



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0029732
(43) 공개일자 2024년03월06일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 403/14 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H10K 50/11 (2023.01)
H10K 85/60 (2023.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 403/14 (2013.01)
C07D 491/048 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2023-7040335
- (22) 출원일자(국제) 2022년07월01일
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2023년11월22일
- (86) 국제출원번호 PCT/KR2022/009507
- (87) 국제공개번호 WO 2023/277645
국제공개일자 2023년01월05일
- (30) 우선권주장
21183113.6 2021년07월01일
유럽특허청(EPO)(EP)

- (71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자
덴즈 마이클
독일 에겐슈타인-레오폴드샤펜 76344 나골드스트
라세 7지
토브 니코 페트릭
독일 부룩살 76646 마이센너 스트라세 8
- (74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 광전자 소자용 유기 분자

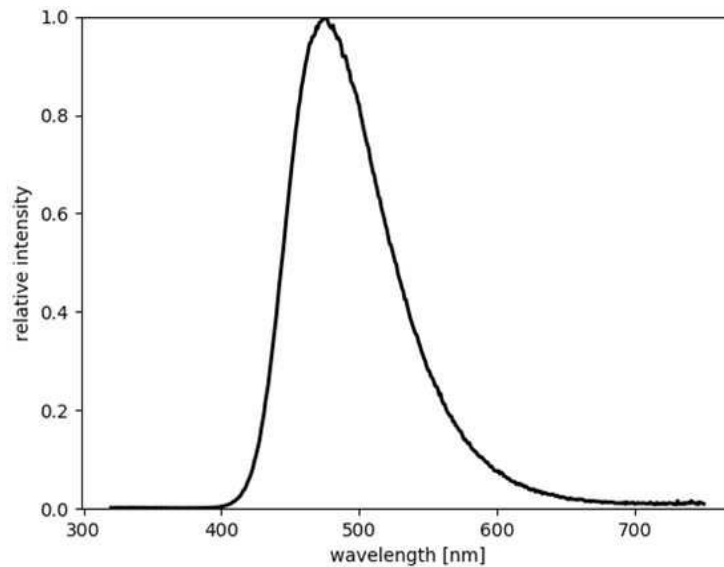
(57) 요약

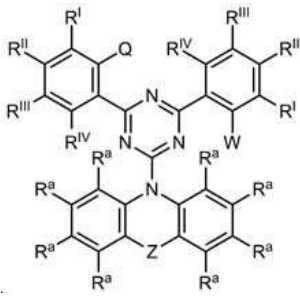
본 발명은 광전자 소자에 적용하기 위한 유기 분자에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, 유기 분자는 다음을 갖는다:

- 화학식 I의 구조를 포함하는 제1 화학적 모이어티:

(뒷면에 계속)

대표도

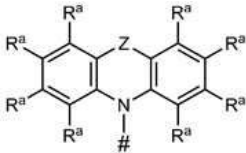




화학식 I

및

- 화학식 II의 구조를 포함하는 1개 또는 2개의 제2 화학적 모이어티:



화학식 II,

여기서

제1 화학적 모이어티는 단일 결합을 통해 제2 화학적 모이어티에 연결되며;

W는 제1 화학적 모이어티를 제2 화학적 모이어티에 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이고,

Q는 W이거나 R¹이고,

#은 제1 화학적 모이어티와 제2 화학적 모이어티의 결합 사이트를 나타내고;

Z는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 직접 결합, CR³R⁴, C≡CR³R⁴, C=O, C=NR³, NR³, O, SiR³R⁴, S, S(O) 및 S(O)₂.

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2022.01)

H10K 50/11 (2023.02)

H10K 85/654 (2023.02)

H10K 85/6572 (2023.02)

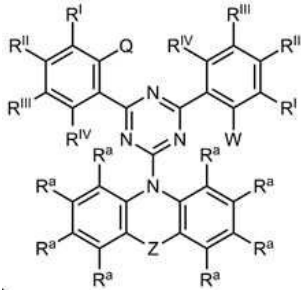
명세서

청구범위

청구항 1

다음을 포함하는 유기 분자

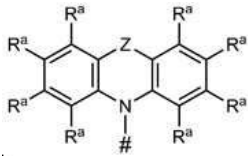
- 화학식 I의 구조를 포함하는 제1 화학적 모이어티:



화학식 I

및

- 화학식 II의 구조를 포함하는 1개 또는 2개의 추가적인 제2 화학적 모이어티:



화학식 II,

여기서

제1 화학적 모이어티는 단일 결합을 통해 제2 화학적 모이어티에 연결되며;

W는 제1 화학적 모이어티를 제2 화학적 모이어티에 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이고,

Q는 W이거나 R¹이고,

#은 제1 화학적 모이어티와 제2 화학적 모이어티의 결합 사이트를 나타내고;

Z는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 직접 결합, CR³R⁴, C≡R³R⁴, C=O, C=NR³, NR³, O, SiR³R⁴, S, S(O) 및 S(O)₂;

R¹, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, 페닐,

C₁-C₅-알킬,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 선택적으로 치환되고;

C₆-C₁₈-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고; 및

C₃-C₁₇-헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고;

R^a , R^3 및 R^4 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소,

중수소,

$N(R^5)_2$,

OR^5 ,

$Si(R^5)_3$,

$B(OR^5)_2$,

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 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$,

$P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 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 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$,

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

C_1 - C_{40} -티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$,

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

C_2 - C_{40} -알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$,

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

C₂-C₄₀-알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;

C₆-C₆₀-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고; 및

C₃-C₅₇-헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고;

R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, N(R⁶)₂, OR⁶, Si(R⁶)₃, B(OR⁶)₂, OSO₂R⁶, CF₃, CN, F, Br, I,

C₁-C₄₀-알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,

C₁-C₄₀-알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,

C₁-C₄₀-티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,

C₂-C₄₀-알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,

C₂-C₄₀-알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,

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

$\text{C}_6\text{-C}_{60}$ -아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고; 및

$\text{C}_3\text{-C}_{57}$ -헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환되고;

R^6 은 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, OPh , CF_3 , CN , F ,

$\text{C}_1\text{-C}_5$ -알킬,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되고;

$\text{C}_1\text{-C}_5$ -알콕시,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되고;

$\text{C}_1\text{-C}_5$ -티오알콕시,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되고;

$\text{C}_2\text{-C}_5$ -알케닐,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되고;

$\text{C}_2\text{-C}_5$ -알키닐,

여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN , CF_3 또는 F 로 치환되고;

$\text{C}_6\text{-C}_{18}$ -아릴,

이는 하나 이상의 $\text{C}_1\text{-C}_5$ -알킬 치환기로 선택적으로 치환되고;

$\text{C}_3\text{-C}_{17}$ -헤테로아릴,

이는 하나 이상의 $\text{C}_1\text{-C}_5$ -알킬 치환기로 선택적으로 치환되고;

$\text{N}(\text{C}_6\text{-C}_{18}\text{-아릴})_2$,

$\text{N}(\text{C}_3\text{-C}_{17}\text{-헤테로아릴})_2$,

및 $\text{N}(\text{C}_3\text{-C}_{17}\text{-헤테로아릴})(\text{C}_6\text{-C}_{18}\text{-아릴})$;

여기서 선택적으로 치환기 R^1 , R^I , R^{II} , R^{III} 또는 R^{IV} 는 서로 독립적으로, 하나 이상의 치환기 R^1 , R^I , R^{II} , R^{III} 및/또는 R^{IV} 와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하고;

여기서 선택적으로 치환기 R^a , R^3 , R^4 또는 R^5 는 서로 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a , R^3 , R^4 및/또는 R^5 와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 선택적으로 형성한다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 분자:

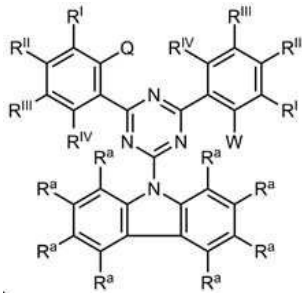
H, 메틸, 페닐 및

하나 이상의 치환기 R^I, R^{II}, R^{III} 및/또는 R^{IV}와 함께 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 제1 화학적 모이어티가 하기 화학식 Ia의 구조를 포함하거나 이로 이루어진, 유기 분자:

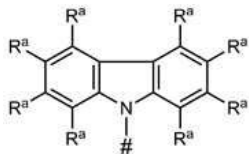


화학식 Ia

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제2 화학적 모이어티가 하기 화학식 IIa의 구조를 포함하거나 이로 이루어진, 유기 분자:



화학식 IIa.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 R^a는 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는, 유기 분자:

수소,

중수소,

Me,

ⁱPr,

^tBu,

CN,

CF₃,

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

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

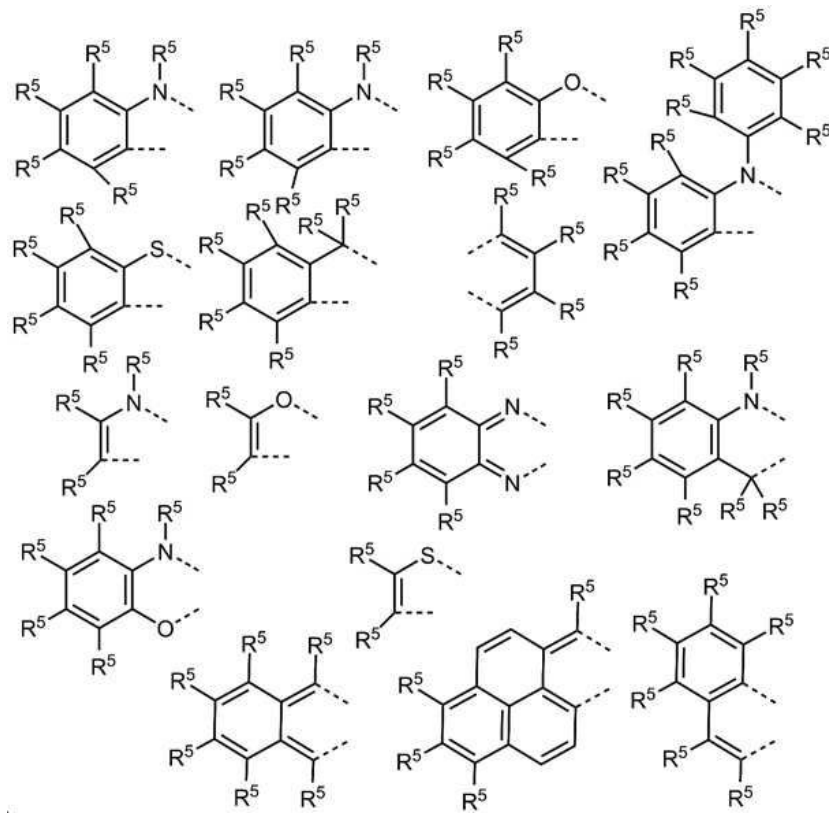
Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

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

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

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

여기서 2개의 인접한 치환기 R^a는 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템으로 대체될 수 있다:

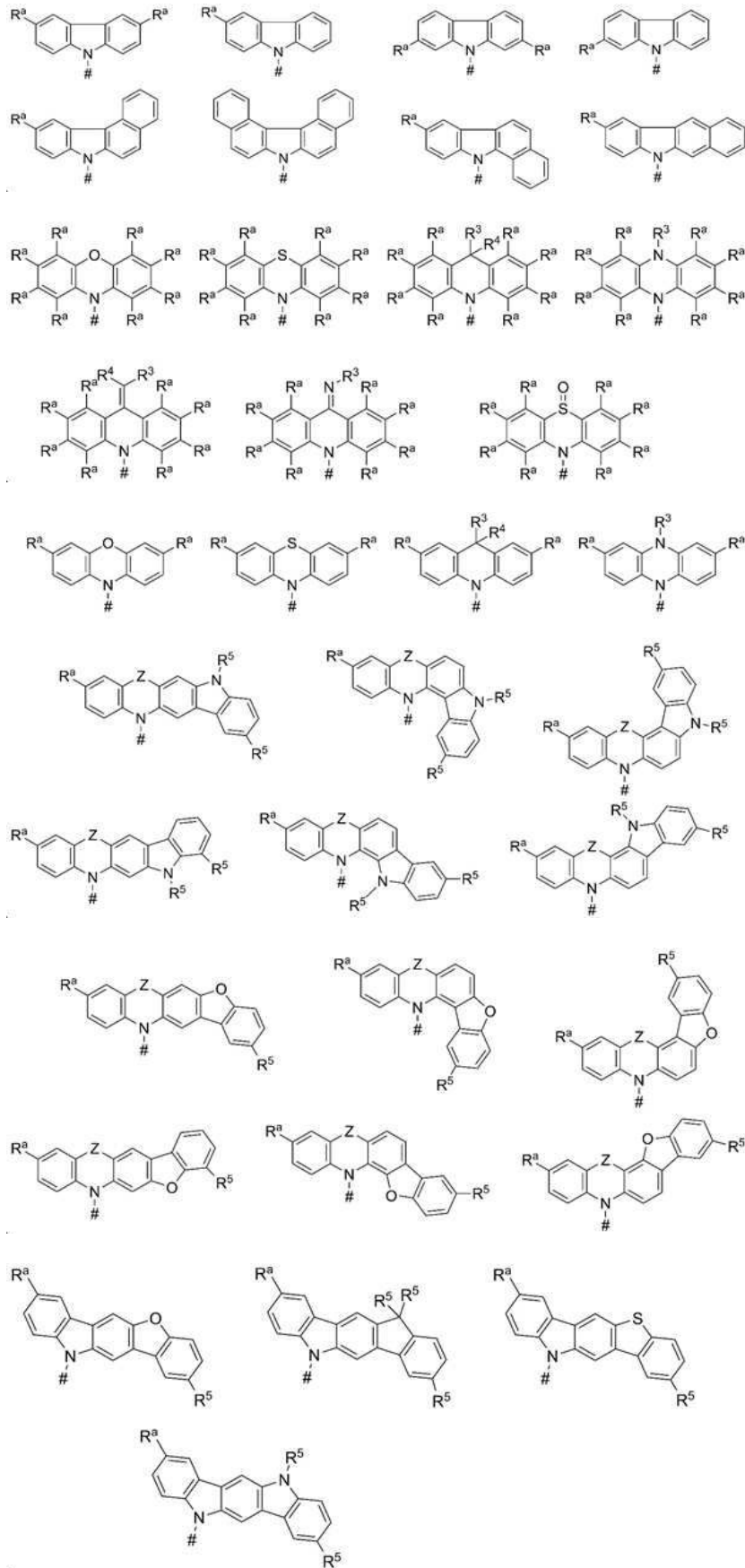


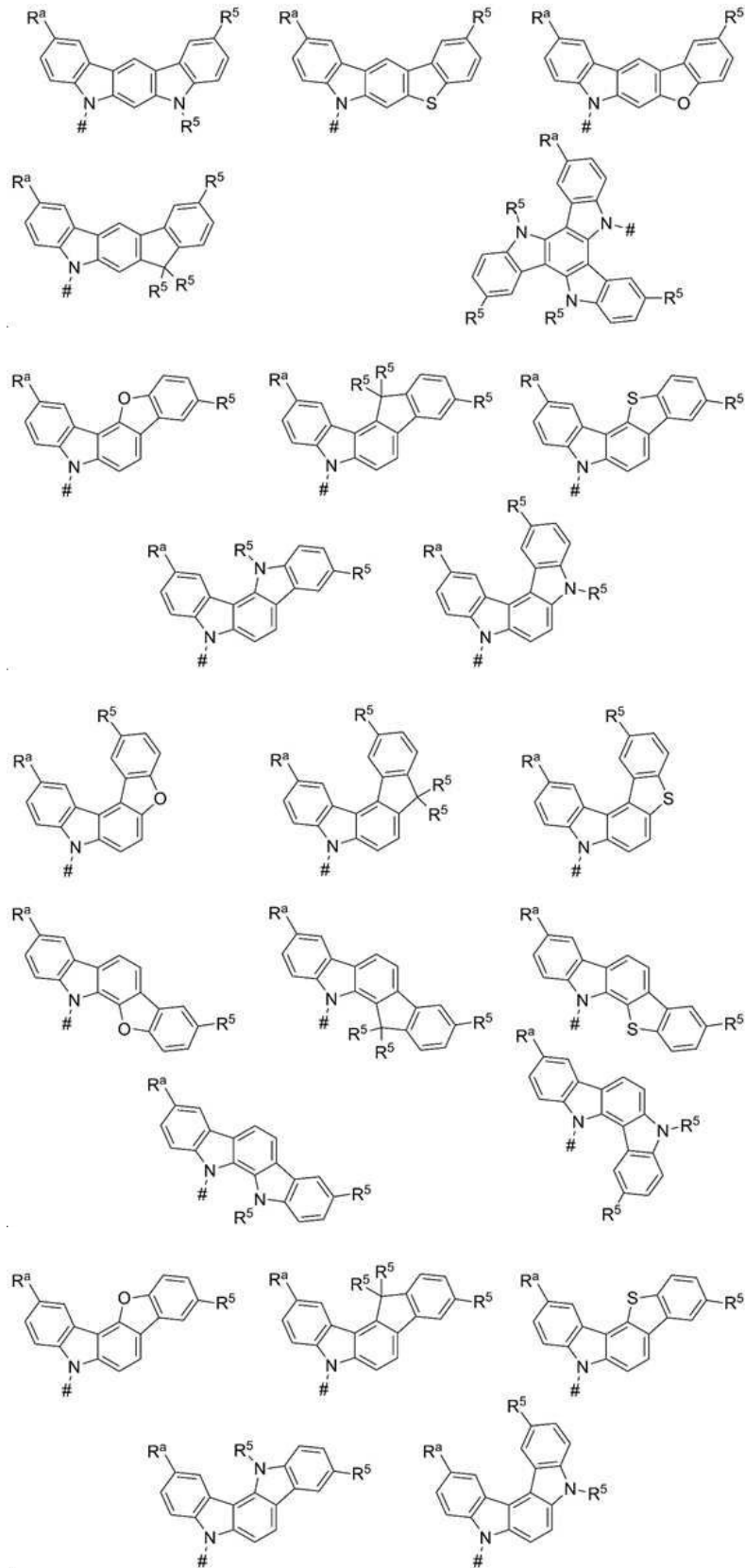
여기서 각각의 점선은 상기 도시된 고리 시스템 중 하나를 R^a로 표시된 위치에 연결하는 직접 결합을 나타낸다.

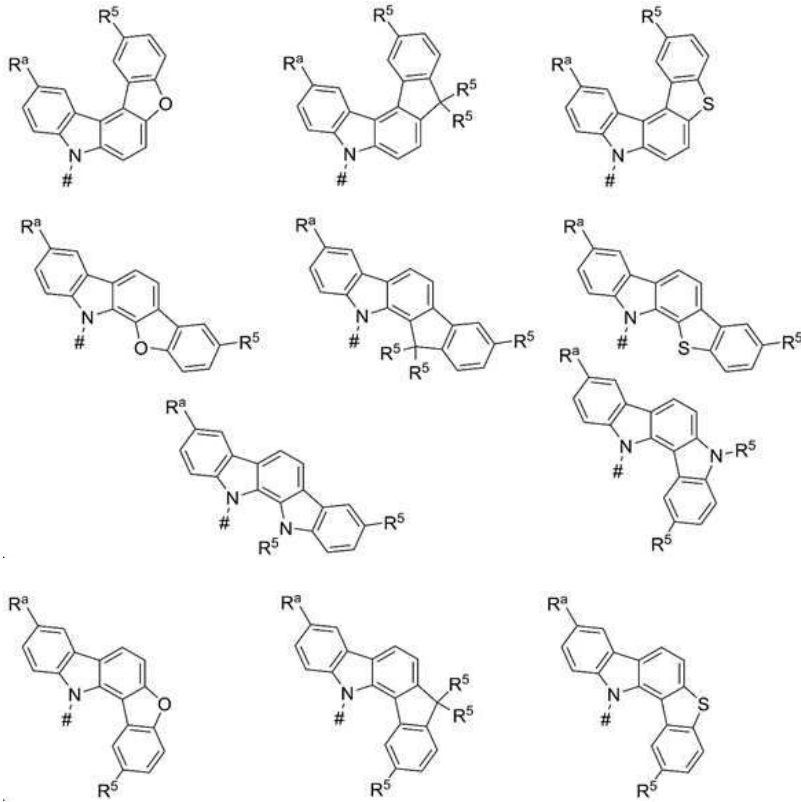
청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제2 화학적 모이어티가 다음 구조들로부터 선택되는 구조를 포함하거나 이로 이루어진, 유기 분자:

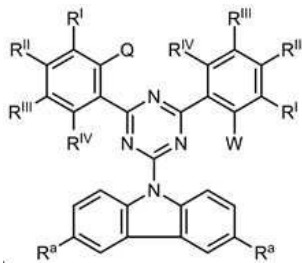






청구항 7

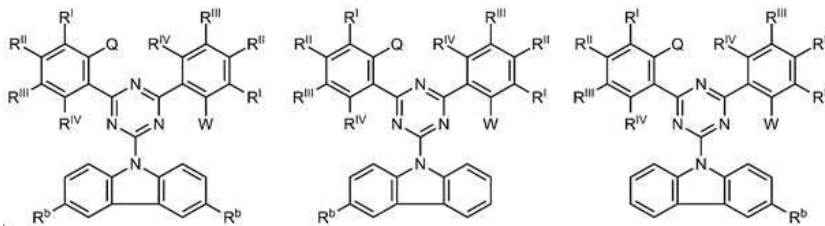
제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,
 하기 화학식 Iaa의 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 Iaa

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,
 하기 화학식 Iaa-1, 화학식 Iaa-2 및 화학식 Iaa-3으로 이루어진 군으로부터 선택된 구조를 포함하는 유기 분자:



화학식 Iaa-1 화학식 Iaa-2 화학식 Iaa-3

여기서

R^b 는 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

중수소,

$N(R^5)_2$,

OR^5 ,

$Si(R^5)_3$,

$B(OR^5)_2$,

OSO_2R^5 ,

CF_3 ,

CN,

F,

Br,

I,

C_{1-40} -알킬,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

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

C_{1-40} -알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

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

C_{1-40} -티오알콕시,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

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

C_{2-40} -알케닐,

이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

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

C_{2-40} -알키닐,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,

여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;

C₆-C₆₀-아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고; 및

C₃-C₅₇-헤테로아릴,

이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환된다.

청구항 9

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

청구항 10

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

- 유기발광다이오드(OLED),
- 발광 전기 화학 전지,
- OLED 센서,
- 유기 다이오드,
- 유기 태양 전지,
- 유기 트랜지스터,
- 유기 전계 효과 트랜지스터,
- 유기 레이저,
- 하향 변환 소자(down-conversion element).

청구항 11

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

청구항 12

하기를 포함하는 조성물:

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

청구항 13

제12항에 있어서, 하기를 추가로 포함하는 조성물:

- 상기 유기 분자와 상이한 형광 에미터 F,

여기서 상기 유기 분자의 분율(중량%)은 상기 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 상기 유기 분자의 분율(중량%)은 상기 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 5배 높다.

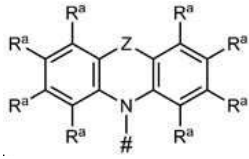
청구항 14

[0011]

및

[0012]

- 1개 또는 2개의 하기 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어지는 제2 화학적 모이어티(상기 제1 화학적 모이어티의 일부인 1개의 제2 화학적 모이어티에 더하여 상기 유기 분자에 존재함):



[0013]

화학식 II,

[0014]

여기서

[0015]

제1 화학적 모이어티는 단일 결합을 통해 제2 화학적 모이어티에 연결되며;

[0016]

W는 제1 화학적 모이어티를 제2 화학적 모이어티에 연결하는 단일 결합의 결합 사이트이고,

[0017]

Q는 W이거나 R¹이고,

[0018]

#은 제1 화학적 모이어티와 제2 화학적 모이어티의 결합 사이트를 나타내고;

[0019]

Z는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 직접 결합, CR³R⁴, C≡CR³R⁴, C=O, C=NR³, NR³, O, SiR³R⁴, S, S(O) 및 S(O)₂;

[0020]

[0021]

R¹, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, 페닐,

[0022]

C₁-C₅-알킬,

[0023]

여기서 하나 이상의 수소 원자는 중수소로 선택적으로 치환되고;

[0024]

C₆-C₁₈-아릴,

[0025]

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고; 및

[0026]

C₃-C₁₇-헤테로아릴,

[0027]

이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고;

[0028]

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

[0029]

중수소,

[0030]

N(R⁵)₂,

[0031]

OR⁵,

[0032]

Si(R⁵)₃,

[0033]

B(OR⁵)₂,

[0034]

OSO₂R⁵,

[0035]

CF₃,

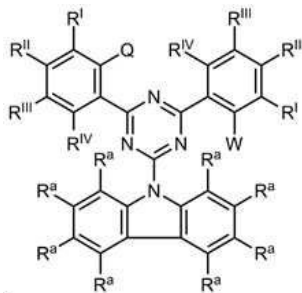
[0036]

CN,

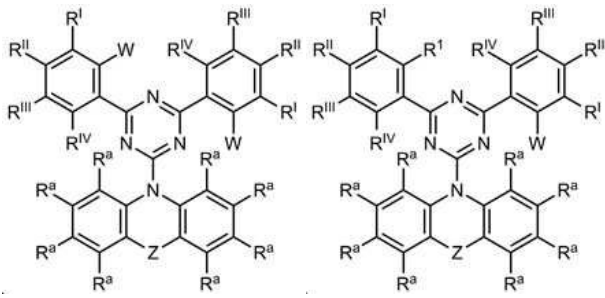
- [0037] F,
- [0038] Br,
- [0039] I,
- [0040] C₁-C₄₀-알킬,
- [0041] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0042] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0043] C₁-C₄₀-알콕시,
- [0044] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0045] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0046] C₁-C₄₀-티오알콕시,
- [0047] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0048] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0049] C₂-C₄₀-알케닐,
- [0050] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0051] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0052] C₂-C₄₀-알키닐,
- [0053] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0054] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0055] C₆-C₆₀-아릴,
- [0056] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고; 및
- [0057] C₃-C₅₇-헤테로아릴,
- [0058] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고;
- [0059] R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, N(R⁶)₂, OR⁶, Si(R⁶)₃, B(OR⁶)₂, OSO₂R⁶, CF₃, CN, F, Br, I,

- [0060] C₁-C₄₀-알킬,
- [0061] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0062] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0063] C₁-C₄₀-알콕시,
- [0064] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0065] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0066] C₁-C₄₀-티오알콕시,
- [0067] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0068] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0069] C₂-C₄₀-알케닐,
- [0070] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0071] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0072] C₂-C₄₀-알키닐,
- [0073] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고,
- [0074] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁶C=CR⁶, C≡C, Si(R⁶)₂, Ge(R⁶)₂, Sn(R⁶)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁶, P(=O)(R⁶), SO, SO₂, NR⁶, O, S 또는 CONR⁶에 의해 선택적으로 치환되고,
- [0075] C₆-C₆₀-아릴,
- [0076] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고; 및
- [0077] C₃-C₅₇-헤테로아릴,
- [0078] 이는 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환되고;
- [0079] R⁶은 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되고: 수소, 중수소, OPh, CF₃, CN, F,
- [0080] C₁-C₅-알킬,
- [0081] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0082] C₁-C₅-알콕시,
- [0083] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;

- [0084] C₁-C₅-티오알콕시,
- [0085] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0086] C₂-C₅-알케닐,
- [0087] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0088] C₂-C₅-알키닐,
- [0089] 여기서 하나 이상의 수소 원자는 선택적으로, 서로 독립적으로 중수소, CN, CF₃ 또는 F로 치환되고;
- [0090] C₆-C₁₈-아릴,
- [0091] 이는 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 선택적으로 치환되고;
- [0092] C₃-C₁₇-헤테로아릴,
- [0093] 이는 하나 이상의 C₁-C₅-알킬 치환기로 선택적으로 치환되고;
- [0094] N(C₆-C₁₈-아릴)₂,
- [0095] N(C₃-C₁₇-헤테로아릴)₂,
- [0096] 및 N(C₃-C₁₇-헤테로아릴)(C₆-C₁₈-아릴);
- [0097] 여기서 치환기 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 서로 독립적으로, 하나 이상의 치환기 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 선택적으로 형성하고;
- [0098] 여기서 치환기 R^a, R³, R⁴ 또는 R⁵는 서로 독립적으로 하나 이상의 치환기 R^a, R³, R⁴ 또는 R⁵와 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 선택적으로 형성한다.
- [0099] 본 발명의 일 구현예에서, 두 R^I는 모두 동일하고, 두 R^{II}는 모두 동일하며, 두 R^{III}는 동일하고, 두 R^{IV}는 동일하다.
- [0100] 일 구현예에서, Z는 각각의 경우에 직접 결합이다.
- [0101] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Ia의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



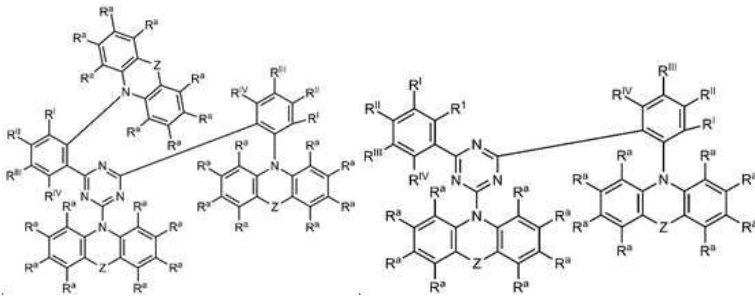
- [0102]
- [0103] 화학식 Ia
- [0104] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Ib-1 및 Ib-2의 군으로부터 선택된 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0105]

[0106] 화학식 Ib-1 화학식 Ib-2

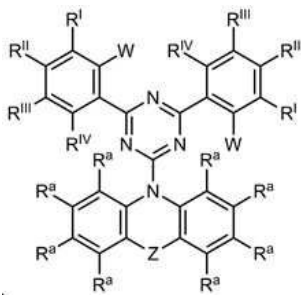
[0107] 본 발명의 일 구현예에서, 유기 분자는 하기 화학식 Ic-1 및 Ic-2의 군으로부터 선택된 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0108]

[0109] 화학식 Ic-1 화학식 Ic-2

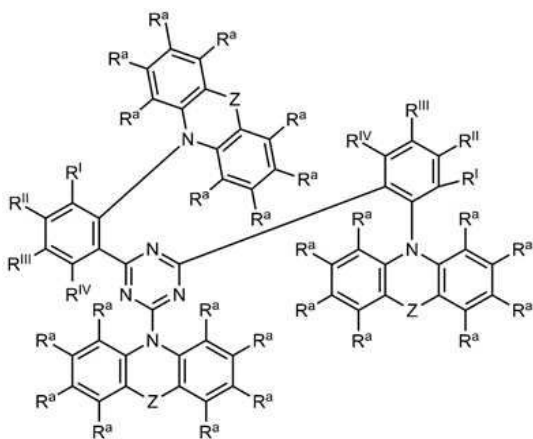
[0110] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 유기 분자는 하기 화학식 Ib-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0111]

[0112] 화학식 Ib-1

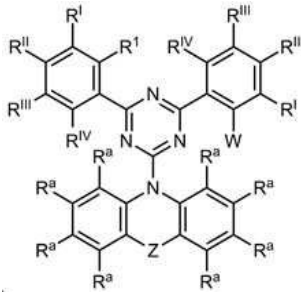
[0113] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Ic-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0114]

[0115] 화학식 Ic-1

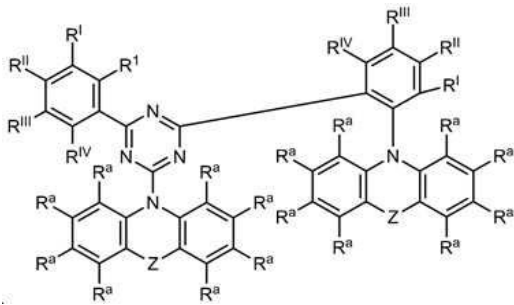
[0116] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Ib-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0117]

[0118] 화학식 Ib-2

[0119] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Ic-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0120]

[0121] 화학식 Ic-2

[0122] 일 구현예에서, R^I는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0123] 일 구현예에서, R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0124] H, 메틸, 페닐 및

[0125] 하나 이상의 치환기 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및/또는 R^{IV}로 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.

[0126] 일 구현예에서, R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0127] 일 구현예에서, R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 H이다.

[0128] 일 구현예에서, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0129] H, 메틸, 페닐 및

[0130] 하나 이상의 치환기 R^I, R^{II}, R^{III} 및/또는 R^{IV}와 함께 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.

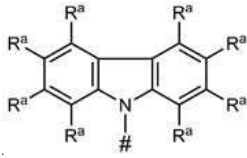
[0131] 일 구현예에서, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0132] 일 구현예에서, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 H이다.

[0133] 일 구현예에서, Z는 각각의 경우에 직접 결합이다.

[0134] 일 구현예에서, R¹은 각각의 경우에 H이다.

[0135] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 화학식 IIa의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0136]

[0137] 화학식 IIa,

[0138] 여기서 #과 R^a는 상기와 같이 정의된다.

[0139] 본 발명의 일 구현예에서, 적어도 하나의 R^a는 수소가 아니다.

[0140] 본 발명의 일 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0141] 수소,

[0142] 중수소,

[0143] Me,

[0144] ⁱPr,

[0145] ^tBu,

[0146] CN,

[0147] CF₃,

[0148] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0149] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

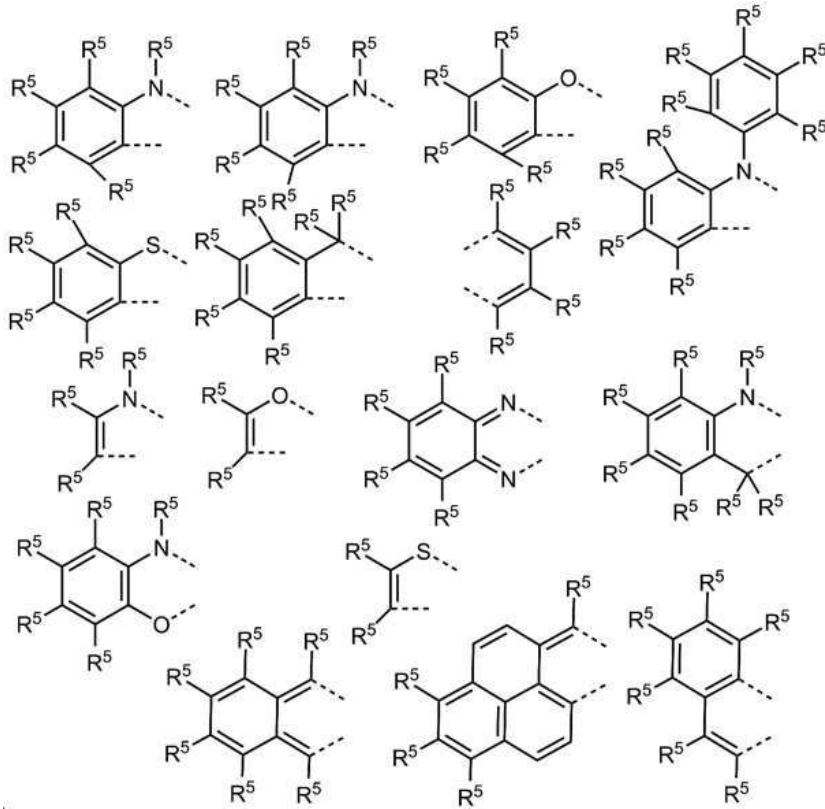
[0150] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0151] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0152] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0153] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂;

[0154] 여기서 2개 이상의 인접한 치환기 R^a는 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템에 대한 부착점을 형성할 수 있다:



[0155]

[0156]

여기서 각각의 점선은, 상기에 나타낸 고리 시스템 중 하나를 2개의 인접한 치환기 R^a의 위치에 연결함으로써, 상기에 나타낸 그룹의 고리 시스템이 화학식 II에 나타난 두 번째 화학적 모이어티에 융합되도록 하는, 직접 결합을 나타낸다.

[0157]

본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0158]

수소,

[0159]

Me,

[0160]

ⁱPr,

[0161]

^tBu,

[0162]

CN,

[0163]

CF₃,

[0164]

하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0165]

하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

[0166]

하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0167]

하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0168]

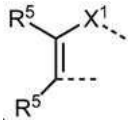
하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0169]

및 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂;

[0170]

여기서, 서로 인접하게 위치한 R^a 그룹 중 임의의 2개는, 선택적으로 서로 결합되어 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는 고리 시스템을 형성한다:



[0171]

[0172] 여기서 X^1 은 S, O 또는 NR^5 이다.

[0173] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0174] 수소,

[0175] Me,

[0176] i Pr,

[0177] t Bu,

[0178] CN,

[0179] CF_3 ,

[0180] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0181] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

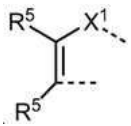
[0182] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0183] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0184] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0185] 및 Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 $N(Ph)_2$;

[0186] 여기서, 서로 인접하게 위치한 R^a 그룹 중 임의의 2개는, 선택적으로 서로 결합되어 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는 고리 시스템을 형성한다:



[0187]

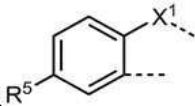
[0188] 여기서 X^1 은 S, O 또는 NR^5 이다.

[0189] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0190] 수소,

[0191] Me,

[0192] i Pr,

- [0193] ^tBu,
 - [0194] CN,
 - [0195] CF₃,
 - [0196] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
 - [0197] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
 - [0198] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
 - [0199] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
 - [0200] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
 - [0201] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂;
 - [0202] 여기서, 서로 인접하게 위치한 R^a 그룹 중 임의의 2개는 선택적으로 서로 결합되어 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는 고리 시스템을 형성한다:
- 

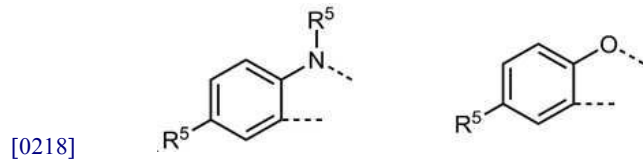
[0203] 여기서 X¹은 S, O 또는 NR⁵이다.
- [0204] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
 - [0205] 수소,
 - [0206] Me,
 - [0207] ⁱPr,
 - [0208] ^tBu,
 - [0209] CN,
 - [0210] CF₃,
 - [0211] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
 - [0212] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
 - [0213] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0214] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0215] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0216] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂;

[0217] 여기서, 서로 인접하게 위치하는 R^a 그룹 중 임의의 2개는 선택적으로 서로 결합되어, 다음 2개로 이루어진 군으로부터 선택되는 고리 시스템을 형성한다:



[0219] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0220] 수소,

[0221] Me,

[0222] ⁱPr,

[0223] ^tBu,

[0224] CN,

[0225] CF₃,

[0226] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0227] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

[0228] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0229] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0230] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0231] 및 N(Ph)₂.

[0232] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0233] 수소,

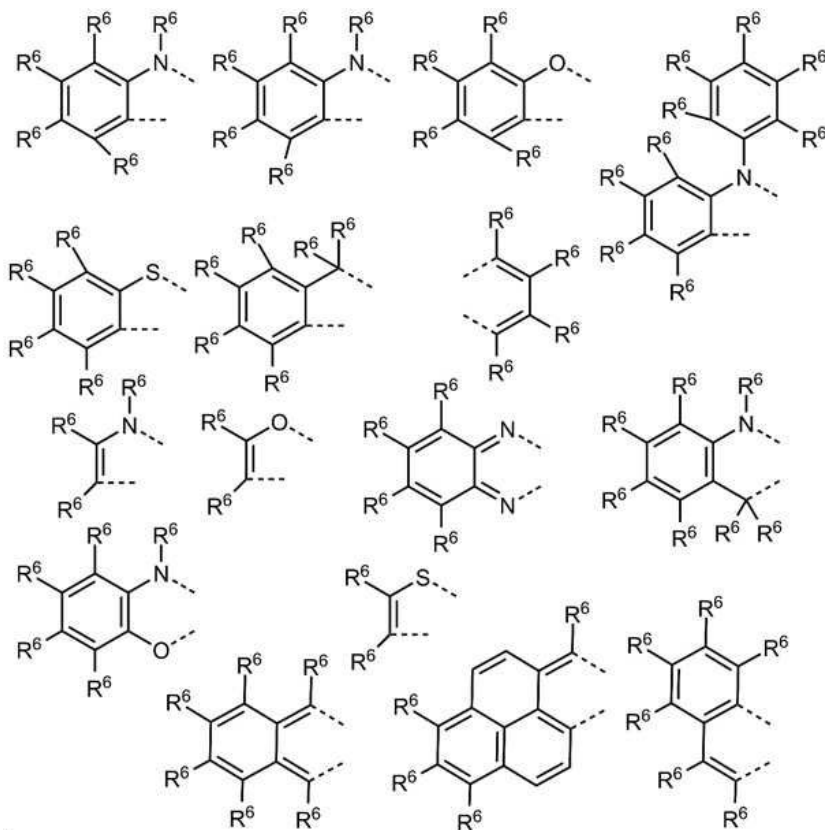
[0234] Me,

[0235] ⁱPr,

- [0236] ^tBu,
- [0237] CN,
- [0238] CF₃,
- [0239] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0240] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0241] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐, 및
- [0242] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐.
- [0243] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0244] 수소,
- [0245] Me,
- [0246] ⁱPr,
- [0247] ^tBu,
- [0248] CN,
- [0249] CF₃,
- [0250] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0251] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0252] 수소,
- [0253] Me,
- [0254] ⁱPr,
- [0255] ^tBu,
- [0256] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0257] 본 발명의 일 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0258] 수소,
- [0259] Me,
- [0260] ⁱPr,
- [0261] ^tBu,

- [0262] CN,
- [0263] CF₃,
- [0264] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0265] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0266] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0267] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0268] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0269] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂;

[0270] 여기서 2개 이상의 인접한 치환기 R⁵, 또는 1개 이상의 치환기 R^a에 인접한 1개 이상의 치환기 R⁵는 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 고리 시스템으로 대체될 수 있다:



- [0271]
- [0272] 여기서 각각의 점선은, 상기에 나타난 융합 고리 시스템 중 하나를, 융합 고리 시스템에 의해 대체된 인접한 치환기들 R⁵ 또는 R⁵ 및 R^a가 결합되는 위치에 연결하는 직접 결합을 나타낸다.

- [0273] 본 발명의 특정 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0274] 수소,
- [0275] Me,
- [0276] ⁱPr,
- [0277] ^tBu,
- [0278] CN,
- [0279] CF₃,
- [0280] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0281] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0282] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0283] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0284] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0285] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂.
- [0286] 본 발명의 바람직한 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0287] 수소,
- [0288] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0289] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0290] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0291] 본 발명의 특정 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0292] 수소,
- [0293] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0294] 및
- [0295] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0296] 본 발명의 특정 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0297] 수소,

[0298] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄-알킬; 및

[0299] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).

[0300] 본 발명의 특정 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0301] 수소,

[0302] Me,

[0303] ⁱPr,

[0304] ^tBu,

[0305] CN,

[0306] CF₃,

[0307] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.

[0308] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0309] 수소,

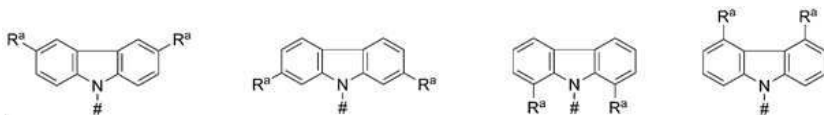
[0310] Me,

[0311] ⁱPr,

[0312] ^tBu,

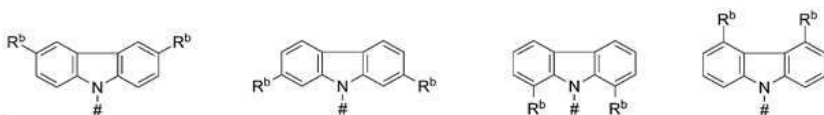
[0313] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.

