

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号
特表2025-505518
(P2025-505518A)

(43)公表日 令和7年2月28日(2025.2.28)

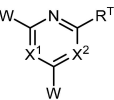
(51)国際特許分類		F I		テーマコード (参考)	
C 0 7 D 403/14 (2006.01)		C 0 7 D 403/14		C S P 3 K 1 0 7	
C 0 9 K 11/06 (2006.01)		C 0 9 K 11/06		6 4 0	
H 1 0 K 85/60 (2023.01)		H 1 0 K 85/60			
H 1 0 K 50/12 (2023.01)		H 1 0 K 50/12			
H 1 0 K 50/14 (2023.01)		H 1 0 K 50/14			
		審査請求 未請求		予備審査請求 未請求 (全87頁) 最終頁に続く	
(21)出願番号 特願2024-542399(P2024-542399)		(71)出願人 512187343			
(86)(22)出願日 令和5年1月18日(2023.1.18)		三星ディスプレイ株式会社			
(85)翻訳文提出日 令和6年7月17日(2024.7.17)		Samsung Display Co.			
(86)国際出願番号 PCT/KR2023/000867		, Ltd.			
(87)国際公開番号 WO2023/149683		大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1			
(87)国際公開日 令和5年8月10日(2023.8.10)		1, Samsung-ro, Gihe			
(31)優先権主張番号 22155266.4		ung-gu, Yongin-si,			
(32)優先日 令和4年2月4日(2022.2.4)		Gyeonggi-do, Repub			
(33)優先権主張国・地域又は機関 欧州特許庁(EP)		lic of Korea			
(81)指定国・地域 AP(BW,CV,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV		(74)代理人 100121382		弁理士 山下 託嗣	
		(72)発明者		デーベス, ニコーパトリック	
		(72)発明者		ドイツ連邦共和国, ブルッフザール 7	
		(72)発明者		6 6 4 6, マイセナール シュトラッセ 8	
		(72)発明者		ダンツ, ミヒャエル	
				最終頁に続く	

(54)【発明の名称】 光電子素子用有機分子

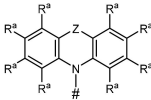
(57)【要約】

本発明は、光電子素子用有機分子に関する。本発明によれば、前記有機分子は、化学式 I の構造を有する第 1 化学的モイエティ、化学式 I I の構造を有する 2 つの第 2 化学的モイエティ、及び、化学式 I I I の構造を有する 1 つの第 3 化学的モイエティを有し、ここで、化学式 I、I I 及び I I I の詳細な説明は、発明の詳細な説明に記載の通りである。

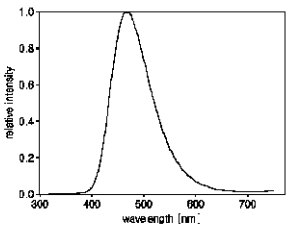
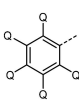
〔化学式 I〕



〔化学式 I I〕



〔化学式 I I I〕



Formula I

Formula II

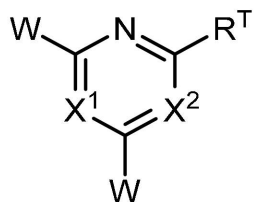
Formula III

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

ー下記化学式 I の構造を含む 1 つの第 1 化学的モイエティ、

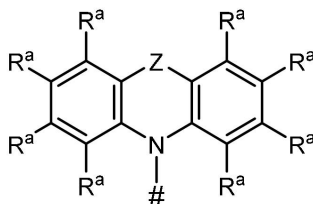
[化学式 I]



10

ー下記化学式 I I の構造を含む 2 つの第 2 化学的モイエティ、及び

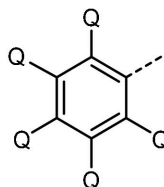
[化学式 I I]



20

ー下記化学式 I I I の構造を含む 1 つの第 3 化学的モイエティを含む、有機分子：

[化学式 I I I]



ここで、

30

前記第 1 化学的モイエティは、単結合を通じて前記第 2 化学的モイエティのそれぞれに連結され、

前記化学式 I の W は、前記第 1 化学的モイエティを 1 つの第 2 化学的モイエティに連結する単結合の結合サイトであり、

Q は、それぞれの場合に、独立して、 W 及び R^1 からなる群から選択され、少なくとも 1 つの Q は W であり、

X^1 及び X^2 は、独立して、 N 及び $C R^a$ からなる群から選択され、 X^1 及び X^2 のうち少なくとも 1 つは N であり、

は、前記第 1 化学的モイエティの前記第 2 化学的モイエティへの結合サイトを示し、

R^T は、前記第 3 化学的モイエティへの結合サイトであり、

40

前記破線



は、前記第 3 化学的モイエティと、 R^T での前記第 1 化学的モイエティとの単結合の結合サイトを示し、

Z は、それぞれの場合に、独立して、直接結合、 $C R^3 R^4$ 、 $C = C R^3 R^4$ 、 $C = O$ 、 $C = N R^3$ 、 $N R^3$ 、 O 、 $S i R^3 R^4$ 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ からなる群から選択され、

R^1 は、下記からなる群から選択され、

50

水素、
重水素、
フェニル、

C₁ - C₅ アルキル、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は重水素で置換され、

選択的に 1 以上の置換基 R⁶ で置換された C₆ - C₁₈ アリール、及び

選択的に 1 以上の置換基 R⁶ で置換された C₃ - C₁₇ ヘテロアリール、

R^a、R³ 及び R⁴ は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、
水素、

重水素、

N (R⁵)₂、

OR⁵、

Si (R⁵)₃、

B (OR⁵)₂、

OSO₂R⁵、

CF₃、

CN、

F、

Br、

I、

C₁ - C₄₀ アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基は、選択的に R⁵C = CR⁵、C ≡ C、Si (R⁵)₂、Ge (R⁵)₂、Sn (R⁵)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR⁵、P (=O) (R⁵)、SO、SO₂、NR⁵、O、S または CONR⁵ で置換され、

C₁ - C₄₀ アルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基は、選択的に R⁵C = CR⁵、C ≡ C、Si (R⁵)₂、Ge (R⁵)₂、Sn (R⁵)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR⁵、P (=O) (R⁵)、SO、SO₂、NR⁵、O、S または CONR⁵ で置換され、

C₁ - C₄₀ チオアルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基は、選択的に R⁵C = CR⁵、C ≡ C、Si (R⁵)₂、Ge (R⁵)₂、Sn (R⁵)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR⁵、P (=O) (R⁵)、SO、SO₂、NR⁵、O、S または CONR⁵ で置換され、

C₂ - C₄₀ アルケニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基は、選択的に R⁵C = CR⁵、C ≡ C、Si (R⁵)₂、Ge (R⁵)₂、Sn (R⁵)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR⁵、P (=O) (R⁵)、SO、SO₂、NR⁵、O、S または CONR⁵ で置換され、

C₂ - C₄₀ アルキニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基は、選択的に R⁵C = CR⁵、C ≡ C、Si (R⁵)₂、Ge (R⁵)₂、Sn (R⁵)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR⁵、P (=O) (R⁵)、SO、SO₂、NR⁵、O、S または CONR⁵ で置換され、

選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換された C₆ - C₆₀ アリール、及び

選択的に 1 以上の置換基 R⁵ で置換された C₃ - C₅₇ ヘテロアリール、

R⁵ は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、

重水素、

10

20

30

40

50

$N(R^6)_2$ 、
 OR^6 、
 $Si(R^6)_3$ 、
 $B(OR^6)_2$ 、
 OSO_2R^6 、
 CF_3 、
 CN 、
 F 、
 Br 、
 I 、

10

$C_1 - C_{40}$ アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

$C_1 - C_{40}$ アルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

20

$C_1 - C_{40}$ チオアルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

$C_2 - C_{40}$ アルケニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

30

$C_2 - C_{40}$ アルキニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換された $C_6 - C_{60}$ アリール、及び
 選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換された $C_3 - C_{57}$ ヘテロアリール、
 R^6 は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、
 重水素、
 OPh 、
 CF_3 、
 CN 、
 F 、

40

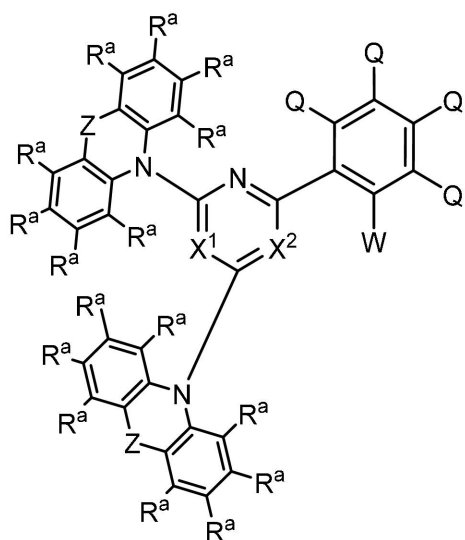
$C_1 - C_5$ アルキル、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

$C_1 - C_5$ アルコキシ、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

50



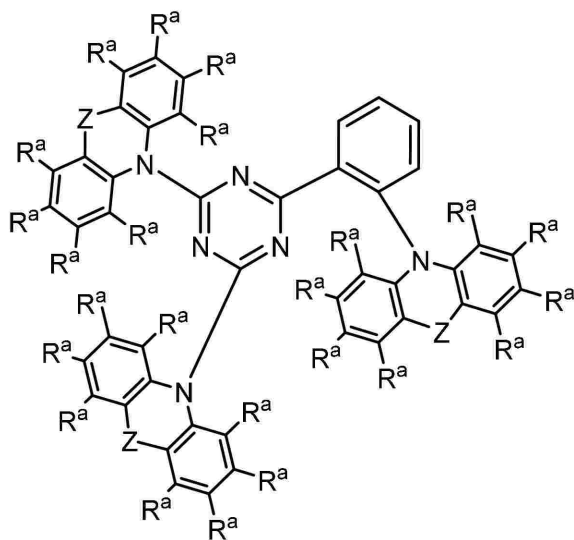
10

【請求項 4】

前記第 1 化学的モイエティは、下記化学式 I c の構造を含む、請求項 1 ないし 3 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子：

【化学式 I c】

20



30

【請求項 5】

R^a は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択される、請求項 1 ないし 4 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子：

40

水素、
重水素、
Me、
i Pr、
t Bu、
CN、
CF₃、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃ 及び Ph からなる群から独立して選択される 1 以上の置換基で選択的に置換された Ph、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃ 及び Ph からなる群から独立して選択される 1 以上の置換基で選択的に置換されたピリジニル、

50

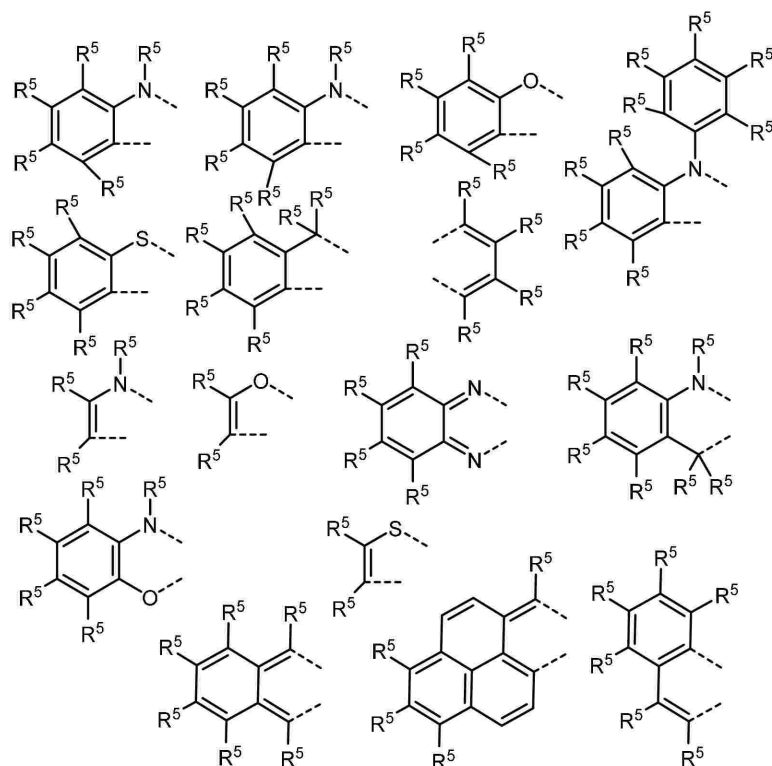
Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたピリミジニル、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたトリアジニル、及び

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたN(Ph)₂、

ここで、選択的に、2つの隣接した置換基R^aは、下記からなる群から選択された環系によって代替され、



ここで、それぞれの破線は、前記表した環系のうち1つをR^aで表された位置に連結する直接結合を示す。

【請求項6】

前記第2化学的モイエティは、下記構造の群から選択された構造を含む、請求項1ないし5のうちいずれか1項に記載の有機分子：

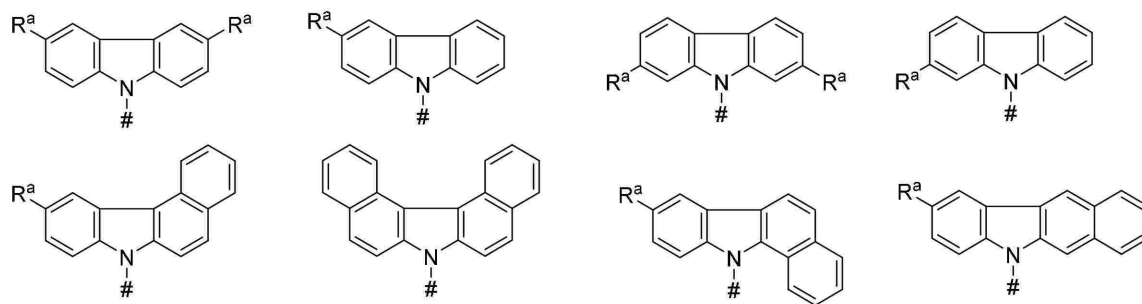
10

20

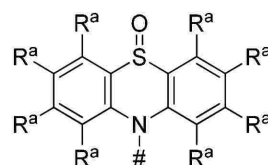
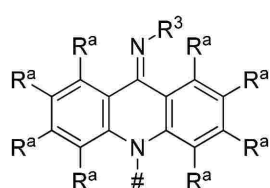
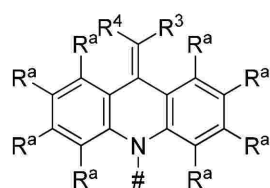
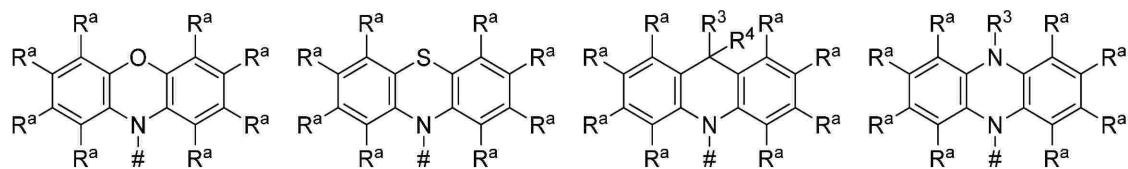
30

