

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年9月22日(22.09.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/196603 A1

(51) 国際特許分類:
H01L 51/50 (2006.01) *H05B 33/10* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/011169

(22) 国際出願日: 2022年3月14日(14.03.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2021-042437 2021年3月16日(16.03.2021) JP

(71) 出願人: 株式会社 K y u l u x (KYULUX, INC.) [JP/JP]; 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 Fukuoka (JP).

(72) 発明者: 垣 添 勇 人 (KAKIZOE Hayato); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス(SIKS & CO.); 〒1040031 東京都中央区京橋一丁目8番7号 京橋日殖ビル8階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN,

HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JM, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) **Title:** COMPOSITION, USE OF SAID COMPOSITION AS LIGHT-EMITTING COMPOSITION, FILM, USE OF SAID FILM AS LIGHT-EMITTING FILM, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, METHOD FOR DESIGNING COMPOSITION, AND PROGRAM FOR IMPLEMENTING SAID DESIGN METHOD

(54) 発明の名称: 組成物、その組成物の発光組成物としての使用、膜、その膜の発光膜としての使用、有機エレクトロルミネッセンス素子、組成物の設計方法およびその設計方法を実施するためのプログラム

(57) **Abstract:** A TAF type organic light-emitting element which has high efficiency and high color purity, and contains a composition that contains a first organic compound satisfying the formulae below, a second organic compound that is a delayed fluorescent material, and a third organic compound that is a fluorescent material. In the formulae, E_{S1} represents the lowest excited singlet energy; λ_{EM}^E represents the short wavelength-side emission wavelength; λ_{AB}^P represents the longest wavelength-side peak top wavelength of the absorption spectrum; and λ_{EM}^P represents the peak top wavelength of the emission spectrum. $E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$ $\lambda_{EM}^E(2) < \lambda_{AB}^P(3) - 10 \text{ nm}$ $\lambda_{EM}^P(3) < \lambda_{EM}^P(2)$ $\lambda_{EM}^P(3) < 480 \text{ nm}$

(57) 要約: 下記式を満たす第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を含む組成物を含む、高効率で高色純度のTAF型有機発光素子。 E_{S1} は最低励起一重項エネルギー、 λ_{EM}^E は短波長側の発光波長、 λ_{AB}^P は吸収スペクトルの最長波長側のピークトップの波長、 λ_{EM}^P は発光スペクトルのピークトップ波長を表す。 $E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$ $\lambda_{EM}^E(2) < \lambda_{AB}^P(3) - 10 \text{ nm}$ $\lambda_{EM}^P(3) < \lambda_{EM}^P(2)$ $\lambda_{EM}^P(3) < 480 \text{ nm}$



WO 2022/196603 A1

明 細 書

発明の名称：

組成物、その組成物の発光組成物としての使用、膜、その膜の発光膜としての使用、有機エレクトロルミネッセンス素子、組成物の設計方法およびその設計方法を実施するためのプログラム

技術分野

[0001] 本発明は、T A F (TADF-assisted fluorescent) 機構により発光しうる組成物、その組成物の発光組成物としての使用、その組成物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに、その組成物の設計方法およびその設計方法を実施するためのプログラムに関する。

背景技術

[0002] 遅延蛍光材料を利用した有機発光素子として、遅延蛍光材料をアシストドナーパントとして、発光材料である蛍光材料と組み合わせて用いるT A F (TADF assisted Fluorescence) 型有機発光素子が開発されている。T A F型有機発光素子は、以下の理由から、通常の蛍光型有機発光素子に比べて高い発光効率を示す。

すなわち、有機発光素子の発光層で電子と正孔が再結合すると、スピン統計則に従って励起一重項状態と励起三重項状態が25%：75%の確率で生成する。ここで、通常の蛍光材料では、励起三重項状態は熱を放出して無輻射失活するため、25%相当分の励起一重項エネルギーしか発光に利用されず、発光効率に理論上の限界がある。一方、遅延蛍光材料は、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を起こす有機化合物である。そのため、遅延蛍光材料と蛍光材料を組み合わせて発光層に用いると、遅延蛍光材料にて励起三重項エネルギーが励起一重項エネルギーに変換されて蛍光材料にフェルスター移動し、そのエネルギーを受け取った蛍光材料も励起一重項状態から輻射失活して発光する。こうしたメカニズムにより、T A F型有機発光素子では、直接励起により生成した励起一重項エネルギーとともに、直接

励起により生成した励起三重項エネルギーも蛍光発光に利用されるため、高い発光効率を示す。

そして、近年では、さらに遅延蛍光材料と発光材料の組み合わせを工夫することにより、より優れたT A F型有機発光素子が提案されている。

[0003] 例えば、特許文献1には、特定のB N多環芳香族化合物を発光材料として用い、4つの置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基（ただし、4つがすべて同一であることはない）で置換されたシアノベンゼンを遅延蛍光材料として用いたT A F型有機発光素子が高い発光効率を示すことが記載されている。

非特許文献1には、青色、緑色、黄色および赤色の汎用の蛍光材料と、特定の遅延蛍光材料を組み合わせ用いたT A F型有機発光素子において、遅延蛍光材料から蛍光材料へのエネルギー移動が効率よく起こり、高い発光効率を示したことが記載されている。

非特許文献2には、特定の黄色蛍光材料と、4つの3, 6-ジメチルカルバゾール-9-イル基で置換されたジシアノベンゼンを遅延蛍光材料として組み合わせたT A F型有機発光素子において、励起一重項エネルギーのフェルスター移動が効率よく起こり、動作安定性が向上したことが記載されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：国際公開第2020/039930号

非特許文献

[0005] 非特許文献1：Nature Commun. DOI: 10.1038/ncomms5016

非特許文献2：Sci. Rep. DOI: 10.1038/srep08429

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 上記のように、T A F型有機発光素子については、これまでに特定の化学

構造を有する遅延蛍光材料と特定の化学構造を有する発光材料を組み合わせたものが提案されており、具体的な遅延蛍光材料と発光材料の組合せを採用した素子について、発光効率や動作安定性が検討されている。しかし、従来のT A F型有機発光素子の研究開発では、遅延蛍光材料と発光材料を組み合わせる際の、指標となる条件が一般化されておらず、提案されている遅延蛍光材料と発光材料の範囲から、特に高効率で高色純度の発光をもたらす組み合わせを見出すことは極めて困難であった。

[0007] そこで本発明者らは、このような従来技術の課題を解決するために、特に高効率で高色純度の発光を示すT A F型有機発光素子を提供するため、遅延蛍光材料と発光材料の満たすべき条件を一般化することを目的として検討を進めた。

課題を解決するための手段

[0008] 上記の課題を解決するために鋭意検討を行った結果、本発明者らは、遅延蛍光材料と蛍光材料よりも最低励起一重項エネルギーが高い第1有機化合物を材料系に加えた上で、遅延蛍光材料と蛍光材料の最低励起一重項エネルギー、吸収スペクトルおよび発光スペクトルの条件を規定することにより、高効率で高色純度を示すT A F型有機発光素子を実現することを見出した。本発明は、こうした知見に基づいて提案されたものであり、具体的に以下の構成を有する。

[0009] [1] 下記条件(a)～(d)を満たす第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を含む組成物。

$$\text{条件 (a)} \quad E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$$

$$\text{条件 (b)} \quad \lambda^{E_{EM}}(2) < \lambda^{P_{AB}}(3) - 10 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (c)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < \lambda^{P_{EM}}(2)$$

$$\text{条件 (d)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < 480 \text{ nm}$$

(上式において、 $E_{S1}(1)$ は前記第1有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $E_{S1}(2)$ は前記第2有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $E_{S1}(3)$ は前記第3有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $\lambda^{E_{EM}}(2)$ は前

記第2有機化合物の短波長側の発光波長（単位 nm）、 $\lambda_{P_{AB}}(3)$ は前記第3有機化合物の吸収スペクトルの最も長波長側のピークトップの波長（単位 nm）、 $\lambda_{P_{EM}}(2)$ は前記第2有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長、 $\lambda_{P_{EM}}(3)$ は前記第3有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長を表す。）

[2] 下記条件 (e) を満たす、[1] に記載の組成物。

$$\text{条件 (e)} \quad FW_{0.3M} < 40 \text{ nm}$$

（上式において、 $FW_{0.3M}$ は前記組成物の発光スペクトルの発光ピークに対する相対強度が30%におけるスペクトル幅を表す。）

[3] 下記条件 (e1) を満たす、[2] に記載の組成物。

$$\text{条件 (e1)} \quad FW_{0.3M} < 32 \text{ nm}$$

[4] 下記条件 (f) および (g) を満たす、[1] ~ [3] のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (f)} \quad LUMO(2) \leq LUMO(3)$$

$$\text{条件 (g)} \quad HOMO(2) \leq HOMO(3)$$

（上式において、 $LUMO(2)$ は前記第2有機化合物の $LUMO$ のエネルギー、 $LUMO(3)$ は前記第3有機化合物の $LUMO$ のエネルギー、 $HOMO(2)$ は前記第2有機化合物の $HOMO$ のエネルギー、 $HOMO(3)$ は前記第3有機化合物の $HOMO$ のエネルギーを表す。）

[5] 下記条件 (h) を満たす、[1] ~ [4] のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (h)} \quad R_0(2-3) > 6.5 \text{ nm}$$

（上式において、 $R_0(2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスター半径を表す。）

[6] 下記条件 (i) を満たす、[1] ~ [5] のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (i)} \quad r(2-3) < 3.91 \text{ nm}$$

（上式において、 $r(2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物

物との間の分子間距離を表す。)

[7] 下記条件 (j) を満たす、[1] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の組成物。

$$\text{条件 (j)} \quad k_{\text{FRET}} (2-3) > 1.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、 $k_{\text{FRET}} (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[8] 下記条件 (h1)、(i1) および (j1) を満たす、[1] ~ [4] のいずれか 1 項に記載の組成物。

$$\text{条件 (h1)} \quad R_0 (2-3) \geq 7.3 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (i1)} \quad r (2-3) \leq 3.71 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (j1)} \quad k_{\text{FRET}} (2-3) \geq 6.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

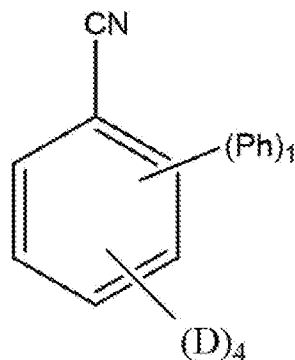
(上式において、

$R_0 (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスター半径、 $r (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間の分子間距離、 $k_{\text{FRET}} (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[9] 前記有機第 2 化合物が下記一般式 (1) で表される構造を有する、[1] ~ [8] のいずれか 1 項に記載の組成物。

[化1]

一般式 (1)



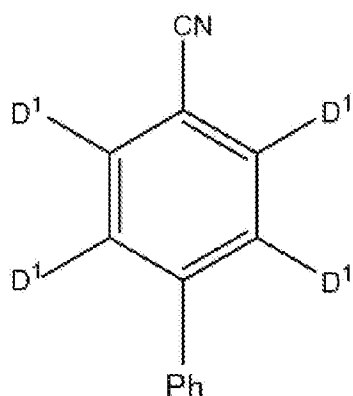
(一般式 (1) において、D は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、Ph は、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基か

らなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[10] 前記有機第2化合物が下記一般式(1a)で表される構造を有する、[9]に記載の組成物。

[化2]

一般式(1a)

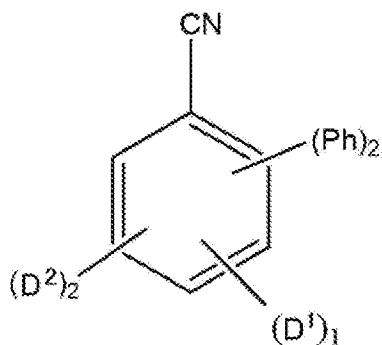


(一般式(1a)において、D¹は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、Phは、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[11] 前記有機第2化合物が下記一般式(2)で表される構造を有する、[1]～[8]のいずれか1項に記載の組成物。

[化3]

一般式(2)



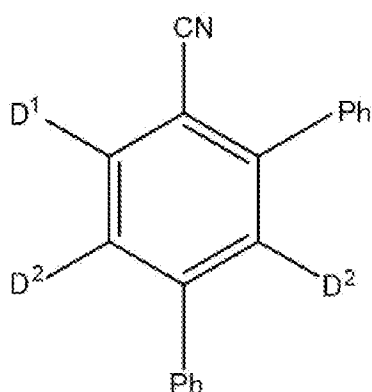
(一般式(2)において、D¹は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル

ル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、2つのPhは各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[12] 前記有機第2化合物が下記一般式(2a)で表される構造を有する、[11]に記載の組成物。

[化4]

一般式(2a)

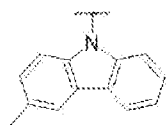


(一般式(2a)において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、2つのPhは各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

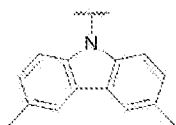
[13] D 、 D^1 および D^2 が、各々独立に下記D1～D37のいずれかで表される構造を有する、[9]～[12]のいずれか1項に記載の組成物。

[化5-1]

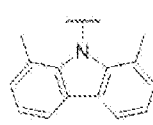
D1



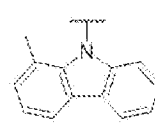
D2



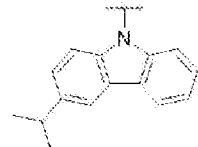
D3



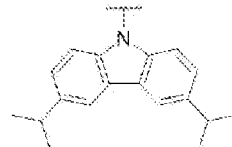
D4



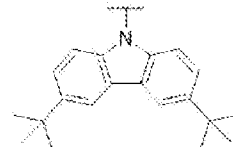
D5



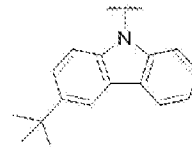
D6



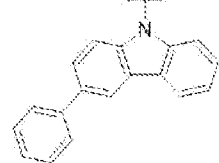
D7



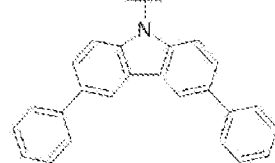
D8



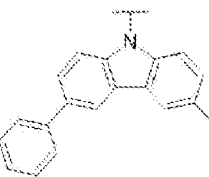
D9



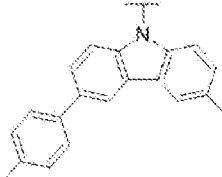
D10



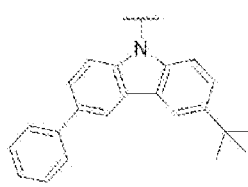
D11



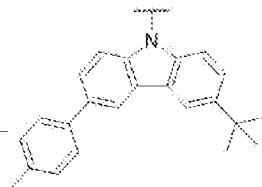
D12



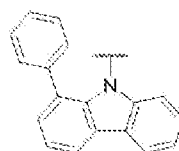
D13



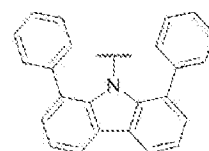
D14



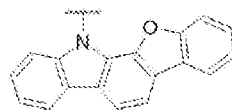
D15



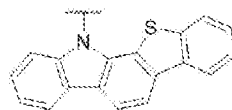
D16



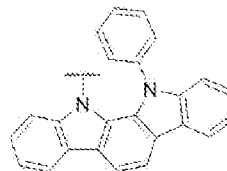
D17



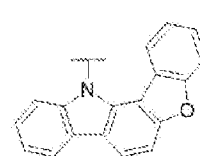
D18



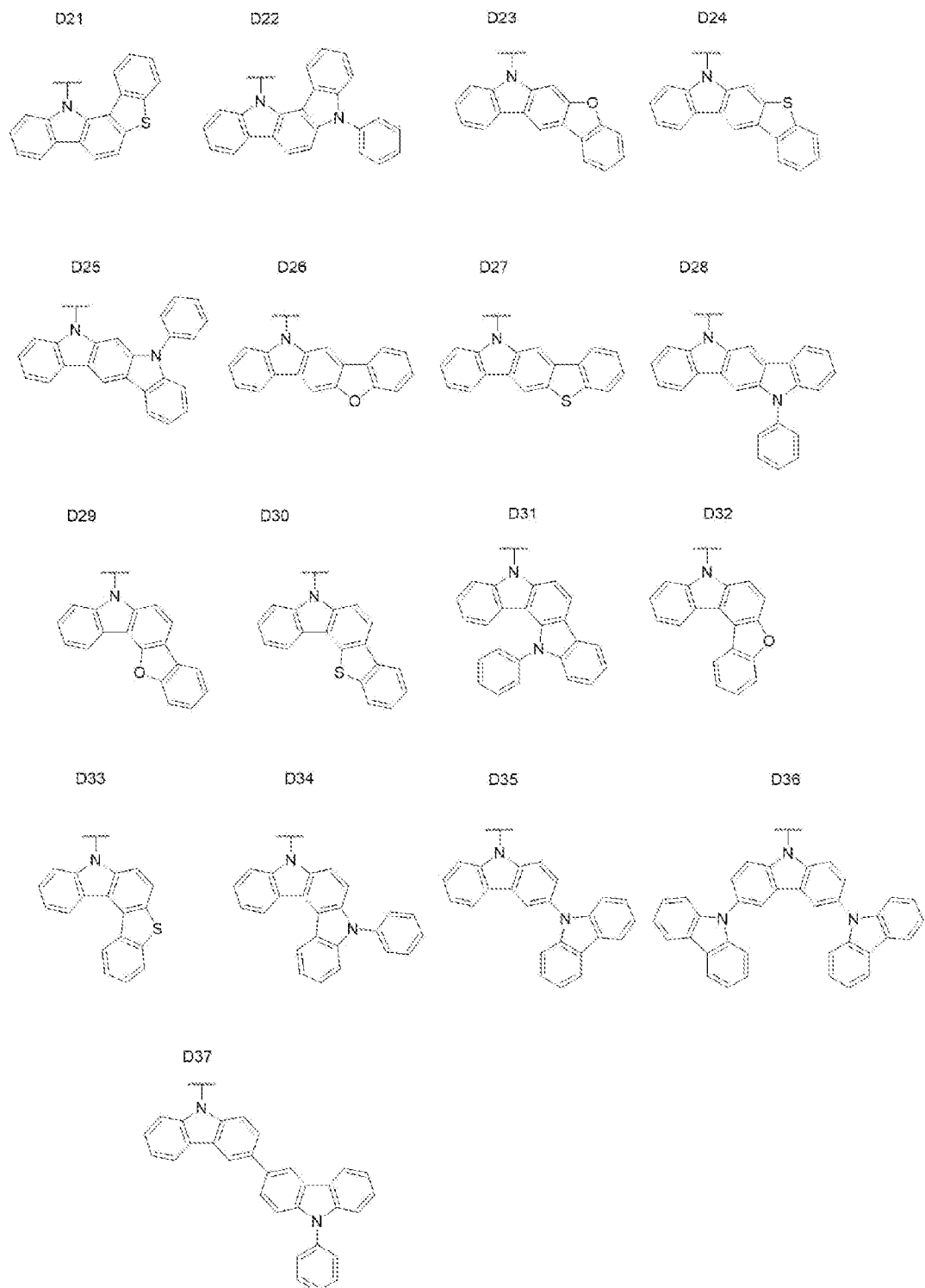
D19



D20



[化5-2]



