

【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 27 年 11 月 5 日 (2015.11.5)

【公開番号】特開 2015-144224 (P2015-144224A)

【公開日】平成 27 年 8 月 6 日 (2015.8.6)

【年通号数】公開・登録公報 2015-050

【出願番号】特願 2014-52133 (P2014-52133)

【国際特許分類】

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【F I】

H 0 5 B 33/14 B

C 0 9 K 11/06 6 9 0

【手続補正書】

【提出日】平成 27 年 9 月 14 日 (2015.9.14)

【手続補正 1】

【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】

陽極と、

発光層と、

陰極と、を含み、

前記発光層は、第一の材料、第二の材料および第三の材料を含み、

前記第一の材料は、蛍光発光性の発光材料であり、

前記第二の材料は、遅延蛍光発光性の材料であり、

前記第三の材料の一重項エネルギーは、前記第二の材料の一重項エネルギーよりも大きく、

前記第二の材料の $\Gamma\Gamma[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g\Gamma\Gamma K}(M2)$ は、前記第一の材料の $\Gamma\Gamma[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g\Gamma\Gamma K}(M1)$ よりも大きく、

前記第三の材料の $\Gamma\Gamma[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g\Gamma\Gamma K}(M3)$ は、前記第二の材料の $\Gamma\Gamma[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g\Gamma\Gamma K}(M2)$ よりも大きい有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2】

請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二の材料の一重項エネルギー $E_{gS}(M2)$ は、前記第一の材料の一重項エネルギー $E_{gS}(M1)$ よりも大きい有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3】

請求項 1 または請求項 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二の材料の一重項エネルギー $E_{gS}(M2)$ と、前記第二の材料の $\Gamma\Gamma[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g\Gamma\Gamma K}(M2)$ との差 $ST(M2)$ が、下記数式 (数 1) の関係を満たしている有機エレクトロルミネッセンス素子。

$ST(M2) = E_{gS}(M2) - E_{g\Gamma\Gamma K}(M2) < 0.3 [eV] \quad \dots (数 1)$

【請求項 4】

請求項 1 から請求項 3 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子

において、

前記第一の材料の一重項エネルギー $E_{gS}(M1)$ と、前記第一の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g77K}(M1)$ との差 $ST(M1)$ が、下記数式(数2)の関係を満たしている有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$ST(M1) = E_{gS}(M1) - E_{g77K}(M1) > 0.3 [eV] \quad \dots (数2)$$

【請求項5】

請求項1から請求項4までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料の一重項エネルギー $E_{gS}(M3)$ と、前記第三の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g77K}(M3)$ との差 $ST(M3)$ が、下記数式(数3)の関係を満たしている有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$ST(M3) = E_{gS}(M3) - E_{g77K}(M3) > 0.3 [eV] \quad \dots (数3)$$

【請求項6】

請求項1から請求項5までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料のイオン化ポテンシャル $I_p(M3)$ と、前記第二の材料のイオン化ポテンシャル $I_p(M2)$ とが下記数式(数4)の関係を満たしている有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$I_p(M3) - I_p(M2) > 0.3 [eV] \quad \dots (数4)$$

【請求項7】

請求項1から請求項6までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g77K}(M3)$ は、 $2.9 eV$ 以上である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項8】

請求項1から請求項7までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料のイオン化ポテンシャル $I_p(M3)$ は、 $6.3 eV$ 以上である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項9】

請求項1から請求項8までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料の電子親和力 $A_f(M3)$ は、 $2.8 eV$ 以上である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

請求項1から請求項9までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

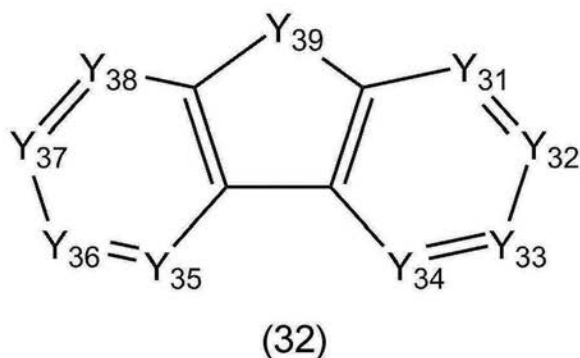
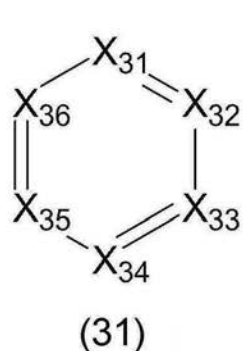
前記第三の材料は、芳香族炭化水素化合物、又は芳香族複素環化合物である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項11】

請求項1から請求項10までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料は、一つの分子中に下記一般式(31)で表される部分構造および下記一般式(32)で表される部分構造の内少なくともいずれかを含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1】



(前記一般式(31)において、 $X_{31} \sim X_{36}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、ただし、 $X_{31} \sim X_{36}$ の内少なくともいずれかは、前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

