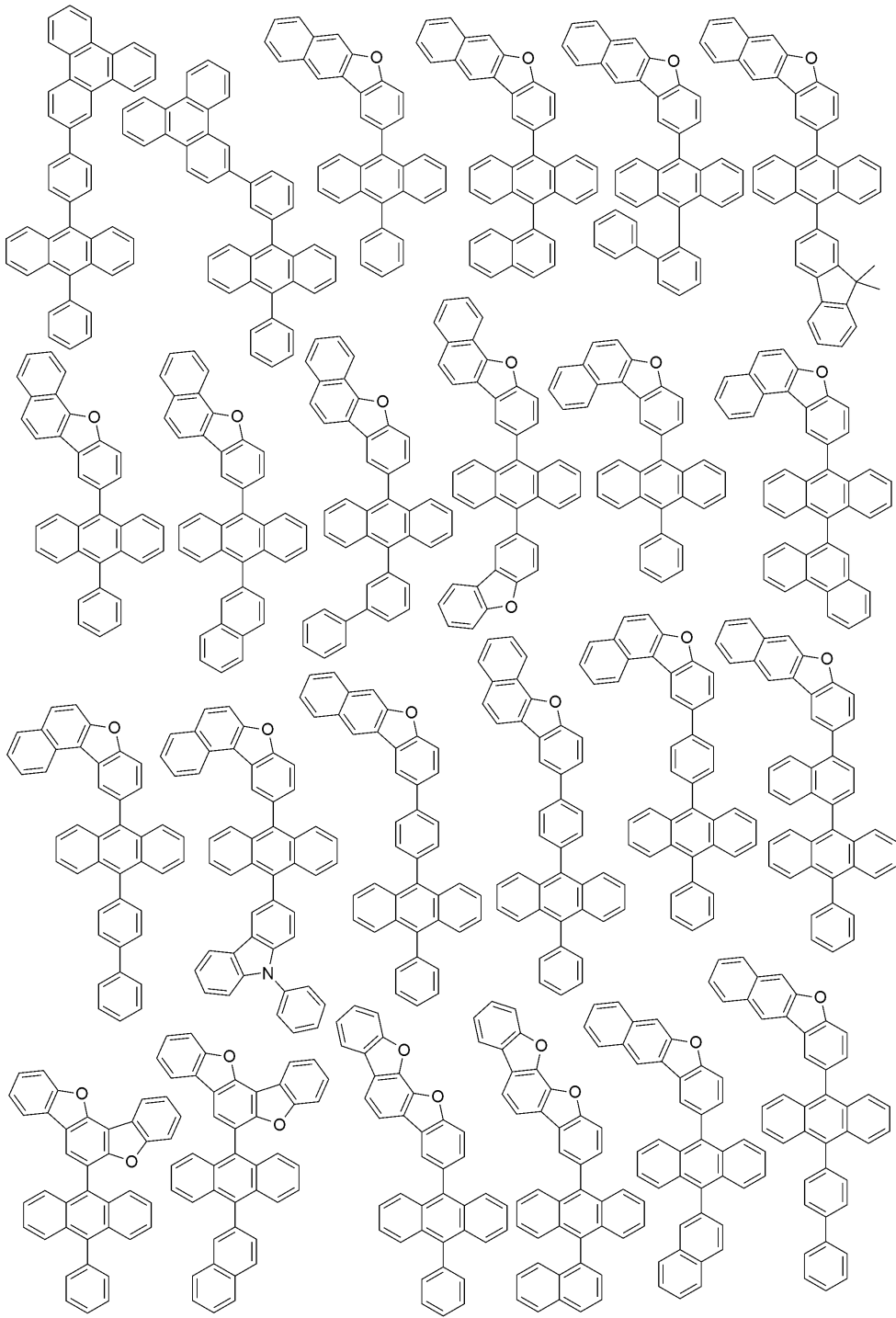
[0403]



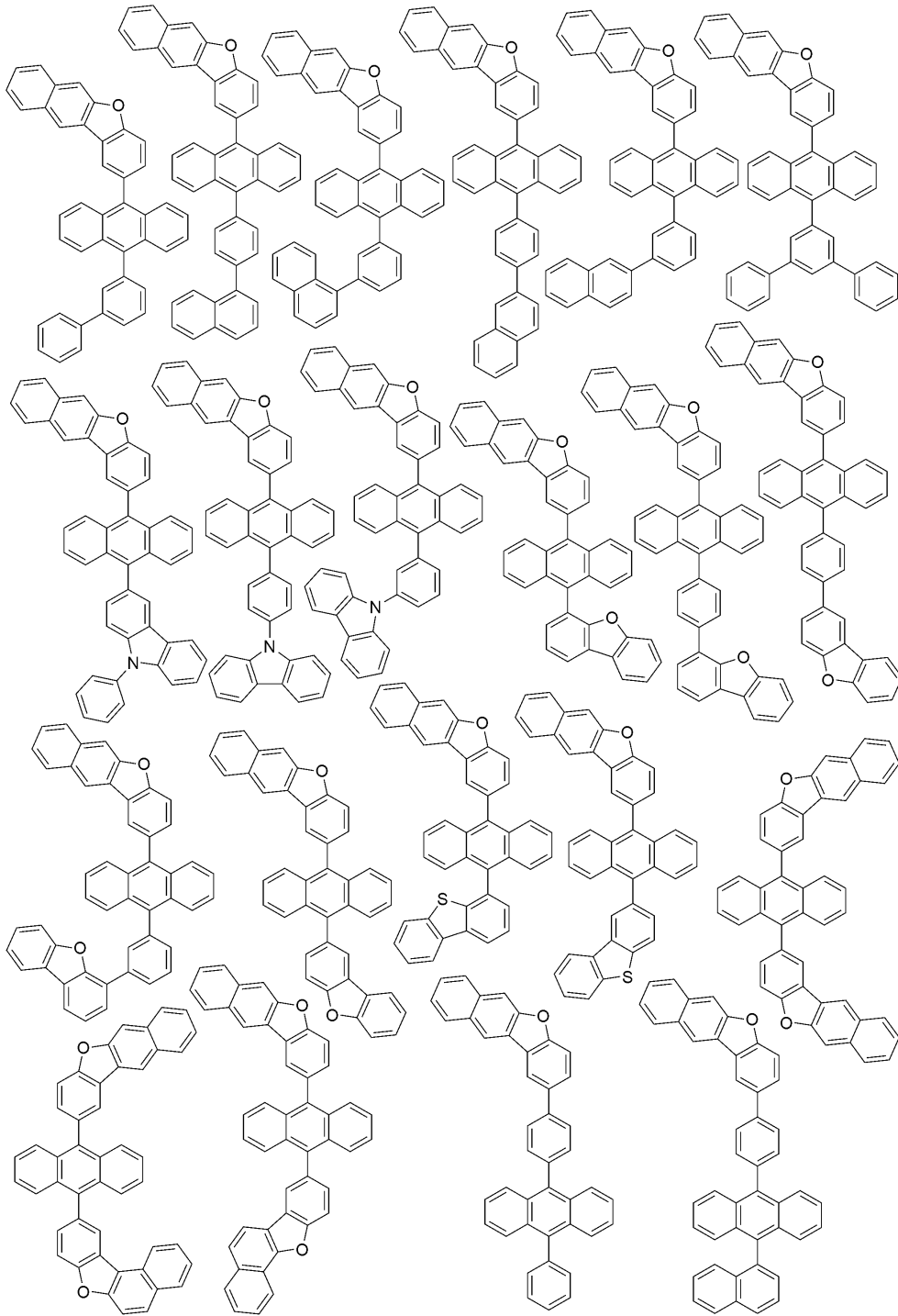
[0404]



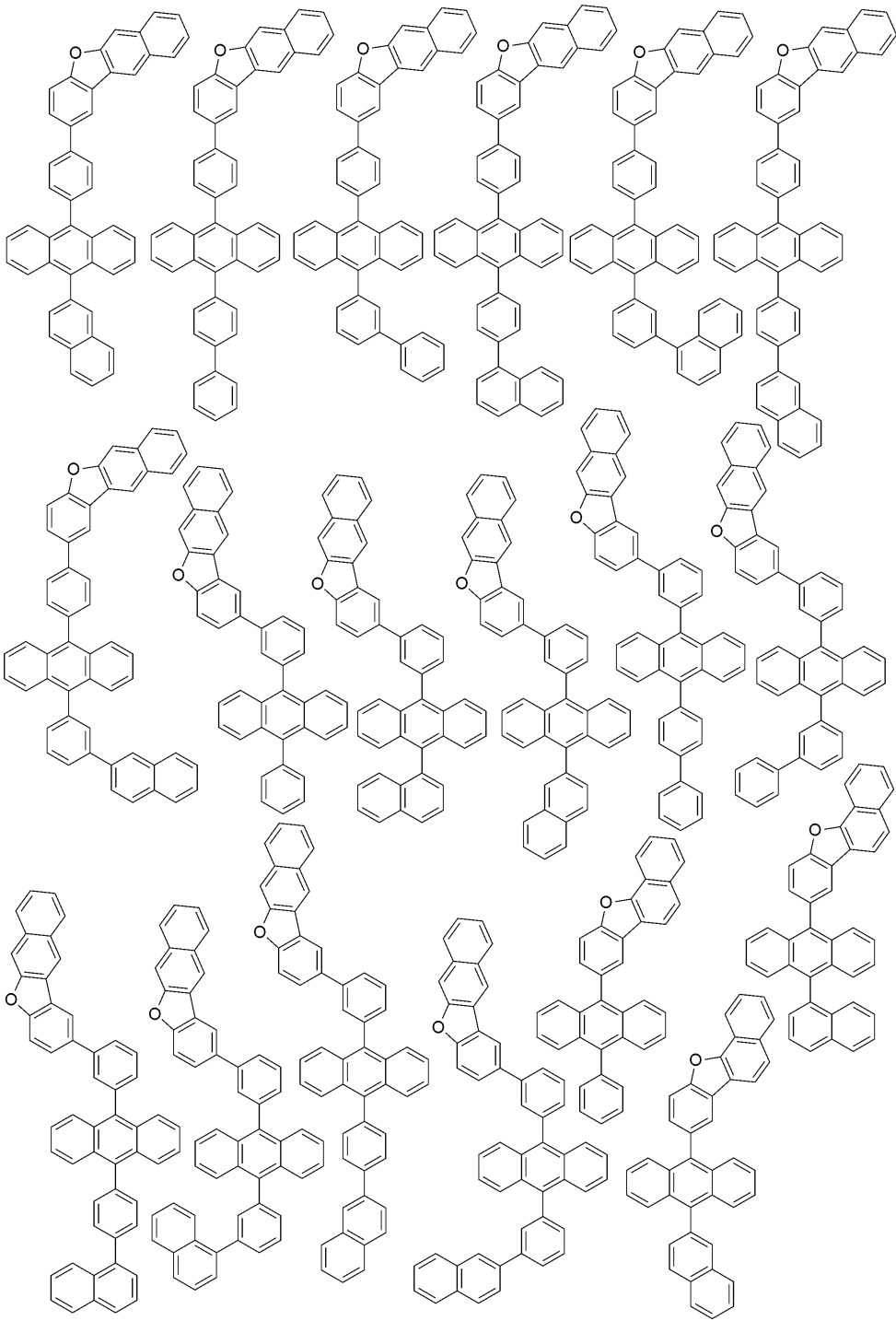
[0405]



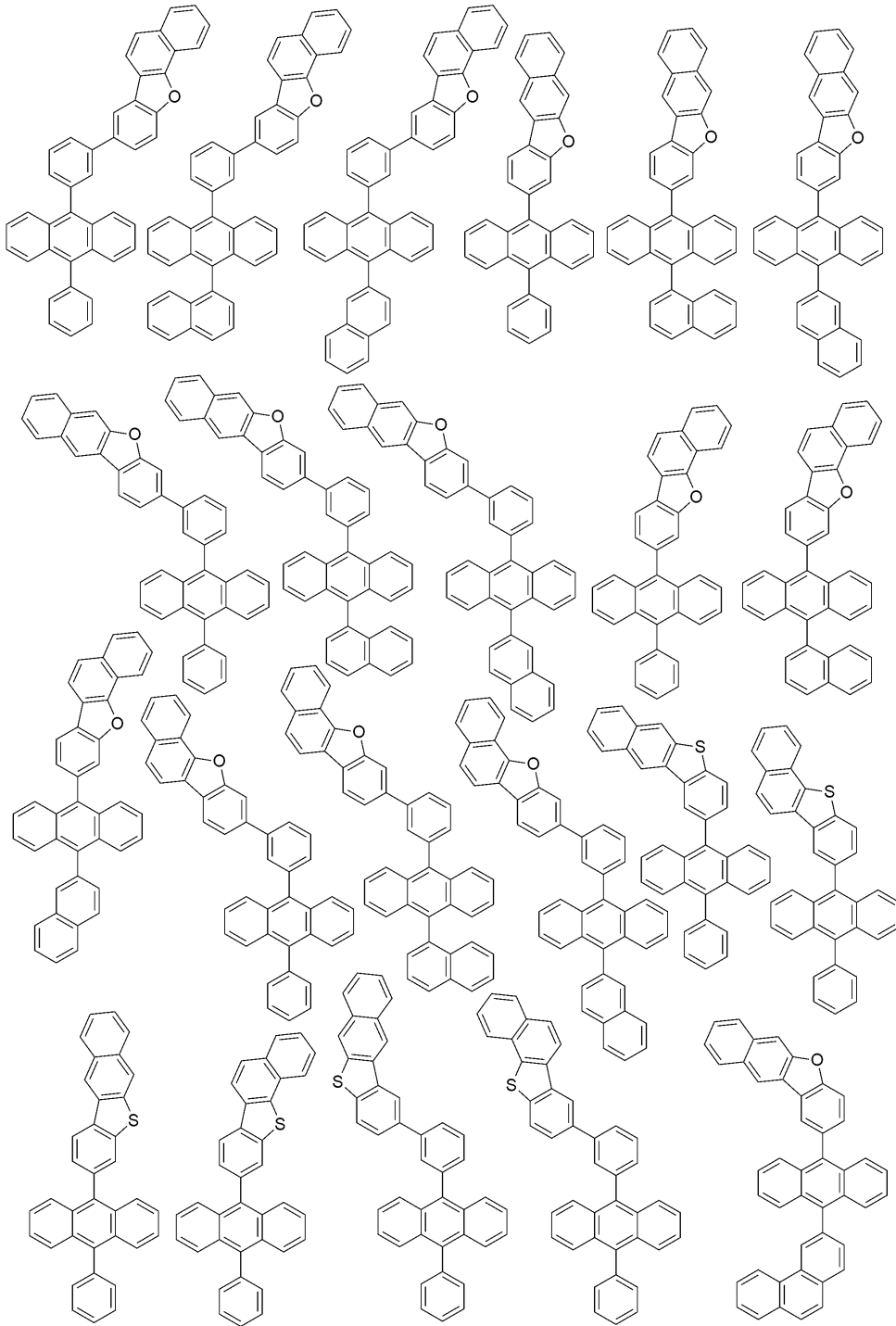
[0406]