40

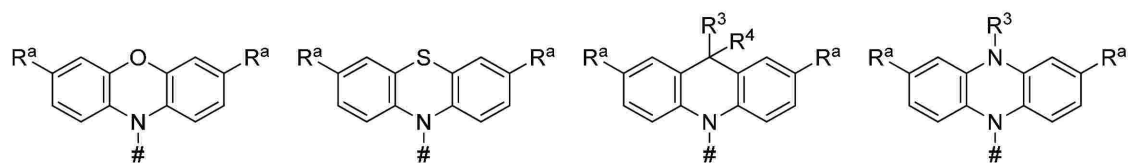
50



10



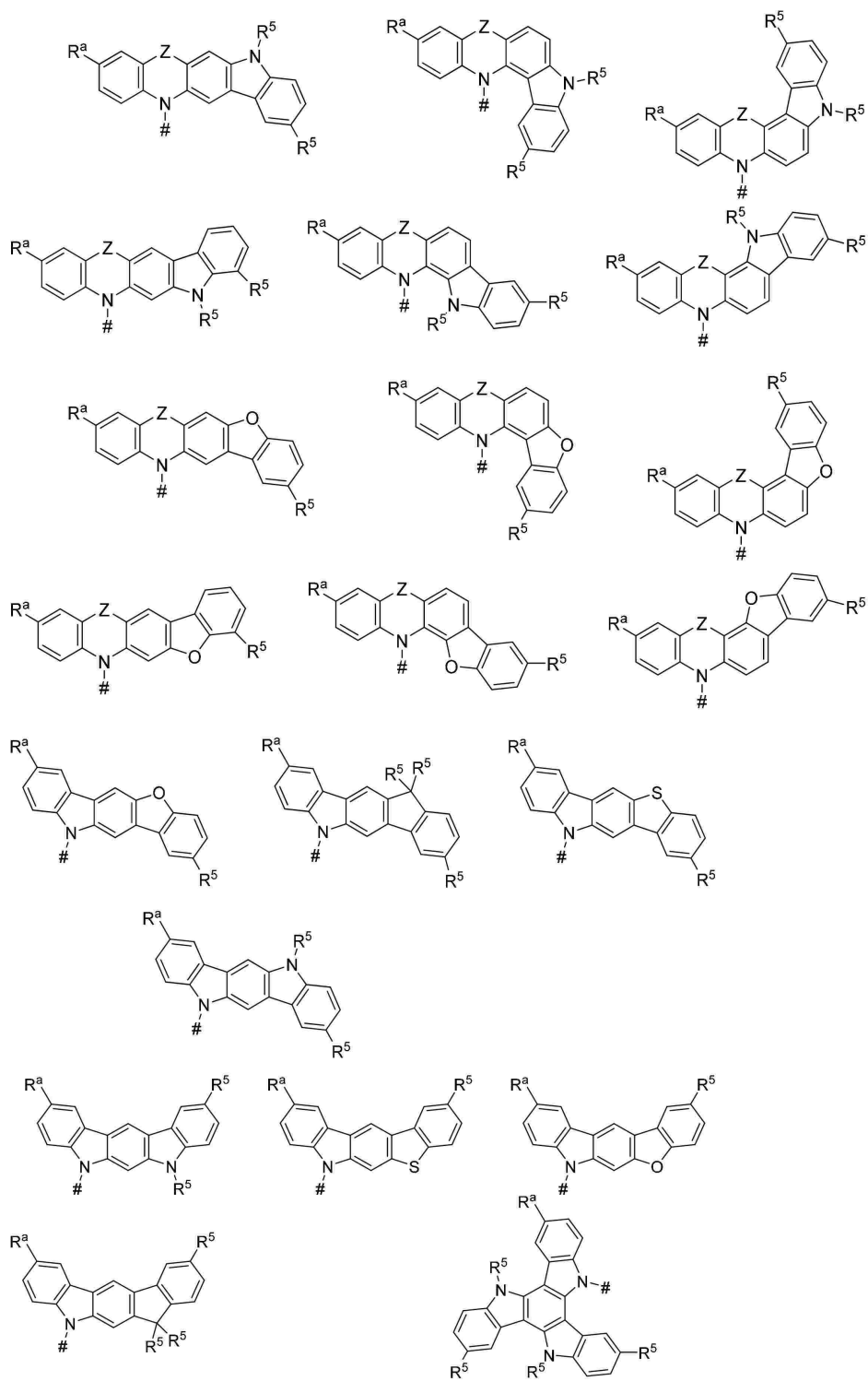
20

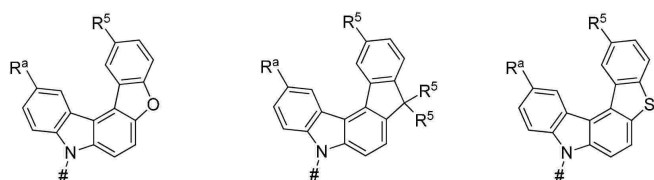
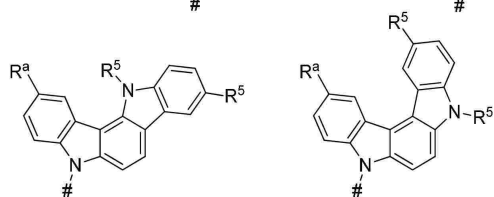
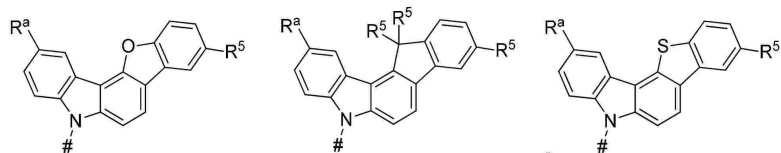
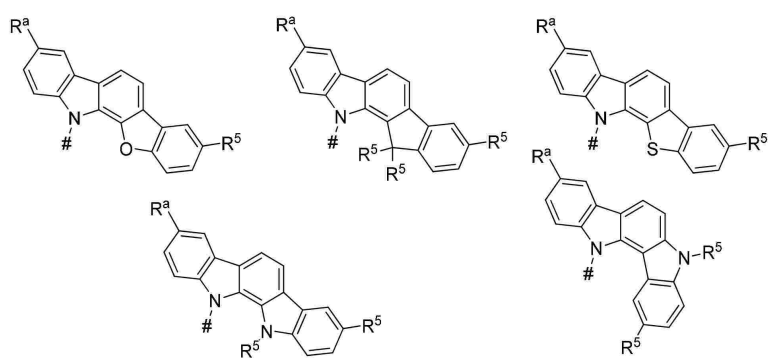
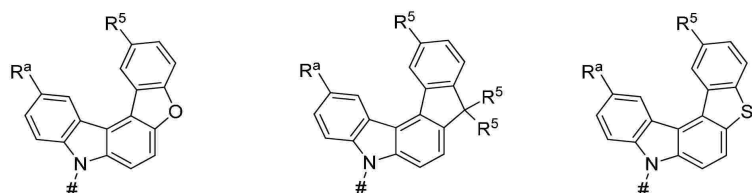
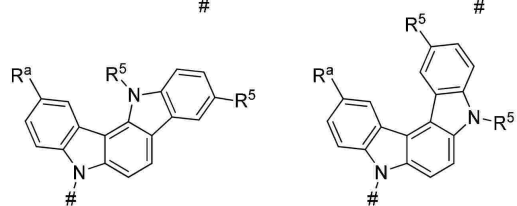
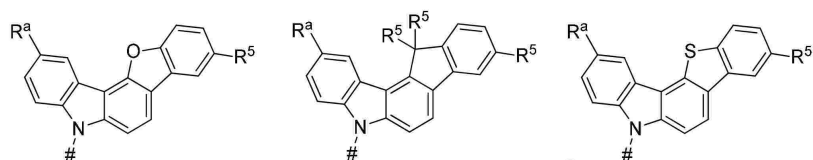


30

40

50





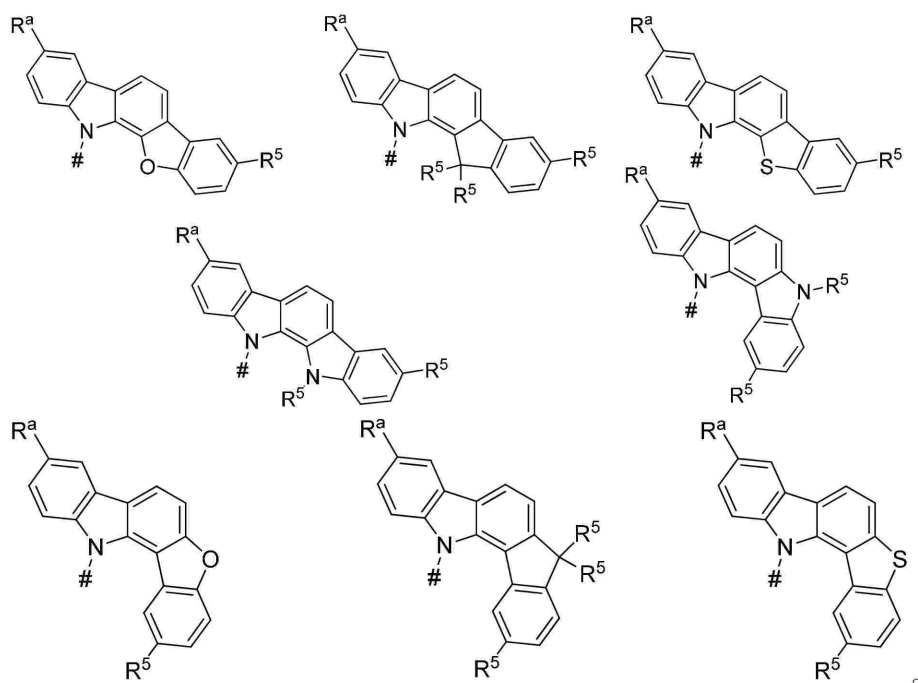
10

20

30

40

50



10

20

【請求項 7】

以下を含む、組成物：

- (a) 特にエミッタ形態の、請求項 1 ないし 6 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子、
- (b) 前記有機分子と異なるホスト材料、及び
- (c) 選択的に、染料及び／または溶媒。

【請求項 8】

0.1～40重量%、または0.8～30重量%、特に1.5～20重量%の前記有機分子を含む、請求項 7 に記載の組成物。

【請求項 9】

TADF 材料及び／または燐光材料を含む、請求項 7 または 8 に記載の組成物。

30

【請求項 10】

前記有機分子と異なる蛍光エミッタ F をさらに含み、

ここで、前記有機分子の分率（重量%）は、前記蛍光エミッタ F の分率（重量%）より高く、好ましくは、前記有機分子の分率（重量%）は、前記蛍光エミッタ F の分率（重量%）より少なくとも 5 倍高い、請求項 7 ないし 9 のうちいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 11】

特に発光エミッタとしての請求項 1 ないし 6 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子、または請求項 7 ないし 10 のうちいずれか 1 項に記載の組成物を含む、光電子素子。

【請求項 12】

前記光電子素子は、下記からなる群から選択される、請求項 11 に記載の光電子素子：

40

- ・有機発光ダイオード（OLED）、
- ・発光電気化学電池、
- ・OLED センサ、
- ・有機ダイオード、
- ・有機太陽電池、
- ・有機トランジスタ、
- ・有機電界効果トランジスタ、
- ・有機レーザ、及び
- ・ダウンコンバージョン素子。

【請求項 13】

50

前記光電子素子は、発光層（EML）、及び／または前記発光層（EML）に直接隣接した層に前記有機分子を含むOLEDの形態である、請求項11に記載の光電子素子。

【請求項14】

請求項1ないし6のうちいずれか1項に記載の有機分子、または請求項7ないし10のうちいずれか1項に記載の組成物が使用され、特に、真空蒸着方法を使用して、または溶液から前記有機分子を処理する段階を含む、光電子素子の製造方法。

【請求項15】

(i) 請求項11ないし13のうちいずれか1項に記載の光電子素子を提供する段階と、

(ii) 前記光電子素子に電流を印加する段階と、を含む、440nmないし470nmの波長を有する光を発生させる方法。 10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光有機分子、並びに有機発光ダイオード（OLED）及びその他光電子素子におけるその用途に関する。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0002】

本発明が解決しようとする課題は、光電子素子における使用に適した分子を提供することである。 20

【課題を解決するための手段】

【0003】

そのような目的は、新規の有機分子を提供する本発明によって達成される。

【0004】

本発明によれば、前記有機分子は、純粋な有機分子であり、すなわち、光電子素子に使用されると知られている金属錯体とは異なり、いかなる金属イオンも含まない。しかしながら、本発明の有機分子は、半金属、特に、B、Si、Sn、Se及び／またはGeを含み得る。

【発明の効果】 30

【0005】

本発明による有機分子は、青色、空色または緑色のスペクトル範囲、好ましくは、青色範囲において最大発光を示す。前記有機分子は、420nmないし530nm、好ましくは、440nmないし500nm、より好ましくは、445nmないし495nm、より一層好ましくは、450nmないし490nmにおいて最大発光を示す。本発明による有機分子のフォトルミネッセンス量子収率は、好ましくは、10%以上、より好ましくは、20%以上、より一層好ましくは、30%以上、特に40%以上、特に好ましくは、50%以上である。本発明の分子は、特に熱活性化遅延蛍光（TADF）を示す。光電子素子、例えば、有機発光ダイオード（OLED）における本発明による分子の使用は、素子のさらに高い効率をもたらす。相応するOLEDは、公知のエミッタ材料及び類似の色相を有するOLEDよりさらに高い安定性を有し、及び／または、OLEDディスプレイにおいて本発明による分子を使用する場合、自然で見える色相のより正確な再現、すなわち、ディスプレイされたイメージでさらに高い解像度が達成される。特に、前記分子は、いわゆる超蛍光（hyper-fluorescence）を可能にするために、蛍光エミッタと組み合わせて使用されうる。 40

【図面の簡単な説明】

【0006】

【図1】PMMAにおいて実施例1（10重量%）の発光スペクトルを示す図面である。

【発明を実施するための形態】

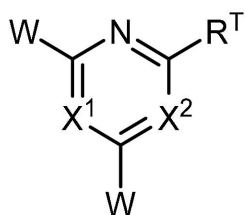
【0007】 50

本発明による有機分子

本発明は、一側面において、下記を含むか、あるいはそれからなる有機分子に関する：
 ー下記化学式Ⅰの構造を含むか、あるいはそれからなる第１化学的モイエティ、

【０００８】

〔化学式Ⅰ〕

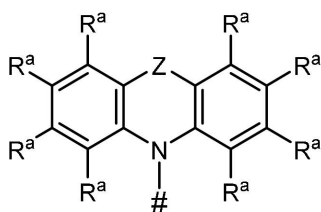


10

ー下記化学式ⅠⅠの構造を含むか、あるいはそれからなる少なくとも２つの第２化学的モイエティ、及び

【０００９】

〔化学式ⅠⅠ〕

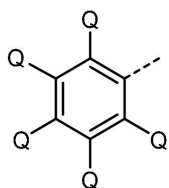


20

ー下記化学式ⅠⅠⅠの構造を含むか、あるいはそれからなる少なくとも１つの第３化学的モイエティ、

【００１０】

〔化学式ⅠⅠⅠ〕



30

ここで、

前記第１化学的モイエティは、単結合を通じて前記第２化学的モイエティに連結され、
 Wは、それぞれの場合に、前記第１化学的モイエティを前記第２化学的モイエティに連結する単結合の結合サイトであり、

Qは、それぞれの場合に、互いに独立して、Wまたは R^1 であり、少なくとも１つのQはWであり、

40

X^1 及び X^2 は、それぞれの場合に、互いに独立して、Nまたは $C R^a$ であり、少なくとも１つのXはNであり、

#は、前記第１化学的モイエティの前記第２化学的モイエティへの結合サイトを示し、
 R^T は、第３化学的モイエティへの結合サイトであり、

前記破線

「」

は、前記第３化学的モイエティと、 R^T での前記第１化学的モイエティとの単結合の結合サイトを示し、

50

Zは、それぞれの場合に、互いに独立して、直接結合、 CR^3R^4 、 $C=CR^3R^4$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、 O 、 SiR^3R^4 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ からなる群から選択され、

R^1 は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、
水素、重水素、フェニル (Ph)、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、選択的に1以上の水素原子は重水素で置換され、

選択的に1以上の置換基 R^6 で置換された C_6-C_{18} アリール、及び

選択的に1以上の置換基 R^6 で置換された C_3-C_{17} ヘテロアリール、

R^a 、 R^3 及び R^4 は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

10

水素、

重水素、

$N(R^5)_2$ 、

OR^5 、

$Si(R^5)_3$ 、

$B(OR^5)_2$ 、

OSO_2R^5 、

CF_3 、

CN、

20

F、

Br、

I、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^5 で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^5C=CR^5$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $Ge(R^5)_2$ 、 $Sn(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^5$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または $CONR^5$ で置換され、

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R^5 で置換され、

30

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^5C=CR^5$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $Ge(R^5)_2$ 、 $Sn(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^5$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または $CONR^5$ で置換され、

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R^5 で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^5C=CR^5$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $Ge(R^5)_2$ 、 $Sn(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^5$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または $CONR^5$ で置換され、

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^5 で置換され、

40

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^5C=CR^5$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $Ge(R^5)_2$ 、 $Sn(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^5$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または $CONR^5$ で置換され、

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^5 で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^5C=CR^5$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $Ge(R^5)_2$ 、 $Sn(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^5$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または $CONR^5$ で置換され、

選択的に1以上の置換基 R^5 で置換された C_6-C_{60} アリール、及び

選択的に1以上の置換基 R^5 で置換された C_3-C_{57} ヘテロアリール、

50

R^5 は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、
水素、重水素、 $N(R^6)_2$ 、 OR^6 、 $Si(R^6)_3$ 、 $B(OR^6)_2$ 、 OSO_2R^6 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $R^6C=CR^6$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^6)_2$ 、 $Ge(R^6)_2$ 、 $Sn(R^6)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^6$ 、 $P(=O)(R^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または $CONR^6$ で置換され、

選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換された C_6-C_{60} アリール、及び

選択的に 1 以上の置換基 R^6 で置換された C_3-C_{57} ヘテロアリール、

R^6 は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

C_1-C_5 アルコキシ、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

C_1-C_5 チオアルコキシ、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

C_2-C_5 アルケニル、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

C_2-C_5 アルキニル、

ここで、選択的に 1 以上の水素原子は、互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

選択的に 1 以上の C_1-C_5 アルキル置換基で置換された C_6-C_{18} アリール、

選択的に 1 以上の C_1-C_5 アルキル置換基で置換された C_3-C_{17} ヘテロアリール、

$N(C_6-C_{18} \text{ アリール})_2$ 、

10

20

30

40

50

N (C₃ - C₁₇ヘテロアリール)₂、及び

N (C₃ - C₁₇ヘテロアリール) (C₆ - C₁₈アリール)、

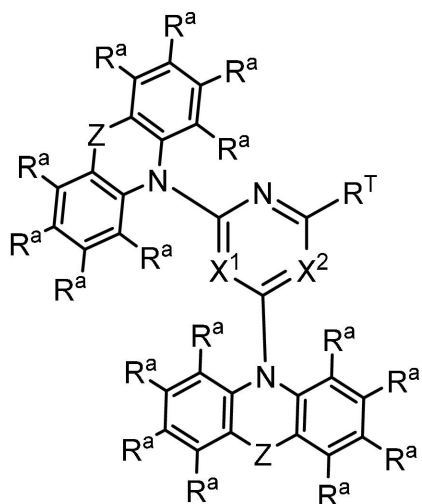
ここで、置換基 R^a、R³、R⁴またはR⁵は、互いに独立して、1以上の置換基 R^a、R³、R⁴またはR⁵と共に、単環式または多環式、脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族環系を選択的に形成する。