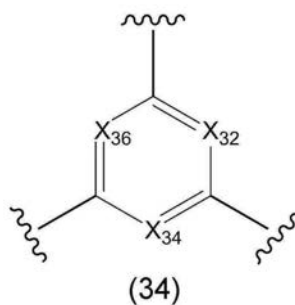
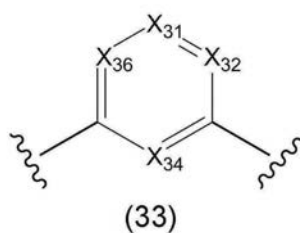
前記一般式(32)において、 $Y_{31} \sim Y_{38}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、ただし、 $Y_{31} \sim Y_{38}$ の内少なくともいずれかは、前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、 Y_{39} は、窒素原子、酸素原子、または硫黄原子である。)

【請求項 12】

請求項11に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記一般式(31)で表される部分構造は、下記一般式(33)および下記一般式(34)からなる群から選択される少なくともいずれかの基として前記第三の材料に含まれる有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 2】



(前記一般式(33)および前記一般式(34)において、 X_{31} , X_{32} , X_{34} , X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

R_{31} は、水素原子または置換基であり、この R_{31} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、

置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基からなる群から選択される置

換基であり、ただし、前記 R_{31} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

前記一般式 (33) および前記一般式 (34) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。)

【請求項 13】

請求項 12 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 R_{31} は、水素原子または置換基であり、この R_{31} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

請求項 12 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 R_{31} は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

請求項 12 から請求項 14 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

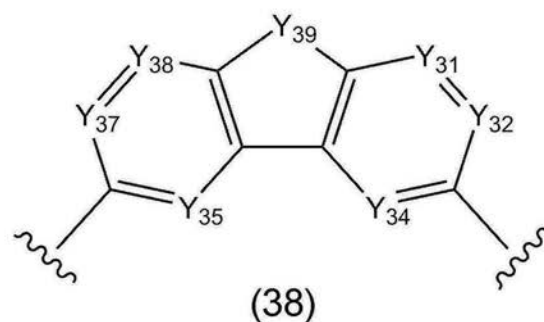
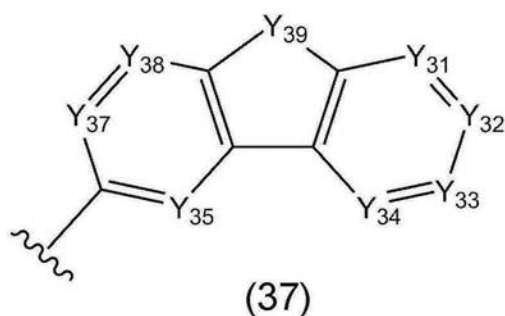
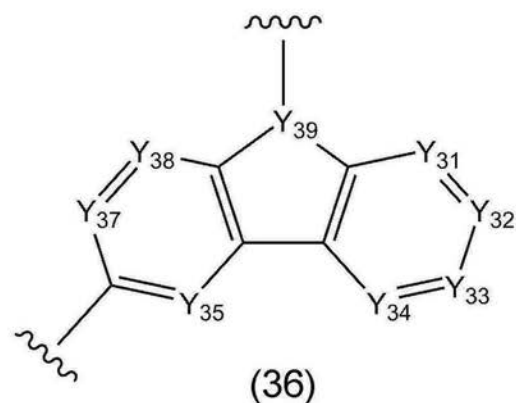
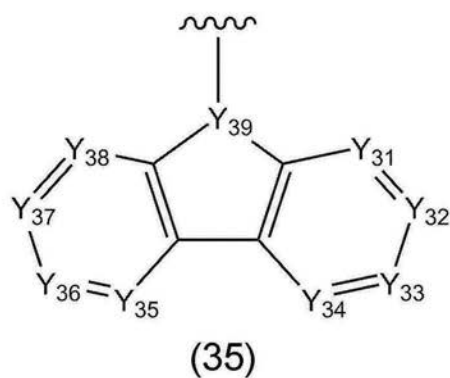
前記 X_{31} , 前記 X_{32} , 前記 X_{34} , 前記 X_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 16】

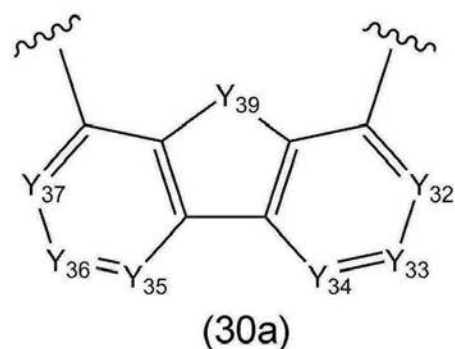
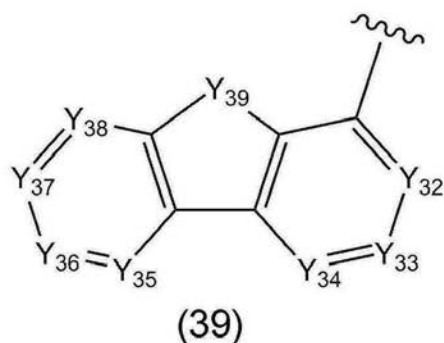
請求項 11 から請求項 15 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記一般式 (32) で表される部分構造は、下記一般式 (35) , 下記一般式 (36) , 下記一般式 (37) , 下記一般式 (38) , 下記一般式 (39) , および下記一般式 (30a) からなる群から選択される少なくともいずれかの基として前記第三の材料に含まれる有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 3】



