



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년07월19일
(11) 등록번호 10-2557864
(24) 등록일자 2023년07월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 421/12 (2006.01) C07D 401/12 (2006.01)
C07D 403/12 (2006.01) C07D 405/12 (2006.01)
C07D 421/14 (2006.01) H01L 27/146 (2006.01)
H10K 30/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07D 421/12 (2013.01)
C07D 401/12 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0042427
(22) 출원일자 2016년04월06일
심사청구일자 2021년04월05일
(65) 공개번호 10-2017-0114839
(43) 공개일자 2017년10월16일
(56) 선행기술조사문헌
EP02317582 A1
KR1020160052448 A
KR1020170037390 A
EP03026722 A1

(73) 특허권자
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
(72) 발명자
시부야 히로마사
경기도 성남시 분당구 동판교로 155, 709동 502호
(삼평동, 붓들마을7단지아파트)
이마세 타츠야
일본 요코하마 츠루미쿠 스가사와초 2-7
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 23 항

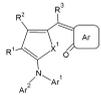
심사관 : 김영국

(54) 발명의 명칭 화합물, 및 이를 포함하는 유기 광전 소자, 이미지 센서 및 전자 장치

(57) 요약

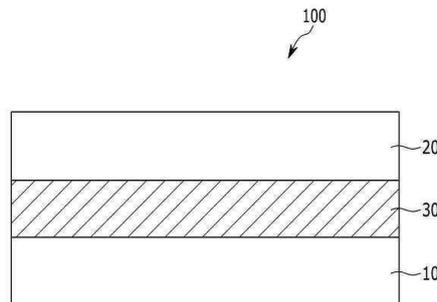
하기 화학식 1의 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전 소자, 이미지 센서 및 전자장치를 제공한다:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서, 각 치환기의 정의는 상세한 설명에 기재된 바와 같다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 403/12 (2013.01)

C07D 405/12 (2013.01)

C07D 421/14 (2013.01)

H01L 27/146 (2021.08)

H10K 30/00 (2023.02)

(72) 발명자

사쿠라이 리에

경기도 수원시 팔달구 권광로 184, 102동 1709호
(인계동)

블리아드 자비에

경기도 성남시 분당구 정자일로 177 (정자동)

최혜성

서울특별시 도봉구 도봉로136길 28, 508동 1604호
(창동, 북한산 아이파크)

야기 타다오

경기도 화성시 동탄문화센터로 39, 318동 701호 (반송동, 시범다운마을포스코더샵아파트)

윤성영

경기도 수원시 권선구 권중로 82, 706동 602호 (권선동, 신우아파트)

이계황

경기도 성남시 분당구 내정로 185, 213동 505호 (수내동, 양지마을청구아파트)

이광희

경기도 화성시 동탄대로시범길 20, 1419동 902호 (청계동, 동탄역 시범한화 꿈에그린 프레스티지)

임동석

경기도 화성시 동탄반석로 277, 121동 802호 (석우동, 예당마을우미린제일풍경채아파트)

최용석

경기도 수원시 영통구 태장로82번길 32, 110동 806호 (망포동, 동수원자이 아파트)

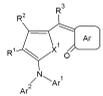
명세서

청구범위

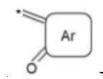
청구항 1

하기 화학식 1로 표현되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,



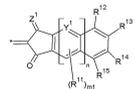
은 하기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X¹은 Se 또는 Te이고,

R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기에서 선택되고, 단 Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피롤릴(pyrrolyl)기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴(prazoly)기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴(imidazolyl)기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴(oxazolyl)기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴(isoxazolyl)기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴(thiazolyl)기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴(isothiazolyl)기, 치환 또는 비치환된 피리디닐(pyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐(pyridazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐(pyrimidinyl)기, 치환 또는 비치환된 피라지닐(pyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 인돌릴(indolyl)기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐(quinoliny)기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐(isoquinoliny)기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐(naphthyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐(cinnoliny)기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐(quinazoliny)기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐(phthalazinyl)기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐(benzotriazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐(pyridopyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐(pyridopyrimidinyl)기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐(pyridopyridazinyl)기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N) 원자를 포함한다:

[화학식 5-1]



상기 화학식 5-1에서,

Z¹은 O 또는 CRᵇRᶜ 이고 (여기에서 Rᵇ 및 Rᶜ는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, Rᵇ 및 Rᶜ 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

Y¹은 N 및 CRᵈ에서 선택되고(여기에서 Rᵈ는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴ 및 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및

이들의 조합에서 선택되거나 또는 R¹²과 R¹³ 및 R¹⁴과 R¹⁵는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

m1은 0 또는 1이고,

n은 0 또는 1이고,

[화학식 5-2]



상기 화학식 5-2에서,

Y²는 O, S, Se, Te 및 C(R^e)(CN)(여기에서 R^e는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

R¹⁶ 및 R¹⁷는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN) 및 이들의 조합에서 선택되고,

[화학식 5-3]



상기 화학식 5-3에서,

R¹⁸ 내지 R²⁰은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택된다.

청구항 2

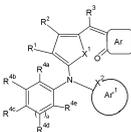
삭제

청구항 3

제1항에서,

상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 2로 표현되는 것인 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,



은 상기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X¹은 Se 또는 Te이고,

R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로겐, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a는 0 또는 1의 정수이고,

X^2 는 질소(N)이고,

Ar^1 은 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함한다.

청구항 4

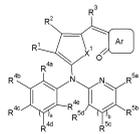
삭제

청구항 5

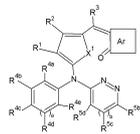
제1항에서,

상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 3-1 내지 3-6중 어느 하나로 표현되는 것인 화합물:

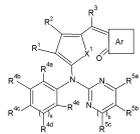
[화학식 3-1]



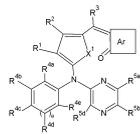
[화학식 3-2]



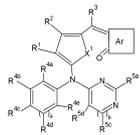
[화학식 3-3]



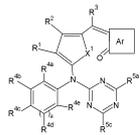
[화학식 3-4]



[화학식 3-5]



[화학식 3-6]



상기 화학식 3-1 내지 3-6에서,



은 상기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

청구항 6

삭제

청구항 7

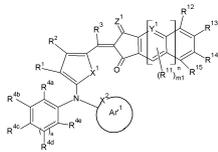
삭제

청구항 8

제1항에서,

상기 화합물은 하기 화학식 6-1 내지 6-3중 어느 하나로 표현되는 것인 화합물:

[화학식 6-1]



상기 화학식 6-1에서,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

Z^1 은 0 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

Y^1 은 N 및 CR^d 에서 선택되고(여기에서 R^d 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R^{12} 과 R^{13} 및 R^{14} 과 R^{15} 는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

m_1 은 0 또는 1이고,

n 은 0 또는 1이고,

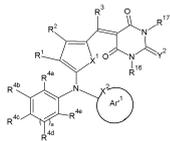
R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a는 0 또는 1의 정수이고,

X^2 는 질소(N)이고,

Ar¹은 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하고,

[화학식 6-2]



상기 화학식 6-2에서,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

R^1 , R^2 , R^3 , R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

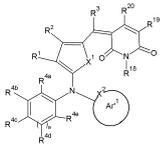
a는 0 또는 1의 정수이고,

X^2 는 질소(N)이고,

Ar¹은 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적

어도 하나의 질소(N)를 포함하고,

[화학식 6-3]



상기 화학식 6-3에서,

X¹은 Se 또는 Te이고,

R¹, R², R³, R¹⁸, R¹⁹ 및 R²⁰은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a는 0 또는 1의 정수이고,

X²는 질소(N)이고,

Ar¹은 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함한다.

청구항 9

제1항에서,

상기 화합물은 박막 상태에서 510 nm 이상 560 nm 미만에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가지는 화합물.

청구항 10

제1항에서,

상기 화합물은 박막 상태에서 520 nm 내지 555 nm에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가지는 화합물.

청구항 11

제1항에서,

상기 화합물은 박막 상태에서 50 nm 내지 110 nm의 반치폭을 가지는 흡광 곡선을 나타내는 화합물.

청구항 12

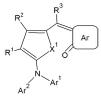
서로 마주하는 제1 전극과 제2 전극, 그리고

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 위치하는 활성층

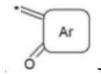
을 포함하고,

상기 활성층은 하기 화학식 1로 표현되는 화합물을 포함하는 유기 광전 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,



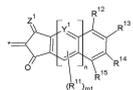
은 하기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X¹은 Se 또는 Te이고,

R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기에서 선택되고, 단 Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함한다:

[화학식 5-1]



상기 화학식 5-1에서,

Z¹은 O 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

Y¹은 N 및 CR^d에서 선택되고(여기에서 R^d는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴ 및 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R¹²과 R¹³ 및 R¹⁴과 R¹⁵는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

m1은 0 또는 1이고,

n은 0 또는 1이고,

[화학식 5-2]



상기 화학식 5-2에서,

Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN) 및 이들의 조합에서 선택되고,

[화학식 5-3]



상기 화학식 5-3에서,

R^{18} 내지 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택된다.

청구항 13

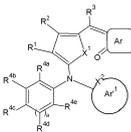
삭제

청구항 14

제12항에서,

상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 2로 표현되는 유기 광전 소자:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,



은 상기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a는 0 또는 1의 정수이고,

X^2 는 질소(N)이고,

Ar¹은 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기에서 선택되는 작용기이고, 상기 작용기는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함한다.

청구항 15

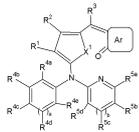
삭제

청구항 16

제12항에서,

상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 3으로 표현되는 유기 광전 소자:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,



은 상기 화학식 5-1 내지 5-3중 어느 하나로 표현되는 고리기이고,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

청구항 17

삭제

청구항 18

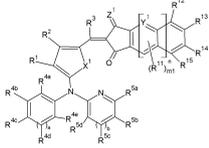
삭제

청구항 19

제12항에서,

상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 6-1 내지 6-3중 어느 하나로 표현되는 화합물인 유기 광전 소자:

[화학식 6-1]



상기 화학식 6-1에서,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

Z^1 은 O 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

Y^1 은 N 및 CR^d 에서 선택되고(여기에서 R^d 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R^{12} 과 R^{13} 및 R^{14} 과 R^{15} 는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

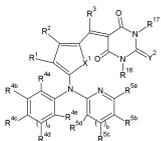
$m1$ 은 0 또는 1이고,

n 은 0 또는 1이고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a 와 b 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

[화학식 6-2]



상기 화학식 6-2에서,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

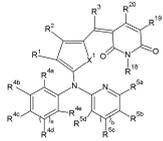
Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

R^1, R^2, R^3, R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

[화학식 6-3]



상기 화학식 6-3에서,

X^1 은 Se 또는 Te이고,

$R^1, R^2, R^3, R^{18}, R^{19}$ 및 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

청구항 20

제12항에서,

상기 활성층은 510 nm 이상 560 nm 미만에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가지는 유기 광전 소자.

청구항 21

제12항에서,

상기 활성층은 520 nm 내지 555 nm에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가지는 유기 광전 소자.

청구항 22

제12항에서,

상기 활성층은 50 nm 내지 110 nm의 반치폭을 가지는 흡광 곡선을 나타내는 유기 광전 소자.

청구항 23

제12항에서,

상기 활성층은 상기 화학식 1로 표현되는 화합물과 C60을 0.9: 1 내지 1.1: 1의 부피비로 포함하고 $5.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 이상의 흡수 계수를 가지는 유기 광전 소자.

청구항 24

제12항에서,

상기 활성층은 화학식 1로 표현되는 화합물과 C60을 0.9: 1 내지 1.1: 1의 부피비로 포함하고 $5.8 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 내지 $10 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 의 흡수 계수를 가지는 유기 광전 소자.

청구항 25

제12항, 제14항, 제16항 및 제19항 내지 제24항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전 소자를 포함하는 이미지 센서.

청구항 26

제25항에서,

청색 파장 영역의 광을 감지하는 복수의 제1 광 감지 소자 및 적색 파장 영역의 광을 감지하는 복수의 제2 광 감지 소자가 집적되어 있는 반도체 기판, 그리고

상기 반도체 기판의 상부에 위치하고 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 감지하는 상기 유기 광전 소자를 포함하는 이미지 센서.