[14] [1] ~ [13] のいずれか 1 項に記載の組成物の発光組成物としての使用。

[15] [1] ~ [13] のいずれか 1 項に記載の組成物の発光組成物を

含む膜。

[16] [15]に記載の膜の発光膜としての使用。

[17] 陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極の間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、前記発光層は、[1]～[13]のいずれか1項に記載の組成物を含み、前記素子からの発光の最大成分は前記第3有機化合物からの蛍光である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[18] トップエミッション型である、[17]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[19] 上記条件(a)～(d)を満たすように第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を選択することを特徴とする、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を含む組成物の設計方法。

[20] 前記選択を、上記条件(f)および(g)も満たすように行う、[19]に記載の組成物の設計方法。

[21] 前記選択を、上記条件(h)も満たすように行う、[19]または[20]に記載の組成物の設計方法。

条件(h) $R_0(2-3) > 6.5 \text{ nm}$

(上式において、 $R_0(2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスター半径を表す。)

[22] 前記選択を、上記条件(i)も満たすように行う、[19]～[21]のいずれか1項に記載の組成物の設計方法。

[23] 前記選択を、上記条件(j)も満たすように行う、[19]～[22]のいずれか1項に記載の組成物の設計方法。

[24] 前記選択を、上記条件(h1)、(i1)および(j1)も満たすように行う、[19]に記載の組成物の設計方法。

[25] [19]～[24]のいずれか1項に記載の組成物の設計方法を実施するためのプログラム。

発明の効果

[0010] 本発明の組成物は、所定の条件を満たす3種類の有機化合物を含むため、T A F機構が機能して、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。そのため、本発明の組成物は発光組成物として有用性が高い。本発明の組成物を用いることにより、高効率で高色純度の発光を示すT A F型有機発光素子を容易に実現することができる。

図面の簡単な説明

[0011] [図1]プログラムの処理手順例を示すフローチャートである。

[図2]化合物H1と化合物D F 1と化合物F 1からなる組成物1の薄膜、化合物H1と化合物D F 2と化合物F 1からなる組成物2の薄膜、および化合物H1と化合物D F 3と化合物F 1からなる比較組成物1の薄膜の発光スペクトルである。

[図3]有機エレクトロルミネッセンス素子の積層構造を示す概略図である。

[図4]組成物1を発光層に用いたE L素子2、化合物F 1の濃度を0.5重量%に変えたE L素子1、化合物F 1の濃度を2.0重量%に変えたE L素子3、および化合物F 1を発光層に含まない比較E L素子1の発光スペクトルである。

発明を実施するための形態

[0012] 以下において、本発明について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、代表的な実施形態や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施形態に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は「～」前後に記載される数値を下限值及び上限値として含む範囲を意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の同位体種は特に限定されず、例えば分子内の水素原子がすべて¹Hであってもよいし、一部または全部が²H（デュートリウムD）であってもよい。

本明細書における「励起光」とは、対象物に励起を引き起こして発光を生

じさせる光であり、その対象物の吸収波長に一致する波長の光を用いることができる。

本明細書における「ホスト材料」とは、有機化合物の混合膜に含まれる材料であって、混合膜を構成する有機化合物の中で、最低励起一重項エネルギーが最も高い有機化合物のことをいう。

[0013] <組成物>

本発明の組成物は、下記条件（a）～（d）を満たす第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を含むものである。

$$\text{条件 (a)} \quad E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$$

$$\text{条件 (b)} \quad \lambda^{E_{EM}}(2) < \lambda^{P_{AB}}(3) - 10 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (c)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < \lambda^{P_{EM}}(2)$$

$$\text{条件 (d)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < 480 \text{ nm}$$

（上式において、 $E_{S1}(1)$ は第1有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $E_{S1}(2)$ は第2有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $E_{S1}(3)$ は第3有機化合物の最低励起一重項エネルギー、 $\lambda^{E_{EM}}(2)$ は第2有機化合物の短波長側の発光波長（単位nm）、 $\lambda^{P_{AB}}(3)$ は第3有機化合物の吸収スペクトルの最も長波長側のピークトップの波長（単位nm）、 $\lambda^{P_{EM}}(2)$ は第2有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長、 $\lambda^{P_{EM}}(3)$ は第3有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長を表す。）

本発明における「遅延蛍光材料」とは、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を起こす材料であり、逆項間交差が熱エネルギーの吸収に起因して起こる、熱活性化型遅延蛍光材料であることが好ましい。遅延蛍光材料であることは、その遅延蛍光材料からなる薄膜（単独膜）またはその遅延蛍光材料とホスト材料からなる混合膜の発光過渡減衰曲線を20℃で観測したとき、発光寿命が短い蛍光と、発光寿命が長い蛍光（遅延蛍光）の両方が観測されることをもって判定することとする。

本発明における「蛍光材料」とは、その蛍光材料からなる薄膜（単独膜）

またはその蛍光材料とホスト材料からなる混合膜の発光を 20℃で観測したとき、燐光の発光強度よりも蛍光の発光強度の方が高い発光材料である。通常の蛍光（遅延蛍光ではない蛍光）は、発光寿命が ns オーダーであり、燐光は、通常、発光寿命が ms オーダーであるため、蛍光と燐光とは発光寿命により区別することができる。本発明における「蛍光材料」は、遅延蛍光を放射しない蛍光材料であってもよいし、遅延蛍光を放射する蛍光材料（遅延蛍光材料）であってもよい。ここで、「遅延蛍光を放射しない蛍光材料」とは、20℃で発光寿命が短い蛍光のみが観測される蛍光材料である。

本発明で規定する $\lambda^{P_{AB}}$ (3) における「吸収スペクトル」、 $\lambda^{E_{EM}}$ (2)、 $\lambda^{P_{EM}}$ (2) および $\lambda^{P_{EM}}$ (3) における「発光スペクトル」の測定温度は 20℃であることとする。「吸収スペクトル」および「発光スペクトル」の具体的な説明については、下記の物性値の定義における説明を参照することができる。

[0014] 本発明における「第 1 有機化合物の最低励起一重項エネルギー」(E_{S1} (1))、「第 2 有機化合物の最低励起一重項エネルギー」(E_{S1} (2))、「第 3 有機化合物の最低励起一重項エネルギー」(E_{S1} (3))は、第 1 有機化合物、第 2 有機化合物および第 3 有機化合物のそれぞれの薄膜（各有機化合物の単独膜）を測定試料として蛍光スペクトルを測定し、その短波側のスペクトル端の波長 $\lambda^{E_{EM}}$ をエネルギー値に換算した値である。ここで、蛍光スペクトルは、測定試料に 20℃で励起光を照射して検出される発光強度を縦軸、発光波長を横軸に示したグラフである。その蛍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（短波長側の蛍光スペクトル端）の波長 ($\lambda^{E_{EM}}$) [nm] を、下記換算式にてエネルギー値に換算した値 E_{S1} を E_{S1} (1)、 E_{S1} (2) または E_{S1} (3) とする。

$$\text{換算式： } E_{S1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda^{E_{EM}}$$

本発明における「第 2 有機化合物の短波長側の発光波長（単位 nm）」($\lambda^{E_{EM}}$ (2)) は、第 2 有機化合物からなる薄膜（第 2 有機化合物の単独膜）を測定試料として測定した発光スペクトルの短波長側のスペクトル端の波長

である。発光スペクトルは、 $900 \sim 190 \text{ nm}$ の範囲で波長を連続的に変化させながら、測定試料に光照射して検出される発光強度を縦軸、波長を横軸に示したグラフである。その発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（短波長側の発光スペクトル端）における波長を波長 $\lambda^{\text{E}}_{\text{EM}}(2)$ [nm]とする。

本発明における「第3有機化合物の吸収スペクトルの最も長波長側のピークトップの波長（単位 nm ）」（ $\lambda^{\text{P}}_{\text{AB}}(3)$ ）は、第3有機化合物の 10^{-5} Mトルエン溶液を測定試料として測定した吸収スペクトルの中で、最も長波長側に位置する吸収ピークの吸収極大波長である。例えば、吸収スペクトルに吸収ピークが複数存在する場合には、その中で、最も長波長側に位置する吸収ピークの吸収極大波長を波長 $\lambda^{\text{P}}_{\text{AB}}(3)$ とする。

本発明における「第2有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長」（ $\lambda^{\text{P}}_{\text{EM}}(2)$ ）は、第2有機化合物とホスト材料の混合膜を測定試料として測定した発光スペクトルの発光ピークの発光極大波長である。ここで、「ホスト材料」は、第2有機化合物の最低励起一重項エネルギー $E_{\text{S}1}(2)$ よりも高い最低励起一重項エネルギーを有する有機化合物であり、混合膜における第2有機化合物の濃度は30重量%とする。発光スペクトルに複数の発光ピークが存在するときは、最も強度が大きな発光ピークの発光極大波長が $\lambda^{\text{P}}_{\text{EM}}(2)$ であることとする。

本発明における「第3有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長」（ $\lambda^{\text{P}}_{\text{EM}}(3)$ ）は、第3有機化合物とホスト材料の混合膜を測定試料として測定した発光スペクトルの発光ピークの発光極大波長である。ここで、「ホスト材料」は、第3有機化合物の最低励起一重項エネルギー $E_{\text{S}1}(3)$ よりも高い最低励起一重項エネルギーを有する有機化合物であり、混合膜における第3有機化合物の濃度は1重量%とする。発光スペクトルに複数の発光ピークが存在するときは、最も強度が大きな発光ピークの発光極大波長が $\lambda^{\text{P}}_{\text{EM}}(3)$ であることとする。 $\lambda^{\text{P}}_{\text{EM}}(3)$ の下限は特に制限されないが、 430 nm 以上であることが好ましい。

[0015] 本発明の組成物は、条件（a）～（d）を満たすことにより、T A F（TADF-assisted fluorescent）機構が働いて、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。そのメカニズムについて、組成物を電流励起により発光させる場合を例にして説明する。ここで、本明細書における「T A F機構（TADF-assisted fluorescent）」とは、遅延蛍光材料で逆項間交差が起こることにより、励起三重項エネルギーが励起一重項エネルギーに変換され、その励起一重項エネルギーが蛍光材料にフェルスター移動して蛍光発光に利用されることをいう。

まず、本発明の組成物に電子と正孔が注入されると、その電子と正孔の再結合により、各有機化合物において励起一重項状態と励起三重項状態が25：75の生成確率で生成する。ここで、条件（a）を満たすことにより、第3有機化合物で生成した励起一重項エネルギーは第2有機化合物と第3有機化合物にフェルスター移動し、第2有機化合物で生成した励起一重項エネルギー、および、第2有機化合物が第1有機化合物から受け取った励起一重項エネルギーは、第3有機化合物にフェルスター移動する。そして、励起一重項エネルギーを受け取った第3有機化合物は、励起一重項状態からの輻射失活により蛍光を放射する。また、第2有機化合物は遅延蛍光材料であるため、第2有機化合物で生成した励起三重項状態は励起一重項状態へと逆項間交差し、その励起一重項エネルギーも第3有機化合物にフェルスター移動する。すなわち、ここでは、第2有機化合物が励起三重項エネルギーを励起一重項エネルギーに変換して第3有機化合物へ供給するアシストドープメントとして機能する。したがって、この組成物では、直接励起により生成した励起一重項状態のエネルギーのみならず、直接励起により生成した励起三重項エネルギーも第3有機化合物の蛍光発光に利用されるため、遅延蛍光材料を用いない蛍光組成物に比べて高い発光効率を得られる。

ここで、本発明の組成物では、第3有機化合物が条件（d）を満たし、第2有機化合物と第3有機化合物が条件（a）および（c）を満たすことにより、第3有機化合物が放射する蛍光のピークは480nm未満の波長範囲に

ピークトップを有し、且つ、第2有機化合物が光を放射する場合の発光ピークよりもピーク幅が狭い。また、条件（b）を満たすことにより、第2有機化合物の発光帯と第3有機化合物の最長波長側吸収ピークに重なりが生じる。そのため、第3有機化合物にフェルスター移動すべき励起一重項エネルギーが第2有機化合物へフェルスター移動して輻射失活するといったエネルギー移動の競合が回避され、組成物の発光スペクトル形状が、第2有機化合物からの光の影響を受けてブロード化することが抑えられる。

以上のことから、本発明の組成物は、条件（a）～（d）を満たすことにより、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。

また、条件（a）～（d）は数値の大小関係で示された客観的な指標であるため、条件を満たすものであるか否かを明確に判別することができる。そのため、条件（a）～（d）を指標にして、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を選択することにより、上記のような特性を示す組成物を確実に実現することができる。

[0016] 第2有機化合物と第3有機化合物は、条件（b）について、さらに、下記条件（b1）を満たすことが好ましく、下記条件（b2）～（b4）を満たすことがより好ましい。

$$\text{条件（b1）} \quad \lambda_{\text{EM}}^{\text{E}}(2) < \lambda_{\text{AB}}^{\text{P}}(3) - 12 \text{ nm}$$

$$\text{条件（b2）} \quad \lambda_{\text{EM}}^{\text{E}}(2) < \lambda_{\text{AB}}^{\text{P}}(3) - 15 \text{ nm}$$

$$\text{条件（b3）} \quad \lambda_{\text{EM}}^{\text{E}}(2) < \lambda_{\text{AB}}^{\text{P}}(3) - 18 \text{ nm}$$

$$\text{条件（b4）} \quad \lambda_{\text{EM}}^{\text{E}}(2) < \lambda_{\text{AB}}^{\text{P}}(3) - 20 \text{ nm}$$

[0017] また、組成物は、下記条件（e）を満たすことが好ましく、下記条件（e1）を満たすことがより好ましい。下記条件を満たす組成物は、発光ピークの裾の幅が狭いため、高い色純度の発光を示す。

$$\text{条件（e）} \quad \text{FW}_{0.3\text{M}} < 40 \text{ nm}$$

$$\text{条件（e1）} \quad \text{FW}_{0.3\text{M}} < 32 \text{ nm}$$

（上式において、 $\text{FW}_{0.3\text{M}}$ は組成物の発光スペクトルの発光ピークに対する

相対強度が30％におけるスペクトル幅を表す。)

[0018] さらに、第2有機化合物と第3有機化合物は、下記条件(f)および(g)を満たすことが好ましい。これにより、第3有機化合物よりも第2有機化合物の方に電子と正孔が注入され易くなり、第2有機化合物のアシストドープメント機能を効果的に発揮させることができる。

条件(f) $LUMO(2) \leq LUMO(3)$

条件(g) $HOMO(2) \leq HOMO(3)$

(上式において、 $LUMO(2)$ は第2有機化合物の $LUMO$ (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)のエネルギー、 $LUMO(3)$ は第3有機化合物の $LUMO$ のエネルギー、 $HOMO(2)$ は第2有機化合物の $HOMO$ (Highest Occupied Molecular Orbital)のエネルギー、 $HOMO(3)$ は第3有機化合物の $HOMO$ のエネルギーを表す。)

ここで、 $LUMO$ のエネルギーは、測定対象化合物からなる薄膜(測定対象化合物の単独膜)について測定したイオン化ポテンシャルからバンドギャップを差し引いた値に「-」の符号を付した値であり、 $HOMO$ のエネルギーは、そのイオン化ポテンシャルに「-」の符号を付した値である。バンドギャップは、長波長側の吸収スペクトル端の波長から見積もることとする。また、イオン化ポテンシャルは光電子分光法で測定することとし、その測定には例えば光電分光装置(理研計器社製:AC-3)を用いることができる。

[0019] 第2有機化合物と第3有機化合物は、下記条件(h)を満たすことも好ましく、下記条件(i)を満たすことも好ましく、下記条件(j)を満たすことも好ましく、下記条件(h)、(i)および(j)の少なくとも2つを満たすことがより好ましく、下記条件(h)、(i)および(j)の全てを満たすことがさらに好ましい。これにより、第2有機化合物から第3有機化合物への励起一重項エネルギーのフェルスター移動が起こり易くなり、発光の効率と色純度をより高くすることができる。

条件(h) $R_0(2-3) > 6.5 \text{ nm}$

(上式において、 $R_0(2-3)$ は、第2有機化合物と第3有機化合物との間のフェルスター半径を表す。)

$$\text{条件 (i)} \quad r(2-3) < 3.91 \text{ nm}$$

(上式において、 $r(2-3)$ は、第2有機化合物と第3有機化合物との間の分子間距離を表す。)

$$\text{条件 (j)} \quad k_{\text{FRET}}(2-3) > 1.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、 $k_{\text{FRET}}(2-3)$ は、第2有機化合物と第3有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[0020] また、第2有機化合物と第3有機化合物は、下記条件 (h1)、(i1) および (j1) を全て満たすことがさらに好ましい。

$$\text{条件 (h1)} \quad R_0(2-3) \geq 7.3 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (i1)} \quad r(2-3) \leq 3.71 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (j1)} \quad k_{\text{FRET}}(2-3) \geq 6.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