[0314] 본 발명의 일 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 화학식 IIa-1의 구조, 화학식 IIa-2의 구조, 화학식 IIa-3의 구조 또는 화학식 IIa-4의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0315] 화학식 IIa-1 화학식 IIa-2 화학식 IIa-3 화학식 IIa-4

[0317] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 화학식 IIb-1의 구조, 화학식 IIb-2의 구조, 화학식 IIb-3의 구조 또는 화학식 IIb-4의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0318] 화학식 IIb-1 화학식 IIb-2 화학식 IIb-3 화학식 IIb-4

[0320] 여기서

[0321] R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0322] 중수소,

- [0323] $N(R^5)_2$,
- [0324] OR^5 ,
- [0325] $Si(R^5)_3$,
- [0326] $B(OR^5)_2$,
- [0327] OSO_2R^5 ,
- [0328] CF_3 ,
- [0329] CN ,
- [0330] F ,
- [0331] Br ,
- [0332] I ,
- [0333] C_1 - C_{40} -알킬,
- [0334] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,
- [0335] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0336] C_1 - C_{40} -알콕시,
- [0337] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,
- [0338] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0339] C_1 - C_{40} -티오알콕시,
- [0340] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,
- [0341] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0342] C_2 - C_{40} -알케닐,
- [0343] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,
- [0344] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 -기는, $R^5C=CR^5$, $C\equiv C$, $Si(R^5)_2$, $Ge(R^5)_2$, $Sn(R^5)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO , SO_2 , NR^5 , O , S 또는 $CONR^5$ 에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0345] C_2 - C_{40} -알키닐,
- [0346] 이는 하나 이상의 치환기 R^5 로 선택적으로 치환되고,

[0347] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;

[0348] C₆-C₆₀-아릴,

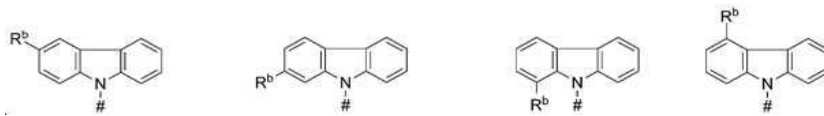
[0349] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고; 및

[0350] C₃-C₅₇-헤테로아릴,

[0351] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고;

[0352] 그 외에는 전술한 정의가 적용된다.

[0353] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 제2화학적 모이어티는 하기 화학식 IIc-1의 구조, 화학식 IIc-2의 구조, 화학식 IIc-3의 구조, 또는 화학식 IIc-4의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0354] 화학식 IIc-1 화학식 IIc-2 화학식 IIc-3 화학식 IIc-4

[0356] 여기서 전술한 정의가 적용된다.

[0357] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0358] Me,

[0359] ⁱPr,

[0360] ^tBu,

[0361] CN,

[0362] CF₃,

[0363] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph;

[0364] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐;

[0365] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일;

[0366] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐;

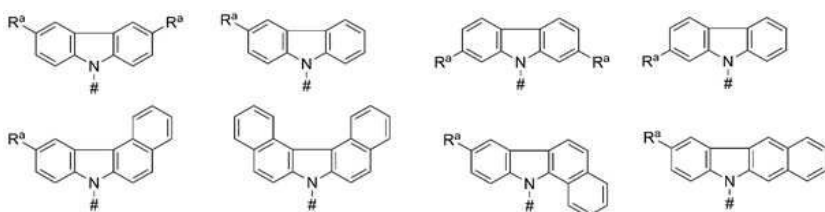
[0367] 및 N(Ph)₂.

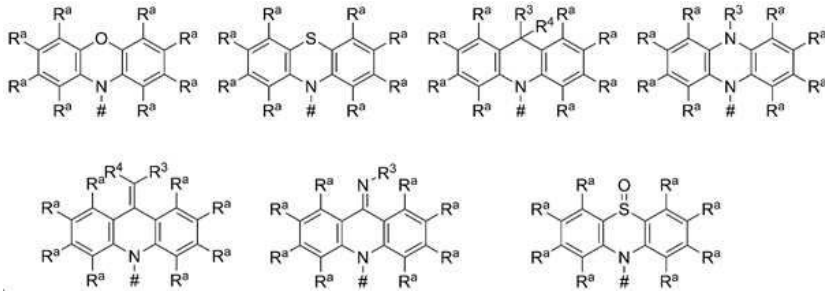
[0368] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0369] Me,

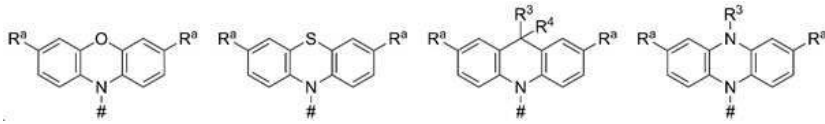
[0370] ⁱPr,

- [0371] ^tBu,
- [0372] CN,
- [0373] CF₃,
- [0374] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph;
- [0375] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐;
- [0376] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐; 및
- [0377] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐.
- [0378] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0379] Me,
- [0380] ^tBu,
- [0381] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph;
- [0382] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일;
- [0383] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐.
- [0384] 본 발명의 추가적인 구현예에서, R^b는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0385] Me,
- [0386] ^tBu,
- [0387] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph;
- [0388] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐.
- [0389] 일 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 구조들로부터 선택되는 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:

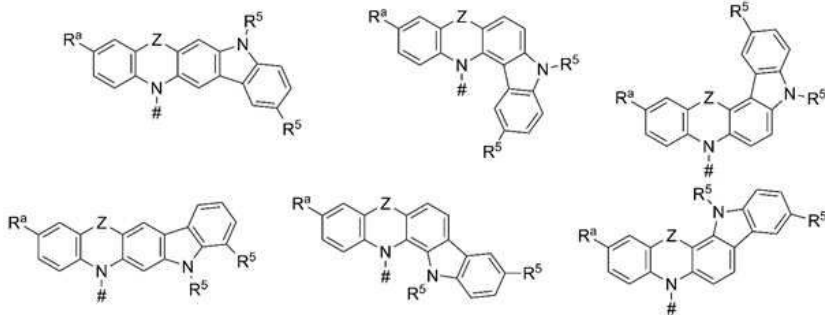




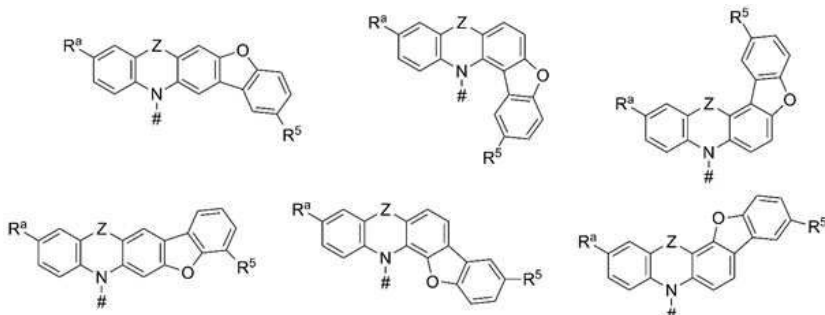
[0391]



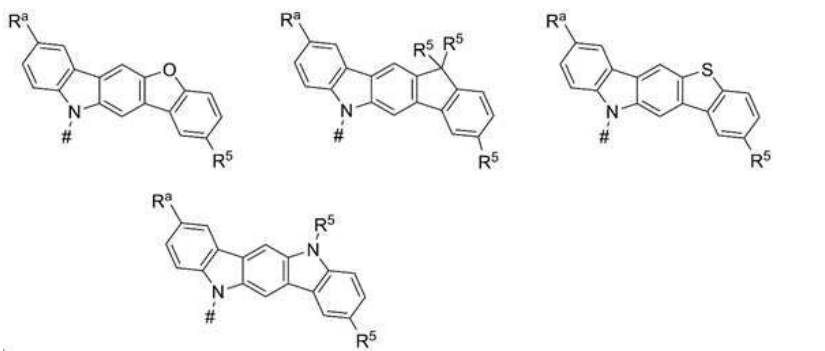
[0392]



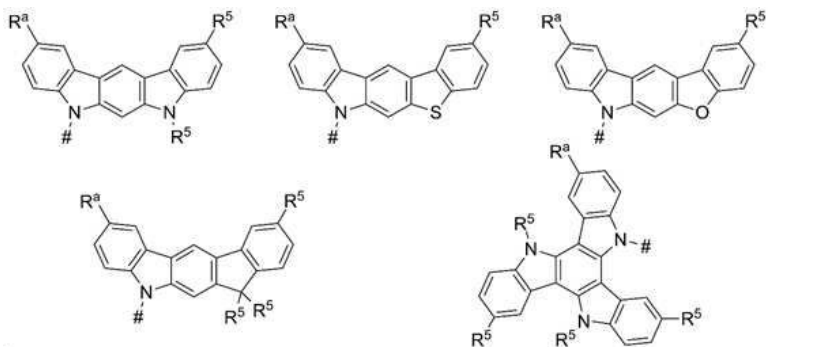
[0393]



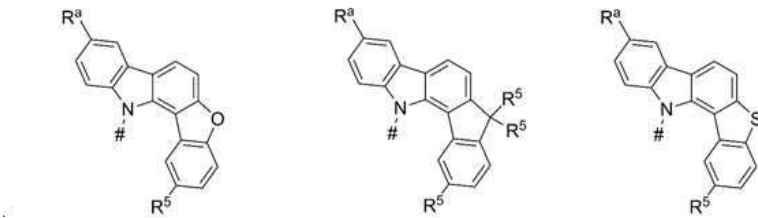
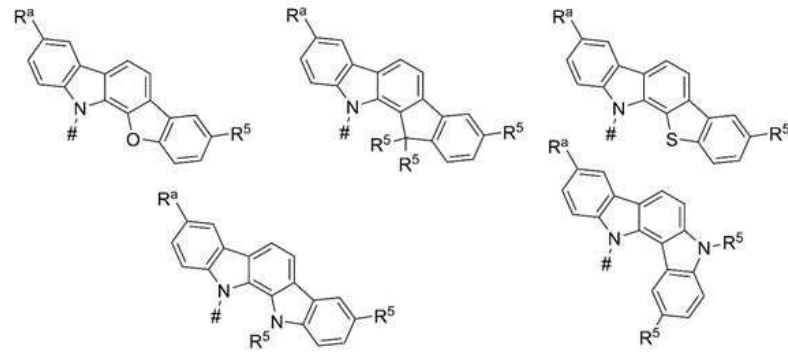
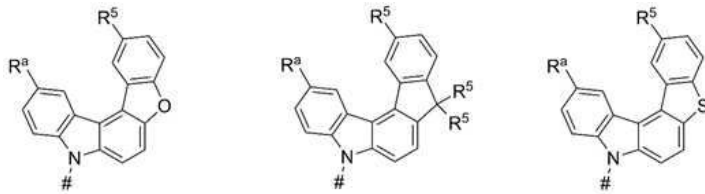
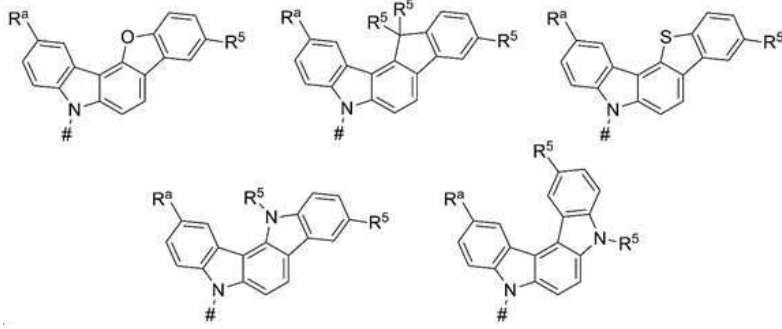
[0394]



[0395]



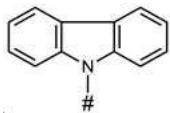
[0396]



[0399] 여기서 전술한 정의가 #, Z, R^a, R³, R⁴ 및 R⁵에 적용된다.

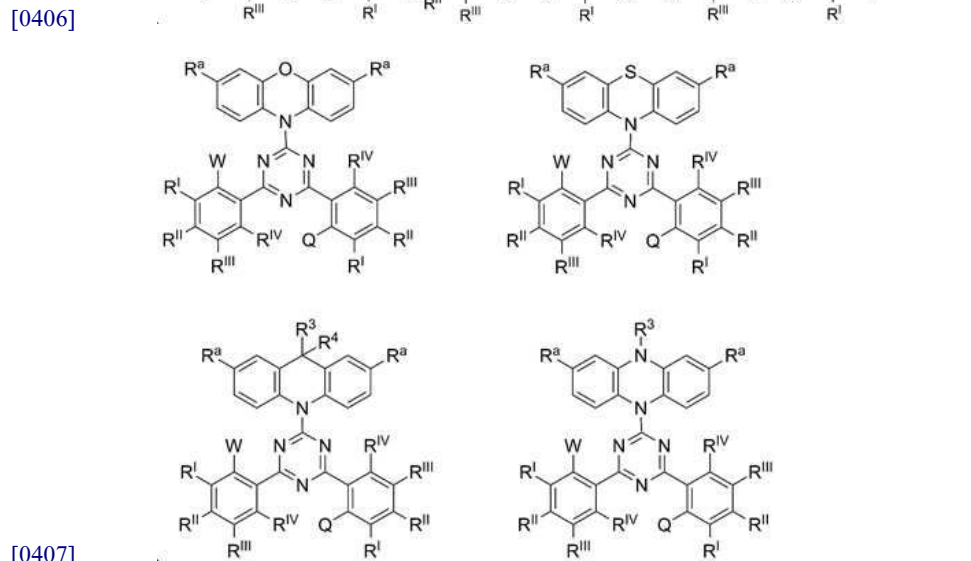
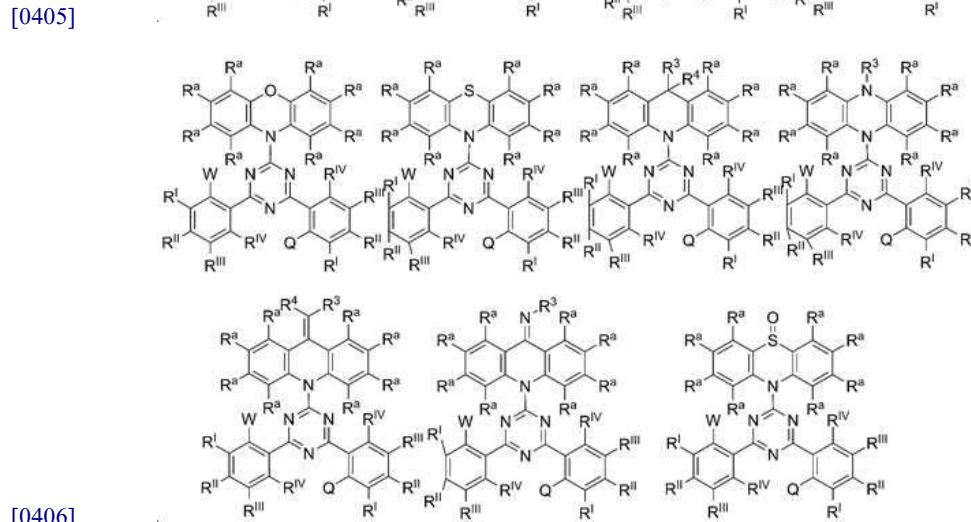
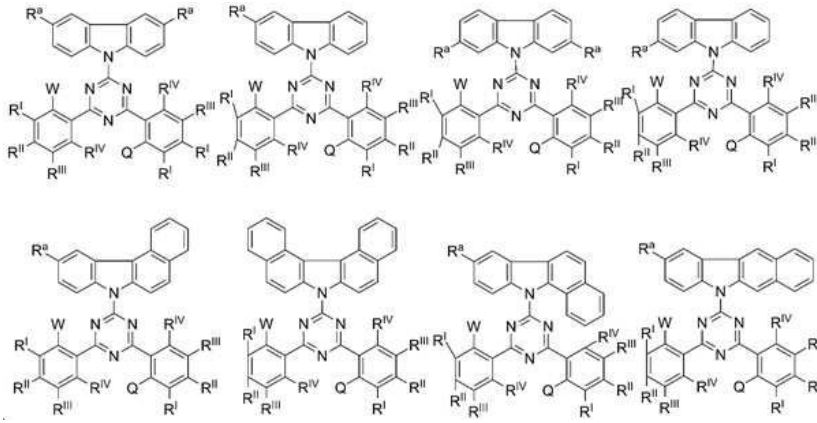
[0400] 일 구현예에서, R^a 및 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 수소(H), 메틸(Me), i-프로필(CH(CH₃)₂)(ⁱPr), t-부틸(^tBu), 페닐(Ph), CN, CF₃ 및 디페닐아민(NPh₂).

[0401] 일 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 화학식 II-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:

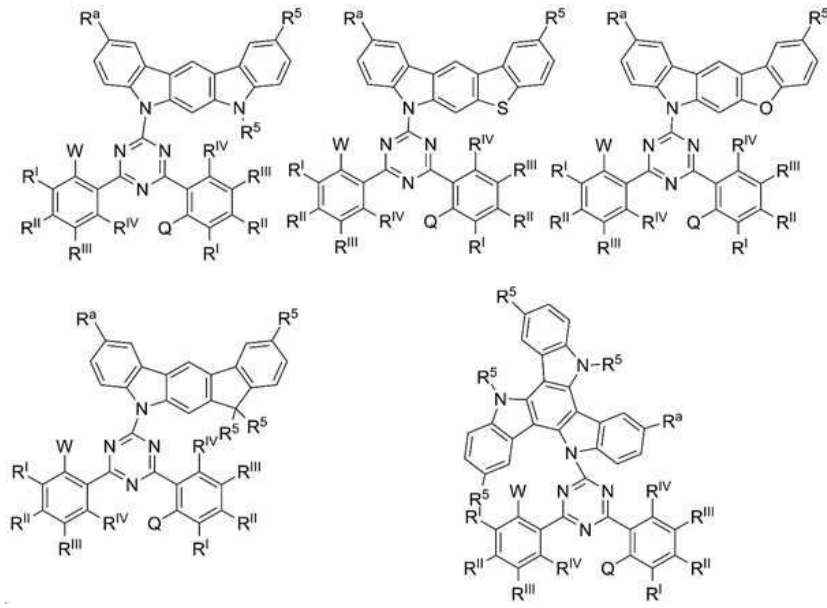
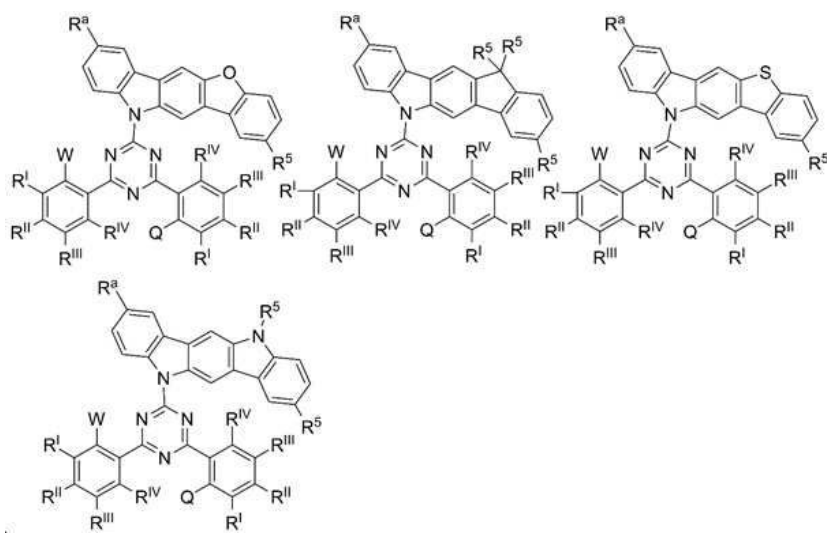
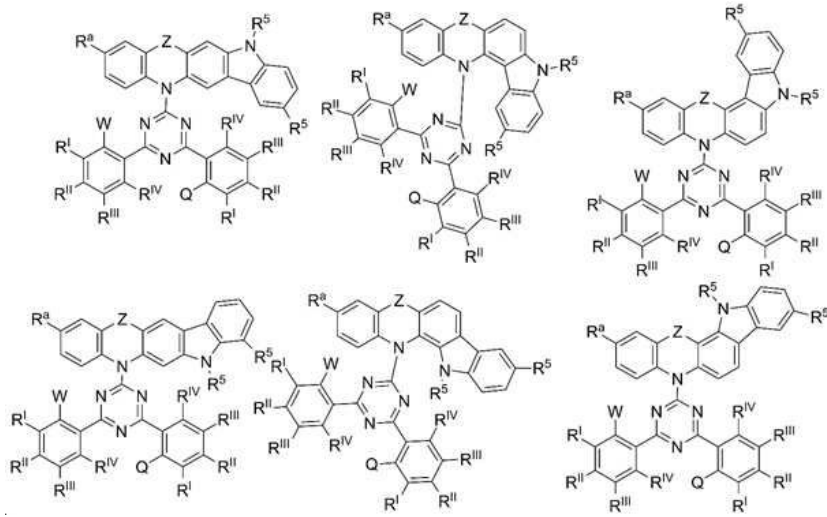


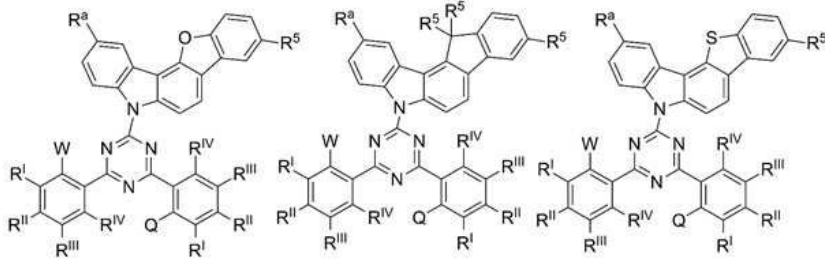
[0403] 화학식 II-1

[0404] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 구조들로부터 선택되는 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:

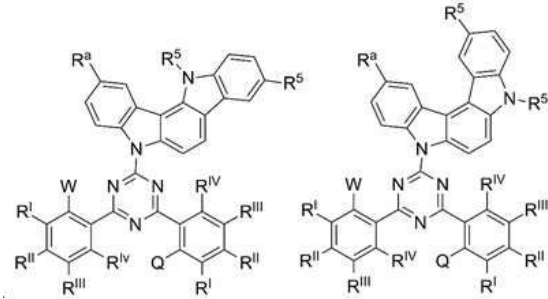


[0407]

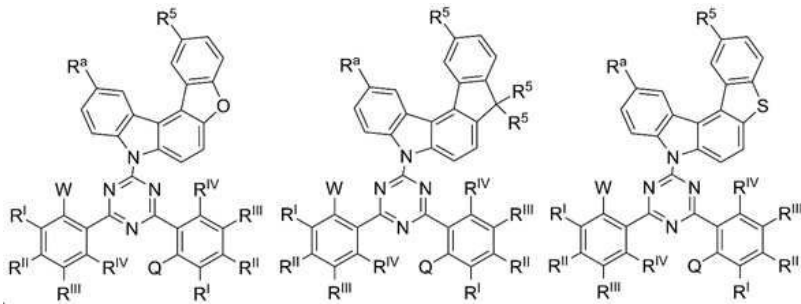




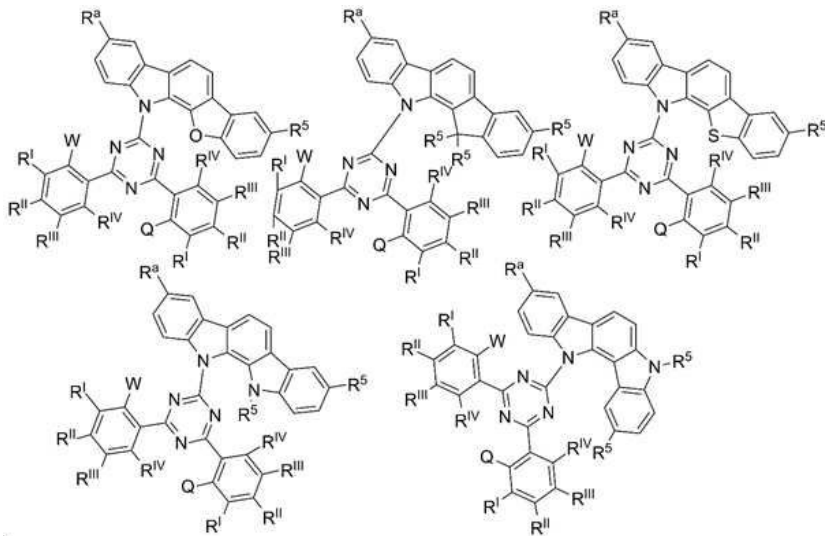
[0411]



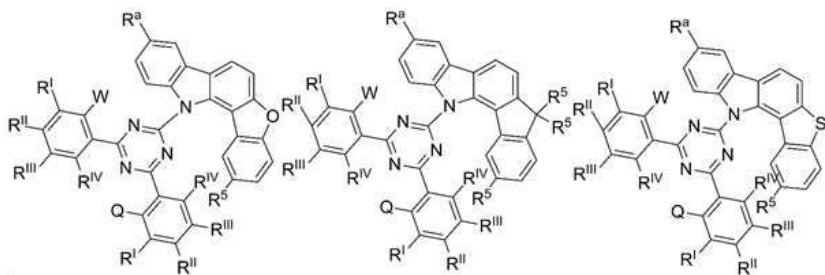
[0412]



[0413]



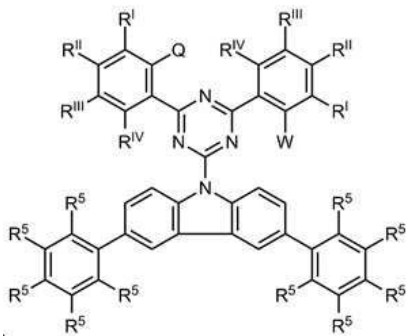
[0414]



[0415]

여기서 전술한 정의가 #, Z, R^a, R³, R⁴ 및 R⁵에 적용된다.

- [0438] C₁-C₄₀-알콕시,
- [0439] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0440] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0441] C₁-C₄₀-티오알콕시,
- [0442] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0443] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0444] C₂-C₄₀-알케닐,
- [0445] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0446] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0447] C₂-C₄₀-알키닐,
- [0448] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고,
- [0449] 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂-기는, R⁵C=CR⁵, C≡C, Si(R⁵)₂, Ge(R⁵)₂, Sn(R⁵)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁵, P(=O)(R⁵), SO, SO₂, NR⁵, O, S 또는 CONR⁵에 의해 선택적으로 치환되고;
- [0450] C₆-C₆₀-아릴,
- [0451] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환되고; 및
- [0452] C₃-C₅₇-헤테로아릴,
- [0453] 이는 하나 이상의 치환기 R⁵로 선택적으로 치환된다.
- [0454] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



- [0455] 화학식 Iaaa.
- [0456] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

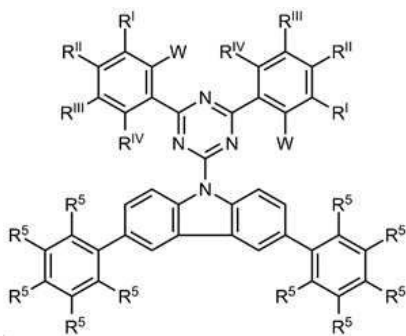
- [0458] 수소,
- [0459] Me,
- [0460] ⁱPr,
- [0461] ^tBu,
- [0462] CN,
- [0463] CF₃,
- [0464] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0465] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0466] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0467] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0468] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0469] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂
- [0470] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0471] 수소,
- [0472] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0473] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0474] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0475] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0476] 수소,
- [0477] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0478] 및
- [0479] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0480] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

- [0481] 수소,
- [0482] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 C_1 - C_4 -알킬; 및
- [0483] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0484] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0485] 수소,
- [0486] Me,
- [0487] i Pr,
- [0488] t Bu,
- [0489] CN,
- [0490] CF_3 ,
- [0491] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0492] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0493] 수소,
- [0494] Me,
- [0495] i Pr,
- [0496] t Bu,
- [0497] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0498] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0499] 수소,
- [0500] Me,
- [0501] i Pr,
- [0502] t Bu,
- [0503] CN,
- [0504] CF_3 ,
- [0505] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0506] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로

치환되는 피리디닐,

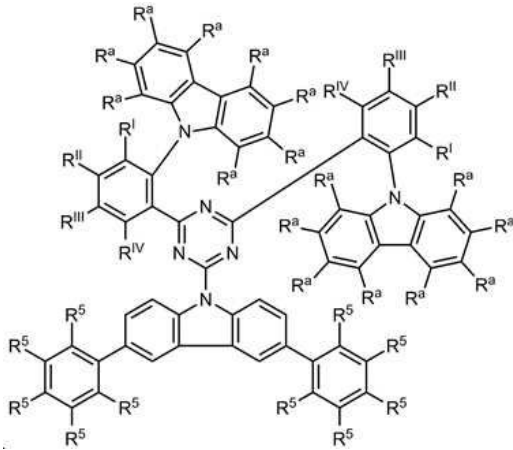
- [0507] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0508] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0509] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0510] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂.
- [0511] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0512] 수소,
- [0513] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0514] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0515] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0516] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0517] 수소,
- [0518] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0519] 및
- [0520] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0521] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0522] 수소,
- [0523] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄-알킬; 및
- [0524] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0525] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0526] 수소,
- [0527] Me,
- [0528] ⁱPr,
- [0529] ^tBu,

- [0530] CN,
- [0531] CF₃,
- [0532] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0533] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0534] 수소,
- [0535] Me,
- [0536] ⁱPr,
- [0537] ^tBu,
- [0538] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0539] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0540] H, 메틸, 페닐 및
- [0541] 하나 이상의 치환기 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및/또는 R^{IV}와 함께 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.
- [0542] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0543] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^I, R^I, R^{II}, R^{III} 및 R^{IV}는 각각의 경우에 H이다.
- [0544] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



- [0545]
- [0546] 화학식 Iaaa-1.

[0547] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0548]
[0549] 화학식 Iaaa-2.

[0550] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0551] 수소,

[0552] Me,

[0553] ⁱPr,

[0554] ^tBu,

[0555] CN,

[0556] CF₃,

[0557] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0558] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

[0559] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0560] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0561] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0562] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂.

[0563] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0564] 수소,

- [0565] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0566] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0567] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0568] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0569] 수소,
- [0570] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0571] 및
- [0572] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0573] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0574] 수소,
- [0575] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄-알킬; 및
- [0576] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0577] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0578] 수소,
- [0579] Me,
- [0580] ⁱPr,
- [0581] ^tBu,
- [0582] CN,
- [0583] CF₃,
- [0584] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0585] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0586] 수소,
- [0587] Me,
- [0588] ⁱPr,
- [0589] ^tBu,
- [0590] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로

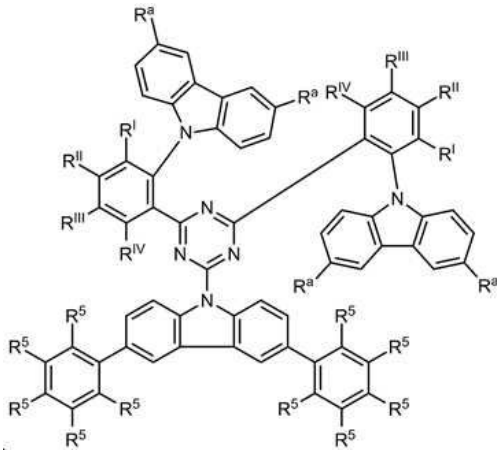
치환되는 Ph.

- [0591] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0592] 수소,
- [0593] Me,
- [0594] ⁱPr,
- [0595] ^tBu,
- [0596] CN,
- [0597] CF₃,
- [0598] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0599] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0600] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0601] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0602] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0603] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂.
- [0604] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0605] 수소,
- [0606] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0607] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0608] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0609] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0610] 수소,
- [0611] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0612] 및

- [0613] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 C_6-C_{60} -아릴.
- [0614] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0615] 수소,
- [0616] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 C_1-C_4 -알킬; 및
- [0617] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0618] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0619] 수소,
- [0620] Me,
- [0621] i Pr,
- [0622] t Bu,
- [0623] CN,
- [0624] CF_3 ,
- [0625] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0626] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0627] 수소,
- [0628] Me,
- [0629] i Pr,
- [0630] t Bu,
- [0631] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0632] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다. 여기서 R^I , R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0633] H, 메틸, 페닐 및
- [0634] 하나 이상의 치환기 R^I , R^{II} , R^{III} 및/또는 R^{IV} 와 함께 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.
- [0635] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^I , R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0636] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^I ,

R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 H이다.

[0637] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0638]

[0639] 화학식 Iaaa-3.

[0640] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

[0641] 수소,

[0642] Me,

[0643] i Pr,

[0644] tBu,

[0645] CN,

[0646] CF₃,

[0647] Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,

[0648] Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,

[0649] Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,

[0650] Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,

[0651] Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,

[0652] 및 Me, i Pr, t Bu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂

[0653] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^5 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

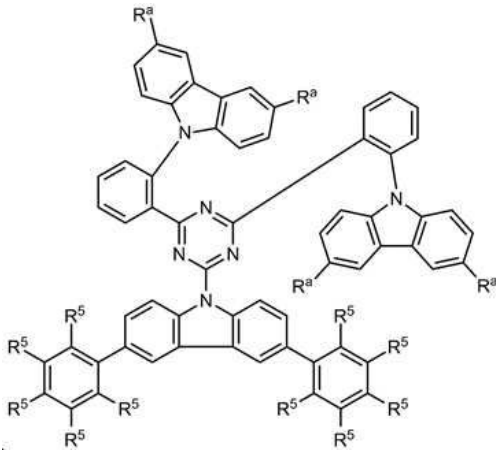
- [0654] 수소,
- [0655] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0656] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0657] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0658] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0659] 수소,
- [0660] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0661] 및
- [0662] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0663] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0664] 수소,
- [0665] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄-알킬; 및
- [0666] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0667] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0668] 수소,
- [0669] Me,
- [0670] ⁱPr,
- [0671] ^tBu,
- [0672] CN,
- [0673] CF₃,
- [0674] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0675] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R⁵는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0676] 수소,
- [0677] Me,
- [0678] ⁱPr,
- [0679] ^tBu,

- [0680] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0681] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0682] 수소,
- [0683] Me,
- [0684] ⁱPr,
- [0685] ^tBu,
- [0686] CN,
- [0687] CF₃,
- [0688] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph,
- [0689] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리디닐,
- [0690] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 피리미디닐,
- [0691] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 카바졸일,
- [0692] Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 트리아지닐,
- [0693] 및 Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃ 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 N(Ph)₂.
- [0694] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0695] 수소,
- [0696] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,
- [0697] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₃-C₅₇-헤테로아릴, 및
- [0698] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₆-C₆₀-아릴.
- [0699] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 Ra는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0700] 수소,
- [0701] 하나 이상의 치환기 R⁶으로 선택적으로 치환된 C₁-C₄₀-알킬,

- [0702] 및
- [0703] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 C_6-C_{60} -아릴.
- [0704] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0705] 수소,
- [0706] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 C_1-C_4 -알킬; 및
- [0707] 하나 이상의 치환기 R^6 으로 선택적으로 치환된 페닐(Ph).
- [0708] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0709] 수소,
- [0710] Me,
- [0711] i Pr,
- [0712] t Bu,
- [0713] CN,
- [0714] CF_3 ,
- [0715] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0716] 본 발명의 특정 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^a 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0717] 수소,
- [0718] Me,
- [0719] i Pr,
- [0720] t Bu,
- [0721] Me, i Pr, t Bu, CN, CF_3 및 Ph로 이루어진 군으로부터 서로 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환되는 Ph.
- [0722] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^1 , R^I , R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 서로 독립적으로 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0723] H, 메틸, 페닐 및
- [0724] 하나 이상의 치환기 R^1 , R^I , R^{II} , R^{III} 및/또는 R^{IV} 와 함께 형성된 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템.
- [0725] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^1 , R^I , R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 서로 독립적으로, H, 메틸 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0726] 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 상기 화학식 Iaaa-3의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 R^1 ,

R^I , R^{II} , R^{III} 및 R^{IV} 는 각각의 경우에 H이다.

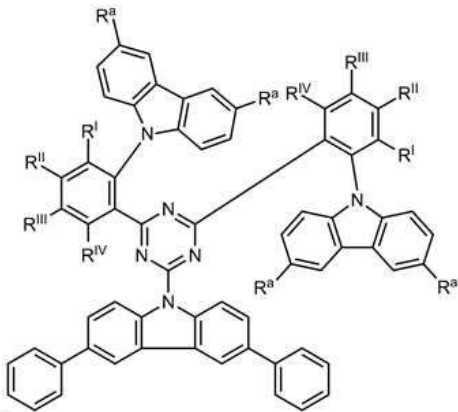
[0727] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-4의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0728]

[0729] 화학식 Iaaa-4.

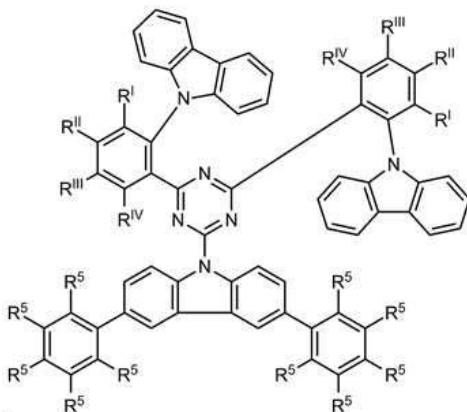
[0730] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-5의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0731]

[0732] 화학식 Iaaa-5.

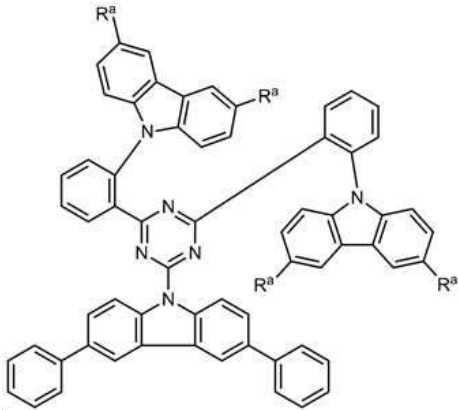
[0733] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-6의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0734]

[0735] 화학식 Iaaa-6.

[0736] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Iaaa-7의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0737]

[0738] 화학식 Iaaa-7.

[0739] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 화학식 I의 구조를 포함하거나 이로 이루어지고, 제2 화학적 모이어티는 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어지며, 여기서 적어도 하나의 치환기는 중수소이다.

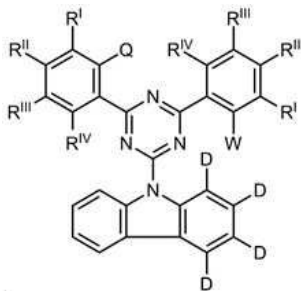
[0740] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 화학식 I의 구조를 포함하거나 이로 이루어지고, 여기서 적어도 하나의 치환기는 중수소이다.

[0741] 본 발명의 일 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어지고, 여기서 적어도 하나의 치환기는 중수소이다.

[0742] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 화학식 I의 구조를 포함하거나 이로 이루어지고, 여기서 적어도 4개의 치환기가 중수소이다.

[0743] 본 발명의 일 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 화학식 II의 구조를 포함하거나 이로 이루어지고, 여기서 적어도 4개의 치환기가 중수소이다.

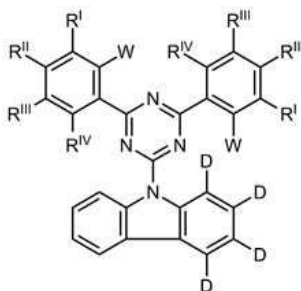
[0744] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Id-1의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:



[0745]

[0746] 화학식 Id-1.

[0747] 본 발명의 일 구현예에서, 제1 화학적 모이어티는 하기 화학식 Id-2의 구조를 포함하거나 이로 이루어진다:

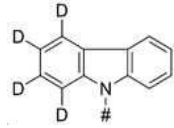


[0748]

[0749] 화학식 Id-2.

[0750] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 제2 화학적 모이어티는 각각의 경우에 하기 화학식 IIId의 구조를 포함하거나 이

로 이루어진다:



[0751]

화학식 IIId.

[0752]

정의

[0753]

여기서, "층"이라는 용어는 광범위하게 평면 형상을 갖는 본체 또는 시트형 본체를 의미한다. 광전자 소자는 여러 층으로 구성될 수 있다.

[0754]

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

[0755]

본 발명의 단락에서 "에미터 물질"("에미터"라고도 함)은 광전자 소자의 발광층(EML)에 포함될 때, 전압 및 전류가 상기 소자에 가해지는 경우 빛을 방출하는 물질이다. 에미터 물질은 일반적으로 "발광성 도펀트" 물질이다. 도펀트 물질(발광성일 수 있거나 아닐 수 있음)은 본 명세서에서 호스트 물질이라고 지칭하는 매트릭스 물질에 매립된 물질이다. 여기서, 호스트 물질은 또한 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED와 같은 광전자 소자에 포함될 때 일반적으로 H^B로 지칭된다.

[0756]

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

[0757]

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

[0758]

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

[0759]

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

[0760]

본 발명의 단락에서, 용어 "카보시클(탄소환)"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(탄소환의)"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.

[0761]

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

[0762]

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

[0763]

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

[0764]

들어, 시클로hex산 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.

[0765] 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 S 로 이루어진 그룹으로부터 개별적으로 선택될 수 있다. 당업자는 형용사 "방향족" 및 "헤테로방향족"이 임의의 시클릭 그룹(즉, 임의의 고리 시스템)을 기술하는 데 사용될 수 있음을 이해한다. 즉, 방향족 시클릭 그룹(즉, 방향족 고리 시스템)은 아릴기이고 헤테로방향족 시클릭 그룹(즉, 헤테로방향족 고리 시스템)은 헤테로아릴기이다.

[0766] 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 이상의 헤테로원자가 헤테로방향족 그룹을 포함하는 경우, 모든 헤테로원자는 바람직하게는 서로 독립적으로 N, O, S 및 Se, 보다 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다.

[0767] 본 발명의 단락에서, 방향족 및 헤테로방향족 그룹(예를 들어, 아릴 또는 헤테로아릴 치환기) 모두에 대해, 방향족 고리 탄소 원자의 수는 특정 치환기의 정의에서 아래 첨자 숫자로, 예를 들어 "C₆-C₆₀-아릴"의 형태로 주어질 수 있다. 이는 각각의 아릴 치환기가 6 내지 60개의 방향족 탄소 고리 원자를 포함함을 의미한다. 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 치환기인지 여부에 관계없이 모든 다른 종류의 치환기에서 허용되는 탄소 원자의 수를 나타내기 위해 동일한 아래 첨자 숫자가 또한 사용된다. 예를 들어 "C₁-C₄₀-알킬"이라는 표현은 1 내지 40개의 탄소 원자를 갖는 알킬 치환기를 의미한다.

[0768] 아릴기의 바람직한 예는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디하이드로피렌, 크라이센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌 또는 이들 그룹의 조합을 포함한다.

[0769] 헤테로아릴기의 바람직한 예는 퓨란, 벤조퓨란, 이소벤조퓨란, 디벤조퓨란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜; 피롤, 인돌, 이소인돌, 카바졸, 인돌로카바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프토이미다졸, 페난트로이미다졸, 피리도이미다졸, 피라지노이미다졸, 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.

[0770] 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.

[0771] 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 이상의 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.

[0772] 본 발명의 단락에서, 용어 "축합된(condensed)" 고리 시스템은 "융합된(fused)" 고리 시스템과 동일한 의미를 갖는다.