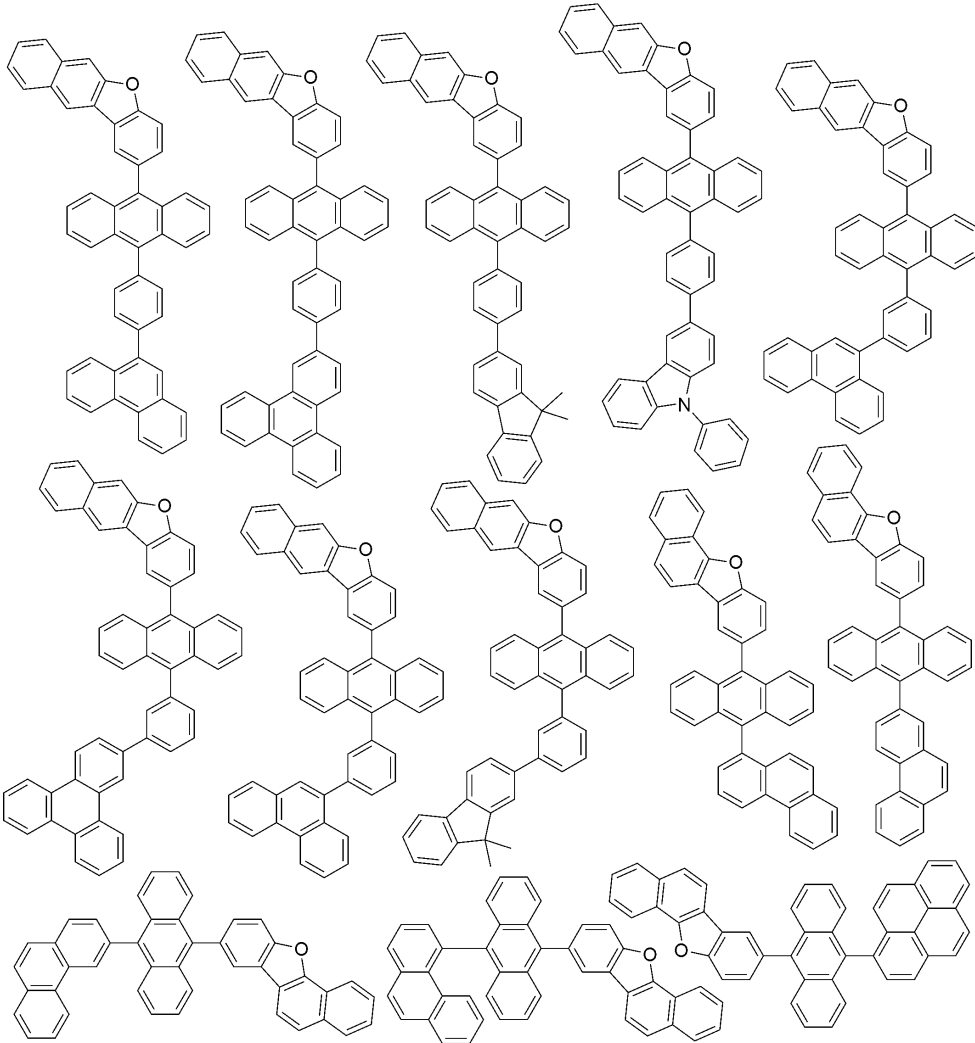
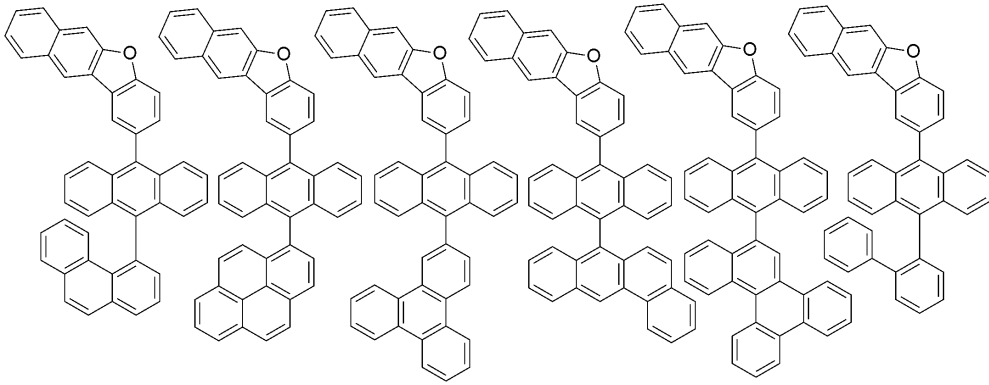
[0407]



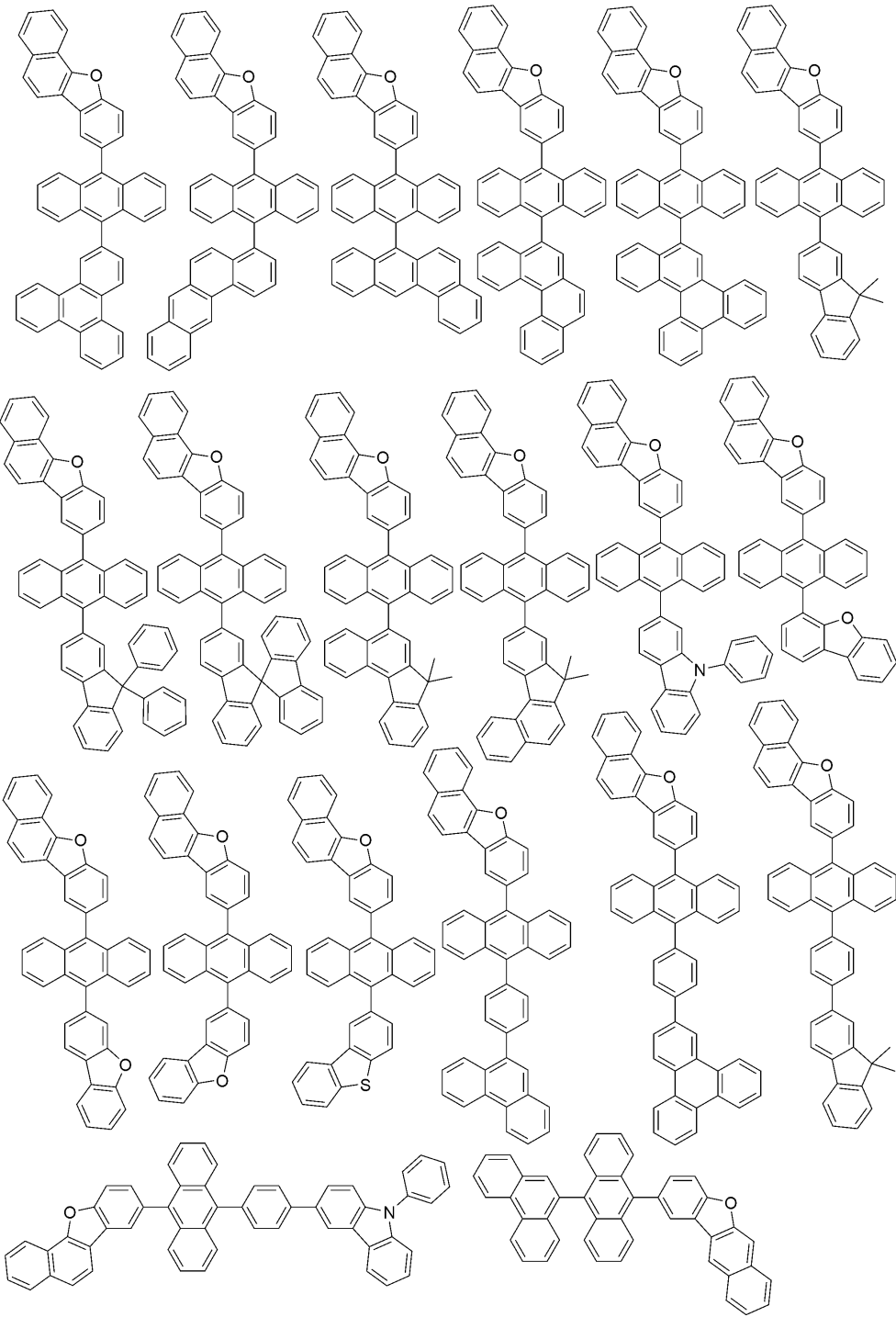
[0408]



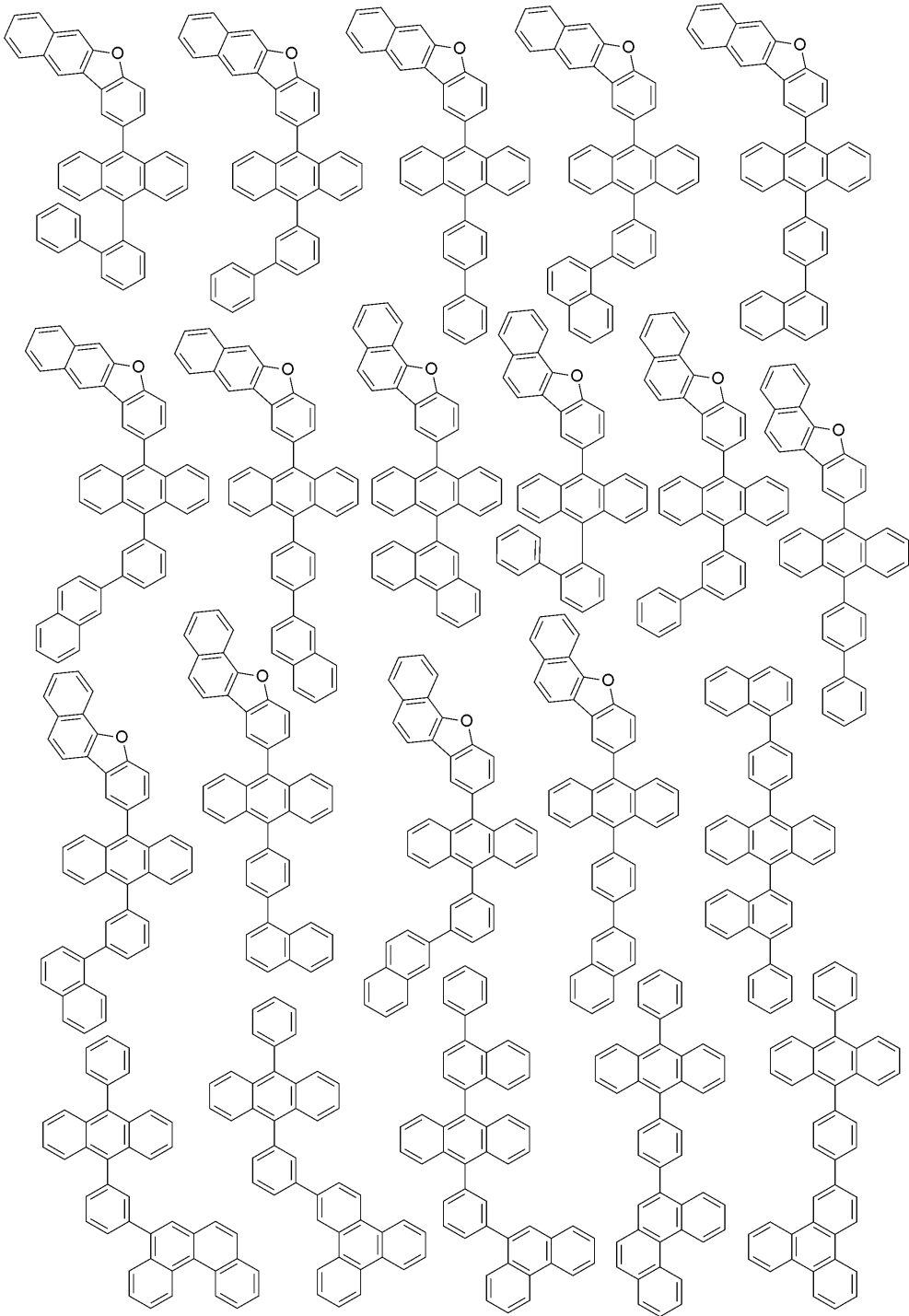
[0409]



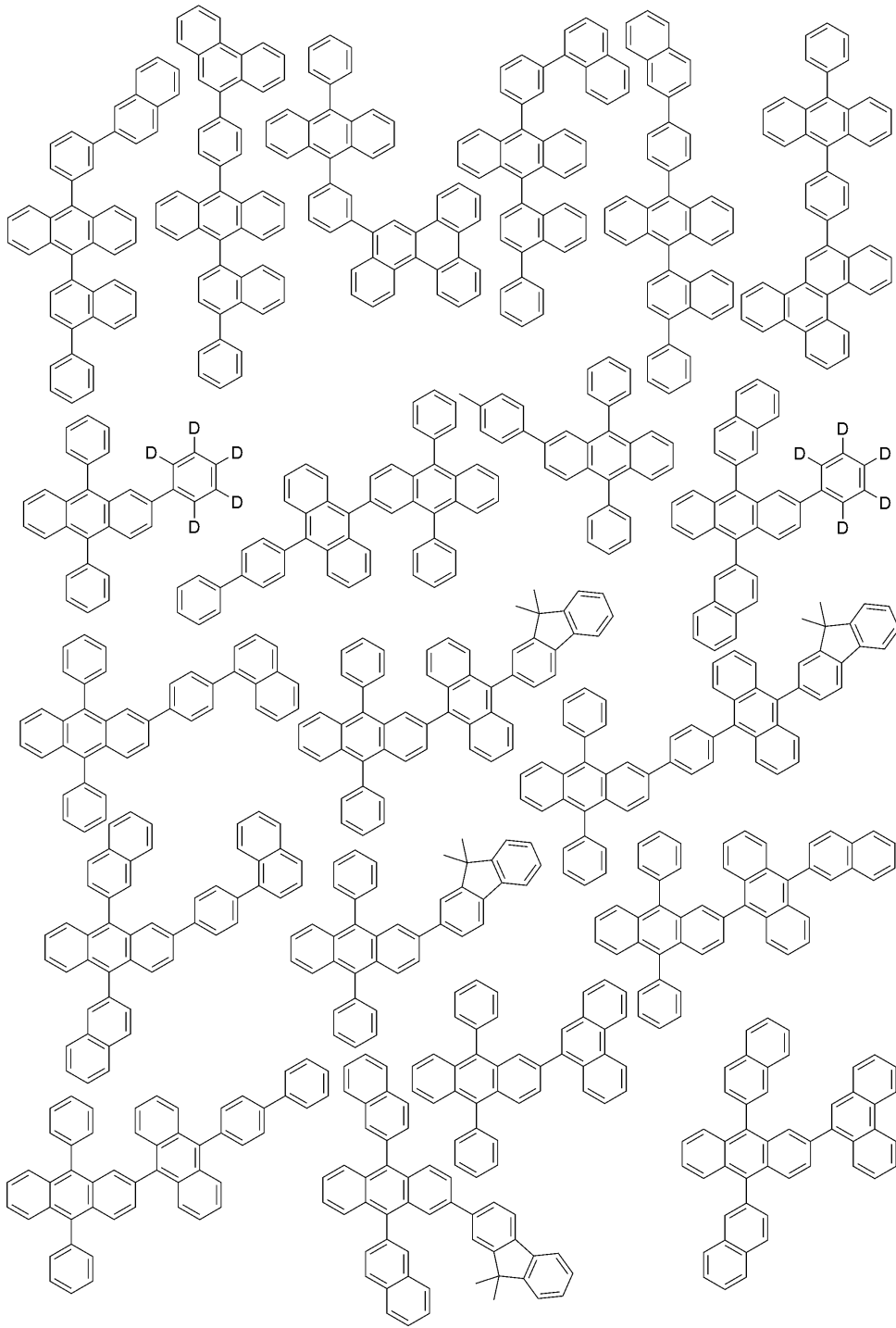
[0410]



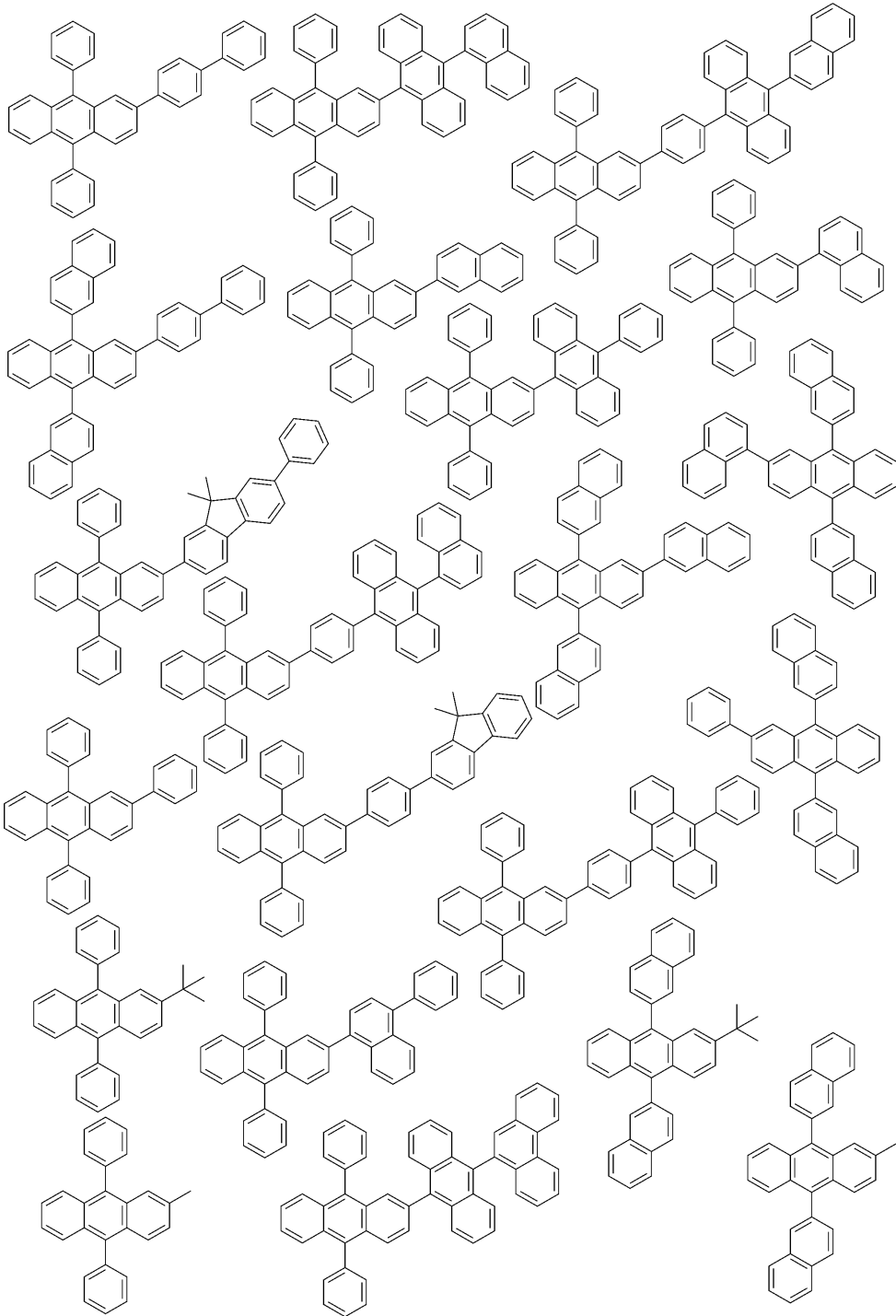
[0411]