청구항 27

제26항에서,

상기 반도체 기판과 상기 유기 광전 소자의 사이에 위치하고 청색 파장 영역의 광을 선택적으로 투과하는 청색 필터와 적색 파장 영역의 광을 선택적으로 투과하는 적색 필터를 포함하는 색 필터 층을 더 포함하는 이미지 센서.

청구항 28

제26항에서,

상기 제1 광 감지 소자와 상기 제2 광 감지 소자는 반도체 기판에서 수직 방향으로 적층되어 있는 이미지 센서.

청구항 29

제25항에서,

녹색 파장 영역의 광을 감지하는 녹색 광전 소자, 청색 파장 영역의 광을 감지하는 청색 광전 소자 및 적색 파장 영역의 광을 감지하는 적색 광전 소자가 적층되어 있고, 상기 녹색 광전 소자는 상기 유기 광전 소자인 이미지 센서.

청구항 30

제25항에서,

상기 이미지 센서는 4.0 미만의 색차(ΔE^*ab)를 가지는 이미지 센서.

청구항 31

제25항에 따른 이미지 센서를 포함하는 전자 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전 소자, 이미지 센서 및 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 광전 소자는 광전 효과를 이용하여 빛을 전기 신호로 변환시키는 소자로, 광 다이오드 및 광 트랜지스터 등을 포함하며, 이미지 센서 등에 적용될 수 있다.

[0003] 광 다이오드를 포함하는 이미지 센서는 날이 갈수록 해상도가 높아지고 있으며, 이에 따라 화소 크기가 작아지고 있다. 현재 주로 사용하는 실리콘 광 다이오드의 경우 화소의 크기가 작아지면서 흡수 면적이 줄어들기 때문에 감도 저하가 발생할 수 있다. 이에 따라 실리콘을 대체할 수 있는 유기 물질이 연구되고 있다.

[0004] 유기 물질은 흡광 계수가 크고 분자 구조에 따라 특정 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수할 수 있으므로, 광 다이오드와 색 필터를 동시에 대체할 수 있어서 감도 개선 및 고집적에 매우 유리하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 일 구현예는 녹색 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수할 수 있는 화합물을 제공한다.

[0006] 다른 구현예는 녹색 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수하고 효율을 개선할 수 있는 유기 광전 소자를 제공한다.

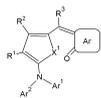
[0007] 다른 구현예는 상기 유기 광전 소자를 포함하는 이미지 센서를 제공한다.

[0008] 또 다른 구현예는 상기 이미지 센서를 포함하는 전자 장치를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0009] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



[0011] 상기 화학식 1에서,
 [0012] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0013] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0014] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0015] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

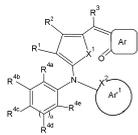
[0016] Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기에서 선택되고, 단 Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0017] 상기 화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피롤릴(pyrrolyl)기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴(prazolyl)기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴(imidazolyl)기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴(oxazoly

1)기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴(isoxazolyl)기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴(thiazolyl)기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴(isothiazolyl)기, 치환 또는 비치환된 피리디닐(pyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐(pyridazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐(pyrimidinyl)기, 치환 또는 비치환된 피라지닐(pyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 인돌일(indolyl)기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐(quinolinyl)기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐(isoquinolinyl)기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐(naphthyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐(cinnolinyl)기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐(quinazolinyl)기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐(phthalazinyl)기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐(benzotriazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐(pyridopyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐(pyridopyrimidinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐(pyridopyridazinyl)기, 치환 또는 비치환된 티에닐(thienyl)기, 치환 또는 비치환된 벤조티에닐(benzothieryl)기, 치환 또는 비치환된 셀레노페닐(selenophenyl)기 및 치환 또는 비치환된 벤조 셀레노페닐(benzoselenophenyl)기에서 선택되고, 상기 작용기들은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함할 수 있다.

[0018] 상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 2로 표현될 수 있다.

[0019] [화학식 2]



[0020] 상기 화학식 2에서,
 [0021] 상기 화학식 2에서,

[0022] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0023] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0024] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0025] R^{4a} 내지 R^{4e}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0026] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0027] X²는 질소(N)이고,

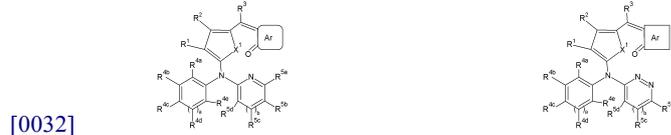
[0028] Ar¹은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0029] 상기 화학식 2에서 Ar¹는 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 티에닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티에닐기, 치환 또는 비치환된 셀레노페닐기 및 치환 또는 비치환된 벤조 셀레노페닐기에서 선택되고, 상기 작용기들은 질소(N)와의

연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함할 수 있다.

[0030] 상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 3-1 내지 3-6 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

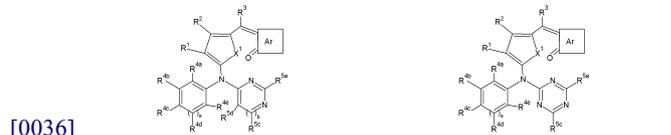
[0031] [화학식 3-1] [화학식 3-2]



[0033] [화학식 3-3] [화학식 3-4]



[0035] [화학식 3-5] [화학식 3-6]



[0037] 상기 화학식 3-1 내지 3-6에서,

[0038] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0039] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0040] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0041] R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0042] a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

[0043] 상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기(ring group)는 하기 화학식 4로 표현될 수 있다.

[0044] [화학식 4]



[0046] 상기 화학식 4에서,

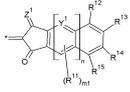
[0047] Ar'은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0048] Z¹은 O 또는 CR^bR^c이고, 여기서 R^b 및 R^c는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아

노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기이다.

[0049] 상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기는 하기 화학식 5-1 내지 5-4중 어느 하나로 표현되는 고리기일 수 있다.

[0050] [화학식 5-1]



[0051]

상기 화학식 5-1에서,

[0053] Z^1 은 0 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

[0054] Y^1 은 N 및 CR^d 에서 선택되고(여기에서 R^d 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0055] R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} 및 R^{15} 는 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R^{12} 과 R^{13} 및 R^{14} 과 R^{15} 는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0056] m1은 0 또는 1이고,

[0057] n은 0 또는 1이다.

[0058] [화학식 5-2]



[0059]

상기 화학식 5-2에서,

[0061] Y^2 는 0, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0062] R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN) 및 이들의 조합에서 선택된다.

[0063] [화학식 5-3]



[0064]

상기 화학식 5-3에서,

[0066] R^{18} 내지 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택된다.

[0067] [화학식 5-4]



[0068]

상기 화학식 5-4에서,

[0070] Y^2 는 0, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서

선택되고,

[0071] Y^3 는 O, S, Se 및 Te에서 선택되고,

[0072] Y^4 는 N 또는 NR^f 이고,

[0073] Y^5 는 CR^g , C=O, C=S, $C=(CR^h)(CN)$ 및 화학식 5-4에서 선택되고,

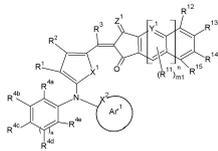
[0074] Y^2 와 Y^5 중 적어도 하나는 C=O이고,

[0075] R^f , R^g 및 R^h 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0076] 선택적으로 Y^4 와 Y^5 는 서로 연결되어 화학식 5-4의 Y^4 - Y^5 -함유 오각링과 융합된 링을 형성할 수 있다.

[0077] 상기 화합물은 하기 화학식 6-1 내지 6-4중 어느 하나로 표현되는 화합물일 수 있다.

[0078] [화학식 6-1]



[0079]

[0080] 상기 화학식 6-1에서,

[0081] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0082] R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0083] Z^1 은 O 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

[0084] Y^1 은 N 및 CR^d 에서 선택되고(여기에서 R^d 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0085] R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R^{12} 과 R^{13} 및 R^{14} 과 R^{15} 는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0086] m_1 은 0 또는 1이고,

[0087] n 은 0 또는 1이고,

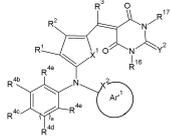
[0088] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0089] a 는 0 또는 1의 정수이고,

[0090] X^2 는 질소(N)이고,

[0091] Ar^1 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이고,

[0092] [화학식 6-2]



[0093] 상기 화학식 6-2에서,

[0094] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , $S(=O)$, $S(=O)_2$ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0095] Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0096] R^1 , R^2 , R^3 , R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

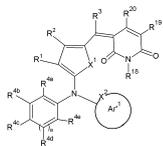
[0097] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0098] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0099] X^2 는 질소(N)이고,

[0100] Ar^1 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이고,

[0101] [화학식 6-3]



[0102] 상기 화학식 6-3에서,

[0103] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , $S(=O)$, $S(=O)_2$ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0104] R^1 , R^2 , R^3 , R^{18} , R^{19} 및 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0105] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향

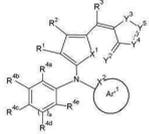
족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0108] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0109] X^2 는 질소(N)이고,

[0110] Ar^1 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이고,

[0111] [화학식 6-4]



[0112]

[0113] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , $S(=O)$, $S(=O)_2$ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0114] Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0115] Y^3 는 O, S, Se 및 Te에서 선택되고,

[0116] Y^4 는 N 또는 NR^f 이고,

[0117] Y^5 는 CR^g , C=O, C=S, $C(CR^h)(CN)$ 및 화학식 5-4에서 선택되고,

[0118] Y^2 와 Y^5 중 적어도 하나는 C=O이고,

[0119] R^1 , R^2 , R^3 , R^f , R^g 및 R^h 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0120] 선택적으로 Y^4 와 Y^5 는 서로 연결되어 화학식 5-4의 Y^4 - Y^5 -함유 오각링과 융합된 링을 형성할 수 있으며,

[0121] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0122] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0123] X^2 는 질소(N)이고,

[0124] Ar^1 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0125] 상기 화합물은 박막 상태에서 약 510 nm 이상 약 560 nm 미만, 예를 들어 약 520 nm 내지 약 555 nm의 파장 범위에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가질 수 있다.

[0126] 상기 화합물은 박막 상태에서 약 50 nm 내지 약 110 nm의 반치폭(full width at half maximum, FWHM)을 가지는 흡광 곡선을 나타낼 수 있다.

[0127] 다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 제1 전극과 제2 전극, 그리고 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 위치하고 상기 화학식 1로 표현되는 화합물을 포함하는 활성층을 포함하는 유기 광전 소자를 제공한다.

- [0128] 상기 화합물은 상기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표현되는 화합물일 수 있다.
- [0129] 상기 화학식 1에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기는 상기 화학식 4로 표현될 수 있다.
- [0130] 상기 활성층은 약 510 nm 이상 약 560 nm 미만, 예를 들어 약 520 nm 내지 약 555 nm의 파장 범위에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가질 수 있다.
- [0131] 상기 활성층은 50 nm 내지 약 110 nm 의 반치폭(full width at half maximum, FWHM)을 가지는 흡광 곡선을 나타낼 수 있다.
- [0132] 상기 활성층은 상기 화학식 1의 화합물과 C60을 약 0.9: 1 내지 약 1.1: 1의 부피비로 포함하고 약 $5.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 이상, 예를 들어 약 $5.8 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 내지 약 $10 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 의 흡수 계수를 가질 수 있다.
- [0133] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전 소자를 포함하는 이미지 센서를 제공한다.
- [0134] 상기 이미지 센서는 청색 파장 영역의 광을 감지하는 복수의 제1 광 감지 소자 및 적색 파장 영역의 광을 감지하는 복수의 제2 광 감지 소자가 집적되어 있는 반도체 기판, 그리고 상기 반도체 기판의 상부에 위치하고 녹색 파장 영역의 광을 감지하는 상기 유기 광전 소자를 포함할 수 있다.
- [0135] 상기 제1 광 감지 소자와 상기 제2 광 감지 소자는 반도체 기판에서 수직 방향으로 적층되어 있을 수 있다.
- [0136] 상기 이미지 센서는 상기 반도체 기판과 상기 유기 광전 소자의 사이에 위치하고 청색 파장 영역의 광을 선택적으로 투과하는 청색 필터와 적색 파장 영역의 광을 선택적으로 투과하는 적색 필터를 포함하는 색 필터 층을 더 포함할 수 있다.
- [0137] 상기 이미지 센서는 상기 유기 광전 소자인 녹색 광전 소자, 청색 파장 영역의 광을 감지하는 청색 광전 소자 및 적색 파장 영역의 광을 감지하는 적색 광전 소자가 적층되어 있을 수 있다.
- [0138] 상기 이미지 센서는 약 4.0 미만의 색차(ΔE^*ab)를 가질 수 있다.
- [0139] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 이미지 센서를 포함하는 전자 장치를 제공한다.