[0773] 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. 본 단락에서 용어 "인접한 치환기"는, 동일하거나 이웃하는 원자에 결합된 치환기들을 의미한다.

[0774] 일반적으로, 본 발명의 단락에서, "인접한 치환기" 또는 "인접한 그룹"라는 용어는 동일하거나 이웃하는 원자에 결합된 치환기 또는 그룹을 지칭한다.

[0775] 본 발명의 단락에서, 용어 "알킬기"는 임의의 선형, 분지형 또는 환형 알킬 치환기로서 가장 넓은 의미로 이해될 수 있다. 특히, 용어 "알킬"은 치환기 메틸(Me), 에틸(Et), n-프로필(ⁿPr), i-프로필(ⁱPr), 시클로프로필, n-부틸(ⁿBu), i-부틸(ⁱBu), s-부틸(^sBu), t-부틸(^tBu), 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오-헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로[2,2,2]옥틸, 2-비시클로[2,2,2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 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-덱-1-일, 1,1-디메틸-n-도덱-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라덱-1-일, 1, 1-디메틸-n-헥사덱-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타덱-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-덱-1-일, 1,1-디에틸-n-도덱-1-일, 1,1- 디에틸-n-테트라덱-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사덱-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타덱-1-일, 1-(n-프로필)-시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)-시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)-시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)-시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)-시클로헥스-1-일을 포함한다.

[0776] 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.

[0777] 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.

[0778] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 바와 같이, 용어 "알킬닐"은 선형, 분지형 및 환형 알킬닐 치환기를 포함한다. 용어 알킬닐기는 예를 들어 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐을 포함한다.

[0779] 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.

- [0780] 본 명세서 전체에 걸쳐 사용된 용어 "티오알콕시"는 선형, 분지형 및 환형 티오알콕시 치환기를 포함하며, 여기서 예시적인 알콕시기의 O는 S로 치환된다.
- [0781] 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.
- [0782] 분자 단편이 치환기이거나 다른 부분에 달리 부착된 것으로 기술될 때 그 이름은 그것이 단편(예: 나프틸, 디벤조퓨릴)인 것처럼 쓰이거나 온전한 그룹인 것처럼(예: 나프탈렌, 디벤조퓨란) 쓰일 수 있다. 본원에 사용된 바와 같이, 치환기 또는 부착된 단편을 지정하는 이러한 상이한 방식은 동등한 것으로 간주된다.
- [0783] 또한, 본원에서 "C₆-C₆₀-아릴" 또는 "C₁-C₄₀-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, "C₆-C₆₀-아릴"-치환기는 임의의 6 내지 60개의 방향족 탄소 원자를 통해 결합될 수 있고 "C₁-C₄₀-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.
- [0784] 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, 치환기로서의 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.
- [0785] 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.
- [0786] 예시적인 실시예에서의 기의 정의가 위에서 주어진 일반적인 정의와 다르게 정의되는 경우에는, 상기 예시적인 실시예에서의 정의가 적용된다.
- [0787] 여기에 언급된 임의의 구조에 포함된 모든 수소 원자(H)는 각각의 경우에 서로 독립적으로, 이를 구체적으로 표시하지 않고, 중수소(D)로 대체될 수 있다. 수소를 중수소로 대체하는 것은 일반적인 관행이며, 당업자에게 자명하다.
- [0788] 실험 또는 계산 데이터를 비교하는 경우 동일한 방법론으로 값을 결정해야 한다. 예를 들어, 특정 방법에 의해 실험적 ΔE_{ST}가 0.4eV 미만으로 결정되면 동일한 조건을 포함하는 동일한 특정 방법을 사용하는 경우에만 비교가 유효하다. 구체적인 예를 들자면, 상이한 화합물의 광발광 양자 수율(PLQY)의 비교는 PLQY 값의 결정이 동일한 반응 조건(예: 실온, 10% PMMA 필름에서의 측정)에서 수행된 경우에만 유효하다. 또한 계산된 에너지 값은 동일한 계산 방법(동일한 범함수 및 동일한 기본 세트와 함께)으로 결정되어야 한다.
- [0789] 초형광(Hyper-fluorescence)은 광전자 소자, 특히 OLED로부터의 발광에 대한 개념으로, 여기서 적어도 하나의 발광층이 하나 이상의 TADF 물질 및 하나 이상의 형광 에미터를 포함한다. 초형광에서 적어도 하나의 TADF 물질은 RISC(reverse-intersystem-crossing)를 통해 삼중항 여기 상태를 단일항 여기 상태로 변환할 수 있으며, 여기 에너지를 적어도 하나의 형광 에미터로 전달하여 빛을 방출한다. 이는 효율적인 형광 생성을 위해 삼중항 엑시톤을 수확(harvest)하도록 허용할 수 있다.
- [0790] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자
- [0791] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 관한 것이다.
- [0792] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 일 구현예에서, 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0793] · 유기발광다이오드(OLED),

- [0794] · 발광 전기화학 전지,
- [0795] · OLED 센서, 특히 주변과 완전히 차단되지 않은 가스 및 증기 센서,
- [0796] · 유기 다이오드,
- [0797] · 유기 태양 전지,
- [0798] · 유기 트랜지스터,
- [0799] · 유기 전계 효과 트랜지스터,
- [0800] · 유기 레이저 및
- [0801] · 하향 변환 소자(down-conversion element).
- [0802] 발광 전기화학 전지는 캐소드, 애노드 및 본 발명에 따른 유기 분자를 포함할 수 있는 활성층의 3개 층으로 이루어진다.
- [0803] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED), 발광 전기화학 전지(LEC), 유기 레이저 및 발광 트랜지스터로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0804] 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 유기 발광 다이오드(OLED)이다.
- [0805] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 하기 층 구조를 나타낼 수 있는 OLED일 수 있다:
- [0806] 1. 기판
- [0807] 2. 애노드층 A
- [0808] 3. 정공 주입층, HIL
- [0809] 4. 정공 수송층, HTL
- [0810] 5. 전자 저지층, EBL
- [0811] 6. 발광층, EML
- [0812] 7. 정공 저지층, HBL
- [0813] 8. 전자 수송층, ETL
- [0814] 9. 전자 주입층, EIL
- [0815] 10. 캐소드층 C,
- [0816] 여기서 (역전된 층 구조를 갖는) OLED는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 선택적으로 포함하고, 여기서 상이한 층들은 병합될 수 있고 OLED는 위에 정의된 각 레이어 유형의 한 층 이상을 포함할 수 있다.
- [0817] 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 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.
- [0818] 본 발명의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 다음의 역전된 층(inverted layer) 구조를 갖는 OLED이다:
- [0819] 1. 기판
- [0820] 2. 캐소드층 C
- [0821] 3. 전자 주입층, EIL
- [0822] 4. 전자 수송층, ETL

- [0823] 5. 정공 저지층, HBL
- [0824] 6. 발광층, EML
- [0825] 7. 전자 저지층, EBL
- [0826] 8. 정공 수송층, HTL
- [0827] 9. 정공 주입층, HIL
- [0828] 10. 애노드층 A
- [0829] 여기서 OLED는 애노드 층 A, 캐소드 층 C 및 발광층 EML을 제외한 각각의 층을 포함하고, 단지 선택적으로, 여기서 상이한 층들이 병합될 수 있고 OLED는 위에서 정의된 각 층 유형의 하나 이상의 층을 포함할 수 있다.
- [0830] 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%(중량에 대한 백분율), 보다 특히 1% 내지 80중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0831] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 적층 구조를 나타낼 수 있는 OLED이다. 이 구조에서는 OLED가 나란히 배치되는 일반적인 배열과 달리, 개별 소자가 서로 위에 쌓인다. 혼합광은 적층 구조를 나타내는 OLED에서 생성될 수 있으며, 특히 백색광은 청색, 녹색 및 적색 OLED를 적층함으로써 생성될 수 있다. 또한, 적층 구조를 나타내는 OLED는 선택적으로 전하 생성층(CGL)을 포함할 수 있으며, 이는 일반적으로 2개의 OLED 서브유닛 사이에 위치하며 일반적으로 n-도핑 및 p-도핑 층으로 구성되며, n-도핑 층은 일반적으로 애노드층에 더 가깝게 위치한 하나의 CGL이다.
- [0832] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 애노드와 캐소드 사이에 2개 이상의 발광층을 포함하는 OLED이다. 특히, 이러한 소위 탠덤 OLED는 3개의 발광층을 포함하고, 여기서 하나의 발광층은 적색광을 방출하고, 하나의 발광층은 녹색광을 방출하고, 하나의 발광층은 청색광을 방출하고, 선택적으로 전하 생성층, 개별 발광층 사이의 차단층 또는 수송층과 같은 추가적인 층을 포함할 수 있다. 추가적인 구현예에서, 발광층은 인접하게 적층된다. 추가적인 구현예에서, 탠덤 OLED는 각각 2개의 발광층 사이에 전하 생성층을 포함한다. 또한, 인접한 발광층 또는 전하 생성층에 의해 분리된 발광층이 병합될 수 있다.
- [0833] 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 본질적으로 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 뒷부분에 설명된 바와 같이, 두 개 이상의 분자 사이에 선택적으로 에너지 전달이 있을 수 있다.
- [0834] 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자는 광전자 소자의 발광층(EML), 가장 바람직하게는 OLED의 EML에 포함될 수 있다. 그러나, 본 발명에 따른 유기 분자는 또한 예를 들어 전자 수송층(ETL) 및/또는 전자 차단층(EBL) 또는 엑시톤 차단층 및/또는 정공 수송층(HTL) 및/또는 정공 차단층(HBL)에서 사용될 수 있다. 사용되는 경우, 광전자 소자, 특히 OLED에서 각각의 층에서 본 발명에 따른 유기 분자의 분율은 0.1 내지 99 중량%, 더 특히 1 내지 80 중량%이다. 대안적인 구현예에서, 각각의 층에서 유기 분자의 비율은 100중량%이다.
- [0835] 광전자 소자, 특히 OLED의 개별 층에 적합한 재료의 선택 기준은 당업자의 상식의 부분을 형성한다. 최신 기술은 개별 층에 사용되는 많은 물질을 보여주고 또한 어떤 물질이 서로 함께 사용하기에 적합한지 교시한다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 물질이 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에도 사용될 수 있음이 이해될 수 있다. 이하에서, 개별 층에 대한 물질의 바람직한 예가 주어질 것이다. 전술한 바와 같이, 이것은 아래에 열거된 모든 유형의 층이 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 존재해야 함을 의미하지 않는다는 것으로 이해된다. 추가로, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 예를 들어 2개 이상의 발광층(EML)과 같이 다음에 나열된 각각의 층 중 하나 이상을 포함할 수 있음이 이해될 수 있다. 동일한 유형의 2개 이상의 층(예를 들어, 2개 이상의 EML 또는 2개 이상의 HTL)이 반드시 동일한 물질 또는 심지어 동일한 비율의 동일한 물질을 포함하지 않는다는 것도 이해될 수 있다. 또한, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는 다음에 열거된 모든 층 유형을 포함할 필요는 없으며, 여

기에서 애노드 층, 캐소드 층 및 발광층은 일반적으로 모든 경우에 존재한다.

[0836] 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 (본질적으로) 투명한 필름을 얻게 할 수 있는 물질로 이루어진다. OLED로부터의 발광을 허용하기 위해 두 전극 중 적어도 하나는 (본질적으로) 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.

[0837] 바람직하게는, 애노드 층 A는 (본질적으로) 인듐 주석 산화물(ITO)(예를 들어, $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$)로 구성될 수 있다. 투명 전도성 산화물(TCO)로 인해 야기되는 애노드층(A)의 거칠기는 정공 주입층(HIL)을 사용함으로써 상쇄될 수 있다. 또한, HIL은 TCO로부터 정공 수송층(HTL)으로의 유사(quasi) 전하 운반체(즉, 정공)의 수송을 용이하게 한다는 점에서 유사 전하 운반체의 주입을 용이하게 할 수 있다. 정공 주입 층(HIL)은 폴리-3,4-에틸렌 디옥시 티오펜(PEDOT), 폴리스티렌 설포네이트(PSS), MoO_2 , V_2O_5 , CuPC 또는 CuI, 특히 PEDOT 및 PSS의 혼합물을 포함할 수 있다. 정공 주입층(HIL)은 또한 애노드층(A)에서 정공 수송층(HTL)으로 금속이 확산되는 것을 방지할 수 있다. 예를 들면, HIL은 PEDOT:PSS(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜:폴리스티렌 설포네이트), PEDOT(폴리-3,4-에틸렌디옥시 티오펜), mMTDATA(4,4',4''-트리스[페닐(m-톨릴)아미노]트리페닐아민), 스피로-TAD(2,2',7,7'-테트라키스(n,n-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌), DNTPD(N1,N1'-(페닐-4,4'-디일)비스(N1-페닐-N4,N4-디-m-톨릴벤젠-1,4-디아민), NPB(N,N'-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.

[0838] 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)), α -NPD(폴리(4-부틸페닐-디페닐-아민)), TAPC(4,4'-시클로헥실리렌-비스[N,N-비스(4-메틸페닐)벤젠아민]), 2-TNATA(4,4',4''-트리스[2-나프틸(페닐)아미노]트리페닐아민), Spiro-TAD(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 헤테로환을 포함할 수 있다. 또한, HTL은 유기 정공 수송 매트릭스 내의 무기 또는 유기 도펀트로 구성될 수 있는 p-도핑된 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바나듐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 텅스텐 산화물과 같은 전이 금속 산화물이 무기 도펀트로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄($\text{F}_4\text{-TCNQ}$), 구리-펜타플루오로벤조에이트(Cu(I)pFBz) 또는 전이 금속 착체가 유기 도펀트로서 사용될 수 있다.

[0839] 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)-9H카바졸-3-일)-9H-카바졸), CzSi(9-(4-tert-부틸페닐)-3,6-비스(트리페닐실릴)-9H-카바졸), 및/또는 DCB(N,N'-디카바졸일-1,4-디메틸벤젠)를 포함할 수 있다.

[0840] 정공 수송층(HTL) 또는 전자 저지층(EBL)(만약 존재할 경우)에 인접하여 발광층(EML)이 일반적으로 위치한다. 발광층(EML)은 적어도 하나의 에미터 분자(즉, 에미터 물질)를 포함한다. 일반적으로 EML은 하나 이상의 호스트 물질(매트릭스 물질이라고도 함)을 추가로 포함한다. 예를 들어, 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'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 중에서 선택된다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 호스트 물질은 일반적으로 각각의 호스트 물질(들) 내에 매립된 적어도 하나의 에미터 분자의 첫 번째(즉, 최저) 삼중항(T1) 및 첫 번째(즉, 최저) 단일항(S1) 에너지 준위보다 에너지적으로 더 높은 첫 번째(즉, 최저) 삼중항(T1) 및 첫 번째(즉, 최저) 단일항(S1) 에너지 준위를 나타내도록 선택되어야 한다.

[0841] 전술한 바와 같이, 본 발명의 단락에서 광전자 소자의 적어도 하나의 EML은 본 발명에 따른 분자를 적어도 하나 포함하는 것이 바람직하다. 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자의 EML의 바람직한 조성은 본 명세서의 뒷부분(아래 참조)에서 더 자세히 설명된다.

[0842] 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 전자 부족 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 헤테로환일 수 있다. ETL은 예를 들어 NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq3(알루미늄-트리(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐-포스핀옥사이드), BPyTP2(2,7-디(2,2'-비피리딘-5-일)트리페닐), Sif87(디벤조[b,d]티오펜-2-일트리페닐실란), Sif88(디벤조[b,d]티오펜-2-일)디페닐실란), BmPyPhB(1,3-비스[3,5-디(피리딘-3-일)페닐]벤젠) 및/또는 BTB(4,4'-비스-[2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐)]-1,1'-비페닐)를 포함할 수 있다. 선택적으로, ETL은 Liq((8-히드록시퀴놀리나토)리튬)와 같은 물질로 도핑될 수 있다. 전자 수송층(ETL)이 또한 정공을 저지할 수 있거나, 일반적으로 EML과 ETL 사이에 정공 저지층(HBL)이 도입된다.

[0843] 정공 저지층(HBL)은 예를 들어 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 = 바토쿠프로인), 4,6-디페닐-2-(3-(트리페닐실릴)페닐)-1,3,5-트리아진, 9,9'-(5-(6-([1,1'-비페닐]-3-일)-2-페닐피리미딘-4-일)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸), BA1q(비스(8-히드록시-2-메틸퀴놀린)-(4-페닐페녹시)알루미늄), NBphen(2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), Alq3(알루미늄-트리(8-히드록시퀴놀린)), TSP01(디페닐-4-트리페닐실릴페닐포스피록사이드), T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), T3T(2,4,6-트리스(트리페닐-3-일)-1,3,5-트리아진), TST(2,4,6-트리스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진) 및/또는 TCB/TCP(1,3,5-트리스(N-카바졸일)벤졸/1,3,5-트리스(카바졸)-9-일)벤젠)을 포함할 수 있다.

[0844] 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, Li, F, Ca, Ba, Mg, In, W 또는 Pd) 또는 금속 합금을 포함하거나 이들로 이루어질 수 있다. 실용적인 이유로 캐소드층은 또한 Mg, Ca 또는 Al과 같은 (본질적으로) 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.

[0845] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED는 선택적으로 전자 수송층(ETL)과 캐소드 층 C(전자 주입층(EIL)으로 지정될 수 있음) 사이에 보호층을 추가로 포함할 수 있다. 이 층은 불화리튬, 불화세슘, 은, Liq((8-히드록시퀴놀리나토)리튬), Li₂O, BaF₂, MgO 및/또는 NaF를 포함할 수 있다.

[0846] 선택적으로, 전자 수송층(ETL) 및/또는 정공 저지층(HBL)은 또한 하나 이상의 호스트 화합물을 포함할 수 있다.

[0847] 본 명세서에 사용된 바와 같이, 특정 문단에서 보다 구체적으로 정의되지 않은 경우, 방출 및/또는 흡수된 광의 색상 지정은 다음과 같다:

[0848] 보라색: >380-420nm의 파장 범위;

[0849] 심청색: >420-480nm의 파장 범위;

[0850] 하늘색: >480-500nm의 파장 범위;

[0851] 녹색: >500-560nm의 파장 범위;

[0852] 노란색: >560-580nm의 파장 범위;

[0853] 주황색: >580-620nm의 파장 범위;

- [0854] 적색: >620-800nm의 파장 범위.
- [0855] 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.
- [0856] 심청색 에미터는 바람직하게는 475 nm 미만, 더 바람직하게는 470 nm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 465 nm 미만 또는 심지어 460 nm 미만에서 최대 발광을 가질 수 있다. 그것은 전형적으로 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 전형적으로 실온(즉, (대략) 20℃)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 본 발명에 따른 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정 시, 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.
- [0857] 추가적인 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하고 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에 정의되어 있는 바와 같은 원색의 청색(CIE_x = 0.131 및 CIE_y = 0.046)의 CIE_x(= 0.131) 및 CIE_y(= 0.046) 색좌표에 가까운 CIE_x 및 CIE_y 색좌표를 갖는 광을 발광하고, 따라서 초고해상도(UHD) 디스플레이, 예를 들어 UHD-TV에 사용하기에 적합한 OLED에 관한 것이다. 따라서 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.02 내지 0.30, 바람직하게는 0.03 내지 0.25, 보다 바람직하게는 0.05 내지 0.20, 더욱 더 바람직하게는 0.08 내지 0.18 또는 심지어 0.10 내지 0.15의 CIE_x 색좌표 및/또는 0.00 내지 0.45, 바람직하게는 0.01 내지 0.30, 보다 바람직하게는 0.02 내지 0.20, 더욱 더 바람직하게는 0.03 내지 0.15 또는 심지어 0.04 내지 0.10의 CIE_y 색좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.
- [0858] 추가적인 구현예는 1000cd/m²에서 8% 초과, 보다 바람직하게는 10% 초과, 보다 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, 보다 바람직하게는 440 nm 내지 480 nm, 훨씬 더 바람직하게는 450 nm 내지 470 nm에서 최대 발광을 나타내고/나타내거나, 500cd/m²에서 100h 초과, 바람직하게는 200h 초과, 보다 바람직하게는 400h 초과, 훨씬 더 바람직하게는 750h 초과 또는 심지어 1000h 초과외의 LT80 값을 나타내는, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED에 관한 것이다.
- [0859] 녹색 에미터 물질은 바람직하게는 500 내지 560 nm, 보다 바람직하게는 510 내지 550 nm, 보다 더 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 가질 수 있다. 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 전형적으로 실온(즉, (대략) 20℃)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 본 발명에 따른 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정 시, 500 내지 600 nm, 보다 바람직하게는 510 내지 550 nm, 가장 바람직하게는 520 내지 540 nm의 최대 발광을 나타낸다.
- [0860] 추가적인 구현예는 ITU-R Recommendation BT.2020(Rec. 2020)에 정의되어 있는 바와 같은 원색의 녹색(CIE_x = 0.170 및 CIE_y = 0.797)의 CIE_x(= 0.170) 및 CIE_y(= 0.797) 색좌표에 가까운 CIE_x 및 CIE_y 색좌표를 갖는 광을 발광하는 OLED에 관한 것이다. 따라서 이러한 소자는 초고해상도(UHD) 디스플레이, 예를 들어 UHD-TV에 사용하기에 적합하다. 본 맥락에서, 용어 "가까운"은 본 문단의 마지막에 제공된 CIE_x 및 CIE_y의 범위를 나타낸다. 상업적 응용에서, 전형적으로 상부 발광(상부 전극이 투명함) 소자가 사용되는 반면, 본 출원 전반에 걸쳐 사용되는 실험 소자는 하부 발광 소자(하부 전극 및 기판이 투명함)를 나타낸다. 따라서 본 발명의 추가적인 측면은 발광이 0.10 내지 0.45, 바람직하게는 0.10 내지 0.35, 보다 바람직하게는 0.10 내지 0.30, 더욱 더 바람직하게는 0.10 내지 0.25 또는 심지어 0.15 내지 0.20의 CIE_x 색좌표 및/또는 0.60 내지 0.92, 바람직하게는 0.65 내지 0.90, 보다 바람직하게는 0.70 내지 0.88, 더욱 더 바람직하게는 0.75 내지 0.86 또는 심지어 0.79 내지 0.84의 CIE_y 색좌표를 나타내는 OLED에 관한 것이다.
- [0861] 추가적인 바람직한 구현예는 14500cd/m²에서 10% 초과, 보다 바람직하게는 13% 초과, 보다 바람직하게는 15% 초과, 더욱 더 바람직하게는 17% 초과 또는 심지어 20% 초과외의 외부 양자 효율을 나타내고/나타내거나, 500 nm 내지 560 nm, 바람직하게는 510 nm 내지 550 nm, 보다 바람직하게는 520 nm 내지 540 nm에서 최대 발광을 나타내고/나타내거나, 14500cd/m²에서 100h 초과, 바람직하게는 250h 초과, 보다 바람직하게는 500h 초과, 훨씬 더 바람직하게는 750h 초과 또는 심지어 1000h 초과외의 LT97 값을 나타내는, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED에 관한 것이다.

- [0862] 추가적인 바람직한 구현에는 분명한 색점에서 발광하는, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED에 관한 것이다. 본 발명에 따르면, OLED는 좁은 발광 밴드(작은 반치폭(FWHM))를 갖는 빛을 방출한다. 바람직한 구현예에서, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 OLED는 0.50 eV 미만, 바람직하게는 0.48 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.45 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.43 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.40 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.35 eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.30 eV 미만 또는 심지어는 0.25 eV 미만의, 주 발광 피크의 FWHM을 갖는 광을 방출한다.
- [0863] 본 발명에 따르면, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는, 예를 들어 디스플레이, 조명 응용 분야의 광원 및 의료 및/또는 미용 응용 분야(예를 들어 광선 치료)의 광원으로 사용될 수 있다.
- [0864] 본 발명에 따른 유기 분자와 추가 물질의 조합
- [0865] 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.
- [0866] 예를 들어, 당업자는 EML이 전압(및 전류)이 해당 소자에 인가될 때 발광할 수 있는 단일 물질로 구성될 수 있음을 이해한다. 그러나, 당업자는 또한 광전자 소자(여기서는 바람직하게는 OLED)의 EML에서 상이한 물질들, 특히 하나 이상의 호스트 물질(들)(즉, 매트릭스 물질(들)); 여기서 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자에 포함될 때 호스트 물질(들) H^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.
- [0867] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자의 사용의 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 EML 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나 이상의 층에 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.
- [0868] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 또는 EML에 직접 인접한 층 또는 이러한 층들의 하나 이상의 층에 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다.
- [0869] 광전자 소자에서 본 발명에 따른 유기 분자를 사용하는 훨씬 더 바람직한 구현예에서, 상기 광전자 소자는 OLED이고 EML에 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함한다. 당업자는 이것이 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자가 예를 들어 각각의 EML의 호스트 물질 H^B (즉, 매트릭스 물질) 또는 적어도 하나의 호스트 물질 H^B (즉, 매트릭스 물질)에 매립된 도펀트(물질)로서 사용될 수 있음을 의미하는 것으로 이해한다. 당업자는 또한 도펀트(물질)가 발광성(즉, 에미터 물질) 또는 비발광성(즉, 전압 및 전류가 광전자 소자에 인가될 때 발광하지 않음)일 수 있음을 이해한다.
- [0870] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 일 구현예에서, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자는 발광층 EML에서 에미터 물질로서 사용된다. 즉, 전압(및 전류)이 해당 소자에 인가될 때 발광한다.
- [0871] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 또 다른 구현예에서, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자는 발광층 EML에 존재하지만, 전압(및 전류)이 상기 소자에 인가될 때 발광하지 않는다. 즉, 그러한 경우에 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자는 호스트 물질 H^B 또는 비발광성 도펀트일 것이고, 둘 다 당업자에게 공지된 물질이다.
- [0872] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED에 관한 일 구현예에서, 하나보다 많은 본 발명에 따른 유기 분자가 적어도 하나의 EML에 포함된다. 당업자는 이것이, 하나 보다 많은 본 발명에 따른 유기 분자가 모두 상기 EML에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트 물질)일 수 있거나, 모두 상기 EML에서 호스트 물질 H^B 일 수 있거나, 또는 모두 상기 EML에서 비발광성 도펀트 물질일 수 있거나, 또는 상기 유기 분자가 서로 독립적으로 호스트 물질 H^B , 에미터 물질(즉, 방출 도펀트 물질) 또는 비발광성 도펀트 물질로부터 선택될 수 있음을 의미함을 이해한다.
- [0873] 당업자에게 공지된 바와 같이, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED)에서 에미터 물질(즉, 발광성 도펀트)로부터의 발광은 여기된 단일항 상태(전형적으로 최저 여기 단일항 상태 S1) 및 여기된 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1)로부터의 인광을 포함한다.

[0874] 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.

[0875] 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^E)와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 E(T1^E) 사이의 에너지 차이 ΔE_{ST}가 감소하면, RISC에 의한 최저 여기 단일항 상태에서부터 최저 여기 삼중항 상태의 전환은 고효율로 일어날 수 있음이 당업자에게 알려져 있다. 따라서, TADF 물질이 일반적으로 작은 ΔE_{ST} 값을 가질 것(아래 참조)이라는 것은 당업자의 일반적인 지식의 일부를 형성한다. 당업자에게 공지된 바와 같이, TADF 물질은 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^N로부터 형성되는 엑시플렉스일 수 있음이 당업자에게 알려져 있다 (아래 참조).

[0876] (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) 내에 각 에미터(즉, 가정된 TADF 물질) 1-10 중량%, 특히 10 중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름이 샘플로서 사용될 수 있다. 분석은 예를 들어 Edinburgh Instruments의 FS5 형광 분광기를 사용하여 수행될 수 있다. 샘플 PMMA 필름을 큐벳에 넣고 측정하는 동안 질소 분위기가 유지될 수 있다. 데이터 수집은 잘 확립된 시간 상관 단일 광자 계수(TCSPC, vide infra) 기술을 사용하여 수행될 수 있다. 시간 및 신호 강도의 여러 자릿수에 걸쳐 전체 감쇠 역학을 수집하기 위해 4개의 시간 창(200ns, 1 μs 및 20 μs 및 > 80 μs보다 더 긴 측정 범위)에서 측정을 수행하고 결합할 수 있다(아래 참조).

[0877] TADF 물질은 앞서 언급한 전체 감쇠 역학과 관련하여 다음 두 가지 조건을 충족하는 것이 바람직하다.

[0878] (i) 감쇠 역학은 나노초(ns) 범위와 마이크로초(μs) 범위의 두 가지 시간 영역을 나타냄; 및

[0879] (ii) 두 가지 시간 영역에서 발광 스펙트럼의 모양이 일치함.

[0880] 여기서, 첫 번째 감쇠 영역에서 방출된 광의 부분은 즉시 형광으로 간주되고, 두 번째 감쇠 영역에서 방출된 일부는 지연 형광으로 간주된다.

[0881] 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.

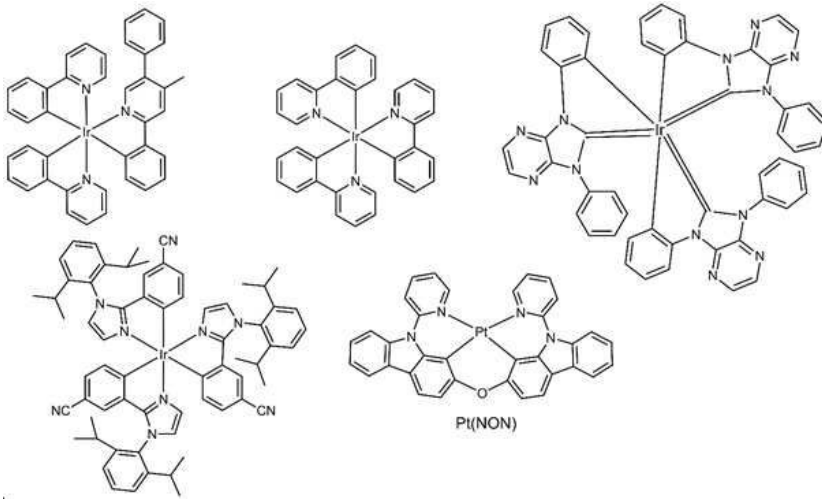
$$\frac{\int I_{DF}(t)dt}{\int I_{FF}(t)dt} = n$$

[0882] 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(지연 형광과 즉시 형광의 비율)을 나타낸다.

[0884] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 0.05보다 큰(n > 0.05) n-값(지연 형광과 즉시 형광의 비율)을 나타낸다.

- [0885] 본 발명의 단락에서, TADF 물질 E^B 는 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위 $E(S1^E)$ 와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 $E(T1^E)$ 사이의 에너지 차이에 해당하는 ΔE_{ST} 값을 나타내는 것을 특징으로 하고, 0.4eV 미만, 바람직하게는 0.3eV 미만, 더 바람직하게는 0.2eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.1eV 미만, 또는 심지어 0.05eV 미만의 값을 나타낸다. TADF 물질 E^B 의 ΔE_{ST} 값을 결정하는 방법은 본문 뒷부분에 설명되어 있다.
- [0886] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 본 명세서에서 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B 이고, 최저 여기 단일항 상태 에너지 준위와 최저 여기 삼중항 상태 에너지 준위 사이의 에너지 차이에 상응하는 ΔE_{ST} 값이 0.4eV 미만, 바람직하게는 0.3eV 미만, 더 바람직하게는 0.2eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.13eV 미만, 또는 심지어 0.07eV 미만을 나타낸다.
- [0887] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물의 단락에서(아래 참조), 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 하나 이상의 TADF 물질 E^B 를 포함하는 조성물을 언급할 것이다. 당업자는 이와 관련하여 최신 기술에 개시된 임의의 TADF 물질이 적합한 TADF 물질 E^B 로 간주될 수 있음을 이해한다. 당업자는 또한 TADF 물질 E^B 가 일반적으로, (전자-) 도너 및 (전자-) 억셉터 그룹 각각에서, HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 및 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)가 공간적으로 크게 분리되도록 설계될 것임을 이해한다. 이러한 그룹은 일반적으로 부피가 크거나(bulky)(즉, 입체적으로 까다로움), 스피로 접합을 통해 연결되어 비틀어지고, HOMO와 LUMO의 공간적 중첩이 감소한다. 그러나 HOMO와 LUMO의 공간적 중첩을 최소화하면 TADF 물질의 PLQY(Photoluminescence Quantum Yield)도 낮아지는 단점이 있다. 따라서 실제로는 ΔE_{ST} 를 줄이고 높은 PLQY를 달성하기 위해 이 두 가지 효과가 모두 고려된다.
- [0888] 일반적으로 TADF 물질 설계를 위한 한 가지 접근 방식은 HOMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 도너 모이어티와 LUMO가 분포된 하나 이상의 (전자) 억셉터 모이어티를 본 명세서에서 링커 그룹으로 지칭되는, 동일한 브리지에 공유 결합하는 것이다. TADF 물질 E^B 는 또한 예를 들어 동일한 억셉터 모이어티에 결합된 2개 또는 3개의 링커 그룹을 포함할 수 있고 추가적인 도너 및 억셉터 모이어티가 이들 2개 또는 3개의 링커 그룹 각각에 결합될 수 있다.
- [0889] 하나 이상의 도너 모이어티 및 하나 이상의 억셉터 모이어티는 또한 서로 직접 결합될 수 있다(링커 그룹의 존재 없이).
- [0890] 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.
- [0891] 벤젠-, 비페닐- 및 어느 정도의 터페닐-유도체가 일반적인 링커 그룹이다.
- [0892] 니트릴 그룹은 TADF 물질에서 매우 일반적인 억셉터 모이어티이며 알려진 예는 다음과 같다.
- [0893] (i) 카바졸일 디시아노벤젠 화합물
- [0894] 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 유도체와 같은 것;
- [0895] (ii) 카바졸일 시아노피리딘 화합물
- [0896] 4CzCNPY(2,3,5,6-테트라(9H-카바졸-9-일)-4-시아노피리딘) 및 이의 유도체와 같은 것;
- [0897] (iii) 카바졸일 시아노비페닐 화합물
- [0898] 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 유도체와 같은 것;
- [0899] 이들 물질에서 하나 이상의 니트릴 그룹은 억셉터 모이어티로서 불소(F) 또는 트리플루오로메틸(CF₃)로 대체될 수 있다.

- [0900] 트리아진-, 피리미딘-, 트리아졸-, 옥사디아졸-, 티아디아졸-, 헵타진-, 1,4-디아자트리페닐렌-, 벤조티아졸-, 벤즈옥사졸-, 퀴놀살린- 및 디아자플루오렌 유도체와 같은 질소-헤테로시클도 TADF 분자 구성에 사용되는 잘 알려진 억셉터 모이어티이다. 예를 들어 트리아진 억셉터를 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.
- [0901] 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 억셉터 모이어티로서 포함하고, 억셉터 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.
- [0902] 설폭사이드, 특히 디페닐 설폭사이드는 또한 TADF 물질의 구성을 위한 억셉터 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.
- [0903] 형광 에미터 F는 또한 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF를 표시할 수 있고 심지어 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B일 수 있다는 것이 이해될 수 있다. 결과적으로, 여기에 정의된 작은 FWHM 에미터 S^B는 또한 여기서 정의된 TADF 물질 E^B일 수도 있고 아닐 수도 있다.
- [0904] 인광, 즉 여기 삼중항 상태(일반적으로 최저 여기 삼중항 상태 T1로부터)로부터의 발광은 스핀-금지된 과정이다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 인광은 (분자내) 스핀-궤도 상호작용(소위 (내부) 중원자 효과)을 이용함으로써 촉진(향상)될 수 있다. 본 발명의 단락에서 인광 물질(P^B)은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 인광을 방출할 수 있는 인광 에미터이다.
- [0905] 여기서, 인광 에미터 물질(P^B)는 칼슘(Ca)의 기준 원자량보다 큰 기준 원자량을 갖는 원소 중 적어도 하나의 원자를 포함하는 것이 바람직하다. 훨씬 더 바람직하게는, 본 발명의 단락에서 인광 물질(P^B)은 전이 금속 원자, 특히 아연(Zn)의 표준 원자량보다 큰 표준 원자량을 갖는 원소의 전이 금속 원자를 포함한다. 인광 에미터 물질(P^B)에 바람직하게 포함되는 전이 금속 원자는 임의의 산화 상태로 존재할 수 있다(및 각 원소의 이온으로서 존재할 수도 있다).
- [0906] 광전자 소자에 사용되는 인광 물질 P^B가 종종 Ir, Pd, Pt, Au, Os, Eu, Ru, Re, Ag 및 Cu, 본 발명의 단락에서 바람직하게는 Ir, Pt 및 Pd, 보다 바람직하게는 Ir 및 Pt의 착물이라는 것은 당업자에게 잘 알려진 사실이다. 당업자는 광전자 소자에서 어떤 물질이 인광 물질(P^B)로 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 또한, 당업자는 광전자 소자에서 인광 물질로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0907] 숙련된 기술자는 광전자 소자에 사용되는 인광 물질(P^B)로 어떤 물질이 적합한지 및 이들을 합성하는 방법을 알고 있다. 이와 관련하여, 당업자는 특히 광전자 소자에서 인광 물질(P^B)로 사용하기 위한 인광 착물의 설계 원리에 익숙하고 구조적 변화를 통해 착물의 발광을 조정하는 방법을 알고 있다.
- [0908] 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 인광 물질(P^B)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^B이다:



[0909]

[0910]

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

[0911]

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

[0912]

당업자에게 공지된 바와 같이, 에미터(예를 들어 작은 FWHM 에미터 S^B)의 반치폭(FWHM)은 각각의 발광 스펙트럼(형광 에미터에 대한 형광 스펙트럼 및 인광 에미터에 대한 인광 스펙트럼)으로부터 쉽게 결정된다. 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_1 및 λ_2 에서 최대 발광의 절반(즉, 최대 발광 강도의 50%)에 도달하는 경우 전자 볼트(eV) 단위의 FWHM은 일반적으로 다음 방정식을 사용하여 결정된다.

[0913]

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

[0914]

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

[0915]

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

[0916]

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

[0917]

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

[0918] (ii) 적어도 2개의 방향족 고리가 함께 융합된 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조를 포함한다(예를 들어, 안트라센, 피렌 또는 이의 아자-유도체).

[0919] 훨씬 더 바람직하게는, 본 발명의 맥락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 바람직하게는 다음 요건 중 적어도 하나를 충족시킨다:

[0920] (i) 보론(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론(B)임을 의미한다.

[0921] (ii) 피렌 코어 구조를 포함한다.

[0922] 가장 바람직하게는, 본 발명의 맥락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 는 보론(B) 함유 에미터이며, 이는 각각의 작은 FWHM 에미터 S^B 내의 적어도 하나의 원자가 보론(B)임을 의미한다.

[0923] 당업자는 상기 언급된 요건 또는 바람직한 특징을 충족시키는 작은 FWHM 에미터(S^B)를 설계하는 방법을 알고 있다.

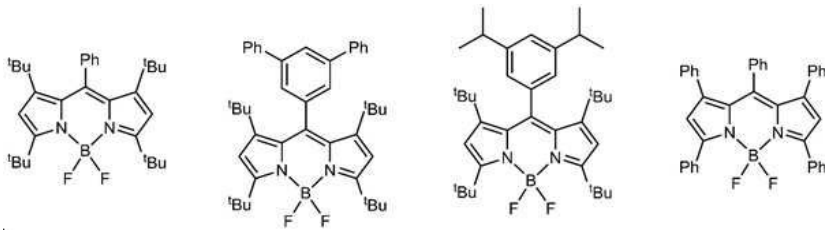
[0924] 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 로 적합한 형광 에미터 F의 부류는 잘 알려진 4,4-디플루오로-4-보라-3a,4a-디아자-s-인다센(BODIPY) 기반 물질이고, 그의 광전자 소자에서의 구조적 특징 및 응용은 상세하게 검토되었으며 당업자에게 일반적인 지식이다. 최신 기술은 또한 이러한 물질이 합성되는 방법과 특정 발광색을 가진 에미터에 도달하는 방법을 보여준다.

[0925] 숙련된 기술자는 또한 아래에 나타낸 BODIPY 기본 구조가 예를 들어 분자간 $\pi-\pi$ 상호 작용 및 관련 자체 소광으로 인해 광전자 소자의 에미터로 이상적으로 적합하지 않다는 사실과 친숙하다.



[0926]

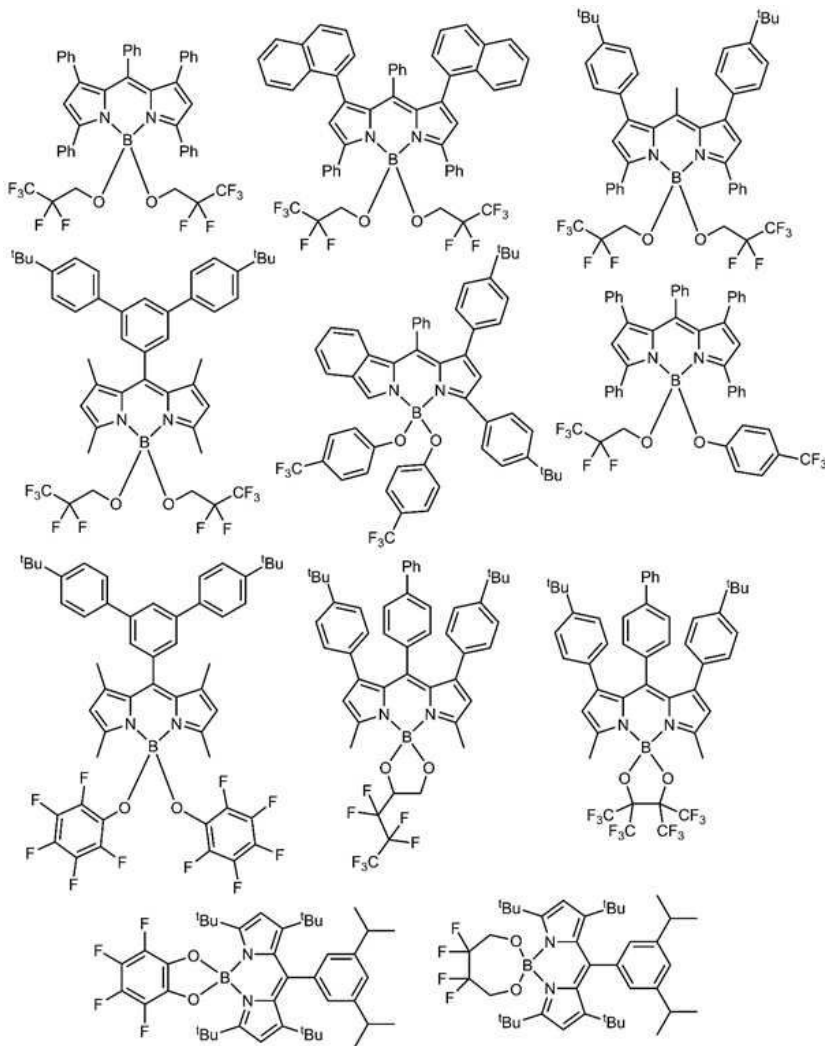
[0927] 대안적인 광전자 소자용 에미터 물질은 부피가 큰(bulky)(즉, 입체적으로 까다로운) 그룹을 상기에 표시된 BODIPY 코어 구조에 부착된 치환기로서 갖는다. 이러한 부피가 큰 그룹은 예를 들어 (많은 다른 것들 중에서도) 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 알콕시 치환기 또는 축합된 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있으며, 이들 모두는 선택적으로 치환될 수 있다. BODIPY 코어에서 적합한 치환기의 선택은 숙련된 기술자에게 명백하고 최신 기술로부터 쉽게 유도될 수 있다. 그러한 분자의 합성 및 후속 변형을 위해 확립된 다수의 합성 경로에 대해서도 마찬가지이다.