【0011】

本発明の一実施形態において、前記第1化学的モイエティは、下記化学式 I a の構造を含むか、あるいはそれからなる：

【0012】

[化学式 I a]



ここで、X¹及びX²はNであり、

R^Tは、第3化学的モイエティへの結合サイトであり、

Zは、それぞれの場合に、互いに独立して、直接結合、C R³ R⁴、C = C R³ R⁴、C = O、C = N R³、N R³、O、S i R³ R⁴、S、S (O) 及びS (O)₂からなる群から選択され、最も好ましくは、直接結合である。

R^aは、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

水素、

重水素、

Me、

i Pr、

t Bu、

CN、

CF₃、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたPh、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたピリジニル、

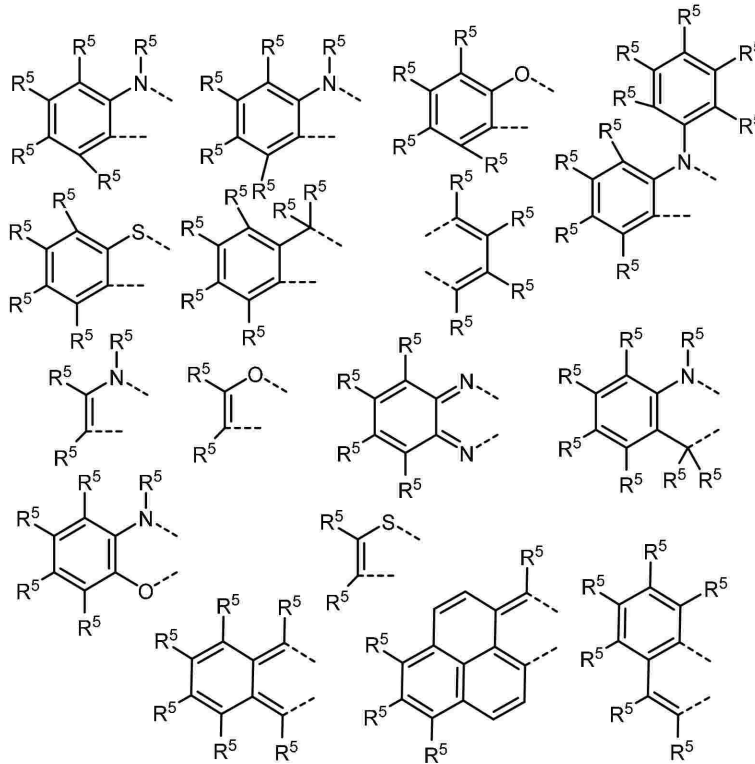
Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたピリミジニル、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたトリアジニル、及び

Me、i Pr、t Bu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたN (Ph)₂、

ここで、2つの隣接した置換基 R^a は、下記からなる群から選択された環系によって代替され、



10

20

ここで、それぞれの破線は、前記表した環系のうち1つを R^a で表された位置に連結する直接結合を示す。

【0013】

本発明の更なる実施形態において、 R^a は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

30

水素、
Me、
iPr、
tBu、及び

Me、iPr、tBu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたPh。

【0014】

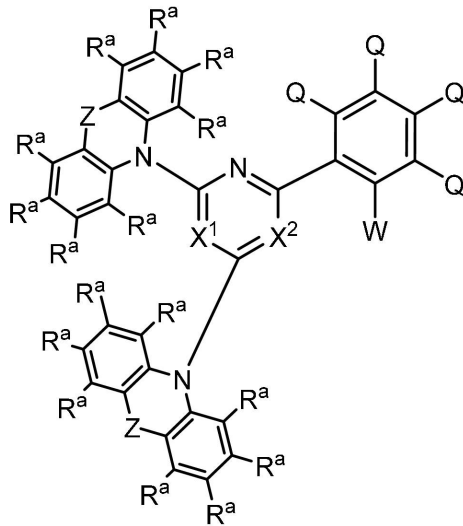
本発明の他の実施形態において、前記第1化学的モイエティは、下記化学式Ibの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【0015】

[化学式Ib]

40

50



10

ここで、 X^1 及び X^2 は両方とも N であり、

Z は、それぞれの場合に、互いに独立して、直接結合、 CR^3R^4 、 $C=CR^3R^4$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、O、 SiR^3R^4 、S、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ からなる群から選択され、最も好ましくは、直接結合である。

20

W は、前記第 1 化学的モイエティを前記第 2 化学的モイエティに連結する単結合の結合サイトであり、

Q は、それぞれの場合に、互いに独立して、W または R^1 であり、最も好ましくは、 R^1 である。

【0016】

本発明の更なる実施形態において、 R^a は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

水素、

Me、

iPr、

tBu、及び

Me、iPr、tBu、CN、 CF_3 及び Ph からなる群から互いに独立して選択される 1 以上の置換基で選択的に置換された Ph。

30

【0017】

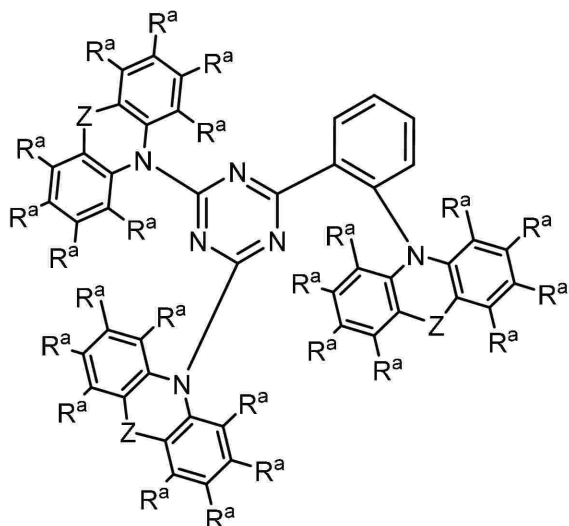
本発明の他の実施形態において、前記第 1 化学的モイエティは、下記化学式 Ic 及び Id の構造を含むか、あるいはそれからなる：

【0018】

[化学式 Ic]

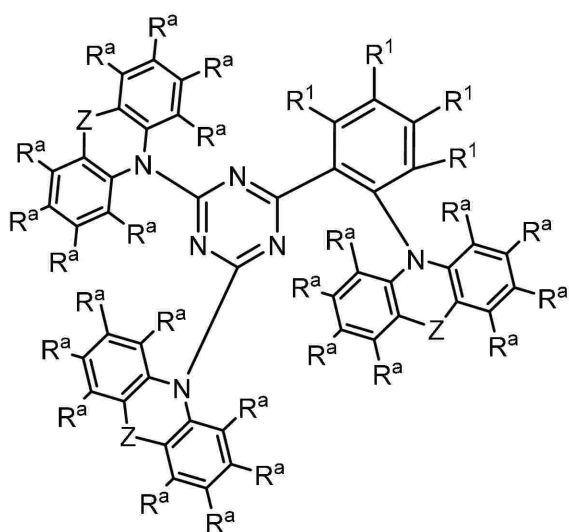
40

50



10

[化学式 I d]



20

30

ここで、

Zは、それぞれの場合に、互いに独立して、直接結合、 CR^3R^4 、 $C=CR^3R^4$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、 O 、 SiR^3R^4 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ からなる群から選択され、最も好ましくは、直接結合である。

【0019】

本発明の更なる実施形態において、 R^a は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

40

水素、

Me、

iPr、

tBu、及び

Me、iPr、tBu、CN、 CF_3 及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたPh。

【0020】

R^1 は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、フェニル、

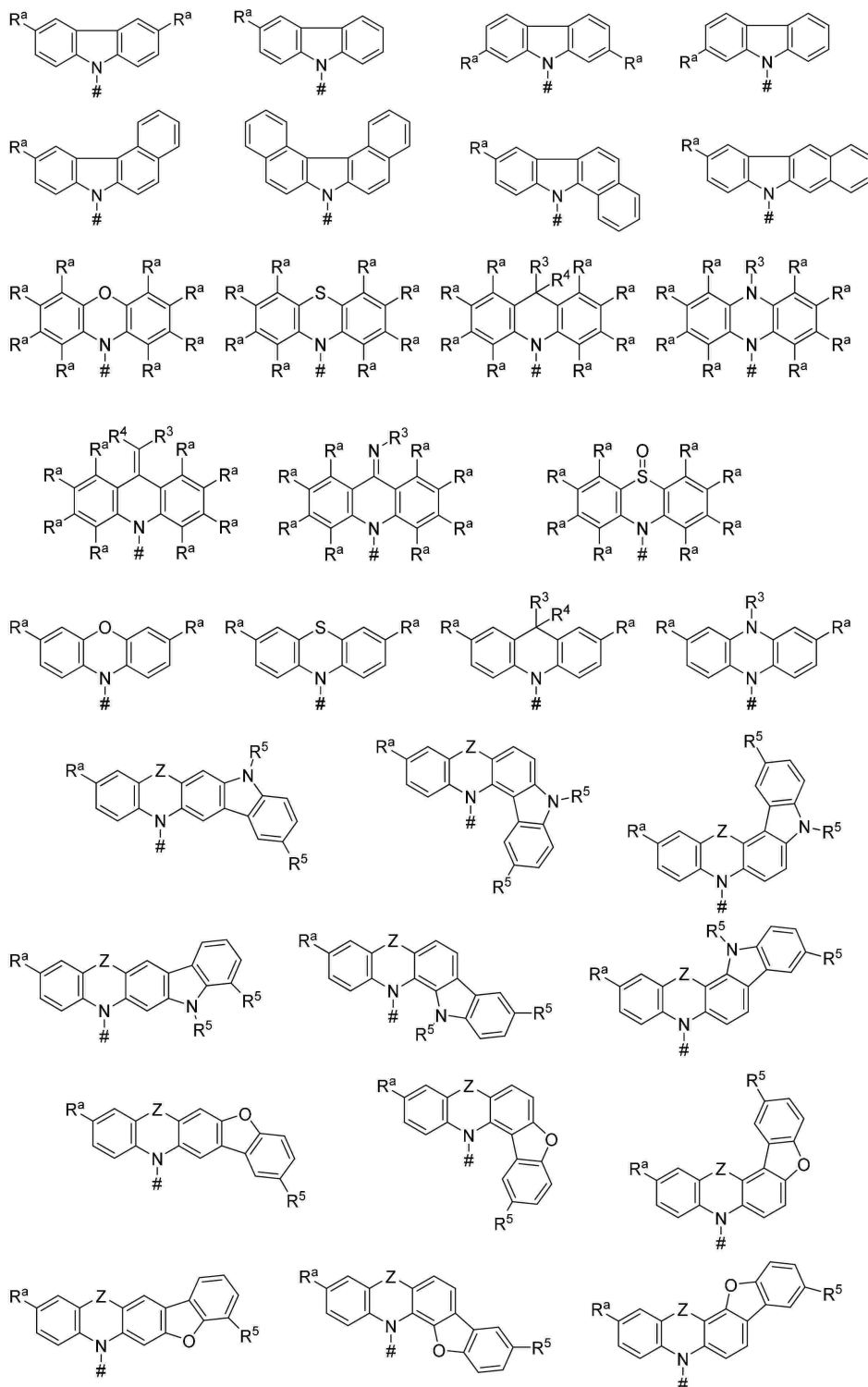
C_1-C_5 アルキル、

50

ここで、選択的に1以上の水素原子は重水素で置換され、
 選択的に1以上の置換基 R^6 で置換された $C_6 - C_{18}$ アリール、及び
 選択的に1以上の置換基 R^6 で置換された $C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、
 最も好ましくは、 R^1 は、それぞれの場合に、互いに独立して、水素、重水素及びフェ
 ニルからなる群から選択される。

【0021】

他の実施形態において、前記第2化学的モイティは、下記構造の群から選択された構
 造を含むか、あるいはそれからなる：



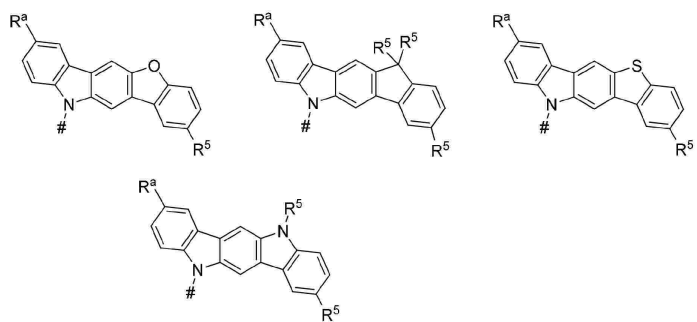
10

20

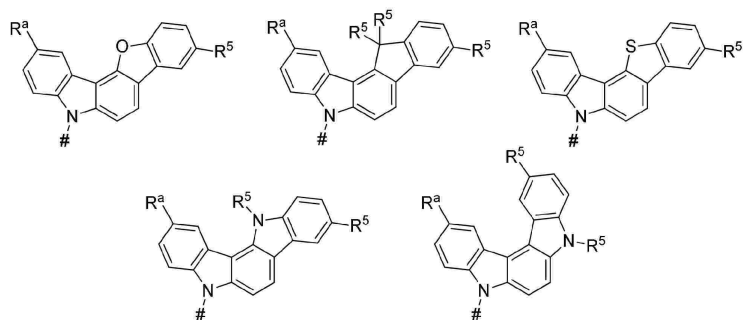
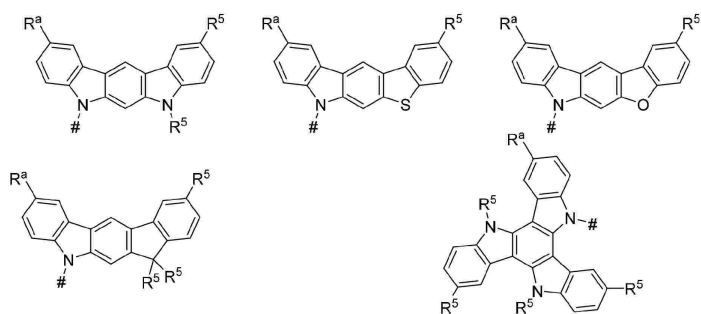
30

40

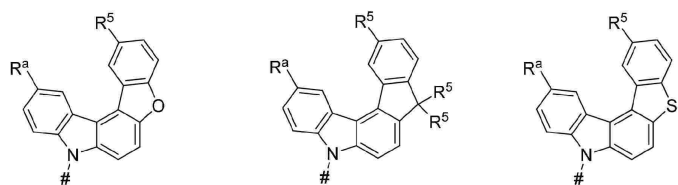
50



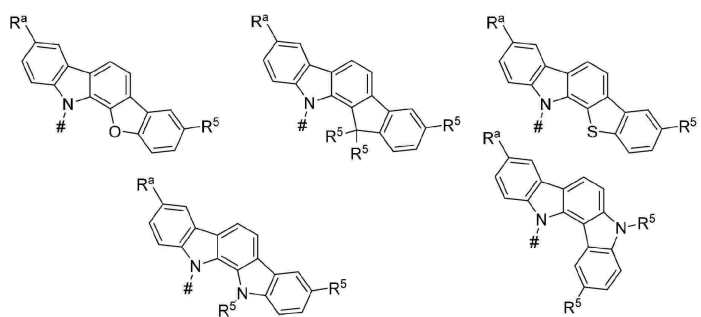
10



20

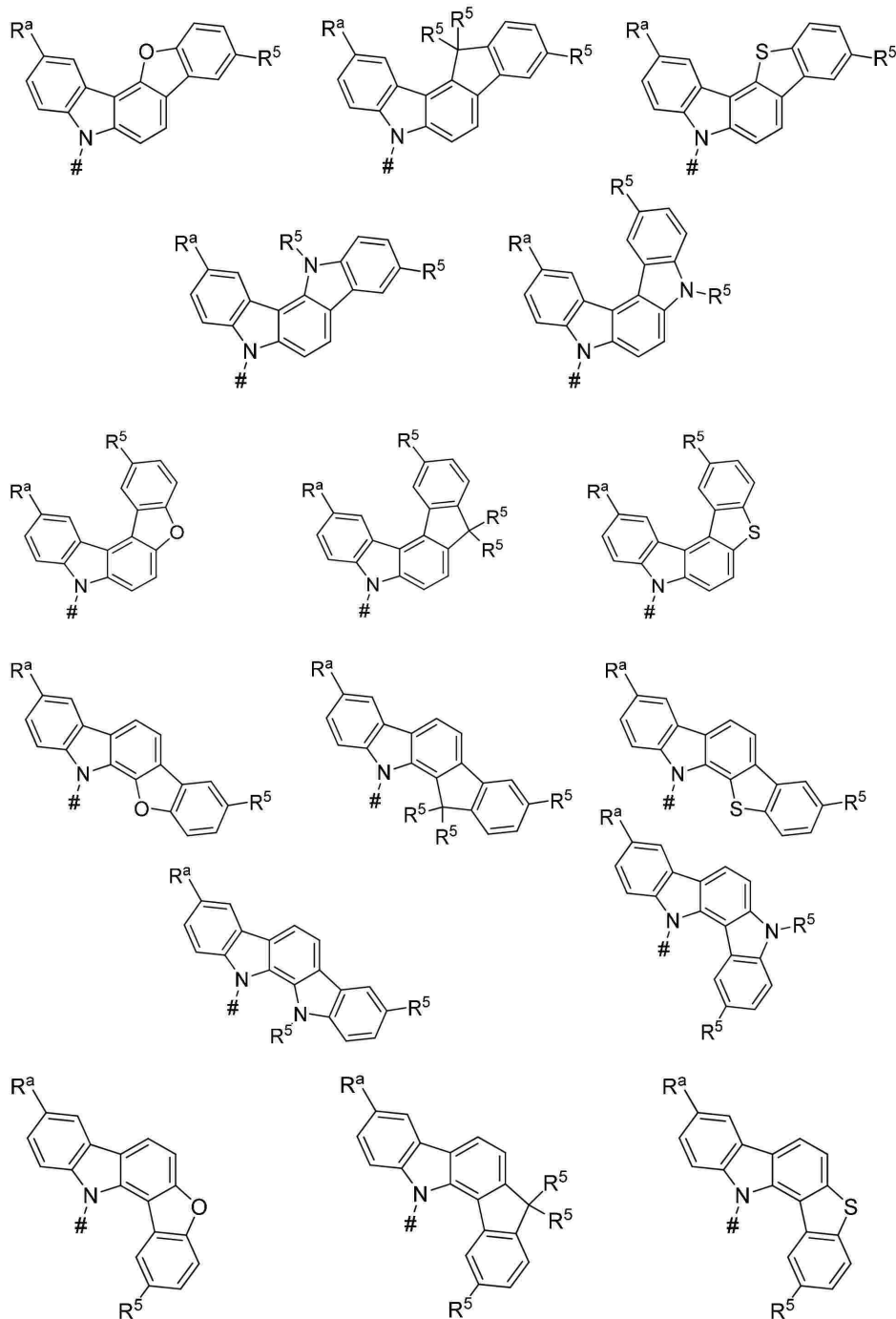


30



40

50



10

20

30

40

50

【0022】

定義

ここで、用語「層」は、広範囲に平面形状を有するボディまたはシート状物を意味する。光電子素子は、複数の層で構成され得る。

【0023】

本発明の文脈において、発光層（EML）は、光電子素子の層であり、ここで、前記層からの発光は、素子に電圧及び電流を印加するときに観察される。当業者は、光電子素子からの発光が少なくとも1つのEMLからの発光に起因することを理解することができる。熟練した技術者は、EMLからの発光が典型的に（主に）前記EMLに含まれた全ての材料に起因せず、特定のエミッタ材料に起因するということを理解することができる。