발명의 효과

- [0140] 녹색 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수할 수 있는 화합물을 제공하고 상기 화합물에 의해 녹색 파장 영역의 파장 선택성을 높여 효율을 개선할 수 있는 유기 광전 소자, 이미지 센서 및 전자 장치를 제공한다.

도면의 간단한 설명

- [0141] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 광전 소자를 도시한 단면도이고,
- 도 2는 다른 구현예에 따른 유기 광전 소자를 도시한 단면도이고,
- 도 3은 일 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 평면도이고,
- 도 4는 도 3의 유기 CMOS 이미지 센서의 단면도이고,
- 도 5는 다른 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 단면도이고,
- 도 6은 또 다른 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서의 단면도이고,
- 도 7은 또 다른 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 개략도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0142] 이하, 구현예에 대하여 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 상세히 설명한다. 그러나 실제 적용되는 구조는 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 구현예에 한정되지 않는다.
- [0143] 도면에서 여러 층 및 영역을 명확하게 표현하기 위하여 두께를 확대하여 나타내었다. 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 동일한 도면 부호를 붙였다. 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "위에" 있다고 할 때, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우 뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대

로 어떤 부분이 다른 부분 "바로 위에" 있다고 할 때에는 중간에 다른 부분이 없는 것을 뜻한다.

- [0144] 도면에서 본 구현예를 명확하게 설명하기 위하여 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 동일 또는 유사한 구성 요소에 대해서는 동일한 도면 부호를 사용하였다.
 - [0145] 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "치환된"이란, 화합물 중의 수소 원자가 할로겐 원자(F, Cl, Br 또는 I), 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아지도기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르보닐기, 카르바밀기, 티올기, 에스테르기, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산기나 그의 염, C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C20 알콕시기, C2 내지 C20 알케닐기, C2 내지 C20 알키닐기, C6 내지 C30 아릴기, C7 내지 C30 아릴알킬기, C2 내지 C20 헤테로아릴기, C3 내지 C20 헤테로아릴알킬기, C3 내지 C30 사이클로알킬기, C3 내지 C15 사이클로알케닐기, C6 내지 C15 사이클로알키닐기, C2 내지 C20 헤테로사이클로알킬기 및 이들의 조합에서 선택된 치환기로 치환된 것을 의미한다.
 - [0146] 또한, 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "헤테로"란, N, O, S, P 및 Si에서 선택된 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유한 것을 의미한다.
 - [0147] 본 명세서에서 알킬기는 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기 등을 들 수 있다.
 - [0148] 본 명세서에서 "사이클로알킬기"는, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등일 수 있다.
 - [0149] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하고, 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
 - [0150] 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "시아노 함유기"는 C1 내지 C30 알킬기, C2 내지 C30 알케닐기 또는 C2 내지 C30 알키닐기의 적어도 하나의 수소가 시아노기로 치환된 1가의 작용기를 의미할 수 있다. 또한 상기 시아노 함유기는 $=CR^x-(CR^y)_p-CR^z(CN)_2$ 로 표현되는 디시아노알케닐기와 같은 2가의 작용기를 포함할 수 있으며 여기에서 R^x , R^y , R^z 및 R^v 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C10 알킬기이고 p는 0 내지 10의 정수이다. 상기 시아노 함유기의 구체적인 예로는 디시아노메틸기(dicyanomethyl group), 디시아노비닐기(dicyanovinyl group), 시아노에틸기(cyanoethyl group) 등이 있다.
 - [0151] 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "조합"이란 하나의 치환기가 다른 치환기에 치환되거나, 서로 융합하여 존재하거나, 단일결합이나 C1 내지 C10 알킬렌기에 의해 서로 연결된 치환기들을 의미한다.
 - [0152] 본 명세서에서 "5원 방향족 고리"는 공액 구조를 제공하는 5원 사이클릭기(예를 들어 C5 아릴기) 또는 공액 구조를 제공하는 5원 헤테로사이클릭기(예를 들어 C2 내지 C4 헤테로아릴기)를 의미한다. 본 명세서에서 "6원 방향족 고리"는 공액 구조를 제공하는 6원 사이클릭기(예를 들어 C6 아릴기) 또는 공액 구조를 제공하는 6원 헤테로사이클릭기(예를 들어 C2 내지 C5 헤테로아릴기)를 포함할 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한 방향족 고리는 상기 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 포함할 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
 - [0153] 이하, 일 구현예에 따른 화합물을 설명한다. 상기 화합물은 하기 화학식 1로 표현된다.
 - [0154] [화학식 1]
-
- [0155]
 - [0156] 상기 화학식 1에서,
 - [0157] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,
 - [0158] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , $S(=O)$, $S(=O)_2$ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),
 - [0159] R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30

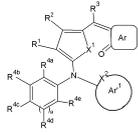
알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

- [0160] Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기에서 선택되고, 단 Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.
- [0161] 상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 아릴아민(-N(Ar¹)(Ar²))의 전자 도너 부분(electron donor moiety), X¹⁻ 함유 5원 고리와 메틴기를 포함하는 링커, 그리고 Ar-함유 고리기의 전자 어셉터 부분(electron acceptor moiety)을 포함한다.
- [0162] Ar¹ 및 Ar²는 방향족 고리가 단독으로 존재하거나 서로 융합되어 있는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있고, 종계는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 예를 들어 치환 또는 비치환된 C8 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 헤테로아릴기 일 수 있다. 즉 방향족 고리 사이에 단일결합이나 다른 연결기로 연결된 방향족기는 공액 구조가 끊어져서 바람직한 공액 길이를 제공할 수 없다. 또한 Ar¹ 및 Ar²가 방향족기가 아닌 알킬기이거나 서로 연결하여 N-함유 지방족 고리기를 형성할 경우 흡광 곡선의 반치폭이 너무 넓어져 녹색 파장 영역의 흡수 선택성이 떨어질 수 있다.
- [0163] Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 상기 화학식 1의 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다. 상기 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N) 원자는 링커에 존재하는 X¹과 전자 어셉터 부분에 존재하는 카르보닐기의 산소(O)와 분자내 상호작용(intramolecular interaction)을 증가시켜 특정 파장에서의 흡수 강도를 향상시킬 수 있다. 상기 헤테로원자가 질소(N)와의 연결기에 대하여 메타 위치 또는 파라 위치에 존재하는 경우 이러한 분자내 상호 작용이 충분하지 못하여 충분한 흡수 강도를 얻을 수 없다.
- [0164] 일 구현예에서, Ar¹ 및 Ar²중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피롤릴(pyrrolyl)기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴(prazoly)기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴(imidazoly)기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴(oxazoly)기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴(isoxazoly)기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴(thiazoly)기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴(isothiazoly)기, 치환 또는 비치환된 피리디닐(pyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐(pyridazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐(pyrimidinyl)기, 치환 또는 비치환된 피라지닐(pyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 인돌일(indolyl)기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐(quinolinyl)기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐(isoquinolinyl)기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐(naphthyridinyl)기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐(cinnolinyl)기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐(quinazolinyl)기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐(phthalazinyl)기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐(benzotriazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐(pyridopyrazinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐(pyridopyrimidinyl)기, 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐(pyridopyridazinyl)기, 치환 또는 비치환된 티에닐(thienyl)기, 치환 또는 비치환된 벤조티에닐(benzothieryl)기, 치환 또는 비치환된 셀레노페닐(selenophenyl)기 및 치환 또는 비치환된 벤조 셀레노페닐(benzoselenophenyl)기에서 선택되고, 상기 작용기들은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함할 수 있다.
- [0165] 일 구현예에서, Ar¹ 및 Ar² 중 어느 하나는 치환 또는 비치환된 페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있고, 다른 하나는 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 티에닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티에닐기, 치환 또는 비치환된 셀레노페닐기 및 치환 또는 비치환된 벤조 셀레노페닐기에서 선택되고, 상기 작용기들은 질소(N)와의 연결기에

대하여 오르쏘 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함할 수 있다.

[0166] 상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 2로 표현될 수 있다.

[0167] [화학식 2]



[0168]

[0169] 상기 화학식 2에서,

[0170] Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0171] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0172] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0173] R^{4a} 내지 R^{4e}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0174] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0175] X²는 질소(N)이고,

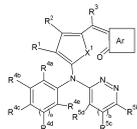
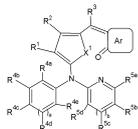
[0176] Ar¹은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0177] 상기 화학식 2에서 Ar¹는 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리도피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 티에닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티에닐기, 치환 또는 비치환된 셀레노페닐기 및 치환 또는 비치환된 벤조 셀레노페닐기에서 선택될 수 있다.

[0178] 상기 화학식 1로 표현되는 화합물은 하기 화학식 3-1 내지 3-6중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[0179] [화학식 3-1]

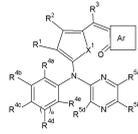
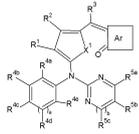
[화학식 3-2]



[0180]

[0181] [화학식 3-3]

[화학식 3-4]



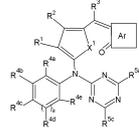
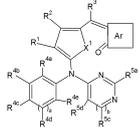
[0182]

[0183]

[화학식 3-5]

[화학식 3-6]

[0184]



[0185]

상기 화학식 3-1 내지 3-6에서,

[0186]

Ar은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0187]

X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0188]

R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아틸기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0189]

R^{4a} 내지 R^{4e} 또는 R^{5a} 내지 R^{5d}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아틸기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고 선택적으로 R^{5a} 내지 R^{5d}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0190]

a와 b는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

[0191]

상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 Ar로 표현되는 고리기는 전자 억셉터 부분으로 적어도 하나의 카르보닐기를 포함한다.

[0192]

일 예로, 상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar로 표현되는 고리기는 적어도 하나의 카르보닐기를 포함할 수 있다.

[0193]

일 예로, 상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar로 표현되는 고리기는 적어도 하나의 카르보닐기와 적어도 하나의 시아노 함유 부분(moiety)을 포함할 수 있다.

[0194]

상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기(ring group)는 하기 화학식 4로 표현될 수 있다.

[0195]

[화학식 4]



[0196]

상기 화학식 4에서,

[0198]

Ar'은 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 6원 방향족 고리 및 이들중 둘 이상의 축합 고리에서 선택되고,

[0199]

Z¹은 O 또는 CR^bR^c이고, 여기서 R^b 및 R^c는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기이다.

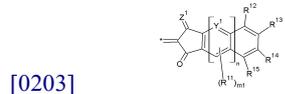
[0200]

일 예로, 상기 화학식 1에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기는 치환 또는 비치환된 5원 방향족 고리와 치환

또는 비치환된 6원 방향족 고리의 축합 고리일 수 있다.

[0201] 상기 화학식 1, 화학식 2 및 화학식 3-1 내지 3-6에서 메틴기에 결합되는 Ar-함유 고리기는 하기 화학식 5-1 내지 5-4중 어느 하나로 표현되는 고리일 수 있다.

[0202] [화학식 5-1]



[0204] 상기 화학식 5-1에서,

[0205] Z^1 은 O 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

[0206] Y^1 은 N 및 CR^d 에서 선택되고(여기에서 R^d 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0207] R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R^{12} 과 R^{13} 및 R^{14} 과 R^{15} 는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0208] m1은 0 또는 1이고,

[0209] n은 0 또는 1이다.

