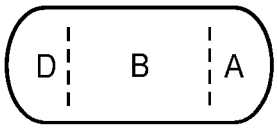
【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第７部門第２区分
【発行日】平成28年1月14日(2016.1.14)

【公表番号】特表2015-508568(P2015-508568A)
【公表日】平成27年3月19日(2015.3.19)
【年通号数】公開・登録公報2015-018
【出願番号】特願2014-547845(P2014-547845)
【国際特許分類】
*Ｈ０１Ｌ　51/50　(2006.01)*
*Ｈ０１Ｌ　51/46　(2006.01)*
*Ｈ０１Ｌ　29/786　(2006.01)*
*Ｈ０１Ｌ　51/05　(2006.01)*
*Ｈ０１Ｌ　51/30　(2006.01)*
【ＦＩ】
Ｈ０５Ｂ　33/14　Ｂ
Ｈ０１Ｌ　31/04　１５４Ｃ
Ｈ０１Ｌ　29/78　６１８Ｂ
Ｈ０１Ｌ　29/28　１００Ａ
Ｈ０１Ｌ　29/28　２５０Ｈ

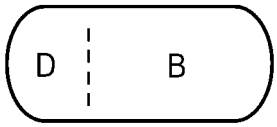
【手続補正書】
【提出日】平成27年11月13日(2015.11.13)
【手続補正１】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】００９５
【補正方法】変更
【補正の内容】
【００９５】
図１３：他のスピロ化合物の化学構造である。上段に記載の化合物は、室温下にかつｃ１重量％の濃度でＰＭＭＡにドープした時に、　５３０ｎｍでの発光最大を持って、自然発生的な蛍光及び熱活性化された蛍光を示す。両成分の発光量子収率は（５０±１０）％である。その下に示す構造式を持つ化合物も同様に熱活性化された蛍光を示す。
本願は、特許請求の範囲に係る発明に関するものであるが、本願の開示は以下も包含する。
１．
－　最低励起一重項状態（$S_1$）とその下にある三重項状態（$T_1$）との間のΔＥ（$S_1$－$T_1$）値が３０００ｃｍ$^{-1}$未満である、発光のための有機分子、及び
－　前記有機分子の項間交差時定数を３００ｍｓ未満に低めるための原子または分子、
を含む組成物。
２．
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子もしくはそれの一部が、１０００ｃｍ$^{-1}$超、好ましくは３０００ｃｍ$^{-1}$超、特に好ましくは４０００ｃｍ$^{-1}$超のスピン軌道相互作用定数を有する、上記１に記載の組成物。
３．
組成物中の有機分子が、２５００ｃｍ$^{-1}$未満、好ましくは１５００ｃｍ$^{-1}$未満、特に好ましくは１０００ｃｍ$^{-1}$未満の、最低励起一重項状態とその下にある三重項状態との間のΔＥ（$S_1$－$T_1$）値を有する、上記１または２に記載の組成物。
４．
有機分子が、

－芳香族二重結合、複素芳香族二重結合及び共役二重結合からなる群から選択される少なくとも一つの共役有機基と、
－電子供与作用を持つ少なくとも一つの化学的に結合したドナー基、及び／または
－電気吸引作用を持つ少なくとも一つの化学的に結合したアクセプター基、
を含む、上記１～３のいずれか一つに記載の組成物。
５．
有機分子が、式Ｉまたは式ＩＩもしくはＩＩＩの分子であり、
【化６】