【0024】

本発明の文脈において、「エミッタ材料」（「エミッタ」ともいう）は、光電子素子の発光層（EML）に含まれるとき、電圧及び電流が前記素子に加えられる場合に光を放出する材料である。エミッタ材料は、一般的に「発光性ドーパント」材料である。ドーパント材料（発光性如何にかかわらず）は、本明細書においてホスト材料というマトリックス材料に組み込まれた材料である。ここで、ホスト材料は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDのような光電子素子に含まれるとき、一般的にH^Bと称される。

【0025】

本発明の文脈において、用語「環状基」は、最も広い意味において、任意の単環式モイエティ、二環式モイエティまたは多環式モイエティとしても理解される。

【0026】

本発明の文脈において、化学構造を言及するとき、用語「環」は、最も広い意味において、任意の単環式モイエティとしても理解される。同じ見地から、化学構造を言及するとき、用語「環」は、最も広い意味において、任意の二環式モイエティまたは多環式モイエティとしても理解される。

【0027】

本発明の文脈において、「環系」は、最も広い意味において、任意の単環式モイエティ、二環式モイエティまたは多環式モイエティとしても理解される。

【0028】

本発明の文脈において、用語「環原子」は、環または環系の環状コアの一部であり、環状コアに選択的に付着された非環状置換基の一部ではない、任意の原子を称する。

【0029】

本発明の文脈において、用語「炭素環」は、最も広い意味において、環状コア構造が水素というまでもなく、または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む任意の環状基としても理解される。用語「炭素環の」は、形容詞であり、環状コア構造が水素というまでもなく、または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む環状基を称するものとも理解される。

【0030】

本発明の文脈において、用語「ヘテロ環」は、最も広い意味において、環状コア構造が炭素原子だけでなく、少なくとも1つのヘテロ原子を含む任意の環状基としても理解される。用語「ヘテロ環の」は、形容詞であり、環状コア構造が炭素原子だけでなく、少なくとも1つのヘテロ原子を含む環状基を称するものとも理解される。該ヘテロ原子は、特定実施形態において特に言及されない限り、それぞれの場合に、同一であっても、異なってもよく、好ましくは、B、Si、N、O、S及びSe、より好ましくは、B、N、O及びS、最も好ましくは、N、O及びSからなる群から個別的に選択されうる。本発明の文脈においてヘテロ環に含まれた全ての炭素原子またはヘテロ原子というまでもなく、水素または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能である。

【0031】

当業者は、任意の環状基（すなわち、任意の炭素環及びヘテロ環）が脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族であることを理解することができる。

【0032】

本発明の文脈において、環状基（すなわち、1つの環、複数の環、環系、炭素環、ヘテロ環）を言及するとき、用語「脂肪族」は、環状コア構造（選択的に付着された置換基は含まず）の芳香族またはヘテロ芳香族環または環系の一部ではない少なくとも1つの環原子を含むことを意味する。好ましくは、脂肪族環状基内のほとんどの環原子、より好ましくは、全ての環原子は、芳香族またはヘテロ芳香族環または環系（例えば、シクロヘキサンまたはピペリジンにおいて）の一部ではない。ここで、一般的に脂肪族環または環系を言及するとき、炭素環基とヘテロ環基との間に区別が行われず、用語「脂肪族」は、脂肪族環基内でヘテロ原子が含まれるか否かを示すために、炭素環またはヘテロ環を説明する形容詞としても使用される。

10

20

30

40

50

【0033】

熟練した技術者によって理解されるように、用語「アリール」及び「芳香族」は、最も広い意味において、任意の単環式芳香族モイエティ、二環式芳香族モイエティまたは多環式芳香族モイエティ、すなわち、全ての環原子が芳香族環系の一部である環基、好ましくは、同一芳香族環系の一部としても理解される。しかし、本明細書の全体にわたって、用語「アリール」及び「芳香族」は、全ての芳香族環原子が炭素原子である単環式芳香族モイエティ、二環式芳香族モイエティまたは多環式芳香族モイエティに制限される。対照的に、本明細書において、用語「ヘテロアリール」及び「ヘテロ芳香族」は、少なくとも1つの芳香族炭素環原子が、ヘテロ原子（すなわち、炭素ではない）によって置換された任意の単環式芳香族モイエティ、二環式芳香族モイエティまたは多環式芳香族モイエティを称する。本発明の特定実施形態において特に言及されない限り、「ヘテロアリール」または「ヘテロ芳香族」内の少なくとも1つのヘテロ原子は、それぞれの場合に、同一であっても、異なってもよく、N、O、S及びSe、より好ましくは、N、O及びSからなる群から個別的に選択されうる。当業者は、形容詞「芳香族」及び「ヘテロ芳香族」が任意の環状基（すなわち、任意の環系）を記述するのに使用されることを理解する。すなわち、芳香族環状基（すなわち、芳香族環系）はアリール基であり、ヘテロ芳香族環状基（すなわち、ヘテロ芳香族環系）はヘテロアリール基である。

10

【0034】

本発明の特定実施形態において特に言及されない限り、本明細書において、アリール基は、好ましくは、6ないし60個の芳香族環原子、より好ましくは、6ないし40個の芳香族環原子、より一層好ましくは、6ないし18個の芳香族環原子を含む。本発明の特定実施形態において特に言及されない限り、本明細書において、ヘテロアリール基は、好ましくは、5ないし60個の芳香族環原子、より好ましくは、5ないし40個の芳香族環原子、より一層好ましくは、5ないし20個の芳香族環原子を含み、そのうち少なくとも1つはヘテロ原子であり、好ましくは、N、O、S及びSe、より好ましくは、N、O及びSから選択される。1以上のヘテロ原子がヘテロ芳香族基を含む場合、全てのヘテロ原子は、好ましくは、互いに独立して、N、O、S及びSe、より好ましくは、N、O及びSから選択される。

20

【0035】

本発明の文脈において、芳香族基及びヘテロ芳香族基（例えば、アリール置換基またはヘテロアリール置換基）の両方に対し、芳香族環炭素原子の数は、特定置換基の定義において下付き数字、例えば、「C₆-C₆₀アリール」の形態に与えられる。これは、それぞれのアリール置換基が6ないし60個の芳香族炭素環原子を含むことを意味する。脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族の置換基であるか否かにかかわらず、全ての他の種類の置換基で許容される炭素原子の数を示すために、同一の下付き数字が使用される。例えば、「C₁-C₄₀アルキル」という表現は、1ないし40個の炭素原子を含むアルキル置換基を意味する。

30

【0036】

アリール基の好ましい例は、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ピレン、ジヒドロピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ベンズアントラセン、ベンゾフェナントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレンから誘導された基、またはそれら基の組み合わせを含む。

40

【0037】

ヘテロアリール基の好ましい例は、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン；ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリドイミダゾール、ピラジノイミダゾール、キ

50

ノキサリノイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1, 2-チアゾール、1, 3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、1, 3, 5-トリアジン、1, 2, 4-トリアジン、1, 2, 3-トリアジン、キノキサリン、ピラジン、フェナジン、ナフチリジン、カルボリン、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1, 2, 3-トリアゾール、1, 2, 4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1, 2, 3-オキサジアゾール、1, 2, 4-オキサジアゾール、1, 2, 5-オキサジアゾール、1, 2, 3, 4-テトラジン、1, 2, 4, 5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジン及びベンゾチアジアゾールから誘導された基、またはそれら基の組み合わせを含む。

10

【0038】

本明細書の全般にわたって使用される用語「アリーレン」は、他の分子構造に対し、2つの結合部位を保有し、リンカー構造の役割を行う二価アリーール置換基を意味する。同じ見地から、用語「ヘテロアリーレン」は、他の分子構造に対し、2つの結合部位を保有し、リンカー構造の役割を行う二価ヘテロアリーール置換基を意味する。

【0039】

本発明の文脈において、芳香族環系またはヘテロ芳香族環系を言及するとき、用語「縮合された」は、「縮合された」芳香族環またはヘテロ芳香族環が両方の環系の一部である少なくとも1つの結合を共有することを意味する。例えば、ナフタレン（または、置換基として言及されるとき、ナフチル）またはベンゾチオフェン（または、置換基として言及されるとき、ベンゾチオフェニル）は、本発明の文脈において縮合芳香族環系と見なされ、ここで、2つのベンゼン環（ナフタレンの場合）またはチオフェン及びベンゼン（ベンゾチオフェンの場合）は、1つの結合を共有する。また、そのような文脈において結合を共有することは、それぞれの結合を構成する2つの原子を共有することを含むものとも理解され、縮合芳香族環系またはヘテロ芳香族環系は、1つの芳香族系またはヘテロ芳香族系とも理解される。また、縮合芳香族環系またはヘテロ芳香族環系（例えば、ピレンで）を構成する芳香族環またはヘテロ芳香族環によって1以上の結合が共有されるものとも理解される。また、脂肪族環系も縮合され、これは、縮合脂肪族環系が芳香族ではないという点を除いては、芳香族環系またはヘテロ芳香族環系と同一の意味を有するものとも理解されるであろう。また、芳香族環系またはヘテロ芳香族環系は、脂肪族環系と縮合（すなわち、少なくとも1つの結合を共有）されうる。

20

30

【0040】

本発明の文脈において、用語「縮合 (condensed)」環系は、「融合 (fused)」環系と同一の意味を有する。

【0041】

本発明の特定実施形態において、環または環系に結合された隣接した置換基は、前記置換基が結合された芳香族またはヘテロ芳香族環または環系に縮合された、更なる単環式または多環式、脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族環系を形成することができる。選択的にそのように形成された縮合環系は、隣接した置換基が結合された芳香族またはヘテロ芳香族環または環系よりさらに大きい（さらに多い環原子を含むことを意味する）ものとも理解される。その場合（及びそのような数字が提供される場合）、縮合環系に含まれた環原子の「総」数は、芳香族またはヘテロ芳香族環または環系に含まれた環原子の和と理解されなければならない。隣接した置換基は結合され、追加環系の環原子は、隣接した置換基によって形成されるが、縮合環によって共有される環原子は、二回ではなく一回にカウントされる。例えば、ベンゼン環は、ナフタレンコアが形成されるように、さらに他のベンゼン環を形成する2つの隣接した置換基を有することができる。当該ナフタレンコアは、2つの炭素原子が2つのベンゼン環によって共有され、二回ではなく、一回のみカウントされるので、10個の環原子を含むことになる。当該文脈において、用語「隣接した置換基」は、同一のまたは隣接する原子に結合された置換基を意味する。

40

【0042】

50

一般的に、本発明の文脈において、用語「隣接した置換基」または「隣接した基」は、同一のまたは隣接する原子に結合された置換基または基を意味する。

【0043】

本発明の文脈において、用語「アルキル基」は、最も広い意味において、任意の直鎖状、分枝状または環状のアルキル置換基としても理解される。置換基としてアルキル基の好ましい例は、メチル (Me)、エチル (Et)、*n*-プロピル (ⁿPr)、*i*-プロピル (ⁱPr)、シクロプロピル、*n*-ブチル (ⁿBu)、*i*-ブチル (ⁱBu)、*s*-ブチル (^sBu)、*t*-ブチル (^tBu)、シクロブチル、2-メチルブチル、*n*-ペンチル、*s*-ペンチル、*t*-ペンチル、2-ペンチル、ネオ-ペンチル、シクロペンチル、*n*-ヘキシル、*s*-ヘキシル、*t*-ヘキシル、2-ヘキシル、3-ヘキシル、ネオ-ヘキシル、シクロヘキシル、1-メチルシクロペンチル、2-メチルペンチル、*n*-ヘプチル、2-ヘプチル、3-ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビスシクロ [2, 2, 2] オクチル、2-ビスシクロ [2, 2, 2] オクチル、2-(2, 6-ジメチル) オクチル、3-(3, 7-ジメチル) オクチル、アダマンチル、1, 1-ジメチル-*n*-ヘキス-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-ヘプト-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-オクト-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-デス-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-ドデス-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-テトラデス-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-ヘキサデス-1-イル、1, 1-ジメチル-*n*-オクタデス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-ヘキス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-ヘプト-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-オクト-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-デス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-ドデス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-テトラデス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-ヘキサデス-1-イル、1, 1-ジエチル-*n*-オクタデス-1-イル、1-(*n*-プロピル)-シクロヘキス-1-イル、1-(*n*-ブチル)-シクロヘキス-1-イル、1-(*n*-ヘキシル)-シクロヘキス-1-イル、1-(*n*-オクチル)-シクロヘキス-1-イル及び1-(*n*-デシル)-シクロヘキス-1-イルを含む。

10

20

30

【0044】

例えば、*s*-ブチル、*s*-ペンチル及び*s*-ヘキシルにおいて、「*s*」は「二次」を意味し、すなわち、*s*-ブチル、*s*-ペンチル及び*s*-ヘキシルは、それぞれ *sec*-ブチル、*sec*-ペンチル及び *sec*-ヘキシルと同一である。例えば、*t*-ブチル、*t*-ペンチル及び*t*-ヘキシルにおいて、「*t*」は「三次」を意味し、すなわち、*t*-ブチル、*t*-ペンチル及び*t*-ヘキシルは、それぞれ *tert*-ブチル、*tert*-ペンチル及び *tert*-ヘキシルと同一である。

【0045】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルケニル」は、直鎖状、分枝状及び環状のアルケニル置換基を含む。用語「アルケニル基」は、例えば、置換基である、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘプテニル、シクロヘプテニル、オクテニル、シクロオクテニルまたはシクロオクタジエニルを含む。

【0046】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルキニル」は、直鎖状、分枝状及び環状のアルキニル置換基を含む。用語「アルキニル基」は、例えば、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘプチニルまたはオクチニルを含む。

【0047】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルコキシ」は、直鎖状、分枝状及び環状のアルコキシ置換基を含む。用語「アルコキシ基」は、例えば、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、*i*-プロポキシ、*n*-ブトキシ、*i*-ブトキシ、*s*-ブトキシ、*t*-ブトキシ及び2-メチルブトキシを含む。

【0048】

本明細書の全体にわたって使用されている用語「チオアルコキシ」は、直鎖状、分枝状

40

50

及び環状のチオアルコキシ置換基を含み、ここで、例示的なアルコキシ基のOは、Sに代替される。

【0049】

本明細書の全体にわたって使用されている用語「ハロゲン」（または、化学命名法で置換基を示すとき、「ハロ」）は、最も広い意味において、元素周期律表の7番目の主要基（すなわち、17族）の元素の任意の原子、好ましくは、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素であるとも理解される。

【0050】

分子フラグメントが、置換基であるか、あるいは他のモイエティに付着していると記述されるとき、その名称は、まさしくそれがフラグメント（例えば、ナフチル、ジベンゾフリル）であるように、あるいは全体分子（例えば、ナフタレン、ジベンゾフラン）であるようにも記述される。本明細書において使用されているように、置換基、または付着されたフラグメントを記述する前記方式は、同等であると見なされる。