[0210] [화학식 5-2]



[0212] 상기 화학식 5-2에서,

[0213] Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0214] R^{16} 및 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN) 및 이들의 조합에서 선택된다.

[0215] [화학식 5-3]



[0217] 상기 화학식 5-3에서,

[0218] R^{18} 내지 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택된다.

[0219] [화학식 5-4]



[0221] 상기 화학식 5-4에서,

[0222] Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서

선택되고,

[0223] Y^3 는 O, S, Se 및 Te에서 선택되고,

[0224] Y^4 는 N 또는 NR^f 이고,

[0225] Y^5 는 CR^g , C=O, C=S, $C=(CR^h)(CN)$ 및 화학식 5-4에서 선택되고,

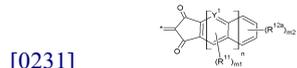
[0226] Y^2 와 Y^5 중 적어도 하나는 C=O이고,

[0227] R^f , R^g 및 R^h 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

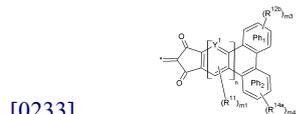
[0228] 선택적으로 Y^4 와 Y^5 는 서로 연결되어 화학식 5-4의 Y^4 - Y^5 -함유 오각링과 융합된 링을 형성할 수 있다. 예를 들어 상기 오각링과 융합된 링을 형성하는 링 구조는 벤즈이미다졸 또는 인돌일 수 있다.

[0229] 상기 화학식 5-1로 표현되는 고리기는 예컨대 하기 화학식 5-1-1, 5-1-2 또는 5-1-3로 표현되는 고리기일 수 있다.

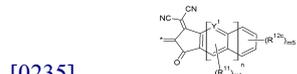
[0230] [화학식 5-1-1]



[0232] [화학식 5-1-2]



[0234] [화학식 5-1-3]



[0236] 상기 화학식 5-1-1, 5-1-2 및 5-1-3에서, Y^1 , R^{11} , $m1$, n 은 화학식 5-1에서와 같고,

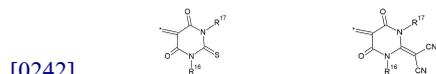
[0237] R^{12a} , R^{12b} , R^{12c} 및 R^{14a} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0238] $m2$, $m3$, $m4$ 및 $m5$ 는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0239] Ph1 및 Ph2는 융합된 페닐렌 링을 의미한다. Ph1과 Ph2중 하나는 선택적으로(optionally) 생략될 수 있다.

[0240] 상기 화학식 5-2로 표현되는 고리기는 예컨대 하기 화학식 5-2-1 또는 5-2-2로 표현되는 고리기일 수 있다.

[0241] [화학식 5-2-1] [화학식 5-2-2]



[0243] 상기 화학식 5-2-1 및 5-2-2에서, R^{16} 및 R^{17} 은 화학식 5-2에서와 같다.

[0244] 상기 화학식 5-3으로 표현되는 고리기는 예컨대 하기 화학식 5-3-1 또는 5-3-2로 표현되는 고리기일 수 있다.

[0245] [화학식 5-3-1] [화학식 5-3-2]



[0246]

[0247] 상기 화학식 5-3-1 및 5-3-2에서, R¹⁸ 내지 R²⁰은 화학식 5-3에서와 같다.

[0248] 상기 화학식 5-4로 표현되는 고리기는 예컨대 하기 화학식 5-4-1, 5-4-2, 5-4-3 또는 5-4-4로 표현되는 고리기일 수 있다.

[0249] [화학식 5-4-1] [화학식 5-4-2]



[0250]

[0251] [화학식 5-4-3] [화학식 5-4-4]



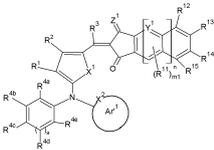
[0252]

[0253] 상기 화학식 5-4-1, 5-4-2, 5-4-3 및 5-4-4에서, Y³ 및 R^f은 화학식 5-4에서와 같고,

[0254] 화학식 5-4-4에서, Rⁱ와 R^j는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 선택적으로 Rⁱ와 R^j가 서로 연결되어 융합링을 형성할 수도 있다. 상기 융합링은 5원 또는 6원 방향족 고리 또는 헤테로 방향족 고리일 수 있다.

[0255] 상기 화합물은 하기 화학식 6-1 내지 6-4중 어느 하나로 표현되는 화합물일 수 있다.

[0256] [화학식 6-1]



[0257]

[0258] 상기 화학식 6-1에서,

[0259] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0260] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0261] Z¹은 O 또는 CR^bR^c 이고 (여기에서 R^b 및 R^c는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 시아노기 또는 시아노 함유기이고, R^b 및 R^c 중 적어도 하나는 시아노기 또는 시아노 함유기임),

[0262] Y¹은 N 및 CR^d에서 선택되고(여기에서 R^d는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0263] R¹¹, R¹², R¹³, R¹⁴ 및 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 R¹²과 R¹³ 및 R¹⁴과 R¹⁵는 각각 독립적으로 연결되어 융합된 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0264] m1은 0 또는 1이고,

[0265] n은 0 또는 1이고,

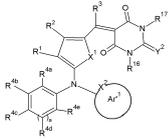
[0266] R^{4a} 내지 R^{4e}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0267] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0268] X²는 질소(N)이고,

[0269] Ar¹은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0270] [화학식 6-2]



[0271]

[0272] 상기 화학식 6-2에서,

[0273] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0274] Y²는 O, S, Se, Te 및 C(R^e)(CN)(여기서 R^e는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0275] R¹, R², R³, R¹⁶ 및 R¹⁷는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

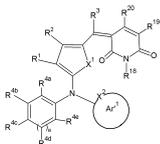
[0276] R^{4a} 내지 R^{4e}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e}중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0277] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0278] X²는 질소(N)이고,

[0279] Ar¹은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0280] [화학식 6-3]



[0281]

[0282] 상기 화학식 6-3에서,

[0283] X¹은 Se, Te, O, NR^a, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR^bR^c에서 선택되고(여기서 R^a, R^b 및 R^c는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0284] $R^1, R^2, R^3, R^{18}, R^{19}$ 및 R^{20} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

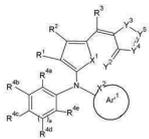
[0285] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0286] a는 0 또는 1의 정수이고,

[0287] X^2 는 질소(N)이고,

[0288] $Ar^{1'}$ 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다.

[0289] [화학식 6-4]



[0290]

[0291] 상기 화학식 6-4에서,

[0292] X^1 은 Se, Te, O, NR^a , $S(=O)$, $S(=O)_2$ 및 SiR^bR^c 에서 선택되고(여기서 R^a , R^b 및 R^c 는 수소 및 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨),

[0293] Y^2 는 O, S, Se, Te 및 $C(R^e)(CN)$ (여기에서 R^e 는 수소, 시아노기(-CN) 및 C1 내지 C10 알킬기에서 선택됨)에서 선택되고,

[0294] Y^3 는 O, S, Se 및 Te에서 선택되고,

[0295] Y^4 는 N 또는 NR^f 이고,

[0296] Y^5 는 CR^g , C=O, C=S, $C=(CR^h)(CN)$ 및 화학식 5-4에서 선택되고,

[0297] Y^2 와 Y^5 중 적어도 하나는 C=O이고,

[0298] R^1, R^2, R^3, R^f, R^g 및 R^h 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0299] 선택적으로 Y^4 와 Y^5 는 서로 연결되어 화학식 5-4의 Y^4 - Y^5 -함유 오각링과 융합된 링을 형성할 수 있으며,

[0300] R^{4a} 내지 R^{4e} 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되거나 또는 선택적으로(optionally) R^{4a} 내지 R^{4e} 중 서로 인접하는 2개가 서로 연결되어 5원 방향족 고리 또는 6원 방향족 고리를 형성할 수 있고,

[0301] a는 0 또는 1의 정수이고,

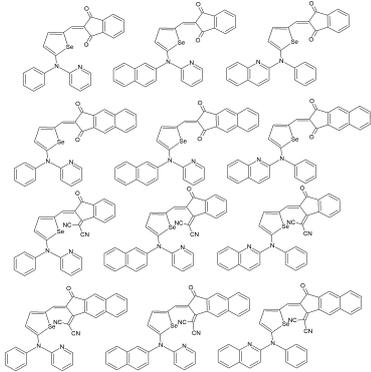
[0302] X^2 는 질소(N)이고,

[0303] $Ar^{1'}$ 은 질소(N)와의 연결기에 대하여 오르쏘(ortho) 위치에 적어도 하나의 질소(N)를 포함하는 헤테로아릴기이다

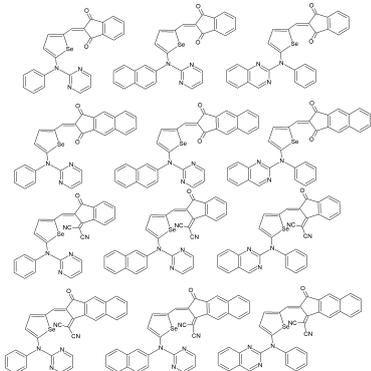
다.

[0304] 상기 화학식 1의 화합물의 구체적인 예로는 하기 화학식 7-1, 화학식 7-2, 화학식 7-3 및 화학식 7-4의 화합물을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

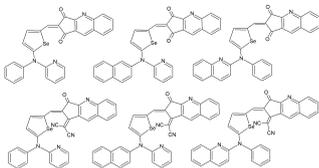
[0305] [화학식 7-1]



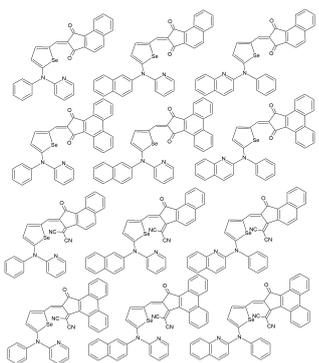
[0306]



[0307]



[0308]

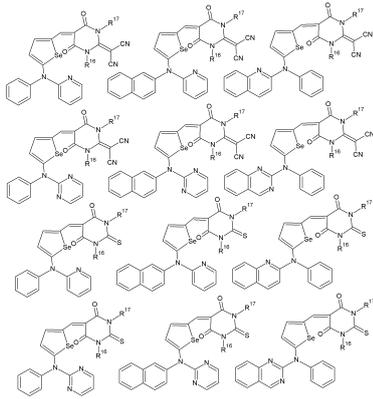


[0309]

[0310] 상기 화학식 7-1에서,

[0311] 각각의 방향족 링에 존재하는 수소는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로겐(F, Cl, Br 또는 I), 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되는 치환기로 치환될 수 있다.

[0312] [화학식 7-2]

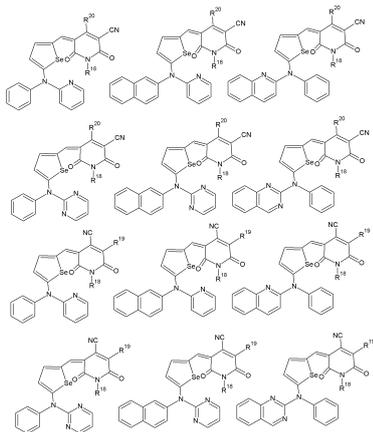


[0313]

[0314] 상기 화학식 7-2에서,

[0315] R^{16} 및 R^{17} 은 화학식 5-2에서와 같고, 각각의 방향족 링에 존재하는 수소는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠(F, Cl, Br 또는 I), 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되는 치환기로 치환될 수 있다.

[0316] [화학식 7-3]

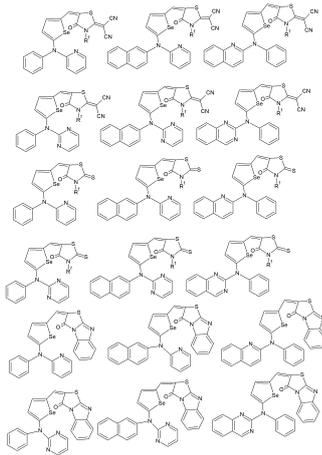


[0317]

[0318] 상기 화학식 7-3에서,

[0319] R^{18} , R^{19} 및 R^{20} 은 화학식 5-3에서와 같고, 각각의 방향족 링에 존재하는 수소는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠(F, Cl, Br 또는 I), 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되는 치환기로 치환될 수 있다.