[0931]

[0932]

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



[0933]

[0934]

당업자는 사실, 최신 기술에서 사용되는 모든 BODIPY 유형 에미터 및 그의 유도체가, 예를 들어 형광 에미터 F로서, 특히 작은 FWHM 에미터 S^B로서, 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있음을 이해한다.

[0935]

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

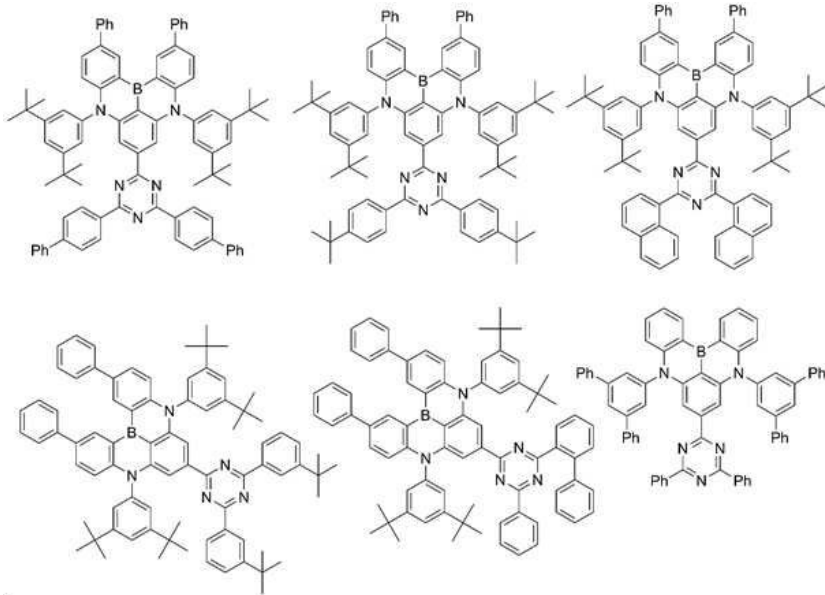
[0936]

일반적인 NRCT 에미터는 시간-분해 광발광 스펙트럼(time-resolved photoluminescence spectrum)에서 지연된 성분을 보여주고 근거리 HOMO-LUMO 분리(near-range HOMO-LUMO separation)를 나타내는 것으로 문헌에 설명되어 있다.

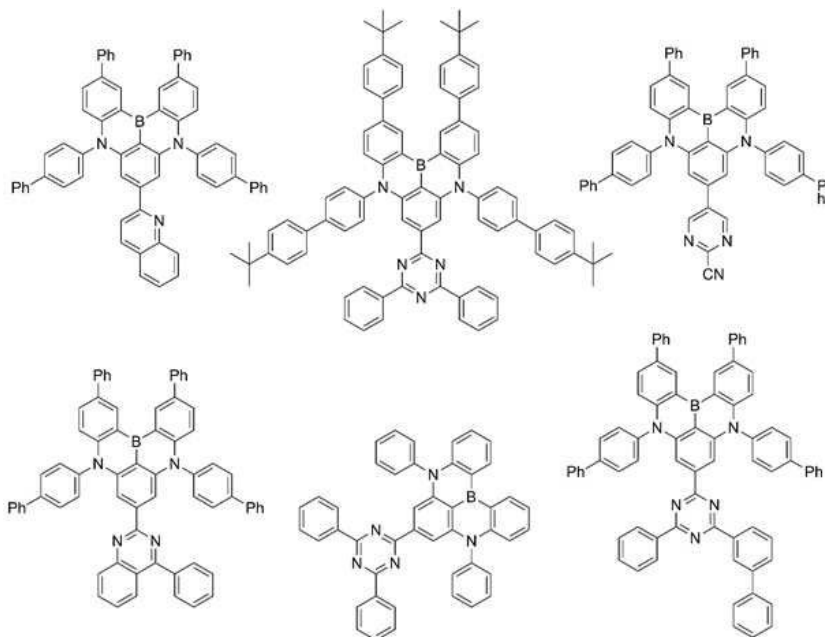
[0937] 일반적인 NRCT 에미터는 발광 스펙트럼에서 하나의 발광 밴드만 나타내며, 일반적인 형광 에미터는 진동 진행 (vibrational progression)으로 인해 여러 개의 고유한 발광 밴드를 나타낸다.

[0938] 숙련된 기술자는 본 발명의 단락에서 작은 FWHM 에미터 S^B로서 적합할 수 있는 NRCT 에미터를 설계하고 합성하는 방법을 알고 있다.

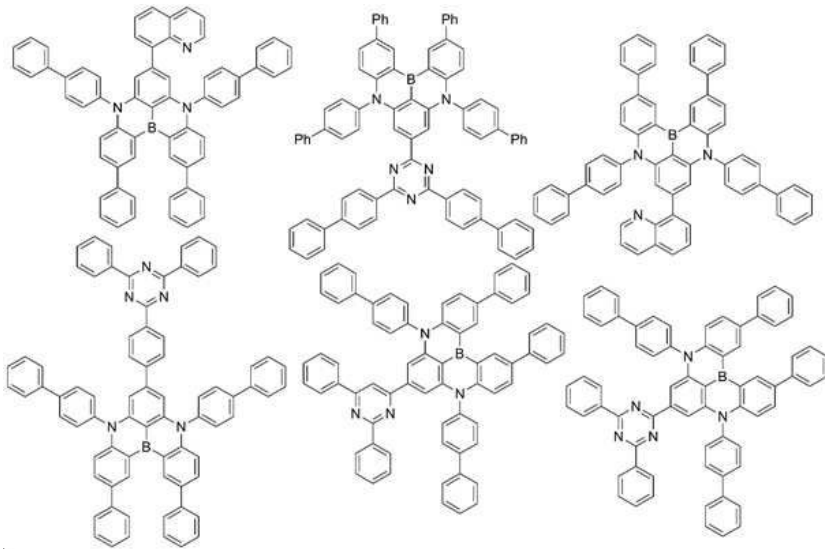
[0939] 본 명세서에 정의된 바와 같은 작은 FWHM 에미터 S^B이고 본 발명에 따른 유기 분자와 함께 사용될 수 있는 추가적인 형광 에미터 F(아래 참조)는 하기에 나타낸 보론 함유 에미터이다:



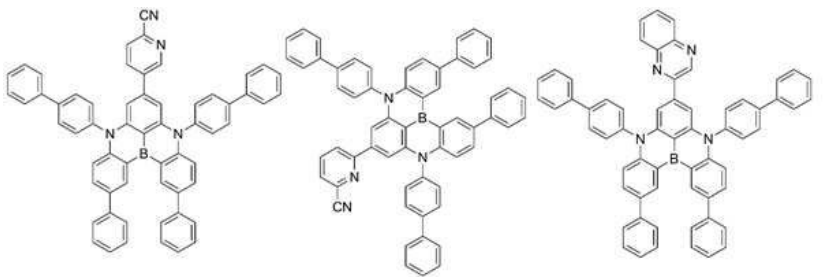
[0940]



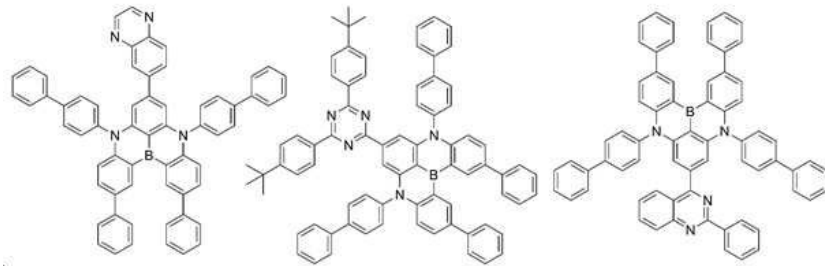
[0941]



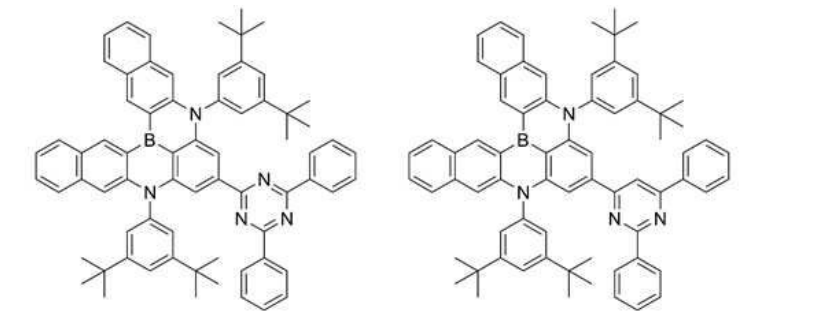
[0942]



[0943]



[0944]

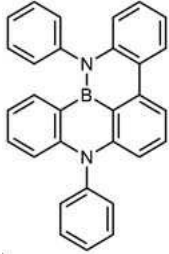


[0945]

여기서 이것은 도시된 물질만이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B로서 사용될 수 있음을 의미하지 않는

다.

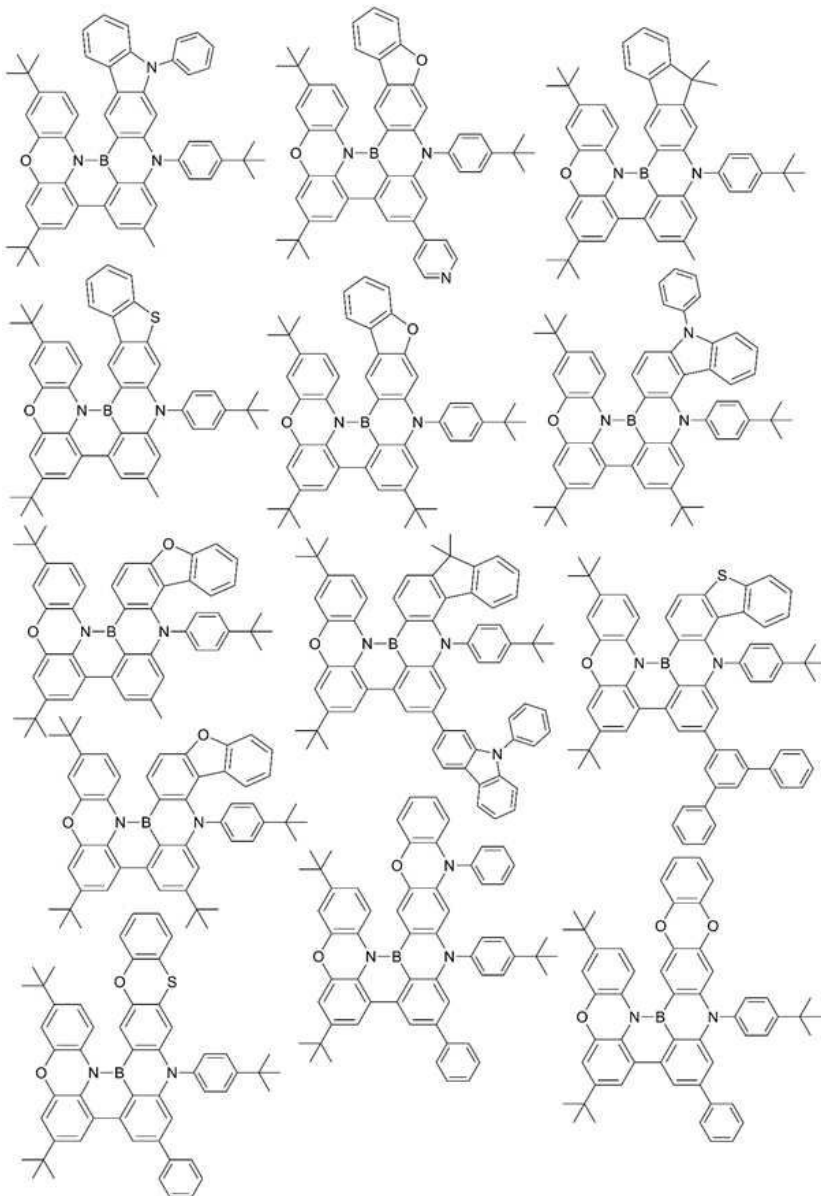
[0946] 작은 FWHM 에미터 S^B 로 사용될 수 있는 형광 에미터 F의 또 다른 그룹은, 정확히 하나의 직접 B-N 결합을 포함하는 보론 함유 에미터이다. 당업자는 구조적으로 관련된 화합물이 또한 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 로서 동등하게 적합할 수 있음을 이해한다. 작은 FWHM 에미터 S^B 에 대한 제한되지 않는 예는 다음 구조를 포함하거나 이로 이루어지는, 정확히 하나의 직접 B-N 결합을 포함하는 보론 함유 에미터이다:



[0947]

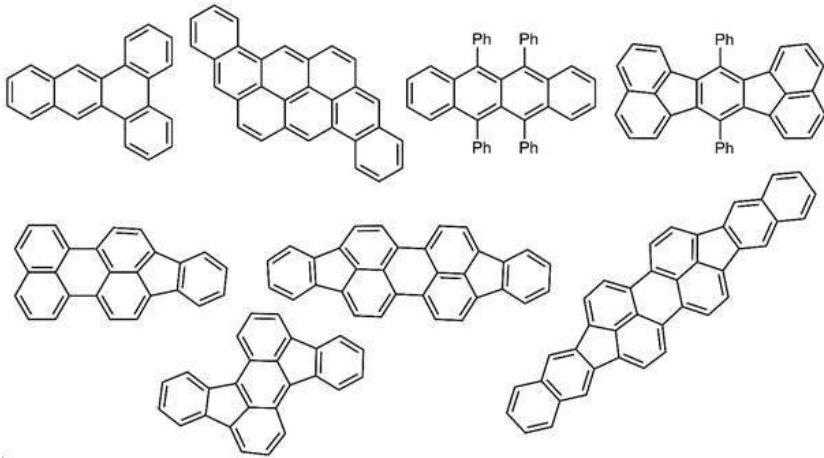
[0948] 이 구조는 추가로 치환될 수 있고 구조 단위 및/또는 치환기가 결합되어 융합된 고리 시스템을 형성할 수 있다.

[0949] 작은 FWHM 에미터(S^B)로 사용될 수 있는 에미터의 특정적이고 제한적이지 않는 예는 다음과 같다:

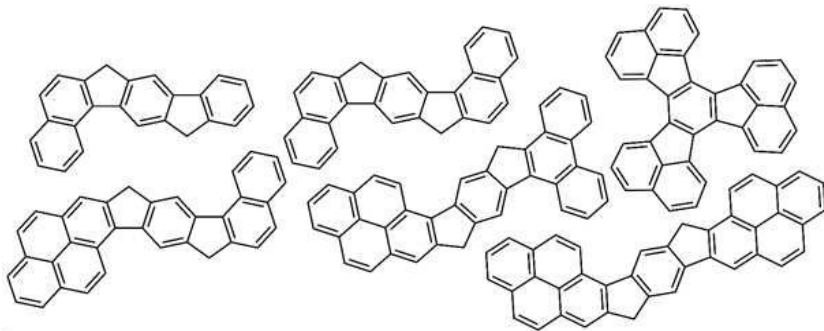


[0950]

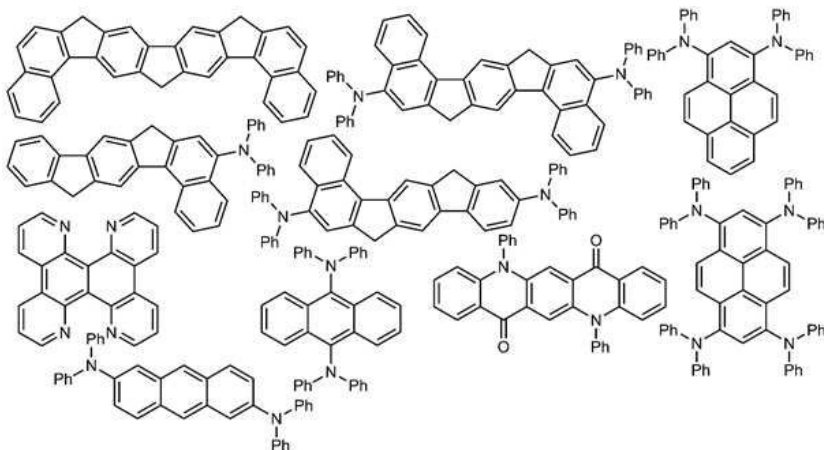
[0951] 형광 에미터 F를 설계하는 한 가지 접근 방식은 형광성 폴리시클릭 방향족 또는 헤테로방향족 코어 구조의 사용



[0958]



[0959]



[0960]

[0961] 이 단락에서 용어 "형광 코어 구조"는 상기 코어를 포함하는 임의의 분자가 잠재적으로 형광 에미터 F로 사용될 수 있음을 나타낸다. 당업자는 이러한 형광 에미터 F의 코어 구조가 선택적으로 치환될 수 있음을 알고 있고, 어떤 치환기가 이와 관련하여 적합한지 알고 있다.

[0962] 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.

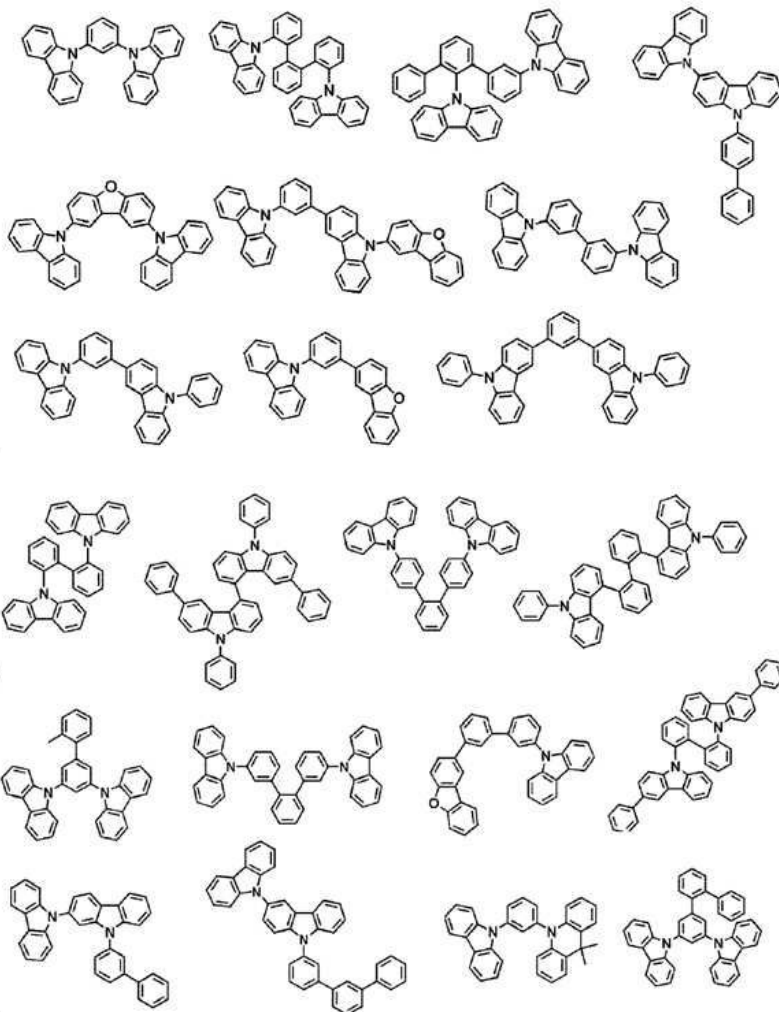
[0963] 당업자에게 공지된 바와 같이, EML은 또한 적어도 하나의 p-호스트 H^P 및 하나의 n-호스트 H^N 을 갖는 소위 혼합-호스트 시스템을 포함할 수 있다. 특히, EML은 본 발명에 따른 정확히 하나의 에미터 물질 및 n-호스트 H^N 로서

의 T2T(2,4,6-트리스(비페닐-3-일)-1,3,5-트리아진)과 p-호스트 H^P로서의 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.

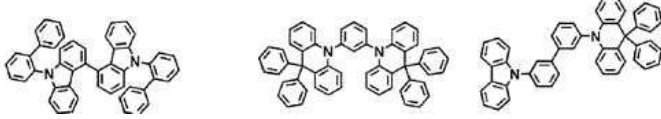
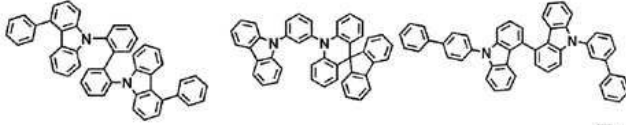
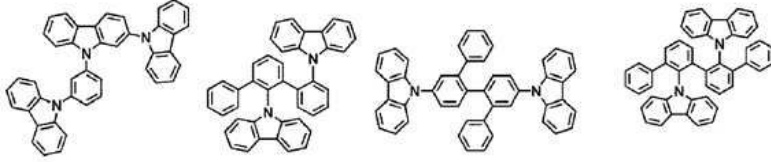
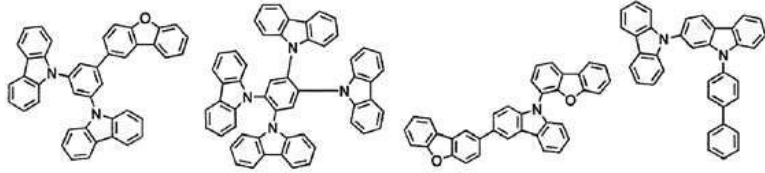
[0964] EML은 적어도 하나의 p-호스트 H^P와 하나의 n-호스트 H^N이 있는 소위 혼합 호스트 시스템을 포함할 수 있다. 여기서 n-호스트 H^N은 피리딘, 피리미딘, 벤조피리미딘, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진 및 1,2,3-트리아진으로부터 유도된 기를 포함하고, p-호스트 H^P는 인돌, 이소인돌, 바람직하게는 카바졸로부터 유도된 기를 포함한다.

[0965] 당업자는 어떤 물질이 광전자 소자에 사용하기에 적합한 호스트 물질인지 알고 있다. 최신 기술에서 사용되는 임의의 호스트 물질이 본 발명의 단락에서 적합한 호스트 물질 H^B일 수 있음이 이해된다.

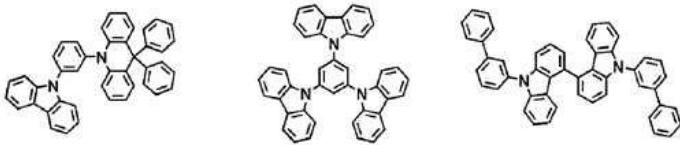
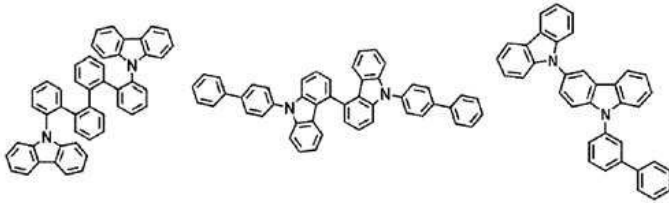
[0966] 본 발명의 단락에서의 p-호스트 물질 H^P인 물질 H^B의 비제한적 예가 하기에 열거되어 있다:



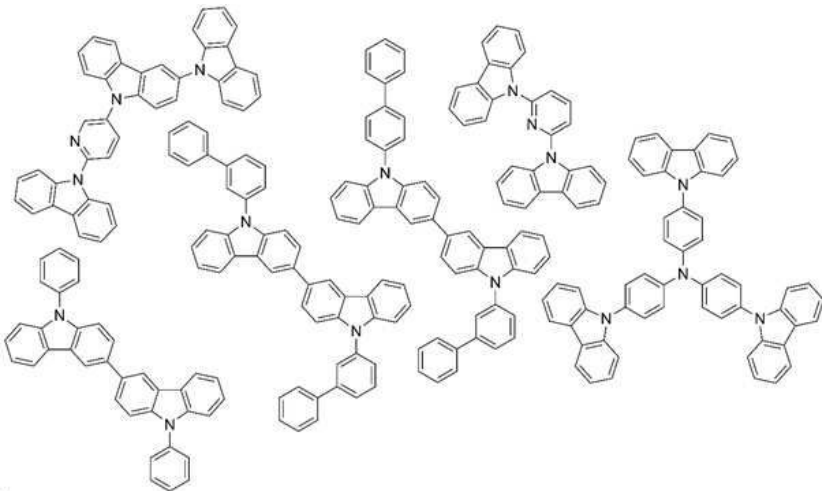
[0968]



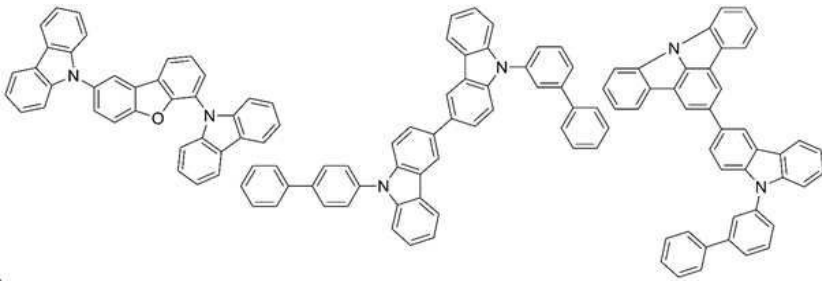
[0969]



[0970]

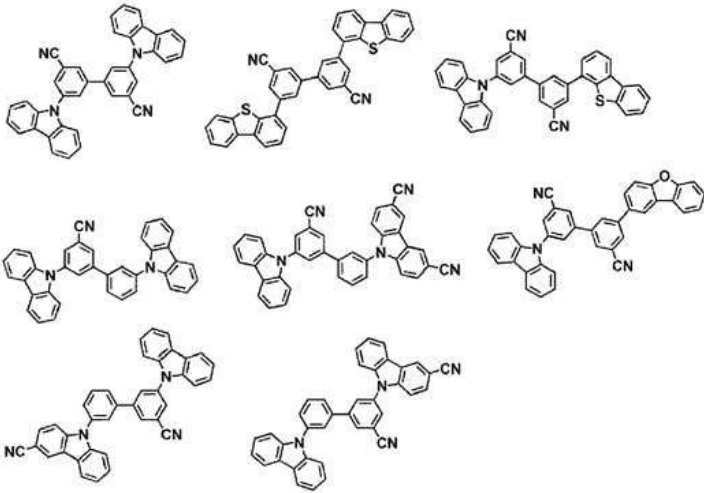


[0971]

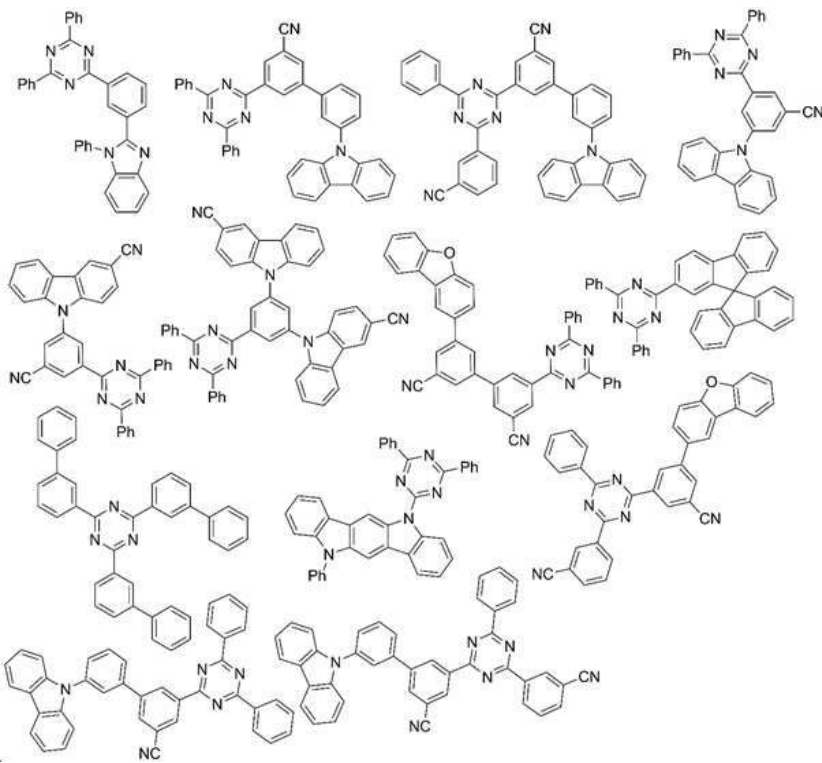


[0972]

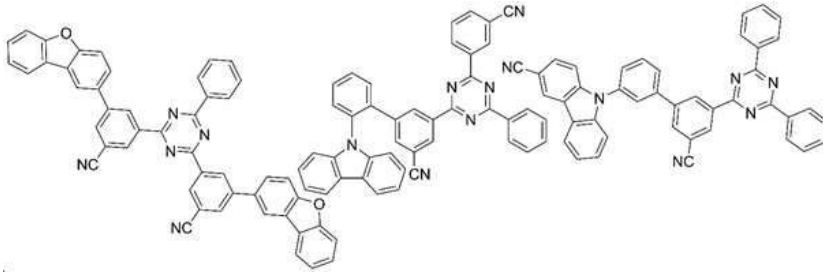
[0973] 본 발명의 단락에서의 n-호스트 물질 H^A인 물질 H^B의 비제한적 예가 하기에 열거되어 있다:



[0974]



[0975]



[0976]

[0977]

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^N의 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^P의 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)는 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N의 HOMO보다 에너지가 적어도 0.20eV 더 높을 수 있고, 하나의 성분, 예를 들어 p-호스트 물질 H^P의 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)는 예를 들어 다른 성분, 예를 들어 n-호스트 물질 H^N의 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 에미터 물질에 전달할 수 있다.

[0978]

본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자를 포함하는 조성물

[0979]

본 발명의 일 측면은 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자를 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명의 일 측면은 광전자 소자, 바람직하게는 OLED, 특히 상기 소자의 EML에서의 상기 조성물의 용도에 관한 것이다.

[0980]

하기에서, 전술한 조성을 설명할 때, 경우에 따라 각각의 조성 중 특정 물질의 함량을 백분율 형태로 언급한다. 특정 구현예에 대해 달리 언급하지 않는 한, 모든 백분율은 중량 백분율을 나타내며, 이는 중량 백분율 또는 중량 %((중량/중량), (w/w), 중량%와 동일한 의미를 갖는다는 점에 유의해야 한다). 예를 들어 특정 조성에서 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의 함량이 예시적으로 30%라고 언급하는 경우, 이는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자의 총 중량을 의미하는 것으로 이해된다. (즉, 결합된 이들 모든 분자의)은 30중량%, 즉 각각의 조성물의 총 중량의 30%를 차지한다. 성분의 바람직한 함량을 중량%로 제공함으로써 조성물이 특정될 때마다, 모든 성분의 총 함량은 100중량%(즉, 조성물의 총 중량)까지 합산되는 것으로 이해된다.

[0981]

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

[0982]

숙련된 기술자는 여기 에너지 전달(excitation energy transfer)이 (효율적으로) 발생하기 위해, 바람직하게는 에너지 도너의 발광 스펙트럼(emission spectrum)과 에너지 억셉터의 흡수 스펙트럼(absorption spectrum) 사이에 스펙트럼 중복이 있음을 이해한다. 또한 당업자는 의도된 에너지 도너가 의도된 에너지 억셉터에 비해 더 높은 여기 상태 에너지 준위(excited state energy level)를 가져야 함을 이해하며, 이는 에너지 도너의 최저 여기 단일항 상태 S1(도너)의 에너지 준위 E(S1)(도너) 및/또는 에너지 도너의 최저 여기 삼중항 상태 T1(도너)의 에너지 준위 E(T1)(도너)가, 에너지 억셉터의 최저 여기 삼중항 상태 S1(억셉터)의 에너지 준위 E(S1)(억셉터) 및/또는 에너지 억셉터의 최저 여기 삼중항 상태 T1(억셉터)의 에너지 준위 E(T1)(억셉터)보다 에너지가 높은 것이 바람직함을 의미한다. 앞서 언급한 바람직한 기준을 충족하는 물질을 선택하는 것은, 발명 단계(inventive step) 없이 당업자의 표준 지식을 기반으로 쉽게 달성된다. 여기 상태 에너지를 결정하는 방법과 흡수 및 발광 스펙트럼을 기록하는 방법에 대한 실험적 세부 사항은 이 텍스트의 뒷부분에서 제공된다.

[0983]

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

- [0984] 일 구현예에서, 상기 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0985] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0986] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0987] (c) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [0988] (d) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [0989] (e) 선택적으로 (a)의 유기 분자와 다르고, 또한 (c)의 TADF 물질 E^B 와 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F, 및
- [0990] (f) 선택적으로 하나 이상의 용매 및/또는 염료,
- [0991] 여기서 임의의 (a) 내지 (e)의 물질(상기 정의된 바와 같은 동일한 그룹의 물질 및/또는 상기 정의된 바와 같은 상이한 그룹의 물질)은, 선택적으로 하나 이상의 엑시플렉스를 형성하고;
- [0992] 여기서 (e)의 형광 에미터 F가 조성물에 존재하지 않는 경우, (a) 및/또는 (c) 및/또는 (d) 중 적어도 하나의 물질 및/또는 적어도 하나의 엑시플렉스는 에미터 물질이다.
- [0993] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자 및 (선택적으로) 하나 이상의 호스트 물질 H^B 를 포함하는 조성물
- [0994] 본 발명에 따른 조성물의 일 구현예는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및 선택적으로 본 발명의 분자와 구조적으로 상이한 하나 이상의 호스트 물질 H^B 를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [0995] 바람직하게는 상기 조성물의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 에미터 물질은, 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 본 발명에 따른 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 450 내지 500 nm, 더 바람직하게는 455 내지 485 nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470 nm의 최대 발광으로 빛을 발광한다. 만약 존재할 경우, 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 호스트 물질(H^B)은 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 에미터 물질의 최저 여기 단일항 상태보다 에너지적으로 더 높은 최저 여기 단일항 상태 $S1(H^B)$ 를 갖는 것이 바람직하다. 만약 존재할 경우, 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 호스트 물질(H^B)은 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 에미터 물질에 여기 에너지를 전달할 수 있는 것이 바람직하다. 여기 에너지는 또한 상이한 본 발명에 따른 유기 분자들 사이에서 전달될 수 있으며, 여기서 여기 에너지가 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 에미터 물질로 전달될 수 있는 것이 다시 특히 바람직하다.
- [0996] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [0997] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [0998] (b) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [0999] (c) 선택적으로, 하나 이상의 용매.
- [1000] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1001] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1002] (b) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B ,
- [1003] 여기서 조성물 중 호스트 물질 H^B 의 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 호스트 물질 H^B 의 분율(중량%)은 본 발명에 따른 유기 분자의 분율(중량%)보다 2배 더 높다.
- [1004] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1005] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1006] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B 5-99 중량%, 바람직하게는 30-95 중량%, 특히 40-90 중량%, 및

- [1007] (c) 하나 이상의 용매 0-94중량%, 바람직하게는 0-65중량%, 특히 0-50중량%
- [1008] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (c)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1009] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자와 함께 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F를 포함하는 조성물
- [1010] 조성물의 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 본 발명의 분자가 아닌 형광 에미터 F(상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이 다(즉, 본 발명에 따른 유기 분자가 형광 에미터일 경우, 추가 형광 에미터 F가 조성물에 존재할 수 있음)
- [1011] 이 경우, 임의의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F는 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있지만, 바람직하게는, 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우, 조성물로부터의 발광은 주로(즉, 50% 이상, 바람직하게는 60% 이상, 더 바람직하게는 70% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 80% 이상, 또는 심지어 90% 이상) 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의, 본 발명의 분자와 구조적으로 다른 (추가) 형광 에미터 F에 기인한다. 추가로, 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이에서 전달될 수 있고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B (만약 존재하는 경우)로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 로 및 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 조성물 내의 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F 중에서 선택되는 물질들 사이에서 전달될 수 있는 것이 바람직하고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자에서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달되는 것이 바람직하다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 특히 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다.
- [1012] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1013] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및
- [1014] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [1015] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F, 및
- [1016] (d) 선택적으로 하나 이상의 용매,
- [1017] 여기서 그룹 (c)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다.
- [1018] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1019] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및
- [1020] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F,
- [1021] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(c)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹 (c)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 5배 더 높다.
- [1022] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1023] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1024] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B 30-98.9 중량%, 바람직하게는 48-94.5 중량%, 특히 65-89 중량%, 및

- [1025] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%, 및
- [1026] (d) 선택적으로 하나 이상의 용매 0-68.9 중량%, 바람직하게는 0-46.5 중량%, 특히 0-24 중량%,
- [1027] 여기서 (c)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다.
- [1028] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (d)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1029] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자와 함께 하나 이상의 (추가) TADF 물질 E^B 를 포함하는 조성물
- [1030] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌, 즉 구조적으로 상이한 적어도 하나의 TADF 물질 E^B (상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [1031] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 TADF 물질 E^B 로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있다. 추가로, 여기 에너지는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이에서 전달될 수 있고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B 로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 조성물 내의 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 TADF 물질 E^B 중에서 선택되는 물질들 사이에서 전달될 수 있는 것이 바람직하고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 에미터 물질로 전달되는 것이 바람직하다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자 및 에미터 물질로 작용하는 적어도 하나의 TADF 물질 E^B 는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 에미터 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광하는 것이 바람직하다.
- [1032] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1033] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1034] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [1035] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [1036] (d) 선택적으로, 하나 이상의 용매.
- [1037] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1038] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1039] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 TADF 물질 E^B ,
- [1040] 여기서 그룹 (c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹(a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(%)은 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높다.
- [1041] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1042] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1043] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B 0-98.9 중량%, 바람직하게는 20-94.5 중량%, 특히 40-89 중량%, 및

- [1044] (c) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 TADF 물질 E^B 0.1-50 중량%, 바람직하게는 0.5-40 중량%, 특히 1-30 중량%, 및
- [1045] (d) 하나 이상의 용매 0-98.9 중량%, 바람직하게는 20-74.5 중량%, 특히 30-49 중량%,
- [1046] 여기서 (a) 및/또는 (c) 중 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이고,
- [1047] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (d)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1048] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자와 함께 하나 이상의 (추가) TADF 물질 E^B 및 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F를 포함하는 조성물
- [1049] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 유기 분자가 아닌 하나 이상의 TADF 물질 E^B (상기 정의된 바와 같음) 및 본 발명의 분자가 아닌 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F(상기 정의된 바와 같음)을 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [1050] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있지만, 바람직하게는, 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우, 조성물로부터의 발광은 주로(즉, 50% 이상, 바람직하게는 60% 이상, 더 바람직하게는 70% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 80% 이상, 또는 심지어 90% 이상) 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의, 본 발명의 분자가 아닌 (추가) 형광 에미터 F에 기인한다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 특히 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다. 추가로, 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이에서 전달될 수 있고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B (만약 존재하는 경우)로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 로 및 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 조성물 내의 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 (추가) TADF 물질 E^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F 중에서 선택되는 물질들 사이에서 전달될 수 있는 것이 바람직하고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자에서 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) TADF 물질 E^B 에서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달되는 것이 바람직하다.
- [1051] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1052] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1053] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [1054] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 (추가) TADF 물질 E^B , 및
- [1055] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 (c)의 TADF 물질 E^B 와도 다른, 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F, 및
- [1056] (e) 선택적으로, 하나 이상의 용매,
- [1057] 여기서 (d)의 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 형광 에미터 F는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다.
- [1058] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1059] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및

- [1060] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 TADF 물질 E^B , 및
- [1061] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 (c)의 TADF 물질 E^B 와도 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F,
- [1062] 여기서 그룹 (c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(중량%)은 그룹(a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(c)의 TADF 물질 E^B 의 분율(%)은 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높고,
- [1063] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹 (d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높다.
- [1064] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1065] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-50 중량%, 바람직하게는 5-40 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1066] (b) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 HB 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-94 중량%, 특히 0-88 중량%, 및
- [1067] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 TADF 물질 E^B 0.1-98.9 중량%, 바람직하게는 0.5-94.5 중량%, 특히 1-89 중량%, 및
- [1068] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 (c)의 TADF 물질 E^B 와 다른, 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%, 및
- [1069] (e) 하나 이상의 용매 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-94 중량%, 특히 0-88 중량%,
- [1070] 여기서 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다.
- [1071] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (e)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1072] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자와 함께 하나 이상의 인광 물질 P^B 를 포함하는 조성물
- [1073] 조성물의 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 인광 물질 P^B (상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [1074] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 적어도 하나의 인광 물질 P^B 로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있다.
- [1075] 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우에, 조성물로부터의 발광이 주로(즉, 50% 이상, 바람직하게는 60% 이상, 더 바람직하게는 70% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 80% 이상, 또는 심지어 90% 이상) 적어도 하나의 인광 물질 P^B 에 기인하는 경우, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자의 최저 여기 단일항 상태 S1이 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 의 최저 여기 삼중항 상태 T1보다 에너지적으로 높은 것이 바람직하다. 그런 다음, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자가 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 로 여기 에너지를 전달할 수 있는 것이 또한 바람직하다.
- [1076] 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우에, 조성물로부터의 발광이 주로(즉, 50% 이상, 바람직하게는 60% 이상, 더 바람직하게는 70% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 80% 이상, 또는 심지어 90% 이상) 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자에 기인하는 경우, 적어도 하나의, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 의 최저 여기 삼중항 상태 T1이 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자의 최저 여기 삼중항 상태 T1보다 에너지적으로 높은 것이 바람직하다. 그런 다음, 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 가 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자로 여기 에너지를 전달할 수 있는 것이 또한 바람직하다. 전술한

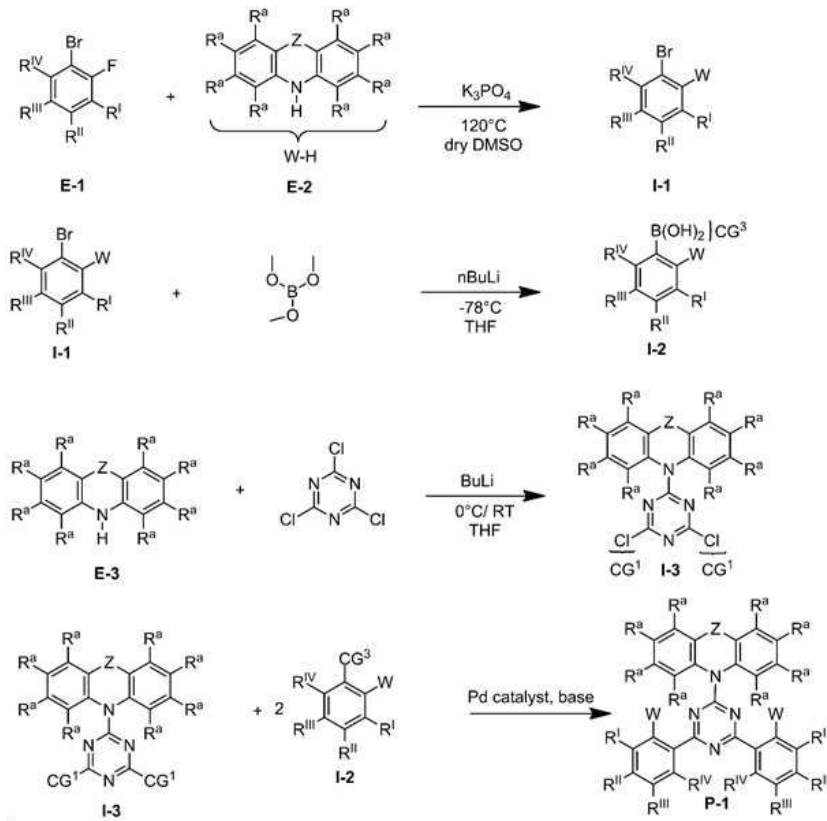
바와 같이, 본 발명에 따른 유기 분자가 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B 인 것이 일반적으로 바람직하다(상기 참조). 이 경우 및 상기 조성물에서, 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B 는 당업자의 상식의 일부를 형성하는 외부 중원자 효과에 의해, 조성물에 포함된 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B 내에서, RISC 프로세스의 효율을 향상시킬 수 있다.