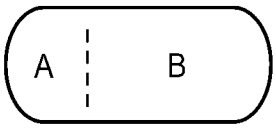

式Ｉ

【化７】




式ＩＩ

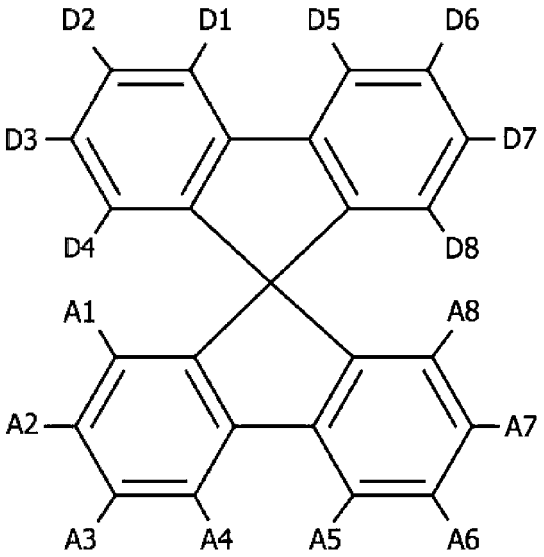
【化８】




式ＩＩＩ

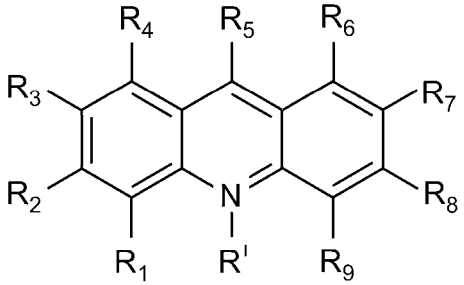
この際、
Ｄは、一つ、二つまたはそれ超の数で存在することができ、そして同一かまたは異なることができる、電子供与性を持つ化学基または置換基を意味し；
Ａは、一つ、二つまたはそれ超の数で存在することができ、そして同一かまたは異なることができる、電子吸引性を持つ化学基または置換基を意味し；
Ｂは、非共役基を含む基本骨格か、あるいは芳香族二重結合、複素芳香族二重結合及び／または共役二重結合からなる共役有機基から構成される基本骨格を意味する、
上記１～４のいずれか一つに記載の組成物。
６．
有機分子が、次式Ｖに従う分子であり、

【化９】




式Ｖ

式中、
Ｄ１～Ｄ８は、互いに独立して、Ｈ、Ｂｒ、Ｉ及び／またはドナーＤである基であり；
前記ドナー基は同一かまたは異なることができ；
少なくとも一つのドナー基が存在し；
この際、Ｄ１～Ｄ８のうちの隣接する$D_i$、$D_j$及び$D_k$は、任意選択的に、共役芳香族環または複素芳香族環であり、ここで前記環は、任意選択的に、ドナー官能基を含み；
Ａ１～Ａ８は、互いに独立して、Ｈ、Ｂｒ、Ｉ、及び／またはアクセプターＡである基であり；
この際、Ａ１～Ａ８のうちの隣接する$A_i$、$A_j$及び$A_k$は、任意選択的に、共役芳香族環または複素芳香族環であり、ここで前記環は、任意選択的に、アクセプター官能基を含み；
ここで、前記アクセプター基は、同一または異なり；　及び
少なくとも一つのアクセプター基が存在し；　及び
Ｂｒ及び／またはＩが、任意選択的に、アルキル基（Ｃ＝１または２）を介して式Ｖの有機分子に結合している、
上記１～５のいずれか一つに記載の組成物。
７．
　有機分子が、式ＩＶに従う分子であり、
【化１０】