[0320] [화학식 7-4]



[0321]

[0322] 상기 화학식 7-4에서,

[0323] R^f는 화학식 5-4에서와 같고, 각각의 방향족 링에 존재하는 수소는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기(예를 들어 페닐기), 치환 또는 비치환된 C4 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠(F, Cl, Br 또는 I), 시아노기(-CN), 시아노 함유기 및 이들의 조합에서 선택되는 치환기로 치환될 수 있다.

[0324] 상기 화합물은 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수하는 화합물로, 약 510 nm 이상 약 560 nm 미만, 예를 들어 약 520 nm 내지 약 555 nm의 파장 범위에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가질 수 있으므로 광전 소자의 활성층에 유용하게 사용될 수 있다. 특히 약 520 nm 내지 약 555 nm의 파장 범위에서 최대 흡수 파장을 가지는 경우 광전 소자가 적용된 이미지 센서의 색차(ΔE^*ab)를 감소시킬 수 있다.

[0325] 상기 화합물은 박막 상태에서 약 50 nm 내지 약 110 nm의 반치폭(full width at half maximum, FWHM)을 가지는 흡광 곡선을 나타낼 수 있다. 여기서 반치폭은 최대 흡광 지점의 반(half)에 대응하는 파장의 폭(width)으로, 반치폭이 작으면 좁은 파장 영역의 빛을 선택적으로 흡수하여 파장 선택성이 높다는 것을 의미한다. 상기 범위의 반치폭을 가짐으로써 녹색 파장 영역에 대한 선택성을 높일 수 있다. 상기 박막은 진공 조건에서 증착된 박막일 수 있다.

[0326] 상기 화합물은 증착에 의하여 박막으로 형성될 수 있다. 증착법은 균일한 박막 형성이 가능하고 불순물 혼입 가능성이 적어 유리한 점이 있으나 화합물의 용점이 증착온도보다 낮은 경우 화합물의 분해물이 증착될 수 있어 소자의 성능을 저해할 수 있다. 따라서 증착온도보다 화합물의 용점이 더 높은 것이 바람직하다. 이런 점에서 상기 화합물은 증착온도보다 높은, 예를 들어 약 10 °C 이상 높은 용점을 가지므로 증착 공정에 바람직하게 사용될 수 있다.

[0327] 상기 화합물은 p형 반도체로 작용하므로 혼합 사용하는 n형 반도체에 비해 LUMO 레벨의 위치가 높으면 적절하게 사용할 수 있다. 예를 들어 폴리렌과 같은 n형 재료와 혼합 사용하는 경우, 폴리렌의 LUMO 레벨이 4.2 eV이므로, 4.2 eV보다 높은 LUMO 레벨을 가지면 된다. 그리고 적절한 HOMO-LUMO 레벨의 경우, 상기 화합물은 HOMO 레벨이 약 5.0 내지 약 5.8 eV이고, 약 1.9 내지 약 2.3 eV의 에너지 밴드갭을 가지게 되면, LUMO 레벨이 약 3.9 내지 약 2.7 eV사이에 위치하게 된다. 상기 범위의 HOMO 레벨과 LUMO 레벨 및 에너지 밴드갭을 가짐으로써 녹색 파장 영역에서 광을 효과적으로 흡수하는 p형 반도체 화합물로 적용될 수 있고 그에 따라 높은 외부 양자 효율(external quantum efficiency, EQE)을 가질 수 있어 광전 변환 효율을 개선할 수 있다.

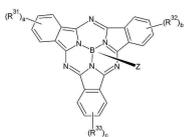
[0328] 일 구현예에서 증착에 의해 박막을 형성하는 관점에서 안정적으로 증착가능한 화합물이 사용되는 것이 좋으므로 약 300 내지 약 1500의 분자량을 가지는 화합물이 증착 공정에 사용될 수 있다. 그러나 상기 범위 외라 하더라도 증착가능한 화합물이라면 제한없이 사용될 수 있다. 또한 도포 공정으로 박막을 형성하는 경우 용매에 용해되고, 도포가능한 화합물이라면 제한없이 사용될 수 있다.

[0329] 상기 화합물은 p형 반도체 화합물로 사용될 수 있다.

[0330] 이하 상기 화합물을 포함하는 일 구현예에 따른 유기 광전 소자에 대하여 도면을 참고하여 설명한다.

- [0331] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 광전 소자를 도시한 단면도이다.
- [0332] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 광전 소자(100)는 서로 마주하는 제1 전극(10)과 제2 전극(20), 그리고 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 사이에 위치하는 활성층(30)을 포함한다.
- [0333] 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 중 어느 하나는 애노드(anode)이고 다른 하나는 캐소드(cathode)이다. 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 중 적어도 하나는 투광 전극일 수 있고, 상기 투광 전극은 예컨대 인듐 틴 옥사이드(indium tin oxide, ITO) 또는 인듐 아연 옥사이드(indium zinc oxide, IZO)와 같은 투명 도전체, 또는 얇은 두께의 단일층 또는 복수층의 금속 박막으로 만들어질 수 있다. 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 중 하나가 불투광 전극인 경우 예컨대 알루미늄(Al)과 같은 불투명 도전체로 만들어질 수 있다.
- [0334] 상기 활성층(30)은 p형 반도체 화합물과 n형 반도체 화합물이 포함되어 pn 접합(pn junction)을 형성하는 층으로, 외부에서 빛을 받아 엑시톤(exciton)을 생성한 후 생성된 엑시톤을 정공과 전자로 분리하는 층이다.
- [0335] 상기 활성층(30)은 상기 화학식 1로 표현되는 화합물을 포함한다. 상기 화합물은 활성층(30)에서 p형 반도체 화합물로 적용될 수 있다.
- [0336] 상기 화합물은 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수하는 화합물로, 상기 화합물을 포함하는 활성층(30)은 약 500 nm 내지 약 600 nm, 구체적으로는 약 520 nm 내지 약 555 nm의 파장 범위에서 최대 흡수 파장(λ_{max})을 가지는 녹색 파장의 광을 선택적으로 흡수할 수 있다.
- [0337] 상기 활성층(30)은 약 50 nm 내지 약 110 nm, 구체적으로 약 50 nm 내지 약 100 nm의 비교적 작은 반치폭(FWHM)을 가지는 흡광 곡선을 나타낼 수 있다. 이에 따라 활성층(30)은 녹색 파장 영역의 광에 대하여 높은 선택성을 가질 수 있다.
- [0338] 상기 활성층은 상기 화합물과 C60을 약 0.9: 1 내지 약 1.1: 1, 예를 들어 1:1의 부피비로 포함하고 약 $5.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 이상, 예를 들어 약 $5.8 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 내지 약 $10 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 또는 약 $7.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 내지 약 $10 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 의 흡수 계수를 가질 수 있다.
- [0339] 상기 활성층(30)은 pn접합을 형성하기 위한 n형 반도체 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0340] 상기 n형 반도체 화합물은 서브프탈로시아닌 또는 서브프탈로시아닌 유도체, 플러렌 또는 플러렌 유도체, 티오펜 또는 티오펜 유도체 또는 이들의 조합일 수 있다.
- [0341] 상기 플러렌의 예로는 C60, C70, C76, C78, C80, C82, C84, C90, C96, C240, C540, 이들의 혼합물, 플러렌 나노튜브 등이 있다. 상기 플러렌 유도체는 상기 플러렌에 치환기를 가지는 화합물을 의미한다. 상기 플러렌 유도체는 알킬기, 아릴기, 헤테로고리기 등의 치환기를 포함할 수 있다. 상기 아릴기와 헤테로고리기의 예로는 벤젠고리, 나프탈렌 고리, 안트라센 고리, 페난트렌 고리, 플루오렌 고리, 트리페닐렌 고리, 나프타센 고리, 바이페닐 고리, 피롤 고리, 퓨란(furan) 고리, 티오펜 고리, 이미다졸 고리, 옥사졸 고리, 티아졸 고리, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진 고리, 인돌진(indolizine) 고리, 인돌 고리, 벤조퓨란 고리, 벤조티오펜 고리, 이소벤조퓨란(isobenzofuran) 고리, 벤즈이미다졸 고리, 이미다조피리딘(imidazopyridine) 고리, 퀴놀리진(quinolizidine) 고리, 퀴놀린 고리, 프탈진(phthalazine) 고리, 나프티리진(naphthyridine) 고리, 퀴녹살린(quinoxaline)고리, 퀴녹사졸린(quinoxazoline) 고리, 이소퀴놀린(isoquinoline) 고리, 카바졸(carbazole) 고리, 페나트리딘(phenanthridine) 고리, 아크리딘(acridine) 고리, 페난트롤린(phenanthroline) 고리, 티아트렌(thianthrene) 고리, 크로멘(chromene) 고리, 잔텐(xanthene) 고리, 페녹사틴(phenoxathin) 고리, 페노티아진(phenothiazine) 고리 또는 페나진(phenazine) 고리가 있다.
- [0342] 상기 서브프탈로시아닌 또는 서브프탈로시아닌 유도체는 하기 화학식 8로 표현될 수 있다.

[0343] [화학식 8]



[0344]

[0345] 상기 화학식 8에서,

[0346] R^{31} 내지 R^{33} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 할로젠, 할로젠 함유기 및 이들의 조합에서 선택되고,

[0347] a, b 및 c는 1 내지 3의 정수이고,

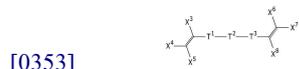
[0348] Z는 1가의 치환기이다.

[0349] 일 예로, Z는 할로젠 또는 할로젠 함유기일 수 있으며, 예를 들어 F, Cl, F 함유기 또는 Cl 함유기일 수 있다.

[0350] 상기 할로젠은 F, Cl, Br 또는 I를 의미할 수 있으며 할로젠 함유기는 알킬기의 수소중 적어도 하나가 F, Cl, Br 또는 I로 치환된 것을 의미할 수 있다.

[0351] 상기 티오펜 유도체는 예컨대 하기 화학식 9 또는 화학식 10으로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0352] [화학식 9]



[0354] [화학식 10]



[0356] 상기 화학식 9과 10에서,

[0357] T^1 , T^2 및 T^3 는 치환 또는 비치환된 티오펜부를 가지는 방향족 고리이고,

[0358] T^1 , T^2 및 T^3 는 각각 독립적으로 존재하거나 융합되어 있을 수 있고,

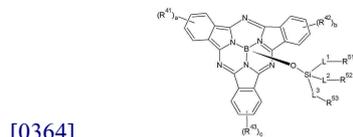
[0359] X^3 내지 X^8 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 시아노기 또는 이들의 조합이고,

[0360] EWG^1 및 EWG^2 는 각각 독립적으로 전자흡인기(electron withdrawing group)일 수 있다.

[0361] 일 예로, 상기 화학식 9에서, X^3 내지 X^8 중 적어도 하나는 전자 흡인기, 예를 들어 시아노기 또는 시아노 함유기일 수 있다.

[0362] 상기 활성층(30)은 녹색광을 선택적으로 흡수하는 제2의 p형 반도체 화합물을 더 포함할 수 있다. 상기 p형 반도체 화합물로는 하기 화학식 11의 화합물을 들 수 있다.