【化 4】



(前記一般式(35)~(39), (30a)において、

$Y_{31} \sim Y_{38}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{32} であり、

R_{32} は、水素原子または置換基であり、この R_{32} における置換基は、ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、

置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{32} における置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30の

芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

前記一般式(35)～(36)において、 Y_{39} は、窒素原子であり、

前記一般式(37)～(39)、(30a)において、 Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、置換基であり、この R_{33} における置換基は、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数3～50のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{33} における置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

前記一般式(35)～(39)、(30a)において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。))

【請求項17】

請求項16に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 R_{32} は、水素原子または置換基であり、この R_{32} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{32} における置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基は、非縮合環である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項18】

請求項16に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 R_{32} は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項19】

請求項16から請求項18までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記一般式(35)において、 $Y_{31} \sim Y_{38}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であり、

前記一般式(36)および前記一般式(37)において、 $Y_{31} \sim Y_{35}$ 、 Y_{37} 、 Y_{38} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であり、

前記一般式(38)において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、 Y_{35} 、 Y_{37} 、 Y_{38} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であり、

前記一般式(39)において、 $Y_{32} \sim Y_{38}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であり、

前記一般式(30a)において、 $Y_{32} \sim Y_{37}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} である有機エレクトロルミネッセンス素子。

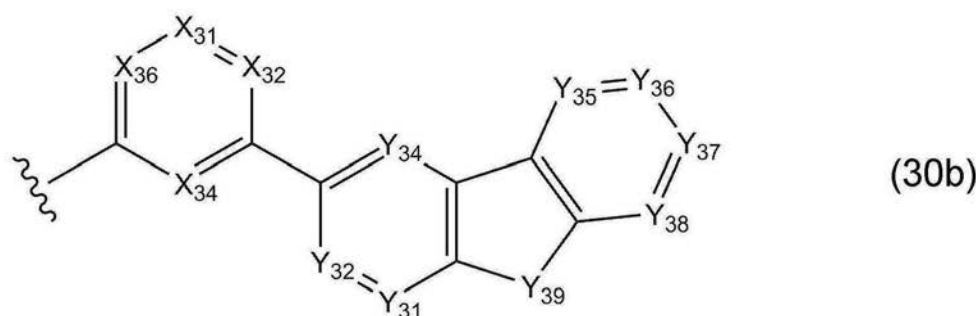
【請求項20】

請求項11から請求項19までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料は、下記一般式(30b)で表される基を含む有機エレクトロルミネッ

センス素子。

【化 5】



(前記一般式(30b)において、

X_{31} , X_{32} , X_{34} , X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

Y_{31} , Y_{32} , $Y_{34} \sim Y_{38}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、 CR_{32} 、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

R_{31} および R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{31} および R_{32} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、

置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} および前記 R_{32} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、置換基であり、この R_{33} における置換基は、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{33} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

X_{32} と Y_{34} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{51}R_{52}$ を介して架橋されている、

X_{34} と Y_{32} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{53}R_{54}$ を介して架橋されている、

$R_{51} \sim R_{54}$ は、それぞれ独立に、前記 R_{33} における置換基と同義であり、

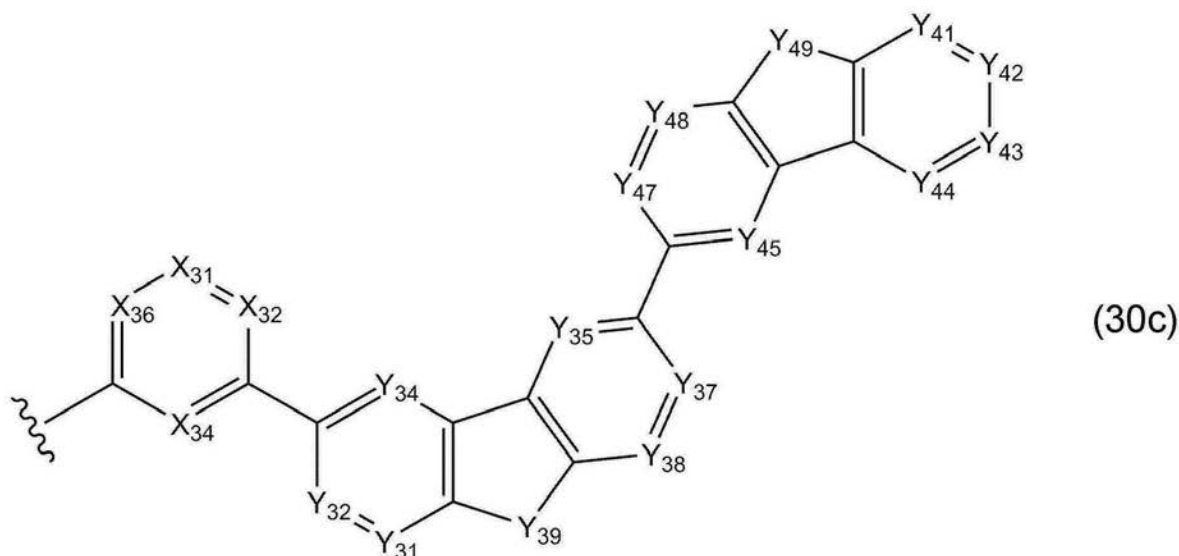
前記一般式(30b)において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。))