上式において、 $R_0(2-3)$ 、 $r(2-3)$ および $k_{\text{FRET}}(2-3)$ の定義については、条件 (h)、(i) および (j) の対応する定義を参照することができる。

ここで、「第2有機化合物と第3有機化合物との間のフェルスター半径」($R_0(2-3)$) は、下記式により求められる値である。

[数1]

$$R_0^6 = \frac{9000 \cdot c^4 \cdot \ln(10) \cdot \Phi_{\text{PL}}}{128 \cdot \pi^5 \cdot n^4 \cdot N_A} \int f_{\text{TADF}}(\nu) \varepsilon_{\text{Flu}}(\nu) \frac{d\nu}{\nu^4}$$

c は光速、 ϕ_{PL} は第2有機化合物の発光効率、 n は第1有機化合物の屈折率、 N_A はアボガドロ定数、 $f_{\text{TADF}}(\nu)$ は第2有機化合物の発光スペクトル、 $\varepsilon_{\text{Flu}}(\nu)$ は第3有機化合物の吸収スペクトル、 ν は波数を表す。

「第2有機化合物と第3有機化合物との間の分子間距離」($R_0(2-3)$) は、古典分子動力学法 (MD) を用いて第1有機化合物、第2有機化合物、第3有機化合物の座標を求めることにより決定した。MD 計算方法としてL

AMMPSプログラムを用い、各材料の分子構造の初期構造は第一原理計算から得られた最安定構造を用いた。第一原理計算として量子化学計算プログラムのGaussian09を使用し、再安定構造を密度汎関数法（DFT）で計算した。MD計算により配位数1となる距離が R_0 （2-3）の値である。

「フェルスターエネルギー移動速度 k_{FRET} （2-3）」は下記式の計算により求められる値である。

[0021] [数2]

$$k_{FRET} = k_{prompt} \left(\frac{R^0}{r} \right)^6$$

$$R^0 \propto J^{1/6}$$

（式において、 r は第2有機化合物と第3有機化合物の発色団の距離を表す。 J はスペクトル重なり密度積分を表し、下記式により求められる値である。）

$$\int f_{TADF}(v) \varepsilon_{Flu}(v) \frac{dv}{v^4}$$

[0022] 本発明の組成物からの発光は、第3有機化合物からの蛍光を含む。本発明の組成物からの発光は、第3有機化合物からの蛍光成分のみを含んでいてもよいし、第1有機化合物や第2有機化合物からの発光成分を部分的に含んでいてもよいが、組成物からの発光の最大成分は、第3有機化合物からの蛍光であることが好ましい。組成物からの発光の最大成分が第3有機化合物からの蛍光であることは、組成物の発光スペクトルにおいて、第3有機化合物由来の発光ピークの面積が全発光ピークの面積の50%超であることをもって確認することができる。組成物からの発光における第3有機化合物由来の蛍光成分の割合は、60%超であることがより好ましく、70%超であることがさらに好ましく、80%超であることがさらに好ましく、90%超であることが特に好ましい。

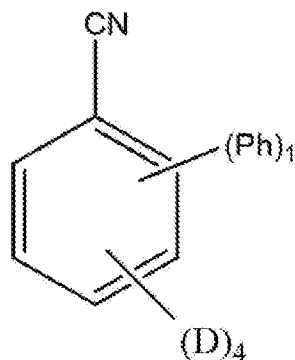
[0023] 以下において、第2有機化合物、第3有機化合物および第1有機化合物として用いる化合物について具体的に説明する。

[0024] [第2有機化合物]

第2有機化合物として用いる化合物の例として、下記一般式(1)で表される化合物を挙げることができる。

[0025] [化6]

一般式(1)



[0026] 一般式(1)において、Dは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表す。Dは無置換のカルバゾール-9-イル基であっても、水素原子の少なくとも1つが置換基で置換されたカルバゾール-9-イル基(置換カルバゾール-9-イル基)であってもよい。ただし、4つのDは、全て互いに化学構造が同一である。置換カルバゾール-9-イル基の置換基の数は特に制限されず、1~8のいずれであってもよい。また、置換基の位置も特に制限されないが、3位と6位の少なくとも一方が置換基であることが好ましい。置換カルバゾール-9-イル基が2つ以上の置換基を有するとき、複数の置換基は互いに同一であっても異なってもよい。置換カルバゾール-9-イル基における置換基の例として、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基を挙げることができ、これらの置換基は、さらにアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基で置換されていてもよい。また、カルバゾール-9-イル基の隣り合う置換基同士が互いに結合して環状構造を形成していてもよい。置換基同士が互いに結合して形成する環状構造の例として、ベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、インドール環を挙げることができ、これらの環状構造はアルキル基、アリール基で置換されていてもよい。

カルバゾール-9-イル基の置換基としてのアルキル基は、直鎖状、分枝

状、環状のいずれであってもよい。好ましい炭素数は1～20であり、より好ましくは1～10であり、さらに好ましくは1～6である。例えば、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基などを例示することができる。

アリール基を構成する芳香環は、単環であっても、2以上の芳香環が縮合した縮合環であっても、2以上の芳香環が連結した連結環であってもよい。2以上の芳香環が連結している場合は、直鎖状に連結したものであってもよいし、分枝状に連結したものであってもよい。アリーレン基を構成する芳香環の炭素数は、6～40であることが好ましく、6～22であることがより好ましく、6～18であることがさらに好ましく、6～14であることがさらにより好ましく、6～10であることが特に好ましい。アリール基の具体例として、フェニル基、ナフタレニル基、ビフェニル基を挙げることができる。

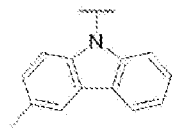
ヘテロアリール基を構成する複素環は、単環であっても、1以上の複素環と1以上の芳香環または複素環が縮合した縮合環であってもよい。ヘテロアリール基を構成する複素環の炭素数は3～40であることが好ましく、5～22であることがより好ましく、5～18であることがさらに好ましく、5～14であることがさらにより好ましく、5～12であることが特に好ましい。複素環を構成する複素原子は窒素原子、酸素原子、硫黄原子の少なくとも1つであることが好ましい。ヘテロアリール基の具体例として、カルバゾール-9-イル基、10H-フェノキサジン-10-イル基、10H-フェノチアジン-10-イル基、9,10-ジヒドロアクリジン-10-イル基などを挙げることができる。

また、Dにおける置換カルバゾール-9-イル基は、下記D1～D37のいずれかで表される構造を有することが好ましい。下記D1～D37における波線はベンゼン環への置換位置を表す。

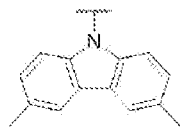
[0027]

[化7-1]

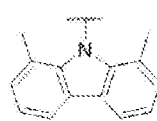
D1



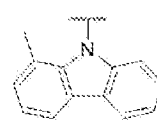
D2



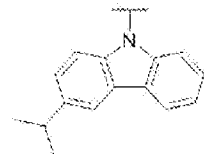
D3



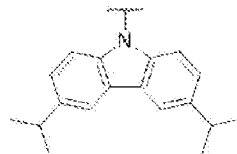
D4



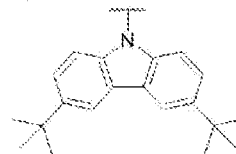
D5



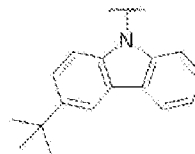
D6



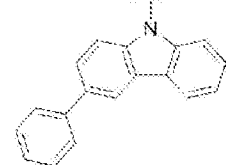
D7



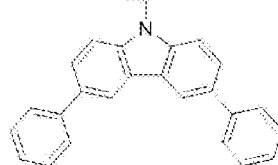
D8



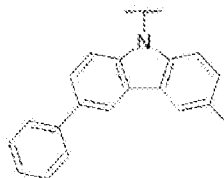
D9



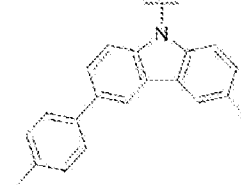
D10



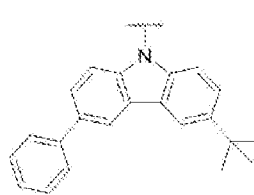
D11



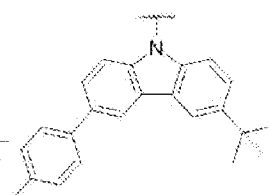
D12



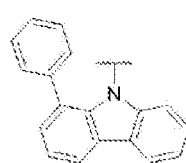
D13



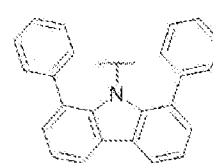
D14



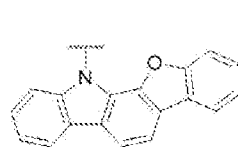
D15



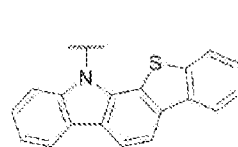
D16



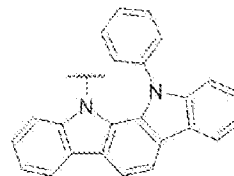
D17



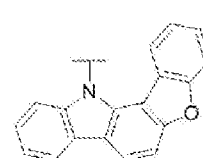
D18



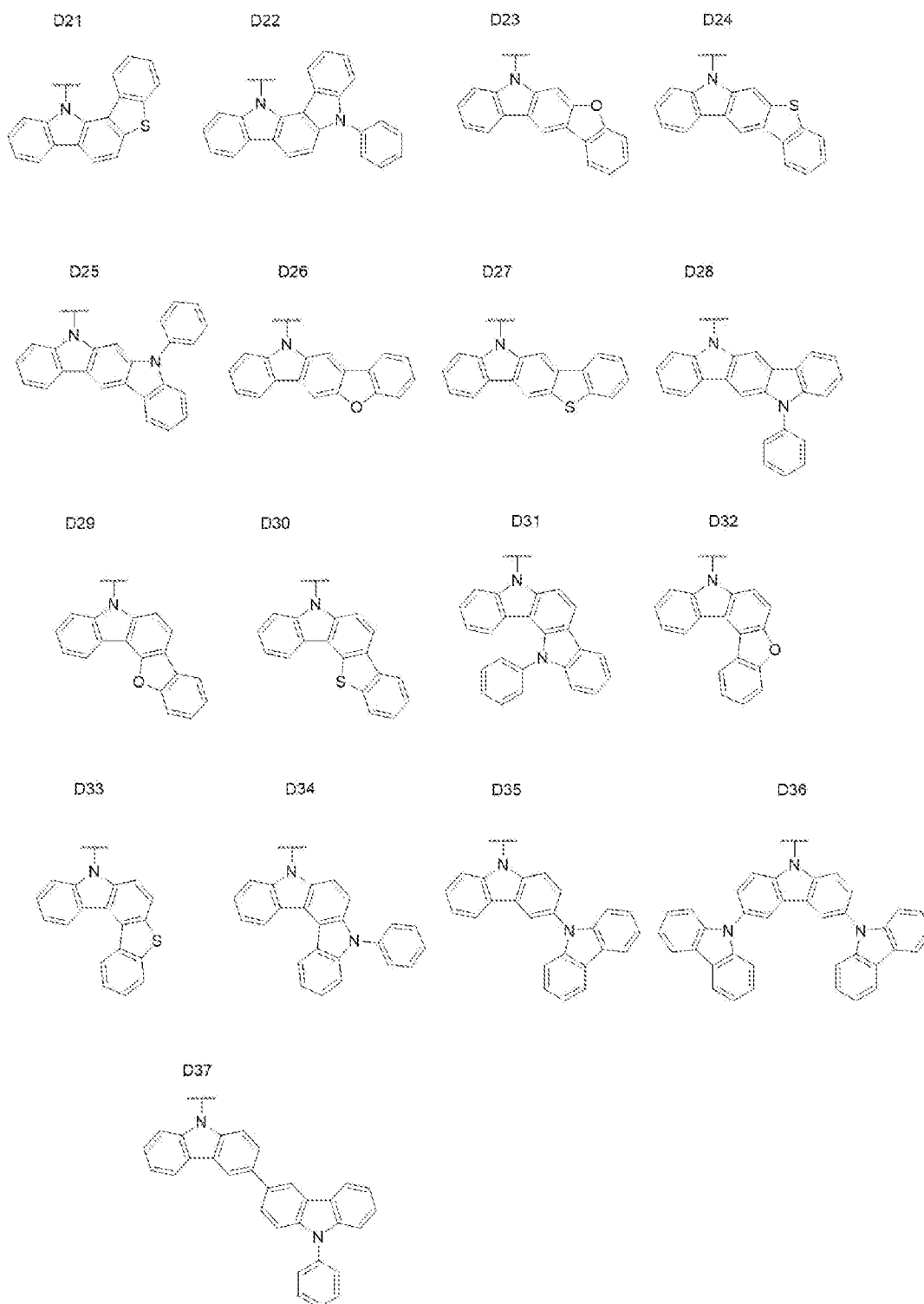
D19



D20



[化7-2]



[0028] 一般式(1)において、Phは、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されているもよいフェニル基を表す。以下の説明では、「アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されているもよいフェニル基」をPhと表す。

びこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基」を「置換基A」ということがある。Phにおけるフェニル基は無置換であっても、水素原子の少なくとも1つが置換基Aで置換されたフェニル基（置換フェニル基）であってもよい。フェニル基が置換基Aで置換されているとき、その置換基Aの数は特に制限されず、1～5のいずれであってもよい。また、置換基Aの位置も特に制限されず、2～6位のいずれであってもよい。フェニル基が2つ以上の置換基Aを有するとき、複数の置換基Aは互いに同一であっても異なってもよい。

アルキル基およびアリール基の説明と好ましい範囲、具体例については、上記のカルバゾール-9-イル基の置換基として例示したアルキル基、アリール基の説明と好ましい範囲、具体例を参照することができる。

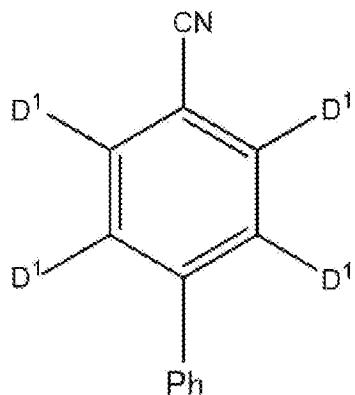
アルキル基とアリール基が連結した基は、アリールアルキル基であってもアルキルアリール基であってもよい。アルキル基に置換するアリール基の数、および、アリール基に置換するアルキル基の数は1つであっても2つ以上であってもよい。アルキル基が2つ以上のアリール基で置換されているとき、複数のアリール基は互いに同一であっても異なってもよい。アリール基が2つ以上のアルキル基で置換されているとき、複数のアルキル基は互いに同一であっても異なってもよい。また、アルキル基の置換基としてのアリール基、および、アリール基の置換基としてのアルキル基には、さらに1つ以上のアルキル基、1つ以上のアリール基が置換していてもよい。アルキル基およびアリール基の説明と好ましい範囲、具体例については、カルバゾール-9-イル基の置換基として例示したアルキル基、アリール基の説明と好ましい範囲、具体例を参照することができる。

一般式(1)において、4つのDおよびPhのベンゼン環における置換位置は特に制限されない。例えば、Phの置換位置は、CN基に対するオルト位、メタ位、パラ位のいずれであってもよいが、パラ位であることが好ましい。Phの置換位置がいずれの位置である場合も、ベンゼン環の残りの置換可能位置が4つのDの置換位置になる。

[0029] 第2有機化合物として用いる化合物は、下記一般式（1 a）で表される化合物であることが好ましい。

[0030] [化8]

一般式（1 a）



[0031] 一般式（1 a）において、D¹は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表す。4つのD¹は全て互いに化学構造が同一である。Phは、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。

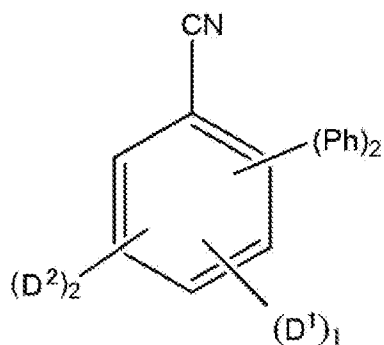
D¹の説明の好ましい範囲、具体例については、その置換位置の説明を除いて、上記の一般式（1）のDについての説明と好ましい範囲、具体例を参照することができ、Phの説明と好ましい範囲、具体例については、その置換位置の説明を除いて、上記の一般式（1）のPhについての説明と好ましい範囲、具体例を参照することができる。

[0032] 第2有機化合物として用いる化合物の例として、下記一般式（2）で表される化合物も挙げることができる。

[0033]

[化9]

一般式 (2)



[0034] 一般式 (2) において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表す。2つの D^2 は互いに化学構造が同一である。

D^1 および D^2 は、無置換のカルバゾール-9-イル基であっても、水素原子の少なくとも1つが置換基で置換されたカルバゾール-9-イル基（置換カルバゾール-9-イル基）であってもよい。置換カルバゾール-9-イル基の説明と好ましい範囲、具体例については、上記のDにおける置換カルバゾール-9-イル基についての説明と好ましい範囲、具体例を参照することができる。ただし、一般式 (2) の D^2 は、 D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表す。 D^1 が表す置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基と、 D^2 が表す置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基は、置換基の有無、置換基の数、置換基の構造および置換位置のいずれが異なってもよい。

2つのPhは各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。2つのPhは互いに同一であっても異なってもよい。Phが表す「アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基」の説明と好ましい範囲、具体例については、上記の一般式 (1) のPhが表す「アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択