[0363] [화학식 11]



[0365] 상기 화학식 11에서,

[0366] R^{41} 내지 R^{43} 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 지방족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 지방족 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 방향족 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티올기, 시아노기, 시아노 함유기, 할로젠기, 할로젠 함유기, 치환 또는 비치환된 설포닐기(예를 들어, 치환 또는 비치환된 C0 내지 C30 아미노설포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬설포닐기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴설포닐기) 또는 이들의 조합이고, 또는 R^{41} 내지 R^{43} 은 인접한 두 개가 연결되어 융합고리를 형성하

고,

- [0367] L^1 내지 L^3 은 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,
- [0368] R^{51} 내지 R^{53} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아민기(예를 들어, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아민기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기), 치환 또는 비치환된 실릴기 또는 이들의 조합이고,
- [0369] a 내지 c는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.
- [0370] 상기 녹색광을 선택적으로 흡수하는 제2의 p형 반도체 화합물은 상기 화학식 1의 화합물 100 중량부에 대하여 약 500 내지 약 1500 중량부로 포함되는 것이 좋다.
- [0371] 상기 활성층(30)은 단일 층일 수도 있고 복수 층일 수도 있다. 활성층(30)은 예컨대 진성층(intrinsic layer, I층), p형 층/I층, I층/n형 층, p형 층/I층/n형 층, p형 층/n형 층 등 다양한 조합일 수 있다.
- [0372] 상기 진성층(I층)은 상기 화학식 1의 화합물과 상기 n형 반도체 화합물이 약 1:100 내지 약 100:1의 두께 비로 혼합되어 포함될 수 있다. 상기 범위 내에서 약 1:50 내지 50:1의 두께 비로 포함될 수 있으며, 상기 범위 내에서 약 1:10 내지 10:1의 두께 비로 포함될 수 있으며, 상기 범위 내에서 약 1:1의 두께 비로 포함될 수 있다. 상기 범위의 조성비를 가짐으로써 효과적인 엑시톤 생성 및 pn 접합 형성에 유리하다.
- [0373] 상기 p형 층은 상기 화학식 1의 반도체 화합물을 포함할 수 있고, 상기 n형 층은 상기 n형 반도체 화합물을 포함할 수 있다.
- [0374] 상기 활성층(30)은 약 1 nm 내지 약 500 nm의 두께를 가질 수 있다. 상기 범위 내에서 약 5 nm 내지 300 nm의 두께를 가질 수 있다. 상기 범위의 두께를 가짐으로써 빛을 효과적으로 흡수하고 정공과 전자를 효과적으로 분리 및 전달함으로써 광전 변환 효율을 효과적으로 개선할 수 있다. 최적의 막 두께는 예컨대 활성층(30)의 흡수 계수를 고려하여 결정할 수 있으며, 예컨대 적어도 약 70% 이상, 예컨대 약 80% 이상, 예컨대 약 90%의 빛을 흡수할 수 있는 두께를 가질 수 있다.
- [0375] 유기 광전 소자(100)는 제1 전극(10) 및/또는 제2 전극(20) 측으로부터 빛이 입사되어 활성층(30)이 소정 파장 영역의 빛을 흡수하면 내부에서 엑시톤이 생성될 수 있다. 엑시톤은 활성층(30)에서 정공과 전자로 분리되고, 분리된 정공은 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 중 하나인 애노드 측으로 이동하고 분리된 전자는 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 중 다른 하나인 캐소드 측으로 이동하여 유기 광전 소자에 전류가 흐를 수 있게 된다.
- [0376] 이하 도 2를 참고하여 다른 구현예에 따른 유기 광전 소자에 대하여 설명한다.
- [0377] 도 2는 다른 구현예에 따른 유기 광전 소자를 도시한 단면도이다.
- [0378] 도 2를 참고하면, 본 구현예에 따른 유기 광전 소자(100)는 전술한 구현예와 마찬가지로 서로 마주하는 제1 전극(10)과 제2 전극(20), 그리고 제1 전극(10)과 제2 전극(20) 사이에 위치하는 활성층(30)을 포함한다.
- [0379] 그러나 본 구현예에 따른 유기 광전 소자(100)는 전술한 구현예와 달리 제1 전극(10)과 활성층(30) 사이 및 제2 전극(20)과 활성층(30) 사이에 각각 전하 보조층(40, 45)을 더 포함한다. 전하 보조층(40, 45)은 활성층(30)에서 분리된 정공과 전자의 이동을 용이하게 하여 효율을 높일 수 있다.
- [0380] 전하 보조층(40, 45)은 정공의 주입을 용이하게 하는 정공 주입층(hole injecting layer, HIL), 정공의 수송을 용이하게 하는 정공 수송층(hole transporting layer, HTL), 전자의 이동을 저지하는 전자 차단층(electron blocking layer, EBL), 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(electron injecting layer, EIL), 전자의 수송을 용이하게 하는 전자 수송층(electron transporting layer, ETL) 및 정공의 이동을 저지하는 정공 차단층(hole blocking layer, HBL)에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0381] 전하 보조층(40, 45)은 예컨대 유기물, 무기물 또는 유무기물을 포함할 수 있다. 상기 유기물은 정공 또는 전자 특성을 가지는 유기 화합물일 수 있고, 상기 무기물은 예컨대 몰리브덴 산화물, 텅스텐 산화물, 니켈 산화물과 같은 금속 산화물일 수 있다.
- [0382] 상기 정공 수송층(HTL)은 예컨대 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜):폴리(스티렌술포네이트)(poly(3,4-

ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate), PEDOT:PSS), 폴리아릴아민, 폴리(N-비닐카바졸)(poly(N-vinylcarbazole), 폴리아닐린(polyaniline), 폴리피롤(polypyrrole), N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)-벤지딘(N,N,N',N'-tetrakis(4-methoxyphenyl)-benzidine, TPD), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐-아미노]비페닐(4,4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl, α -NPD), m-MTDATA, 4,4',4"-트리스(N-카바졸릴)-트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)-triphenylamine, TCTA) 및 이들의 조합에서 선택되는 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0383] 상기 전자 차단층(EBL)은 예컨대 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜):폴리(스티렌술포네이트)(poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate), PEDOT:PSS), 폴리아릴아민, 폴리(N-비닐카바졸)(poly(N-vinylcarbazole), 폴리아닐린(polyaniline), 폴리피롤(polypyrrole), N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)-벤지딘(N,N,N',N'-tetrakis(4-methoxyphenyl)-benzidine, TPD), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐-아미노]비페닐(4,4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl, α -NPD), m-MTDATA, 4,4',4"-트리스(N-카바졸릴)-트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)-triphenylamine, TCTA) 및 이들의 조합에서 선택되는 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0384] 상기 전자 수송층(ETL)은 예컨대 1,4,5,8-나프탈렌-테트라카르복실릭 디안하이드라이드(1,4,5,8-naphthalene-tetracarboxylic dianhydride, NTCDA), 바소쿠프로인(bathocuproine, BCP), LiF, Alq3, Gaq3, Inq3, Znq2, Zn(BTZ)2, BeBq2 및 이들의 조합에서 선택되는 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0385] 상기 정공 차단층(HBL)은 예컨대 1,4,5,8-나프탈렌-테트라카르복실릭 디안하이드라이드(1,4,5,8-naphthalene-tetracarboxylic dianhydride, NTCDA), 바소쿠프로인(BCP), LiF, Alq3, Gaq3, Inq3, Znq2, Zn(BTZ)2, BeBq2 및 이들의 조합에서 선택되는 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0386] 상기 전하 보조층(40, 45) 중 하나는 생략될 수 있다.
- [0387] 상기 유기 광전 소자는 태양 전지, 이미지 센서, 광 검출기, 광 센서 및 유기발광다이오드 등에 적용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0388] 이하 상기 유기 광전 소자를 적용한 이미지 센서의 일 예에 대하여 도면을 참고하여 설명한다. 여기서는 이미지 센서의 일 예로 유기 CMOS 이미지 센서에 대하여 설명한다.
- [0389] 도 3은 일 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 평면도이고, 도 4는 도 3의 유기 CMOS 이미지 센서의 단면도이다.
- [0390] 도 3 및 도 4를 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서(300)는 광 감지 소자(50B, 50R), 전송 트랜지스터(도시하지 않음) 및 전하 저장소(55)가 집적되어 있는 반도체 기판(310), 하부 절연층(60), 색 필터 층(70), 상부 절연층(80) 및 유기 광전 소자(100)를 포함한다.
- [0391] 반도체 기판(310)은 실리콘 기판일 수 있으며, 광 감지 소자(50B, 50R), 전송 트랜지스터(도시하지 않음) 및 전하 저장소(55)가 집적되어 있다. 광 감지 소자(50R, 50B)는 광 다이오드일 수 있다.
- [0392] 광 감지 소자(50B, 50R), 전송 트랜지스터 및/또는 전하 저장소(55)는 각 화소마다 집적되어 있을 수 있으며, 일 예로 도면에서 보는 바와 같이 광 감지 소자(50B, 50R)는 청색 화소 및 적색 화소에 포함될 수 있고 전하 저장소(55)는 녹색 화소에 포함될 수 있다.
- [0393] 광 감지 소자(50B, 50R)는 빛을 센싱하고 센싱된 정보는 전송 트랜지스터에 의해 전달될 수 있고, 전하 저장소(55)는 후술하는 유기 광전 소자(100)와 전기적으로 연결되어 있고 전하 저장소(55)의 정보는 전송 트랜지스터에 의해 전달될 수 있다.
- [0394] 도면에서는 광 감지 소자(50B, 50R)가 나란히 배열된 구조를 예시적으로 도시하였으나 이에 한정되지 않고 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)가 수직으로 적층되어 있을 수도 있다.
- [0395] 반도체 기판(310) 위에는 또한 금속 배선(도시하지 않음) 및 패드(도시하지 않음)가 형성되어 있다. 금속 배선 및 패드는 신호 지연을 줄이기 위하여 낮은 비저항을 가지는 금속, 예컨대 알루미늄(Al), 구리(Cu), 은(g) 및 이들의 합금으로 만들어질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 그러나 상기 구조에 한정되지 않고, 금속 배선 및 패드가 광 감지 소자(50B, 50R)의 하부에 위치할 수도 있다.
- [0396] 금속 배선 및 패드 위에는 하부 절연층(60)이 형성되어 있다. 하부 절연층(60)은 산화규소 및/또는 질화규소와 같은 무기 절연 물질 또는 SiC, SiCOH, SiCO 및 SiOF와 같은 저유전율(low K) 물질로 만들어질 수 있다. 하부

절연층(60)은 전하 저장소(55)를 드러내는 트렌치를 가진다. 트렌치는 충전재로 채워져 있을 수 있다.