【請求項21】

請求項11から請求項20までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料は、下記一般式(30c)で表される基を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化6】



(前記一般式(30c)において、

X_{31} , X_{32} , X_{34} , X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

Y_{31} , Y_{32} , Y_{34} , Y_{35} , Y_{37} , Y_{38} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{32} であり、

$Y_{41} \sim Y_{45}$, Y_{47} , Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子、 CR_{34} 、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

R_{31} , R_{32} , R_{34} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{31} , R_{32} , R_{34} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、

置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} , 前記 R_{32} , 前記 R_{34} における置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

Y_{49} は、 NR_{35} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} , R_{35} は、それぞれ独立に、置換基であり、この R_{33} , R_{35} における置換基は、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルシリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{33} , 前記 R_{35} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

X_{32} と Y_{34} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{51}R_{52}$ を介して架橋されていてもよく、

X_{34} と Y_{32} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{53}R_{54}$ を介して架橋されていてもよく、

$R_{51} \sim R_{54}$ は、それぞれ独立に、前記 R_{33} , R_{35} における置換基と同義であり、

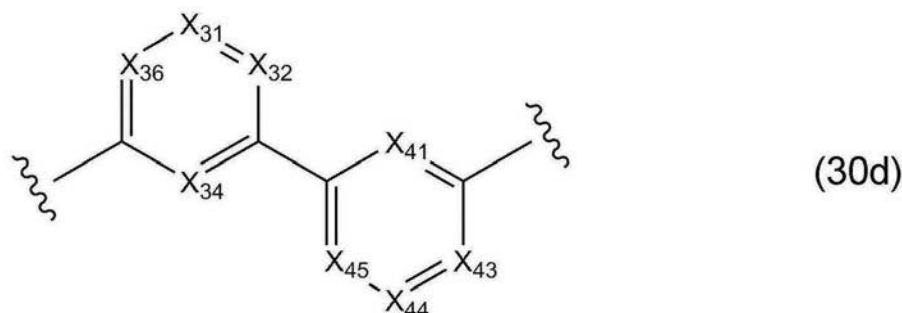
前記一般式 (30c) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。))

【請求項 22】

請求項 11 から請求項 21 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネセンス素子において、

前記第三の材料は、下記一般式 (30d) で表される基を含む有機エレクトロルミネセンス素子。

【化 7】



(前記一般式 (30d) において、

X_{31} , X_{32} , X_{34} , X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

X_{41} , X_{43} , X_{44} , X_{45} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{36} であり、

R_{31} , R_{36} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{31} , R_{36} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリアルアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリアルシリル基、

置換もしくは無置換のジアリアルホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} 、前記 R_{36} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

X_{32} と X_{41} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{55}R_{56}$ を介して架橋されているように、

X_{34} と X_{45} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{57}R_{58}$ を介して架橋されているように、

$R_{55} \sim R_{58}$ は、それぞれ独立に、置換基であり、この $R_{55} \sim R_{58}$ における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 $R_{55} \sim R_{58}$ における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

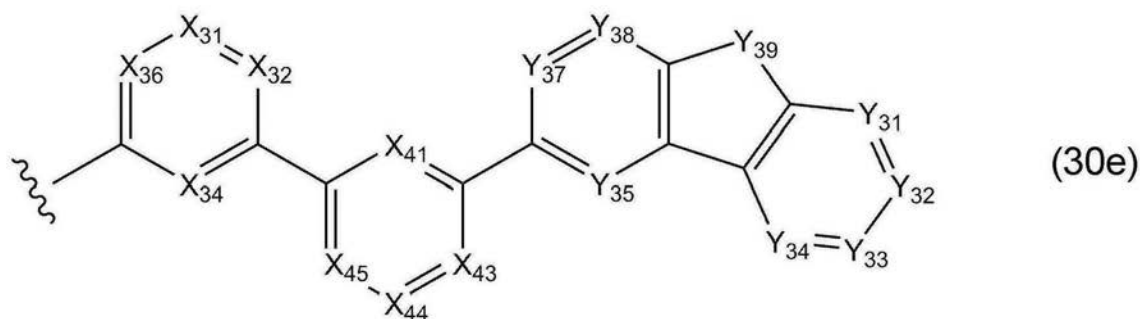
前記一般式 (30d) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。))

【請求項 23】

請求項 11 から請求項 22 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料は、下記一般式 (30e) で表される基を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 8】



(前記一般式 (30e) において、

X_{31} 、 X_{32} 、 X_{34} 、 X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

X_{41} 、 X_{43} 、 X_{44} 、 X_{45} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{36} であり、