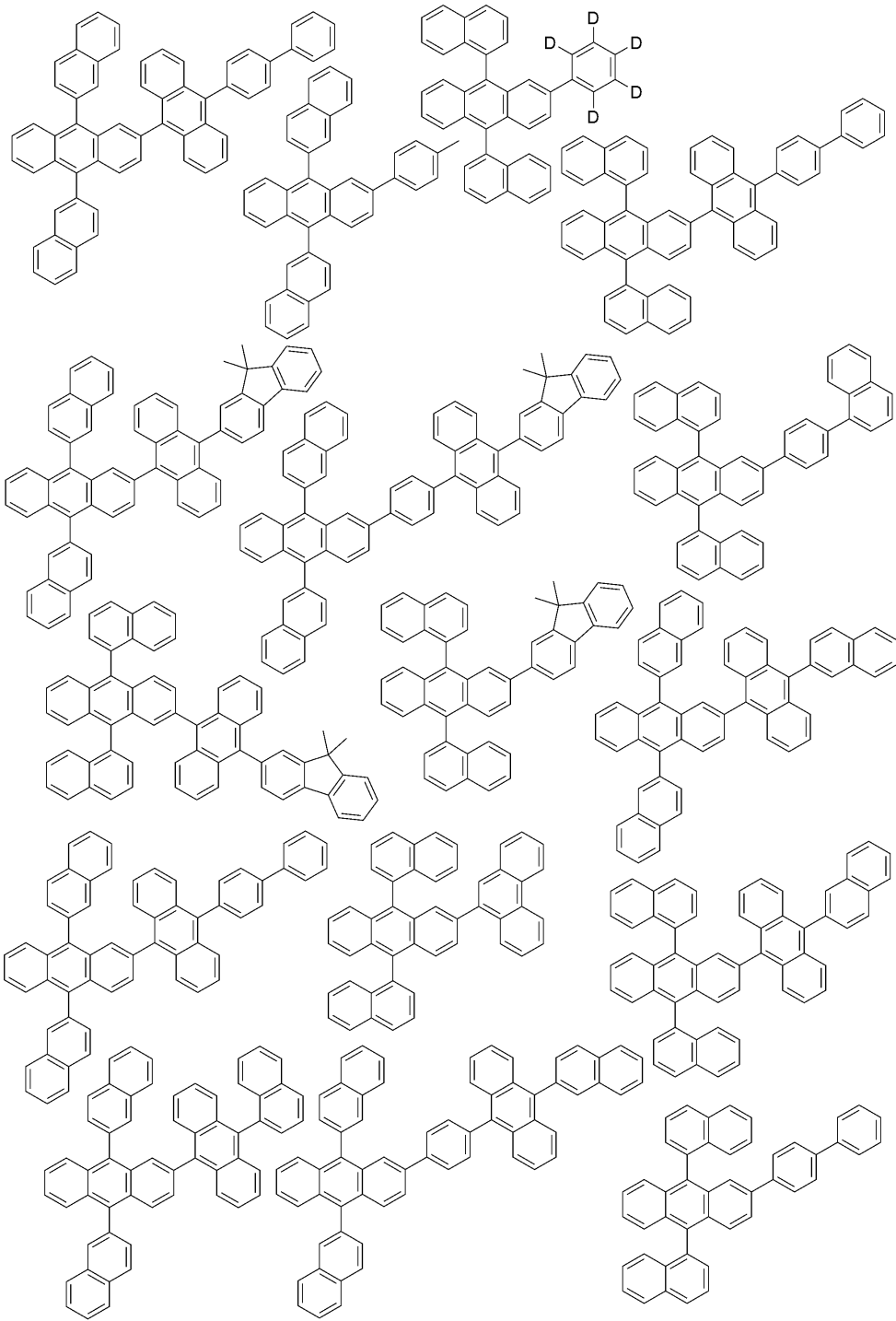
[0412]



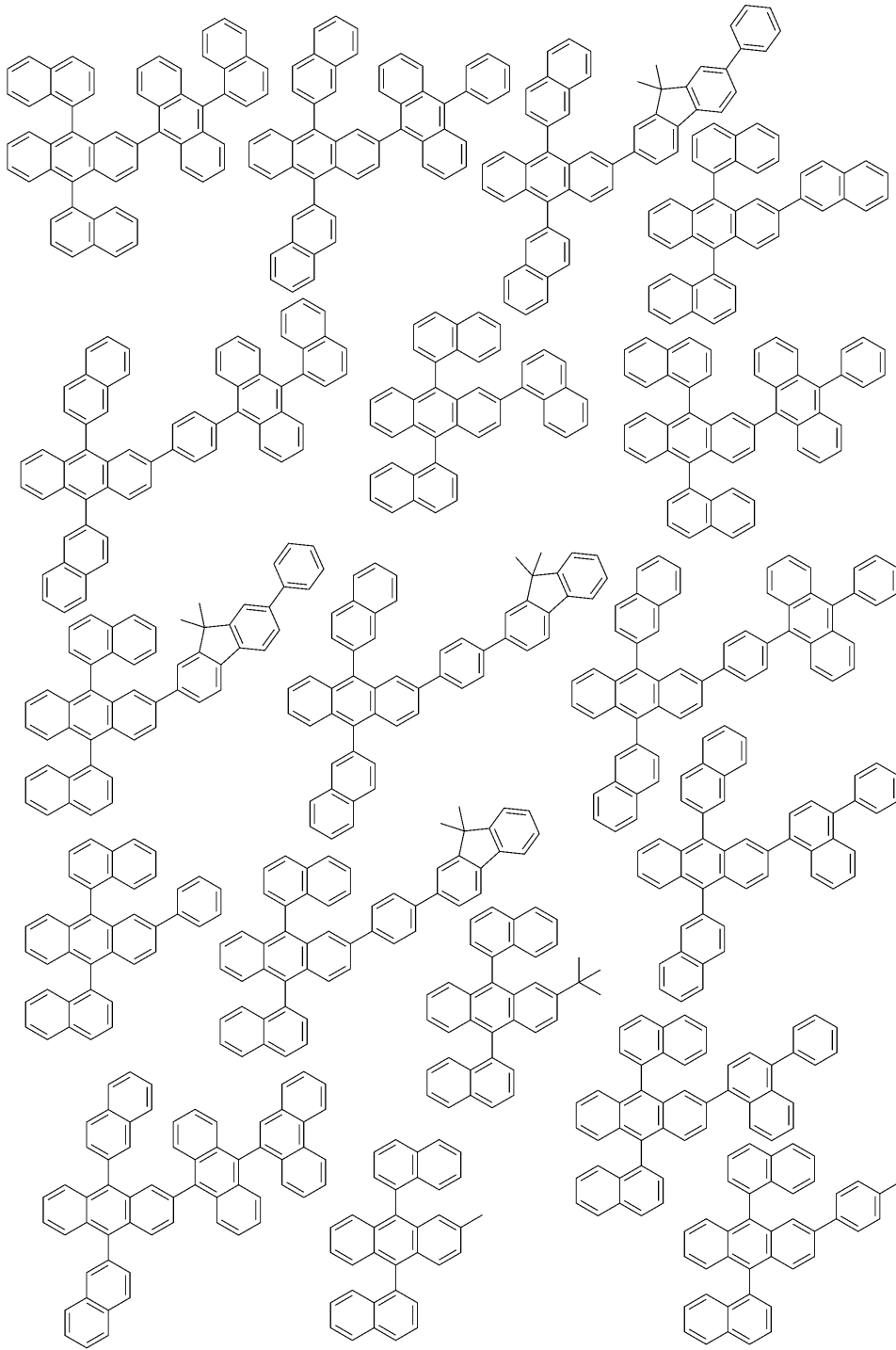
[0413]



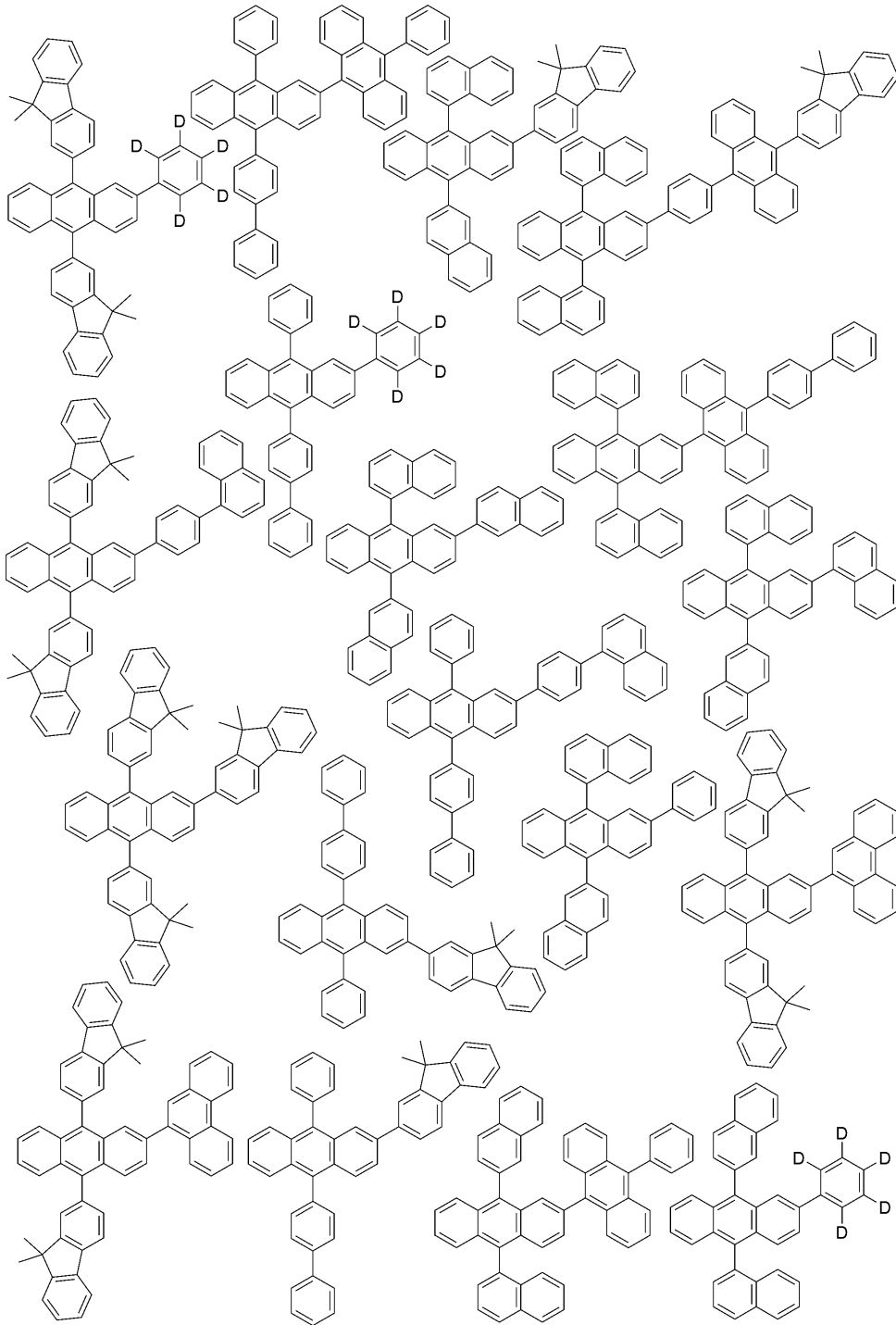
[0414]



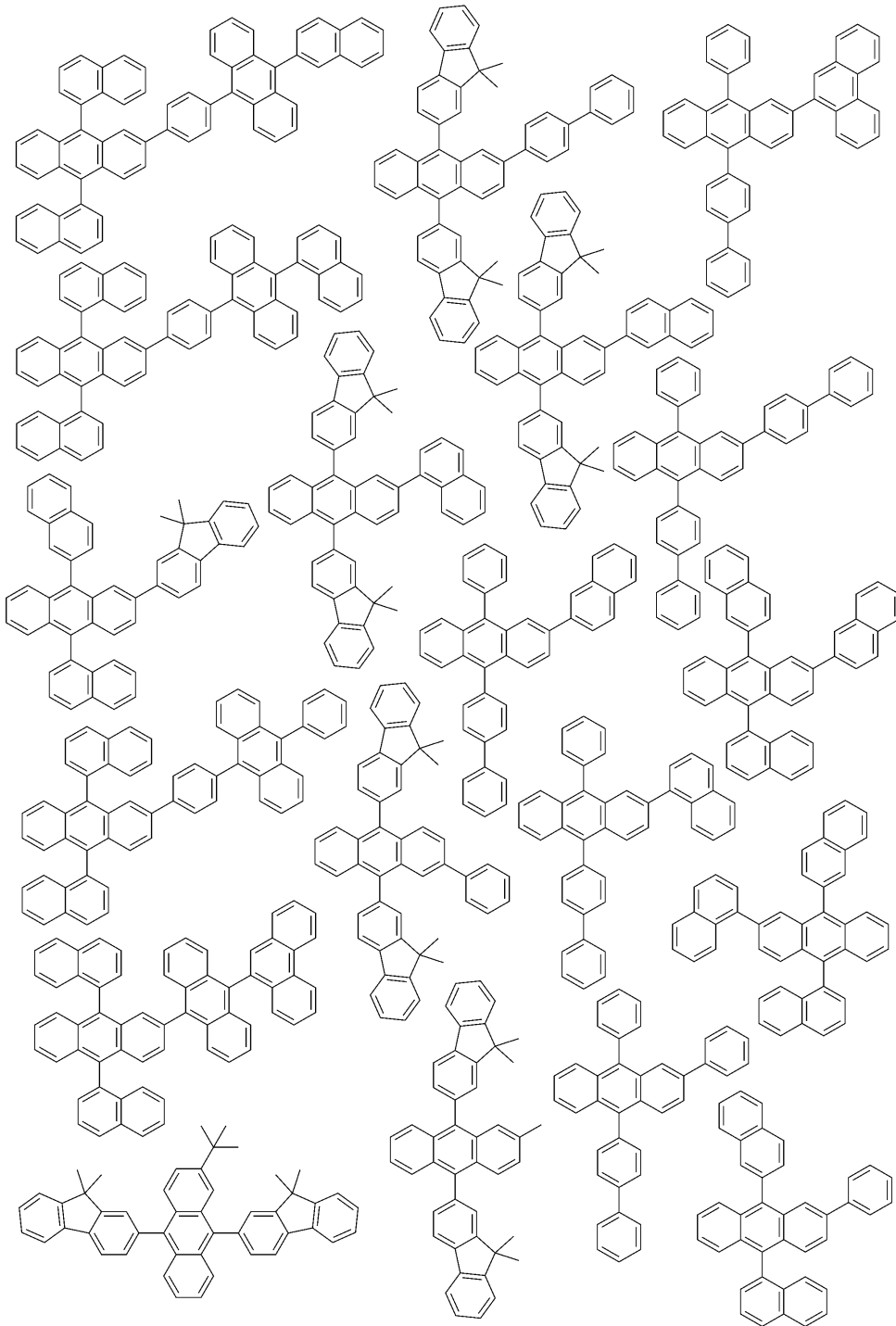
[0415]