- [0397] 하부 절연막(60) 위에는 색 필터 층(70)이 형성되어 있다. 색 필터 층(70)은 청색 화소에 형성되어 청색 광을 선택적으로 투과하는 청색 필터(70B)와 적색 화소에 형성되어 적색 광을 선택적으로 투과하는 적색 필터(70R)를 포함한다. 본 구현예에서는 녹색 필터를 구비하지 않은 예를 설명하지만, 경우에 따라 녹색 필터를 구비할 수도 있다.
- [0398] 색 필터 층(70)은 경우에 따라 생략될 수 있으며, 일 예로 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)가 수직으로 적층되어 있는 구조에서는 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)가 적층 깊이에 따라 각 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지할 수 있으므로 색 필터 층(70)을 구비하지 않을 수도 있다.
- [0399] 색 필터 층(70) 위에는 상부 절연층(80)이 형성되어 있다. 상부 절연층(80)은 색 필터 층(70)에 의한 단차를 제거하고 평탄화한다. 상부 절연층(80) 및 하부 절연층(60)은 패드를 드러내는 접촉구(도시하지 않음)와 녹색 화소의 전하 저장소(55)를 드러내는 관통구(85)를 가진다.
- [0400] 상부 절연층(80) 위에는 전술한 유기 광전 소자(100)가 형성되어 있다. 유기 광전 소자(100)는 전술한 바와 같이 제1 전극(10), 활성층(30) 및 제2 전극(20)을 포함한다.
- [0401] 제1 전극(10)과 제2 전극(20)은 모두 투명 전극일 수 있으며, 활성층(30)은 전술한 바와 같다. 활성층(30)은 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지할 수 있으며 녹색 화소의 색 필터를 대체할 수 있다.
- [0402] 제2 전극(20) 측으로부터 입사된 광은 활성층(30)에서 녹색 파장 영역의 빛이 주로 흡수되어 광전 변환될 수 있고 나머지 파장 영역의 빛은 제1 전극(10)을 통과하여 광 감지 소자(50B, 50R)에 센싱될 수 있다.
- [0403] 상기와 같이 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 유기 광전 소자가 적층된 구조를 가짐으로써 이미지 센서의 크기를 줄여 소형화 이미지 센서를 구현할 수 있다.
- [0404] 또한 전술한 바와 같이 상기 화학식 1로 표현되는 화합물을 p형 또는 n형 반도체 화합물로서 포함함으로써 박막 상태에서도 화합물들 사이의 응집이 발생하는 것을 방지하여 파장에 따른 흡광 특성을 유지할 수 있다. 이에 따라 녹색 파장 선택성을 그대로 유지할 수 있고 그에 따라 녹색 이외의 파장 영역의 광을 불필요하게 흡수하여 발생하는 크로스토크를 줄이고 감도를 높일 수 있다.
- [0405] 도 4에서는 도 1의 유기 광전 소자(100)를 포함하는 예를 도시하였지만 이에 한정되지 않고 도 2의 유기 광전 소자(200)를 포함하는 경우에도 동일하게 적용할 수 있다. 도 5는 도 2의 유기 광전 소자(200)를 적용한 유기 CMOS 이미지 센서(400)를 도시한 단면도이다.
- [0406] 도 6은 또 다른 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 단면도이다.
- [0407] 도 6을 참고하면, 본 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서(500)는 전술한 구현예와 마찬가지로 광 감지 소자(50B, 50R), 전송 트랜지스터(도시하지 않음) 및 전하 저장소(55)가 집적되어 있는 반도체 기판(310), 절연층(80) 및 유기 광전 소자(100)를 포함한다.
- [0408] 그러나 본 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서(500)는 전술한 구현예와 달리, 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)가 적층되어 있고 색 필터 층(70)이 생략될 수 있다. 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)는 전하 저장소와 전기적으로 연결되어 있고 전송 트랜지스터(도시하지 않음)에 의해 전달될 수 있다. 청색 광 감지 소자(50B)와 적색 광 감지 소자(50R)는 적층 깊이에 따라 각 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지할 수 있다.
- [0409] 상기와 같이 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 유기 광전 소자가 적층된 구조를 가지고 적색 광 감지 소자와 청색 광 감지 소자가 적층된 구조를 가짐으로써 이미지 센서의 크기를 더욱 줄여 소형화 이미지 센서를 구현할 수 있다. 또한 전술한 바와 같이 유기 광전 소자(100)는 녹색 파장 선택성을 높임으로써 녹색 이외의 파장 영역의 광을 불필요하게 흡수하여 발생하는 크로스토크를 줄이고 감도를 높일 수 있다.
- [0410] 도 6에서는 도 1의 유기 광전 소자(100)를 포함하는 예를 도시하였지만 이에 한정되지 않고 도 2의 유기 광전 소자(200)를 포함하는 경우에도 동일하게 적용할 수 있다.
- [0411] 도 7은 또 다른 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서를 개략적으로 도시한 개략도이다.
- [0412] 도 7을 참고하면, 본 구현예에 따른 유기 CMOS 이미지 센서는 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 녹색 광전 소자(G), 청색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 청색 광전 소자(B) 및

적색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 적색 광전 소자(R)가 적층되어 있는 구조이다.

[0413] 도면에서는 적색 광전 소자(R), 청색 광전 소자(B) 및 녹색 광전 소자(G)가 차례로 적층된 구조를 도시하였지만, 이에 한정되지 않고 적층 순서는 다양하게 바뀔 수 있다.

[0414] 상기 녹색 광전 소자(G)는 전술한 유기 광전 소자(100)일 수 있고, 상기 청색 광전 소자(B)는 서로 마주하는 전극들과 그 사이에 개재되어 있는 청색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수하는 유기 물질을 포함하는 활성층을 포함할 수 있으며, 상기 적색 광전 소자(R)는 서로 마주하는 전극들과 그 사이에 개재되어 있는 적색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수하는 유기 물질을 포함하는 활성층을 포함할 수 있다.

[0415] 상기와 같이 녹색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 유기 광전 소자(G), 청색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 유기 광전 소자(B) 및 적색 파장 영역의 광을 선택적으로 흡수 및/또는 감지하는 유기 광전 소자(R)가 적층된 구조를 가짐으로써 이미지 센서의 크기를 더욱 줄여 소형화 이미지 센서를 구현할 수 있는 동시에 감도를 높이고 크로스토크를 줄일 수 있다.

[0416] 상기 이미지 센서는 약 4.0 미만, 예를 들어 약 3.9 이하, 3.2 이하, 약 1.6 이하의 색차(ΔE^*ab)를 가질 수 있다. ΔE^*ab 는 CIE (국제조명위원회)가 1976년에 $L^*a^*b^*$ 색공간상의 2 점간의 거리를 나타내는 수치로 규정된 것이다. 예를 들어 상기 색차는 하기 수학적 식 1에 의하여 계산될 수 있다.

[0417] [수학적 식 1]

[0418]
$$\Delta E^* = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2}$$

[0419] (상기 수학적 식 1에서,

[0420] ΔL^* 는 상온(20 °C 내지 25 °C)에서의 색 좌표 L^* 와 비교할 때 색 좌표 L^* 의 변화를 나타내고,

[0421] Δa^* 는 상온에서의 색 좌표 a^* 와 비교할 때 색 좌표 a^* 의 변화를 나타내며,

[0422] Δb^* 는 상온에서의 색 좌표 b^* 와 비교할 때 색 좌표 b^* 의 변화를 나타낸다.

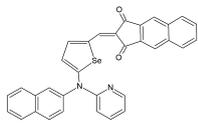
[0423] 상기 이미지 센서는 색차(ΔE^*ab)가 3.0일 때 100 lux 이하의 높은 감도(YSNR10)를 구현할 수 있다.

[0424] 상기 이미지 센서는 다양한 전자 장치에 적용될 수 있으며, 예컨대 모바일 폰, 디지털 카메라 등에 적용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

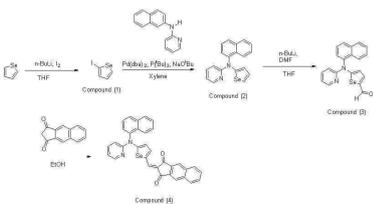
[0425] 이하 실시예를 통하여 상술한 구현예를 보다 상세하게 설명한다. 다만 하기의 실시예는 단지 설명의 목적을 위한 것이며 범위를 제한하는 것은 아니다.

[0426] **합성예 1:** 하기 화학식 1-1로 표현되는 화합물의 합성

[0427] [화학식 1-1]



[0428] [반응식 1-1]



[0430] 화합물(1)은 비특허 문헌(Heterocycles 1996, 43, 1927-1935)에 기재된 방법을 사용하여 합성하였다.

[0432] 3.6 g(14.2 mmol)의 화합물(1), 2.8 g(12.8 mmol)의 2-(나프틸 아미노)피리딘(2-(naphthyl amino)pyridine), 10 mol%의 Pd(dba)₂(bis(dibenzylideneacetone)palladium(0)), 10 mol%의 P(^tBu)₃(tri-tert-

butylphosphine), 1.5 g의 NaO^tBu(sodium-t-butoxide)을 사용하여, 100 ml의 무수 톨루엔에서 5시간 가열환류 하였다. 실온(24℃)으로 냉각시키고, 농축후 얻어진 조생성물(crude product)은 실리카겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 2.7 g의 화합물(2)을 얻었다(수율 65%)

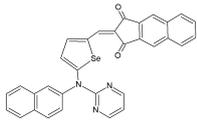
[0433] 2.0 g(5.7 mmol)의 화합물(2)를 30 ml의 무수 테트라하이드로퓨란(THF)에 용해시키고, 0℃로 냉각 후, 3.9 ml의 n-BuLi 용액(농도 1.6M)을 0~5℃ 범위내에서 적하하였다. 적하 후, 40℃로 승온하여 30분 교반하였다. 그리고 나서, 온도를 -78℃로 냉각시키고 1.0 ml의 무수 DMF 첨가하였다. 실온(24℃)으로 승온시킨 후, 염화암모늄 수용액을 첨가한 후 급냉(quench)하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 증발시켜 제거하여 조생성물을 얻었다. 다음으로 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여 1.0 g의 화합물(3)을 얻었다(수율 47%).

[0434] 0.5 g(1.3mmol)의 화합물(3)을 10 ml의 에탄올에 현탁시키고, 0.3 g의 1H-사이클로펜타[b]나프탈렌-1,3(2H)-디온(1H-cyclopenta[b]naphthalene-1,3(2H)-dione)을 첨가한 다음, 50℃에서 2시간 가열하였다. 실온(24℃)으로 냉각시킨 후, 흡인여과후 건조하여 0.67 g의 조생성물을 얻었다(수율 92%). 승화정제하여 0.54 g의 화학식 1-1의 화합물(화합물(4))을 얻었다(수율 74%, 순도 99%)

[0435] ¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆): δ 8.8 (d, 1 H), 8.5 (s, 1 H), 8.4 (s, 1 H), 8.2-8.3 (m, 4 H), 8.2 (d, 1 H), 8.1 (s, 1H), 7.9-7.6 (m, 6 H), 7.5 (t, 1 H), 7.4 (d, 1 H), 7.3 (dd, 1 H), 6.3 (d, 1 H), 6.0 (d, 1 H), 5.7 (s, 1 H).).

[0436] **합성예 2:** 하기 화학식 1-2로 표현되는 화합물의 합성

[0437] [화학식 1-2]

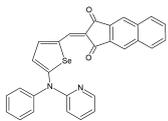


[0438] 합성예 1에서 2-(나프틸 아미노)피리딘 대신 2-(페닐아미노)피리미딘(2-(phenylamino)pyrimidine)을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 합성 방법으로 화학식 1-2의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0440] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃): δ 8.7 (s, 2 H), 8.4 (d, 2 H), 8.0-8.2 (m, 5 H), 7.4-7.9 (m, 8 H), 7.2 (dd, 1 H), 6.1 (d, 1 H).

[0441] **합성예 3:** 하기 화학식 1-3으로 표현되는 화합물의 합성

[0442] [화학식 1-3]

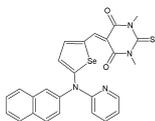


[0443] 합성예 1에서 2-(나프틸 아미노)피리딘 대신 2-(페닐아미노)피리딘(2-(phenylamino)pyridine)을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 합성방법으로 화학식 1-3의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0445] ¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆): δ 8.8 (d, 1H), 8.5 (s, 1 H), 8.4 (s, 1 H), 8.3 (m, 3 H), 8.1 (s, 1 H), 7.6-7.8 (m, 6 H), 7.6 (d, 2 H), 7.3 (dd, 1 H), 6.5 (d, 1 H), 6.1 (d, 1 H).

[0446] **합성예 4:** 하기 화학식 1-4로 표현되는 화합물의 합성

[0447] [화학식 1-4]



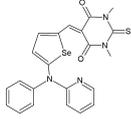
[0448] 합성예 1에서 1H-사이클로펜타[b]나프탈렌-1,3(2H)-디온 대신 1,3-디메틸-2-티옥소헥사히드로피리미딘-4,6-디온(1,3-dimethyl-2-thioxohexahydropyrimidine-4,6-dione)을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 합성방법으로

화학식 1-4의 화합물을 합성하였다 (수율 74%, 순도 99%).

[0450] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 8.8(d, 1 H), 8.7(s, 1 H), 8.2 (d, 1 H), 8.0(d, 2H), 7.9(d, 2H), 7.8(t, 1 H), 7.6(m, 2 H), 7.5(m, 3H), 7.1(t, 1 H), 6.3(d, 1 H), 6.2(d, 1 H), 3.9(d, 6 H).

[0451] **합성예 5:** 하기 화학식 1-5로 표현되는 화합물의 합성

[0452] [화학식 1-5]



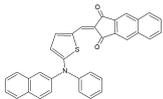
[0453]

[0454] 합성예 1에서 2-(나프틸아미노)피리딘 대신 2-(페닐아미노)피리딘(2-(phenylamino)pyridine)을 사용하고, 1H-사이클로헥타[b]나프탈렌-1,3(2H)-디온 대신 1,3-디메틸-2-티옥소헥사히드로피리미딘-4,6-디온 (1,3-dimethyl-2-thioxohexahydropyrimidine-4,6-dione)을 사용한 것외에는 합성예 1과 동일한 방법으로 화학식 1-5의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0455] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 8.8 (d, 1 H), 8.7 (s, 1 H), 8.0 (d, 1 H), 7.7 (m, 4 H), 7.4 (d, 2 H), 7.1 (t, 1 H), 6.5 (d, 1 H), 6.3 (d, 1H), 3.9 (d, 6H).