$Y_{31} \sim Y_{35}$ 、 Y_{37} 、 Y_{38} は、それぞれ独立に、窒素原子、 CR_{32} 、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

R_{31} 、 R_{32} 、 R_{36} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{31}

1, R_{32} , R_{36} における置換基は、
ハロゲン原子、
シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、
置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、
置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、
置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} , 前記 R_{32} , 前記 R_{36} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、置換基であり、この R_{33} における置換基は、
シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{33} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

X_{32} と X_{41} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{55}R_{56}$ を介して架橋されているように、

X_{34} と X_{45} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{57}R_{58}$ を介して架橋されているように、

X_{41} と Y_{37} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{59}R_{60}$ を介して架橋されているように、

X_{43} と Y_{35} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{61}R_{62}$ を介して架橋されているように、

$R_{55} \sim R_{62}$ は、それぞれ独立に、前記 R_{33} における置換基と同義であり、

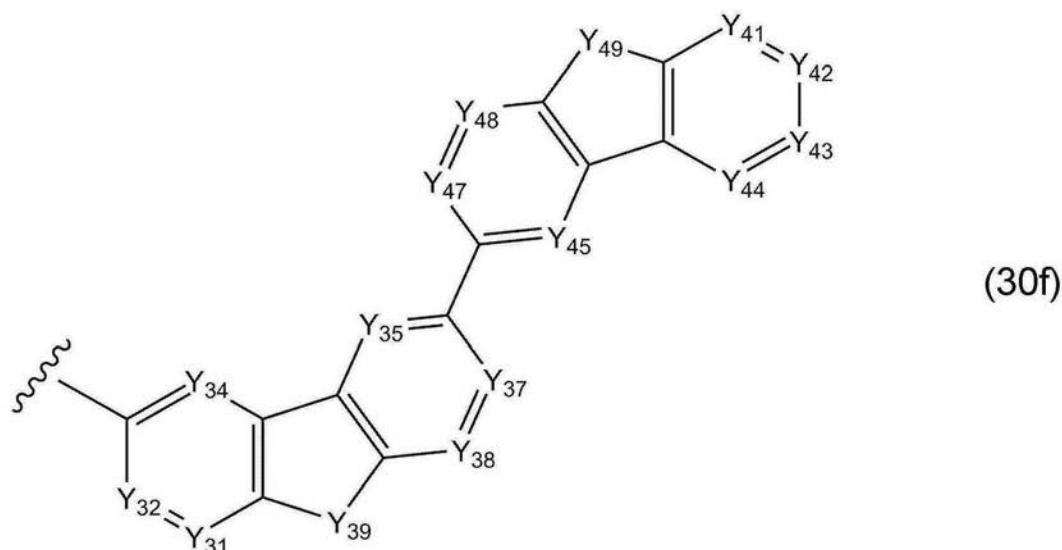
前記一般式 (30e) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。))

【請求項 24】

請求項 11 から請求項 23 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネセンス素子において、

前記第三の材料は、下記一般式 (30f) で表される基を含む有機エレクトロルミネセンス素子。

【化 9】



(前記一般式(30f)において、

Y_{31} , Y_{32} , Y_{34} , Y_{35} , Y_{37} , Y_{38} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{32} であり、

$Y_{41} \sim Y_{45}$, Y_{47} , Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子、 CR_{34} 、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

R_{32} , R_{34} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{32} , R_{34} における置換基は、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、

置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、

置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{32} , 前記 R_{34} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

Y_{49} は、 NR_{35} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} , R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{33} , R_{35} における置換基は、

シアノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R₃₃, 前記 R₃₅ における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

前記一般式 (30f) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。)

【請求項 25】

請求項 11、請求項 20、または請求項 23 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 Y₃₉ は、酸素原子、または硫黄原子である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 26】

請求項 11、請求項 20、または請求項 23 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 Y₃₉ は、酸素原子である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 27】

請求項 21、または請求項 24 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 Y₃₉ および前記 Y₄₉ は、それぞれ独立に、酸素原子、または硫黄原子である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 28】

請求項 21、または請求項 24 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記 Y₃₉ および前記 Y₄₉ は、酸素原子である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 29】

請求項 1 から請求項 28 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第三の材料は、分子中に縮合芳香族炭化水素環を有していない有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 30】

請求項 1 から請求項 29 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層は、燐光発光性の金属錯体を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 31】

請求項 1 から請求項 30 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の材料は、主ピーク波長が 550 nm 以下の蛍光発光を示す有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 32】

請求項 1 から請求項 31 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の材料は、主ピーク波長が 480 nm 以下の蛍光発光を示す有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 33】

請求項 1 から請求項 32 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の材料は、ピレン誘導体、アミノアントラセン誘導体、アミノクリセン誘導体、アミノピレン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体、およびスチリルアミン誘導体からなる群から選ばれた少なくとも 1 種の化合物である有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 34】