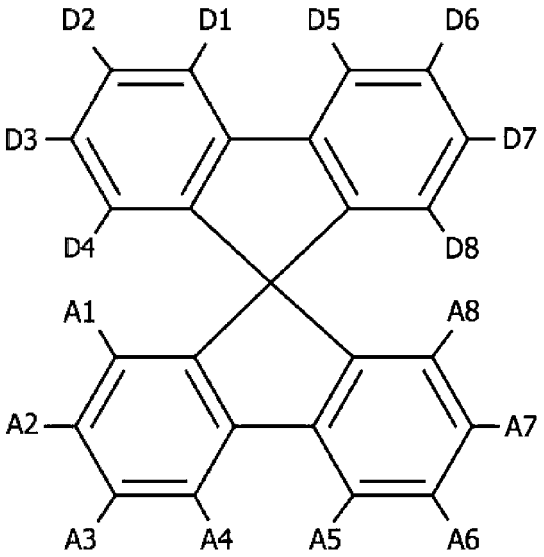

式ＩＶ

式中、

$R_1$～$R_9$は、Ｈ、Ｂｒ、Ｉ、及び／またはドナーＤ及び／もしくはアクセプターＡである基であり；
$R_1$～$R_9$のうちの隣接する$R_i$、$R_j$及び$R_k$は、任意選択的に、共役芳香族環または複素芳香族環であり、ここで前記環は、任意選択的に、ドナー官能基及び／またはアクセプター官能基を含み；
Ｂｒ及び／またはＩが、任意選択的に、アルキル基（Ｃ＝１または２）を介して芳香族基本骨格に結合しており；　及び
Ｒ’は、存在しないか、あるいはＨ、アルキル、Ｏ及びＳからなる群から選択される、
上記１～５のいずれか一つに記載の組成物。
８．
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子が、有機分子の発光領域及び／またはＨＯＭＯ／ＬＵＭＯ領域において吸収または発光を持たない、上記１～７のいずれか一つに記載の組成物。
９．
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子が、クリプトン希ガス及びキセノン希ガス、臭素含有物質、ヨウ素含有物質、金属原子、金属ナノ粒子、金属イオン、Ｇｄ錯体及び鉛錯体からなる群から選択される、上記１～８のいずれか一つに記載の組成物。
１０．
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される原子または分子と、エミッター分子との間の数比が１：０．１～１：５０である、上記１～９のいずれか一つに記載の組成物。
１１．
有機エミッター分子が、Ｔ＝３００Ｋにおいて、５００ｍｓ未満、好ましくは１ｍｓ未満、特に好ましくは１０μｓ未満、中でも特に好ましくは１μｓ未満の発光減衰時間を有する、上記１～１０のいずれか一つに記載の組成物。
１２．
有機分子の項間交差時定数を低めるための原子または分子が、有機分子と共有結合しており、及び項間交差時定数を低めるための、有機分子に共有結合した原子または分子が、スピン軌道相互作用を高める、上記１～１１のいずれか一つに記載の組成物。
１３．
有機分子の項間交差時定数を低めるための、有機分子と供給結合した原子または分子が、ヨウ素及び／または臭素である、上記１２に記載の組成物。
１４．
Ｔ＝３００Ｋで測定した時に、少なくとも３０％、好ましくは少なくとも５０％、特に好ましくは８０％超の発光量子収率を有する、上記１～１３のいずれか一つに記載の組成物。
１５．
有機分子が少なくとも一つの重水素原子を含む、上記１～１４のいずれか一つに記載の組成物。
１６．
有機分子がマトリックス中に埋設されているかまたはそれと架橋されており、この際、前記マトリックスは、任意選択的に、少なくとも一つの重水素原子を含む、上記１～１５のいずれか一つに記載の組成物。
１７．
マトリックスがポリマーマトリックスまたはポリマー架橋マトリックスであり、この際、前記マトリックスが有機分子と共有結合している、上記１～１６のいずれか一つに記載の組成物。
１８．
マトリックスが、スピン軌道相互作用を高め、それ故項間交差時定数を低める少なくと

も一つの共有結合した添加物質、特にＢｒ原子またはＩ原子を含む、上記１６または１７に記載の組成物。
１９．
特に光電子デバイスに使用するための、
－　グルコース及び／またはトレハロースを含むかあるいはグルコース及び／またはトレハロースからなるマトリックス、及び
－　上記１～１５のいずれか一つに記載の組成物、
を含む組成物。
２０．
－　グルコース及び／またはトレハロースを含むかあるいはグルコース及び／またはトレハロースからなるマトリックス、及び
－　上記１～１５のいずれか一つに記載の組成物、
を含む組成物の、光電子デバイスでの使用。
２１．
上記１～２０のいずれか一つに記載の組成物の、光電子デバイスにおけるエミッター層中での使用。
２２．
上記１～１９のいずれか一つに記載の組成物が使用される、光電子デバイスの製造方法。
２３．
上記１～１９のいずれか一つに記載の組成物を含む、光電子デバイス。
２４．
エミッター層中での組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして０．５重量％～１００重量％、好ましくは６～３０重量％である、上記２３に記載の光電子デバイス。
２５．
有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）の形の上記２３または２４に記載の光電子デバイスであって、上記１～１９のいずれか一つに記載の組成物を含むエミッター層を特徴とし、この際、エミッター層中での該組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして０．５重量％～１００重量％の間、好ましくは６～３０重量％の間である、光電子デバイス。
２６．
光電子デバイスが、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電子化学的セル（ＬＥＥＣまたはＬＥＣ）、ＯＬＥＤセンサー、特に外側に対し気密にシールされていないガスセンサー及び蒸気センサー、光学温度センサー、有機太陽電池（ＯＳＣ）、有機電界効果トランジスター、有機ダイオード、有機フォトダイオード、及び“ダウンコンバージョン”システムからなる群から選択される、上記２０または２１に記載の使用、上記２２に記載の方法、上記２３～２５の何れか一つに記載の光電子デバイス。
【手続補正２】
【補正対象書類名】特許請求の範囲
【補正対象項目名】全文
【補正方法】変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項１】
－　最低励起一重項状態（$S_1$）とその下にある三重項状態（$T_1$）との間のΔＥ（$S_1$－$T_1$）値が３０００ｃｍ$^{-1}$未満である、発光のための有機分子、及び
－　前記有機分子の項間交差時定数を３００ｍｓ未満に低めるための原子または分子、
を含む組成物であって、
有機分子が、次式Ｖに従う分子であり、