- [1077] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1078] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1079] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B , 및
- [1080] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 인광 물질 P^B , 및
- [1081] (d) 선택적으로 하나 이상의 용매,
- [1082] 여기서 (a) 및/또는 (c)의 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이다.
- [1083] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1084] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 및
- [1085] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 인광 물질 P^B ,
- [1086] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(c)의 인광 물질 P^B 의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹 (c)의 인광 물질 P^B 의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높다.
- [1087] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1088] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-99.5 중량%, 바람직하게는 5-50 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1089] (b) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 호스트 물질 H^B 0-98.5 중량%, 바람직하게는 35-94 중량%, 특히 60-88 중량%, 및
- [1090] (c) (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 인광 물질 P^B 0.5-20 중량%, 바람직하게는 1-15 중량%, 특히 2-10 중량%, 및
- [1091] (d) 하나 이상의 용매 0-98.5 중량%, 바람직하게는 0-59 중량%, 특히 0-28 중량%,
- [1092] 여기서 (a) 및/또는 (c) 중 적어도 하나의 물질은 에미터 물질이고,
- [1093] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (d)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1094] 본 발명에 따른 하나 이상의 유기 분자와 함께 하나 이상의 인광 물질 P^B 및 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F 를 포함하는 조성물
- [1095] 또 다른 바람직한 구현예는 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 인광 물질 P^B (상기 정의된 바와 같음) 및 본 발명의 분자가 아닌 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F (상기 정의된 바와 같음)를 포함하는 조성물이다.
- [1096] 이 경우, 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 하나의 인광 물질 P^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F 로부터 선택되는 임의의 물질(들)이 에미터 물질(들)의 역할을 할 수 있지만, 바람직하게는, 광전자 소자의 EML에서 사용되는 경우, 조성물로부터의 발광은 주로(즉, 50% 이상, 바람직하게는 60% 이상, 더 바람직하게는 70% 이상, 훨씬 더 바람직하게는 80% 이상, 또는 심지어 90% 이상) 적어도 하나, 바람직하게는 정확히 하나의, 본 발명의 분자가 아닌 (추가) 형광 에미터 F 에 기인한다. 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F 는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 특히 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm,

더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 청색광을 발광한다. 추가로, 여기 에너지는 바람직하게는 이 조성물 내의 상이한 물질들 사이에서 전달될 수 있고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 호스트 물질 H^B(만약 존재하는 경우)로부터 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 TADF 물질 E^B로 및 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달될 수 있다. 여기 에너지는 또한 조성물 내의 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자, 적어도 인광 물질 P^B 및 적어도 하나의 (추가) 형광 에미터 F 중에서 선택되는 물질들 사이에서 전달될 수 있는 것이 바람직하고, 특히 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자에서 및/또는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B에서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F로 전달되는 것이 바람직하다. 바람직하게는 또한 여기 에너지는 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 본 발명에 따른 유기 분자에서 적어도 하나의, 바람직하게는 각각의 인광 물질 P^B로 전달될 수 있다.

- [1097] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1098] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1099] (b) 선택적으로, (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 호스트 물질 H^B, 및
- [1100] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 인광 물질 P^B, 및
- [1101] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 또한 (c)의 인광 물질 P^B와도 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F, 및
- [1102] (e) 선택적으로, 하나 이상의 용매,
- [1103] 여기서 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 녹색 광을 발광한다.
- [1104] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1105] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자, 및
- [1106] (c) (a)의 유기 분자와 다른, 하나 이상의 인광 물질 P^B, 및
- [1107] (d) (a)의 유기 분자와 다르고 또한 (c)의 인광 물질 P^B와도 다른, 하나 이상의 형광 에미터 F,
- [1108] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(c)의 인광 물질 P^B의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹(c)의 인광 물질 P^B의 분율(중량%)보다 적어도 2배 더 높고,
- [1109] 여기서 그룹 (a)의 유기 분자의 분율(중량%)은 그룹(d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 높고, 바람직하게는 그룹(a)의 유기 분자의 분율(%)은 그룹 (d)의 형광 에미터 F의 분율(중량%)보다 적어도 5배 더 높다.
- [1110] 일 구현예에서, 조성물은 하기를 포함하거나 하기로 이루어진다:
- [1111] (a) 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자 1-99.8 중량%, 바람직하게는 5-50 중량%, 특히 10-30 중량%, 및
- [1112] (b) 본 발명에 따른 유기 분자와 상이한 하나 이상의 호스트 물질 H^B 0-98.8 중량%, 바람직하게는 35-94 중량%, 특히 60-88 중량%, 및
- [1113] (c) (a)의 유기 분자와 상이한 하나 이상의 인광 물질 P^B 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-10 중량%, 특히 1-3 중량%, 및
- [1114] (d) (a)의 유기 분자와 다른 하나 이상의 (추가) 형광 에미터 F 0.1-20 중량%, 바람직하게는 0.5-12 중량%, 특히 1-5 중량%, 및

- [1115] (e) 하나 이상의 용매 0-98.8 중량%, 바람직하게는 0-59 중량%, 특히 0-28 중량%의,
- [1116] 여기서 적어도 하나, 바람직하게는 각각의 (추가) 형광 에미터 F(즉, (d)의 물질)는 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 것이 바람직하고, 이는 바람직하게는 실온(즉 (약) 20°C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 S^B 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된 발광 스펙트럼에서, 바람직하게는 450 내지 500nm, 더 바람직하게는 455 내지 485nm, 더욱 더 바람직하게는 460 내지 470nm 사이의 최대 발광을 갖는 녹색 광을 발광한다.
- [1117] 여기서 특정 구현예에서 그룹 (a) 내지 (e)의 물질을 합하면 100중량%이다.
- [1118] 본 발명의 추가적인 측면 및 구현예
- [1119] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는 광발광 양자 수율(PLQY)이 20% 이상, 더 바람직하게는 30% 이상, 더욱 더 바람직하게는 40% 이상, 특히 50% 이상, 특히 60% 이상, 특히 70% 이상 또는 심지어 80% 이상이며, 여기서 본 발명에 따른 유기 분자의 PLQY는 실온(즉, (대략) 20 ° C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 본 명세서의 뒷부분에 설명된 대로 결정된다.
- [1120] 본 발명의 일 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는, 실온(즉, (대략) 20 ° C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정 시, 50 μ s 이하, 바람직하게는 25 μ s 이하, 보다 바람직하게는 15 μ s 이하, 보다 더 바람직하게는 10 μ s 이하, 특히 8 μ s 이하, 특히 6 μ s 이하, 특히 바람직하게는 4 μ s 이하의 지연된 여기 상태 수명(delayed excited state lifetime)을 갖는다.
- [1121] 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는, 실온(즉, (대략) 20 ° C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서, 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.45 eV 미만, 보다 더 바람직하게는 0.43 eV 미만 또는 심지어 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [1122] 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는, 실온(즉, (대략) 20 ° C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서, 50 μ s 이하, 바람직하게는 25 μ s 이하, 더 바람직하게는 15 μ s 이하, 더욱 더 바람직하게는 10 μ s 이하, 특히 8 μ s 이하, 특히 6 μ s 이하, 특히 바람직하게는 4 μ s 이하의 지연된 여기 상태 수명을 갖고, 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV 미만, 더 바람직하게는 0.45 eV 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.43 eV 미만 또는 심지어 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [1123] 본 발명의 추가적인 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 분자는, 실온(즉, (대략) 20 ° C)에서 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 유기 분자 10중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정 시, 가시광선 또는 근자외선 범위, 즉 380 내지 800nm의 파장 범위에서 발광 피크를 갖고, 0.60 eV 미만, 바람직하게는 0.50 eV 미만, 더 바람직하게는 0.45 eV 미만, 더욱 더 바람직하게는 0.43 eV 미만 또는 심지어 0.40 eV 미만의 반치폭(FWHM)을 갖는다.
- [1124] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자를 제조하는 방법에 관한 것으로, 이 방법은 팔라듐 촉매 교차 결합 반응(palladium-catalyzed cross coupling reaction) 및 2개의 친핵성 방향족 치환 반응(nucleophilic aromatic substitution reaction)을 포함한다:



[1125]

[1126]

본 발명에 따르면, 팔라듐 촉매 교차 결합 반응을 위해 2개의 결합기(coupling group) CG¹으로 치환된 헤테로시클 **I-3**이 출발 물질로 사용되며, 이는 결합기 CG³로 치환된 2개의 오르토-카바졸일벤젠(반응물 **I-2**)과 반응한다. 결합기 CG¹은 CG¹의 위치에 **I-2**의 오르토-카바졸일벤젠을 도입하기 위한 반응 쌍(reaction pair)으로 선택된다. 바람직하게는 소위 스즈키 커플링 반응(Suzuki coupling reaction)이 사용된다. 여기서, CG¹은 Cl, Br 또는 I 중에서 선택되고, CG³은 보론산기 또는 보론산 에스테르기, 특히 보론산 피나콜 에스테르기이거나, 또는 CG¹은 보론산기 또는 보론산 에스테르기, 특히 보론산 피나콜 에스테르기이고, CG³는 Cl, Br 또는 I에서 선택된다.

[1127]

친핵성 방향족 치환에서 질소 헤테로시클과 아릴 할라이드, 바람직하게는 아릴 플루오라이드의 반응을 위해, 전형적인 조건은 예를 들어, 디메틸 설폭사이드(DMSO), 테트라히드로퓨란(THF) 또는 N,N-디메틸포름아미드(DMF)와 같은 비양성자성 극성 용매(aprotic polar solvent)에서, 예를 들어, 제삼인산칼륨, n-부틸리튬 또는 수소화나트륨과 같은 염기의 사용을 포함한다.

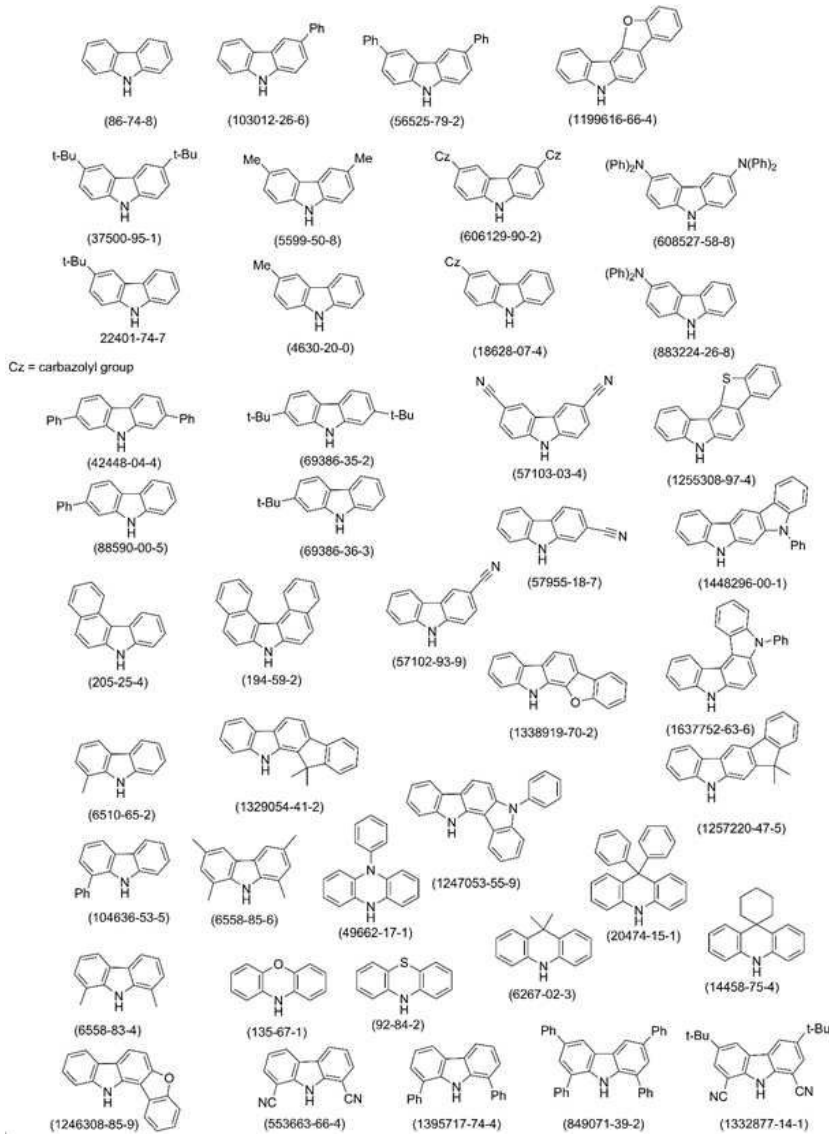
[1128]

보론산 그룹 또는 보론산 에스테르 그룹으로 치환된 방향족 커플링제를 형성하기 위해, 테트라히드로퓨란(THF)과 같은 비양성자성 극성 용매에서, 리튬 할로젠 교환 반응이 진행될 수 있도록 리튬화제(예를 들어 n-부틸리튬)로 전처리된 아릴 할라이드(예를 들어 아릴 브로마이드)와 보릴화 시약(예를 들어 보론산 또는 보론산 에스테르)을 이용하여 보릴화 반응이 수행된다.

[1129]

당업자는 질소 헤테로시클의 아릴 할라이드와의 친핵성 방향족 치환 반응을 위해 적합한 다양한 구조를 알고 있다.

[1130] 아래에 질소 헤테로시클에 대한 비제한적 예가 나열되어 있다(CAS 번호는 구조 아래 괄호 안에 표시됨).



[1131]

[1132] 본 발명의 추가적인 측면은 광전자 부품 또는 소자, 바람직하게는 하나 이상의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제조하는 방법에 관한 것이다.

[1133] 본 발명의 추가적인 측면은 본 발명에 따른 유기 분자 또는 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물이 사용되는 광전자 소자의 제조 방법에 관한 것이다.

[1134] 광전자 소자, 특히 적어도 하나의 본 발명에 따른 분자를 포함하는 OLED는 임의의 수단의 기상 증착 및/또는 액상 공정에 의해 제조될 수 있다.

[1135] OLED의 개별 층을 형성하기 위한 공지된 방법은 다음을 포함한다:

- [1136] - 승화 공정에 의한 증착,
- [1137] - 유기 기상 증착 공정에 의한 증착,
- [1138] - 운반체 가스 승화 공정에 의한 증착,
- [1139] - 용액 처리 또는 인쇄.

[1140] 본 발명의 추가적인 측면은 특히 진공 증발 방법을 사용하거나 용액을 사용하여 유기 분자를 처리하는 단계를 포함하는, 본 발명에 따른 유기 분자 또는 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 조성물이 사용되는 광전자 소자의 제조 방법에 관한 것이다.

[1141] 적어도 하나의 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자, 바람직하게는 OLED와 같은 광전자 소자를 제

조하는 데 사용되는 방법은 당업자에게 공지되어 있다. 상이한 층은 후속 증착 공정에 의해 적합한 기판 상에 개별적으로 및 연속적으로 증착된다. 개별 층은 동일하거나 상이한 증착 방법을 사용하여 증착될 수 있다.

- [1142] 기상 증착 공정은 열적 (공)증발, 화학적 기상 증착 및 물리적 기상 증착을 포함할 수 있다. 액티브 매트릭스 OLED 디스플레이의 경우 AMOLED 백플레인인 기판으로서 사용된다. 개별 층은 적절한 용매를 사용하는 용액 또는 분산액으로부터 처리될 수 있다. 용액 증착 공정에는 예를 들어 스핀 코팅, 딥 코팅 및 제트 프린팅이 포함된다. 액체 처리는 선택적으로 불활성 분위기(예를 들어, 질소 분위기)에서 수행될 수 있고 용매는 선택적으로 최신 기술에 공지된 수단에 의해 완전히 또는 부분적으로 제거될 수 있다.
- [1143] 바람직하게는, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는, 하나 이상의 층이, 물질에 10^{-5} mbar와 1 bar 사이의 압력이 적용되는 OVPD(organic vapor phase deposition, 유기 기상 증착) 공정 또는 운반체-기체 승화에 의해 코팅되는 것을 특징으로 한다. 이 공정의 특별한 경우가 물질이 노즐을 통해 직접 적용되어 구조화되는 OVJP(Organic Vapor Jet Printing) 공정이다.
- [1144] 또한, 바람직하게는, 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자는, 하나 이상의 층이 예를 들어 스핀-코팅에 의해, 또는 임의의 원하는 인쇄 공정, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소 인쇄, 노즐 인쇄 또는 오프셋 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI(light induced thermal imaging(광유도 열화상), thermal transfer printing(열전사 인쇄)) 또는 잉크젯 인쇄에 의해 용액으로부터 생성되는 것을 특징으로 한다. 이를 위해서는 용해성 화합물이 필요하다. 화합물의 적절한 치환을 통해 높은 용해도를 달성할 수 있다.
- [1145] 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가 층이 기상 증착에 의해 적용되는 하이브리드 공정도 가능하다. 따라서, 예를 들어 용액으로부터 발광층을 적용하고 증착에 의해 전자 수송층을 적용하는 것이 가능하다.
- [1146] 이들 공정/방법은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 당업자에 의해 본 발명에 따른 하나 이상의 분자를 포함하는 광전자 소자에 적용될 수 있다.
- [1147] 추가적인 측면에서, 본 발명은 하기의 단계를 포함하는 광을 발생시키는 방법, 특히 470 내지 490nm 파장의 청색광을 발생시키는 방법에 관한 것이다:
 - [1148] (i) 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제공하는 단계; 및
 - [1149] (ii) 소자에 전류를 가하는 단계.
- [1150] 다른 측면에서, 본 발명은 하기의 단계를 포함하는 광을 발생시키는 방법, 특히 520 내지 540nm 파장의 녹색광을 발생시키는 방법에 관한 것이다:
 - [1151] (i) 본 발명에 따른 유기 분자를 포함하는 광전자 소자를 제공하는 단계; 및
 - [1152] (ii) 소자에 전류를 가하는 단계.
- [1153] 빛을 발생시키는 유기 전계발광 소자의 핵심 요소는 일반적으로 양극과 음극 사이에 위치한 적어도 하나의 발광층(EML)이다. 유기 전계 발광 소자의 양극과 음극에 전압(및 전류)을 가하면 양극과 음극에서 각각 정공과 전자가 주입된다. 정공 수송층(HTL)은 일반적으로 발광층(EML)과 양극 사이에 위치하며 전자 수송층(ETL)은 일반적으로 발광층(EML)과 음극 사이에 위치한다. 상이한 층들이 순차적으로 배치된다. 그런 다음 EML에서 정공과 전자의 재결합에 의해 높은 에너지의 엑시톤이 생성된다. 이러한 여기 상태(예를 들어, S1과 같은 단일항 상태 및 /또는 T1과 같은 삼중항 상태)에서 바닥 상태(S0)로의 감쇠는 바람직하게는 광 발광을 야기한다.
- [1154] *궤도 및 여기 상태 에너지와 ΔE_{ST} 결정*
- [1155] 궤도 및 여기 상태 에너지는 실험 방법이나 양자 화학 방법, 특히 밀도 함수 이론 계산을 이용하는 계산 방법을 통해 결정할 수 있다. 최고준위 점유 분자궤도 에너지 E^{HOMO} 는 당업자에게 공지된 방법에 의해 순환 전압전류법 측정으로부터 0.1 eV의 정확도로 결정된다.
- [1156] 최저준위 비점유 분자궤도 에너지 E^{LUMO} 는 당업자에게 공지된 방법에 의해 순환 전압전류법 측정으로부터 0.1eV의 정확도로 결정될 수 있다. E^{LUMO} 가 순환 전압 전류법 측정으로 결정되면 E^{LUMO} 로 표시된다. 대안적으로, 또한 본 명세서에서 바람직하게는 E^{LUMO} 는 $E^{HOMO} + E^{gap}$ 으로 계산되며, 여기서 E^{gap} 은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 광발광

(PL) 스펙트럼(정상 상태 스펙트럼)의 시작(onset)으로 결정되고, 이는 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 물질이 스핀 코팅된 필름에서 측정된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적인 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는, 달리 언급되지 않는 한, 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고(즉, 일반식 X로 표시되지 않고) 본 명세서에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대하여, PL 스펙트럼은 일반적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 니트 필름(neat film)에서 측정될 수 있다. 본 발명의 분자와 상이한(즉, 일반식 X로 표시되지 않는) 형광 에미터 F의 경우, 특히 이들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, PL 스펙트럼은 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 에미터 물질 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된다.

[1157] 흡수 스펙트럼은 실온(즉, (대략) 20°C)에서, 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 물질이 스핀 코팅된 필름에서 측정된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적인 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는, 달리 언급되지 않는 한, 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본 명세서에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대하여, 흡수 스펙트럼은 일반적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 니트 필름(neat film)에서 측정될 수 있다. 본 발명의 분자와 상이한 형광 에미터 F의 경우, 특히 이들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, PL 스펙트럼은 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 에미터 물질 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된다. 대안적으로, 흡수 스펙트럼은 또한 각각의 분자의 용액에서, 예를 들어 디클로로메탄 또는 톨루엔 내에서 기록될 수 있으며, 여기서 용액의 농도는 일반적으로 최대 흡광도가 바람직하게는 0.1 내지 0.5 범위가 되도록 선택된다.

[1158] 달리 언급하지 않는 한, 첫 번째 여기된 삼중항 상태 T1의 에너지는 일반적으로 각각의 물질의 스핀 코팅된 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 필름의 77K(정상 상태 스펙트럼)에서의 인광 스펙트럼 시작(onset)으로부터 결정된다. 인광 물질 P^B 에 대해서만, 인광 스펙트럼이 실온(즉, (대략) 20°C)에서 기록된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적인 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는, 달리 언급되지 않는 한, 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본 명세서에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대하여, 흡수 스펙트럼은 일반적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 니트 필름(neat film)에서 측정될 수 있다. 본 발명의 분자와 상이한 형광 에미터 F의 경우, 특히 이들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, PL 스펙트럼은 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 에미터 물질 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된다. ΔE_{ST} 값이 작은 TADF 물질 E^B 의 경우 시스템 간 교차(intersystem crossing) 및 역 시스템 간 교차(reverse intersystem crossing)가 모두 저온에서도 발생할 수 있다. 결과적으로, 77K에서의 발광 스펙트럼은 S1 및 T1 상태 모두로부터의 방출을 포함할 수 있다. 그러나 삼중항 에너지의 기여/값이 일반적으로 우세한 것으로 간주된다.

[1159] 달리 언급하지 않는 한, 첫 번째 여기된 단일항 상태 S1의 에너지는 실온(즉, (대략) 20°C)에서, 일반적으로 각각의 물질의 스핀 코팅된 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 필름의 형광 스펙트럼(정상 상태 스펙트럼)의 시작(onset)으로부터 결정된다. 본 발명에 따른 유기 분자의 경우, 일반적인 TADF 물질 E^B 의 경우 및 인광 물질 P^B 의 경우, 스핀 코팅된 PMMA 필름에서 각각의 물질의 농도는, 달리 언급되지 않는 한, 10중량%이다. 본 발명의 분자와 상이하고 본 명세서에 정의된 TADF 물질 E^B 가 아닌 호스트 물질 H^B 에 대하여, 흡수 스펙트럼은 일반적으로 각각의 호스트 물질 H^B 의 니트 필름(neat film)에서 측정될 수 있다. 본 발명의 분자와 상이한 형광 에미터 F의 경우, 특히 이들이 본 발명의 단락에서의 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우, PL 스펙트럼은 일반적으로 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 내에 각각의 에미터 물질 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%를 갖는 스핀 코팅된 필름에서 측정된다. 효율적인 시스템간 교차(intersystem crossing)를 나타내는 인광 물질 P^B 의 경우, 실온 발광(일반적으로 P^B 가 PMMA에 에미터 대비 10중량%로 스핀 코팅된 필름으로부터 측정됨)은 (대부분) 형광이 아닌 인광일 수 있다. 이 경우, 상온(즉, (대략) 20°C)에서 발광 스펙트럼의 시작은 위에서 언급한 첫 번째 여기된 삼중항 상태 T1의 에너지를 결정하는 데 사용되며 첫 번째 여기된 단일항 상태 S1의 에너지를 결정하는 데 사용되지 않

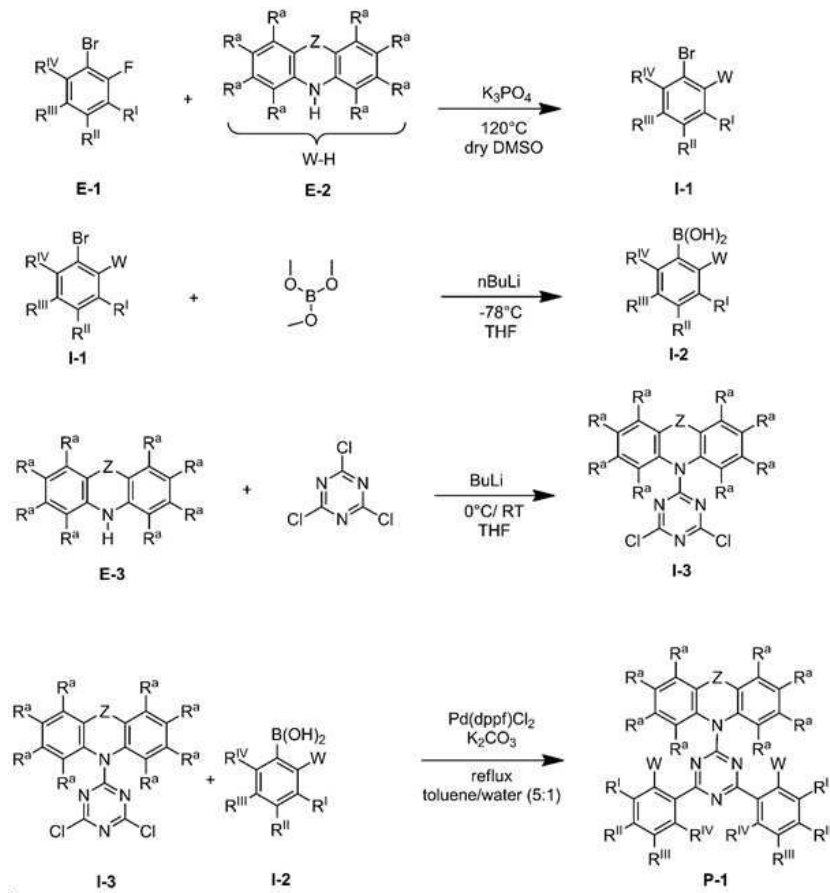
는다.

[1160] 달리 언급하지 않는 한, 첫 번째(즉, 최저) 여기 단일항 상태(S1)와 첫 번째(즉, 최저) 여기 삼중항 상태(T1) 사이의 에너지 차이에 해당하는 ΔE_{ST} 값은, 상기 설명된 대로 결정된 첫 번째 여기 단일항 상태 에너지 상태와 첫 번째 여기 삼중항 상태 에너지를 기준으로 결정된다.

[1161] 실시예

[1162] 일반 합성 방식 I

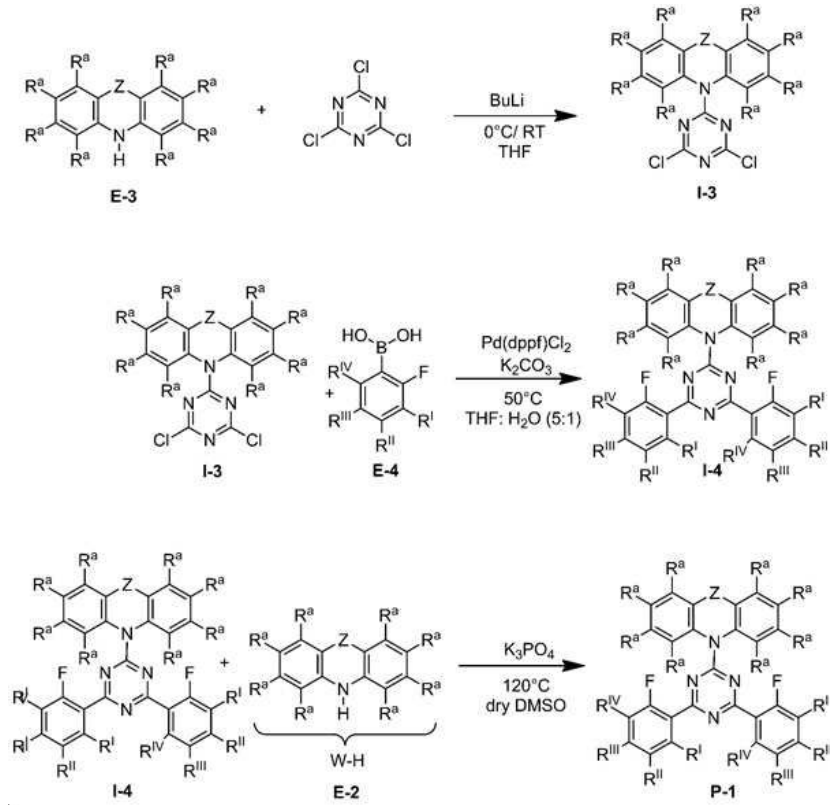
[1163] 예시적으로, 일반 합성 방식 I은 본 발명에 따른 유기 분자 P-1에 대한 합성 방식을 제공한다.



[1164]

[1165] 일반 합성 방식 Ib

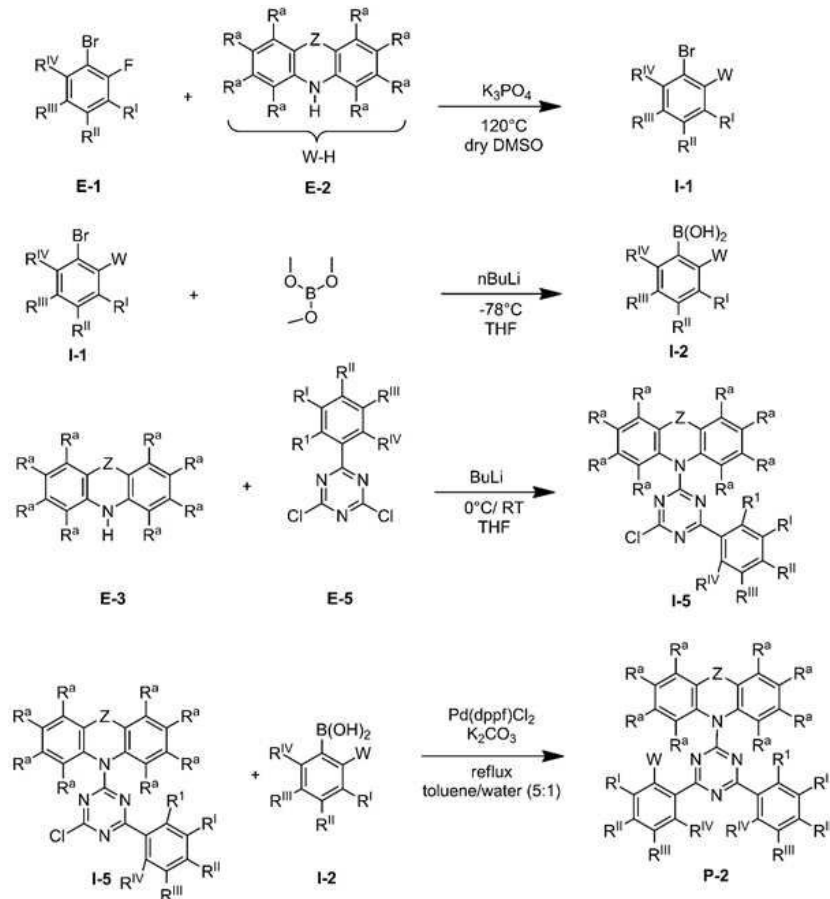
[1166] 예시적으로, 일반 합성 방식 I은 본 발명에 따른 유기 분자 P-1에 대한 대안적인 합성 방식을 제공한다.



[1167]

[1168] 일반 합성 방식 II

[1169] 일반 합성 방식 II는 본 발명에 따른 유기 분자 P-2에 대한 합성 방식을 제공한다.



[1170]

- [1171] 합성을 위한 일반적인 절차:
- [1172] 합성 방식 I에 대한 절차
- [1173] **절차 1**
- [1174] **E-1**(1.50당량), 카바졸 **E-2**(1.00당량) 및 제삼인산칼륨(2.50당량, CAS: 7778-53-2)를 질소 분위기 하에서 건조 DMSO 내에서 120° C에서 16시간 동안 교반한다(TLC 제어). 실온으로 냉각한 후, 혼합물에 물을 붓는다. 침전된 고체를 여과하고 디클로로메탄에 용해한다. 용액을 물로 세척하고, MgSO₄로 건조하고, 여과 및 농축한다. 획득된 미정제 생성물(crude product)을 컬럼 크로마토그래피에 의해 추가로 정제할 수 있다. 생성물 **I-1**을 고체로 얻는다.
- [1175] **절차 2**
- [1176] 질소 분위기 하에서, n-부틸리튬(THF 중 2.5M, 1.30 당량, CAS 109-72-8)을 건조 THF 중 **I-1**(1.00 당량)에 -78 °C에서 적가하고, 혼합물을 1.5시간 동안 교반한다. 이어서 트리메틸보레이트(4.00 당량, CAS 121-43-7)를 혼합물에 첨가하고, -78°C에서 2시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온까지 데우고 물과 에틸 아세테이트로 추출한다. 유기 용액을 MgSO₄로 건조하고, 여과 및 농축한다. 획득한 미정제 생성물에 톨루엔을 첨가하고 혼합물을 가열하여 환류한다. 남은 고체를 뜨겁게 여과하고 톨루엔으로 세척한 후 진공에서 건조한다. 생성물 **I-2**를 고체로 얻는다.
- [1177] **절차 3**
- [1178] 질소 분위기 하에서, n-부틸리튬(THF 중 2.5M, 1.00 당량, CAS 109-72-8)을 건조 THF 중 카바졸 **E-3**(1.00 당량)에 0°C에서 적가하고, 혼합물을 1.5시간 동안 교반한다. 이어서, 혼합물을 THF 중 염화시아누르(1.50 당량, CAS 108-77-0)에 첨가하고 혼합물을 실온에서 23시간 동안 교반한다. 침전물을 여과하고 메탄올로 세척한다. 획득한 미정제 생성물은 컬럼 크로마토그래피 또는 재결정화로 정제하여 **I-3**을 고체로 제공한다.
- [1179] **절차 4**
- [1180] **I-3**(1.00당량), **I-2**(2.50당량), Pd(dppf)Cl₂(0.05당량, CAS: 72287-26-4), 탄산칼륨(4.00당량, CAS: 584-08-7)을 질소 분위기 하에서 톨루엔/물 혼합물(5:1 비율)에서 환류와 함께 완료 시까지(보통 1-2시간; TLC 제어) 교반한다. 실온으로 냉각한 후, 혼합물을 에틸 아세테이트 및 물로 추출한다. 합한 유기층을 MgSO₄로 건조하고, 진공에서 여과 및 농축한다. 획득한 미정제 생성물은 적절한 용매(에탄올, 톨루엔, n-헥산)로부터의 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피에 의해 추가로 정제될 수 있다. 생성물 **P-1**을 고체로 얻는다.
- [1181] 합성 방식 Ib에 대한 절차
- [1182] **절차 1b**
- [1183] 질소 분위기 하에서, n-부틸리튬(THF 중 2.5M, 1.00 당량, CAS 109-72-8)을 건조 THF 중 카바졸 **E-3**(1.00 당량)에 0°C에서 적가하고, 혼합물을 1.5시간 동안 교반한다. 이어서, 혼합물을 THF 중 염화시아누르(1.50 당량, CAS 108-77-0)에 첨가하고 혼합물을 실온에서 23시간 동안 교반한다. 침전물을 여과하고 메탄올로 세척한다. 획득한 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피 또는 재결정화로 정제하여 **I-3**을 고체로 제공한다.
- [1184] **절차 2b**
- [1185] **I-3**(1.00당량), 2-플루오로페닐보론산 **E-4**(2.40당량), Pd(dppf)Cl₂(0.03당량, CAS: 72287-26-4), 탄산칼륨(4.00당량, CAS: 584-08-7)을 질소 분위기 하에서 톨루엔/물 혼합물(5:1 비율)에서 환류와 함께 완료 시까지(보통 1-2시간; TLC 제어) 교반한다. 실온으로 냉각한 후, 혼합물을 에틸 아세테이트 및 물로 추출한다. 합한 유기층을 MgSO₄로 건조하고, 진공에서 여과 및 농축한다. 획득한 미정제 생성물은 적절한 용매(에탄올, 톨루엔, n-헥산)로부터의 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피에 의해 추가로 정제될 수 있다. 생성물 **I-4**를 고체로 얻는다.
- [1186] **절차 3b**
- [1187] **I-4**(1.00 당량), 카바졸 **E-2**(2.40 당량) 및 제삼인산칼륨(4.00 당량, CAS: 7778-53-2)을 질소 분위기 하에서 건조 DMSO내에서 120° C에서 16시간 동안 교반한다(TLC 제어). 실온으로 냉각된 후, 혼합물을 물에 붓는다. 침

전된 고체를 여과하고 디클로로메탄에 용해한다. 용액을 물로 세척하고, MgSO₄로 건조하고, 여과 및 농축한다. 획득한 미정제 생성물은 적절한 용매(에탄올, 톨루엔, n-헥산)로부터의 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피에 의해 추가로 정제될 수 있다. 생성물 **P-1**을 고체로 얻는다.

[1188] 합성 방식 II의 절차

[1189] 처음 두 반응 단계는 절차 1과 절차 2에 설명되어 있다.

[1190] **절차 5**

[1191] 질소 분위기 하에서, n-부틸리튬(THF 중 2.5M, 1.00 당량, CAS 109-72-8)을 건조 THF 중 카바졸 **E-3**(1.00 당량)에 0°C에서 적가하고, 혼합물을 1.5시간 동안 교반한다. 이어서, 혼합물을 THF 중 **E-5**(1.50 당량)에 첨가하고, 혼합물을 실온에서 5시간 동안 교반한다. 증류수를 첨가하고 침전물을 여과한 후 메탄올로 세척한다. 획득한 미정제 생성물이 컬럼 크로마토그래피 또는 에탄올에서의 재결정화에 의해 정제하여 **I-5**가 고체로 얻는다.

[1192] **절차 6**

[1193] **I-5**(1.00당량), **I-2**(1.20당량), Pd(dppf)Cl₂(0.05당량, CAS: 72287-26-4), 탄산칼륨(4.00당량, CAS: 584-08-7)을 질소 분위기 하에서 톨루엔/물 혼합물(5:1 비율)에서 환류와 함께 완료 시까지(보통 1-2시간; TLC 제어) 교반한다. 실온으로 냉각한 후, 혼합물을 에틸 아세테이트 및 물로 추출한다. 합한 유기층을 MgSO₄로 건조하고, 진공에서 여과 및 농축한다. 획득한 미정제 생성물은 적절한 용매(에탄올, 톨루엔, n-헥산)로부터의 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피에 의해 추가로 정제될 수 있다. 생성물 **P-2**를 고체로 얻는다.

[1194] 순환전압전류법

[1195] 순환 전압전류법이 디클로로메탄 또는 적합한 용매 및 적합한 지지 전해질(예: 0.1mol/L의 테트라부틸암모늄 헥사플루오로포스페이트) 내에서 각각의 화합물(예: 본 발명에 따른 유기 분자, 일반적인 TADF 물질 E^B, 일반적인 호스트 물질 H^B, 일반적인 인광 물질 PB 및 일반적인 형광 에미터 F)의 농도가 10⁻³ mol/L인 용액에서 측정된다. 측정은 3전극 조립체(작업 및 상대 전극: Pt 와이어, 기준 전극: Pt 와이어)를 사용하여 질소 분위기에서 실온(즉, (대략) 20°C)에서 수행하고, 내부 표준으로서 FeCp₂/FeCp₂⁺를 사용하여 보정한다.

[1196] HOMO 및 LUMO 데이터는 페로센을 내부 표준으로 사용하여 보정되며, 이 목적을 위해 페로센의 문헌 값이 사용된다.

[1197] 밀도 범함수 이론 계산

[1198] 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.

[1199] 광물리학적 측정

[1200] 샘플 전처리: 스핀 코팅

[1201] 달리 언급하지 않는 한, 성분의 광물리학적 측정은 각각의 성분(예를 들어, 본 발명에 따른 유기 분자, 일반적인 TADF 물질 E^B, 일반적인 호스트 물질 H^B, 일반적인 인광 물질 P^B, 및 일반적인 형광 에미터 F)이 스핀-코팅된 폴리(메틸 메타크릴레이트), PMMA 필름으로부터 수행된다. 달리 언급하지 않는 한, 이러한 스핀 코팅된 PMMA 필름의 성분 농도는 다음과 같다.

[1202] · 본 발명에 따른 모든 유기 분자: PMMA 중 10중량%

[1203] · 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B: PMMA 중 10중량%

[1204] · 본 명세서에 정의된 바와 같은 인광 물질 P^B: PMMA에서 10 중량%

[1205] · 본 발명에 따른 유기 분자의 일부를 형성하지 않는, 본 명세서에 정의된 바와 같은 형광 에미터 F, 특히 그

들이 본 발명의 맥락에서 작은 FWHM 에미터 S^B 인 경우: PMMA에서 1-5중량%, 바람직하게는 2중량%.

[1206] 그러나, 본 발명에 따른 유기 분자가 아니고, 본 명세서에 정의된 바와 같은 TADF 물질 E^B 또는 인광 물질 P^B 또는 형광 에미터 F가 아닌 호스트 물질 H^B 의 경우, H^B 의 스핀 코팅된 니트 필름(neat film)이 PMMA 필름 대신에 사용된다.

[1207] 장치: Spin150, SPS 유로.

[1208] 샘플 농도는 1.0mg/ml이며 일반적으로 적합한 용매로 톨루엔/DCM에 용해된다.

[1209] 프로그램: 2000U/분에서 7-30초. 코팅 후 필름을 70° C에서 1분 동안 건조한다.

[1210] 흡수 측정

[1211] Thermo Scientific Evolution 201 UV-Visible Spectrophotometer가 270nm 초과와 파장 영역에서 샘플의 최대 흡수 파장을 결정하는 데 사용된다. 이 파장은 광발광 스펙트럼 및 양자 수율 측정을 위한 여기 파장으로 사용된다.

[1212] 광발광 분광법

[1213] 광발광 분광법의 측정을 위해 Horiba의 형광 분광계 "Fluoromax 4P"가 사용된다.

[1214] 인광 에미터로부터의 정상 상태 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼이 실온에서 기록된다. 기본 작동 방식은 다음과 같다: 연속 광원(제논 아크 램프)을 적절한 파장 밴드를 선택하는 여기 단색기(excitation monochromator)에 비춘다. 이 단색 여기 광(monochromatic excitation light)은 발광(luminescence)을 방출하는 샘플로 향한다. 샘플이 스핀 코팅된 또는 증발된 필름인 경우, 이는 측정하는 동안 큐벳에 놓여지고 질소 분위기에 유지된다. 발광은 파장 밴드를 선택하는 두 번째 방출 단색기로 향하고, 측정 중에 변경되어, 이를 광자 계수 검출기(photon counting detector)(R928P 광전자 증배관(photomultiplier tube))에 비춘다. 검출기로부터의 신호는 시스템 컨트롤러와 호스트 컴퓨터로 보고되며, 여기에서 데이터를 처리하고 표시할 수 있다.