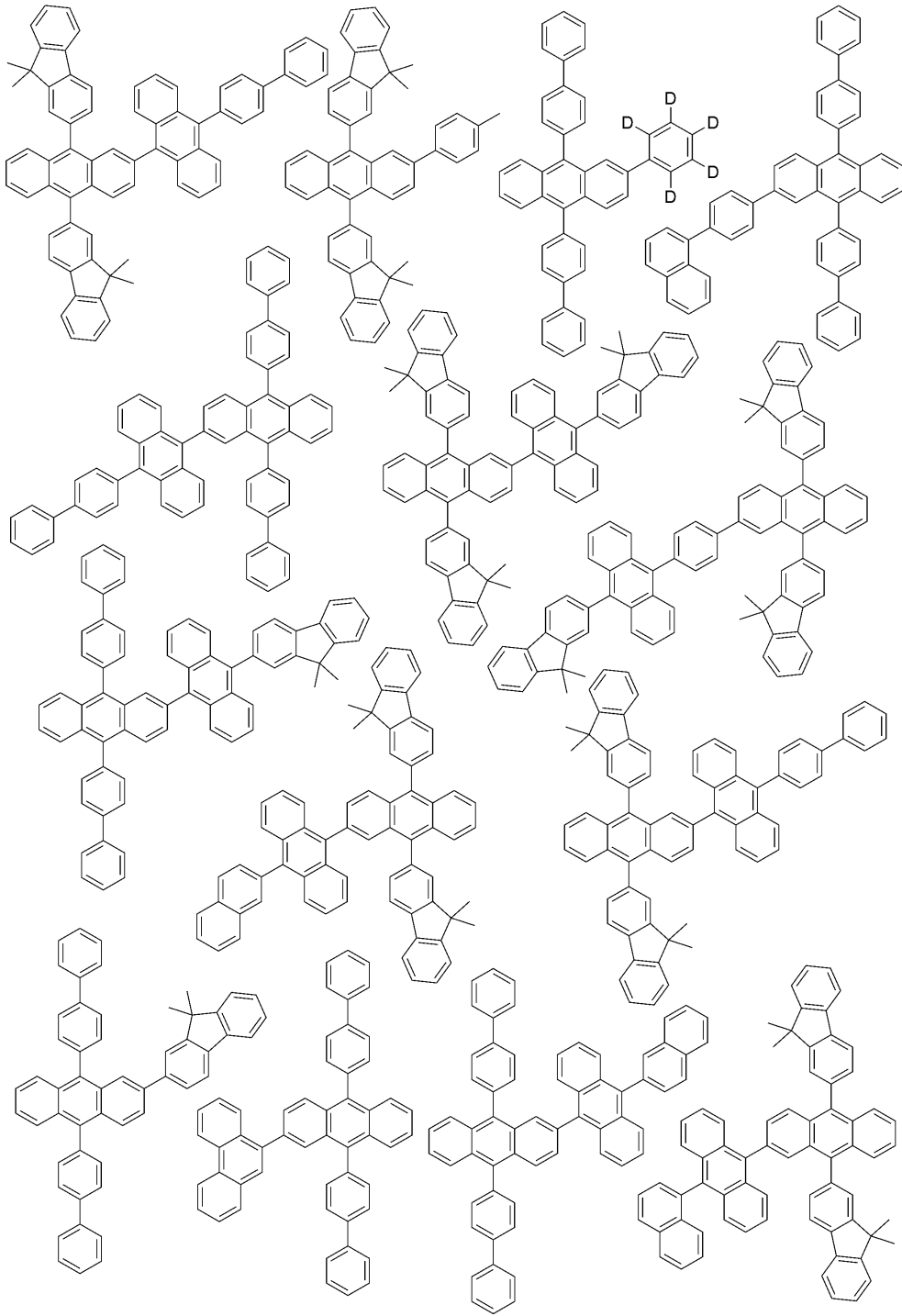
[0416]



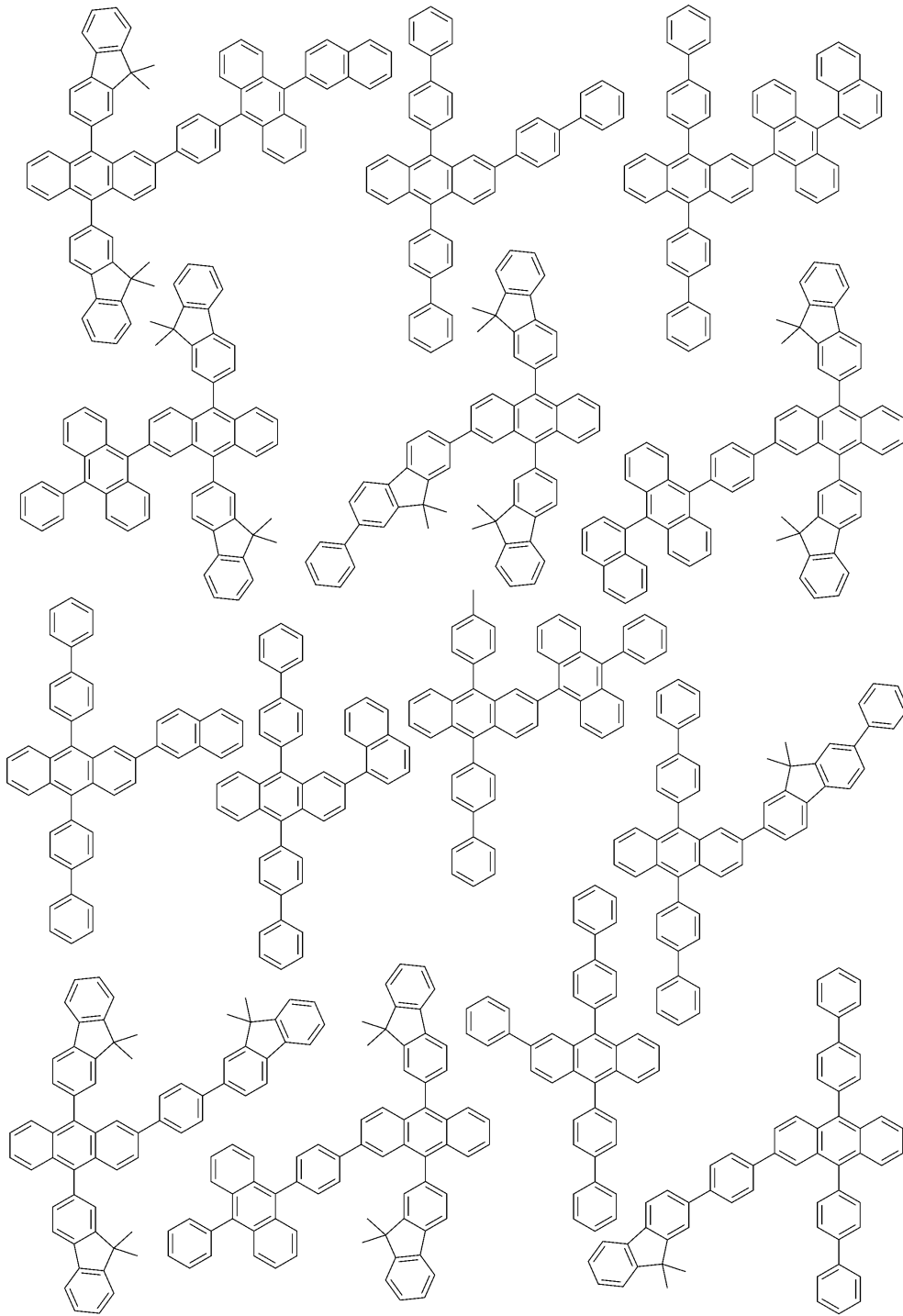
[0417]



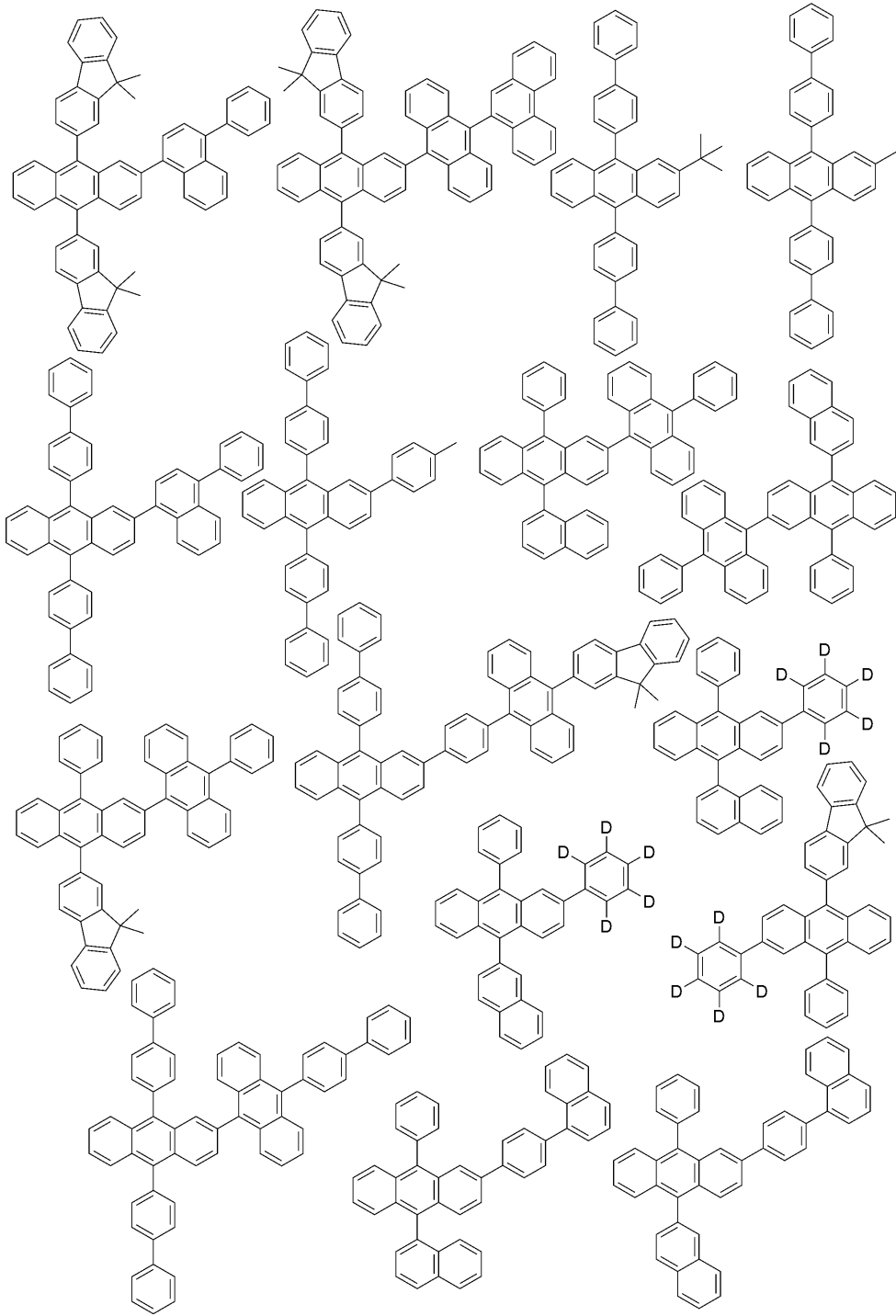
[0418]



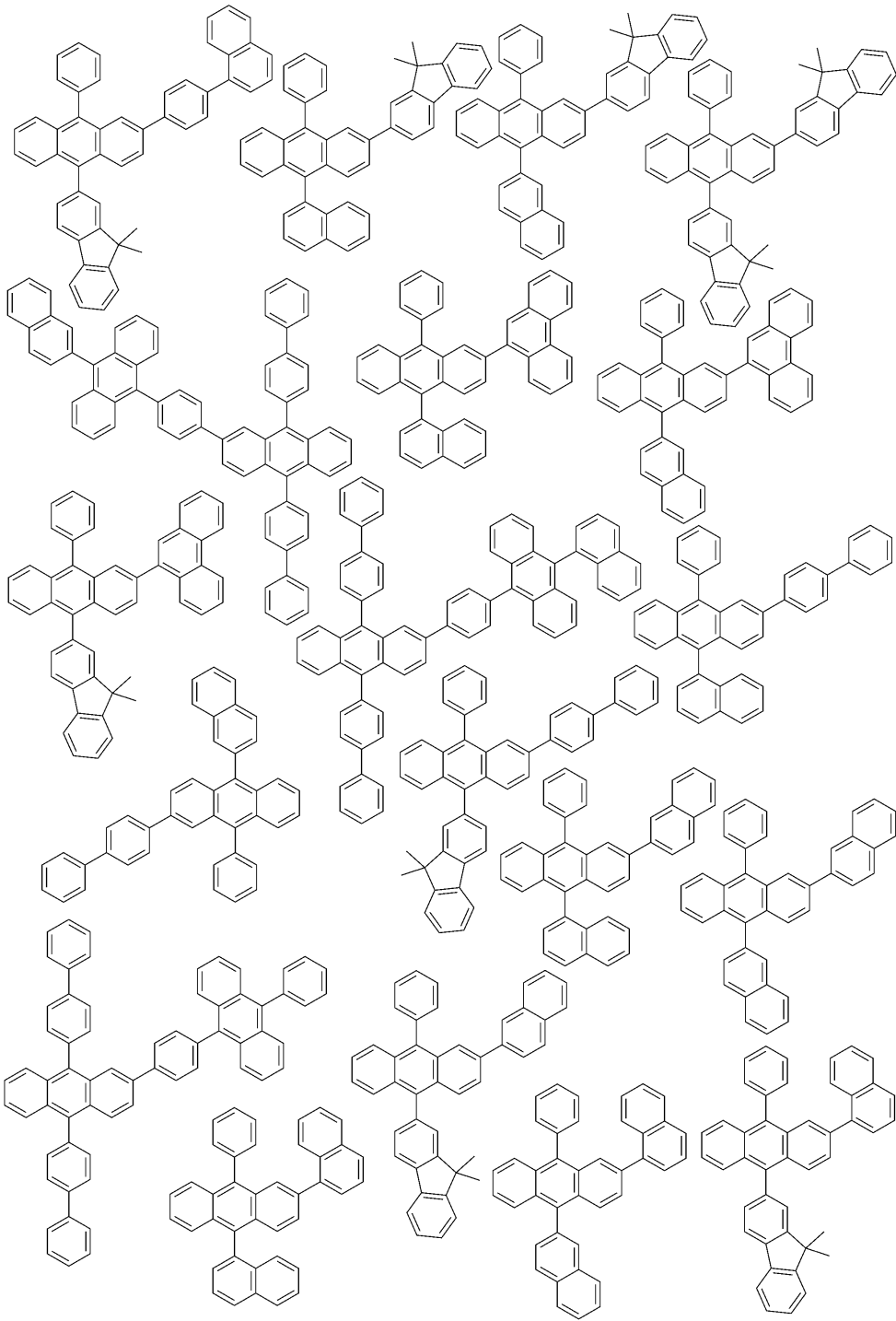
[0419]