【化１】




式Ｖ

式中、
Ｄ１～Ｄ８は、互いに独立して、Ｈ、Ｂｒ、Ｉ及び／またはドナーＤである基であり；
前記ドナー基は同一かまたは異なることができ；
少なくとも一つのドナー基が存在し；
この際、Ｄ１～Ｄ８のうちの隣接する$D_i$、$D_j$及び$D_k$は、任意選択的に、共役芳香族環または複素芳香族環であり、ここで前記環は、任意選択的に、ドナー官能基を含み；
Ａ１～Ａ８は、互いに独立して、Ｈ、Ｂｒ、Ｉ、及び／またはアクセプターＡである基であり；
この際、Ａ１～Ａ８のうちの隣接する$A_i$、$A_j$及び$A_k$は、任意選択的に、共役芳香族環または複素芳香族環であり、ここで前記環は、任意選択的に、アクセプター官能基を含み；
ここで、前記アクセプター基は、同一かまたは異なることができ；　及び
少なくとも一つのアクセプター基が存在し；　及び
Ｂｒ及び／またはＩが、任意選択的に、アルキル基（Ｃ＝１または２）を介して式Ｖの有機分子に結合している、
前記組成物。

【請求項２】
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子もしくはそれの一部が、$10000\ cm^{-1}$超のスピン軌道相互作用定数を有する、請求項１に記載の組成物。

【請求項３】
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子もしくはそれの一部が、$3000\ cm^{-1}$超のスピン軌道相互作用定数を有する、請求項１に記載の組成物。

【請求項４】
組成物中の有機分子が、$2500\ cm^{-1}$未満の、最低励起一重項状態とその下にある三重項状態との間のΔＥ（$S_1-T_1$）値を有する、請求項１～３のいずれか一つに記載の組成物。

【請求項５】
組成物中の有機分子が、$1500\ cm^{-1}$未満の、最低励起一重項状態とその下にある三重項状態との間のΔＥ（$S_1-T_1$）値を有する、請求項１～３のいずれか一つに記載

の組成物。
【請求項６】
組成物中の有機分子が、１０００ｃｍ$^{-1}$未満の、最低励起一重項状態とその下にある三重項状態との間のΔＥ（Ｓ$_1$－Ｔ$_1$）値を有する、請求項１～３のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項７】
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子が、有機分子の発光領域及び／またはＨＯＭＯ／ＬＵＭＯ領域において吸収または発光を持たない、請求項１～６のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項８】
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される追加的な原子または分子が、クリプトン希ガス及びキセノン希ガス、臭素含有物質、ヨウ素含有物質、金属原子、金属ナノ粒子、金属イオン、Ｇｄ錯体及び鉛錯体からなる群から選択される、請求項１～７のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項９】
エミッター分子の項間交差時定数を低めるために使用される原子または分子と、エミッター分子との間の数比が１：０．１～１：５０である、請求項１～８のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１０】
有機エミッター分子が、Ｔ＝３００Ｋにおいて、５００ｍｓ未満の発光減衰時間を有する、請求項１～９のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１１】
有機エミッター分子が、Ｔ＝３００Ｋにおいて、１ｍｓ未満の発光減衰時間を有する、請求項１～９のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１２】
有機エミッター分子が、Ｔ＝３００Ｋにおいて、１０μｓ未満の発光減衰時間を有する、請求項１～９のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１３】
有機分子の項間交差時定数を低めるための原子または分子が、有機分子と共有結合しており、及び項間交差時定数を低めるための、有機分子に共有結合した原子または分子が、スピン軌道相互作用を高める、請求項１～１２のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１４】
有機分子の項間交差時定数を低めるための、有機分子と供給結合した原子または分子が、ヨウ素及び／または臭素である、請求項１３に記載の組成物。
【請求項１５】
Ｔ＝３００Ｋで測定した時に、少なくとも３０％の発光量子収率を有する、請求項１～１４のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１６】
Ｔ＝３００Ｋで測定した時に、少なくとも５０％の発光量子収率を有する、請求項１～１４のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１７】
有機分子が少なくとも一つの重水素原子を含む、請求項１～１６のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１８】
有機分子がマトリックス中に埋設されているかまたはそれと架橋されており、この際、前記マトリックスは、任意選択的に、少なくとも一つの重水素原子を含む、請求項１～１７のいずれか一つに記載の組成物。
【請求項１９】
マトリックスがポリマーマトリックスまたはポリマー架橋マトリックスであり、この際、前記マトリックスが有機分子と共有結合している、請求項１～１８のいずれか一つに記