10

【0051】

また、本明細書において「C₆-C₆₀アリール」または「C₁-C₄₀アルキル」のような置換基がその置換基内の結合部位を示す名称なしに言及される度に、これは、それぞれの置換基が任意の原子を介して結合されることを意味する。例えば、「C₆-C₆₀アリール」置換基は、任意の6ないし60個の芳香族炭素原子を介して結合され、「C₁-C₄₀アルキル」置換基は、任意の1ないし40個の脂肪族炭素原子を介して結合される。一方、「2-シアノフェニル」置換基は、正確な化学命名法を許容するように、そのCN基が結合部位に隣接する方式のみによって結合される。

20

【0052】

本発明の文脈において、「ブチル」、「ビフェニル」または「ターフェニル」のような置換基が追加詳細なしに言及される度に、これは、それぞれの置換基の任意の異性体体が特定置換基として許容されることを意味する。これと係わり、例えば、置換基としての用語「ブチル」は、置換基として、n-ブチル、s-ブチル、t-ブチル及びイソブチルを含む。同様に、置換基として、用語「ビフェニル」は、オルト-ビフェニル、メタ-ビフェニルまたはパラ-ビフェニルを含み、ここで、オルト、メタ及びパラは、ビフェニル置換基を有するそれぞれの化学的モイエティに対するビフェニル置換基の結合部位に係わって定義される。同様に、用語「ターフェニル」は、置換基として、3-オルト-ターフェニル、4-オルト-ターフェニル、4-メタ-ターフェニル、5-メタ-ターフェニル、2-パラ-ターフェニルまたは3-パラ-ターフェニルを含み、ここで、熟練した技術者に知られたように、オルト、メタ及びパラは、互いに対するターフェニル基内の2つのPh部分の位置を示し、「2-」、「3-」、「4-」及び「5-」は、ターフェニル置換基を有するそれぞれの化学的モイエティに対するターフェニル置換基の結合位置を示す。

30

【0053】

前記定義された全ての基及び実際に全ての化学的モイエティは、それらが環状または非環状、脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族であるか否かにかかわらず、本明細書に記載された特定実施形態によってさらに置換可能であるものと理解される。

40

【0054】

本実施形態において、基が、ここで与えられた一般定義と異なるように定義される場合には、本実施形態における定義が適用される。

【0055】

本明細書に言及された任意の構造に含まれた全ての水素原子（H）は、それぞれの場合に互いに独立して、具体的に述べられない限り、重水素（D）にも置換される。水素を重水素に置換することは、一般慣行であり、当業者には明白である。

【0056】

実験または計算データを比較する場合、同一の方法論によって値を決定しなければならない。例えば、特定方法により、実験的なΔE_{ST}が0.4 eV未満と決定されれば、同

50

一条件を含む同一特定方法を使用する場合にのみ比較が有効である。具体的な例を挙げれば、異なる化合物のフォトルミネッセンス量子収率（P L Q Y）の比較は、P L Q Yの決定が同一反応条件（例えば、室温、10% PMMAフィルムにおける測定）で同一プロトコルによって行われた場合にのみ有効である。また、計算されたエネルギー値は、同一計算方法（同一関数及び同一基本セットを用いて）によって決定される。

【0057】

超蛍光は、光電子素子、特にO L E Dからの発光に係わる概念であって、少なくとも1つの発光層は、1以上のT A D F材料及び1以上の蛍光エミッタを含む。超蛍光において、少なくとも1つのT A D F材料は、R I S C（reverse-intersystem-crossing）により、三重項励起状態を一重項励起状態に変換することができ、励起エネルギーを少なくとも1つの蛍光エミッタに伝達した後、光を放出する。これは、効率的な蛍光生成のために、三重項励起子を収穫するように許容することができる。

10

【0058】

本発明による有機分子を含む光電子素子

本発明の更なる側面は、本発明による有機分子を含む光電子素子に係わるものである。

【0059】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記からなる群から選択される：

- ・有機発光ダイオード（O L E D）、
- ・発光電気化学電池、
- ・O L E Dセンサ、特に、外部と完全に遮断されていないガスセンサ及び蒸気センサ、
- ・有機ダイオード、
- ・有機太陽電池、
- ・有機トランジスタ、
- ・有機電界効果トランジスタ、
- ・有機レーザ、及び
- ・ダウンコンバージョン素子。

20

【0060】

発光電気化学電池は、カソード、アノード及び本発明による有機分子を含む活性層の3層からなる。

30

【0061】

好ましい実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、有機発光ダイオード（O L E D）、発光電気化学電池（L E C）、有機レーザ及び発光トランジスタからなる群から選択される。

【0062】

より好ましい実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、有機発光ダイオード（O L E D）である。

【0063】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記層構造を有するO L E Dである：

40

- 1．基板
- 2．アノード層A
- 3．正孔注入層（H I L）
- 4．正孔輸送層（H T L）
- 5．電子阻止層（E B L）
- 6．発光層（放出層とも称される）（E M L）
- 7．正孔阻止層（H B L）
- 8．電子輸送層（E T L）
- 9．電子注入層（E I L）
- 10．カソード層C

50

ここで、該 O L E D（逆積み層構造を有する）は、アノード層 A、カソード層 C 及び発光層 E M L を除いたそれぞれの層を選択的に含み、異なる層が併合され、該 O L E D は、前述のところで定義された各層タイプのうち 1 層以上の層を含むものであってもよい。

【0064】

また、少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、例えば、水分、蒸気及び／またはガスを含む環境内の有害物質に対する損傷露出から素子を保護する 1 層以上の保護層を選択的に含んでもよい。

【0065】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記の逆積み層（i nverted layer）構造を有する O L E D である：

- 1．基板
- 2．カソード層 C
- 3．電子注入層（E I L）
- 4．電子輸送層（E T L）
- 5．正孔阻止層（H B L）
- 6．発光層（放出層とも称される）（E M L）
- 7．電子阻止層（E B L）
- 8．正孔輸送層（H T L）
- 9．正孔注入層（H I L）
- 10．アノード層 A

ここで、該 O L E D は、アノード層 A、カソード層 C 及び発光層 E M L を除いたそれぞれの層を選択的に含み、異なる層が併合され、該 O L E D は、前述のところで定義された各層タイプのうち 1 層以上の層を含むものであってもよい。

【0066】

本発明による有機分子（前述の実施形態による）は、特定の構造及び置換によって多様な層に使用可能である。使用される場合、光電子素子、特に O L E D のそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0．1 重量％ないし 99 重量％、より特に 1 重量％ないし 80 重量％である。代案的な実施形態において、それぞれの層において、有機分子の割合は 100 重量％である。

【0067】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、積層構造を有することができる O L E D である。前記構造においては、O L E D が並んで配される一般配置とは異なり、個別ユニットが互いの上に積層される。混合光は、積層構造を示す O L E D によって生成され、特に、白色光は、青色 O L E D、緑色 O L E D 及び赤色 O L E D を積層して生成される。また、積層構造を示す O L E D は、選択的に電荷生成層（C G L）を含んでもよく、それは、一般的に、2 つの O L E D サブユニット間に位置し、一般的に、n－ドーピングされた層及び p－ドーピングされた層として構成される。一般的に、1 つの C G L の n－ドーピングされた層がアノード層にさらに近く位置する。

【0068】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、アノードとカソードとの間に、2 層以上の発光層を含む O L E D である。特に、いわゆるタンデム O L E D は、3 層の発光層を含み、ここで、1 層の発光層は、赤色光を放出し、1 層の発光層は、緑色光を放出し、1 層の発光層は、青色光を放出し、選択的に、個々の発光層間に、電荷生成層、電荷阻止層または電荷輸送層のような追加層を含んでもよい。更なる実施形態において、該発光層は、隣接するように積層される。更なる実施形態において、該タンデム O L E D は、それぞれの 2 層の発光層間に電荷生成層を含む。また、隣接した発光層、または電荷生成層によって分離した発光層が併合されうる。

【0069】

一実施形態において、本発明による有機分子を含む光電子素子は、本質的に白色光電子素子であってもよく、これは、素子が白色光を放出するということを意味する。例えば、

10

20

30

40

50

そのような白色光電子素子は、少なくとも1つの（深）青色エミッタ分子、及び緑色光及び／または赤色光を放出する1以上のエミッタ分子を含むものであってもよい。その後、本文の後項で説明されたように、2以上の分子間に選択的にエネルギー伝達がありうる。

【0070】

本発明による有機分子を含む光電子素子の場合、少なくとも1つの本発明による有機分子は、光電子素子の発光層（EML）、最も好ましくは、OLEDのEMLに含まれる。しかし、本発明による有機分子は、例えば、電子輸送層（ETL）及び／または電子阻止層（EBL）または励起子阻止層及び／または正孔輸送層（HTL）及び／または正孔阻止層（HBL）でも使用される。使用される場合、光電子素子、特にOLEDのそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0.1重量%ないし99重量%、より特に1重量%ないし80重量%である。代案的な実施形態において、それぞれの層において、有機分子の割合は100重量%である。

10

【0071】

光電子素子、特にOLEDの個々の層に適している材料の選択基準は、当業者の常識の一部を形成する。先行技術は、個々の層に使用される多くの材料を示しており、どの材料が互いに共に使用するのに適しているかを知らせる。先行技術で使用される任意の材料が、本発明による有機分子を含む光電子素子にも使用可能であることが理解される。以下、個々の層に対する材料の好ましい例が与えられるであろう。前述のように、これは、下記に列挙された全ての種類の層が、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子に存在すべきであることを意味しないものと理解される。さらに、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、例えば、2以上の発光層（EML）のように、下記に羅列されたそれぞれの層のうち1以上を含むものと理解される。同一種類の2以上の層（例えば、2以上のEML、または2以上のHTL）が、必ずしも同一材料、またははなはだしくは、同一割合の同一材料を含むものではないとも理解される。また、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記に列挙された全ての種類の層を含む必要はなく、ここで、アノード層、カソード層及び発光層は、一般的に全ての場合に存在する。

20

【0072】

前記基板は、任意の材料、または該材料の組成物によっても形成される。ほとんど、ガラスライドが基板として使用される。代案としては、薄い金属層（例えば、銅、金、銀またはアルミニウムフィルム）、またはプラスチックフィルムやプラスチックライドが使用されうる。それは、さらに高レベルの柔軟性を許容することができる。アノード層Aは、ほとんど（本質的に）透明なフィルムを得ることができる材料によって構成される。OLEDからの発光を許容するために、二電極のうち少なくとも1つは（本質的に）透明ではなければならないので、アノード層Aまたはカソード層Cのうち一層は透明である。好ましくは、アノード層Aは、透明伝導性酸化物（TCOs）を多量含むか、あるいはそれからなる。そのようなアノード層Aは、例えば、インジウムスズ酸化物、アルミニウム亜鉛酸化物、フッ素ドーピングされたスズ酸化物、インジウム亜鉛酸化物、PbO、SnO、ジルコニウム酸化物、モリブデン酸化物、バナジウム酸化物、タングステン酸化物、黒鉛、ドーピングされたSi、ドーピングされたGe、ドーピングされたGaAs、ドーピングされたポリアニリン、ドーピングされたポリピロール及び／またはドーピングされたポリチオフェンを含むものであってもよい。

30

40

【0073】

好ましくは、アノード層Aは、（本質的に）インジウムスズ酸化物（ITO）（例えば、 $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$ ）で構成される。透明伝導性酸化物（TCO）によるアノード層Aの粗さは、正孔注入層（HIL）を使用することによっても緩和される。また、該HILは、TCOから正孔輸送層（HTL）への類似電荷キャリア（すなわち、正孔）の輸送が促進されるという点において、類似電荷キャリアの注入を容易にする。正孔注入層（HIL）は、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン（PEDOT）、ポリスチレンスルホン酸（PSS）、 MoO_2 、 V_2O_5 、CuPCまたはCuI、特に

50

、PEDOT及びPSSの混合物を含むものであってもよい。正孔注入層(HIL)は、また、アノード層Aから正孔輸送層(HTL)に金属が拡散することを防止することができる。例えば、該HILは、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフエン：ポリスチレンスルホン酸(PEDOT:PSS)、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフエン(PEDOT)、4,4',4''-トリス[フェニル(m-トリル)アミノ]トリフェニルアミン(mMTDATA)、2,2',7,7'-テトラキス(n,n'-ジフェニルアミノ)-9,9'-スピロビフルオレン(Spiro-TAD)、N1,N1'-(ビフェニル-4,4'-ジイル)ビス(N1-フェニル-N4,N4'-ジ-m-トリルベンゼン-1,4'-ジアミン(DNTPD)、N,N'-ニス-(1-ナフタレニル)-N,N'-ビス-フェニル-(1,1'-ビフェニル)-4,4'-ジアミン(NPB)、N,N'-ジフェニル-N,N'-ジ-[4-(N,N'-ジフェニルアミノ)フェニル]ベンジジン(NPNPB)、N,N,N',N'-テトラキス(4-メトキシフェニル)ベンジジン(MeO-TPD)、1,4,5,8,9,11-ヘキサアザトリフェニレン-ヘキサカルボニトリル(HAT-CN)及び／またはN,N'-ジフェニル-N,N'-ビス-(1-ナフチル)-9,9'-スピロビフルオレン-2,7'-ジアミン(Spiro-NPD)によっても構成される。

【0074】

アノード層Aまたは正孔注入層(HIL)に隣接し、一般的に正孔輸送層(HTL)が位置する。ここで、任意の正孔輸送物質が使用されうる。例えば、トリアリールアミン及び／またはカルバゾールのような、電子が豊富なヘテロ芳香族化合物が、正孔輸送化合物としても使用される。該HTLは、アノード層Aと発光層(EML)との間のエネルギー障壁を低減させることができる。該正孔輸送層(HTL)は、また、電子阻止層(EBL)であってもよい。好ましくは、該正孔輸送化合物は、比較的高いエネルギー準位の最低励起三重項状態T1を有する。例えば、正孔輸送層(HTL)は、トリス(4-カルバゾリル-9-イルフェニル)アミン(TCTA)、ポリ(4-ブチルフェニル-ジフェニルアミン)(poly-TPD)、ポリ(4-ブチルフェニル-ジフェニルアミン)(α -NPD)、4,4'-シクロヘキシリデン-ビス[N,N'-ビス(4-メチルフェニル)ベンゼンアミン](TAPC)、4,4',4''-トリス[2-ナフチル(フェニル)-アミノ]トリフェニルアミン(2-TNATA)、2,2',7,7'-テトラキス(n,n'-ジフェニルアミノ)-9,9'-スピロビフルオレン(Spiro-TAD)、N1,N1'-(ビフェニル-4,4'-ジイル)ビス(N1-フェニル-N4,N4'-ジ-m-トリルベンゼン-1,4'-ジアミン(DNTPD)、N,N'-ビス-(1-ナフタレニル)-N,N'-ビス-フェニル-(1,1'-ビフェニル)-4,4'-ジアミン(NPB)、N,N'-ジフェニル-N,N'-ジ-[4-(N,N'-ジフェニルアミノ)フェニル]ベンジジン(NPNPB)、N,N,N',N'-テトラキス(4-メトキシフェニル)ベンジジン(MeO-TPD)、1,4,5,8,9,11-ヘキサアザトリフェニレン-ヘキサカルボニトリル(HAT-CN)及び／または9,9'-ジフェニル-6-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-9H,9'H-3,3'-ビカルバゾール(TrisPcz)のような星状のヘテロ環化合物を含むものであってもよい。また、該HTLは、有機正孔輸送マトリックス内の無機または有機ドーパントによっても構成されるp-ドーピングされた層を含むものであってもよい。該無機ドーパントとしては、例えば、バナジウム酸化物、モリブデン酸化物またはタングステン酸化物のような遷移金属酸化物が使用されうる。該有機ドーパントとしては、例えば、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン(F₄-TCNQ)、銅-ペンタフルオロ安息香酸(Cu(I)pFBz)または遷移金属錯体を使用されうる。

【0075】

EBLは、例えば、1,3-ビス(カルバゾール-9-イル)ベンゼン(mCP)、トリス(4-カルバゾイル-9-イルフェニル)アミン(TCTA)、4,4',4''-トリス[2-ナフチル(フェニル)アミノ]トリフェニルアミン(2-TNATA)、3,3'-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)ビフェニル(mCBP)、9-フェニル-3,6

ービス（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）－９Ｈ－カルバゾール（*tris-Pcz*）、９－（４－*tert*-ブチルフェニル）－３，６－ビス（トリフェニルシリル）－９Ｈ－カルバゾール（*CzSi*）及び／または N, N' －ジカルバゾリル－１，４－ジメチルベンゼン（*DCB*）を含むものであってもよい。