[1215] TADF 에미터의 인광 스펙트럼은 77K에서 기록된다. 기본 작동 방식은 다음과 같다: 여기를 위해 펄스 광원(펄스 제논 램프)이 사용되며, 25Hz에서 작동한다. 게이트-및-지연 생성기(gate-and-delay generator)를 포함하는 제어 모듈이 여기와 검출 사이의 타이밍을 제어하는데 사용된다. 일반적인 데이터 수집 시퀀스가 제어 모듈에 의해 감지되는 펄스 램프로부터의 플래쉬에 의해 시작된다. 광은 여기 단색기에 진입하여 분산된다. 단색기로부터의 단색광이 샘플을 여기시킨다. 측정 동안 샘플은 액체 질소로 채워진 유리 듀어 용기(glass dewar container)에 놓여진다. 샘플로부터의 광(luminescence) 방출은 그 다음 방출 단색기를 통과하여 광전자 증배관-튜브 검출기(photon counting photomultiplier-tube detector)로 전달된다. 제어 모듈은 검출기로부터의 신호를 가로채고, 플래쉬 이후 게이팅된 부분의 신호만을 (초기 지연) 사전 결정된 길이의 샘플링 시간 동안 (샘플 윈도우) 수집한다. 게이팅 전후에 도달하는 모든 신호는 무시된다. 초기 지연은 0 내지 10000ms 사이에서 변경될 수 있으며, 이는 초기 형광 방출 및 램프 감쇠에 의한 임의의 영향을 배제하도록 설정되고, 바람직하게는 50ms로 설정된다. 샘플 윈도우는 0.01 내지 10000ms 사이에서 변경될 수 있으며, 이는 인광 방출을 수집하도록 설정되고, 바람직하게는 40ms로 설정된다.

[1216] μs 범위 및 ns 범위(FS5)의 시간 분해(과도) 광발광(PL) 분광법

[1217] 시간 분해 PL 측정은 Edinburgh Instruments의 FS5 형광 분광기에서 수행된다. HORIBA 설정에서의 측정과 비교할 때, 더 나은 집광에 의해 신호 대 노이즈 사이 비율이 최적화되므로, FST는 특히 지연 형광 특성의 과도 PL 측정에 유리하다. 연속 광원으로서 분광기는 150W 제논 아크 램프를 포함하고, 선택된 파장은 Czerny-Turner 단색기(monochromator)에 의해 선택될 수 있다. 그러나, 표준 측정은 대신에 발광 파장이 310nm인 외부 VPLED 가변 펄스 LED를 사용하여 수행된다. 샘플 발광은 민감한 R928P 광전자 증배관(PMT)을 향하고, 이는 200nm에서 870nm의 스펙트럼 범위에서 최대 양자 효율이 최대 25%인 단일 광자의 검출이 가능하도록 한다. 검출기는 온도-안정화된 PMT이고, 이는 초당 300 미만의 카운트 수(counts per second)의 암계수율(dark count)을 보장한다.

[1218] 데이터 수집은 잘 확립된 시간 상관 단일 광자 계수(time correlated single photon counting, TCSPC) 기술을 사용하여 이루어진다. FS5에는 방출 단색기, 온도 안정화 광전자 증배관 및 여기 소스로서의 펄스 LED(310nm 중앙 파장, 910ps 펄스 폭)가 장착되어 있다. 샘플이 스핀 코팅된 또는 증발된 필름인 경우, 이는 측정되는 동안 큐벳에 놓여지고 질소 분위기에서 유지된다.

[1219] 측정된 과도 광발광 신호의 평균 감쇠 수명 τ 을 결정하기 위해, 데이터는 다음의 n 지수 함수의 합으로 맞춤 된다:

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

[1220] 여기서 n은 1 내지 3이다. 특정 수명 τ_i 에 해당 진폭 A_i 으로 가중치를 부여하여, 지연 형광 수명 τ_{DF} 이 다음과 같이 결정된다:

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

[1222] TCSPC(Time-correlated single-photon counting, 시간 상관 단일 광자 계수)

[1224] 여기 상태 분포 역학(excited state population dynamics)은 방출 단색기, 검출기 장치로서 온도 안정화 광전자 증배관 및 여기 소스로서 펄스 LED(310nm 중심 파장, 910ps 펄스 폭)가 장착된 Edinburgh Instruments FS5 Spectrofluorometers를 사용하여 결정된다. 샘플은 측정되는 동안 질소로 플러시되고 큐벳에 배치된다.

[1225] 전체 감쇠 역학(Full decay dynamics)

[1226] 시간 및 신호 강도에서 여러 차수의 크기에 걸친 전체 여기 상태 분포 감쇠 역학(full excited state population decay dynamics)이 4개 시간 창(: 200ns, 1 μ s 및 20 μ s, 및 > 80 μ s에 이르는 더 긴 측정)에서 TCSPC 측정을 수행함으로써 달성된다. 측정된 시간 곡선은 다음과 같은 방식으로 처리된다.

- [1227] 1. 배경 보정은 여기(excitation) 및 빼기(subtract) 전에 평균 신호 레벨을 결정하여 적용된다.
- [1228] 2. 시간 축은 주 신호의 초기 상승을 기준으로 정렬된다.
- [1229] 3. 곡선은 겹치는 측정 시간 영역을 사용하여 서로 크기가 조정된다.
- [1230] 4. 처리된 곡선이 하나의 곡선으로 병합된다.

[1231] 데이터 분석

[1232] 데이터 분석은 즉시 형광(prompt fluorescence, PF)(일반적으로 나노초 정도) 및 지연 형광(Delayed fluorescence, DF)(일반적으로 마이크로초 정도) 감쇠 각각에 대해 단일 지수 및 이중 지수 맞춤을 사용하여 수행된다. 지연 형광 및 즉시 형광의 비율(n-값)은 각각의 광발광 감쇠를 시간에 따라 통합하여 계산된다.

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

[1234] 평균 여기 상태 수명은 PF 및 DF의 각각의 기여도와 함께 가중된 즉각 및 지연 형광 감쇠 시간의 평균을 취하여 계산된다.

[1235] 광발광 양자 수율 측정

[1236] 광발광 양자 수율(PLQY) 측정을 위해 절대 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.

[1237] 최대 발광(emission maxima)은 nm로, 양자 수율(quantum yield) Φ 는 %로, CIE 좌표는 x,y 값으로 표시된다.

[1238] 광발광 양자 수율(PLQY)은 다음의 프로토콜을 사용하여 결정된다.

- [1239] 1) 품질 보증: 에탄올 중 안트라센(알려진 농도)이 기준(reference)으로서 사용된다.
- [1240] 2) 여기 파장: 유기 분자의 최대 흡수가 결정되고, 이 파장을 사용하여 분자가 여기된다.
- [1241] 3) 측정

[1242] 양자 수율은 실온(즉, (대략) 20°C)에서 전술한 스핀 코팅된 필름으로부터 질소 분위기 하에서 측정된다. PLQY는 다음 방정식을 사용하여 계산된다.

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{photon,emitted}}}{n_{\text{photon,absorbed}}} = \frac{\int_{\lambda_3}^{\lambda_4} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{sample}}(\lambda) - I_{\text{reference}}(\lambda)] d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{reference}}(\lambda) - I_{\text{sample}}(\lambda)] d\lambda}$$

[1243] 여기서 n_{photon} 은 광자 수를 나타내고 I는 강도를 나타낸다. 색인 'reference'은 발광 샘플이 없는 기준 측정을 나타내고 색인 'sample'은 발광 샘플이 있는 측정을 나타낸다. 파장 λ_1 및 λ_2 는 여기 광 영역을 표시하고 파장 λ_3 및 λ_4 는 샘플 발광 영역을 표시한다.

[1245] 광전자 소자의 제조 및 특성화

[1246] 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 백분율 값은 100%가 되므로, 값이 지정되지 않으면, 화합물의 분율은 지정된 값들과 100% 간의 차이와 같다.

[1247] 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 특징지어진다. 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, LT97은 측정 휘도가 초기 휘도의 97%로 감소한 시점에 해당하는 등이다.

[1248] 가속 수명 측정이 수행된다(예: 증가된 전류 밀도가 적용됨). 예를 들어, 500cd/m^2 에서 LT80 값은 다음의 식을 사용하여 결정된다.

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

[1249] 여기서 L_0 는 인가된 전류 밀도에서의 초기 휘도를 나타낸다.

[1251] 값들은 여러 픽셀(일반적으로 2~8개)의 평균에 해당하며, 이러한 픽셀 간의 표준 편차가 제공된다. 도면은 하나의 OLED 픽셀에 대한 데이터 시리즈를 보여준다.

[1252] HPLC-MS

[1253] 유기 화합물의 순도는 질량 분석법(MS)과 결합된 고압 액체 크로마토그래피(HPLC)를 사용하여 평가할 수 있다. 이러한 HPLC-MS 측정은 단일 사중극자 MS 검출기(single quadrupole MS-detector)가 장착된 Agilent의 HPLC1260 Infinity HPLC-MS 시스템을 사용하여 수행되었다. 예를 들어, 일반적인 HPLC 방법은 다음과 같다: 역상 컬럼 3.0mm x 100mm, 입자 크기 2.7 μm Agilent(Poroshell 120EC-C18, 3.0 x 100mm, 2.7 μm HPLC 컬럼)가 HPLC에 사용된다. HPLC-MS 측정은 45° C에서 수행되며 일반적인 구배는 다음과 같다.

표 1

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

[1255] 다음 용매 혼합물(모든 용매는 0.1%(V/V)의 포름산을 함유함)을 사용하였다:

표 2

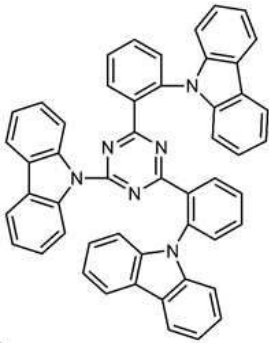
[1256]

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

[1257] 0.5 mg/mL 농도의 분석물 용액 2 μL 주입 부피를 측정에 사용한다.

[1258] 프로브의 이온화는 양성(APCI +) 또는 음성(APCI -) 이온화 모드에서 대기압 화학적 이온화(APCI) 소스 또는 대기압 광이온화(APPI) 소스를 사용하여 수행된다.

[1259] 실시예 1



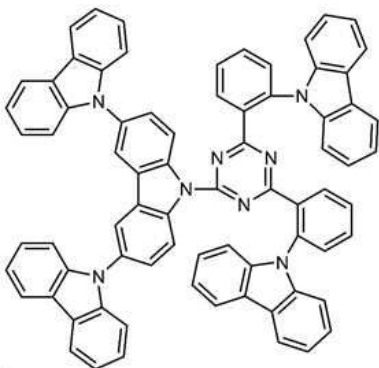
[1260]

[1261] 실시예 1을 절차 4(수율 43%)에 따라 합성하였고, 여기서 9-(4,6-디클로로-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸(CAS 24209-95-8)을 생성물(반응물) I-3로서 사용하고, 2-플루오로페닐보론산(CAS: 1993-03-9)을 생성물 I-2로서 각각 사용하였다.

[1262] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 729.6(5.39분).

[1263] 도 1은 실온(즉, 대략 20° C)에서 실시예 1(PMMA 내의 10 중량%)의 발광 스펙트럼을 나타낸다. 최대 발광(I_{max})은 475nm이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 79%, 반치폭(FWHM)은 0.44eV, 발광 수명은 15.4 μs이다. 결과 CIE_x 좌표는 0.17에서 결정되고, CIE_y 좌표는 0.27에서 결정된다.

[1264] 실시예 2



[1265]

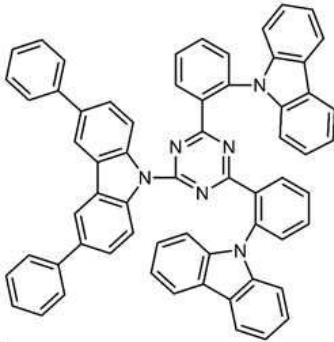
[1266] 실시예 2를 절차 3(수율 66%)과 절차 4(수율 25%)에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 3,6-비스(9H-카바졸-9-일)-9H-카바졸(CAS 606129-90-2)을 생성물 E-3으로 사용하였고, B-[2-(9H-카바졸-9-일)페닐]보론산(CAS: 1189047-28-6)을 생성물 I-2로 사용하였다.

[1267] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 1060.1(7.45분).

[1268] 도 2는 실온(즉, 대략 20° C)에서 실시예 2(PMMA 중량의 10%)의 발광 스펙트럼을 나타낸다. 최대 발광(I_{max})은

486nm이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 49%, 반치폭(FWHM)은 0.48eV, 발광 수명은 19.8 μ s이다. 결과 CIE_x 좌표는 0.21에서 결정되고, CIE_y 좌표는 0.35에서 결정된다.

[1269] 실시예 3



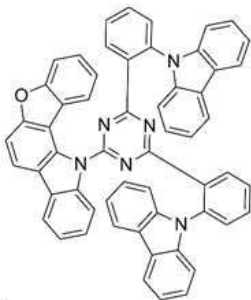
[1270]

[1271] 실시예 3을 절차 3(수율 49%) 및 절차 4(수율 55%)에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 3,6-디페닐카바졸(CAS 56525-79-2)을 생성물 **E-3**로 사용하였고, B-[2-(9H-카바졸-9-일)페닐]보론산(CAS: 1189047-28-6)을 생성물 **I-2**로 사용하였다.

[1272] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 881.8(6.44분).

[1273] 도 3은 실온(즉, 대략 20° C)에서 실시예 3(PMMA 내의 10 중량%)의 발광 스펙트럼을 나타낸다. 최대 발광(I_{max})은 476nm이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 65%, 반치폭(FWHM)은 0.45eV, 발광 수명은 30.5 μ s이다. 결과 CIE_x 좌표는 0.18에서 결정되고, CIE_y 좌표는 0.30에서 결정된다.

[1274] 실시예 4



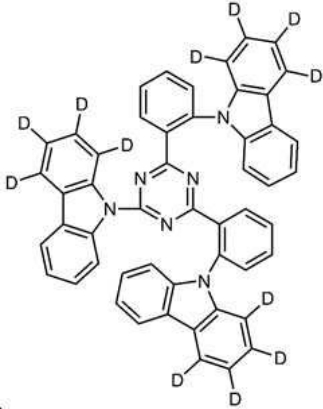
[1275]

[1276] 실시예 4를 절차 3(수율 29%) 및 절차 4(수율 86%)에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 12H-벤조푸로[3,2-a]카바졸(CAS: 1246308-85-9)을 생성물 **E-3**으로 사용하였고, B-[2-(9H-카바졸-9-일)페닐]보론산(CAS: 1189047-28-6)을 생성물 **I-2**로 사용하였다.

[1277] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 820.2(5.69분).

[1278] 도 4는 실온(즉, 대략 20° C)에서 실시예 4(PMMA 내의 10 중량%)의 발광 스펙트럼을 나타낸다. 최대 발광(I_{max})은 489nm이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 72%, 반치폭(FWHM)은 0.44eV, 발광 수명은 11.0 μ s이다. 결과 CIE_x 좌표는 0.21에서 결정되고, CIE_y 좌표는 0.39에서 결정된다.

[1279] 실시예 5

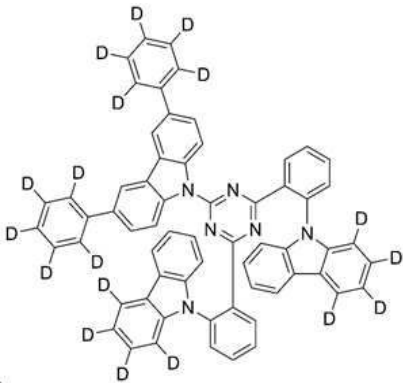


[1280]

[1281] 실시예 5를 절차 1(수율 87%), 절차 2(수율 55%), 절차 3(수율 70%) 및 절차 4(수율 67%)에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 2-브로모플루오로벤젠(CAS 1072-85-1)을 생성물 E-1로 사용하였고, 9H-카바졸-1,2,3,4-d4(CAS 935425-39-1)를 생성물 E-2 및 E-3으로 사용하였다.

[1282] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 742.1(5.21분).

[1283] 실시예 6

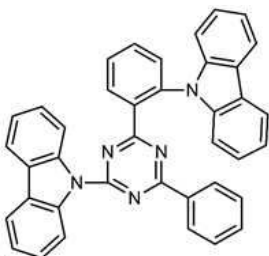


[1284]

[1285] 실시예 6을 절차 1(수율 87%), 절차 2(수율 55%), 절차 3(수율 61%) 및 절차 4(수율 68%)에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 2-브로모플루오로벤젠(CAS 1072-85-1)을 생성물 E-1로 사용하였고 3,6-디(페닐-2,3,4,5,6-d5)-9H-카바졸(CAS:2179126-86-2)을 생성물 E-2 및 E-3으로 사용하였다.

[1286] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 742.1(5.21분).

[1287] 실시예 7



[1288]

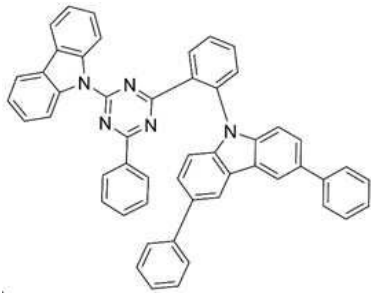
[1289] 실시예 7을 절차 6에 따라 합성하였으며(수율 50%), 여기서 각각 9-(4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸(CAS: 1268244-56-9)을 생성물 I-5로 사용하였고, B-[2-(9H-카바졸-9-일)페닐]보론산(CAS: 1189047-28-6)을 생성물 I-2로 사용하였다.

[1290] MS(HPLC-MS), m/z(체류 시간): 564.7(4.91분).

[1291] 도 5는 실온(즉, 대략 20° C)에서 실시예 7(PMMA 내의 10 중량%)의 발광 스펙트럼을 나타낸다. 최대 발광(I_{max})

은 468nm이다. 광발광 양자 수율(PLQY)은 75%, 반치폭(FWHM)은 0.44eV, 발광 수명은 26.2 μ s이다. 결과 CIE_x 좌표는 0.16에서 결정되고, CIE_y 좌표는 0.20에서 결정된다.

[1292] 실시예 8



[1293]

[1294] 실시예 8을 절차 1, 절차 2 및 절차 6에 따라 합성하였으며, 여기서 각각 9-(4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸(CAS: 1268244-56-9)을 생성물 **I-5**로 사용하였고, 2-브로모플루오로벤젠(CAS 1072-85-1)을 생성물 **E-1**로 사용하였고, 3,6-디페닐카바졸(CAS 56525-79-2)을 생성물 **E-2**로 사용하였고, (2-(3,6-다이페닐-9H-카바졸-9-일)페닐)보론산(CAS 2640936-45-2)을 생성물 **I-2**로 사용하였다.

[1295] 실시예 D1

[1296] 실시예 1을 다음 층 구조로 제작된 OLED **D1**에서 테스트하였다.

표 3

[1297]

층 #	두께	D1
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(80%): 실시예 1(20%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1298] OLED **D1**은 1000cd/m²에서 19.2%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.0V에서 최대 발광이 481nm에서 나타나고, 76nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.17이고, CIE_y 값은 0.32이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 13.9시간으로 결정되었다.

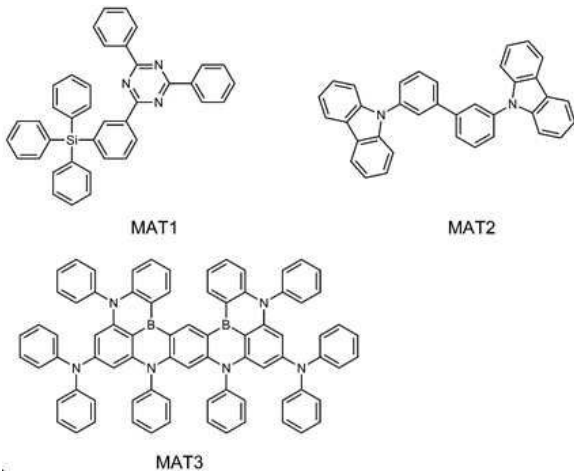
[1299] 실시예 D2

[1300] 실시예 1을 다음 층 구조로 제작된 OLED **D2**에서 테스트하였다.

표 4

[1301]

층 #	두께	D2
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2 (79%): 실시예 1 (20%): MAT3 (1%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리



[1302]

[1303]

OLED D2는 1000cd/m²에서 17.8%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 7.6V에서 최대 발광이 472nm에서 나타나고, 20nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.12이고, CIE_y 값은 0.17이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 5.4 시간으로 결정되었다.

[1304]

실시예 D3

[1305]

실시예 3을 다음 층 구조로 제작된 OLED D3에서 테스트하였다.

표 5

[1306]

층 #	두께	D3
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2 (79.5%): 실시예 3 (20%): AT3 (0.5%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1307]

OLED D3은 1000cd/m²에서 23.3%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 7.3V에서 최대 발광이 470nm에서 나타나고, 22nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.14이고, CIE_y 값은 0.19이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 4.1 시간으로 결정되었다.

[1308]

실시예 D4

[1309]

실시예 3을 다음 층 구조로 제작된 OLED D4에서 테스트하였다.

표 6

[1310]

층 #	두께	D4
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(80%): 실시예 3(20%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1311]

OLED D4는 1000cd/m²에서 17.8%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.7V에서 최대 발광이 486nm에서 나타나고, 79nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.18이고, CIE_y 값은 0.35이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 1.4 시간으로 결정되었다.

[1312]

실시예 D5

[1313]

실시예 5를 다음 층 구조로 제작된 OLED D5에서 테스트하였다:

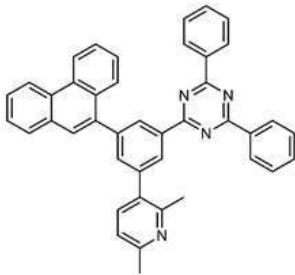
표 7

[1314]

층 #	두께	D5
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	MAT4(50%):Liq(50%)
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2 (79.5%): 실시예 5 (20%): MAT3 (0.5%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1315]

OLED D5는 1000cd/m²에서 26.1%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 7.6V에서 최대 발광이 470nm에서 나타나고, 20nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.13이고, CIE_y 값은 0.16이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 20.0시간으로 결정되었다.



MAT4

[1316]

실시예 D6

[1318]

실시예 5를 다음 층 구조로 제작된 OLED D6에서 테스트하였다:

표 8

[1319]

층 #	두께	D6
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	MAT4(50%):Liq(50%)
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(80%): 실시예 5(20%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1320] OLED **D6**은 1000cd/m²에서 19.8%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.4V에서 최대 발광이 480nm에서 나타나고, 74nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.16이고, CIE_y 값은 0.32이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 8.8시간으로 결정되었다.

[1321] 실시예 **D2b**

[1322] 실시예 **1**을 다음 층 구조로 제작된 OLED **D2b**에서 테스트하였다.

표 9

[1323]

층 #	두께	D5
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	MAT4(50%): Liq(50%)
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2 (79.5%): 실시예 1 (20%): MAT3 (0.5%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1324] OLED **D2b**는 1000cd/m²에서 26.2%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.9V에서 최대 발광이 470nm에서 나타나고, 20nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.13이고, CIE_y 값은 0.16이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 17.9시간으로 결정되었다.

[1325] 비교예 **C1**을 다음 층 구조로 제작된 OLED **CD1**에서 테스트하였다.

표 10

[1326]

층 #	두께	CD1
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(80%): 비교예 C1(20%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1327] OLED **CD1**은 1000cd/m²에서 8.7%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.1V에서 최대 발광이 476nm에서 나타나고, 74nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.16이고, CIE_y 값은 0.28이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 0.8시간으로 결정되었다.

[1328] 비교예 C1을 다음 층 구조로 제작된 OLED CD2에서 테스트하였다.

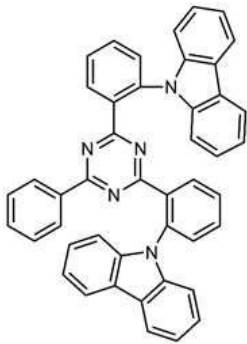
표 11

[1329]

층 #	두께	CD2
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2 (79%): 비교예 C1(20%): MAT3(1%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
기판		유리

[1330] OLED CD2는 1000cd/m²에서 16.9%의 외부양자효율(EQE)을 나타내었다. 6.4V에서 최대 발광이 472nm에서 나타나고, 20nm의 반치폭(FWHM)을 갖는다. 해당 CIE_x 값은 0.12이고, CIE_y 값은 0.15이다. 1200cd/m²에서의 LT95 값은 1.2시간으로 결정되었다.

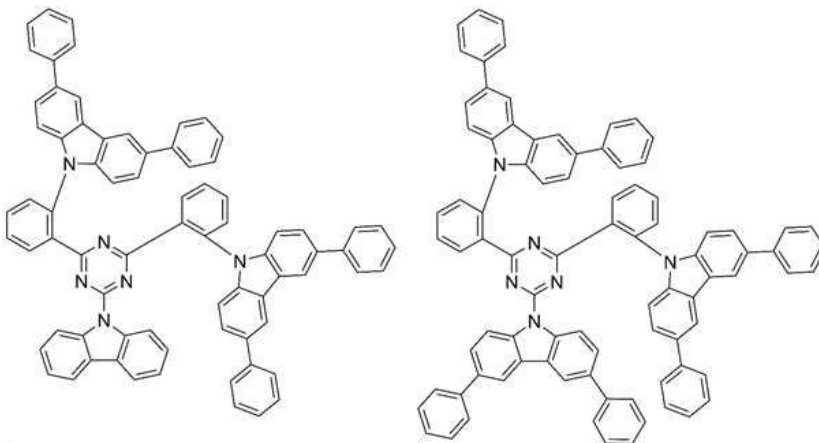
[1331] 본 발명에 따른 분자는 비교예 C1보다 외부 양자 효율 및 수명 측면에서 더 나은 소자 성능을 나타낸다.



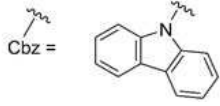
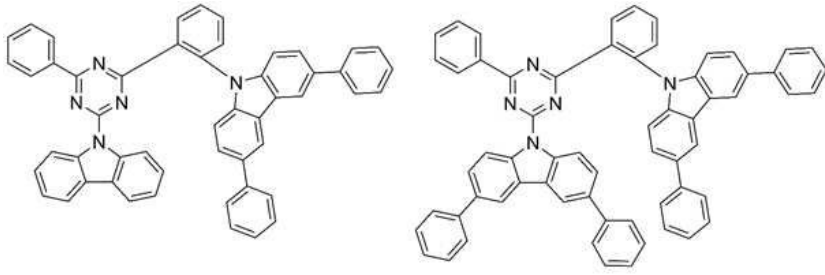
C1

[1332]

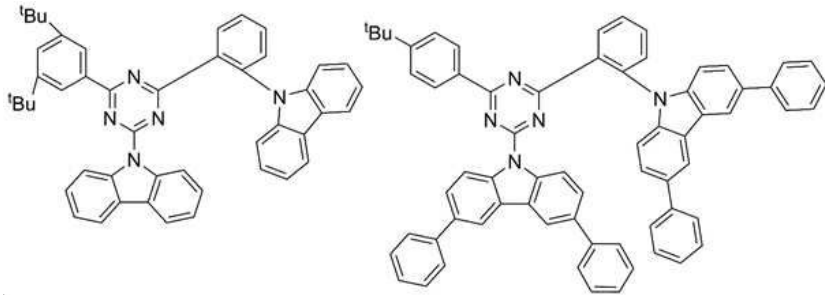
[1333] 본 발명의 유기 분자의 추가 실시예



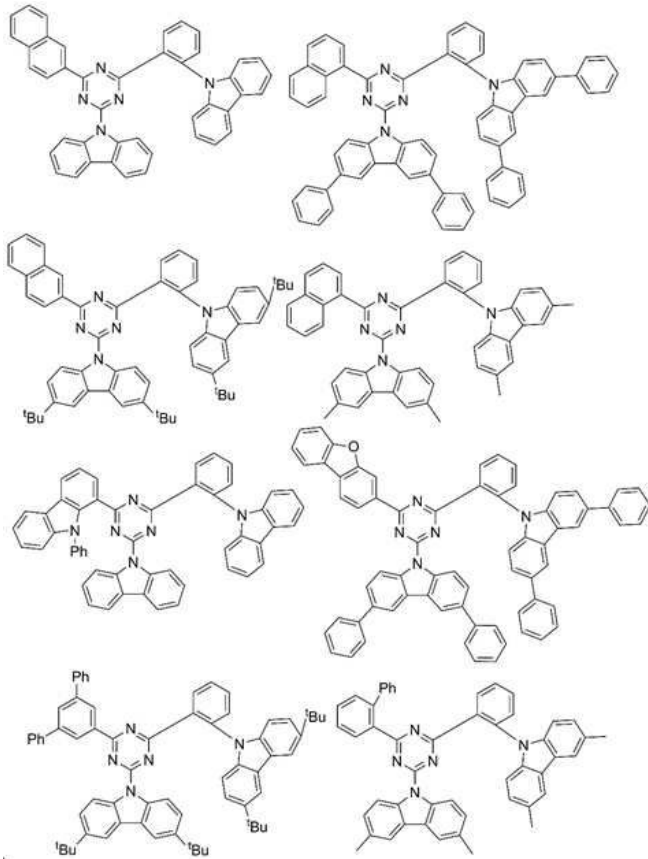
[1334]



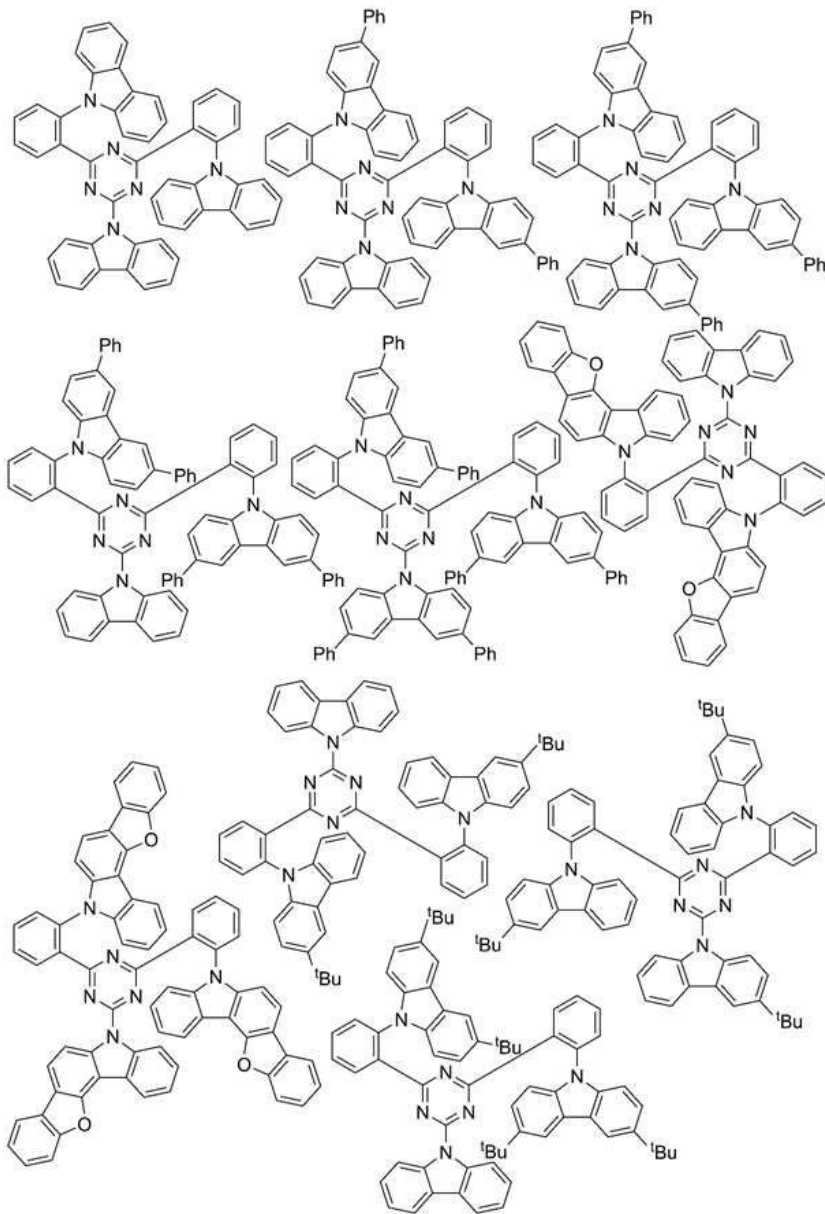
[1335]



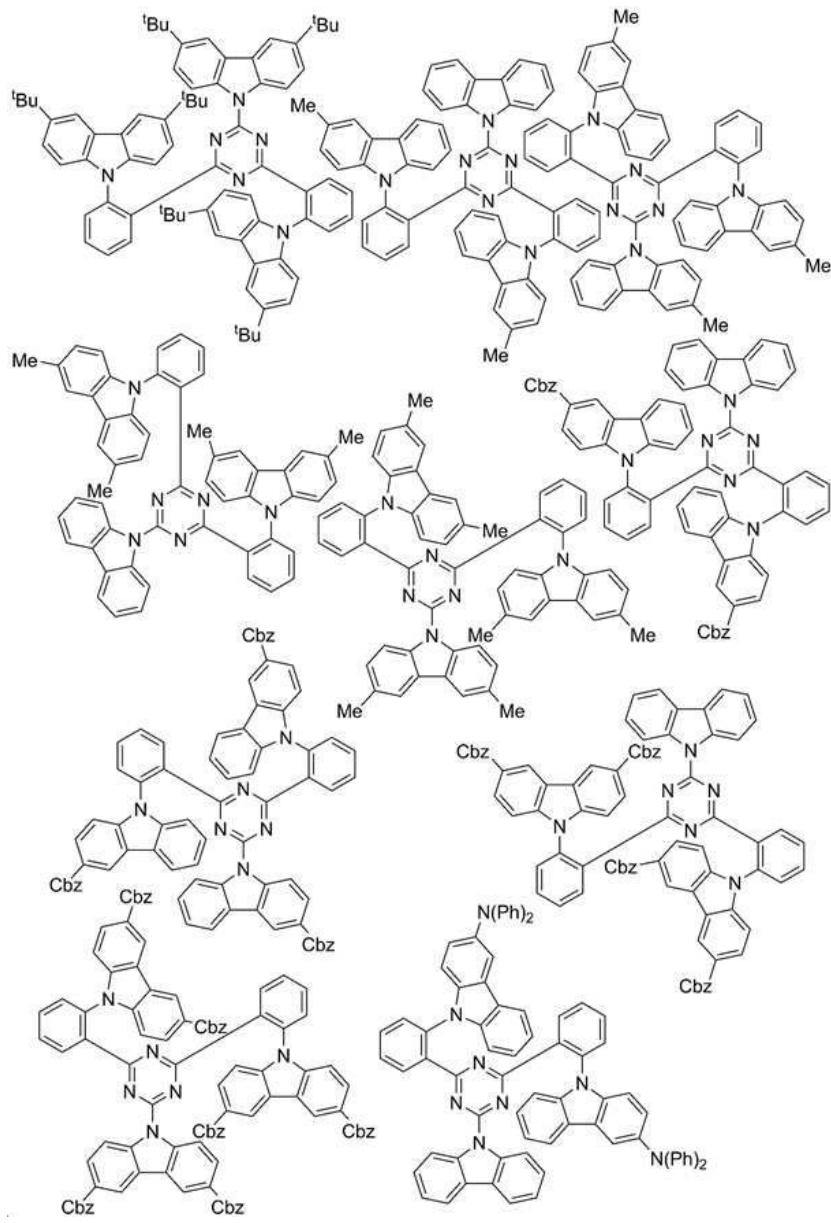
[1336]



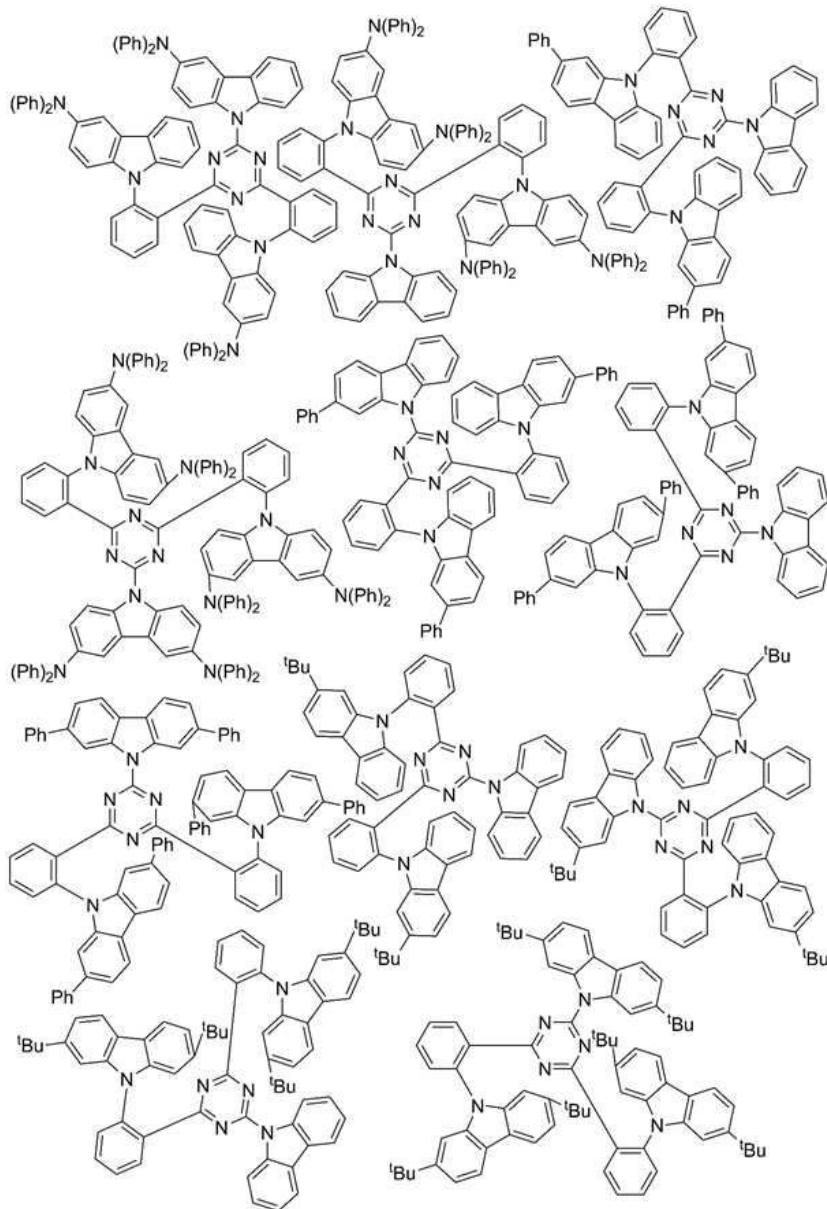
[1337]



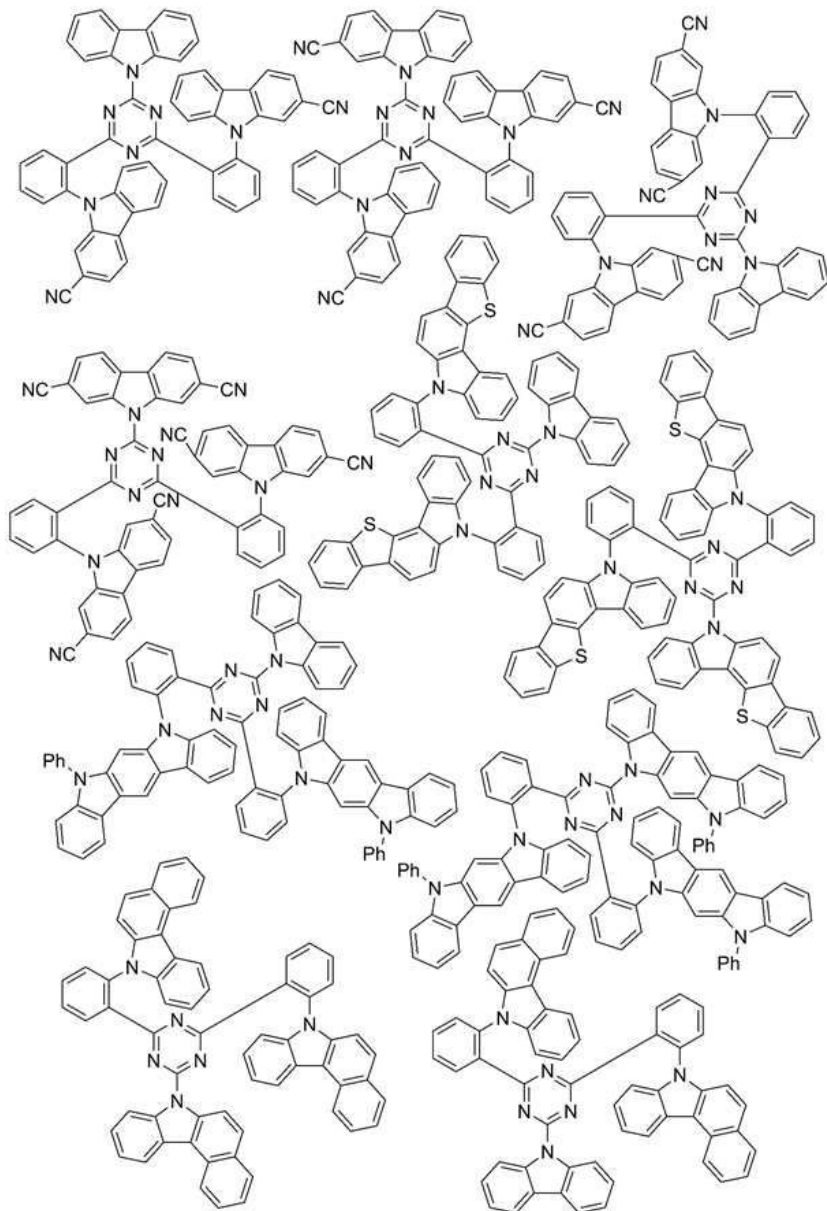
[1338]



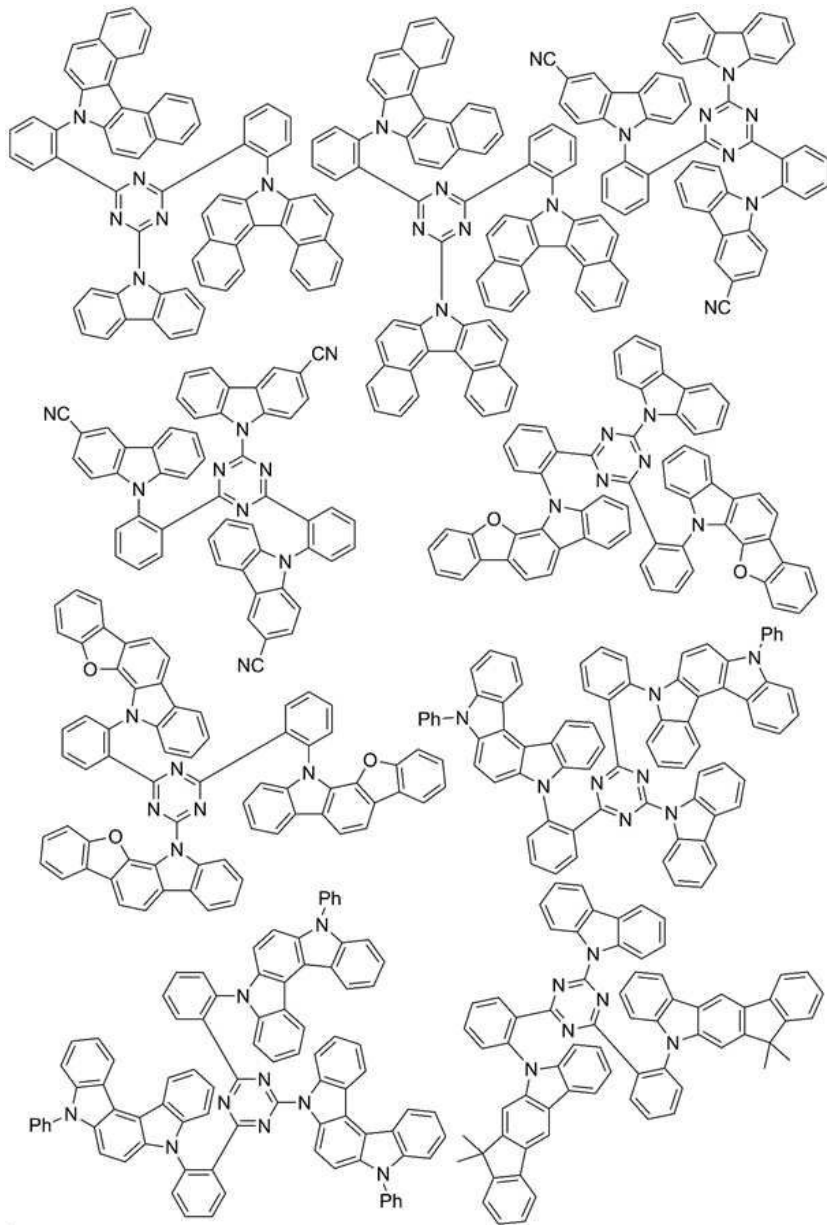
[1339]