載の組成物。
【請求項２０】
マトリックスが、スピン軌道相互作用を高め、それ故項間交差時定数を低める少なくとも一つの共有結合した添加物質を含む、請求項１８または１９に記載の組成物。
【請求項２１】
少なくとも一つの共有結合した添加物質がＢｒ原子またはＩ原子である、請求項２０に記載の組成物。
【請求項２２】
－　グルコース及び／またはトレハロースを含むかあるいはグルコース及び／またはトレハロースからなるマトリックス、及び
－　請求項１～１７のいずれか一つに記載の組成物、
を含む組成物。
【請求項２３】
－　グルコース及び／またはトレハロースを含むかあるいはグルコース及び／またはトレハロースからなるマトリックス、及び
－　請求項１～１７のいずれか一つに記載の組成物、
を含む組成物の、光電子デバイスでの使用。
【請求項２４】
請求項１～２２のいずれか一つに記載の組成物の、光電子デバイスにおけるエミッター層中での使用。
【請求項２５】
光電子デバイスが、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電子化学的セル（ＬＥＥＣまたはＬＥＣ）、ＯＬＥＤセンサー、光学温度センサー、有機太陽電池（ＯＳＣ）、有機電界効果トランジスター、有機ダイオード、有機フォトダイオード、及び“ダウンコンバージョン”システムからなる群から選択される、請求項２３または２４に記載の使用。
【請求項２６】
請求項１～２２のいずれか一つに記載の組成物が使用される、光電子デバイスの製造方法。
【請求項２７】
光電子デバイスが、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電子化学的セル（ＬＥＥＣまたはＬＥＣ）、ＯＬＥＤセンサー、光学温度センサー、有機太陽電池（ＯＳＣ）、有機電界効果トランジスター、有機ダイオード、有機フォトダイオード、及び“ダウンコンバージョン”システムからなる群から選択される、請求項２６に記載の方法。
【請求項２８】
請求項１～２２のいずれか一つに記載の組成物を含む、光電子デバイス。
【請求項２９】
エミッター層中での組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして０．５重量％～１００重量％である、請求項２８に記載の光電子デバイス。
【請求項３０】
エミッター層中での組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして６～３０重量％である、請求項２８に記載の光電子デバイス。
【請求項３１】
有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）の形の請求項２８～３０のいずれか一つに記載の光電子デバイスであって、請求項１～２２のいずれか一つに記載の組成物を含むエミッター層を特徴とし、この際、エミッター層中での該組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして０．５重量％～１００重量％の間である、光電子デバイス。
【請求項３２】
エミッター層中での該組成物の割合が、エミッター層の総重量を基準にして６～３０重量％の間である、請求項３１に記載の光電子デバイス。
【請求項３３】

光電子デバイスが、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電子化学的セル（ＬＥＥＣまたはＬＥＣ）、ＯＬＥＤセンサー、光学温度センサー、有機太陽電池（ＯＳＣ）、有機電界効果トランジスター、有機ダイオード、有機フォトダイオード、及び“ダウンコンバージョン”システムからなる群から選択される、請求項２８～３２のいずれか一つに記載の光電子デバイス。