【００７６】

正孔輸送層（*HTL*）または（存在する場合）電子阻止層（*EBL*）に隣接し、一般的に発光層（*EML*）が位置する。発光層（*EML*）は、少なくとも１つの発光分子（すなわち、エミッタ材料）を含む。一般的に、*EML*は、１以上のホスト材料（マトリックス材料ともいう）をさらに含む。例えば、ホスト材料は、４，４'－ビス－（*N*－カルバゾリル）－ビフェニル（*CBP*）、１，３－ビス（カルバゾール－９－イル）ベンゼン（*mCP*）、３，３－ジ（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）ビフェニル（*mCBP*）、ジベンゾ〔*b, d*〕チオフェン－２－イルトリフェニルシラン（*Sif87*）、９－（４－*tert*-ブチルフェニル）－３，６－ビス（トリフェニルシリル）－９Ｈ－カルバゾール（*CzSi*）、ジベンゾ〔*b, d*〕チオフェン－２－イル）ジフェニルシラン（*Sif88*）、ビス〔２－（ジフェニルホスフィノ）フェニル〕エーテルオキサイド（*DPEPO*）、９－〔３－（ジベンゾフラン－２－イル）フェニル〕－９Ｈ－カルバゾール、９－〔３－（ジベンゾフラン－２－イル）フェニル〕－９Ｈ－カルバゾール、９－〔３－（ジベンゾチオフェン－２－イル）フェニル〕－９Ｈ－カルバゾール、９－〔３，５－ビス（２－ジベンゾフランニル）フェニル〕－９Ｈ－カルバゾール、９－〔３，５－ビス（２－ジベンゾチオフェニル）フェニル〕－９Ｈ－カルバゾール、２，４，６－トリス（ビフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（*T2T*）、２，４，６－トリス（トリフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（*T3T*）及び／または２，４，６－トリス（９，９'－スピロビフルオレン－２－イル）－１，３，５－トリアジン（*TST*）から選択される。当業者に知られているように、ホスト材料は、一般的に、第１（すなわち、最低）励起三重項状態（*T1*）及び第１（すなわち、最低）励起一重項状態（*S1*）エネルギー準位を示すように選択されなければならない、これは、それぞれのホスト材料に組み込まれた少なくとも１つの発光分子の第１（すなわち、最低）励起三重項状態（*T1*）及び第１（すなわち、最低）励起一重項状態（*S1*）エネルギー準位よりもエネルギーが高い。

【００７７】

前述のように、本発明の文脈において、光電子素子の少なくとも１つの*EML*は、少なくとも１つの本発明による分子を含むことが好ましい。少なくとも１つの本発明による有機分子を含む光電子素子の*EML*の好ましい組成は、本文の後項でさらに詳細に説明する（以下参照）。

【００７８】

発光層（*EML*）に隣接し、電子輸送層（*ETL*）が位置する。ここで、任意の電子輸送物質が使用されうる。例示的には、ベンズイミダゾール、ピリジン、トリアゾール、トリアジン、オキサジアゾール（例えば、１，３，４－オキサジアゾール）、ホスフィンオキシド及びスルホンのような電子不足化合物が使用されうる。該電子輸送物質は、また、１，３，５－トリ（１－フェニル－１Ｈ－ベンゾ〔*d*〕イミダゾール－２－イル）フェニル（*TPBi*）のような星状のヘテロ環化合物であってもよい。該*ETL*は、例えば、２，９－ビス（ナフタレン－２－イル）－４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン（*NBphen*）、アルミニウム－トリス（８－ヒドロキシキノリン）（*Alq3*）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキサイド（*TSP01*）、２，７－ジ（２，２'－ビピリジン－５－イル）トリフェニル（*BPyTP2*）、ジベンゾ〔*b, d*〕チオフェン－２－イルトリフェニルシラン（*Sif87*）、ジベンゾ〔*b, d*〕チオフェン－２－イル）ジフェニルシラン（*Sif88*）、１，３－ビス〔３，５－ジ（ピリジン－３－イル）フェニル〕ベンゼン（*BmPyPhB*）及び／または４，４'－ビス－〔２－（４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジニル）〕－１，１'－ビフェニル（*BTB*）を含むものであってもよい。選択的に、該*ETL*は、８－ヒドロキシキノリノラトリチウム（*Li q*）のような物質によってもドーピングされる。該電子輸送層

(ETL)は、また、正孔を阻止することができる。または、一般的にEMLとETLとの間に正孔阻止層(HBL)が導入される。

【0079】

正孔阻止層(HBL)は、例えば、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン=バソクプロイン(BCP)、4,6-ジフェニル-2-(3-(トリフェニルシリル)フェニル)-1,3,5-トリアジン、9,9'-(5-(6-(1,1'-ビフェニル)-3-イル)-2-フェニルピリミジン-4-イル)-1,3-フェニレン)ビス(9H-カルバゾール)、ビス(8-ヒドロキシ-2-メチルキノリン)-(4-フェニルフェノキシ)アルミニウム(BAlq)、2,9-ビス(ナフタレン-2-イル)-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(NBphen)、アルミニウム-トリス(8-ヒドロキシキノリン)(Alq₃)、ジフェニル-4-トリフェニルシリルフェニル-ホスフィンオキサイド(TSPO1)、2,4,6-トリス(ビフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T2T)、2,4,6-トリス(トリフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T3T)、2,4,6-トリス(9,9'-スビロピフルオレン-2-イル)-1,3,5-トリアジン(TST)及び／または1,3,5-トリス(N-カルバゾリル)ベンゾール／1,3,5-トリス(カルバゾール)-9-イル)ベンゼン(TCB/TCP)を含むものであってもよい。

10

【0080】

電子輸送層(ETL)に隣接し、カソード層Cが位置する。該カソード層Cは、例えば、金属(例えば、Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、LiF、Ca、Ba、Mg、In、WまたはPd)または金属合金を含むか、あるいはそれからなる。実用的な理由により、該カソード層Cは、Mg、CaまたはAlのような(本質的に)不透明な金属によっても構成される。代案としてまたは追加的に、該カソード層Cは、また、黒鉛及び／または炭素ナノチューブ(CNT)を含むものであってもよい。代案としては、カソード層Cは、また、ナノスケール銀ワイヤを含むか、あるいはそれからなる。

20

【0081】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDは、選択的に、電子輸送層(ETL)とカソード層Cとの間に、保護層(電子注入層(EIL)とも称される)をさらに含んでもよい。該層は、フッ化リチウム、フッ化セシウム、銀、8-ヒドロキシキノリノラトリチウム(Liq)、Li₂O、BaF₂、MgO及び／またはNaFを含むものであってもよい。

30

【0082】

選択的に、電子輸送層(ETL)及び／または正孔阻止層(HBL)は、また、1以上のホスト材料を含むものであってもよい。

【0083】

本明細書に使用されているように、特定文脈において、さらに具体的に定義されない場合、放出及び／または吸収された光の色相指定は、下記の通りである：

紫色：>380～420nmの波長範囲

深青色：>420～480nmの波長範囲

空色：>480～500nmの波長範囲

緑色：>500～560nmの波長範囲

黄色：>560～580nmの波長範囲

オレンジ色：>580～620nmの波長範囲

赤色：>620～800nmの波長範囲。

40

【0084】

エミッタ分子(すなわち、エミッタ材料)と係わり、そのような色相は、主発光ピークの最大発光を示す。したがって、例えば、深青色エミッタは、>420～480nm範囲で最大発光を有し、空色エミッタは、>480～500nm範囲で最大発光を有し、緑色エミッタは、>500～560nm範囲で最大発光を有し、赤色エミッタは、>620～

50

800 nm 範囲で最大発光を有する。

【0085】

深青色エミッタは、好ましくは、475 nm 未満、より好ましくは、470 nm 未満の最大発光を有することができる。これは、一般的に、420 nm 超過、好ましくは、430 nm 超過、より好ましくは、440 nm 超過、またははなはだしくは、450 nm 超過である。好ましい実施形態において、本発明による有機分子は、一般的に、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内に本発明による有機分子10重量%を含むスピンコーティング膜から測定された、440 nm ないし500 nm、好ましくは、445 nm ないし495 nm、最も好ましくは、450 nm ないし490 nm の最大発光を示す。

10

【0086】

さらに他の実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含み、ITU-R Recommendation BT. 2020 (Rec. 2020) によって定義されているような原色青色 ($CIE_x = 0.131$ 及び $CIE_y = 0.046$) の CIE_x ($= 0.131$) 及び CIE_y ($= 0.046$) の色座標に近い CIE_x 及び CIE_y の色座標を有する光を放出するOLEDに係わるものであり、これは、UHD (Ultra High Definition) ディスプレイ、例えば、UHD-TV に使用するのに適している。したがって、本発明の更なる側面は、発光が、0.02 ないし0.30、好ましくは、0.03 ないし0.25、より好ましくは、0.05 ないし0.20、より一層好ましくは、0.08 ないし0.18、またははなはだしくは、0.10 ないし0.15 の CIE_x 色座標、及び／または、0.00 ないし0.45、好ましくは、0.01 ないし0.30、より好ましくは、0.02 ないし0.20、より一層好ましくは、0.03 ないし0.15、またははなはだしくは、0.04 ないし0.10 の CIE_y 色座標を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

20

【0087】

さらに他の実施形態は、1000 cd/m² において、8% 超過、好ましくは、10% 超過、より好ましくは、13% 超過、より一層好ましくは、15% 超過、またははなはだしくは、20% 超過の外部量子効率を示し、及び／または、440 nm ないし500 nm、好ましくは、445 nm ないし495 nm、より好ましくは、450 nm ないし490 nm の最大発光を示し、及び／または、500 cd/m² において、100 h 超過、好ましくは、200 h 超過、より好ましくは、400 h 超過、最も好ましくは、750 h 超過、またははなはだしくは、1000 h 超過のLT80値を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

30

【0088】

緑色エミッタ材料は、好ましくは、500 ないし560 nm、より好ましくは、510 ないし550 nm、より一層好ましくは、520 ないし540 nm の最大発光を有することができる。一実施形態において、本発明による有機分子は、一般的に、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内に本発明による有機分子10重量%を含むスピンコーティング膜から測定された、500 ないし560 nm、好ましくは、510 ないし550 nm、より好ましくは、520 ないし540 nm の最大発光を示す。

40

【0089】

さらに他の実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含み、ITU-R Recommendation BT. 2020 (Rec. 2020) によって定義されているような原色緑色 ($CIE_x = 0.170$ 及び $CIE_y = 0.797$) の CIE_x ($= 0.170$) 及び CIE_y ($= 0.797$) の色座標に近い CIE_x 及び CIE_y の色座標を有する光を放出するOLEDに係わるものであり、これは、UHD ディスプレイ、例えば、UHD-TV に使用するのに適している。本段落において「近い」という用語は、本段落の末尾に提供された CIE_x 及び CIE_y の色座標の範囲を示す。商業的応用において、典型的に上部発光素子（上部電極が透明である）が使用される一方、本発明の全

50

般にわたって使用されるテスト素子は、下部発光素子（下部電極及び基板が透明である）を示す。したがって、本発明の更なる側面は、発光が、0.10ないし0.45、好ましくは、0.10ないし0.35、より好ましくは、0.10ないし0.30、より一層好ましくは、0.10ないし0.25、またははなはだしくは、0.15ないし0.20のCIE x色座標、及び／または、0.60ないし0.92、好ましくは、0.65ないし0.90、より好ましくは、0.70ないし0.88、より一層好ましくは、0.75ないし0.86、またははなはだしくは、0.79ないし0.84のCIE y色座標を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

【0090】

さらに他の好ましい実施形態は、 14500 cd/m^2 において、10%超過、好ましくは、13%超過、より好ましくは、15%超過、より一層好ましくは、17%超過、またははなはだしくは、20%超過の外部量子効率を示し、及び／または、500ないし560nm、好ましくは、510ないし550nm、より好ましくは、520ないし540nmの最大発光を示し、及び／または、 14500 cd/m^2 において、100h超過、好ましくは、250h超過、より好ましくは、500h超過、より一層好ましくは、750h超過、またははなはだしくは、1000h超過のLT97値を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

【0091】

さらに他の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含み、明確な色点で発光するOLEDに係わるものである。好ましくは、OLEDは、狭い発光帯域（小さい半値幅（full width at half maximum: FWHM））を有する光を放出する。好ましい実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDは、0.50eV未満、好ましくは、0.48eV未満、より好ましくは、0.45eV未満、より好ましくは、0.43eV未満、より好ましくは、0.40eV未満、より好ましくは、0.35eV未満、より一層好ましくは、0.30eV未満、またははなはだしくは、0.25eV未満の、主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

【0092】

本発明によれば、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、例えば、ディスプレイ、照明応用分野の光源、並びに医療及び／または美容応用分野（例えば、光療法）の光源として使用可能である。

【0093】

本発明による有機分子と追加材料の組み合わせ

光電子素子（ここで、好ましくは、OLED）内の任意の層、特に発光層（EML）が単一材料または異なる材料の組み合わせからなるということは、当業者には一般知識の一部を形成する。

【0094】

例えば、当業者は、EMLが、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光する単一材料で構成されることを理解する。しかし、当業者は、光電子素子（ここで、好ましくは、OLED）のEMLにおいて、異なる材料、特に1以上のホスト材料（すなわち、マトリックス材料；ここで、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子に含まれるとき、ホスト材料H^Bと称される）と、素子に電圧及び電流を印加するとき、そのうち少なくとも1つが発光する1以上のドーパント材料（すなわち、エミッタ材料）との結合が有利であることを理解する。

【0095】

光電子素子における本発明による有機分子の使用の好ましい実施形態において、前記光電子素子は、EML、またはEMLに直接隣接した層、またはそれら層の1以上の層に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む。

【0096】

光電子素子における本発明による有機分子の使用の好ましい実施形態において、前記光電子素子はOLEDであり、EML、またはEMLに直接隣接した層、またはそれら層の

10

20

30

40

50

1以上の層に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む。

【0097】

光電子素子における本発明による有機分子の使用のより好ましい実施形態において、前記光電子素子はOLEDであり、EMLに少なくとも1つの本発明による有機分子を含む。当業者は、これが、少なくとも1つの本発明による有機分子が、例えば、それぞれのEMLのホスト材料H^B（すなわち、マトリックス材料）、または少なくとも1つのホスト材料H^B（すなわち、マトリックス材料）に組み込まれたドーパント（材料）として使用可能であることを意味するものと理解する。当業者は、また、ドーパント（材料）が発光性（すなわち、エミッタ材料）または非発光性（すなわち、電圧及び電流が光電子素子に印加されるときに発光せず）であることを理解する。

10

【0098】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子、好ましくは、OLEDに係わる一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子は、発光層EMLにおいてエミッタ材料として使用される。すなわち、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光する。

【0099】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子、好ましくは、OLEDに係わる他の実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子は、発光層EMLに存在するが、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光しない。すなわち、その場合、少なくとも1つの本発明による有機分子は、ホスト材料H^Bまたは非発光性ドーパント材料であり、両方とも当業者に知られている。

20

【0100】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子、好ましくは、OLEDに係わる一実施形態において、1以上の本発明による有機分子は、少なくとも1つのEMLに含まれる。当業者は、これが、1以上の本発明による有機分子が、いずれも前記EMLにおいてエミッタ材料（すなわち、発光性ドーパント材料）であるか、いずれも前記EMLにおいてホスト材料H^Bであるか、いずれも前記EMLにおいて非発光性ドーパント材料であるか、あるいは前記有機分子が、互いに独立して、ホスト材料H^B、エミッタ材料（すなわち、発光性ドーパント材料）または非発光性ドーパント材料から選択されることを意味するものと理解する。

30

【0101】

当業者に知られているように、例えば、有機発光ダイオード（OLED）において、エミッタ材料（すなわち、発光性ドーパント）からの発光は、励起一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態S₁）からの蛍光、及び励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態T₁）からの燐光を含む。

【0102】

蛍光エミッタFは、電子励起（例えば、光電子素子において）時に室温（すなわち、（約）20℃）で発光することができ、発光励起状態は一重項状態である。蛍光エミッタは、一般的に、初期電子励起（例えば、電子正孔再結合による）がエミッタの励起一重項状態を提供するとき、ナノ秒の時間尺度で即時（すなわち、直接的な）蛍光を示す。

40

【0103】

本発明の文脈において、遅延蛍光材料は、逆項間交差（RISC；すなわち、アップ項間交差または逆項間交差）により、励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態T₁）から励起一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態S₁）に達することができ、また、そのように達した励起一重項状態（一般的に、S₁）から電子基底状態に戻る時に発光することができる材料である。励起三重項状態（一般的に、T₁）から励起一重項状態（一般的に、S₁）へのRISC後に観察された蛍光発光が発生する時間尺度（一般的に、マイクロ秒範囲）は、直接的な（すなわち、即時）蛍光が発生する時間尺度（一般的に、ナノ秒範囲）より遅く、したがって、遅延蛍光（DF）という。励起三重項状態（一般的に、T₁から）から励起一重項状態（一般的に、S₁まで）へのRISCが熱活性化を介

50

して発生し、そのように充填された励起一重項状態が発光する場合（遅延蛍光発光）、その過程を熱活性化遅延蛍光（TADF）という。したがって、TADF材料は、前述のように熱活性化遅延蛍光（TADF）を発光することができる材料である。蛍光エミッタFの最低励起一重項状態エネルギー準位 $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギー準位 $E(T1^E)$ とのエネルギー差 ΔE_{ST} が減少すれば、RISCによる最低励起一重項状態から最低励起三重項状態への切り替えが高効率で起こることは当業者に知られている。したがって、TADF材料が一般的に小さい ΔE_{ST} 値を有するということは、当業者の一般知識の一部を形成する（以下参照）。当業者に知られているように、TADF材料は、単純に前述のようにTADFの後続放出と共に、励起三重項状態から励起一重項状態へのそれ自体のRISCが可能な材料ではない。TADF材料は、事実上2種類の材料、好ましくは、2つのホスト材料 H^B 、より好ましくは、p-ホスト材料 H^P 及びn-ホスト材料 H^N から形成されるエキシプレックスであることが当業者に知られている（以下参照）。