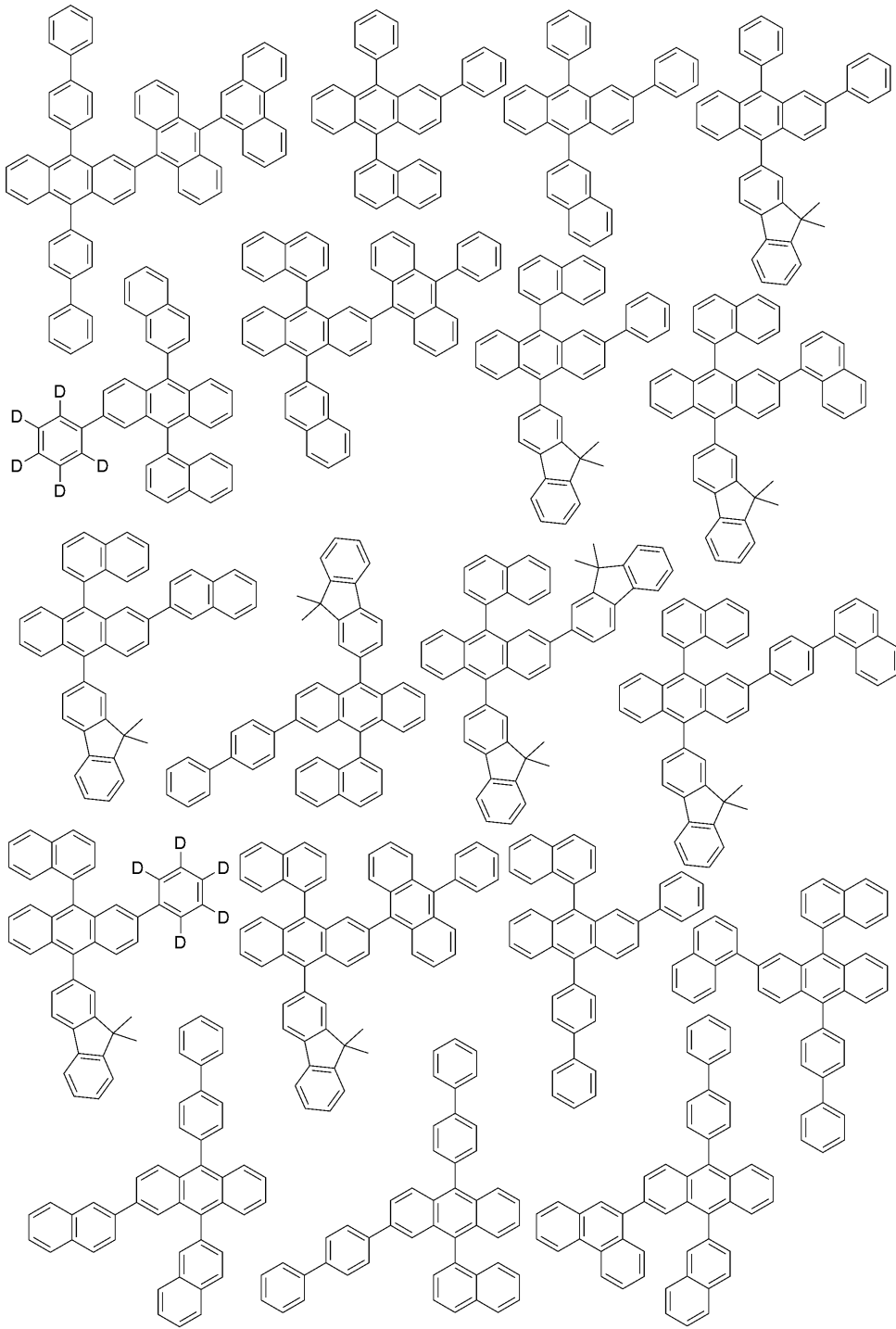
[0420]



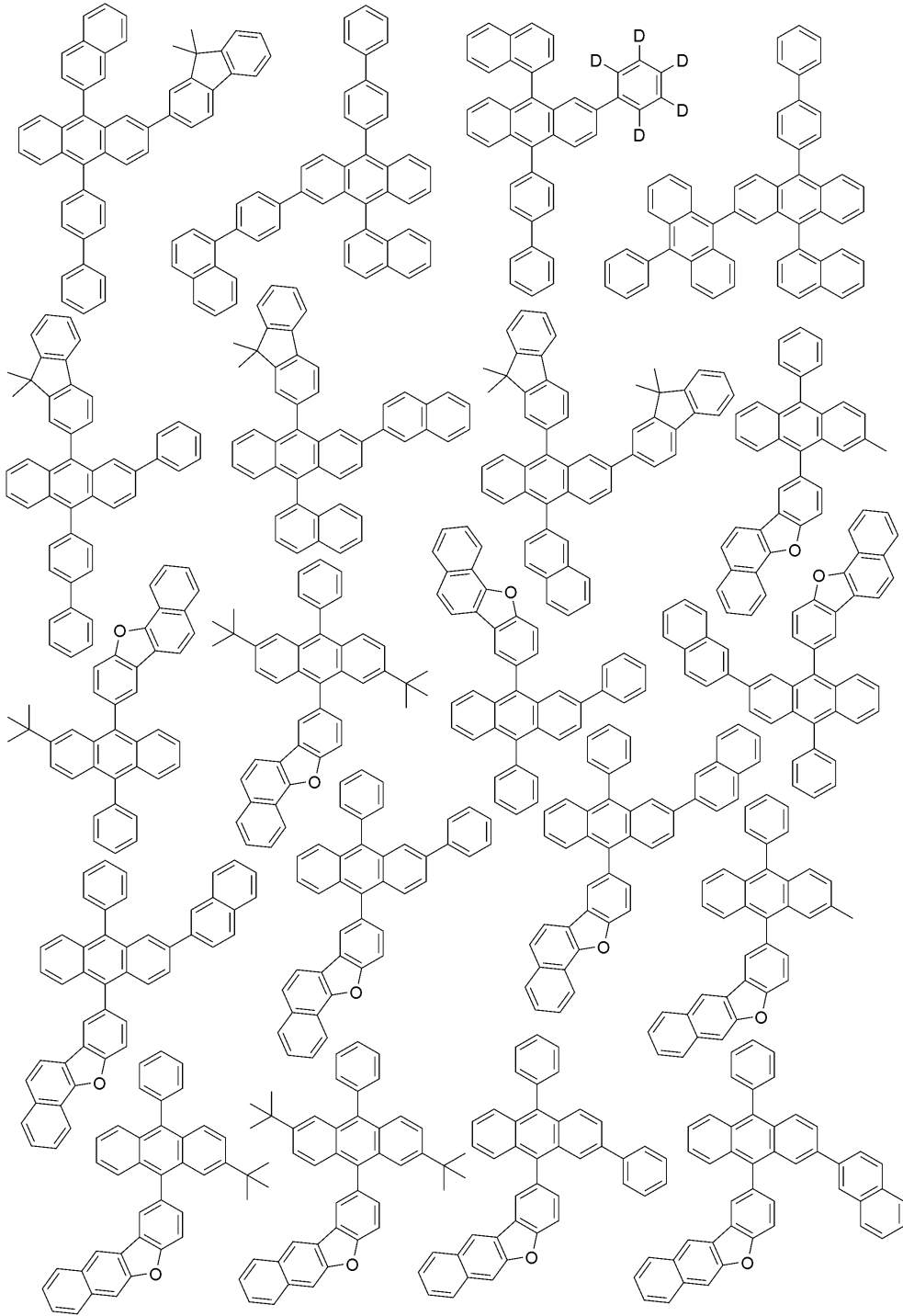
[0421]



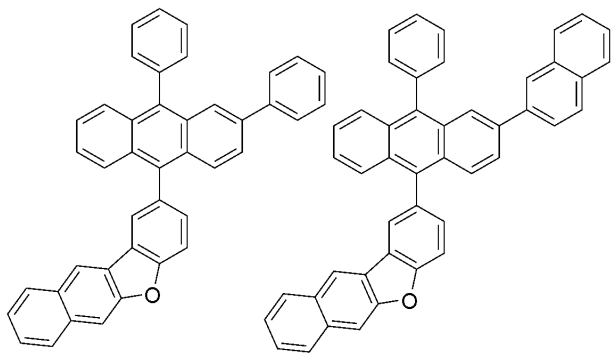
[0422]



[0423]



[0424]



[0425]

[0426] 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 조성물

[0427] 본 발명의 한 측면은 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명의 한 측면은 광전자 소자, 바람직하게는 OLED, 특히 상기 소자의 EML에서 상기 조성물의 용도에 관한 것이다.

[0428] 하기에서, 전술한 조성물을 설명할 때, 일부 경우에는 각각의 조성물 중 특정 물질의 함량을 백분율 형태로 언급한다. 특정 구현예에 대해 달리 언급하지 않는 한, 모든 백분율은 중량 백분율을 나타내며, 이는 중량 백분율 또는 중량 %((중량/중량), (w/w), 중량%와 동일한 의미를 갖는다는 점에 유의해야 한다). 예를 들어 특정 조성물에서 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의 함량이 예시적으로 30%라고 언급하는 경우, 이는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의(즉, 결합된 이들 분자 모두의) 총 중량이 30중량%, 즉 각각의 조성물의 총 중량의 30%를 차지하는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 성분의 바람직한 함량을 중량%로 제공함으로써 조성물이 특정 될 때마다, 모든 성분의 총 함량은 100중량%(즉, 조성물의 총 중량)까지 합산되는 것으로 이해된다.

[0429] 본 발명에 따른 유기 분자를 적어도 하나 포함하는 조성물에 관한 본 발명의 구현예를 설명하는 하기 설명에서, 광전자 소자, 바람직하게는 광전자 소자의 EML에서, 가장 바람직하게는 OLED의 EML에서 상기 조성물을 사용할 때 이들 조성물 내의 성분 사이에서 발생할 수 있는 에너지 전달 프로세스를 언급할 것이다. 당업자는 이러한 여기 에너지 전달 공정이 광전자 소자의 EML에서 조성물을 사용할 때 발광 효율을 향상시킬 수 있음을 이해한다.

[0430] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물을 기술할 때, 특정 물질이 다른 물질과 "다르다"는 점도 지적될 것이다. 이것은 서로 "다른"물질이 동일한 화학 구조를 갖지 않는다는 것을 의미한다.

[0431] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0432] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0433] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H<sup>B</sup>, 및

[0434] (c) 선택적으로 하나 이상의 용매.

[0435] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0436] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

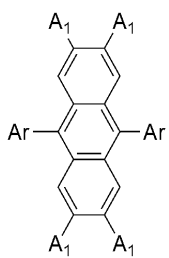
[0437] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H<sup>B</sup>,

[0438] 여기서 상기 조성물 중 호스트 물질 H<sup>B</sup>의 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 상기 조성물 중 호스트 물질 H<sup>B</sup>의 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 2배 보다 높다.

[0439] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0440] (a) 본 발명에 따른 유기 분자 0.1-30 중량%, 바람직하게는 0.8-15 중량%, 특히 1.5-5 중량%, 및

[0441] (b) 하기 화학식 (4)에 따른 호스트 물질 H<sup>B</sup>로서의 TTA 물질:



[0442] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:

[0444] (a) 본 발명에 따른 유기 분자, 및

[0445] (b) (a)의 유기 분자와 상이한 호스트 물질 H<sup>B</sup>,

[0446] (c) TADF 물질 E<sup>B</sup> 및/또는 인광 물질 P<sup>B</sup>.

- [0447] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0448] (a) 본 발명에 따른 유기 분자 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%, 및
- [0449] (b) 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 하나 이상의 호스트 물질 H<sup>B</sup> 0-98.8 중량%, 바람직하게는 35-94 중량%, 특히 60-88 중량%, 및
- [0450] (c) (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 인광 물질 P<sup>B</sup> 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-10 중량%, 특히 1-3 중량%, 및
- [0451] (d) (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 TADF 물질 E<sup>B</sup> 1-99.8 중량%, 바람직하게는 5-50 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [0452] (e) 하나 이상의 용매 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-59 중량%, 특히 0-28 중량%.
- [0453] 추가적인 측면에서, 본 발명은 본문에 기술된 유형의, 유기 분자 또는 조성물을 포함하는 광전자 소자, 특히 유기 발광 다이오드(OLED), 발광 전기화학 전지, OLED 센서, 특히 외부에서 밀폐되지 않은 가스 및 증기 센서, 유기 다이오드, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 전계 효과 트랜지스터, 유기 레이저 및 하향 변환 소자로 이루어진 군으로부터 선택되는 소자의 형태에 관한 것이다.
- [0454] 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC) 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된 소자이다.
- [0455] 본 발명의 광전자 소자의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자 E는 발광층 EML에서 발광 물질로서 사용된다.
- [0456] 본 발명의 광전자 소자의 일 구현예에서, 발광층 EML은 본문에 기술된 본 발명에 따른 조성물로 이루어진다.
- [0457] 상기 광전자 소자가 OLED인 경우, 예를 들어 다음과 같은 층 구조를 가질 수 있다:
- [0458] 1. 기판
- [0459] 2. 애노드층 A
- [0460] 3. 정공 주입층, HIL
- [0461] 4. 정공 수송층, HTL
- [0462] 5. 전자 저지층, EBL
- [0463] 6. 발광층, EML
- [0464] 7. 정공 저지층, HBL
- [0465] 8. 전자 수송층, ETL
- [0466] 9. 전자주입층, EIL
- [0467] 10. 캐소드층,
- [0468] 여기서 OLED는 HIL, HTL, EBL, HBL, ETL 및 EIL의 군으로부터 선택되는 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하며, 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각 층 유형의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있다.
- [0469] 또한, 일 구현예에서, 상기 광전자 소자는 예를 들어 수분, 증기 및/또는 가스를 포함하는 환경에서 유해한 종에 대한 손상을 일으키는 노출로부터 소자를 보호하는 하나 이상의 보호층(protective layer)을 선택적으로 포함할 수 있다.
- [0470] 본 발명의 일 구현예에서, 상기 광전자 소자는 다음의 역전된 층(inverted layer) 구조를 갖는 OLED이다:
- [0471] 1. 기판
- [0472] 2. 캐소드층
- [0473] 3. 전자주입층, EIL

- [0474] 4. 전자 수송층, ETL
- [0475] 5. 정공 저지층, HBL
- [0476] 6. 발광층, B
- [0477] 7. 전자 저지층, EBL
- [0478] 8. 정공 수송층, HTL
- [0479] 9. 정공 주입층, HIL
- [0480] 10. 애노드층 A

[0481] 여기서 OLED는 HIL, HTL, EBL, HBL, ETL 및 EIL의 군으로부터 선택되는 각각의 층을 단지 선택적으로 포함하며, 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각 층 유형의 하나 보다 많은 층을 포함할 수 있다.

[0482] 본 발명의 일 구현예에서, 상기 광전자 소자는 적층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다. 이 구조에서는 OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리, 개별 유닛이 서로 위에 쌓인다. 혼합광은 적층 구조를 나타내는 OLED에서 생성될 수 있으며, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있으며, 이는 일반적으로 2개의 OLED 서브유닛 사이에 위치하며 일반적으로 n-도핑 및 p-도핑 층으로 구성되며, 하나의 CGL의 n-도핑 층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한다.

[0483] 본 발명의 일 구현예에서, 상기 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이에 2개 이상의 발광층을 포함하는 OLED이다. 특히, 이러한 소위 탠덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 방출하고, 하나의 발광층은 녹색광을 방출하고, 하나의 발광층은 청색광을 방출하고, 선택적으로 개별 발광층 사이에 전하 생성층, 저지층 또는 수송층과 같은 추가적인 층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 탠덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층이 병합될 수 있다.

[0484] 상기 기판은 임의의 물질 또는 물질들의 조성물에 의해 형성될 수 있다. 가장 빈번하게는 유리 슬라이드가 기판으로서 사용된다. 대안적으로, 얇은 금속 층(예를 들어, 구리, 금, 은 또는 알루미늄 필름) 또는 플라스틱 필름이나 슬라이드가 사용될 수 있다. 이것은 더 높은 수준의 유연성(flexibility)을 허용할 수 있다. 애노드 층 A는 대부분 (실질적으로) 투명한 필름을 얻게 할 수 있는 물질로 이루어진다. OLED로부터의 발광을 허용하기 위해 두 전극 중 적어도 하나는 (실질적으로) 투명해야 하므로, 애노드 층 A 또는 캐소드 층 C 중 하나는 투명하다. 바람직하게는, 애노드 층 A는 투명 전도성 산화물(TCOs)을 다량 포함하거나 심지어 이로 이루어진다. 이러한 애노드 층 A는 예를 들어 인듐 주석 산화물, 알루미늄 아연 산화물, 불소 도핑된 주석 산화물, 인듐 아연 산화물, PbO, SnO, 지르코늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 바나듐 산화물, 텅스텐 산화물, 흑연, 도핑된 Si, 도핑된 Ge, 도핑된 GaAs, 도핑된 폴리아닐린, 도핑된 폴리피롤 및/또는 도핑된 폴리티오펜을 포함할 수 있다.

[0485] 애노드 층 A는 (실질적으로) 인듐 주석 산화물(ITO)(예를 들어,  $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$ )로 구성될 수 있다. 투명 전도성 산화물(TCO)로 인해 야기되는 애노드층(A)의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용함으로써 상쇄될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사(quasi) 전하 운반체(즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 운반체의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입 층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설포네이트(PSS),  $\text{MoO}_2$ ,  $\text{V}_2\text{O}_5$ , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT 및 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층(A)에서 정공 수송층(HTL)으로 금속이 확산되는 것을 방지할 수 있다. 예를 들면, HIL은 PEDOT:PSS(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜:폴리스티렌 설포네이트), PEDOT(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜), mMMDATA(4,4',4''-트리스[페닐(m-톨릴)아미노]트리페닐아민), 스피로-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4'-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-비스-(1-나프탈레닐)-N,N'-비스-페닐-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민), NPNPB(N,N'-디페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디페닐-아미노)페닐]벤지딘), MeO-TPD(N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘), HAT-CN(1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌-헥사카보나이트릴) 및/또는 스피로-NPD(N,N'-디페닐-N,N'-비스-(1-나프틸)-9,9'-스피로비플루오렌-2,7-디아민)으로 구성될 수 있다.