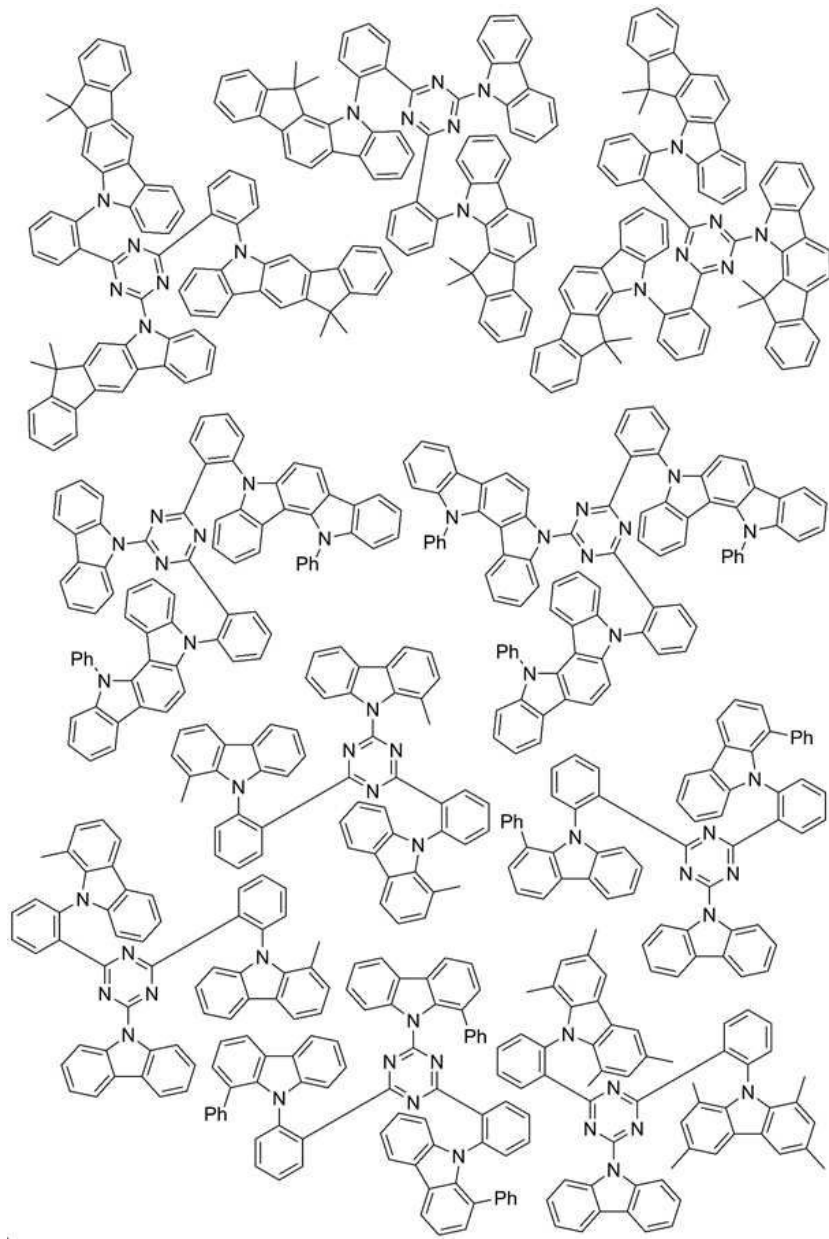
[1340]



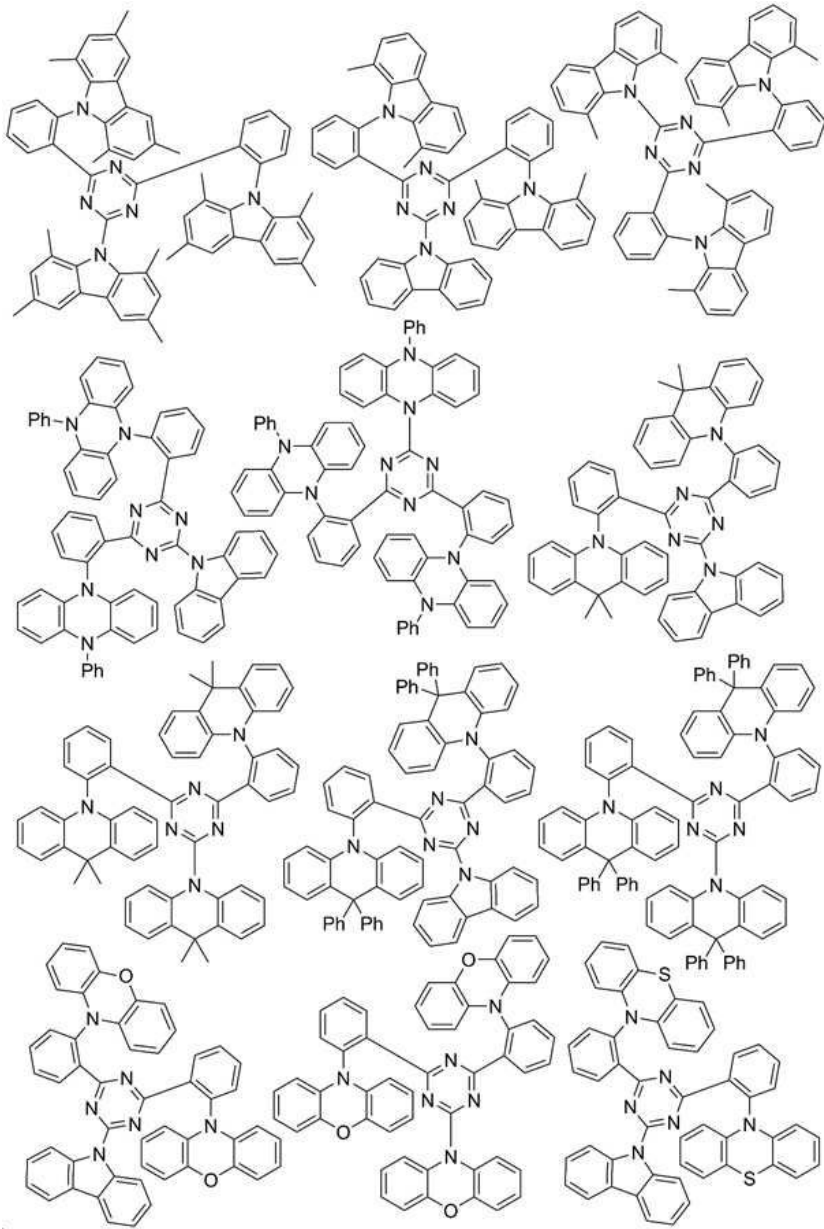
[1341]



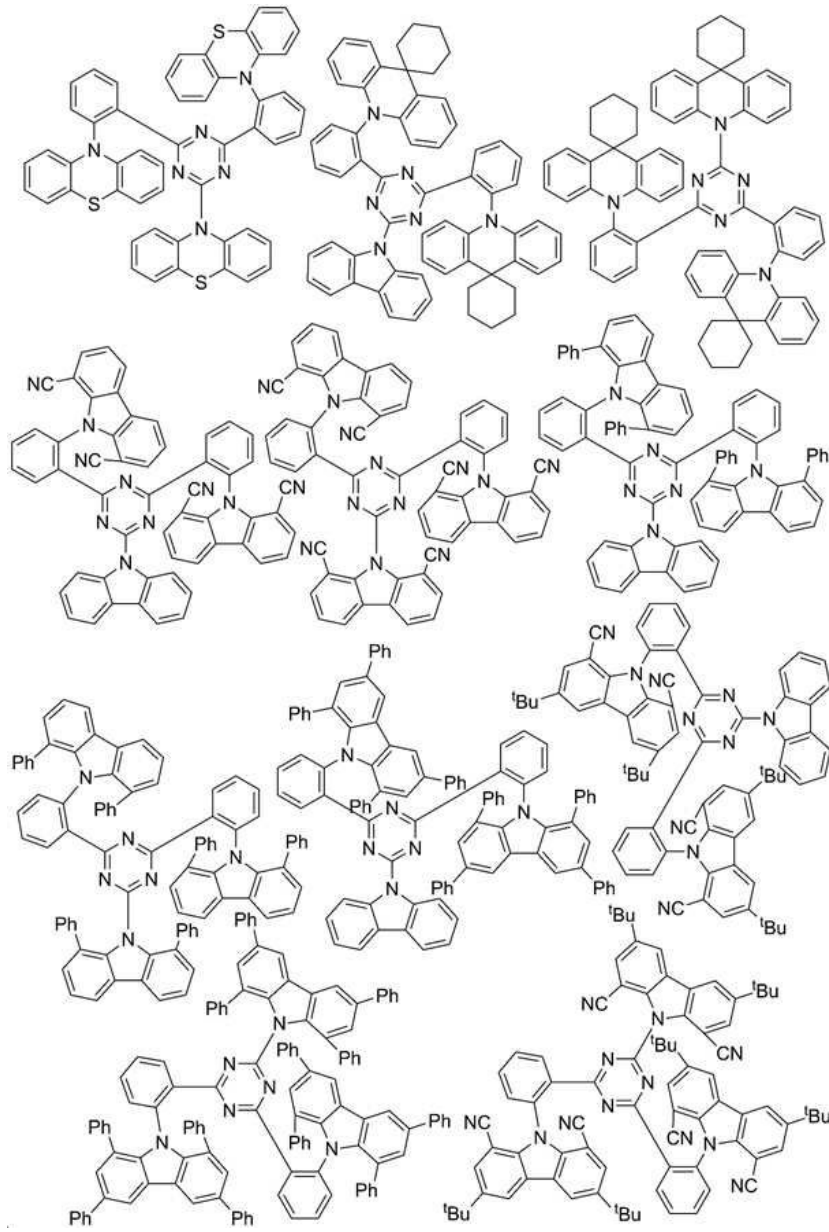
[1342]



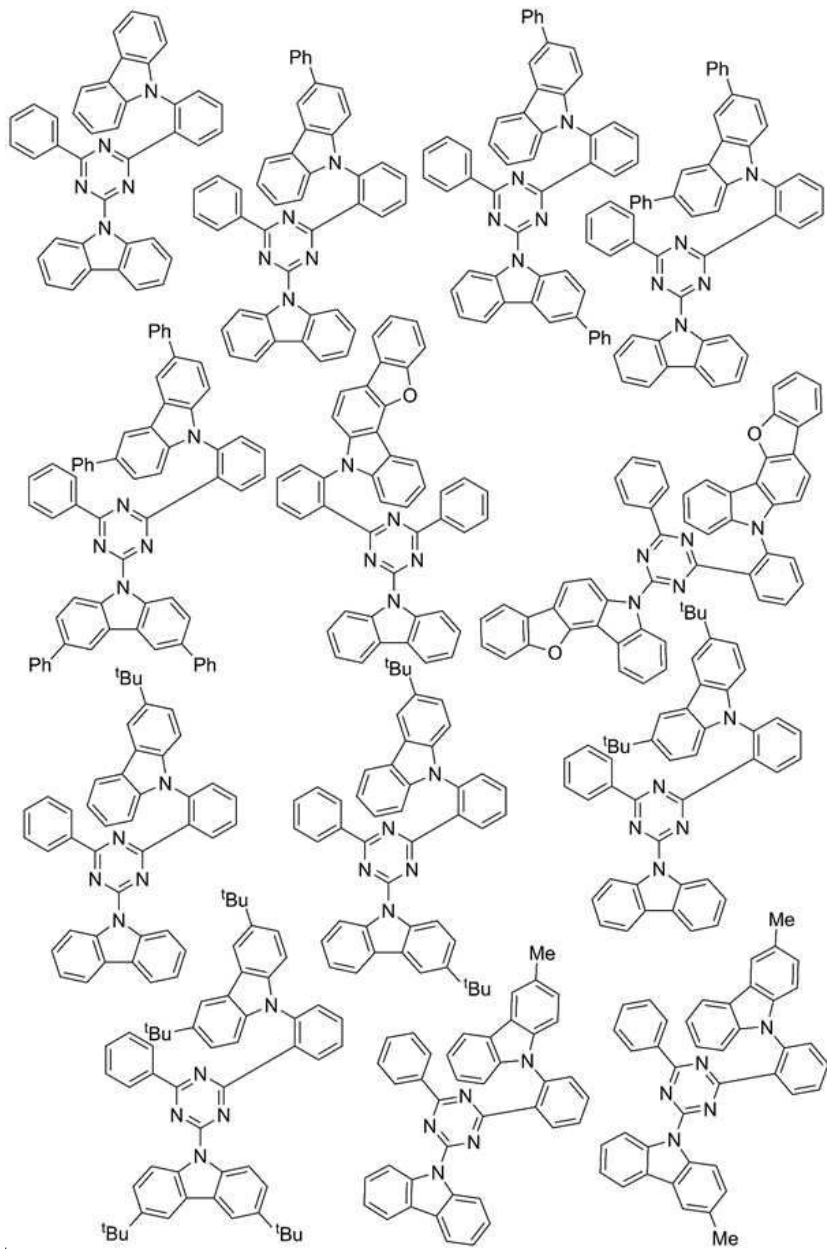
[1343]



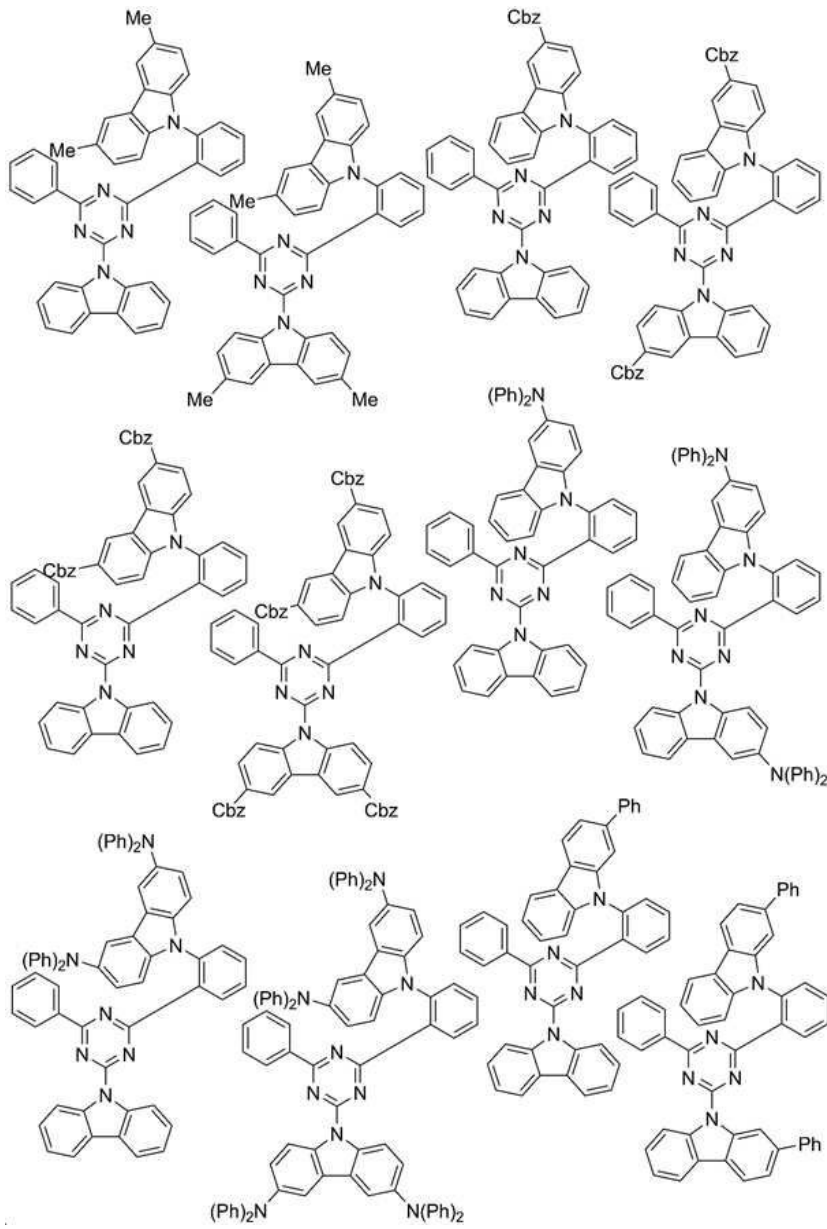
[1344]



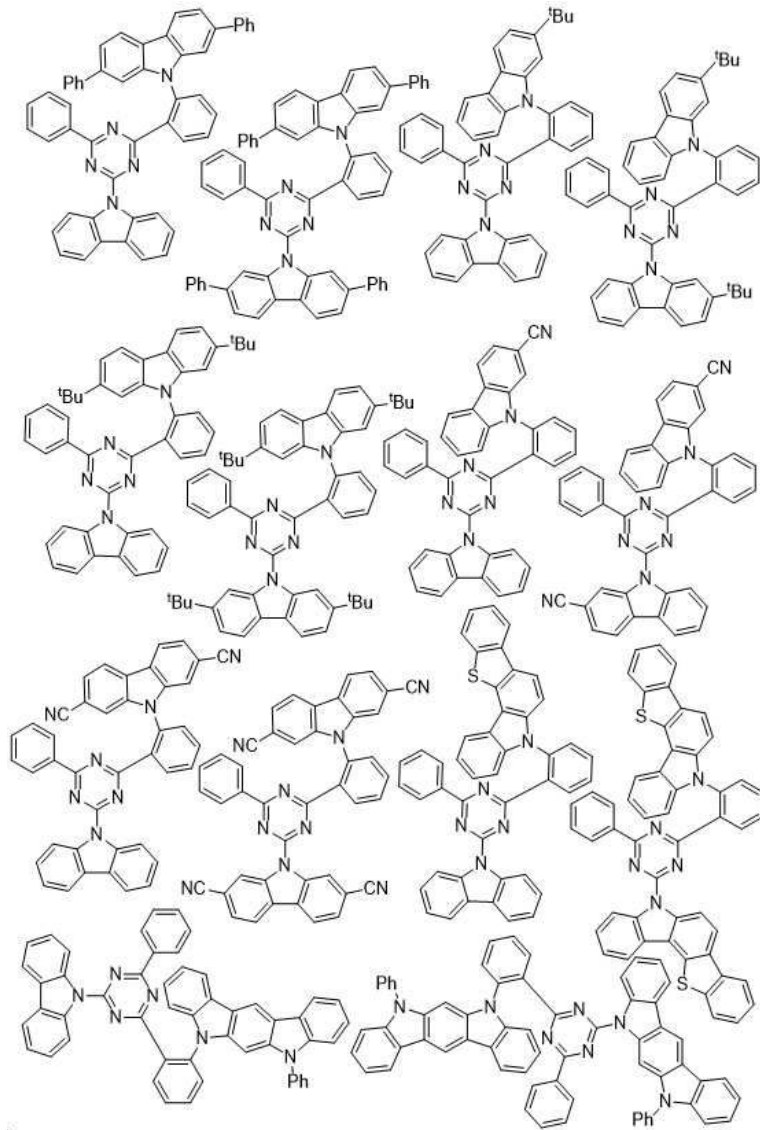
[1345]



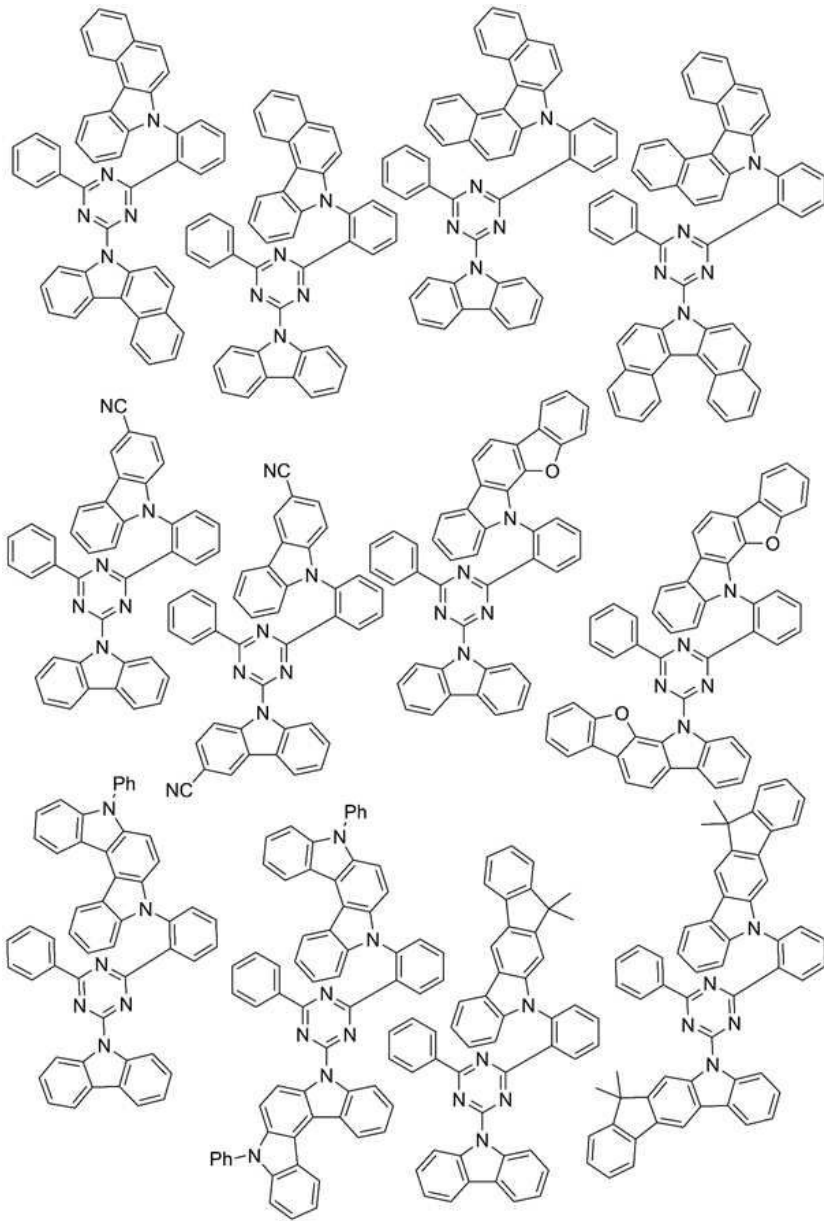
[1346]



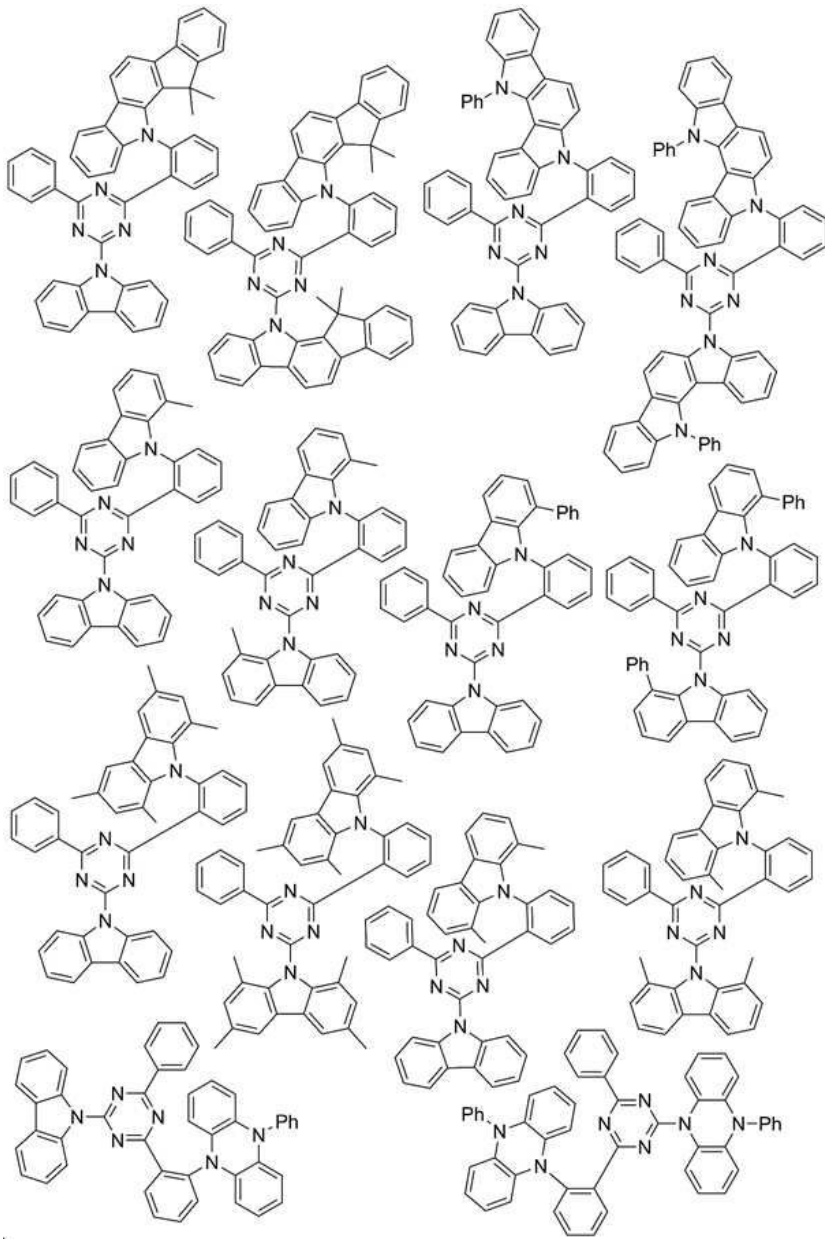
[1347]



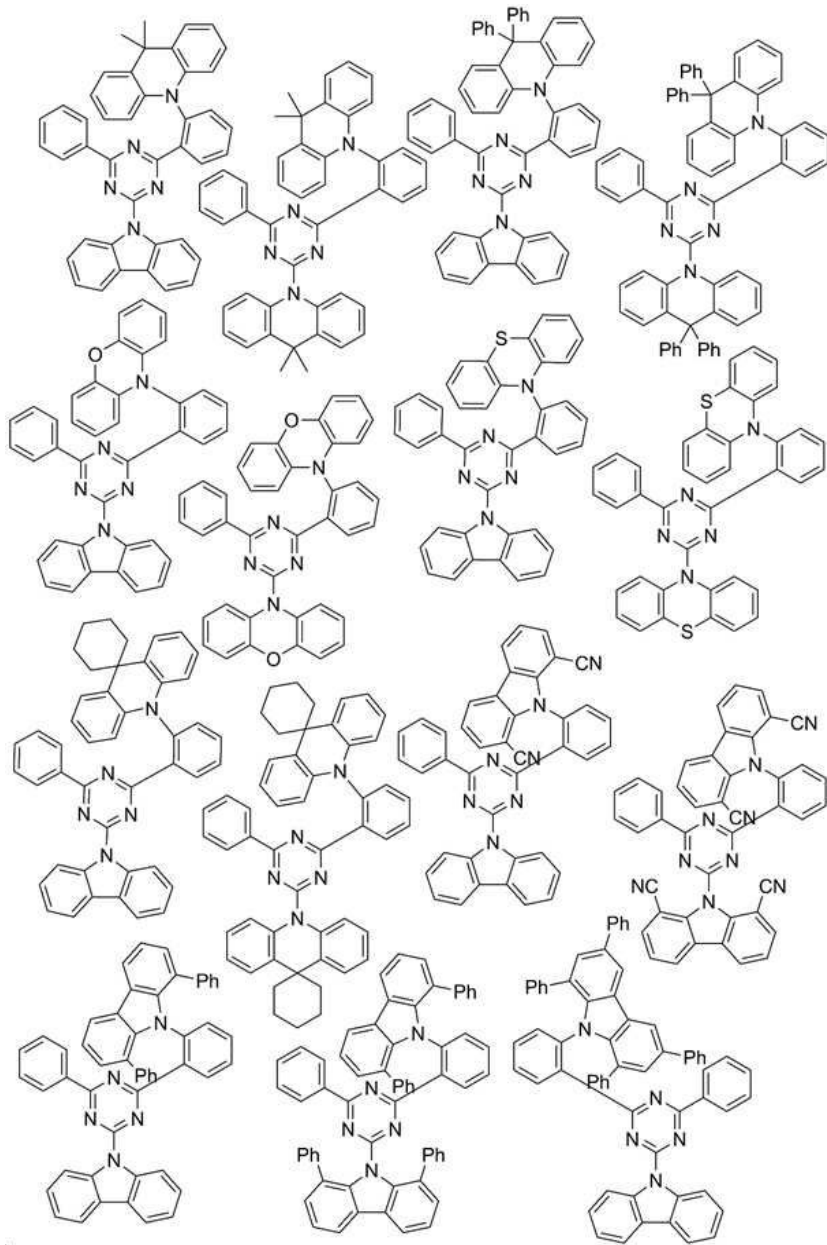
[1348]



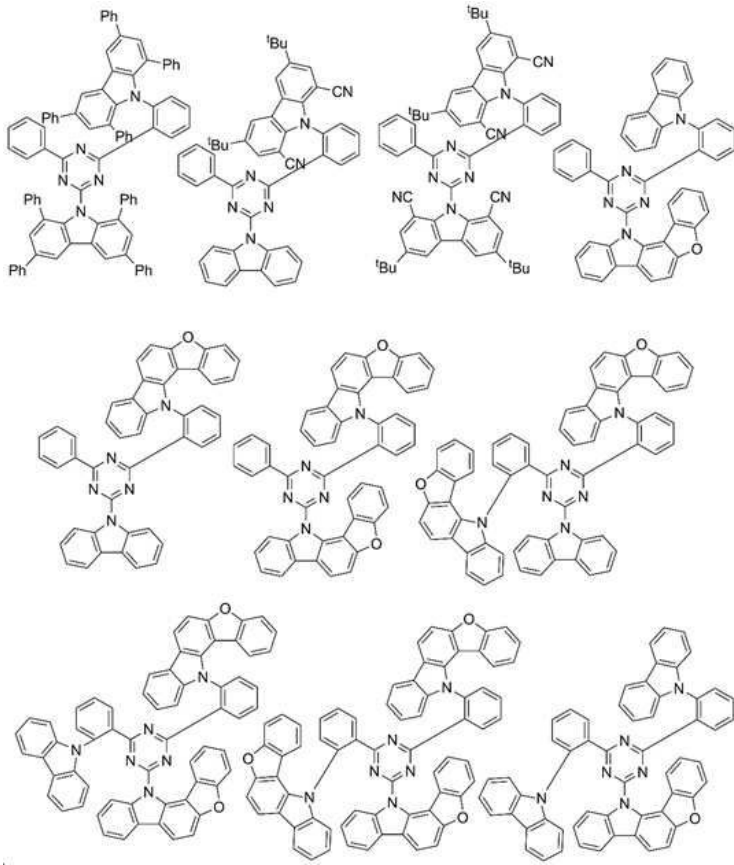
[1349]



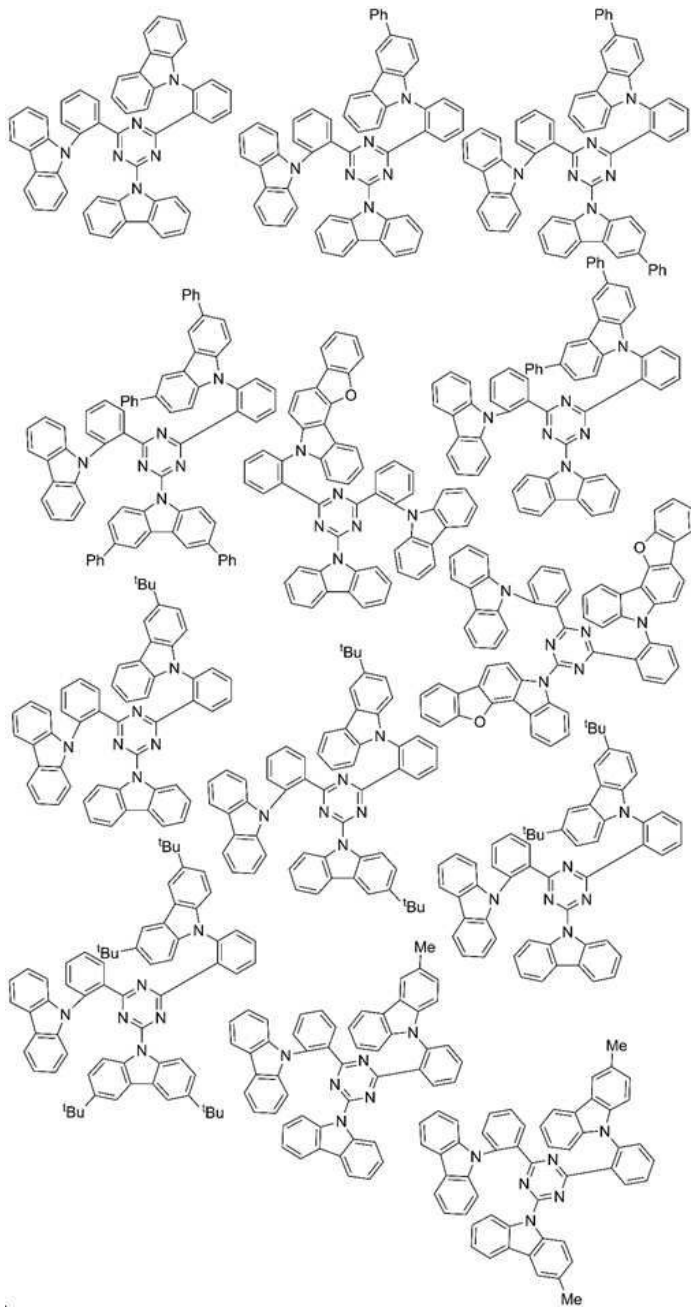
[1350]



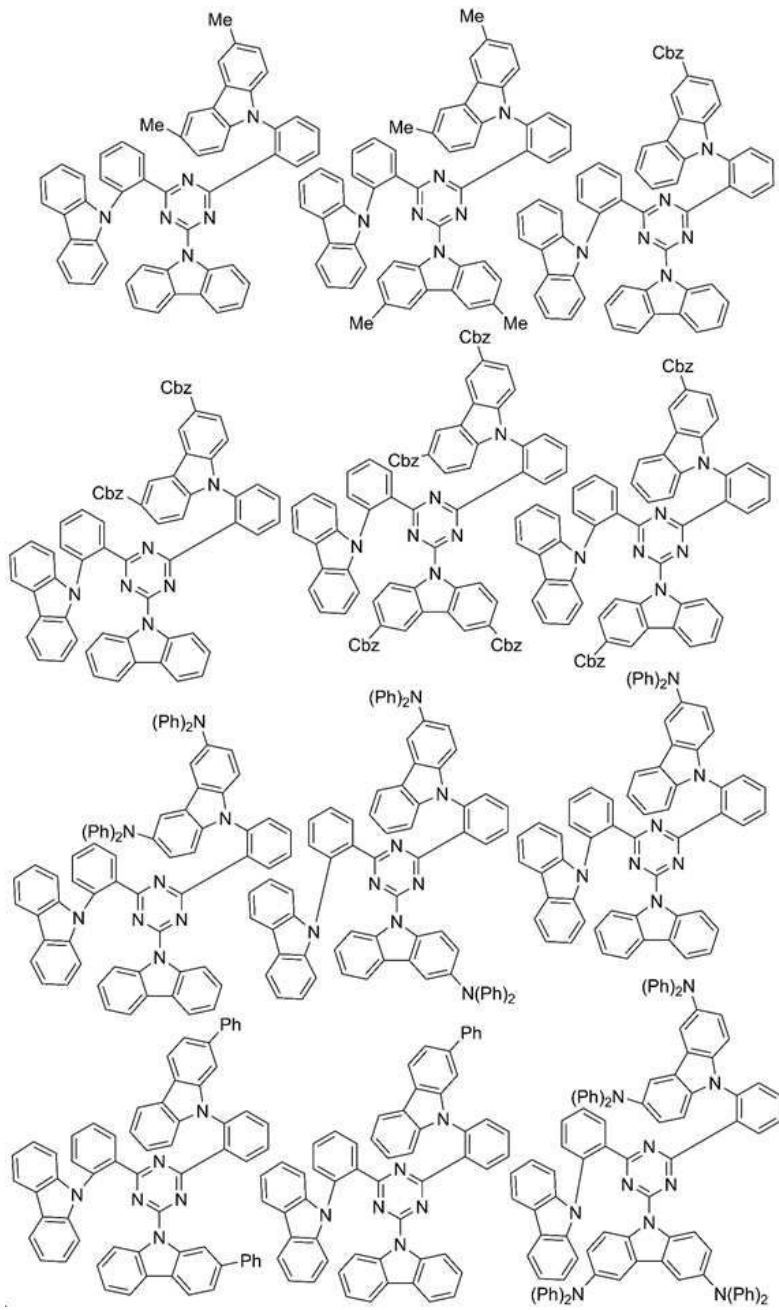
[1351]



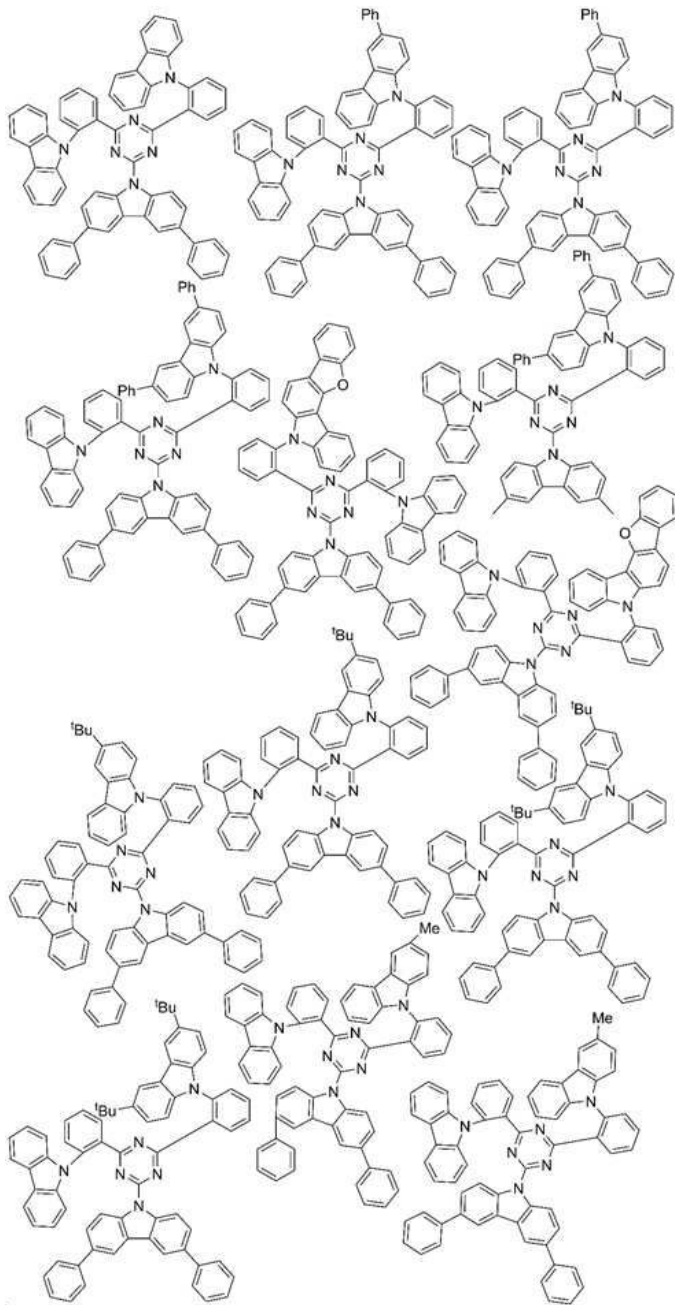
[1352]



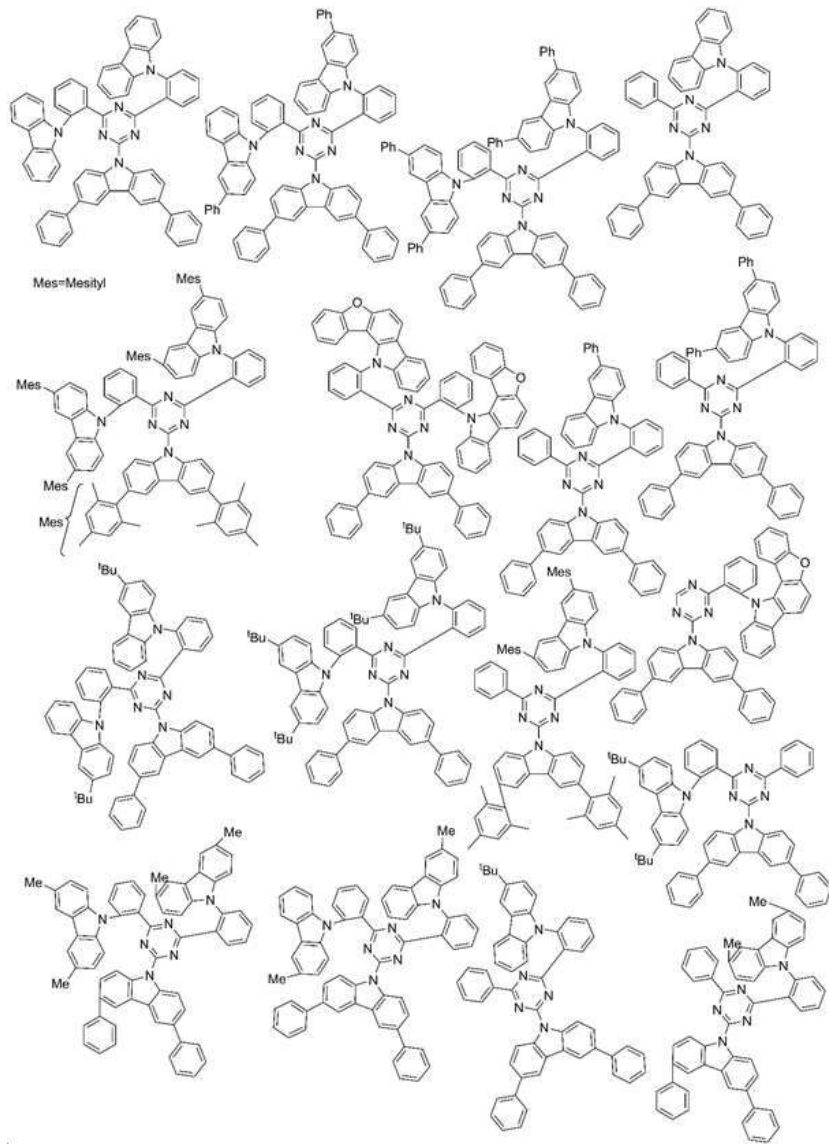
[1353]