10

【0104】

（熱的に活性化された）遅延蛍光の発生は、例えば、時間分解（すなわち、過渡）フォトルミネッセンス（PL）測定から得た減衰曲線に基づいて分析される。このために、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内で、1～10重量%、特に10重量%の各エミッタ（すなわち、仮定されたTADF材料）のスピンコーティング膜がサンプルとして使用される。分析は、例えば、Edinburgh InstrumentsのFS5蛍光分光計を使用して行われる。サンプルPMMAフィルムをキュベットに入れ、測定する間に窒素雰囲気は維持される。データ収集は、よく確立された時間相関単一光子計数（TCSPC、以下参照）技術を使用して行われる。時間及び信号強度で複数の次数（order）の大きさにわたって全体の減衰ダイナミクスを収集するために、4つの時間ウィンドウ（200 ns、1 μ s、20 μ s及び>80 μ sのさらに長い測定期間）で測定を行って結合することができる（以下参照）。

20

【0105】

TADF材料は、好ましくは、前述の全体の減衰ダイナミクスと係わり、以下の2つの条件を満たす：

（i）減衰ダイナミクスは、2つの時間領域を示し、1つはナノ秒（ns）範囲にあり、他の1つはマイクロ秒（ μ s）範囲にある、及び

30

（ii）2つの時間領域で発光スペクトルの形態が一致する。

【0106】

ここで、最初の減衰領域で放出された光の一部は即時蛍光と見なされ、二番目の減衰領域で放出された光の一部は遅延蛍光と見なされる。

【0107】

遅延蛍光と即時蛍光との割合は、いわゆるn値の形態に表され、これは、次の方程式により、それぞれのフォトルミネッセンス減衰を経時的に積分して計算される：

【0108】

【数1】

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

40

【0109】

本発明の文脈において、TADF材料は、好ましくは、0.05より大きい（ $n > 0.05$ ）、より好ましくは、0.1より大きい（ $n > 0.1$ ）、より一層好ましくは、0.15より大きい（ $n > 0.15$ ）、特に好ましくは、0.2より大きい（ $n > 0.20$ ）、またははなはだしくは、0.25より大きい（ $n > 0.25$ ）n値（即時蛍光に対する遅延蛍光の割合）を示す。

【0110】

50

好ましい実施形態において、本発明による有機分子は、 0.05 より大きい ($n > 0.05$) n 値 (即時蛍光に対する遅延蛍光の割合) を示す。

【0111】

本発明の文脈において、TADF材料 E^B は、最低励起一重項状態エネルギー準位 $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギー準位 $E(T1^E)$ とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値を示すことを特徴とし、 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またははなはだしくは、 0.05 eV 未満の値を示す。TADF材料 E^B の ΔE_{ST} 値を決定する方法は、本文の後項で説明されている。

【0112】

好ましい実施形態において、本発明による有機分子は、本明細書で定義されたようなTADF材料 E^B であり、最低励起一重項状態エネルギー準位と最低励起三重項状態エネルギー準位とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値が、 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.13 eV 未満、またははなはだしくは、 0.07 eV 未満を示す。

【0113】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物の段落において (以下参照)、本発明による有機分子と異なる1以上のTADF材料 E^B を含む組成物が言及される。当業者は、先行技術に開示された任意のTADF材料が、これと関連して好適なTADF材料 E^B と見なされることを理解する。当業者は、また、TADF材料 E^B が、一般的にHOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) 及びLUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) がそれぞれ (電子) ドナー基及び (電子) アクセプター基で空間的に大きく分離されるように設計されるものと理解する。当該基は、一般的に体積が大きい (すなわち、立体的に要求される)、スピロ接合を介して連結されて捻じれており、HOMOとLUMOの空間的重畳が減少する。しかし、HOMOとLUMOの空間的重畳を最小化すれば、TADF材料のフォトルミネッセンス量子収率 (PLQY) も低くなる短所がある。したがって、実際に ΔE_{ST} を減らし、高いPLQYを達成するために、その2つの効果の両方が考慮される。

【0114】

TADF材料設計のための1つの一般的なアプローチは、HOMOが分布された1以上の (電子) ドナーモイエティと、LUMOが分布された1以上の (電子) アクセプターモイエティとを、本明細書においてリンカー基と呼ばれる、同一のブリッジに共有結合することである。また、TADF材料 E^B は、例えば、同一のアクセプターモイエティに結合された2つまたは3つのリンカー基を含み、更なるドナーモイエティ及びアクセプターモイエティがそれら2つまたは3つのリンカー基それぞれに結合されうる。

【0115】

また、1以上のドナーモイエティ及び1以上のアクセプターモイエティは、(リンカー基の存在なしに) 互いに直接結合されうる。

【0116】

典型的なドナーモイエティは、ジフェニルアミン、インドール、カルバゾール、アクリジン、フェノキサジン及び関連構造の誘導体である。特に、脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族環系は、例えば、インドロカルバゾールに達するために、前述のドナー前駆体に縮合される。

【0117】

ベンゼン、ビフェニル及びある程度までターフェニルの誘導体が一般的なリンカー基である。

【0118】

ニトリル基は、TADF材料において非常に一般的なアクセプターモイエティであり、その周知の例は、下記を含む：

(i) カルバゾリルジシアノベンゼン化合物

10

20

30

40

50

2 CzPN (4, 5-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)フタロニトリル)、DCzIPN (4, 6-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)イソフタロニトリル)、4 CzPN (3, 4, 5, 6-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)フタロニトリル)、4 CzIPN (2, 4, 5, 6-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)イソフタロニトリル)、4 CzTPN (2, 4, 5, 6-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)テレフタロニトリル) 及びその誘導体、

(ii) カルバゾリルシアノピリジン化合物

4 CzCNP_y (2, 3, 5, 6-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)-4-シアノピリジン) 及びその誘導体、

(iii) カルバゾリルシアノビフェニル化合物

CNBPCz (4, 4', 5, 5'-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)-[1, 1'-ビフェニル]-2, 2'-ジカルボニトリル)、CzBPCN (4, 4', 6, 6'-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)-[1, 1'-ビフェニル]-3, 3'-ジカルボニトリル)、DDCzIPN (3, 3', 5, 5'-テトラ(9H-カルバゾール-9-イル)-[1, 1'-ビフェニル]-2, 2', 6, 6'-テトラカルボニトリル) 及びその誘導体、

ここで、それら材料において、1以上のニトリル基は、アクセプターモイエティとして、フッ素(F)またはトリフルオロメチル(CF₃)にも代替される。

【0119】

また、トリアジン、ピリミジン、トリアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ヘプタジン、1, 4-ジアザトリフェニレン、ベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、キノキサリン及びジアザフルオレン誘導体のような窒素ヘテロ環は、TADF分子の構成に使用される周知のアクセプターモイエティである。例えば、トリアジンアクセプターを含むTADF分子の公知の例は、PIC-TRZ (7, 7'-(6-([1, 1'-ビフェニル]-4-イル)-1, 3, 5-トリアジン-2, 4-ジイル)ビス(5-フェニル-5, 7-ジヒドロインドロ[2, 3-b]カルバゾール))、mBFCzTrz (5-(3-(4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン-2-イル))フェニル)-5H-ベンゾフロ[3, 2-c]カルバゾール)、及びDCzTrz (9, 9'-(5-(4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン-2-イル)-1, 3-フェニレン)ビス(9H-カルバゾール))を含む。

【0120】

TADF材料の他の一群は、ドナーモイエティ(主に、カルバゾリル置換基)が結合されたアクセプターモイエティとして、ベンゾフェノンのようなジアリールケトン、または4-ベンゾイルピリジン、9, 10-アントラキノン、9H-キサンテン-9-オンのような(ヘテロアリール)アリールケトン及びその誘導体を含む。そのようなTADF分子の例は、BPBCz (ビス(4-(9'-フェニル-9H, 9'H-[3, 3'-ビカルバゾール]-9-イル)フェニル)メタノン)、mDCBP ((3, 5-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)(ピリジン-4-イル)メタノン)、AQ-DTBu-Cz (2, 6-ビス(4-(3, 6-ジ-tert-ブチル-9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)アントラセン-9, 10-ジオン)、及びMCz-X_T (3-(1, 3, 6, 8-テトラメチル-9H-カルバゾール-9-イル)-9H-キサンテン-9-オン)をそれぞれ含む。

【0121】

また、スルホキシド、特にジフェニルスルホキシドは、TADF材料の構成のためのアクセプターモイエティとして一般的に使用され、周知の例は、4-PC-DPS (9-フェニル-3-(4-(フェニルスルホニル)フェニル)-9H-カルバゾール)、DitBu-DPS (9, 9'-(スルホニルビス(4, 1-フェニレン))ビス(9H-カルバゾール))、及びTXO-PhCz (2-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-9H-チオキサンテン-9-オン10, 10-ジオキシド)を含む。

【0122】

10

20

30

40

50

蛍光エミッタ F は、また、本明細書に定義されたような T A D F を示すことができ、はなはだしくは、本明細書に定義されたような T A D F 材料 E^B であるものと理解される。結果として、本明細書に定義された小さい F W H M エミッタ S^B は、本明細書に定義された T A D F 材料 E^B であってもよく、そうでなくてもよい。

【0123】

燐光、すなわち、励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態 T₁）からの発光は、スピン禁止過程である。当業者に知られているように、燐光は、（分子内）スピン軌道相互作用（いわゆる（内部）重原子効果）を利用して促進（向上）される。本発明の文脈において、燐光材料 P^B は、室温（すなわち、（約）20℃）で燐光を放出することができる燐光エミッタである。

【0124】

ここで、燐光材料 P^B は、カルシウム（Ca）の標準原子量より大きい標準原子量を有する元素のうち少なくとも1つの原子を含むことが好ましい。より好ましくは、本発明の文脈において、燐光材料 P^B は、遷移金属原子、特に亜鉛（Zn）の標準原子量より大きい標準原子量を有する元素の遷移金属原子を含む。燐光材料 P^B に好ましく含まれる遷移金属原子は、任意の酸化状態で存在する（及び各元素のイオンとして存在することもできる）。

【0125】

光電子素子に使用される燐光材料 P^B は、Ir、Pd、Pt、Au、Os、Eu、Ru、Re、Ag 及び Cu、本発明の文脈において、好ましくは、Ir、Pt 及び Pd、より好ましくは、Ir 及び Pt の錯体ということが当業者に常識である。当業者は、光電子素子においていかなる材料が燐光材料 P^B として適しているか、及びそれらの合成方法を知っている。また、当業者は、光電子素子において燐光材料として使用するための燐光錯体の設計原理に精通しており、構造的変化を介して錯体の放出を調整する方法を知っている。

【0126】

当業者は、光電子素子に使用される燐光材料 P^B としていかなる材料が適しているか、及びそれらの合成方法を知っている。これと関連し、当業者は、特に、光電子素子において燐光材料 P^B として使用するための燐光錯体の設計原理に精通しており、構造的変化を介して錯体の放出を調整する方法を知っている。

【0127】

本発明による有機分子と共に使用可能な燐光材料 P^B の非制限的な例（例えば、組成物の形態または光電子素子の E M L において、以下参照）は、先行技術に開示されている。例えば、以下の金属錯体は、本発明による有機分子と共に使用可能な燐光材料 P^B である：

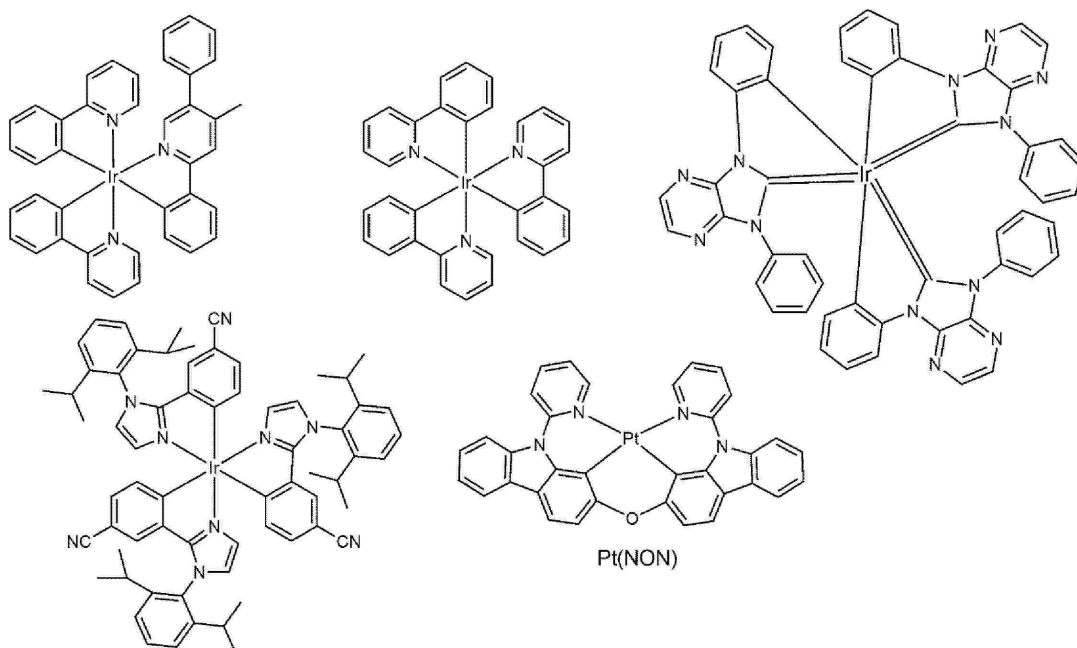
10

20

30

40

50



10

【0128】

20

本発明の文脈において、小さい半値幅（FWHM）エミッタ S^B は、 0.35 eV 以下（ $\leq 0.35\text{ eV}$ ）のFWHMを示す発光スペクトルを有する任意のエミッタ（すなわち、エミッタ材料）であり、好ましくは、 0.30 eV 以下（ $\leq 0.30\text{ eV}$ ）、特に 0.25 eV 以下（ $\leq 0.25\text{ eV}$ ）である。他に明示されない限り、これは、室温（すなわち、（約） 20°C ）で各エミッタの発光スペクトルを基準として判断され、一般的にポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内で1～5重量%、特に2重量%のエミッタで測定される。あるいは、小さいFWHMエミッタ S^B の発光スペクトルは、一般的に、室温（すなわち、（約） 20°C ）でジクロロメタンまたはトルエンに $0.001\sim 0.2\text{ mg/mL}$ のエミッタ S^B がある溶液で測定されうる。

【0129】

30

小さいFWHMエミッタ S^B は、蛍光エミッタ F 、燐光エミッタ（例えば、燐光材料 P^B ）及び／またはTADFエミッタ（例えば、TADF材料 E^B ）である。本発明による有機分子、前述のTADF材料 E^B 及び燐光材料 P^B の場合、発光スペクトルは、室温（すなわち、（約） 20°C ）でポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内で10重量%のそれぞれの分子、 E^B または P^B のそれぞれのスピンコーティング膜から測定される。

【0130】

当業者に知られているように、エミッタ（例えば、小さいFWHMエミッタ S^B ）の半値幅（FWHM）は、それぞれの発光スペクトル（蛍光エミッタ用蛍光スペクトル及び燐光エミッタ用燐光スペクトル）から容易に決定される。記録された全てのFWHM値は、一般的に、主発光ピーク（すなわち、強度が最も高いピーク）を示す。FWHM（ここで、好ましくは、電子ボルト eV で記録される）を決定する手段は、当業者の常識の一部である。例えば、発光スペクトルの主発光ピークが、発光スペクトルからナノメートル（ nm ）で得られた2つの波長 λ_1 及び λ_2 において最大発光の半分（すなわち、最大発光強度の50%）に達する場合、電子ボルト（ eV ）のFWHMは、一般的に（及び、ここで）、以下の方程式を使用して決定される：

40

【0131】

【数2】

50

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

【0132】

本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B は有機エミッタであり、これは、本発明の文脈において、いかなる遷移金属も含まないということの意味する。好ましくは、本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B は、主に水素（H）、炭素（C）、窒素（N）及びボロン（B）元素で構成されるが、例えば、酸素（O）、ケイ素（Si）、フッ素（F）及び臭素（Br）を含むこともできる。

10

【0133】

また、本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B は、さらにTADFを示してもよく、示さなくてもよい蛍光エミッタFであることが好ましい。

【0134】

好ましくは、本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B は、以下の要件のうち少なくとも1つを満たす：

（i）ボロン（B）含有エミッタであり、これは、それぞれの小さいFWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子がボロン（B）であることを意味し、

（ii）多環の芳香族またはヘテロ芳香族コア構造を含み、ここで、少なくとも2つの芳香族環が共に縮合される（例えば、アントラセン、ピレンまたはそれらのアザ誘導体）。

20

【0135】

より好ましくは、本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B は、以下の要件のうち少なくとも1つを満たす：

（i）ボロン（B）含有エミッタであり、これは、それぞれの小さいFWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子がボロン（B）であることを意味し、

（ii）ピレンコア構造を含む。

【0136】

最も好ましくは、本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B はボロン（B）含有エミッタであり、これは、それぞれの小さいFWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子がボロン（B）であることを意味する。

30

【0137】

当業者は、前述の要件または好ましい特徴を満たす小さいFWHMエミッタ S^B を設計する方法を知っている。

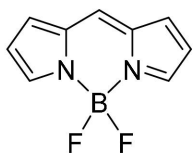
【0138】

本発明の文脈において、小さいFWHMエミッタ S^B として好適な蛍光エミッタFの種類は、周知の4,4-ジフルオロ-4-ボラ-3a,4a-ジアザ-s-インダセン（BODIPY）系材料であり、光電子素子におけるその構造的特徴及び応用が詳細に検討されており、当業者に一般的な知識である。また、先行技術は、そのような材料が合成される方法及び特定発光色相を有するエミッタに達する方法を示す。