[0486] 애노드 층 A 또는 정공 주입 층(HIL)에 인접하여 일반적으로 정공 수송 층(HTL)이 위치한다. 여기에 임의의 정공 수송 화합물이 사용될 수 있다. 예를 들어, 트리아릴아민 및/또는 카바졸과 같은 전자가 풍부한 헤테로방향

족 화합물이 정공 수송 화합물로서 사용될 수 있다. HTL은 애노드층(A)과 발광층(EML) 사이의 에너지 장벽을 감소시킬 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 또한 전자 저지층(EBL)일 수 있다. 바람직하게는, 정공 수송 화합물은 비교적 높은 에너지 준위의 삼중항 상태 T1을 갖는다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 TCTA(트리스(4-카바졸일-9-일페닐)아민), poly-TPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), α-NPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), TAPC(4,4'-시클로헥실리덴-비스[N,N-비스(4-메틸페닐)벤젠아민]), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), Spiro-TAD, DNTPD, NPB, NPNPB, MeO-TPD, HAT-CN 및/또는 TrisPcz(9,9'-디페닐-6-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-9H,9'H-3,3'-비카바졸)와 같은 별 모양의 헤테로시클을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공-수송 매트릭스 내의 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑된 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이 금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄(F<sub>4</sub>-TCNQ), 구리-펜타플루오로벤조에이트(Cu(I)pFBz) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

[0487] EBL은 예를 들어 mCP(1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠), TCTA, 2-TNATA, mCBP(3,3-디(9H-카바졸-9-일)비페닐), tris-Pcz, CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), 및/또는 DCB(N,N'-디카바졸일-1,4-디메틸벤젠)를 포함할 수 있다.

[0488] 정공 수송층(HTL)에 인접하여, 전형적으로 발광층(EML)이 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 발광 분자를 포함한다. 특히, EML은 본 발명 E에 따른 적어도 하나의 발광 분자를 포함한다. 일 구현예에서, 발광층은 오직 본 발명에 따른 유기 분자만을 포함한다. 일반적으로 EML은 하나 이상의 호스트 물질 H을 추가로 포함한다. 예시적으로, 호스트 물질 H은 CBP(4,4'-비스-(N-카바졸일)-비페닐), mCP, mCBP, Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), CzSi, Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), DPEPO(비스[2-(디페닐포스피노)페닐]에테르 옥사이드), 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조퓨라닐)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)페닐]-9H-카바졸, T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5- 트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 중에서 선택된다. 호스트 물질 H은 일반적으로 상기 유기 분자의 제1 삼중항 상태(T1) 및 제1 단일항(S1) 에너지 준위 보다 에너지적으로 더 높은 제1 삼중항 상태(T1) 및 제1 단일항 상태(S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택된다.

[0489] 본 발명의 일 구현예에서, EML은 적어도 하나의 정공 지배적 호스트와 하나의 전자 지배적 호스트를 갖는 소위 혼합 호스트 시스템을 포함한다. 특정 구현예에서, EML은 정확히 하나의 본 발명에 따른 발광 유기 분자 및 전자 지배적 호스트로서 T2T 및 정공 지배적 호스트로서 CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조푸라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트를 포함하는 혼합 호스트 시스템을 포함한다. 추가적인 구현예에서 EML은 50-80 중량%, 바람직하게는 60-75 중량%의 CBP, mCP, mCBP, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조퓨란-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3-(디벤조티오펜-2-일)페닐]-9H-카바졸, 9-[3,5-비스(2-디벤조푸라닐)페닐]-9H-카바졸 및 9-[3,5-비스(2-디벤조티오페닐)페닐]-9H-카바졸로부터 선택된 호스트; 10-45 중량%, 바람직하게는 15-30 중량%의 T2T 및 5-40 중량%, 바람직하게는 10-30 중량%의 본 발명에 따른 발광 분자를 포함한다.

[0490] 발광층 EML과 인접하여 전자 수송층(ETL)이 위치할 수 있다. 여기에 임의의 전자 수송체가 사용될 수 있다. 예시적으로, 벤즈이미다졸, 피리딘, 트리아졸, 트리아진, 옥사디아졸(예를 들어, 1,3,4-옥사디아졸), 포스핀옥사이드 및 설폰과 같은 전자가 부족한 화합물이 사용될 수 있다. 전자 수송체는 또한 1,3,5-트리(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐(TPBi)과 같은 별 모양의 헤테로시클일 수 있다. ETL은 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq<sub>3</sub>(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐-포스핀옥사이드), BPyTP2(2,7-디(2,2'-비피리딘-5-일)트리페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), BmPyPhB(1,3-비스[3,5-디(피리딘-3-일)페닐]벤젠) 및/또는 BTB(4,4'-비스-[2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐)]-1,1'-비페닐)를 포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)은 또한 정공을 차단할 수 있거나 정공 저지층(HBL)이 도입된다.

[0491] HBL은 예를 들어 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 = 바토쿠프로인), BA1q(비스(8-히드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq<sub>3</sub>(알루미늄-트리스(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐포스핀옥사이드),

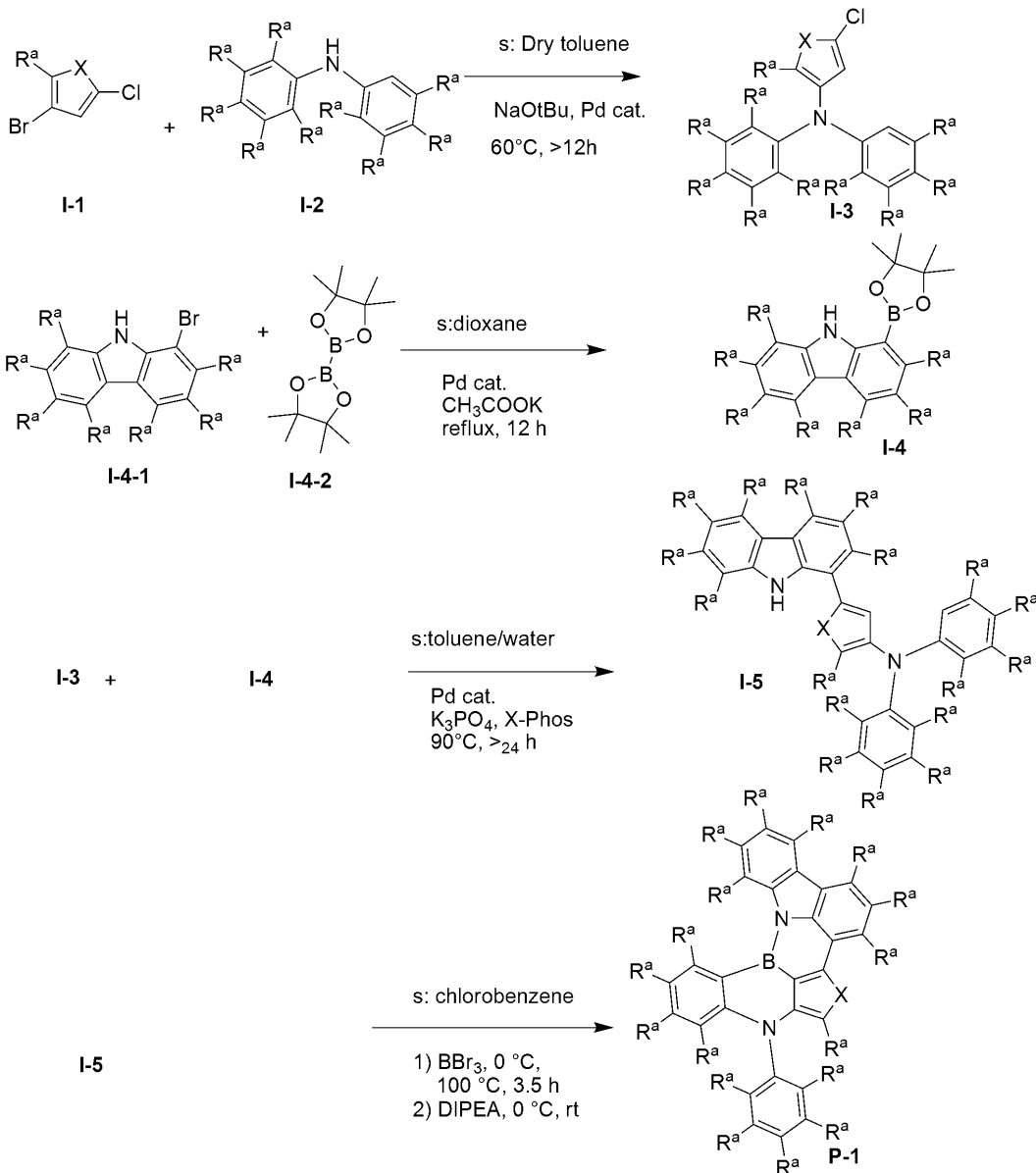
T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TCB/TCP(1,3,5-트리스(N-카바졸일)벤졸/1,3,5-트리스(카바졸)-9-일)벤젠)을 포함할 수 있다.

- [0492] 전자 수송층(ETL)에 인접하여 캐소드층 C가 위치할 수 있다. 캐소드층 C는 예를 들어 금속(예를 들어, Al, Au, Ag, Pt, Cu, Zn, Ni, Fe, Pb, LiF, Ca, Ba, Mg, In, W 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이들로 이루어질 수 있다. 실용적인 이유로 캐소드층은 또한 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (실질적으로) 불투명한 금속으로 구성될 수 있다. 대안적으로 또는 추가적으로, 캐소드층 C는 또한 흑연 및/또는 탄소 나노튜브(CNT)를 포함할 수 있다. 대안적으로, 캐소드층 C는 또한 나노스케일의 은 와이어로 구성될 수 있다.
- [0493] OLED는 선택적으로 전자 수송층(ETL)과 캐소드층(C) 사이에 보호층(전자 주입층(EIL)으로 지칭될 수 있음)을 추가로 포함할 수 있다. 이 층은 불화리튬, 불화세슘, 은, Liq(8-히드록시퀴놀리놀라토 리튬), Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.
- [0494] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 저지층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 화합물 H을 포함할 수 있다.
- [0495] 발광층 EML의 발광 스펙트럼 및/또는 흡수 스펙트럼을 추가로 변경하기 위해, 발광층 EML은 하나 이상의 추가 에미터 분자 F를 더 포함할 수 있다. 이러한 에미터 분자 F는 당업계에 공지된 임의의 에미터 분자일 수 있다. 바람직하게는 이러한 에미터 분자 F는 본 발명에 따른 분자 E의 구조와 상이한 구조를 갖는 분자이다. 에미터 분자 F는 선택적으로 TADF 에미터일 수 있다. 대안적으로, 에미터 분자 F는 선택적으로 발광층 EML의 발광 스펙트럼 및/또는 흡수 스펙트럼을 이동시킬 수 있는 형광 및/또는 인광 에미터 분자일 수 있다. 예를 들어, 삼중항 및/또는 단일항 엑시톤은 유기 분자에 의해 방출된 빛과 비교하여 일반적으로 적색 편이된 빛을 방출함으로써 바닥 상태 S<sub>0</sub>로 완화되기 전에 본 발명에 따른 유기 에미터 분자로부터 에미터 분자 F로 전달될 수 있다. 선택적으로, 에미터 분자 F는 또한 2광자 효과(즉, 흡수 최대 에너지의 절반의 2광자의 흡수)를 유발할 수 있다.
- [0496] 선택적으로, 광전자 소자(예를 들어, OLED)는 예를 들어 실질적으로 백색 광전자 소자일 수 있다. 예를 들어, 이러한 백색 광전자 소자는 적어도 하나의 (심)청색 에미터 분자 및 녹색 및/또는 적색 광을 방출하는 하나 이상의 에미터 분자를 포함할 수 있다. 그런 다음, 전술한 바와 같이 2개 이상의 분자 사이에 선택적으로 에너지 투과율이 있을 수도 있다.
- [0497] 본 명세서에 사용된 바와 같이, 특정 문단에서 보다 구체적으로 정의되지 않은 경우, 방출 및/또는 흡수된 광의 색상 지정은 다음과 같다:
- [0498] 보라색: >380-420 nm의 파장 범위;
- [0499] 심청색: >420-480 nm의 파장 범위;
- [0500] 하늘색: >480-500 nm의 파장 범위;
- [0501] 녹색: >500-560 nm의 파장 범위;
- [0502] 황색: >560-580 nm의 파장 범위;
- [0503] 주황색: >580-620 nm의 파장 범위;
- [0504] 적색: >620-800 nm의 파장 범위.
- [0505] 에미터 분자와 관련하여 이러한 색상은 최대 발광을 나타낸다. 따라서 예를 들어 심청색 에미터는 >420-480nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 하늘색 에미터는 >480-500nm 범위에서 최대 발광을 가지며, 녹색 에미터는 >500-560nm 범위에서 최대 발광을 갖고, 적색 에미터는 >620-800nm 범위에서 최대 발광을 갖는다.
- [0506] 심청색 에미터는 바람직하게는 480 nm 미만, 더 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만의 최대 발광을 가질 수 있다. 그것은 일반적으로 420 nm 초과, 바람직하게는 430 nm 초과, 보다 바람직하게는 440 nm 초과 또는 심지어 450 nm 초과일 것이다.
- [0507] 녹색 에미터는 560nm 미만, 보다 바람직하게는 550nm 미만, 보다 더 바람직하게는 545nm 미만 또는 심지어 540nm 미만의 최대 발광을 갖는다. 이는 전형적으로 500 nm 초과, 더 바람직하게는 510 nm 초과, 훨씬 더 바람직하게는 515 nm 초과 또는 심지어 520 nm 초과일 것이다.