請求項 1 から請求項 33 までのいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0004

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0004】

例えば、TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence、熱活性化遅延蛍光) 機構が研究されている。この TADF 機構は、一重項準位と三重項準位とのエネルギー差 (ST) の小さな材料を用いた場合に、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が熱的に生じる現象を利用するものである。熱活性遅延蛍光については、例えば、『安達千波矢編、「有機半導体のデバイス物性」、講談社、2012年3月22日、261-262ページ』に記載されている。

この TADF 機構を利用した有機 EL 素子が、例えば、特許文献 1～3 に開示されている。

特許文献 1 には、ST が小さい化合物をホスト材料として含有し、蛍光発光性の化合物をドーパント材料として含有した発光層を備える有機 EL 素子が開示されている。特許文献 1 によれば、ST が小さい化合物をホスト材料として用い、このホスト材料にて TADF 機構を発現させることで、内部量子効率が向上する旨が記載されている。

特許文献 2 や特許文献 3 にも、特定の化合物をホスト材料として含有し、蛍光発光性の化合物をドーパント材料として含有した発光層を備える有機 EL 素子が開示されている。特許文献 2 や特許文献 3 によれば、特許文献 1 と同様、TADF 機構を利用して、有機 EL 素子の性能向上を図っている。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0008

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0008】

本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極と、発光層と、陰極と、を含み、前記発光層は、第一の材料、第二の材料および第三の材料を含み、前記第一の材料は、蛍光発光性の発光材料であり、前記第二の材料は、遅延蛍光発光性の材料であり、前記第三の材料の一重項エネルギーは、前記第二の材料の一重項エネルギーよりも大きく、前記第二の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g,77K}(M2)$ は、前記第一の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g,77K}(M1)$ よりも大きく、前記第三の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g,77K}(M3)$ は、前記第二の材料の $77[K]$ におけるエネルギーギャップ $E_{g,77K}(M2)$ よりも大きい。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0032

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0032】

前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキル基としては、それぞれ独立に、炭素数が 1～10 であるアルキル基が好ましく、炭素数が 1～5 であるアルキル基がより好ましい。前記 Ar_1 および Ar_2 におけるアルキル基としては、メチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 s -ブチル基、 t -ブチル基、ペンチル基 (異性体を含む)、ヘキシル基 (異性体を含む)、ヘプチル基 (異性体を含む)、オクチル基 (異性体を含む)、ノニル基 (異性体を含む)、デシル基 (異性体を含む)、ウンデシル基 (異性体を含む)、及びドデシル基 (異性体を含む) 等が挙げられ

、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、及びペンチル基（異性体を含む）が好ましく、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、及び*t*-ブチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基及び*t*-ブチル基が特に好ましい。

前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキル基としては、それぞれ独立に、環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基であってもよい。前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるシクロアルキル基としては、それぞれ独立に、環形成炭素数が 3 ~ 6 のシクロアルキル基が好ましく、環形成炭素数が 5 又は 6 のシクロアルキル基がより好ましい。前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンチル基などが挙げられ、シクロペンチル基、シクロヘキシル基が好ましい。

前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルケニル基としては、それぞれ独立に、炭素数が 2 ~ 20 であるアルケニル基が好ましく、炭素数 2 ~ 10 であるアルケニル基がより好ましい。前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルケニル基としては、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1,3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、1-メチルアリル基、1,1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1,2-ジメチルアリル基等が挙げられる。

置換のアルケニル基としては、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2-ジフェニルビニル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3,3-ジフェニルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられる。

前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキニル基としては、それぞれ独立に、炭素数が 2 ~ 20 であるアルキニル基が好ましく、炭素数 2 ~ 10 であるアルキニル基がより好ましい。前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキニル基としては、プロパルギル基、3-ペンチニル基等が挙げられる。

【**手続補正 5**】

【**補正対象書類名**】明細書

【**補正対象項目名**】0035

【**補正方法**】変更

【**補正の内容**】

【**0035**】

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての炭素数 1 ~ 50 のアルキル基は、前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキル基として説明したものと同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての炭素数 2 ~ 20 のアルケニル基は、前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルケニル基として説明したものと同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての炭素数 2 ~ 20 のアルキニル基は、前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるアルキニル基として説明したものと同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基は、前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 におけるシクロアルキル基として説明したものと同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素基は、前記 Ar_1 、 Ar_2 および Ar_3 における芳香族炭化水素基として説明したものと同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としての環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基は、環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素基と、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基とを有し、このアルキル基部分の具体例は、上述のアルキル基と同様であり、芳香族炭化水素基

部分の具体例は、上述の芳香族炭化水素基と同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としてのモノアルキルアミノ基又はジアルキルアミノ基において、アルキル基部分の具体例は、上述のアルキル基と同義である。

“置換もしくは無置換”というときの置換基としてのモノアリールアミノ基又はジアリールアミノ基において、アリール基（芳香族炭化水素基）部分の具体例は、上述の芳香族炭化水素基と同義である。

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0042

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0042】

・遅延蛍光発光性

遅延蛍光（熱活性化遅延蛍光）については、「有機半導体のデバイス物性」（安達千波矢編、講談社発行）の261～268ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 E_{13} を小さくすることができれば、通常は遷移確率が低い励起三重項状態から励起一重項状態への逆エネルギー移動が高効率で生じ、熱活性化遅延蛍光（Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF）が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図10.38で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。本実施形態における第二の材料は、このようなメカニズムで発生する熱活性遅延蛍光を示す化合物である。