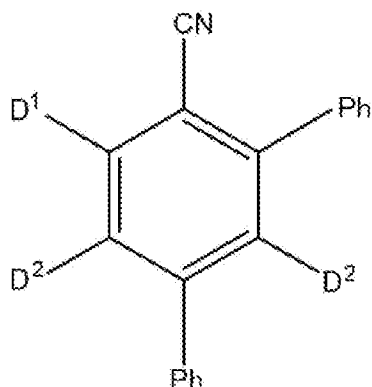
される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基」についての説明と好ましい範囲、具体例を参照することができる。

一般式(2)において、 D^1 、 D^2 およびPhのベンゼン環における置換位置は特に制限されない。例えば、2つのPhの置換位置は、それぞれCN基に対するオルト位、メタ位、パラ位のいずれであってもよく、いずれの場合も、その残りの置換可能位置が D^1 および2つの D^2 の置換位置になる。2つのPhの好ましい置換位置として、CN基に対するオルト位およびパラ位を挙げることができる。 D^2 の好ましい置換位置として、CN基に対するメタ位を挙げることができる。

[0035] 第2有機化合物として用いる化合物は、下記一般式(2a)で表される化合物であることも好ましい。

[0036] [化10]

一般式(2a)

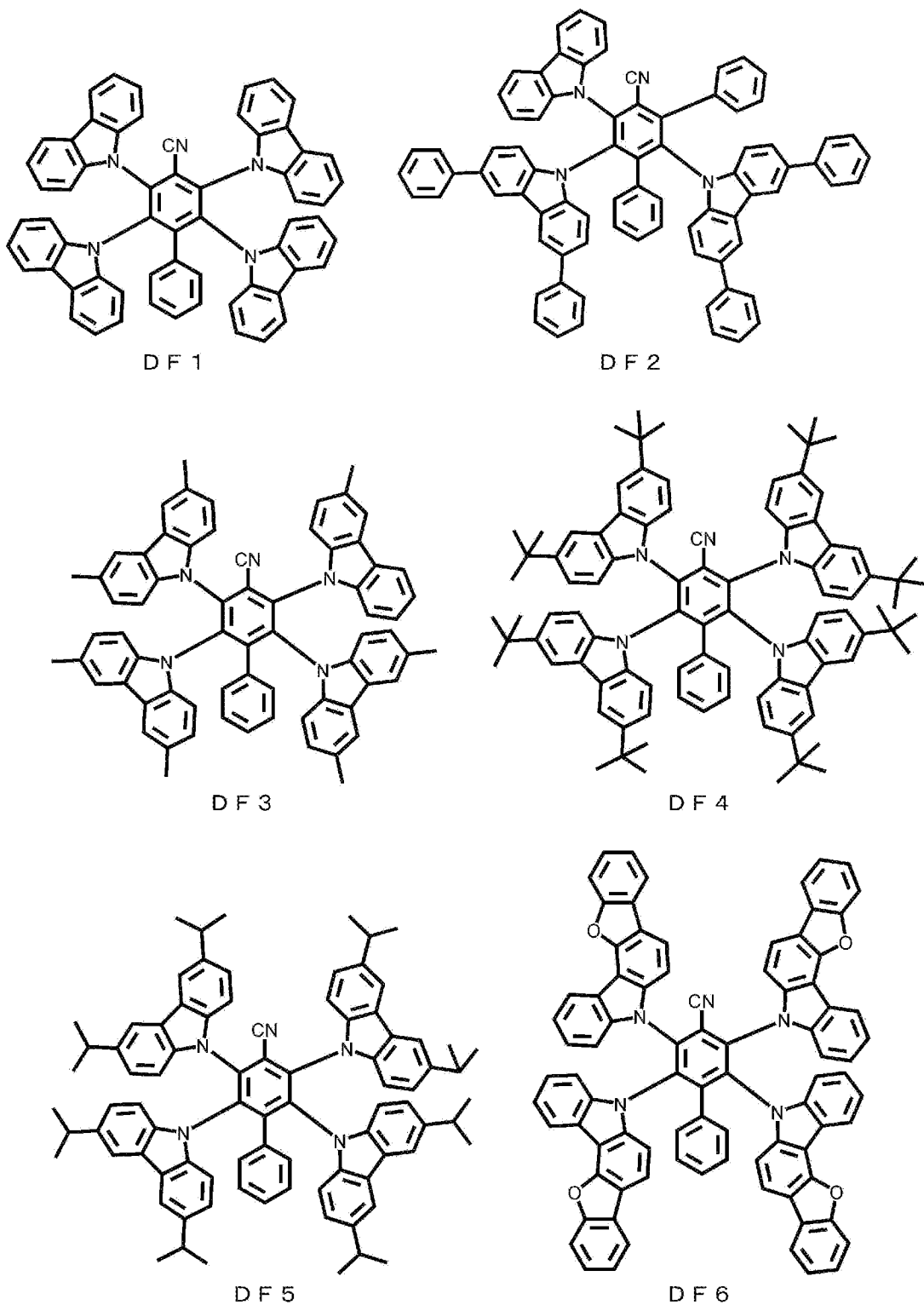


[0037] 一般式(2a)において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表す。2つの D^2 は互いに同一の化学構造を有する。2つのPhは各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。2つのPhは互いに同一であっても異なってもよい。

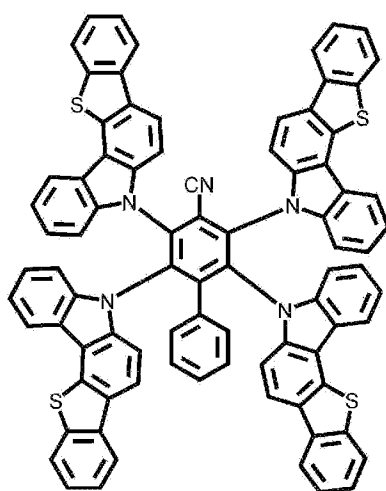
D^1 、 D^2 、Phの説明については、ベンゼン環における置換位置の説明を除いて、上記の一般式(2)の D^1 、 D^2 、Phの説明を参照することができる。

[0038] 以下において、第2有機化合物として用いる化合物の具体例を例示する。
ただし、本発明において用いることができる第2有機化合物は、これらの
具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。

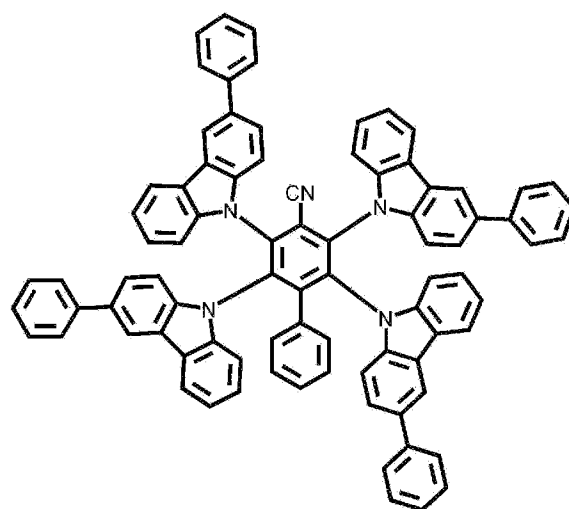
[0039] [化11-1]



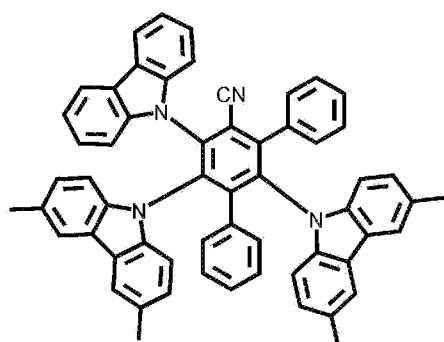
[化11-2]



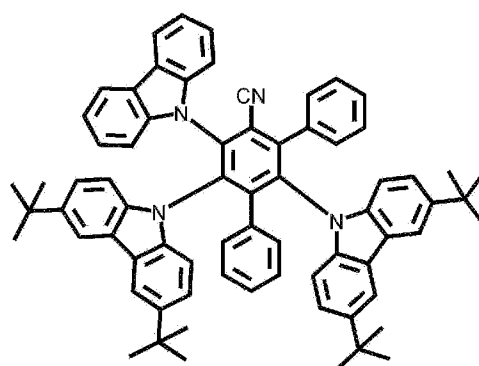
DF 7



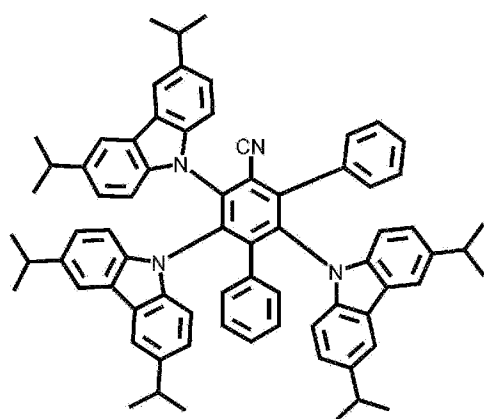
DF 8



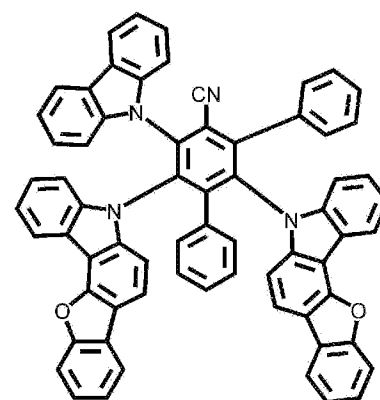
DF 9



DF 10

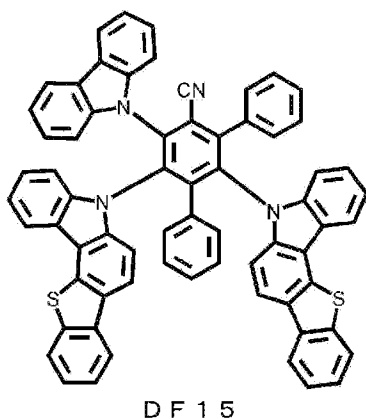
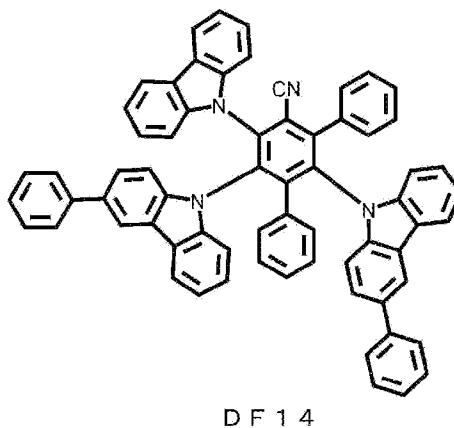
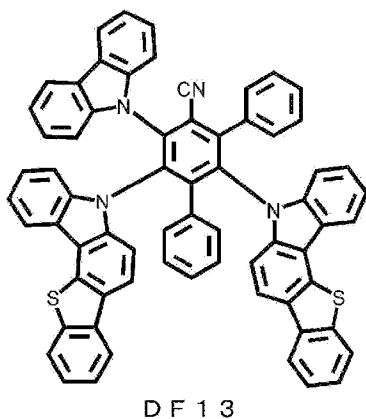


DF 11



DF 12

[化11-3]



[0040] [第3有機化合物]

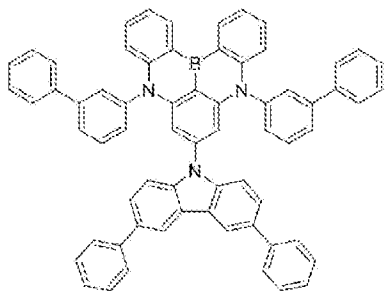
第3有機化合物は多重共鳴型蛍光材料であることが好ましく、多重共鳴型遅延蛍光材料であることがより好ましい。

第3有機化合物は、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される1種以上の原子とホウ素原子との間で多重共鳴する化合物であることが好ましい。

本明細書の一部としてここに引用する、国際公開第2020/039930の段落[0011]～[0032]に記載される一般式で表される化合物や具体的な化合物、および下記式で表される化合物を第3有機化合物として好ましく用いることができる。

[0041]

[化12]



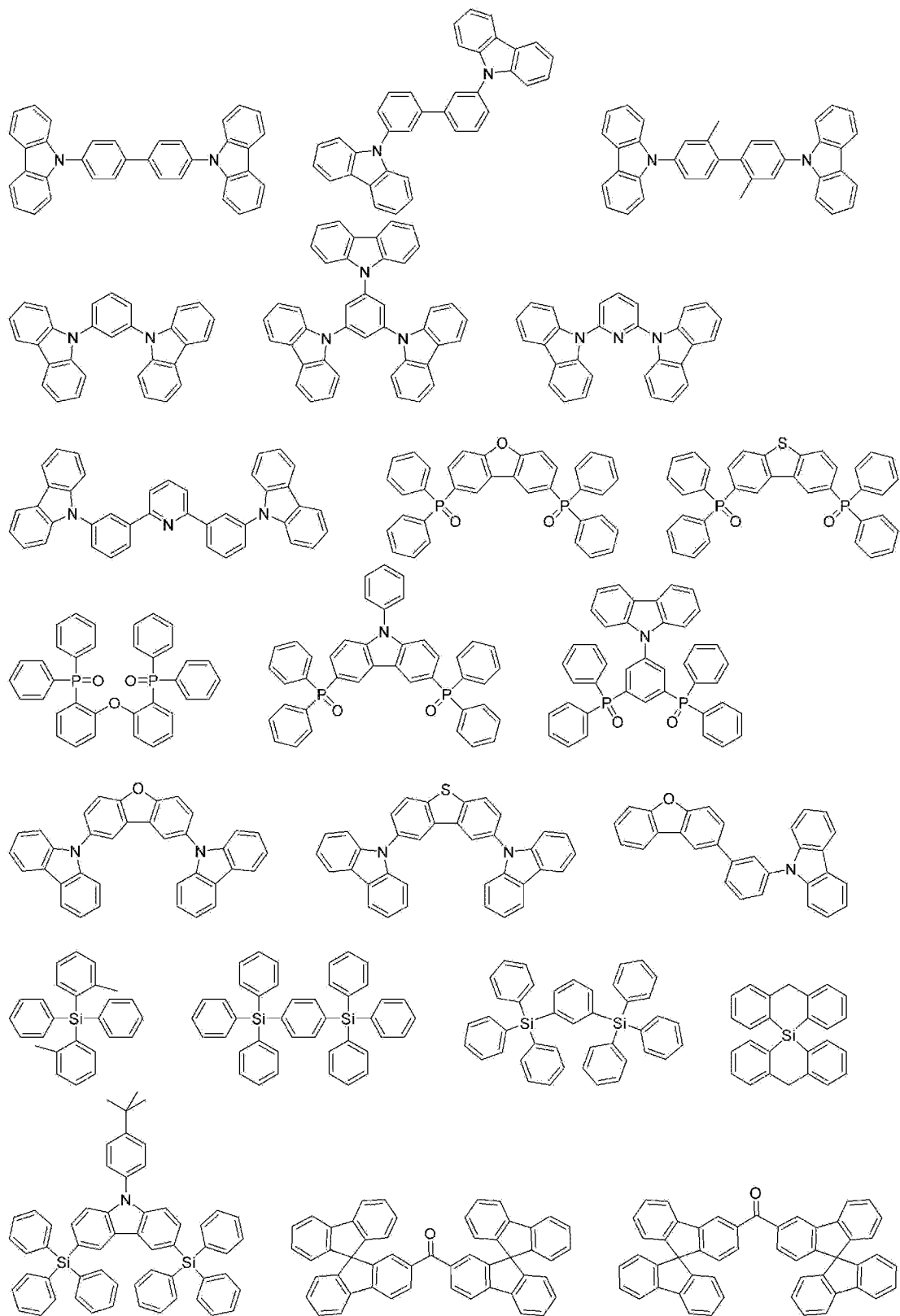
[0042] [第1有機化合物]

第1有機化合物は、第2有機化合物および第2有機化合物よりも最低励起一重項エネルギーが高い有機化合物であり、例えば公知のホスト材料の中から選択して用いることができる。

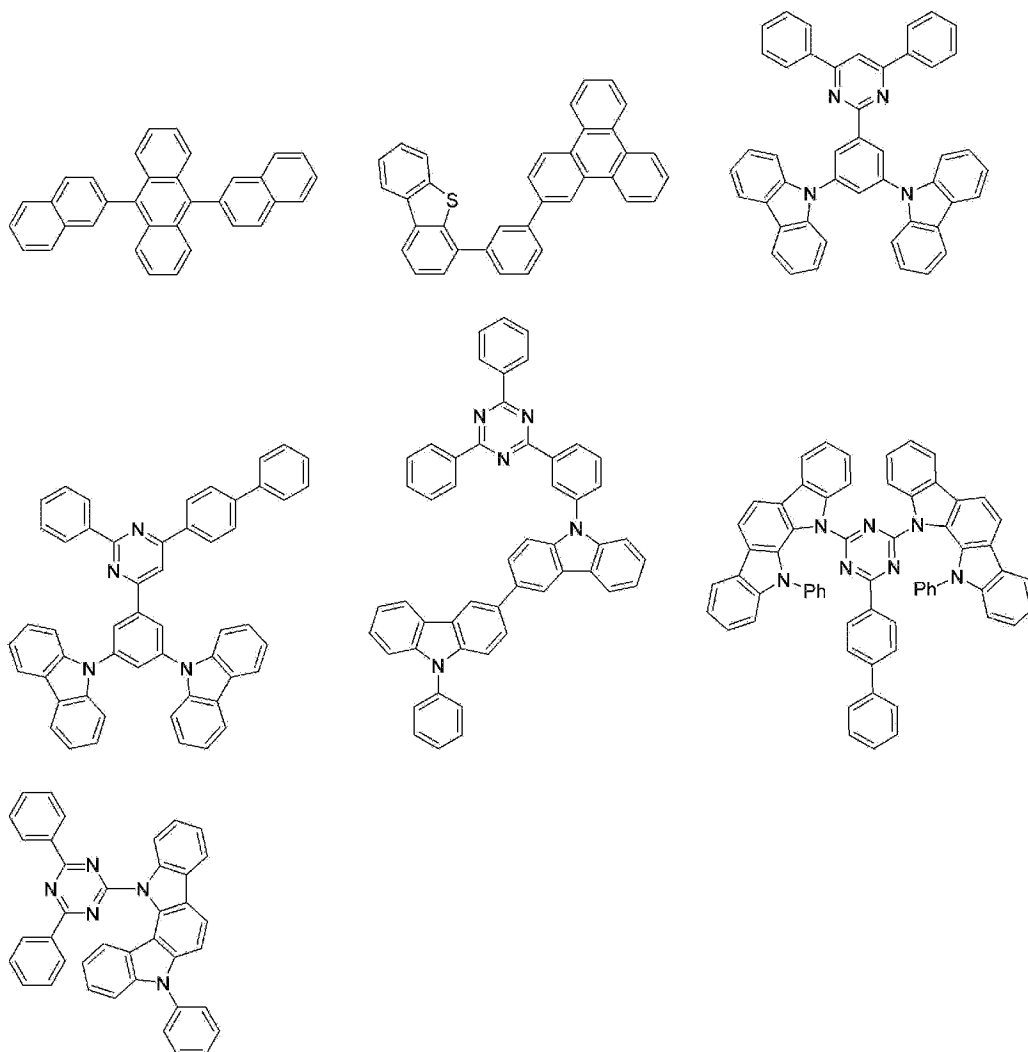
以下において、第3有機化合物として用いる化合物の具体例を例示する。ただし、本発明において用いることができる第3有機化合物は、これらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。