- [0508] 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은  $1000\text{cd/m}^2$ 에서 8% 초과, 더 바람직하게는 10% 초과, 더 바람직하게는 13% 초과, 더욱 더 바람직하게는 15% 초과 또는 심지어 20% 초과와 외부 양자 효율 및/또는 420 nm 내지 500 nm, 바람직하게는 430 nm 내지 490 nm, 더 바람직하게는 440 nm 내지 480 nm, 훨씬 더 바람직하게는 450 nm 내지 470 nm의 최대 발광을 나타내고/나타내거나  $500\text{cd/m}^2$ 에서 100h 초과, 바람직하게는 200h 초과, 더 바람직하게는 400h 초과, 훨씬 더 바람직하게는 750h 초과 또는 심지어 1000h 초과와 LT80 값을 나타내는 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.45 미만, 바람직하게는 0.30 미만, 더 바람직하게는 0.20 미만, 보다 더 바람직하게는 0.15 미만 또는 심지어 0.10 미만의 CIEy 색 좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.
- [0509] 본 발명의 추가적인 측면은 분명한 색점에서 빛을 방출하는 OLED에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, OLED는 좁은 발광 대역(작은 FWHM(full width at half maximum))으로 발광한다. 일 측면에서, 본 발명에 따른 OLED는 0.25eV 미만, 바람직하게는 0.20eV 미만, 보다 바람직하게는 0.17eV 미만, 보다 더 바람직하게는 0.15eV 미만 또는 심지어 0.13eV 미만의 주 발광 피크의 FWHM으로 발광한다.
- [0510] 본 발명의 추가적인 측면은 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에서 정의된 원 청색(CIEx = 0.131 및 CIEy = 0.046)의 CIEx(=0.131) 및 CIEy(=0.046) 색좌표에 가까운 CIEx 및 CIEy 색좌표의 빛을 발광하고, 따라서 UHD(Ultra High Definition) 디스플레이(예: UHD-TV)에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서, 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 더 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 보다 바람직하게는 0.08 내지 0.18 또는 심지어 0.10 내지 0.15 사이의 CIEx 색좌표 및/또는 0.00 내지 0.45, 바람직하게는 0.01 내지 0.30, 보다 바람직하게는 0.02 내지 0.20 또는 훨씬 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 또는 심지어 0.04 내지 0.10의 CIEy 색좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.
- [0511] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 상기 조성물은 실온에서 20% 초과, 바람직하게는 30% 초과, 더욱 바람직하게는 35% 초과, 더욱 바람직하게는 40% 초과, 더욱 바람직하게는 45% 초과, 보다 바람직하게는 50% 초과, 보다 바람직하게는 55% 초과, 더욱 더 바람직하게는 60% 초과 또는 심지어 70% 초과와 광발광 양자 수율(PLQY)을 갖는다.
- [0512] 추가적인 측면에서, 본 발명은 광전자 부품을 생산하는 방법에 관한 것이다. 이 경우 본 발명의 유기 분자가 사용된다.
- [0513] 추가적인 측면에서, 본 발명은 하기 단계들을 포함하는 440 nm 내지 470 nm의 파장 영역의 빛을 생산하는 방법에 관한 것이다:
- [0514] (i) 본 발명의 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제공하는 단계 및
- [0515] (ii) 상기 광전자 소자에 전류를 인가하는 단계.
- [0516] 광전자 소자, 특히 본 발명에 따른 OLED는 임의의 수단의 기상 증착 및/또는 액체 처리에 의해 제조될 수 있다. 따라서, 적어도 하나의 층은
- [0517] - 승화 공정에 의해 제조되거나,
- [0518] - 유기 기상 증착 공정에 의해 제조되거나,
- [0519] - 캐리어 가스 승화 공정에 의해 제조되거나,
- [0520] - 용액 처리 또는 인쇄에 의해 제조될 수 있다.
- [0521] 본 발명에 따른 광전자 소자, 특히 OLED를 제조하는데 사용되는 방법은 당업계에 공지되어 있다. 상이한 층은 후속 증착 공정에 의해 개별적으로 및 연속적으로 적합한 기판 상에 증착된다. 개별 층은 동일하거나 상이한 증착 방법을 사용하여 증착될 수 있다.
- [0522] 예를 들어, 기상 증착 공정은 열적(공)증발, 화학적 기상 증착 및 물리적 기상 증착을 포함한다. 액티브 매트릭스 OLED 디스플레이의 경우 AMOLED 백플레인도 기판으로 사용된다. 개별 층은 적절한 용매를 사용하는 용액 또는 분산액으로부터 처리될 수 있다. 예를 들어, 용액 침착 공정은 스핀 코팅, 딥 코팅 및 제트 프린팅을 포함한다. 액체 처리는 선택적으로 불활성 분위기(예: 질소 분위기)에서 수행될 수 있으며 용매는 최신 기술에 알려진 수단에 의해 완전히 또는 부분적으로 제거될 수 있다.
- [0523] 실시예

[0524] 일반 합성 방식 I

X= O or S



[0525]

[0526] 합성을 위한 일반 절차:

[0527] **AAV1:** I-1(1.0당량; 예를 들어, 3-브로모-5-클로로-2-메틸티오펜, CAS 61074-71-3), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0)(0.02당량; CAS 51364-51-3), 트리-tert-부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트(0.09 당량; CAS 131274-22-1) 및 나트륨 tert-부톡사이드(2.0 당량; CAS 865-48-5)를 플라스크에 충전하였다. 톨루엔에 용해된 건조 톨루엔 및 I-2(1.0 당량; 예를 들어, 비스(4-tert-부틸페닐)아민, CAS 4627-22-9)를 상기 혼합물에 첨가하였다. 상기 혼합물을 60°C에서 12시간 이상 교반하였다. 냉각시킨 후, 혼합물에 물을 첨가하고 상을 분리하고 수분층을 추출하였다. 합쳐진 유기층을 수집하고, MgSO<sub>4</sub>로 건조시키고, Celite®(kieselguhr) 및 목탄으로 처리하고, 1시간 동안 교반하고, 실리카패드를 통해 여과하였다. 상기 용매를 완전히 제거하여 I-3을 얻었다.

[0528] **AAV1-2:** I-4-1(1.0 당량), I-4-2(1.7당량), [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]팔라듐(II)디클로라이드(0.02당량, CAS-72287-26-4) 및 아세트산 칼슘(CAS-No. 127-08-2, 4.5 당량)의 현탁액을 건조 디옥산 중에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 냉각시킨 후 혼합물에 물을 첨가하여 물과 디옥산 사이에서 추출하였다. 합쳐진 유기층을 물로 세척하고 목탄/셀라이트/MgSO<sub>4</sub>로 처리하고 여과하고 농축하였다.

[0529] **AAV2:** 톨루엔과 물의 탈기 혼합물(10:3 부피) 내의 I-3(1.0당량), I-4(1.2당량), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔

라듐(0)(0.01당량; Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>; CAS-No. 51364-51-3), X-Phos(0.04 당량, CAS No. 564483-18-7) 및 K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(CAS No. 7778-53-2, 2.0 당량) 현탁액을 90℃에서 24시간 이상 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후 수성 워크업을 수행한 후, 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피를 통해 미정제 생성물을 정제하였다. 목표 화합물 I-5를 고체로 얻었다.

[0530] **AAV3:** 0 °C에서 건조 클로로벤젠(I-5 1mmol당 35mL) 내의 I-5(1.0당량) 용액에 삼브롬화붕소(99%, CAS No. 10294-33-4, 4.0 당량)를 첨가하였다. 혼합물을 실온으로 가온한 후, 70℃에서 3.5시간 동안 가열하였다. 상기 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 이어서, 혼합물을 물과 에틸 아세테이트 사이에서 추출하고, 합쳐진 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시키고, 여과하고 농축시켰다. 재결정 또는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 고체 형태의 화합물 P-1을 얻었다.

[0531] 순환 전압전류법

[0532] 순환 전압전류도가 디클로로메탄 또는 적합한 용매 및 적합한 지지 전해질(예: 0.1mol/L의 테트라부틸암모늄 헥사플루오로포스페이트) 내에서 상기 유기 분자의 농도가 10<sup>-3</sup> mol/L인 용액에서 측정된다. 측정은 3전극 조립체(작업 및 상대 전극: Pt 와이어, 기준 전극: Pt 와이어)를 사용하여 질소 분위기에서 실온에서 수행하고, 내부 표준으로서 FeCp<sub>2</sub>/FeCp<sub>2</sub><sup>+</sup>를 사용하여 보정한다. HOMO 데이터는 포화 칼로멜 전극(SCE)에 대한 내부 표준으로서 페로센을 사용하여 교정되었다.

[0533] 밀도 범함수 이론 계산

[0534] 분자 구조가 BP86 범함수 및 RI(Resolution of identity) 접근법을 사용하여 최적화된다. 여기 에너지는(BP86) 최적화된 구조를 사용하고 시간의존 DFT(Time-Dependent DFT, TD-DFT) 방법을 채용하여 계산된다. 궤도 및 여기 상태 에너지는 B3LYP 범함수로 계산된다. Def2-SVP 기본 세트 및 수치 적분을 위한 m4-grid가 사용된다. Turbomole 프로그램 패키지가 모든 계산에 사용된다.

[0535] 광물리적 측정

[0536] 시료 전처리: 스핀 코팅

[0537] 장치: Spin150, SPS euro.

[0538] 시료 농도는 10 mg/ml이고, 적절한 용매에 용해된다.

[0539] 프로그램: 1) 400U/min에서 3초; 1000Upm/s으로 1000U/min에서 20초. 3) 1000Upm/s으로 4000U/min에서 10초. 코팅 후, 필름은 70℃에서 1분 동안 건조된다.

[0540] 광발광 분광법 및 시간 상관 단일 광자 계수(TCSPC)

[0541] 정상 상태 발광 분광법은 150W Xenon-Arc 램프, 여기 및 발광 모노크로메이터, Hamamatsu R928 광전자 증배관 및 시간 상관 단일 광자 계수 옵션이 장착된 Horiba Scientific, Model FluoroMax-4로 측정된다. 발광 및 여기 스펙트럼은 표준 보정 맞춤을 사용하여 수정된다.

[0542] 여기 상태 수명은 FM-2013 장비 및 Horiba Yvon TCSPC 허브와 함께 TCSPC 방법을 사용하는 동일한 시스템을 사용하여 결정된다.

[0543] 여기 소스:

[0544] NanoLED 370(파장: 371nm, 펄스 지속 시간: 1.1ns)

[0545] NanoLED 290(파장: 294nm, 펄스 지속 시간: <1ns)

[0546] SpectraLED 310(파장: 314nm)

[0547] SpectraLED 355(파장: 355nm).

[0548] 데이터 분석(지수 맞춤)은 소프트웨어 제품군 DataStation 및 DAS6 분석 소프트웨어를 사용하여 수행된다. 적당한 카이제곱 검정을 사용하여 지정된다.

[0549] 광발광 양자 수율 측정

[0550] 광발광 양자 수율(PLQY) 측정을 위해 Absolute PL 양자 수율 측정 C9920-03G 시스템(Hamamatsu Photonics)이 사용된다. 양자 수율 및 CIE 좌표는 소프트웨어 U6039-05 버전 3.6.0을 사용하여 결정된다.

[0551] 최대 발광은 nm로, 양자 수율  $\Phi$ 은 %로, CIE 좌표는 x,y 값으로 표시된다.

[0552] PLQY는 다음의 프로토콜을 사용하여 결정된다.

[0553] 1) 품질 보증: (알려진 농도의) 에탄올 중 안트라센이 기준(reference)으로서 사용된다.

[0554] 2) 여기 파장: 유기 분자의 최대 흡수가 결정되고, 이 파장을 사용하여 분자가 여기된다.

[0555] 3) 측정

[0556] 양자 수율은 질소 분위기 하에서 용액 또는 필름 샘플에 대해서 측정된다. 수율은 다음 방정식을 사용하여 계산된다.

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

[0557] 여기서  $n_{\text{광자}}$ 은 광자 수를 나타내고 Int는 강도를 나타낸다.

[0559] **광전자 소자의 제조 및 특징화**

[0560] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 특히 OLED 소자는 진공 증착 방법을 통해 제조될 수 있다. 층이 하나보다 많은 화합물을 포함하는 경우, 하나 이상의 화합물의 중량 백분율은 %로 표시된다. 총 중량 백분율은 100%가 되므로, 값이 지정되지 않은 경우 이 화합물의 분율은 지정된 값과 100% 간의 차이와 같다.

[0561] 완전히 최적화되지 않은 OLED가 표준 방법을 사용하여, 전계발광 스펙트럼 및 광다이오드에 의해 검출된 광을 사용하여 계산된 세기 및 전류에 의존하는 외부 양자 효율(%)을 측정하여 특징화된다. OLED 소자의 수명은 일정한 전류 밀도에서 동작하는 동안 휘도의 변화로부터 추출된다. LT50 값은 측정 휘도가 초기 휘도의 50%로 감소한 시간에 해당하고, 유사하게 LT80은 측정 휘도가 초기 휘도의 80%로 감소한 시점에 해당하고, LT95는 측정 휘도가 초기 휘도의 95%로 감소한 시점에 해당하는 등이다.

[0562] 가속 수명 측정이 수행된다(예: 증가된 전류 밀도가 적용됨). 예를 들어,  $500\text{cd/m}^2$ 에서 LT80 값은 다음의 식을 사용하여 결정된다.

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

[0563] 여기서  $L_0$ 는 인가된 전류 밀도에서의 초기 휘도를 나타낸다.

[0565] 값들은 여러 픽셀(일반적으로 2-8개)의 평균에 해당하며, 이러한 픽셀 간의 표준 편차가 제공된다.

[0566] **HPLC-MS:**

[0567] HPLC-MS 분석은 MS 검출기(Thermo LTQ XL)가 장착된 Agilent에 의한 HPLC(1100 series)에서 수행된다.

[0568] 예를 들어, 일반적인 HPLC 방법은 다음과 같다: Agilent(ZORBAX Eclipse Plus 95Å C18, 4.6 x 150mm, 3.5µm HPLC 컬럼)로부터의 역상 컬럼 4.6mm x 150mm, 입자 크기 3.5µm가 HPLC에 사용된다. HPLC-MS 측정은 다음의 구매에서 실온에서 수행된다:

**표 1**

[0569]

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

2.5	35	10	20	70
2.5	35.01	40	50	10
2.5	40.01	40	50	10
2.5	41.01	40	50	10

[0570] 다음 용매 혼합물을 사용함:

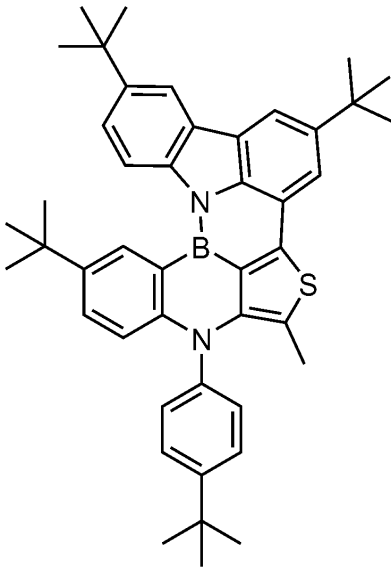
**표 2**

[0571] 용매 A:	H <sub>2</sub> O (90%)	MeCN(10%)
용매 B:	H <sub>2</sub> O (10%)	MeCN(90%)
용매 C:	THF (50%)	MeCN(50%)

[0572] 0.5 mg/mL 농도의 분석물 용액에서 주입 부피 5 μL 이 측정을 위해 사용된다.

[0573] 프로브의 이온화는 양성(APCI +) 또는 음성(APCI -) 이온화 모드에서 APCI(대기압 화학적 이온화) 소스를 사용하여 수행된다.

[0574] 실시예 1



[0575]

[0576] 실시예 1을 다음에 따라 합성하였다:

[0577] **AAV1**(53% 수율),

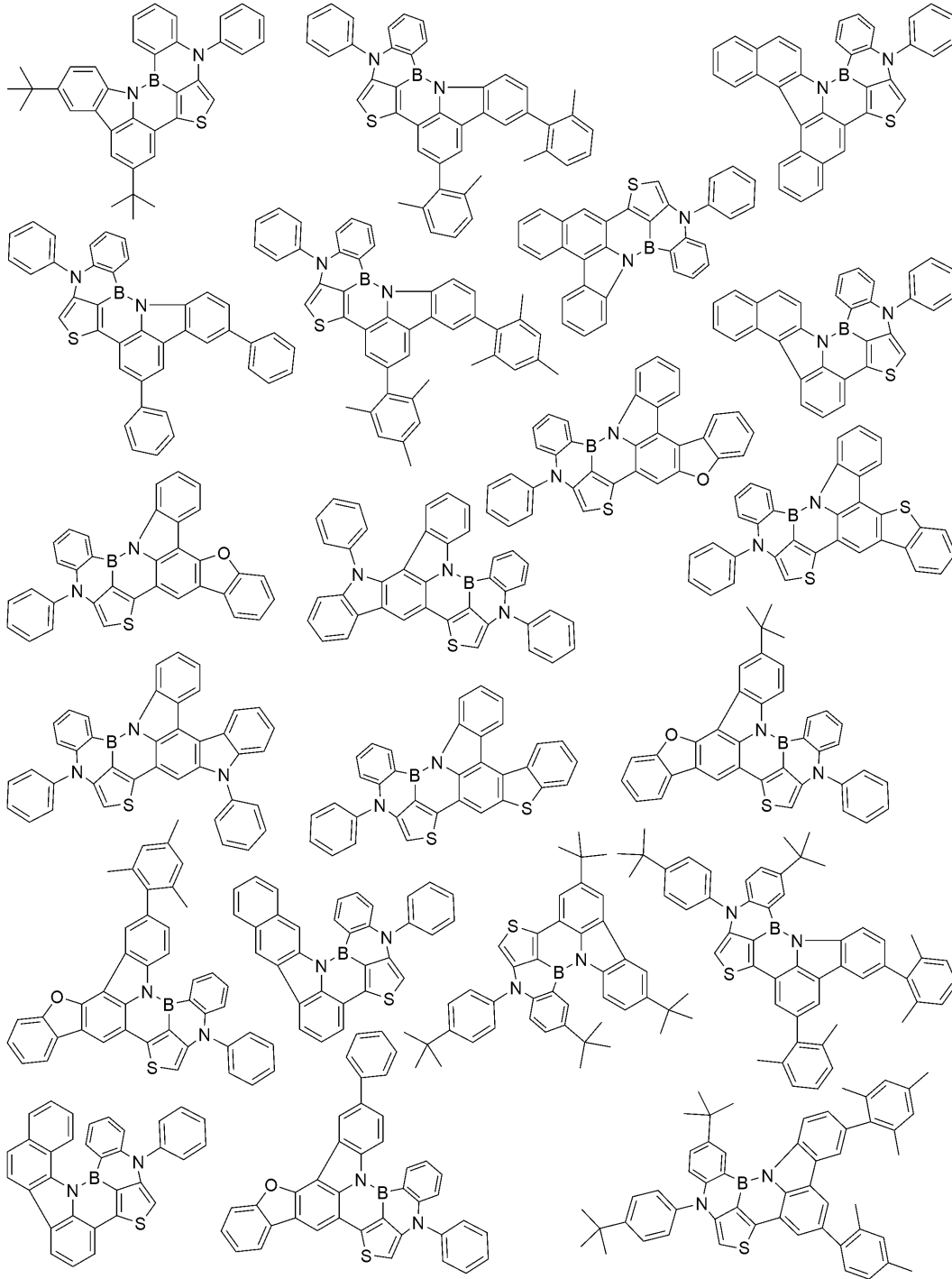
[0578] **AAV2**(91% 수율),

[0579] 및 **AAV3**(0.5% 수율).