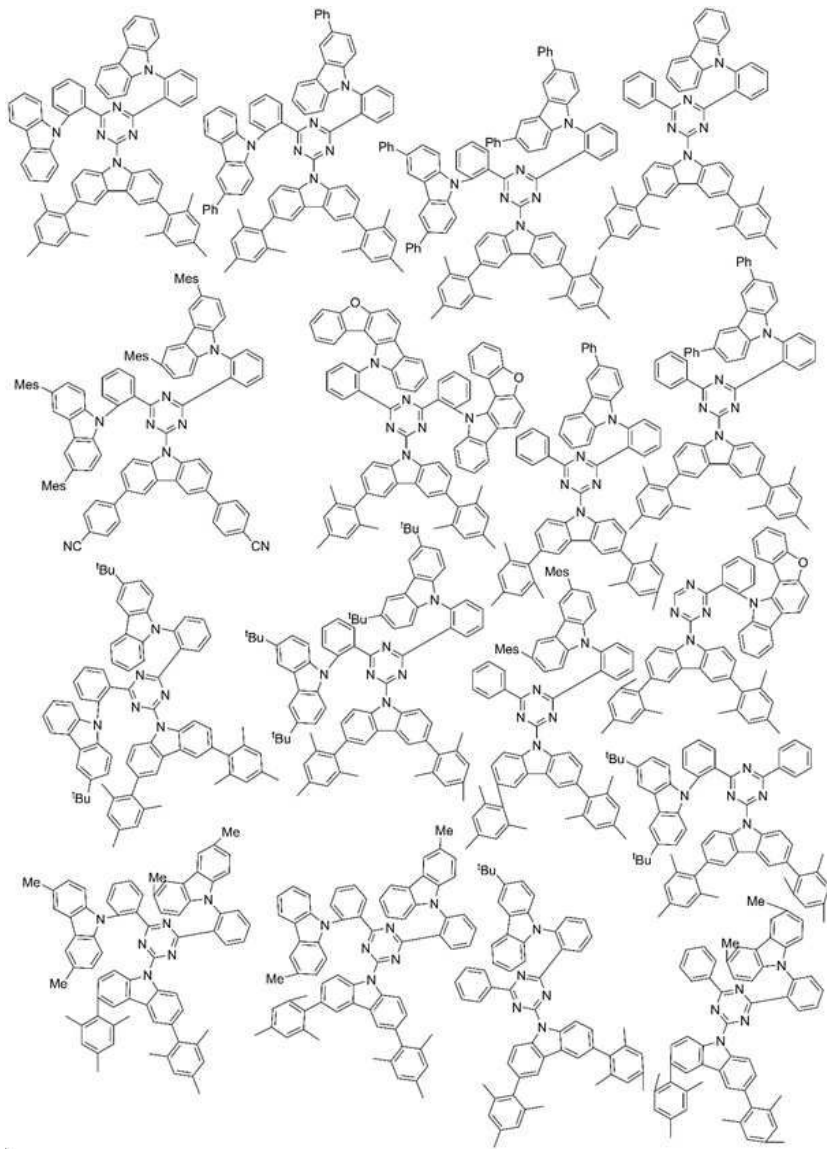
[1354]



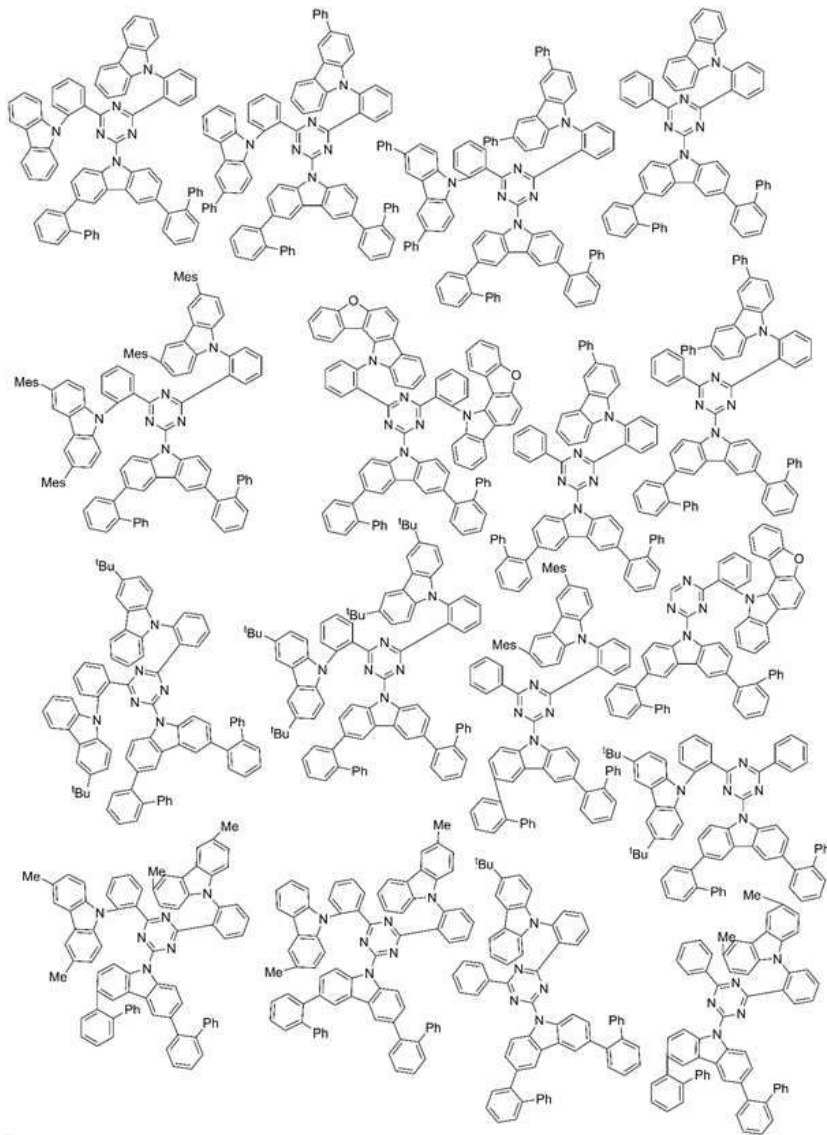
[1355]



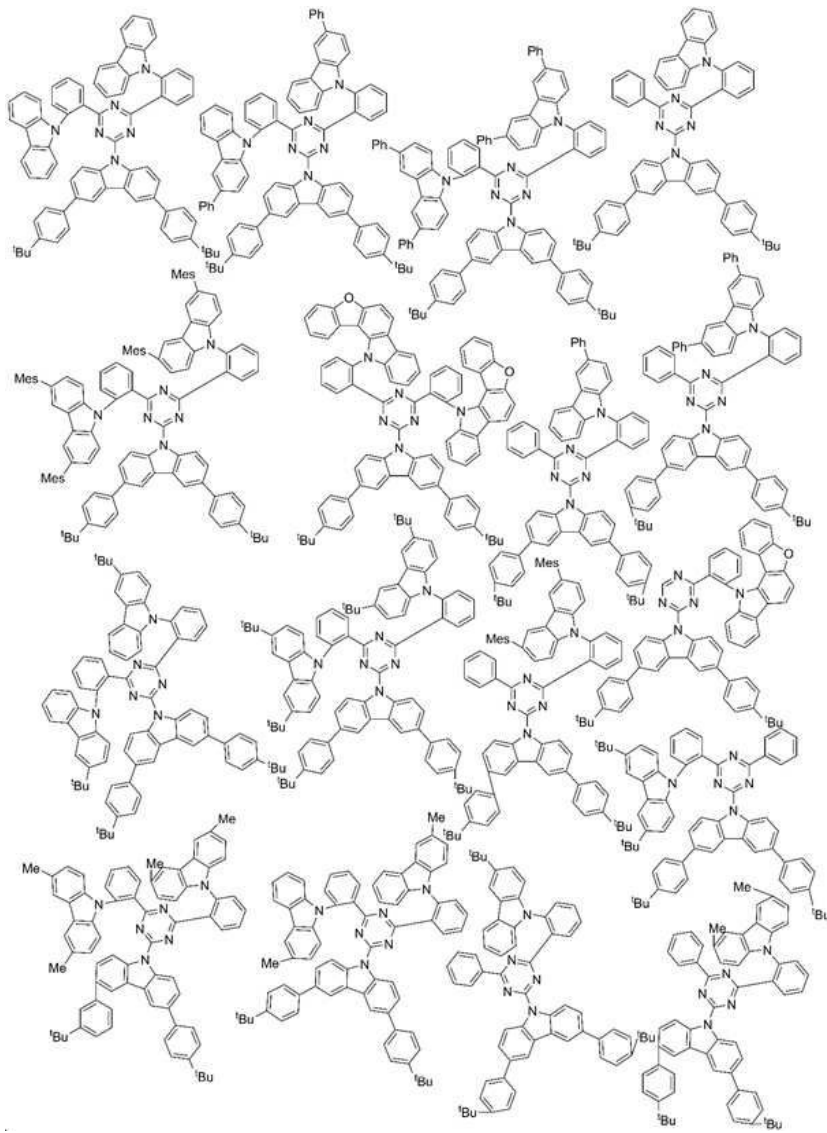
[1356]



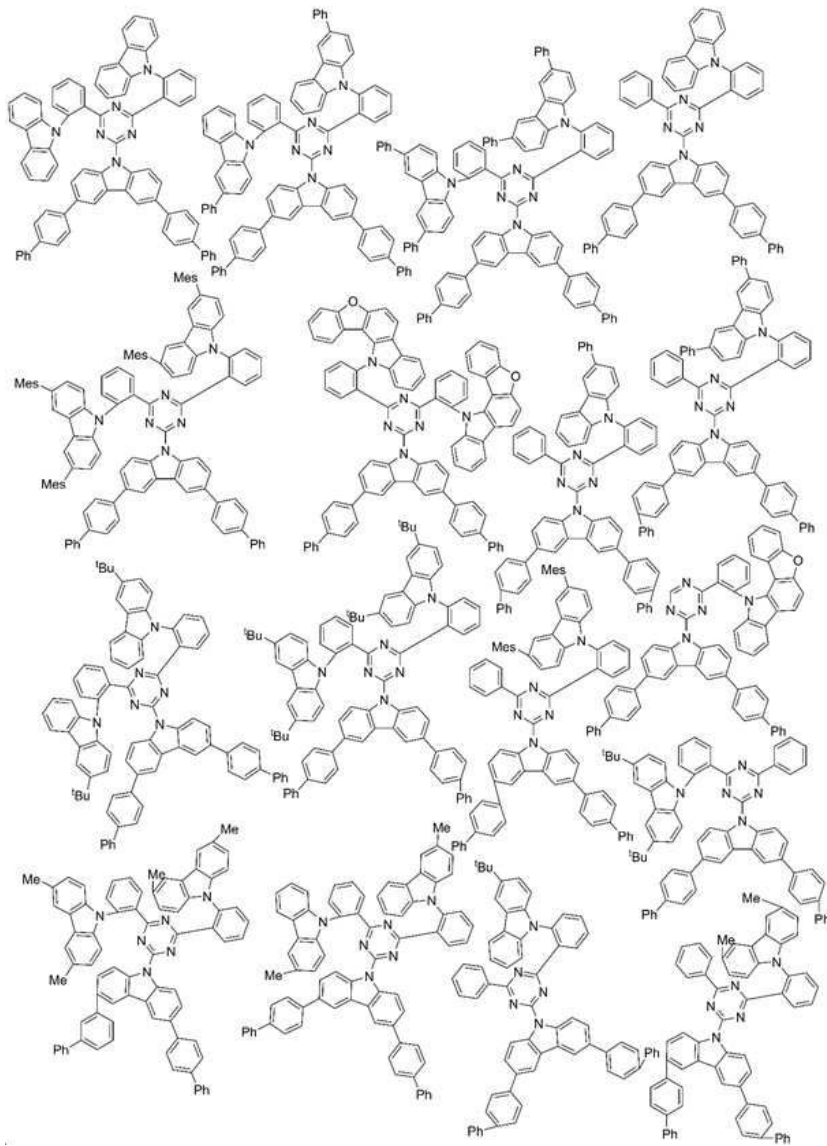
[1357]



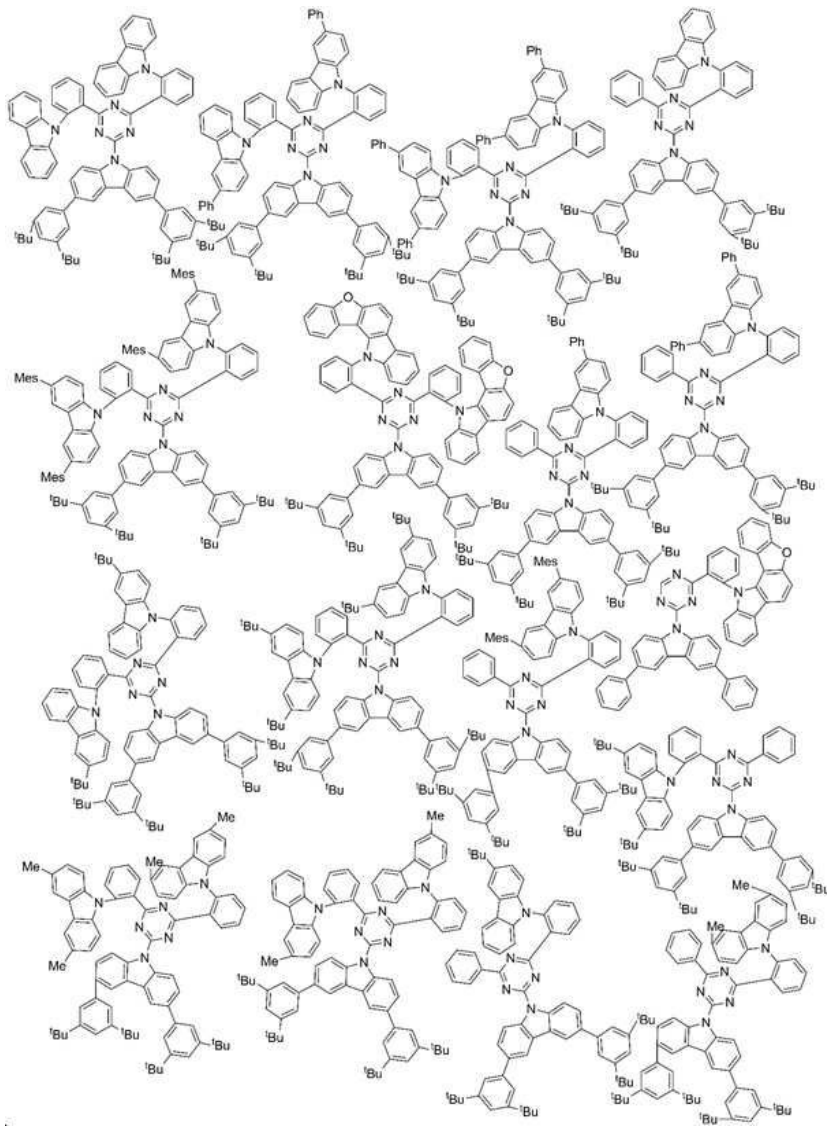
[1358]



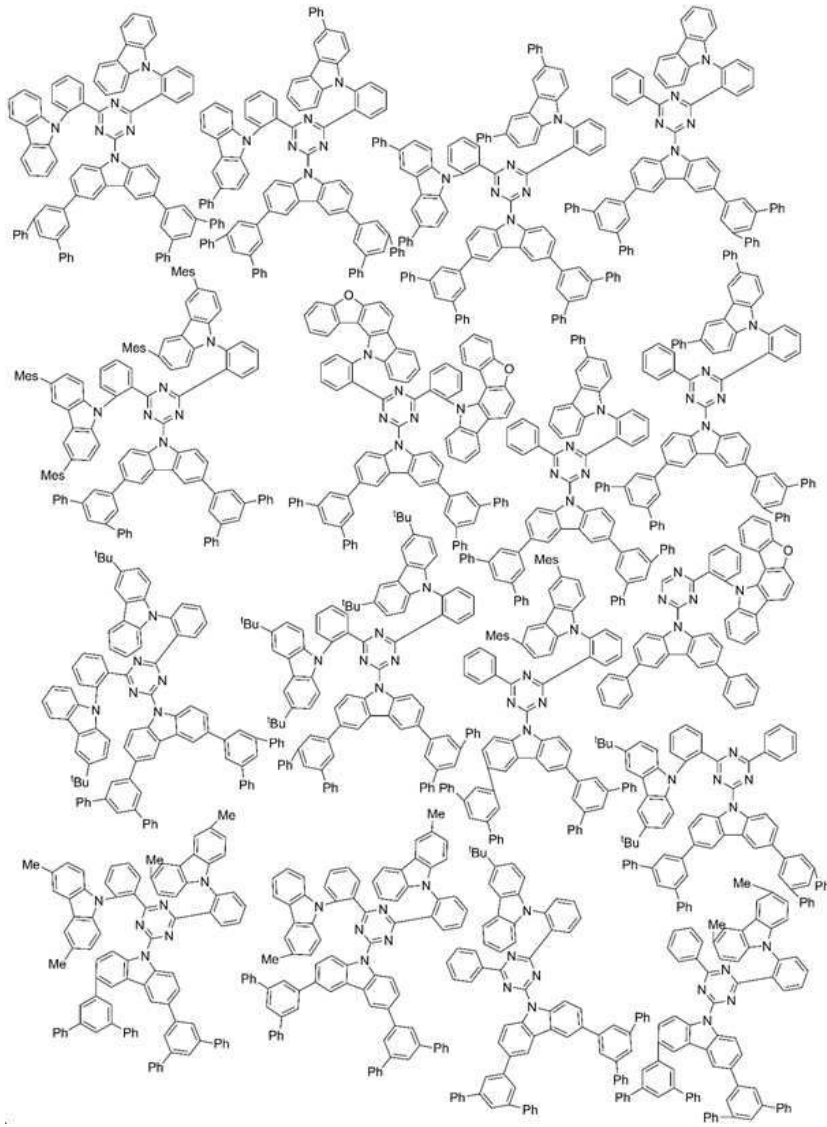
[1359]



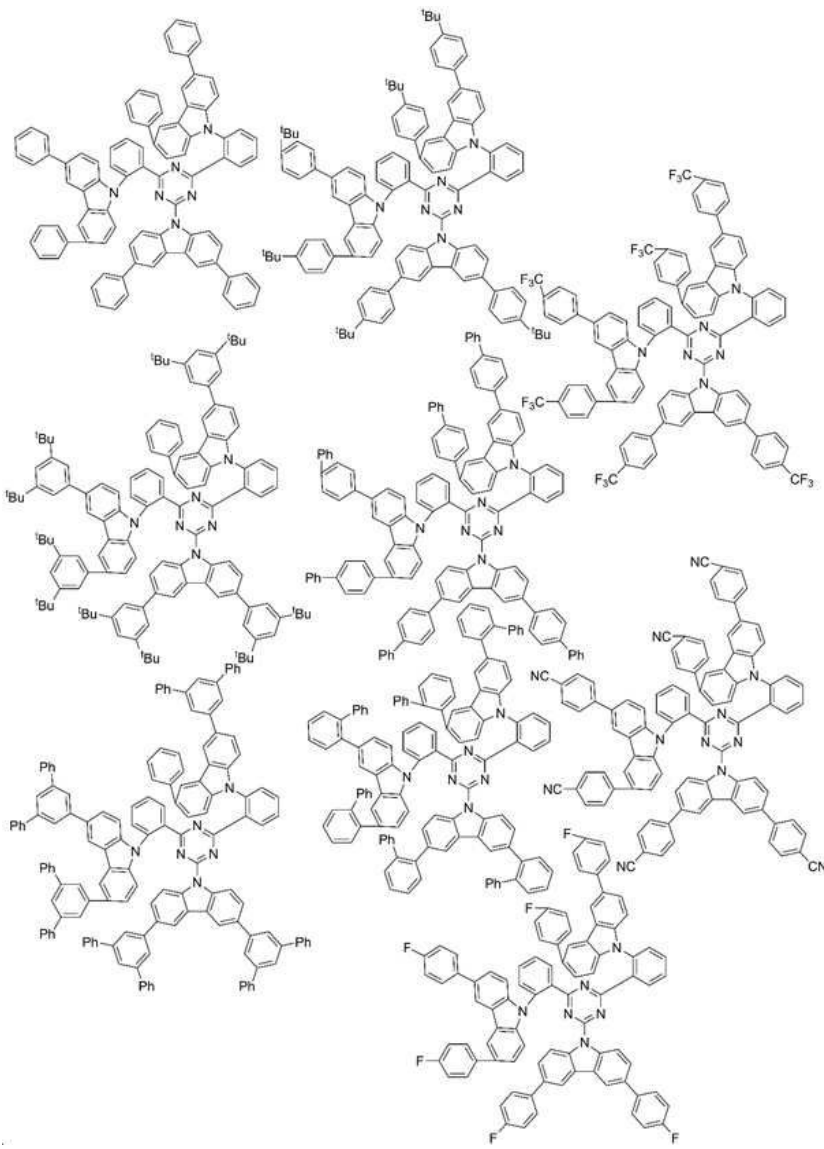
[1360]



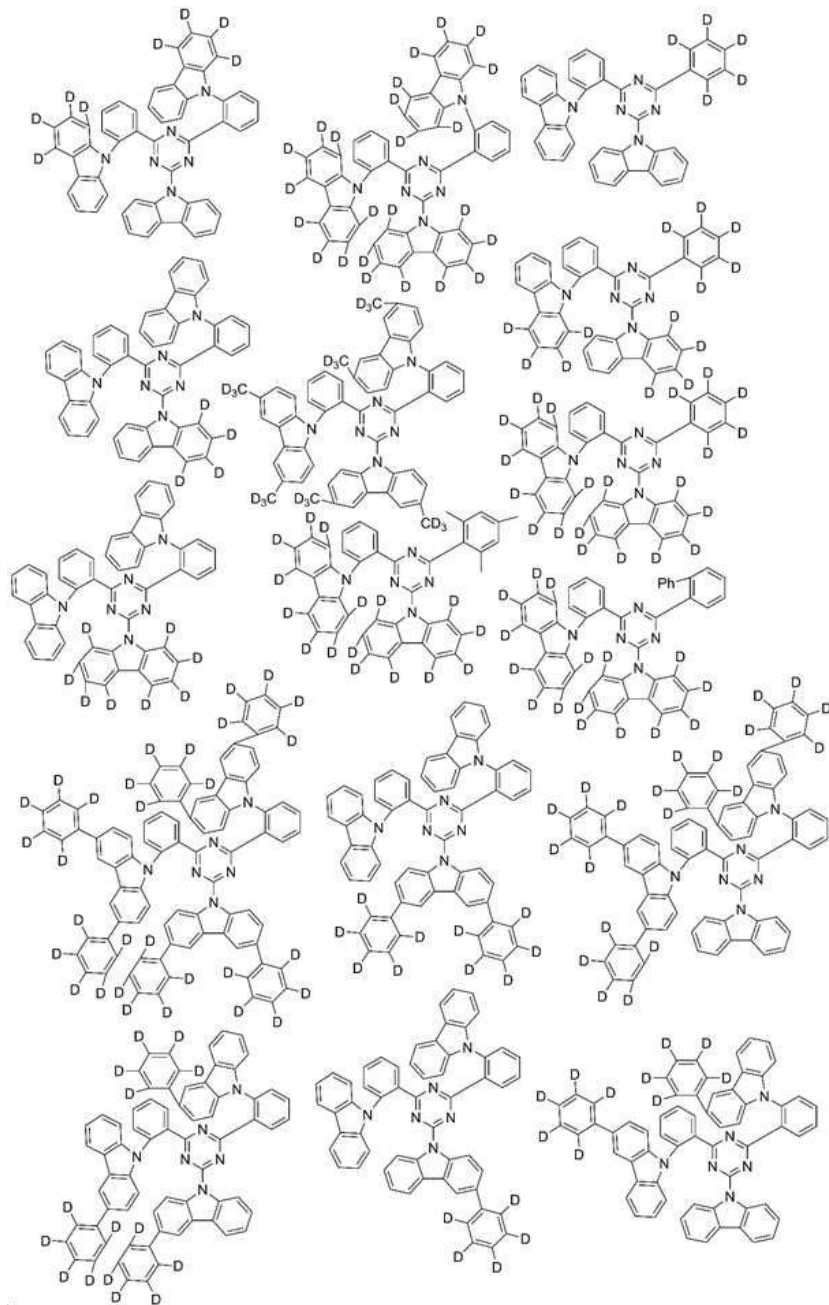
[1361]



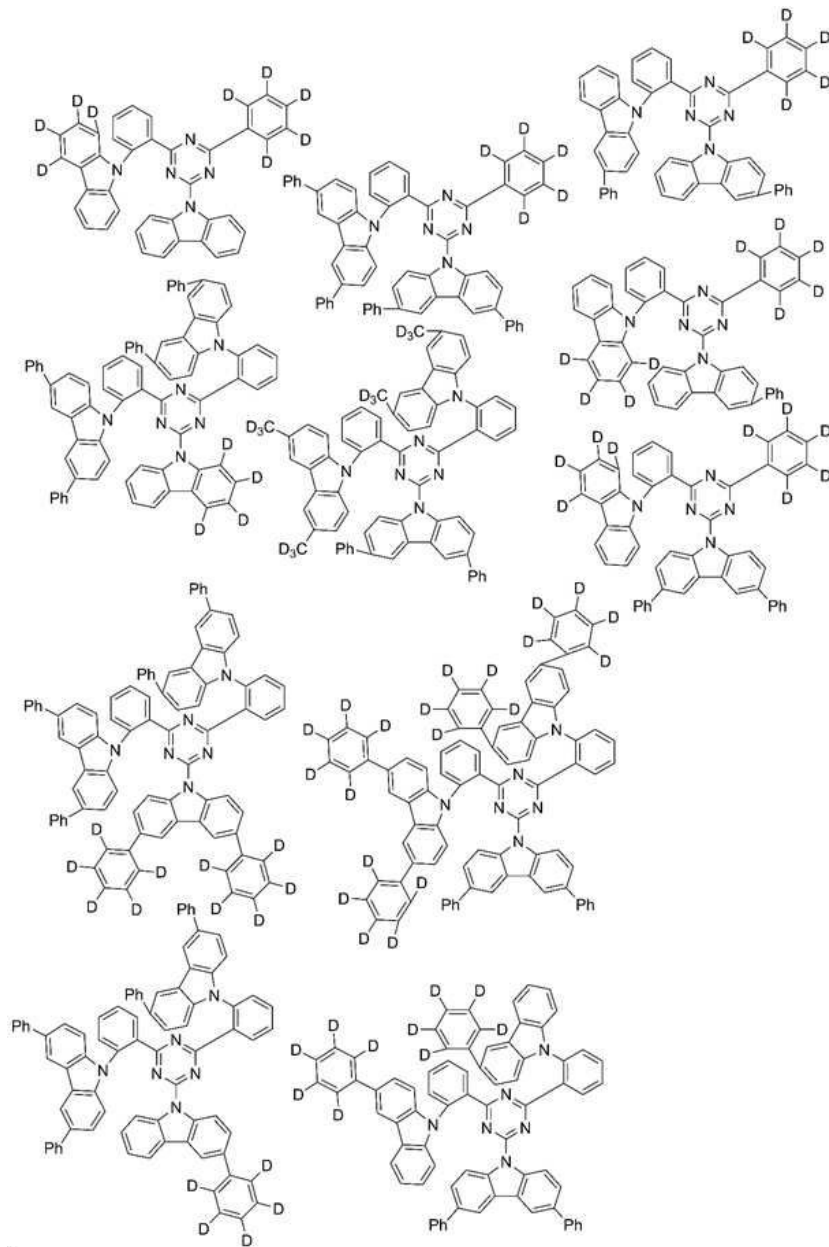
[1362]



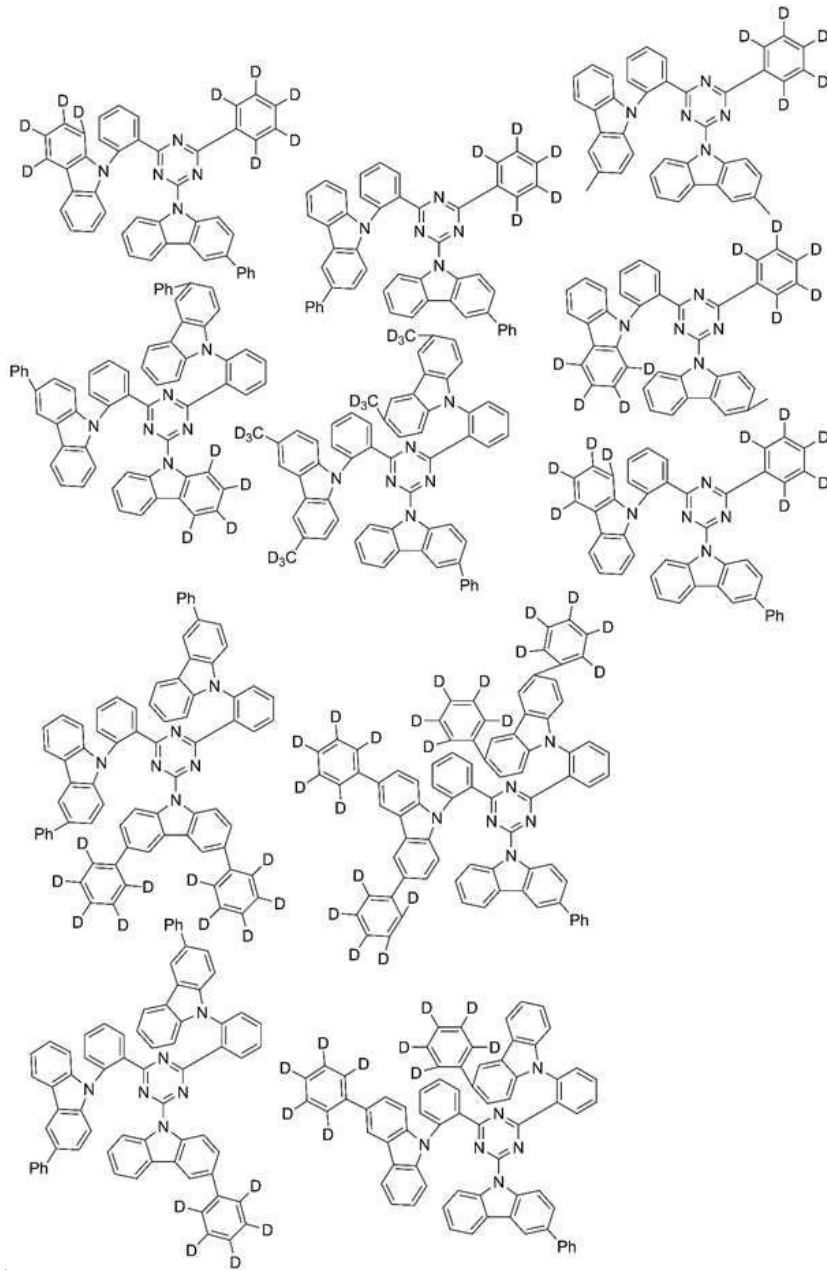
[1363]



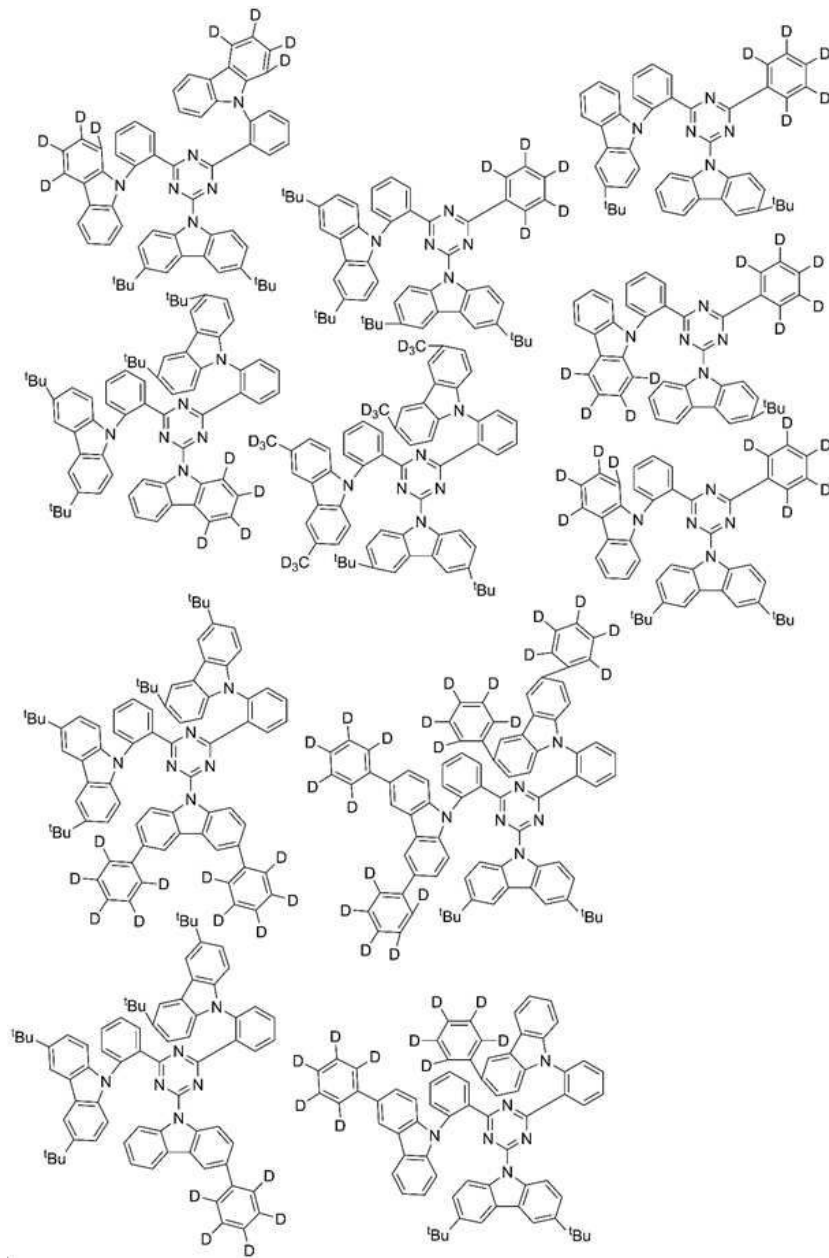
[1364]



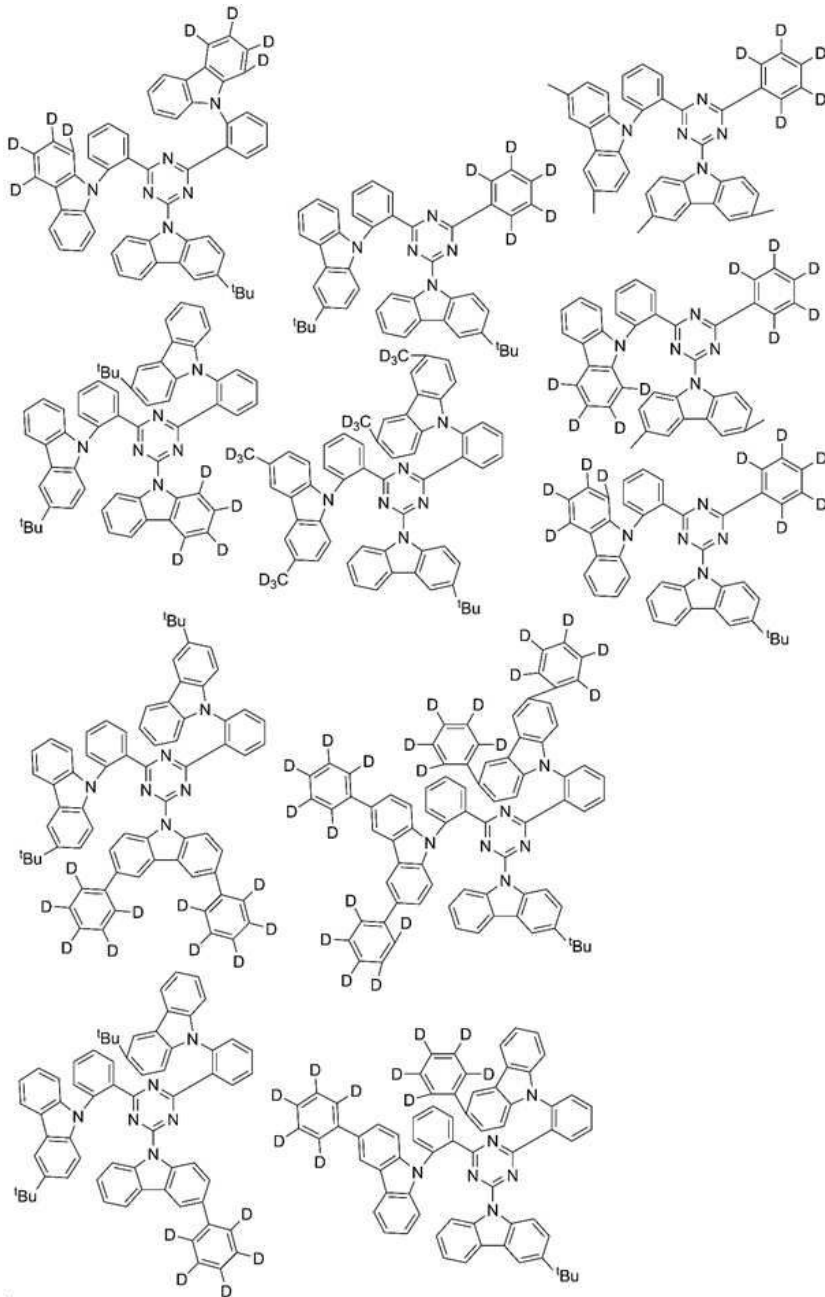
[1365]



[1366]



[1367]



[1368]

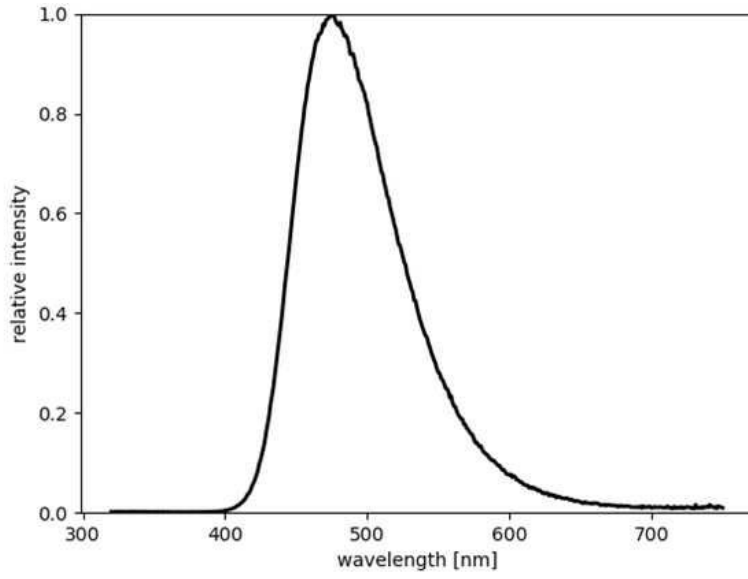
도면의 간단한 설명

[1369]

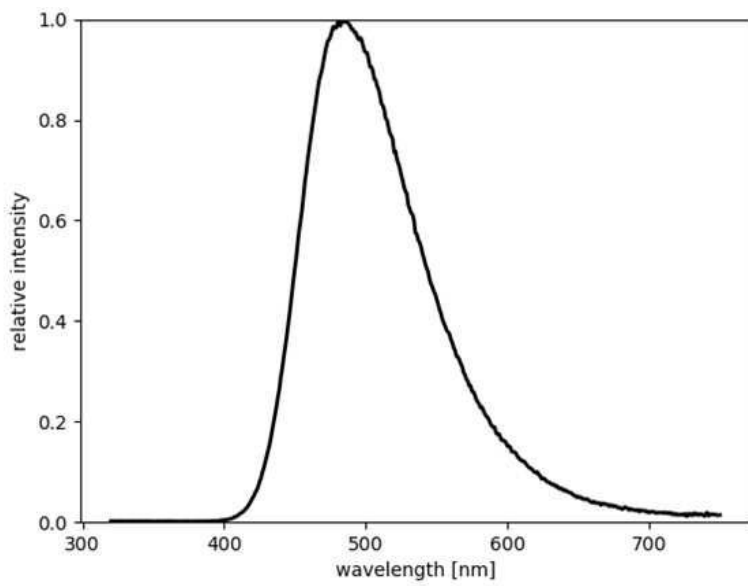
- 도 1 PMMA에서 실시예 1(10 중량%)의 발광 스펙트럼.
- 도 2 PMMA에서 실시예 2(10 중량%)의 발광 스펙트럼.
- 도 3 PMMA에서 실시예 3(10 중량%)의 발광 스펙트럼.
- 도 4 PMMA에서 실시예 4(10 중량%)의 발광 스펙트럼.
- 도 5 PMMA에서 실시예 7(10 중량%)의 발광 스펙트럼.

도면

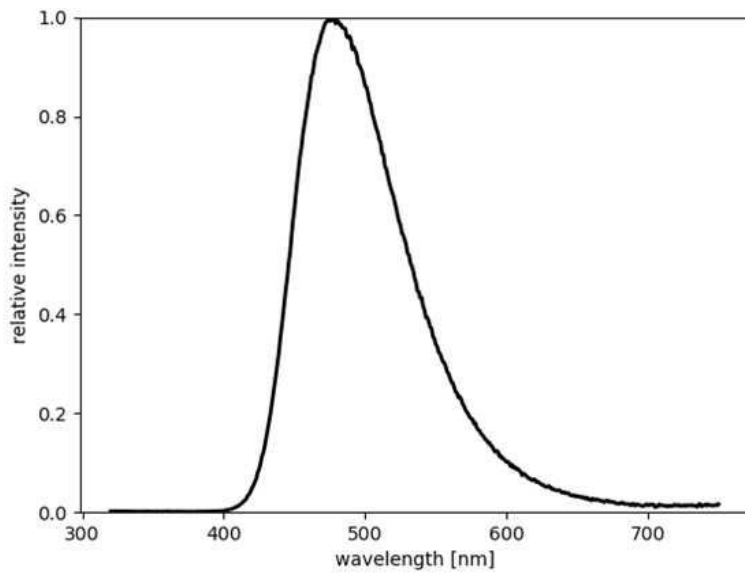
도면1



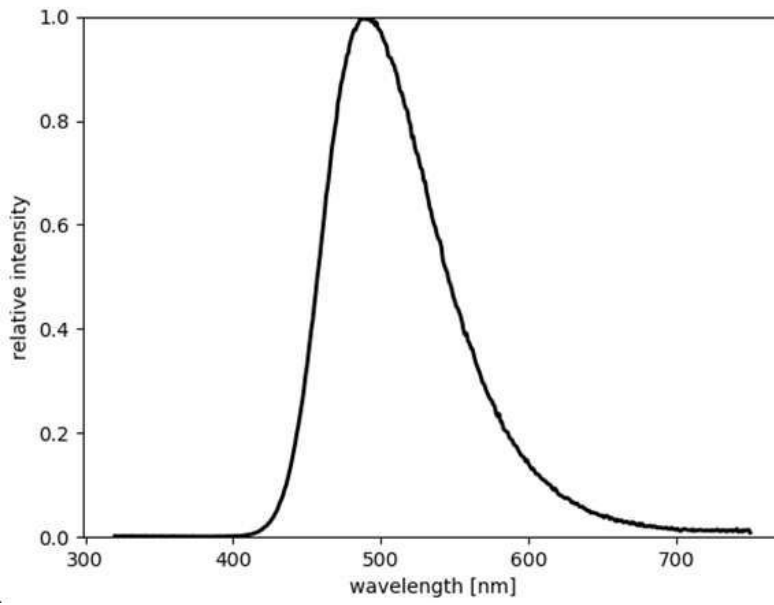
도면2



도면3



도면4



도면5