[0043]

[化13-1]



[化13-2]



[0044] [第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物の配合比]

本発明の組成物において、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の配合比は特に制限されないが、第2有機化合物の含有量は、第1有機化合物の含有量よりも少なく、第3有機化合物の含有量よりも多いこと、すなわち、「第3有機化合物の含有量<第2有機化合物の含有量<第1有機化合物の含有量」の関係を満たすことが好ましい。

具体的には、組成物における第2有機化合物の含有量は、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の合計量に対して50重量%未満とすることが好ましい。さらに、第2有機化合物の含有量の上限値は、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の合計量に対して40重量%未満と

することが好ましく、例えば30重量%未満、20重量%未満、10重量%未満とすることもできる。下限値は0.1重量%以上とすることが好ましく、例えば1重量%超、3重量%超とすることもできる。

また、組成物における第3有機化合物の含有量は、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の合計量に対して0.1重量%以上、1重量%以上とすることもできる。また、組成物における第3有機化合物の含有量は、30重量%以下、20重量%以下、10重量%以下とすることもできる。

[0045] [組成物のその他の成分]

本発明の組成物は、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物のみから構成されていてもよいし、その他の成分を含んでいてもよい。

[0046] <発光組成物としての使用>

上記のように、本発明の組成物は、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。そのため、本発明の組成物は発光組成物として効果的に用いることができる。本発明の組成物を発光組成物として用いる場合の使用態様は特に制限されないが、例えば組成物を膜状に成形して発光膜として用いる態様や、その発光膜を有機発光素子の発光層として用いる態様、組成物を溶媒に溶解して液状の発光材料として用いる態様などが挙げられる。本発明の組成物を用いた発光膜の構成については、下記の<膜>および<発光膜>の欄の記載を参照することができ、本発明の組成物を発光層に用いた有機発光素子の構成については、下記の<有機発光素子>の欄の記載を参照することができる。

[0047] <膜>

次に、本発明の膜について説明する。

本発明の膜は、本発明の組成物を含むことを特徴とする。

本発明の組成物の説明については、上記の<組成物>の欄の記載を参照することができる。

上記のように、本発明の組成物は、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られるため、この組成物を

含む膜も、その組成物の特性を反映して優れた特性を示す。

[0048] 本発明の膜は、以下のようにして形成することができる。

ある実施形態では、本発明の組成物を含む膜は、湿式工程で形成することができる。湿式工程では、本発明の組成物を溶解した溶液を面に塗布し、溶媒の除去後にフィルムを形成する。湿式工程として、スピンコート法、スリットコート法、インクジェット法（スプレー法）、グラビア印刷法、オフセット印刷法、フレキソ印刷法を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。湿式工程では、本発明の組成物を溶解することができる適切な有機溶媒を選択して用いる。ある実施形態では、組成物に含まれる有機化合物に、有機溶媒に対する溶解性を上げる置換基（例えばアルキル基）を導入することができる。

ある実施形態では、本発明の組成物を含む膜は、乾式工程で形成することができる。ある実施形態では、乾式工程として真空蒸着法を採用することができる、これに限定されるものではない。真空蒸着法を採用する場合は、組成物を構成する各有機化合物を個別の蒸着源から共蒸着させてもよいし、各有機化合物を混合した単一の蒸着源から共蒸着させてもよい。単一の蒸着源を用いる場合は、各有機化合物の粉末を混合した混合粉を用いてもよいし、その混合粉を圧縮した圧縮成形体を用いてもよいし、各有機化合物を加熱溶解して冷却した混合物を用いてもよい。ある実施形態では、単一の蒸着源に含まれる複数の有機化合物の蒸着速度（重量減少速度）が一致しないしほぼ一致する条件で共蒸着を行うことにより、蒸着源に含まれる複数の有機化合物の組成比に対応する組成比の膜を形成することができる。形成される膜の組成比と同じ組成比で複数の有機化合物を混合して蒸着源とすれば、所望の組成比を有する膜を簡便に形成することができる。ある実施形態では、共蒸着される各有機化合物が同じ重量減少率になる温度を特定して、その温度を共蒸着時の温度として採用することができる。

[0049] 本発明の膜は単層構成であっても多層構成であってもよい。本発明の膜が多層構成である場合、各層同士は第1有機化合物、第2有機化合物および第

3有機化合物の少なくとも1つの種類が互いに異なってもよいし、その組成比が互いに異なってもよいし、他の成分の有無が互いに異なってもよい。

本発明の膜の厚さは、10～100nmであることが好ましく、20～60nmであることがより好ましく、30～50nmであることがさらに好ましい。本発明の膜が多層構成である場合、それぞれの膜の厚さの好ましい範囲が、上記の厚さ範囲であることとする。

[0050] ＜発光膜としての使用＞

上記のように、本発明の膜は、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。そのため、本発明の膜は発光膜として効果的に用いることができる。

本発明の膜の説明については、上記の＜膜＞の欄の記載を参照することができる。

本発明の発光膜は、有機発光素子の発光層として効果的に用いることができる。本発明の発光膜を発光層として用いた有機発光素子の構成については、下記の＜有機発光素子＞の欄の記載を参照することができる。

[0051] ＜有機発光素子＞

本発明の組成物は、所定の条件を満たす第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を含むことによりTAF機構が働いて、特に高効率で高色純度の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高い色純度が得られる。そのため、本発明の組成物は、TAF型有機発光素子の発光層の材料として効果的に用いることができ、特に有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層の材料として好適である。

ここで、US2020/0168814A1の[0141]～[0169]および[0192]～[0242]に記載される使用例、デバイス、ディスプレイ、スクリーン等の説明は、「発光層」の材料を「本発明の組成物」に書き換えて、その全体を本明細書の一部としてここに引用し、本発明の説明とする。

[0052] 有機エレクトロルミネッセンス素子の好ましい態様（本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子）は、陽極、陰極、および陽極と陰極の間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、発光層は、本発明の組成物を含み、素子からの発光の最大成分は第3有機化合物からの蛍光であるものである。

本発明の組成物の説明については、上記の＜組成物＞の欄の記載を参照することができる。

素子からの発光の最大成分が第3有機化合物からの蛍光であることは、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光スペクトルにおいて、第3有機化合物由来の発光ピークの面積が全発光ピーク面積の50%超であることをもって確認することができる。素子からの発光における第3有機化合物由来の蛍光成分の割合は、60%超であることがより好ましく、70%超であることがさらに好ましく、80%超であることがさらに好ましく、90%超であることが特に好ましい。第3有機化合物由来の発光ピークの波長（有機エレクトロルミネッセンス素子の発光ピークの波長）は制限されないが、好ましい態様では青色発光領域（400nm～490nm）であり、より好ましい態様では420nm～480nmである。

[0053] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子において、有機層は、少なくとも発光層を含むものであり、発光層のみからなるものであってもよいし、発光層の他に1層以上の有機層を有するものであってもよい。そのような他の有機層として、正孔輸送層、正孔注入層、電子阻止層、正孔阻止層、電子注入層、電子輸送層、励起子阻止層などを挙げることができる。正孔輸送層は正孔注入機能を有した正孔注入輸送層でもよく、電子輸送層は電子注入機能を有した電子注入輸送層でもよい。

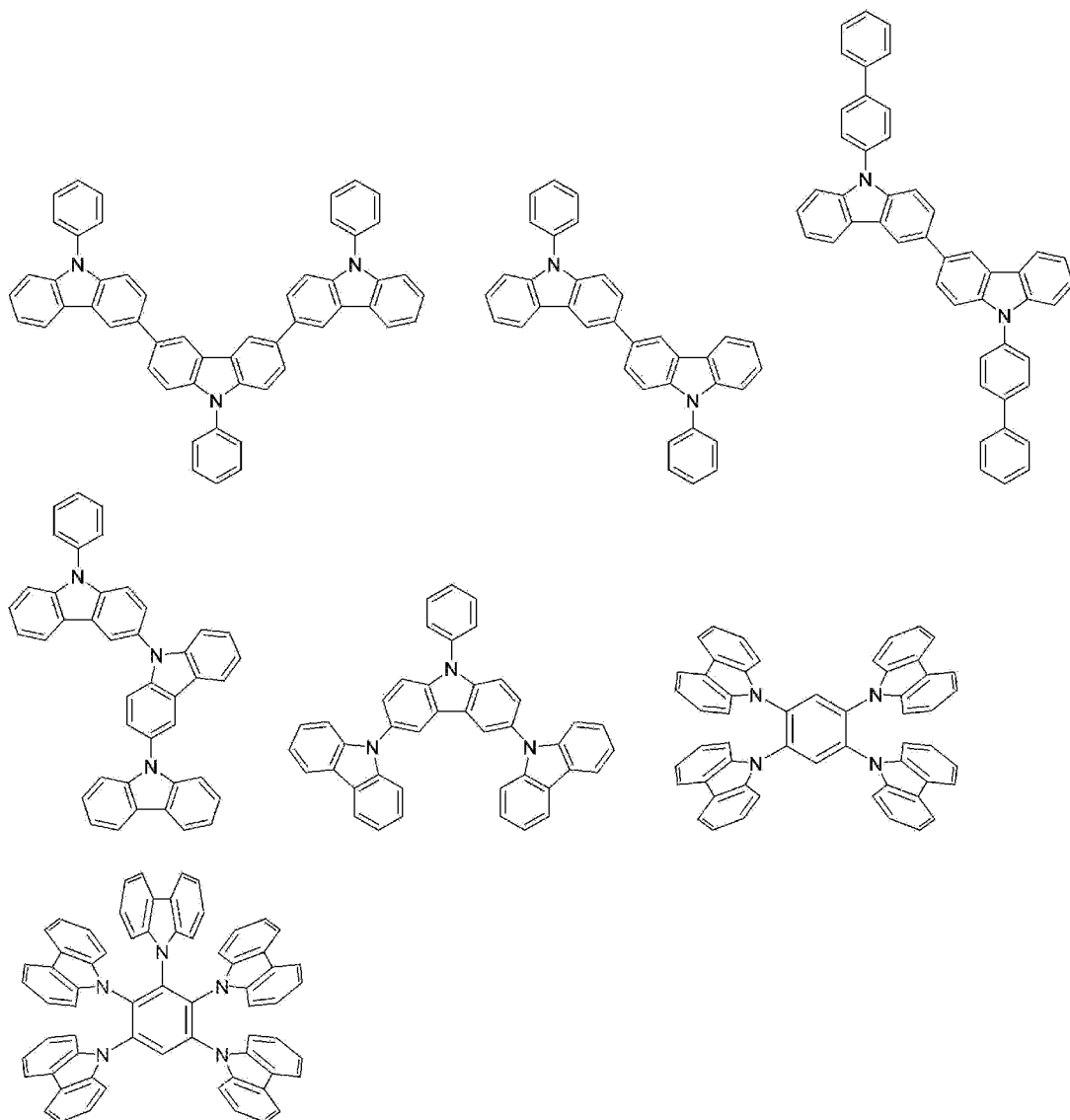
[0054] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、基板側から光を放射するボトムエミッション型であってもよいし、基板と反対側から光を放射するトップエミッション型であってもよいが、トップエミッション型であることが好ましい。ボトムエミッション型の有機エレクトロルミネッセンス素子では

、一対の電極のうち、基板側の電極（一方の電極）が透明電極で構成され、トップエミッション型の有機エレクトロルミネッセンス素子では、一対の電極のうち、基板と反対側の電極（一方の電極）が透明電極で構成される。他方の電極は、透明電極、半透明電極および反射電極のいずれであってもよいが、透明電極や半透明電極である場合、該電極と隣接して、金属単体または合金で形成された反射層を設けてもよい。

[0055] 以下に、有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示する。ただし、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。

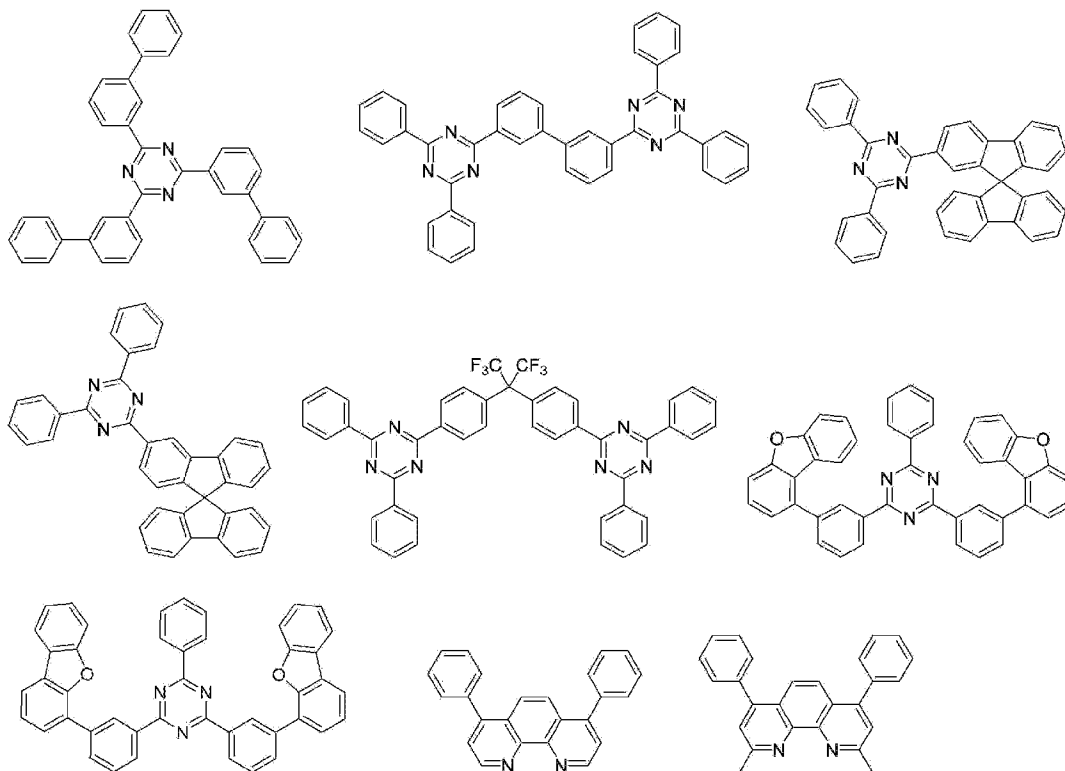
[0056] 本発明のある実施形態では、下記の化合物を電子阻止材料として好ましく用いることができる。

[化14]



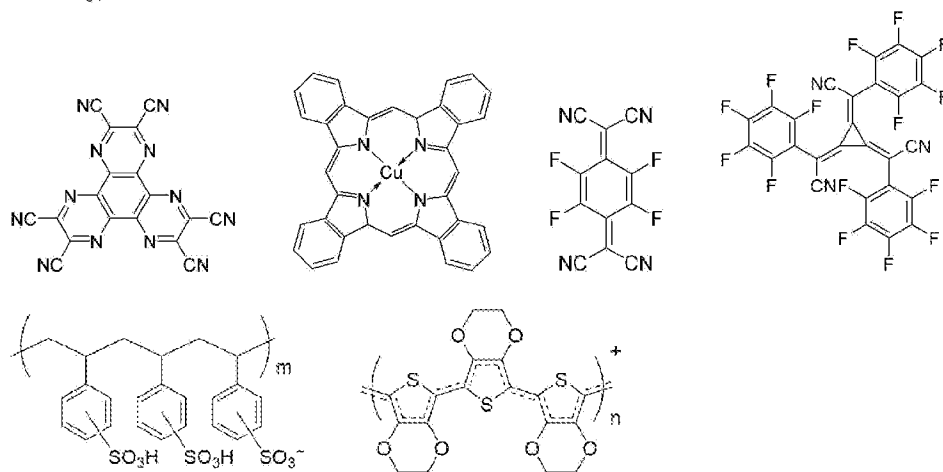
[0057] 本発明のある実施形態では、下記の化合物を正孔阻止材料として好ましく用いることができる。

[化15]