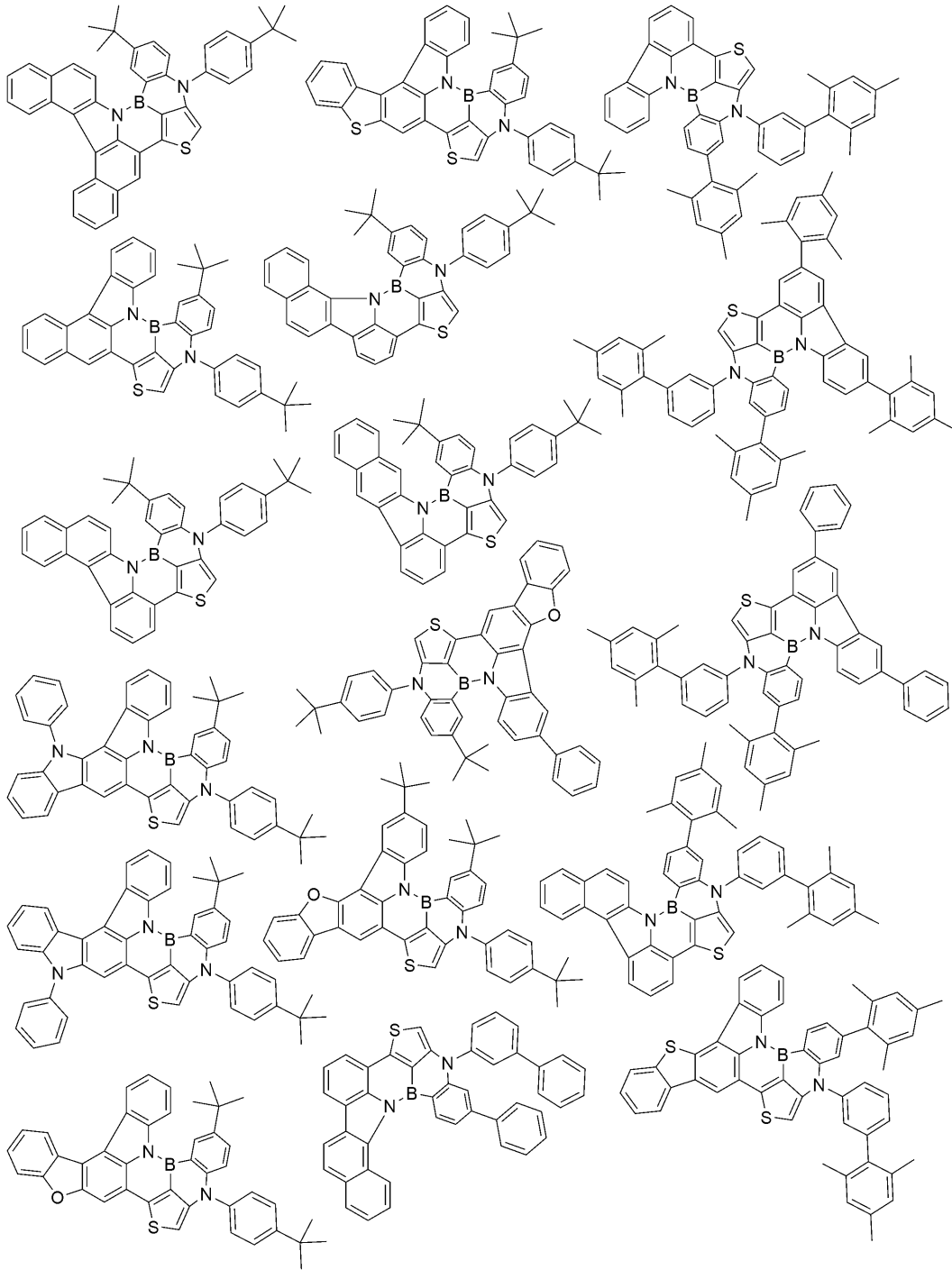
[0580] MS(LC-MS, APCI 이온 소스): 663m/z (체류시간: 8.5분).

[0581] 실시예 1(톨루엔 중 0.01mg/mL)의 최대 발광은 495nm이고, CIE<sub>x</sub> 좌표는 0.16이고, CIE<sub>y</sub> 좌표는 0.56이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 47%이다.

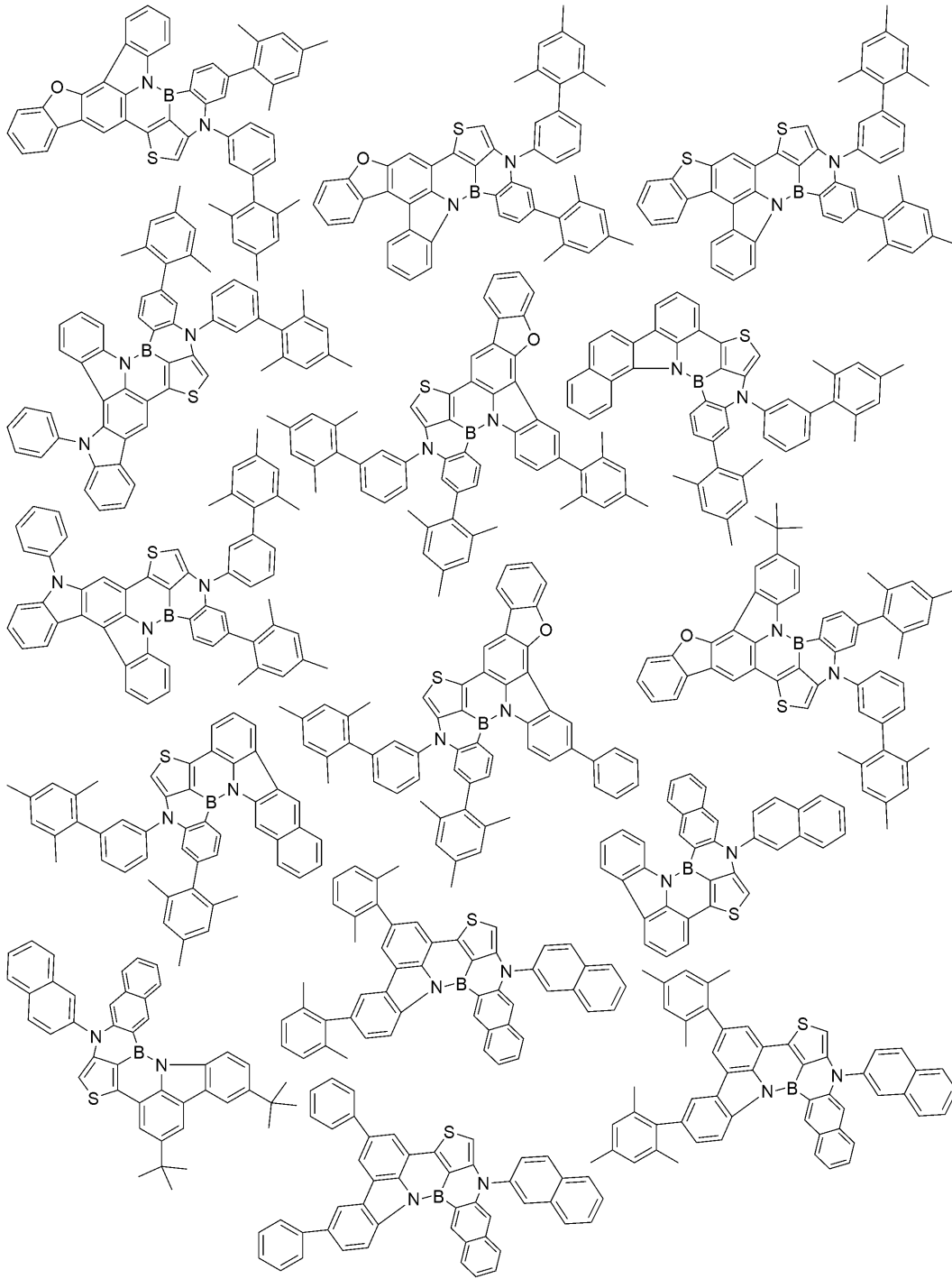
[0582] 본 발명의 유기 분자 추가 예



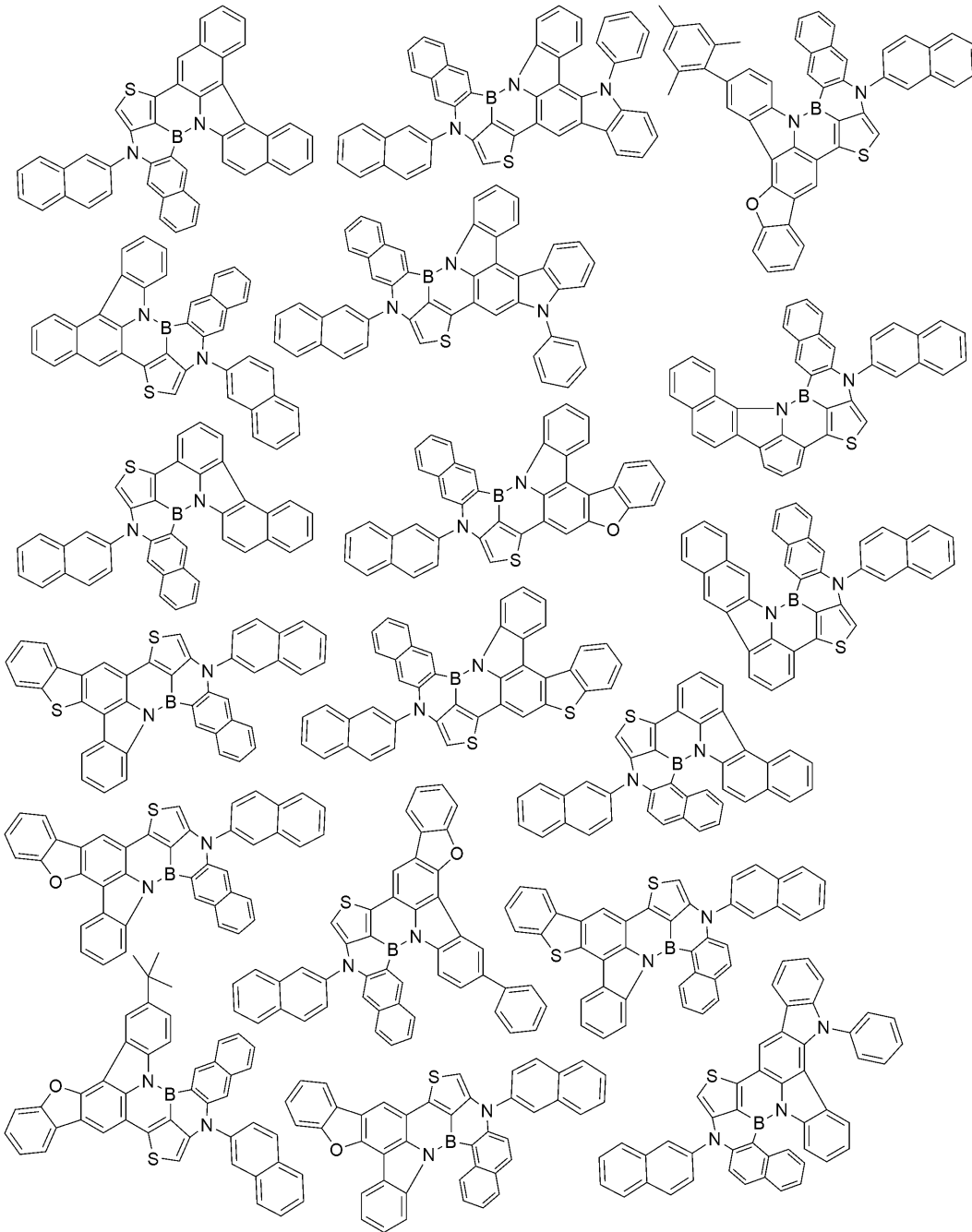
[0583]



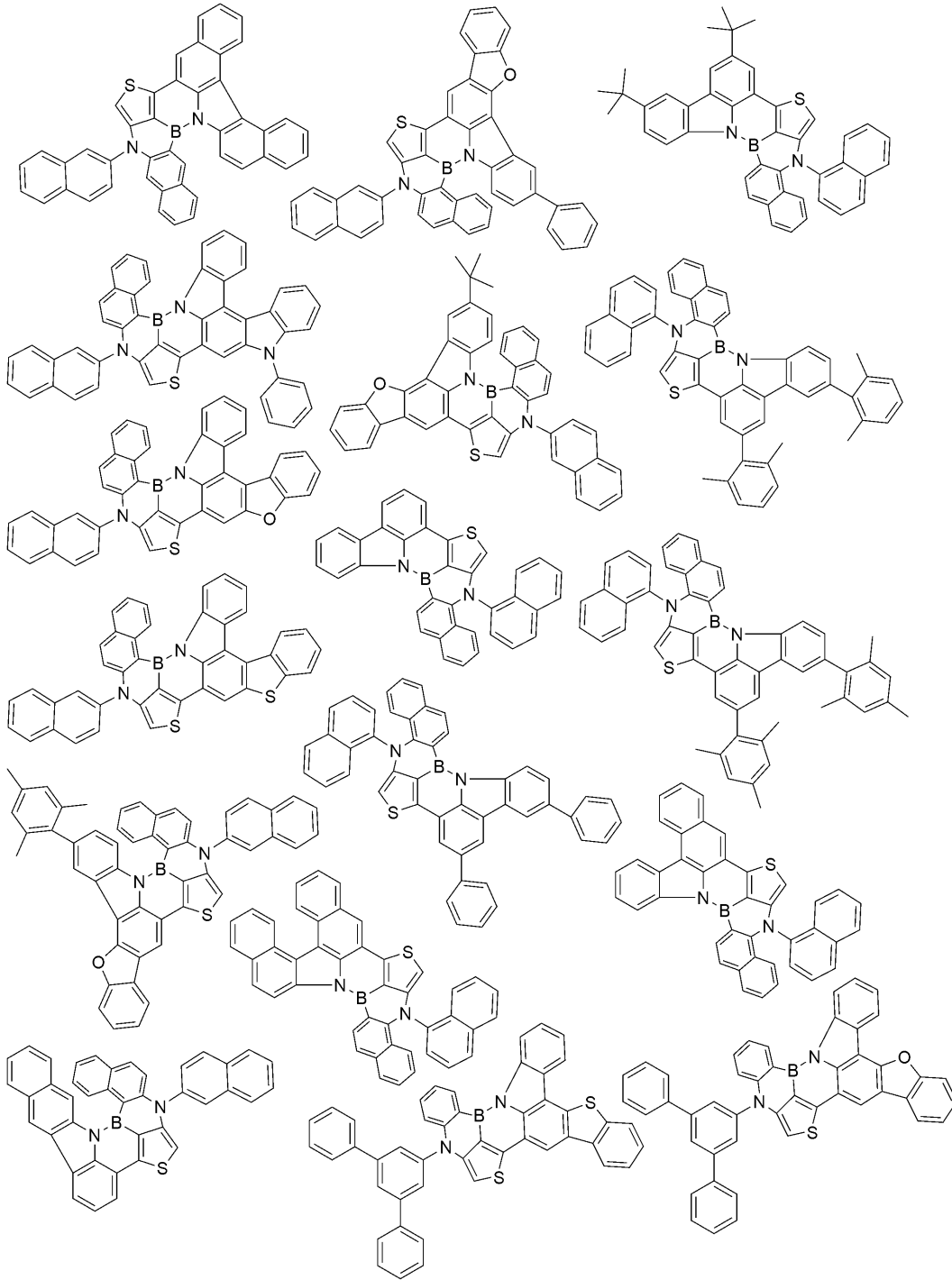
[0584]



[0585]



[0586]



[0587]