遅延蛍光の発光は過渡PL測定により確認できる。

【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0094

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0094】

前記一般式(2y)における $R_{11} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2e)における $R_1 \sim R_9$ と同義である。

ただし、 $R_{11} \sim R_{19}$ のうち少なくともいずれかは、前記第二の材料の分子中における他の原子と結合する単結合である。

前記一般式(2y)において、 $R_{11} \sim R_{19}$ から選ばれる置換基同士の組み合わせのうち少なくとも1組は、互いに結合して、環構造を構築していてもよい。

前記一般式(2y)において、AおよびBは、それぞれ独立に、下記一般式(2g)で表される環構造、または下記一般式(2h)で表される環構造を示し、環構造Aおよび環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合している。

p_x は、環構造Aの数であり、0以上4以下の整数である。 p_x が2以上4以下の整数の場合、複数の環構造Aは、互いに同一でも異なってもよい。 p_y が2以上4以下の整数の場合、複数の環構造Bは、互いに同一でも異なってもよい。 p_y は、環構造Bの数であり、0以上4以下の整数である。したがって、例えば、 p_x が2のとき、2つの環構造Aは、下記一般式(2g)で表される環構造が2つでもよいし、下記一般式(2h)で表される環構造が2つでもよいし、下記一般式(2g)で表される環構造を1つと、下記一般式(2h)で表される環構造を1つとの組み合わせでもよい。

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0165

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 6 5 】

(前記一般式 (3 0 e) において、

X_{31} , X_{32} , X_{34} , X_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{31} であり、

X_{41} , X_{43} , X_{44} , X_{45} は、それぞれ独立に、窒素原子、または CR_{36} であり、

$Y_{31} \sim Y_{35}$, Y_{37} , Y_{38} は、それぞれ独立に、窒素原子、 CR_{32} 、または前記第三の材料の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

R_{31} , R_{32} , R_{36} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、この R_{31} , R_{32} , R_{36} における置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基、置換もしくは無置換のアリールアルキルシリル基、置換もしくは無置換のトリアリールシリル基、置換もしくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{31} , 前記 R_{32} , 前記 R_{36} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

Y_{39} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、置換基であり、この R_{33} における置換基は、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、および置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基からなる群から選択される置換基であり、ただし、前記 R_{33} における置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基は、非縮合環であり、

X_{32} と X_{41} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{55}R_{56}$ を介して架橋されているように、

X_{34} と X_{45} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{57}R_{58}$ を介して架橋されているように、

X_{41} と Y_{37} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{59}R_{60}$ を介して架橋されているように、

X_{43} と Y_{35} とは、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{61}R_{62}$ を介して架橋されているように、

$R_{55} \sim R_{62}$ は、それぞれ独立に、前記 R_{33} における置換基と同義であり、

前記一般式 (3 0 e) において、波線部分は、前記第三の材料の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。)

【 手続補正 9 】

【 補正対象書類名 】 明細書

【 補正対象項目名 】 0 1 8 7

【 補正方法 】 変更

【 補正の内容 】

【 0 1 8 7 】

また、 R_1 、 R_a 、 Ar_1 、 Ar_2 、 Ar_3 、 Ar_4 が置換基を有する場合、それらの置換基は、置換若しくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換若しくは無置換のトリアルキルシリル基、置換若しくは無置換のアリールアルキルシリル基、置換若しくは無置換のトリアリールシリル基、置換若しくは無置換のジアリールホスフィンオキシド基、置換若しくは無置換の

環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の芳香族複素環基等であり、好ましくは、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の芳香族複素環基であり、芳香族炭化水素環基の具体例としては、フェニル基、トリル基、キシリル基、ナフチル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ [c] フェナントリル基、ベンゾ [g] クリセニル基、ベンゾアントリル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9 - ジメチルフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、フルオランテニル基等が挙げられ、芳香族複素環基の具体例としては、ピロリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ピリジル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾ [1, 2 - a] ピリジニル基、フリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、ナフチリジニル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、フラザニル基、ベンズオキサゾリル基、チエニル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンズチアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基等が挙げられる。

発光層を青色で発光させる有機 EL 素子の場合には、第三の材料における置換基としての芳香族複素環基は、非縮合芳香族複素環基であることが好ましい。

【手続補正 10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0202

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0202】

・三重項エネルギーと 77 [K] におけるエネルギーギャップとの関係

ここで、三重項エネルギーと 77 [K] におけるエネルギーギャップとの関係について説明する。本実施形態では、77 [K] におけるエネルギーギャップは、通常定義される三重項エネルギーとは異なる点がある。

測定対象となる第一の材料および第三の材料に関しては、三重項エネルギーの測定は、次のようにして行われる。測定対象となる化合物を EPA (ジエチルエーテル : イソペンタン : エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) 中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸 : 燐光発光強度、横軸 : 波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ に基づいて、次の換算式 1 から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ $E_{\text{g}_{77\text{K}}}$ とした。