[0058] 以下に、有機エレクトロルミネッセンス素子の正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[化16]

$$\text{MoO}_3.$$


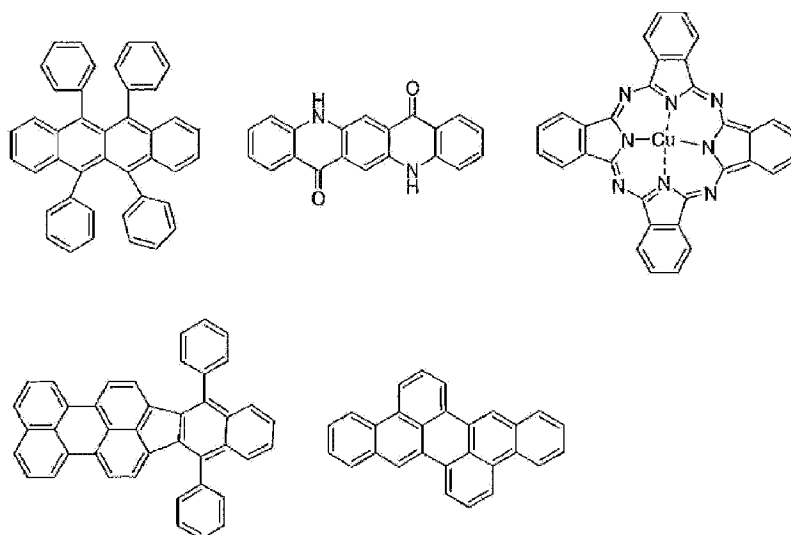
[0059] 次に、有機エレクトロルミネッセンス素子の電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[化17]



[0060] さらに、有機エレクトロルミネッセンス素子の各有機層に添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

[0061] [化18]



[0062] <組成物の設計方法>

本発明の組成物の設計方法は、上記の条件（a）～（d）を満たすように第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を選択することを特徴とする、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を含む組成物の設計方法である。

本発明の組成物の設計方法では、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の選択を、上記の条件（f）および（g）も満たすように行うことが好ましく、上記の条件（h）、（i）および（j）の少なくとも1つも満たすように行うことも好ましく、上記の条件（h1）、（i1）および（j1）の全ても満たすように行うことがより好ましい。

すなわち、本発明の組成物の設計方法では、第1有機化合物と第2有機化

合物と第3有機化合物の選択を、上記の条件（a）～（d）を満たすように行えばよく、さらに、条件（f）および（g）も満たすか、条件（h）、（i）および（j）の少なくとも1つも満たすように行うことが好ましく、条件（f）および（g）も満たし、且つ、条件（h）、（i）および（j）の少なくとも1つも満たすように行うことがより好ましく、条件（f）および（g）も満たし、且つ、条件（h1）、（i1）および（j1）の全ても満たすように行うことが特に好ましい。

条件（a）～（d）、（f）～（j）、（h1）～（j1）の説明については、上記の＜組成物＞の欄の記載を参照することができる。

上記のように、条件（a）～（d）を満たす有機化合物の組成物、好ましくは、条件（a）～（d）、および、条件（f）～（j）、（h1）～（j1）を満たす有機化合物の組成物は、特に高効率で高色純の発光を示し、特に480nm未満の波長範囲で高色純度が得られる。また、条件（a）～（d）、（f）～（j）および（h1）～（j1）は、数値の大小関係で示された客観的な指標であるため、条件を満たすものであるか否かを明確に判別することができる。そのため、条件（a）～（d）、条件（f）～（j）、（h1）～（j1）を満たすように、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を選択することにより、上記のような特性を示す組成物を確実に実現することができる。

ここで、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物の選択対象となる母集団には、上記の〔第1有機化合物〕、〔第2有機化合物〕および〔第3有機化合物〕の欄に例示した化合物群を用いることができる。ただし、本発明の設計方法で用いる選択対象は、これらの化合物例によって限定的に解釈されるべきものではない。

[0063] ＜プログラム＞

本発明のプログラムは、本発明の組成物の設計方法を実施するためのプログラムである。

本発明の組成物の設計方法の説明については、上記の＜組成物の設計方法

＞の欄の記載を参照することができる。

本発明のプログラムは、例えば第1有機化合物として用いる化合物群の $E_{S1}(1)$ を蓄積したデータベース、第2有機化合物として用いる化合物群の $E_{S1}(2)$ 、 $\lambda^{E_{EM}}(2)$ および $\lambda^{P_{EM}}(2)$ を蓄積したデータベース、第3有機化合物として用いる化合物群の $E_{S1}(3)$ 、 $\lambda^{P_{AB}}(3)$ および $\lambda^{P_{EM}}(3)$ を蓄積したデータベースを参照して、条件 (a) ~ (d) を満たす第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の組み合わせを選定するステップを有する。

第2有機化合物のデータベースには、その化合物群の LUMO (2) と HOMO (2) も蓄積し、第3有機化合物のデータベースには、その化合物群の LUMO (3) と HOMO (3) も蓄積して、上記のステップにおいて、これらのデータも参照して、条件 (a) ~ (d) とともに、条件 (f) および (g) を満たす第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物の組み合わせを選定することが好ましい。

また、本発明のプログラムは、上記のステップで選定した第2有機化合物と第3有機化合物の組み合わせについて、 $R_0(2-3)$ 、 $r(2-3)$ および $k_{FRET}(2-3)$ の少なくとも1つを計算するステップと、その組み合わせの中から、条件 (h) ~ (j) の少なくとも1つを満たすものを選択するステップを有することも好ましい。

本発明のプログラムの処理手順例を図1を参照しながら説明する。好ましいプログラムの一態様では、図1に示すようにまず第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物の組み合わせを1つ以上想定し (S1)、その各組み合わせについて条件 (a) ~ (d) を満たすか否かを判定する (S2)。その後、さらに他の組み合わせについても判定したい場合は、ステップS1とステップS2を1サイクル以上繰り返す (S3)。判定結果についてはディスプレイに表示したり、印刷したりして出力することができる。その判定結果は、ステップS1とステップS2のサイクルごとに出力してもよいし、すべてのサイクルが終了した後にまとめて出力してもよい。ステップ

S 3では、さらにサイクルを繰り返すか否かの判断をサブプログラムにより行ってもよい。例えば、条件 (a) ~ (d) のすべてを満たす組み合わせが特定の個数以上見いだされるまでサイクルを繰り返す指令を出すサブプログラムを用いることができる。サイクルを1回以上繰り返す場合、ステップS 1では前に想定した組み合わせとは異なる組み合わせを新たに想定する。このとき、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物のいずれか1種だけを変更してもよいし、いずれか2種を変更してもよいし、3種のすべてを変更してもよい。また、候補となる第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物をあらかじめ読み込ませておき、それらの候補化合物の組み合わせを順に出力するサブプログラムをステップS 1で使用してもよい。その他、当業者に自明な改変を適宜行うことができる。

実施例

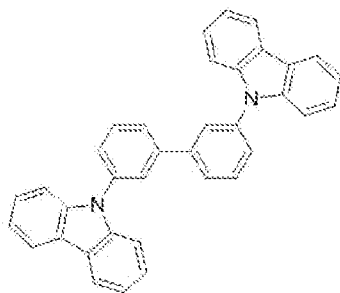
[0064] 以下に実施例と比較例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。

以下の実施例に示す材料、使用量、割合、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。なお、発光特性の評価は、吸収スペクトル装置 (SHIMAZU社製: UV-2550)、絶対PL量子収率測定装置 (浜松ホトニクス社製) を用いて行い、光学計算は、光学計算ソフト (FLUXiM社製: setfos) にて、材料の屈折率、積分球にて実測した発光材料の発光効率および実測したPLスペクトルのデータを用いて行った。

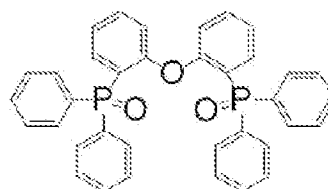
下記の各実施例および各比較例で使用した化合物を以下に示す。各実施例では、ホスト材料の欄に示した化合物H 1が第1有機化合物に対応し、遅延蛍光材料の欄に示した化合物DF 1またはDF 2が第2有機化合物に対応し、蛍光材料の欄に示した化合物F 1が第3有機化合物に対応する。

[0065]

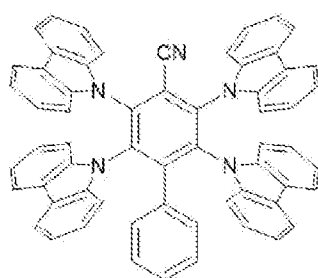
[化19]

ホスト材料

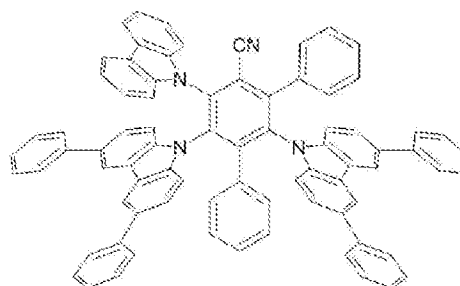
化合物H 1 (mCBP)



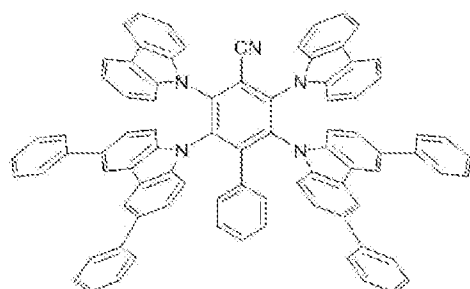
化合物H 2

遅延蛍光材料

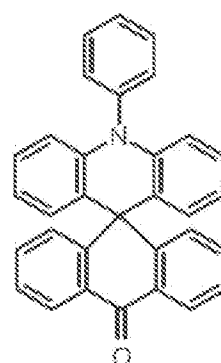
化合物D F 1



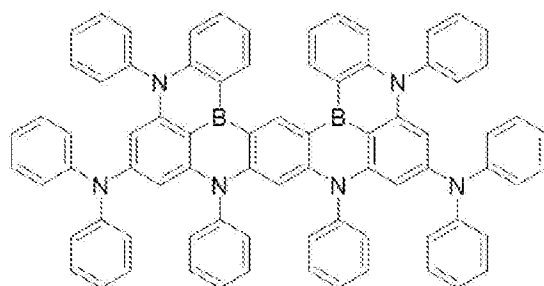
化合物D F 2



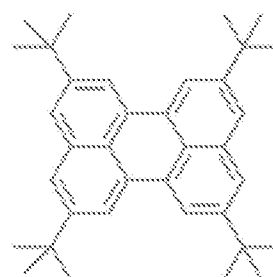
化合物D F 3



化合物D F 4

蛍光材料

化合物F 1



化合物F 2

[0066] 各実施例および各比較例で使用した化合物の物性値を表 1 ～ 3 に示す。

[0067] [表1]

材料の種類	化合物No	$E_{Si}(1)$ (eV)
ホスト材料	化合物H1	3.63
	化合物H2	3.50

[0068] [表2]

材料の種類	化合物No	$E_{Si}(2)$ (eV)	$\lambda_{EM}^E(2)$ (nm)	$\lambda_{EM}^P(2)$ (nm)	LUMO(2) (eV)	HOMO(2) (eV)
遅延蛍光材料	化合物DF1	2.83	436	482	-3.17	-5.95
	化合物DF2	2.83	436	477	-3.30	-6.12
	化合物DF3	2.78	447	494	-3.28	-6.01
	化合物DF4	2.88	430	486	-2.7	-5.8

[0069] [表3]

材料の種類	化合物No	$E_{Si}(3)$ (eV)	$\lambda_{AB}^P(3)$ (nm)	$\lambda_{EM}^P(3)$ (nm)	LUMO(3) (eV)	HOMO(3) (eV)
蛍光材料	化合物F1	2.75	457	470	-2.82	-5.42
	化合物F2	2.82	440	460	-2.6	-5.3

[0070] また、各実施例および各比較例で用いた組成物の組成を表 4 に示す。表 4 に示すように、組成物 1 および組成物 2 は、本発明で規定する条件 (a) ～ (d) とともに、条件 (f) ～ (j) を全て満たす組成物である。一方、比較組成物 1 は、 $\lambda_{EM}^E(2)$ (= 447 nm) が $\lambda_{AB}^P(3) - 10$ nm (= 447 nm) と等しい値になっていて条件 (b) を満たさず、条件 (h) ～ (j) も満たさない組成物である。比較組成物 2 は $\lambda_{EM}^E(2)$ (= 430 nm) が $\lambda_{AB}^P(3) - 10$ nm (= 430 nm) と等しい値になっていて条件 (b) を満たさず、条件 (h) ～ (j) も満たさない組成物である。

[0071]

[表4]

組成物No	ホスト材料 (第1有機化合物)	遅延蛍光材料 (第2有機化合物)	蛍光材料 (第3有機化合物)	ホスト材料:遅延蛍光材料:蛍光材料 (重量比)	フォスター半径 $R_0(2-3)$ (nm)	分子間距離 $r(2-3)$ (nm)	$k_{\text{FRET}}(2-3)$ (s^{-1})	Prompt速度 (ns)
組成物1	化合物H1	化合物DF1	化合物F1	69:30:1.0	7.3	3.71	6.1×10^9	10.1
組成物2	化合物H1	化合物DF2	化合物F1	69:30:1.0	7.4	3.86	3.6×10^9	13.8
比較組成物1	化合物H1	化合物DF3	化合物F1	69:30:1.0	6.5	3.91	1.5×10^9	14.1
比較組成物2	化合物H2	化合物DF4	化合物F2	84:15:1.0	4.4	28.9	1.2×10^9	10.0

[0072] [1] 薄膜の作製と評価

(実施例1) 組成物1の薄膜の作製

真空蒸着法を用い、真空度 1×10^{-6} Pa の条件で、石英基板上に、化合物H1と化合物DF1と化合物F1とを異なる蒸着源から蒸着して40nm厚の薄膜(組成物1)を形成した。このとき、各化合物の組成比(化合物H1:化合物DF1:化合物F1)は69:30:1.0(重量比)とした。

[0073] (実施例2) 組成物2の薄膜の作製

化合物DF1の代わりに化合物DF2を用いること以外は、実施例1と同様にして薄膜(組成物2)を形成した。

[0074] (比較例1) 比較組成物1の薄膜の作製

化合物DF1の代わりに化合物DF3を用いること以外は、実施例1と同様にして薄膜(比較組成物1)を形成した。

[0075] (比較例2) 比較組成物2の薄膜の作製

化合物H1の代わりに化合物H2を用い、化合物DF1の代わりに化合物DF4を用い、化合物F1の代わりに化合物F2を用いること以外は、実施例1と同様にして薄膜(比較組成物2)を形成した。

実施例1、2および比較例1で作製した各薄膜について、365nm励起光で測定した発光スペクトルを図2に示し、発光極大波長、フォトルミネッセンス量子収率(PLQY)、 $FW_{0.3M}$ および、CIE色度座標の測定結果を表5に示す。

[0076] [表5]

実施例No	組成物No	PLQY (%)	$FW_{0.3M}$ (nm)	CIE	
				x	y
実施例1	組成物1	80	32.0	0.127	0.195
実施例2	組成物2	93	29.0	0.116	0.167
比較例1	比較組成物1	83	54.5	0.159	0.319

[0077] 表5に示すように、組成物1および組成物2の薄膜で観測された発光は、 $FW_{0.3M}$ が40nm未満であって色度座標のy値が小さく、高い色純度を示した。これに対して、条件(b)を満たさない比較組成物1からの発光はブ

ロードなピーク形状をなしており、 $FW_{0.3M}$ が54.5 nmと広く、色純度が低いものであった。

また、条件（b）を満たさない比較組成物2の薄膜についても、365 nm励起光による発光スペクトルを測定したところ、裾が広がったブロードなピーク形状であった。

このことから、条件（a）～（d）を満たす3種類の有機化合物を用いて組成物を構成することにより、条件（b）を満たさない組成物に比べて色純度が大きく改善されることがわかった。

[0078] [2] 有機エレクトロルミネッセンス素子の作製と評価

下記の実施例3～5および比較例3、4では図3に示す積層構造を有するボトムエミッション型の有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。

（実施例3） 組成物1を発光層に用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の作製

膜厚50 nmのインジウム・スズ酸化物（ITO）からなる陽極2が形成されたガラス基板1上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-6} Paで積層した。まず、ITO上にHATCNを10 nmの厚さに蒸着して正孔注入層3を形成した。続いて、 α -NPDを35 nmの厚さに蒸着して第1正孔輸送層4を形成し、その上に、TrisPCzを10 nmの厚さに蒸着して第2正孔輸送層5を形成した。さらに、mCBPを5 nmの厚さに蒸着して電子ブロック層6を形成した。次に、組成物1からなる発光層を形成した。具体的には、化合物H1と化合物DF1と化合物F1を異なる蒸着源から共蒸着し、40 nmの厚さの層を形成して発光層7とした。このとき、各化合物の組成比（化合物H1：化合物DF1：化合物F1）は69：30：1.0（重量比）とした。次に、化合物aを10 nmの厚さに蒸着して正孔ブロック層8を形成し、その上に、化合物aとLi qを異なる蒸着源から共蒸着して、30 nmの厚さの正孔輸送層9を形成した。このとき、各化合物の組成比（化合物a：Li q）は70：30（重量比）とした。続いて、Li qを2 nmの厚さに蒸着して電子注入層10を形成し、その上に、Alを

100nmの厚さに蒸着して陰極11を形成した。以上の工程で、組成物1を発光層に用いた有機エレクトロルミネッセンス素子（EL素子1）を作製した。

[0079]（実施例4、5） 発光層の組成比を変えた有機エレクトロルミネッセンス素子の作製

発光層の組成比（化合物H1：化合物DF1：化合物F1）を69.5：30：0.5（重量比）としたこと以外は、実施例3と同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子（EL素子2）を作製した。

また、これとは別に、発光層の組成比（化合物H1：化合物DF1：化合物F1）を68：30：2.0（重量比）としたこと以外は、実施例3と同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子（EL素子3）を作製した。

[0080]（比較例3） 化合物F1を発光層に含まない有機エレクトロルミネッセンス素子の作製

化合物F1を用いずに、化合物H1：化合物DF1を70：30（重量比）として発光層を形成したこと以外は、実施例3と同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子（比較EL素子1）を作製した。

[0081]（比較例4） 比較組成物1を発光層に用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の作製