[0456] **비교합성예 1:** 하기 화학식 1-6으로 표현되는 화합물의 합성

[0457] [화학식 1-6]



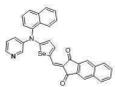
[0458]

[0459] 합성예 1에서 화합물(1) 대신 2-요오도티오펜(2-iodothiophene)을 사용하고, 2-(나프틸아미노)피리딘 대신 N-(2-나프틸)아닐린(N-(2-naphthyl)aniline)을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 방법으로 화학식 1-6의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0460] ^1H NMR (300 MHz, DMSO-d_6): δ 8.5 (s, 1 H), 8.4 (s, 1 H), 8.2-8.3 (m, 4 H), 8.2 (d, 1 H), 8.1 (s, 1H), 7.9-7.6 (m, 7 H), 7.5 (t, 1 H), 7.4 (d, 1 H), 7.3 (dd, 1 H), 6.3 (d, 1 H), 6.0 (d, 1 H), 5.7 (s, 1 H).

[0461] **참고합성예 1:** 하기 화학식 1-7로 표현되는 화합물의 합성

[0462] [화학식 1-7]



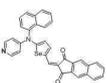
[0463]

[0464] 합성예 1에서 2-(나프틸 아미노)피리딘 대신 3-(나프틸아미노)피리딘을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 합성 방법으로 화학식 1-7의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0465] ^1H NMR (300 MHz, DMSO-d_6): δ 8.8 (s, 1 H), 8.7 (d, 1 H), 8.5 (s, 1 H), 8.4 (s, 1 H), 8.2-8.3 (m, 4 H), 8.2 (d, 1 H), 8.1 (s, 1H), 7.9-7.6 (m, 5 H), 7.5 (t, 1 H), 7.4 (d, 1 H), 7.3 (dd, 1 H), 6.3 (d, 1 H), 6.0 (d, 1 H), 5.7 (s, 1 H).

[0466] **참고합성예 2:** 하기 화학식 1-8로 표현되는 화합물의 합성

[0467] [화학식 1-8]



[0468]

[0469] 합성예 1에서 2-(나프틸 아미노)피리딘 대신 4-(나프틸아미노)피리딘을 사용한 것 외에는 합성예 1과 동일한 합성방법으로 화학식 1-8의 화합물을 합성하였다(수율 74%, 순도 99%).

[0470] ¹H NMR (300 MHz, DMSO-d₆): δ 8.8 (d, 2 H), 8.5 (s, 1 H), 8.4 (s, 1 H), 8.2-8.3 (m, 4 H), 8.2 (d, 1 H), 8.1 (s, 1H), 7.9-7.6 (m, 5 H), 7.5 (t, 1 H), 7.4 (d, 1 H), 7.3 (dd, 1 H), 6.3 (d, 1 H), 6.0 (d, 1 H), 5.7 (s, 1 H).).

[0471] **합성예 1 내지 5, 비교합성예 1 및 참고합성예 1과 2에 따른 화합물의 흡광 특성**

[0472] 상기 합성예 1 내지 5, 비교합성예 1 및 참고합성예 1과 2의 화합물의 파장에 따른 흡광 특성(흡수 파장, 흡수 강도 및 반치폭)을 평가한다. 흡광 특성은 용액 상태와 박막 상태에서 수행한다.

[0473] 용액 상태의 흡광 특성은 합성예 1 내지 5, 비교합성예 1 및 참고합성예 1과 2에 따른 각각의 화합물 5 mg을 톨루엔 250 ml에 녹인 용액을 10배로 희석한 후 평가한다.

[0474] 박막 상태의 흡광 특성은 합성예 1 내지 5, 비교합성예 1 및 참고합성예 1과 2에서 얻은 화합물과 C60을 1:1의 부피비로 고진공(< 10⁻⁷ Torr) 하에서 0.5 내지 1.0 Å/s 속도로 열증착(thermal evaporation)하여 70 nm 두께의 박막으로 준비한 후 상기 박막을 Cary 5000 UV spectroscopy(Varian 사 제조)를 사용하여 자외선-가시광선(UV-Vis)을 조사하여 평가한다. 상기 합성예 1 내지 5, 비교합성예 1 및 참고합성예 1과 2에 따른 화합물의 측정 결과를 하기 표 1에 기재한다.

표 1

	용액			박막		
	λ _{max} (nm)	흡수 계수 (10 ⁵ cm ⁻¹)	FWHM (nm)	λ _{max} (nm)	흡수 계수 (10 ⁴ cm ⁻¹)	FWHM (nm)
합성예 1	533	1.2	40	552	7.8	105
합성예 2	526	1.2	34	540	7.9	100
합성예 3	537	1.1	32	554	8.2	108
합성예 4	515	1.2	27	530	7.4	97
합성예 5	515	1.2	28	520	9.1	95
비교합성예 1	540	1.0	51	560	5.3	110
참고합성예 1	540	0.9	52	560	5.3	111
참고합성예 2	541	0.9	52	560	5.3	111

[0476] 표 1을 참고하면, 합성예 1 내지 5의 화합물이 비교합성예 1, 참고합성예 1 및 2의 화합물에 비하여 녹색 파장 영역(예를 들어 박막 상태에서 520 nm 내지 554 nm)에서 최대 흡수 파장을 보이고 반치폭도 좁아지며, 흡수 계수(absorption coefficient)도 높음을 알 수 있다. 따라서 합성예 1 내지 5의 화합물이 비교합성예 1, 참고합성예 1 및 2의 화합물에 비하여 녹색 파장 선택성과 흡수 강도가 우수함을 확인할 수 있다.

[0477] **실시예 1: 유기 광전 소자의 제작**

[0478] 유리 기판 위에 인듐 틴 옥사이드(ITO)를 스퍼터링으로 적층하여 약 150 nm 두께의 애노드를 형성하고 그 위에 합성예 1에 따른 화학식 1-1로 표현되는 화합물(p형 반도체 화합물)과 C60(n형 반도체 화합물)을 1:1 두께비로 공증착하여 150 nm 두께의 활성층을 형성한다. 그 위에 전하 보조층으로 몰리브덴 산화물(MoO_x, 0<x≤3) 박막을 10 nm 두께로 적층한다. 이어서 몰리브덴 산화물 박막 위에 ITO를 스퍼터링으로 적층하여 7 nm 두께의 캐소드를 형성하여 유기 광전 소자를 제작한다.

[0479] **실시예 2 내지 5: 유기 광전 소자의 제작**

[0480] 상기 합성예 1의 화합물 대신 합성예 2 내지 5에 따른 화합물을 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 5의 유기 광전 소자를 제작한다.

[0481] **비교예 1: 유기 광전 소자의 제작**

[0482] 상기 합성예 1의 화합물 대신 비교합성예 1에 따른 화합물을 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 비교예 1의 유기 광전 소자를 제작한다.

[0483] **유기 광전 소자의 외부 양자 효율(EQE)**

[0484] 실시예 1 내지 5 및 비교예 1에 따른 유기 광전 소자의 파장 및 전압에 따른 외부 양자 효율(EQE)을 평가한다.

[0485] 외부 양자 효율은 IPCE measurement system(McScience사, 한국) 설비를 이용하여 측정한다. 먼저, Si 광 다이오드(Hamamatsu사, 일본)를 이용하여 설비를 보정(calibration)한 후 실시예 1 내지 5 및 비교예 1에 따른 유기 광전 소자를 설비에 장착하고 파장범위 약 350 내지 약 750 nm 영역에서 외부 양자 효율을 측정한다. 그 결과를 표 2에 기재한다.

[0486] **이미지 센서의 색재현도(ΔE^*ab)와 감도(YSNR10)**

[0487] 도 4에 도시된 구조의 이미지 센서(300)의 유기 광전 소자(100)에 상기 제작된 실시예 1 내지 5 및 비교예 1에 따른 유기 광전 소자를 배치하여 이미지 센서를 제작하였다.

[0488] D-65의 조명광(표준광원) 밑에서 Macbeth 차트의 18% gray patch를 촬영했을 때의 Macbeth 차트 24색의 최소 색차 ΔE^*ab (반사색과 투과색의 색상 차이)를 구하였다. 색차 ΔE^*ab 는 하기 수학적 식 1에 따라 계산된다.

[0489] [수학적 식 1]

[0490]
$$\Delta E^*ab = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2}$$

[0491] (상기 수학적 식 1에서,

[0492] ΔL^* 는 23°C에서의 색 좌표 L^* 와 비교할 때 색 좌표 L^* 의 변화를 나타내고,

[0493] Δa^* 는 23°C에서의 색 좌표 a^* 와 비교할 때 색 좌표 a^* 의 변화를 나타내며,

[0494] Δb^* 는 23°C에서의 색 좌표 b^* 와 비교할 때 색 좌표 b^* 의 변화를 나타낸다.

[0495] 촬영렌즈로는 F값 2.8, 투과율 80%인 것을 사용하였고 적외선 컷트 필터로는 일반적인 간섭형 렌즈를 사용하였다. 이미지 센서의 화소 사이즈는 1.4 μm 로 하였고 프레임 레이트는 15fps로 하였다.

표 2

[0496]

유기 광전 소자	EQE (%) (at -3V)	Min. ΔE^*ab
실시예 1	68	3.5
실시예 2	62	2.5
실시예 3	76	3.9
실시예 4	74	3.0
실시예 5	74	3.0
비교예 1	60	4.0

[0497] 표 2에서 보는 바와 같이 실시예 1 내지 실시예 5에 따른 유기 광전 소자는 비교예 1의 유기 광전 소자에 비하여 외부 양자 효율이 우수함을 알 수 있다. 또한 실시예 1 내지 실시예 5에 따른 유기 광전 소자의 최소 색차 ΔE^*ab 는 3.9 이하로 비교예 1에 비하여 낮음을 알 수 있다.

[0498] **이미지 센서의 감도(YSNR10)**

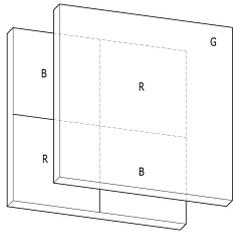
[0499] 상기 실시예 1, 2, 4 및 5에 따른 이미지 센서의 $\Delta E^*ab=3.5$ 일 때의 YSNR10 값을 2007년 International Image Sensor Workshop(Ogunquit Maine, USA)의 개요집에 기재된 Juha Alakarhu의 "Image Sensors and Image Quality in Mobile Phones"에 기재된 방법에 따라 측정하였다.

[0500] D-65의 조명광(표준광원) 밑에서 Macbeth 차트의 18% gray patch를 촬영했을 때의 YSNR10를 구하였다.

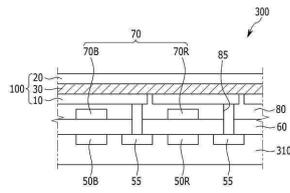
[0501] 촬영렌즈로는 F값 2.8, 투과율 80%인 것을 사용하였고 적외선 컷트 필터로는 일반적인 간섭형 렌즈를 사용하였다. 이미지 센서의 화소 사이즈는 1.4 μm 로 하였고 프레임 레이트는 15fps로 하였다.

[0502] CCM(Color Correction Matrix)으로 색보정하여 그 결과를 하기 표 3에 기재한다.

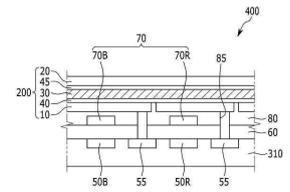
도면3



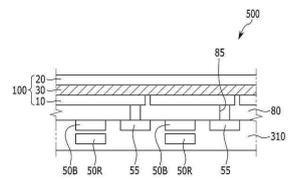
도면4



도면5



도면6



도면7