換算式 1 : $E_{\text{g}_{77\text{K}}} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$

燐光の測定には、(株)日立ハイテクノロジ製の F - 4500 形分光蛍光光度計本体を用いた。なお、燐光測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。

燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ (つまり縦軸が増加するにつれ)、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線 (すなわち変曲点における接線) が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の 15 % 以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値

をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

測定対象となる第二の材料に関しては、三重項エネルギーの測定は、次のようにして行われる。測定対象となる化合物（第二の材料）と、化合物TH-2とを石英基板上に共蒸着し、NMR管内に封入した試料を作製する。なお、この試料は、下記の条件にて作られたものである。

石英基板 / TH-2 : 第二の材料（膜厚 100 nm , 第二の材料濃度 : 12 質量 %）

この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] に基づいて、次の換算式 2 から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ $E_{g, 77 K}$ とした。

$$\text{換算式 2 : } E_{g, 77 K} [eV] = 1239.85 / \lambda_{edge}$$

燐光の測定には、（株）日立ハイテクノロジーズ製の F-4500 形分光蛍光光度計本体を用いた。なお、燐光測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。

燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は、第一の材料および第三の材料の燐光スペクトルにおける接線の引き方と同様に引く。

ここで、本実施形態に用いる第二の材料としては、ST が小さい化合物であることが好ましい。ST が小さいと、低温（77 [K]）状態でも、項間交差、及び逆項間交差が起こりやすく、励起一重項状態と励起三重項状態とが混在する。その結果、上記と同様に測定されるスペクトルは、励起一重項状態および励起三重項状態の両者からの発光を含んだものとなり、いずれの状態から発光したものかについて峻別することは困難であるが、基本的には三重項エネルギーの値が支配的と考えられる。

そのため、本実施形態では、通常の三重項エネルギー E_g と測定手法は同じであるが、その厳密な意味において異なることを区別するため、次のようにして測定される値をエネルギーギャップ $E_{g, 77 K}$ と称する。

【手続補正 11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0254

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0254】

・ 77 [K] におけるエネルギーギャップ $E_{g, 77 K}$

測定対象となる第一の材料および第三の材料に関しては、三重項エネルギーの測定は、次のようにして行った。ここでは、化合物MT-1および化合物MT-3を測定対象とした。測定対象となる化合物をEPA（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール = 5 : 5 : 2（容積比））中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] に基づいて、次の換算式 1 から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ $E_{g, 77 K}$ とした。

$$\text{換算式 1 : } E_{g, 77 K} [eV] = 1239.85 / \lambda_{edge}$$

測定対象となる第二の材料に関しては、三重項エネルギーの測定は、次のようにして行った。ここでは、化合物MT-2を測定対象とした。測定対象となる化合物（第二の材料）と、化合物TH-2とを石英基板上に共蒸着し、NMR管内に封入した試料を作製した。なお、この試料は、下記の条件にて作製したものである。

石英基板 / TH-2 : 第二の材料（膜厚 100 nm , 第二の材料濃度 : 12 質量 %）

この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接

線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ に基づいて、次の換算式 2 から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ $E_{\text{g}_{77\text{K}}}$ とした。

$$\text{換算式 2 : } E_{\text{g}_{77\text{K}}} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

燐光の測定には、(株)日立ハイテクノロジー製の F-4500 形分光蛍光光度計本体を用いた。

【手続補正 12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0258

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0258】

・遅延蛍光発光性

遅延蛍光発光性は図 2 に示す装置を利用して過渡 PL を測定することにより確認した。前記化合物 MT-2 と前記化合物 TH-2 とを化合物 MT-2 の割合が 12 質量%となるように石英基板上に共蒸着し、膜厚 100 nm の薄膜を形成して試料を作製した。

遅延蛍光発光は、前記図 2 の装置を用いて求めることができる。前記化合物 MT-2 が吸収する波長のパルス光 (パルスレーザーから照射される光) で励起された後、当該励起状態から即座に観察される Prompt 発光 (即時発光) と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察される Delay 発光 (遅延発光) とが存在する。本実施形態における遅延蛍光発光とは、Delay 発光 (遅延発光) の量が Prompt 発光 (即時発光) の量に対して 5% 以上を意味し、化合物 MT-2 は Delay 発光 (遅延発光) の量が Prompt 発光 (即時発光) の量に対して 5% 以上あることを確認している。

Prompt 発光と Delay 発光の量は、“Nature 492, 234-238, 2012” に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt 発光と Delay 発光の量の算出に使用される装置は、前記図 2 の装置や文献に記載のものに限定されるものではない。

【手続補正 13】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0333

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0333】

(実施例 27)

実施例 27 の有機 EL 素子は、実施例 26 の障壁層における化合物 HB-2 の代わりに化合物 HB-3 を用いること以外は、実施例 26 と同様にして作製した。

実施例 27 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (70) / HI (5) / HT-1 (65) / HT-2 (5) / CBP (5) / MT-13 : MT-12 : MT-11 (25, 74% : 25% : 1%) / HB-3 (5) / ET-1 (30) / LiF (1) / Al (80)