組成物1の代わりに比較組成物1の組成で発光層を形成したこと以外は、実施例3と同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子（比較EL素子2）を作製した。

[0082] [有機エレクトロルミネッセンス素子の実測による評価]

実施例3～5および比較例3で作製した各EL素子について測定した発光スペクトルを図4に示す。図4中、括弧内の数値は発光層における化合物F1の濃度を示す。また、実施例3～5および比較例3、4で作製した各EL素子について、1000cd/m²で測定した駆動電圧、外部量子効率（EQE）、CIE色度座標および発光のピークトップ波長（発光極大波長）を表6に示す。

[0083] [表6]

素子No	発光層の組成(重量比)	駆動電圧 (V)	EQE (%)	CIE		発光の ピーク波長 (nm)
				x	y	
EL素子2	化合物H1:化合物DF1:化合物F1=69.5:30:0.5	4.39	17.6	0.13	0.16	470
EL素子1	化合物H1:化合物DF1:化合物F1=69:30:1.0(組成物1)	4.48	17.4	0.13	0.15	471
EL素子3	化合物H1:化合物DF1:化合物F1=68:30:2.0	4.61	16.0	0.13	0.15	471
比較EL素子1	化合物H1:化合物DF1=70:30	4.11	15.4	0.16	0.29	479
比較EL素子2	化合物H1:化合物DF3:化合物F1=69.5:30:0.5(比較組成物1)	4.85	17.8	0.15	0.24	472

[0084] 図4に示すように、EL素子1～3の発光ピークは、比較EL素子1の発光ピークに比べて明らかにピーク幅が狭い。また、表6に示すように、EL素子1～3は、比較EL素子1に比べて外部量子効率が高く、また、比較EL素子1、2よりも色度座標のy値が小さく、高い色純度を示した。

このことから、条件(a)～(d)を満たす3種類の有機化合物を用いて発光層を構成することにより、第3有機化合物を用いない素子に比べて効率と色純度が向上し、3種類の有機化合物を用いているが条件(b)を満たさない素子に比べて色純度が向上することがわかった。

[0085] [有機エレクトロルミネッセンス素子の計算による評価]

実施例3で作製したボトムエミッション型のEL素子1、EL素子1の組成物1の代わりに組成物2を発光層に用いるEL素子4、および比較例4で作製したボトムエミッション型の比較EL素子2について、計算による光学シミュレーションを行って素子特性を評価した。また、組成物1を発光層に用いるトップエミッション型のEL素子5、組成物2を発光層に用いるトップエミッション型のEL素子6、比較組成物1を発光層に用いるトップエミッション型の比較EL素子3についても、計算による光学シミュレーションを行って素子特性を評価した。その結果を表7に示す。

トップエミッション型のEL素子(EL素子5、6、比較EL素子3)は、ガラス基板の上に、下記の層構成が積層されたトップエミッション型有機エレクトロルミネッセンス素子である。下記層構成において、「/」は層同士の間の境界を示し、丸括弧内の数値は各層の厚さである。また、「APC反射層」は、Ag:98重量%、Pd:1重量%、Cu:1重量%の組成を有する合金層であり、APC反射層側がガラス基板側に配置していることとする。「組成物」は発光層を構成する組成物であり、EL素子5では組成物1、EL素子6では組成物2、比較EL素子3では比較組成物1である。

APC反射層(150nm)/ITO陽極(10nm)/HATCNの正孔注入層(10nm)/ α -NPDの第1正孔輸送層(35nm)/TrisPCzの第2正孔輸送層(10nm)/mCBPの電子ブロック層(5nm)/組成物からなる発光層(40nm)/化合物aの正孔ブロック層(10nm)/化合物a(

70重量%):Li q(30重量%)の電子輸送層(30nm)/Li qの電子注入層(2nm)/MgAg陰極(15nm)/ α -NPD(105nm)

[0086] [表7]

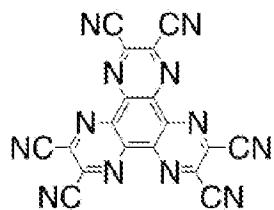
素子No	素子構造	発光層の組成物	分光放射輝度	電流効率 (cd/A)	CIE	
					x	y
EL素子1	ボトムエミッション型	組成物1	0.65	31.4	0.120	0.192
EL素子4	ボトムエミッション型	組成物2	0.75	30.7	0.112	0.167
比較EL素子2	ボトムエミッション型	比較組成物1	0.50	48.9	0.141	0.306
EL素子5	トップエミッション型	組成物1	1.34	20.3	0.111	0.095
EL素子6	トップエミッション型	組成物2	1.75	23.2	0.113	0.090
比較EL素子3	トップエミッション型	比較組成物1	1.04	18.3	0.103	0.122

[0087] 表7に示すように、組成物1を用いるEL素子1および組成物2を用いるEL素子4は、比較組成物1を用いる比較EL素子2よりも色純度が高く（色度座標のy値が小さく）、組成物1を用いるEL素子5および組成物2を用いるEL素子6は、比較組成物1を用いる比較EL素子3よりも色純度が高い（色度座標のy値が小さい）。特にトップエミッション型のEL素子5、6は、トップエミッション型の比較EL素子3に比べて発光強度が大きく向上している。このことから、条件（a）～（d）を満たす3種類の有機化合物を用いて発光層を構成すると、条件（b）を満たさないものに比べて色純度が改善され、特にトップエミッション型において、発光強度が大きく向上することがわかった。

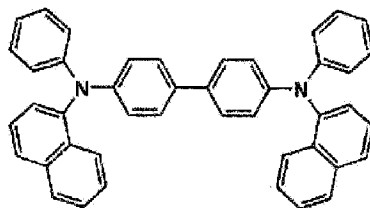
以下において、発光層以外で用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の材料を示す。

[0088]

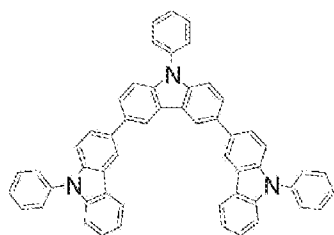
[化20]



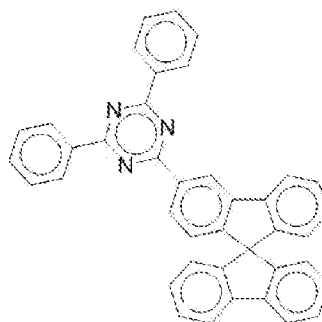
HAT-CN



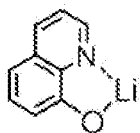
α-NPD



Tris-PCz



化合物a



Liq

産業上の利用可能性

[0089] 本発明の組成物は、T A F機構で発光する組成物であって、高効率で高色純度の発光を示す。このため、本発明の組成物を用いれば、高効率で色純度が高いT A F型有機発光素子を容易に実現することができる。したがって、本発明は、産業上の利用可能性が高い。

符号の説明

- [0090]
- 1 ガラス基板
 - 2 陽極
 - 3 正孔注入層
 - 4 第1正孔輸送層

- 5 第2正孔輸送層
- 6 電子ブロック層
- 7 発光層
- 8 正孔ブロック層
- 9 正孔輸送層
- 10 陰極

請求の範囲

[請求項1] 下記条件（a）～（d）を満たす第1有機化合物と遅延蛍光材料である第2有機化合物と蛍光材料である第3有機化合物を含む組成物。

$$\text{条件（a）} \quad E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$$

$$\text{条件（b）} \quad \lambda^{E_{EM}}(2) < \lambda^{P_{AB}}(3) - 10 \text{ nm}$$

$$\text{条件（c）} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < \lambda^{P_{EM}}(2)$$

$$\text{条件（d）} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < 480 \text{ nm}$$

（上式において、

$E_{S1}(1)$ は前記第1有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$E_{S1}(2)$ は前記第2有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$E_{S1}(3)$ は前記第3有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$\lambda^{E_{EM}}(2)$ は前記第2有機化合物の短波長側の発光波長（単位 nm）、

$\lambda^{P_{AB}}(3)$ は前記第3有機化合物の吸収スペクトルの最も長波長側のピークトップの波長（単位 nm）、

$\lambda^{P_{EM}}(2)$ は前記第2有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長、

$\lambda^{P_{EM}}(3)$ は前記第3有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長

を表す。）

[請求項2] 下記条件（e）を満たす、請求項1に記載の組成物。

$$\text{条件（e）} \quad FW_{0.3M} < 40 \text{ nm}$$

（上式において、 $FW_{0.3M}$ は前記組成物の発光スペクトルの発光ピークに対する相対強度が30％におけるスペクトル幅を表す。）

[請求項3] 下記条件（e1）を満たす、請求項2に記載の組成物。

$$\text{条件（e1）} \quad FW_{0.3M} < 32 \text{ nm}$$

[請求項4] 下記条件（f）および（g）を満たす、請求項1～3のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (f)} \quad \text{LUMO (2)} \leq \text{LUMO (3)}$$

$$\text{条件 (g)} \quad \text{HOMO (2)} \leq \text{HOMO (3)}$$

(上式において、

LUMO (2) は前記第2有機化合物のLUMOのエネルギー、

LUMO (3) は前記第3有機化合物のLUMOのエネルギー、

HOMO (2) は前記第2有機化合物のHOMOのエネルギー、

HOMO (3) は前記第3有機化合物のHOMOのエネルギー

を表す。)

[請求項5] 下記条件 (h) を満たす、請求項1～4のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (h)} \quad R_0 (2-3) > 6.5 \text{ nm}$$

(上式において、 $R_0 (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスター半径を表す。)

[請求項6] 下記条件 (i) を満たす、請求項1～5のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (i)} \quad r (2-3) < 3.91 \text{ nm}$$

(上式において、 $r (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間の分子間距離を表す。)

[請求項7] 下記条件 (j) を満たす、請求項1～6のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (j)} \quad k_{\text{FRET}} (2-3) > 1.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、 $k_{\text{FRET}} (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[請求項8] 下記条件 (h1)、(i1) および (j1) を満たす、請求項1～4のいずれか1項に記載の組成物。

$$\text{条件 (h1)} \quad R_0 (2-3) \geq 7.3 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (i1)} \quad r (2-3) \leq 3.71 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (j 1)} \quad k_{\text{FRET}} (2-3) \geq 6.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、

$R_0 (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスター半径、

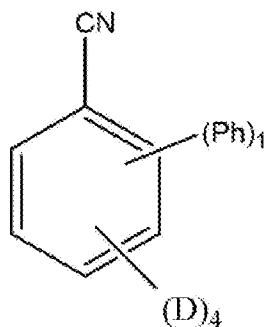
$r (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間の分子間距離、

$k_{\text{FRET}} (2-3)$ は、前記第2有機化合物と前記第3有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[請求項9] 前記有機第2化合物が下記一般式(1)で表される構造を有する、請求項1～8のいずれか1項に記載の組成物。

[化1]

一般式(1)

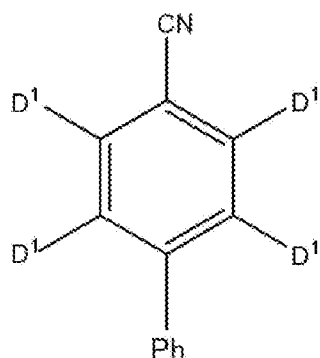


(一般式(1)において、Dは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、Phは、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[請求項10] 前記有機第2化合物が下記一般式(1a)で表される構造を有する、請求項9に記載の組成物。

[化2]

一般式 (1 a)



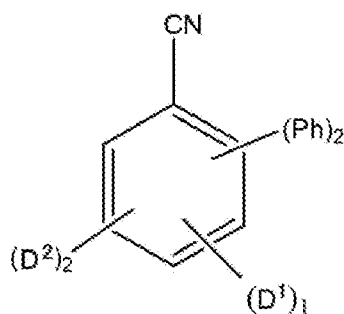
(一般式 (1 a) において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 Ph は、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[請求項11]

前記有機第2化合物が下記一般式 (2) で表される構造を有する、請求項1～8のいずれか1項に記載の組成物。

[化3]

一般式 (2)



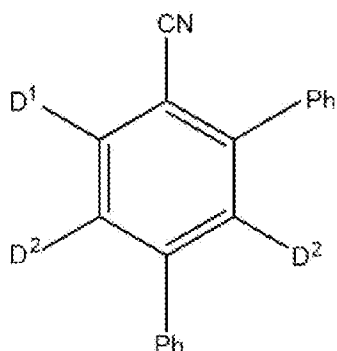
(一般式 (2) において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、2つの Ph は各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[請求項12]

前記有機第2化合物が下記一般式 (2 a) で表される構造を有する、請求項11に記載の組成物。

[化4]

一般式 (2 a)



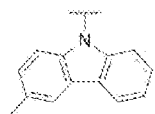
(一般式 (2 a) において、 D^1 は置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、 D^2 は D^1 とは異なる置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を表し、2つのPhは各々独立に、アルキル基、アリール基およびこれらが連結した基からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいフェニル基を表す。)

[請求項13]

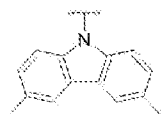
D、 D^1 および D^2 が、各々独立に下記D1～D37のいずれかで表される構造を有する、請求項9～12のいずれか1項に記載の組成物。

[化5-1]

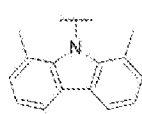
D1



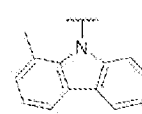
D2



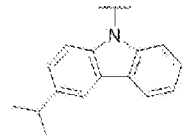
D3



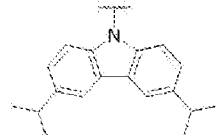
D4



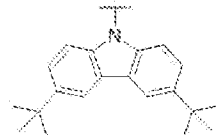
D5



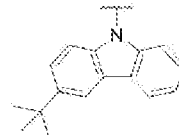
D6



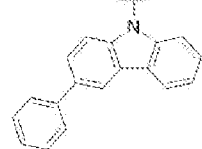
D7



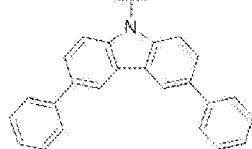
D8



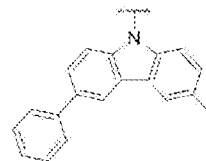
D9



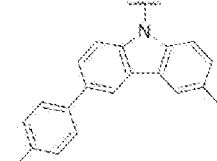
D10



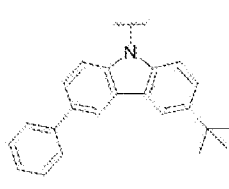
D11



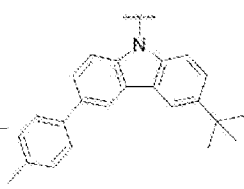
D12



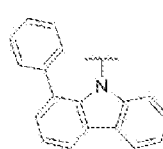
D13



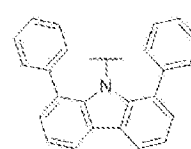
D14



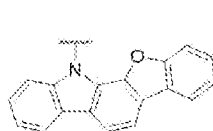
D15



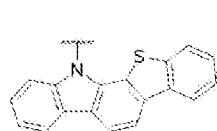
D16



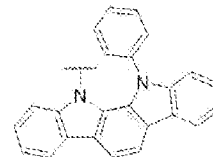
D17



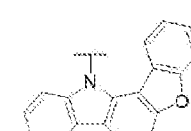
D18



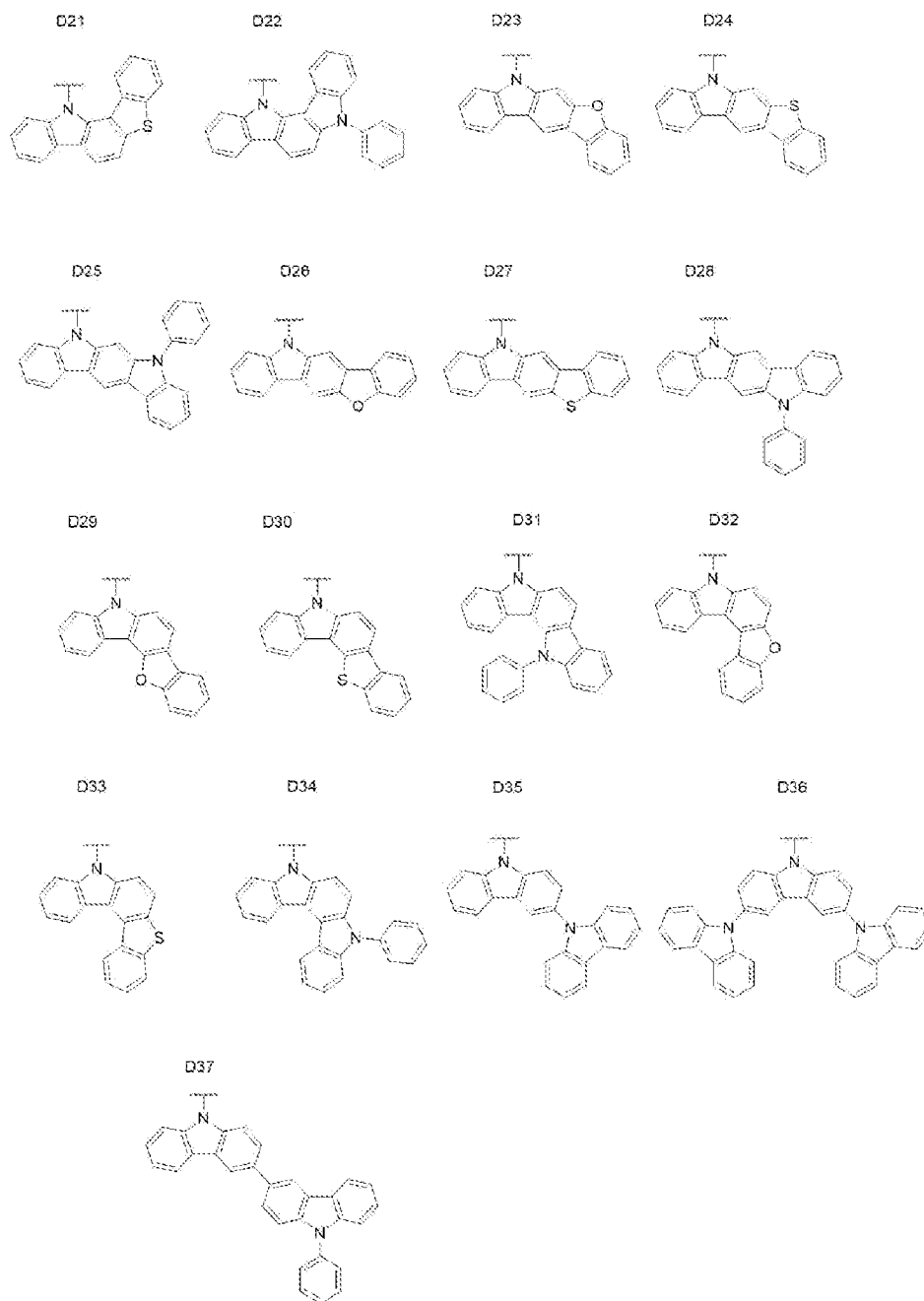
D19



D20



[化5-2]



[請求項14] 請求項1～13のいずれか1項に記載の組成物の発光組成物としての使用。

[請求項15] 請求項1～13のいずれか1項に記載の組成物の発光組成物を含む膜。

[請求項16] 請求項15に記載の膜の発光膜としての使用。

[請求項17] 陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極の間に発光層を含む少なく

とも一層の有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記発光層は、請求項 1 ～ 13 のいずれか 1 項に記載の組成物を含み、

前記素子からの発光の最大成分は前記第 3 有機化合物からの蛍光である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項 18] トップエミッション型である、請求項 17 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項 19] 下記条件 (a) ～ (d) を満たすように第 1 有機化合物と遅延蛍光材料である第 2 有機化合物と蛍光材料である第 3 有機化合物を選択することを特徴とする、第 1 有機化合物と第 2 有機化合物と第 3 有機化合物を含む組成物の設計方法。

$$\text{条件 (a)} \quad E_{S1}(1) > E_{S1}(2) > E_{S1}(3)$$

$$\text{条件 (b)} \quad \lambda^{E_{EM}}(2) < \lambda^{P_{AB}}(3) - 10 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (c)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < \lambda^{P_{EM}}(2)$$

$$\text{条件 (d)} \quad \lambda^{P_{EM}}(3) < 480 \text{ nm}$$

(上式において、

$E_{S1}(1)$ は前記第 1 有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$E_{S1}(2)$ は前記第 2 有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$E_{S1}(3)$ は前記第 3 有機化合物の最低励起一重項エネルギー、

$\lambda^{E_{EM}}(2)$ は前記第 2 有機化合物の短波長側の発光波長 (単位 nm)、

$\lambda^{P_{AB}}(3)$ は前記第 3 有機化合物の吸収スペクトルの最も長波長側のピークトップの波長 (単位 nm)、

$\lambda^{P_{EM}}(2)$ は前記第 2 有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長、

$\lambda^{P_{EM}}(3)$ は前記第 3 有機化合物の発光スペクトルのピークトップの波長

を表す。)

[請求項20] 前記選択を、下記条件 (f) および (g) も満たすように行う、請求項 19 に記載の組成物の設計方法。

$$\text{条件 (f)} \quad \text{LUMO (2)} \leq \text{LUMO (3)}$$

$$\text{条件 (g)} \quad \text{HOMO (2)} \leq \text{HOMO (3)}$$

(上式において、

LUMO (2) は前記第 2 有機化合物の LUMO のエネルギー、

LUMO (3) は前記第 3 有機化合物の LUMO のエネルギー、

HOMO (2) は前記第 2 有機化合物の HOMO のエネルギー、

HOMO (3) は前記第 3 有機化合物の HOMO のエネルギー

を表す。)

[請求項21] 前記選択を、下記条件 (h) も満たすように行う、請求項 19 または 20 に記載の組成物の設計方法。

$$\text{条件 (h)} \quad R_0 (2-3) > 6.5 \text{ nm}$$

(上式において、 $R_0 (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスター半径を表す。)

[請求項22] 前記選択を、下記条件 (i) も満たすように行う、請求項 19 ~ 21 のいずれか 1 項に記載の組成物の設計方法。

$$\text{条件 (i)} \quad r (2-3) < 3.91 \text{ nm}$$

(上式において、 $r (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間の分子間距離を表す。)

[請求項23] 前記選択を、下記条件 (j) も満たすように行う、請求項 19 ~ 22 のいずれか 1 項に記載の組成物の設計方法。

$$\text{条件 (j)} \quad k_{\text{FRET}} (2-3) > 1.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、 $k_{\text{FRET}} (2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[請求項24] 前記選択を、下記条件 (h1)、(i1) および (j1) も満たす

ように行う、請求項 19 に記載の組成物の設計方法。

$$\text{条件 (h 1)} \quad R_0(2-3) \geq 7.3 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (i 1)} \quad r(2-3) \leq 3.71 \text{ nm}$$

$$\text{条件 (j 1)} \quad k_{\text{FRET}}(2-3) \geq 6.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

(上式において、

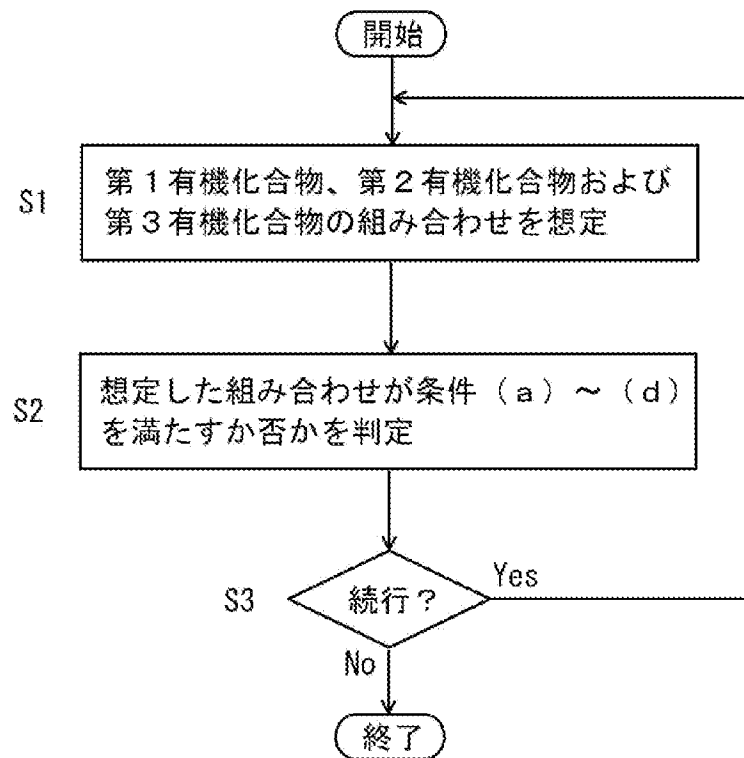
$R_0(2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスター半径、

$r(2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間の分子間距離、

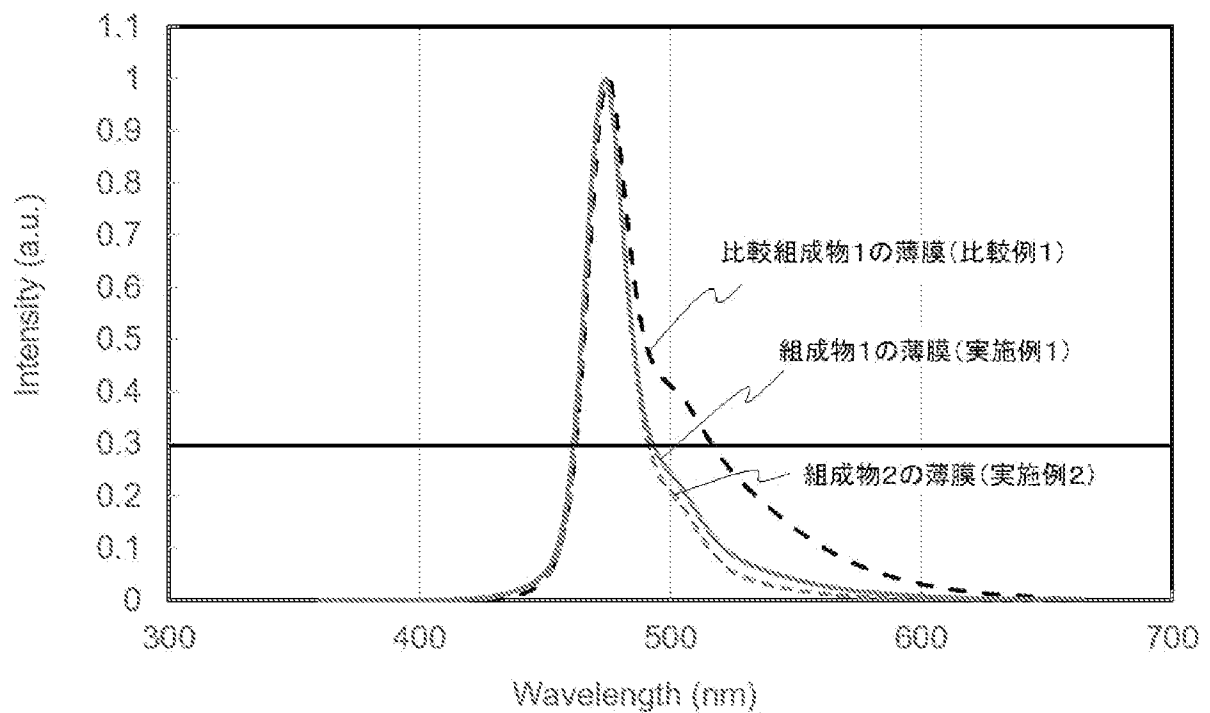
$k_{\text{FRET}}(2-3)$ は、前記第 2 有機化合物と前記第 3 有機化合物との間のフェルスターエネルギー移動速度定数を表す。)

[請求項 25] 請求項 19～24 のいずれか 1 項に記載の組成物の設計方法を実施するためのプログラム。

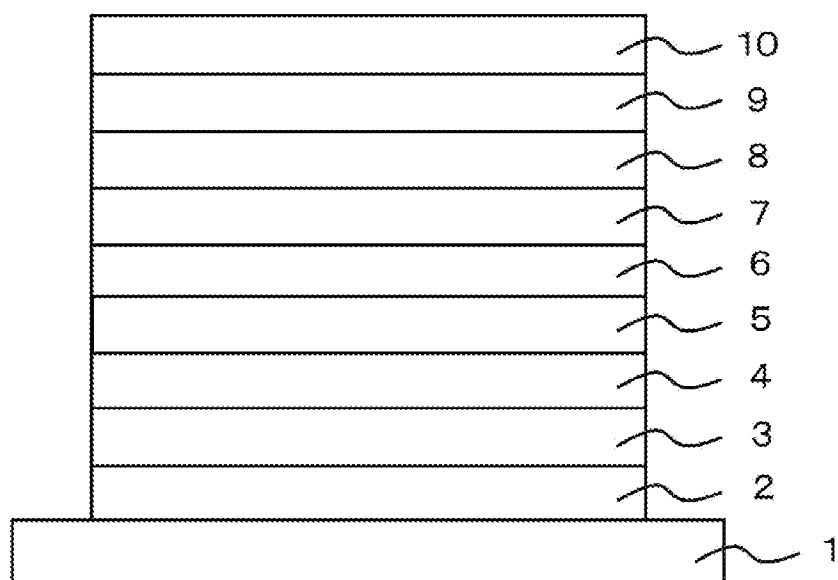
[図1]



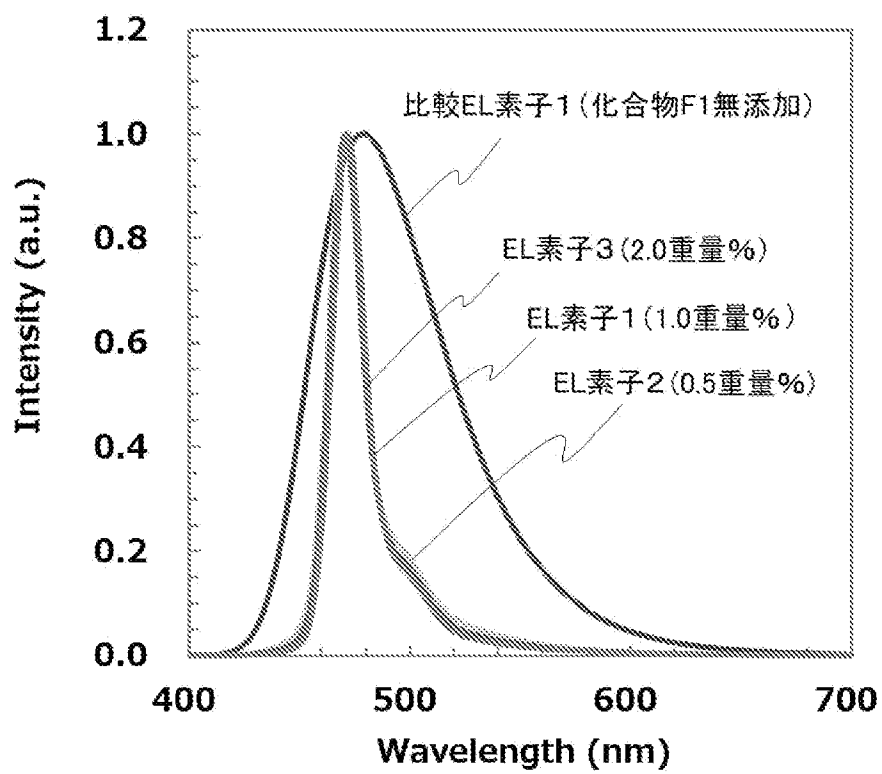
[図2]



[図3]



[図4]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/011169

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**H01L 51/50**(2006.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i; **H05B 33/10**(2006.01)i

FI: H05B33/14 B; H05B33/10; C09K11/06 690; C09K11/06 610; C09K11/06 630

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L51/50; C09K11/06; H05B33/10

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022

Registered utility model specifications of Japan 1996-2022

Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2020/039930 A1 (KYUSHU UNIVERSITY, KWANSEI GAKUIN UNIVERSITY, KYULUX INC.) 27 February 2020 (2020-02-27) paragraphs [0011], [0032], [0033], [0044]-[0050], [0056], [0066], [0067], [0095]-[0119]	1-25
A	JP 2020-31162 A (KYUSHU UNIVERSITY, KYULUX INC.) 27 February 2020 (2020-02-27) paragraphs [0019], [0025], [0102], [0202]-[0208]	1-25
A	WO 2020/067143 A1 (KYOTO UNIVERSITY) 02 April 2020 (2020-04-02) paragraph [0008]	1-25
A	WO 2019/009307 A1 (MITSUBISHI CHEMICAL CORP.) 10 January 2019 (2019-01-10) paragraph [0027]	1-25



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

18 May 2022

Date of mailing of the international search report

31 May 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/011169

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2020/039930	A1	27 February 2020	US 2021/0202851 A1 paragraphs [0016], [0047], [0048], [0064]-[0074], [0084], [0095], [0108]-[0162] EP 3843168 A1 CN 112585778 A KR 10-2021-0055712 A	
JP	2020-31162	A	27 February 2020	US 2021/0202864 A1 paragraphs [0031], [0033], [0160], [0368]-[0378] WO 2020/039708 A1 EP 3843167 A1 CN 112602206 A KR 10-2021-0043688 A	
WO	2020/067143	A1	02 April 2020	CN 112771031 A KR 10-2021-0065956 A	
WO	2019/009307	A1	10 January 2019	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） H01L 51/50(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H05B 33/10(2006.01)i FI: H05B33/14 B; H05B33/10; C09K11/06 690; C09K11/06 610; C09K11/06 630										
B. 調査を行った分野										
調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） H01L51/50; C09K11/06; H05B33/10										
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2022年</td> </tr> </table>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2022年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2022年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2022年
日本国実用新案公報	1922 - 1996年									
日本国公開実用新案公報	1971 - 2022年									
日本国実用新案登録公報	1996 - 2022年									
日本国登録実用新案公報	1994 - 2022年									
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）										
C. 関連すると認められる文献										
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号								
X	WO 2020/039930 A1（国立大学法人九州大学，学校法人関西学院，株式会社K y u l u x）27.02.2020（2020 - 02 - 27） 段落[0011]，[0032]-[0033]，[0044]-[0050]，[0056]，[0066]-[0067]，[0095]-[0119]	1-25								
A	JP 2020-31162 A（国立大学法人九州大学，株式会社K y u l u x）27.02.2020（2020 - 02 - 27） 段落[0019]，[0025]，[0102]，[0202]-[0208]	1-25								
A	WO 2020/067143 A1（国立大学法人京都大学）02.04.2020（2020 - 04 - 02） 段落[0008]	1-25								
A	WO 2019/009307 A1（三菱ケミカル株式会社）10.01.2019（2019 - 01 - 10） 段落[0027]	1-25								
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。										
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献										
国際調査を完了した日 18.05.2022		国際調査報告の発送日 31.05.2022								
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 小久保 州洋 20 1169 電話番号 03-3581-1101 内線 3271								

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/011169

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO	2020/039930	A1	27.02.2020	US 2021/0202851 A1 段落[0016], [0047]- [0048], [0064]-[0074], [0084], [0095], [0108]- [0162] EP 3843168 A1 CN 112585778 A KR 10-2021-0055712 A	
JP	2020-31162	A	27.02.2020	US 2021/0202864 A1 段落[0031], [0033], [0160], [0368]-[0378] WO 2020/039708 A1 EP 3843167 A1 CN 112602206 A KR 10-2021-0043688 A	
WO	2020/067143	A1	02.04.2020	CN 112771031 A KR 10-2021-0065956 A	
WO	2019/009307	A1	10.01.2019	(ファミリーなし)	