40

【0139】

また、当業者は、下記に示したBODIPY基本構造が、



【0140】

50

例えば、分子間 $\pi-\pi$ 相互作用及び関連した自己消光により、光電子素子のエミッタとして理想的に適していないという事実に通じている。

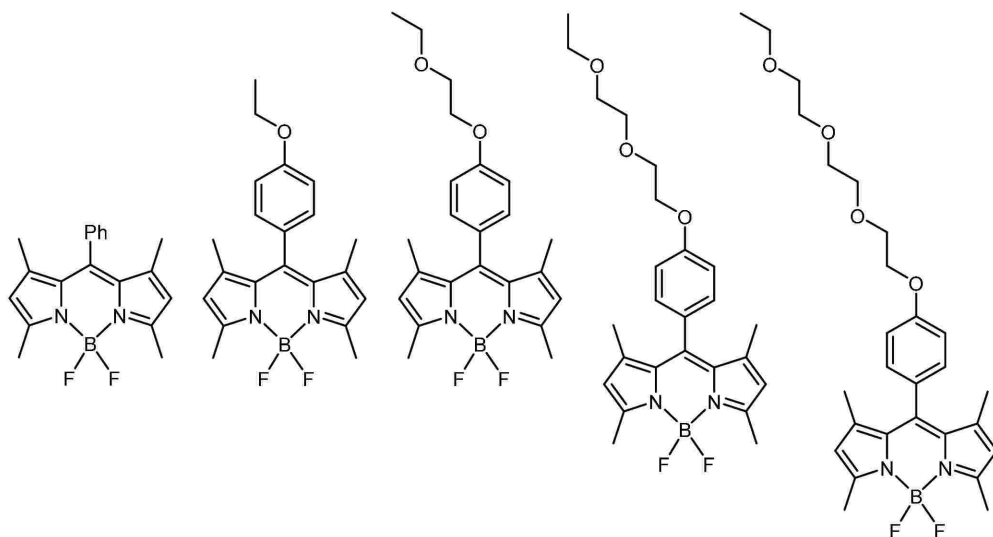
【0141】

代案的な光電子素子用エミッタ材料は、前述のBODIPYコア構造に付着された置換基として、体積が大きい（すなわち、立体的に要求される）基を有している。そのような体積の大きい基は、例えば、（多くの他のもののうち）アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはアルコキシ置換基または縮合された多環芳香族またはヘテロ芳香族であってもよく、それらはいずれも選択的に置換される。BODIPYコアにおいて好適な置換基の選択は、当業者に明白であり、先行技術から容易に誘導されうる。そのような分子の合成及び後続変形のために確立されてきた多数の合成経路に対しても同様である。

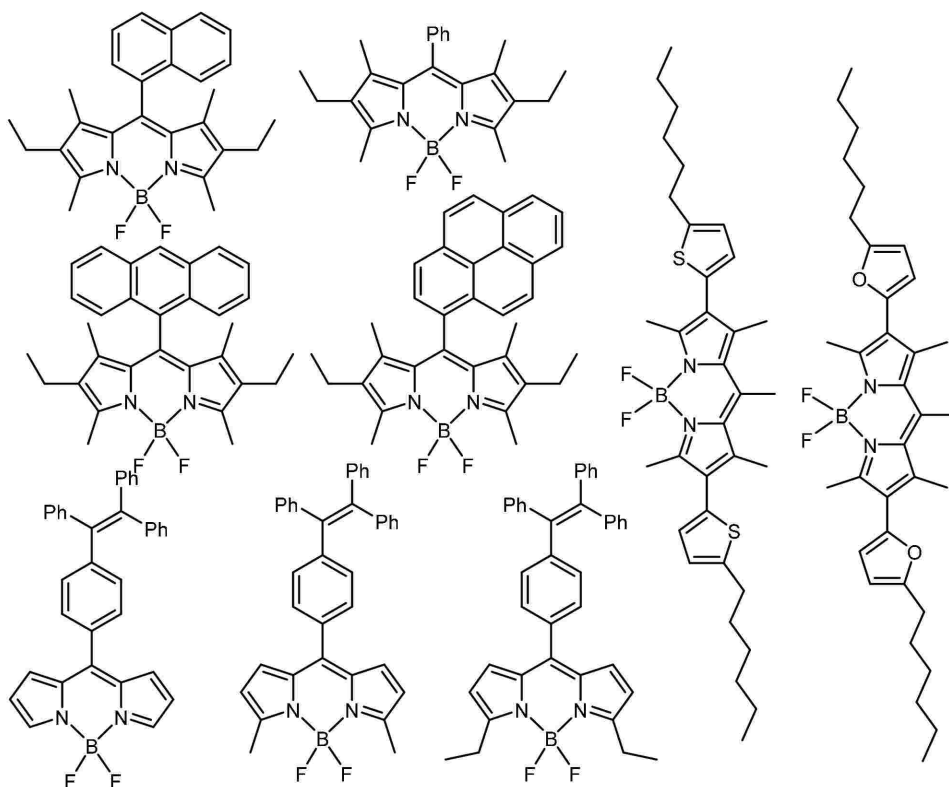
10

【0142】

本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B として適しているBODIPY系エミッタの例を下記に示した：



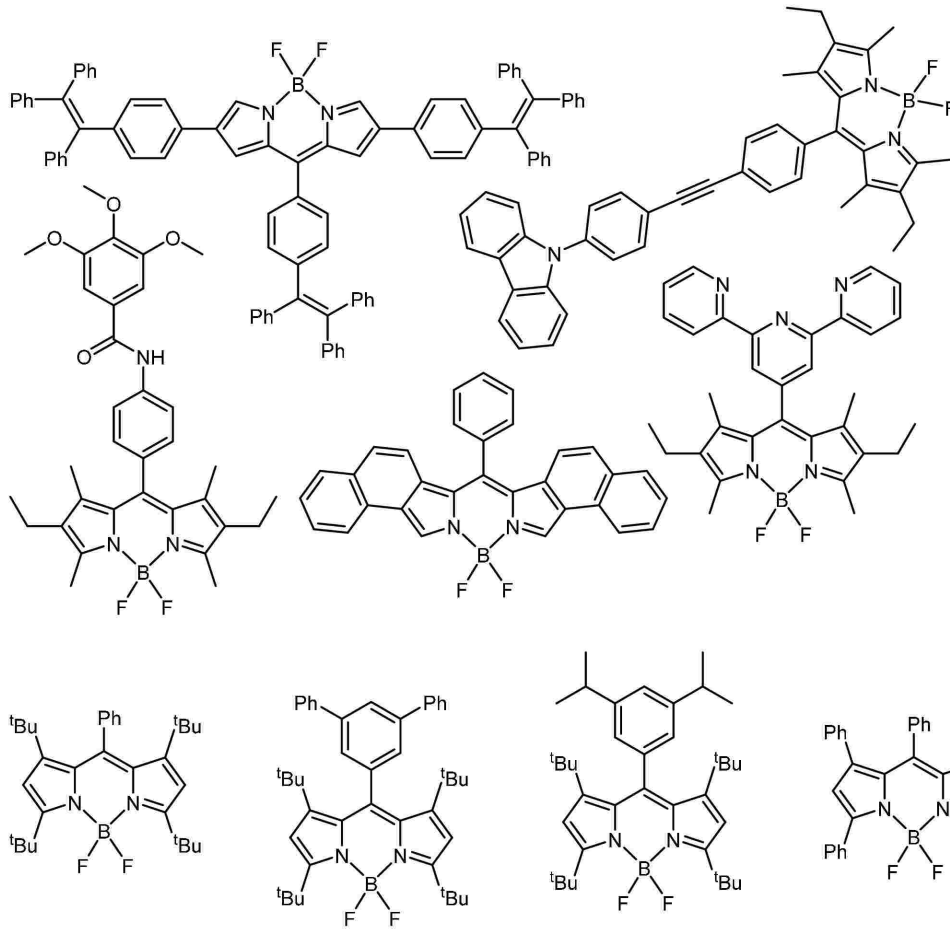
20



30

40

50



10

20

°

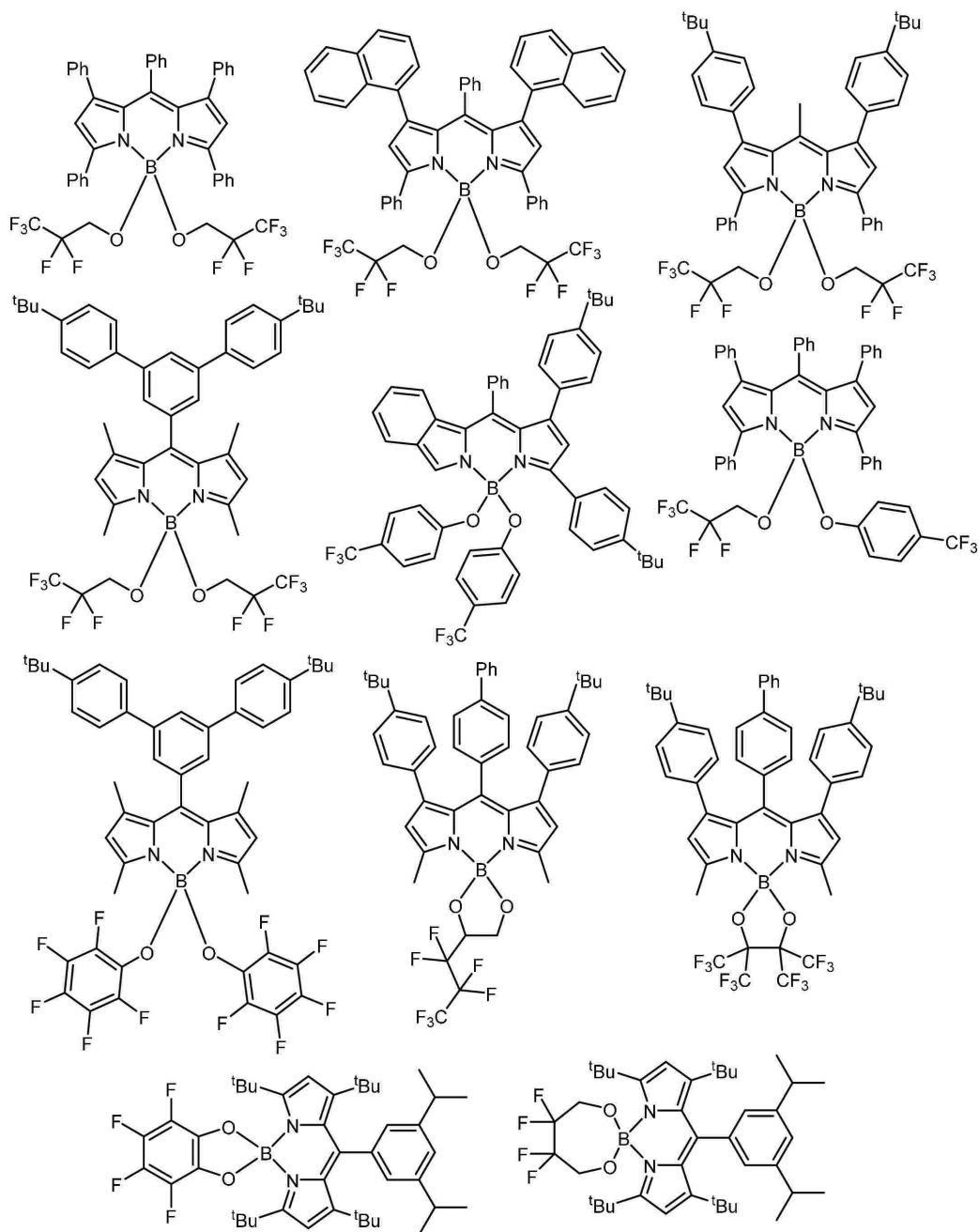
30

40

50

【 0 1 4 3 】

また、BODIPYコア構造の中心ボロン原子に付着されたフッ素置換基のうち1つまたは両方を、酸素原子を介して付着され、好ましくは、フッ素（F）またはトリフルオロメチル（CF₃）のような電子求引置換基で選択的に置換されるアルコキシ基またはアリールオキシ基に代替することにより、光電子素子用エミッタに達することができることは当業者に公知である。そのようなエミッタ材料の例が下記に示されており、これは、下記に示された構造のみが本発明の文脈における好適な小さいFWHMエミッタS^Bであるということを意味しない：



10

20

30

【0144】

当業者は、事実上、先行技術で使用される全てのBODIPY系エミッタ及びその誘導体が、例えば、蛍光エミッタFとして、特に小さいFWHMエミッタS^Bとして、本発明による有機分子と共に使用可能であるものと理解する。

40

【0145】

本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bを提供するのに適している他の部類の分子は、NRCT (near-range-charge-transfer) エミッタである。

【0146】

一般的なNRCTエミッタは、時間分解フォトルミネッセンススペクトルで遅延された成分を示し、近距離HOMO-LUMO分離を示すものと文献に説明されている。

【0147】

一般的なNRCTエミッタは、発光スペクトルで1つの発光帯域のみを示し、一般的な蛍光エミッタは、振動進行により、複数の固有な発光帯域を示す。

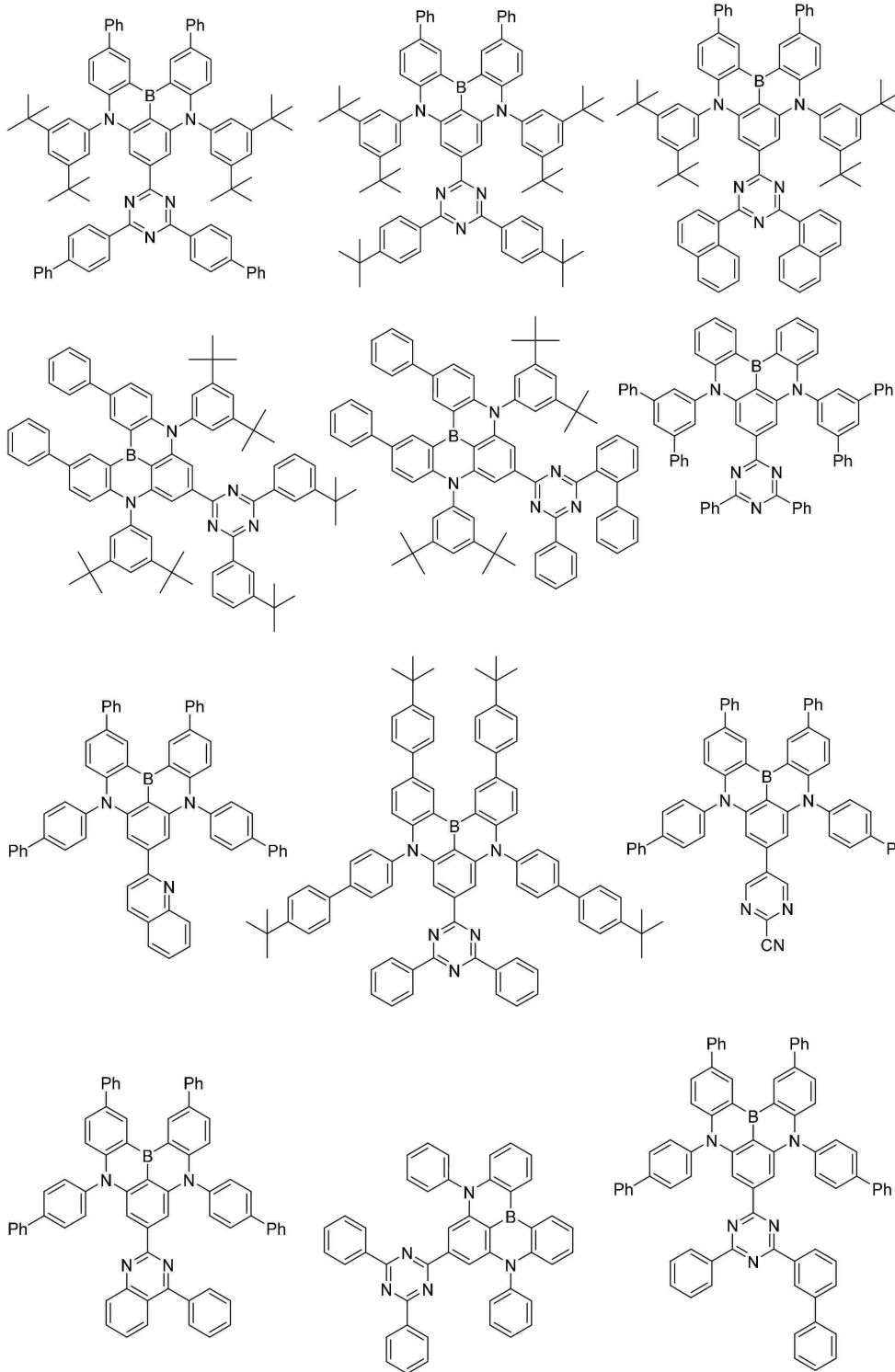
50

【 0 1 4 8 】

当業者は、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B として適しているNRC Tエミッタを設計及び合成する方法を知っている。

【 0 1 4 9 】

本明細書に定義されたような小さいFWHMエミッタ S^B であり、本発明による有機分子と共に使用可能な追加蛍光エミッタF（以下参照）は、下記に示したボロン含有エミッタである：



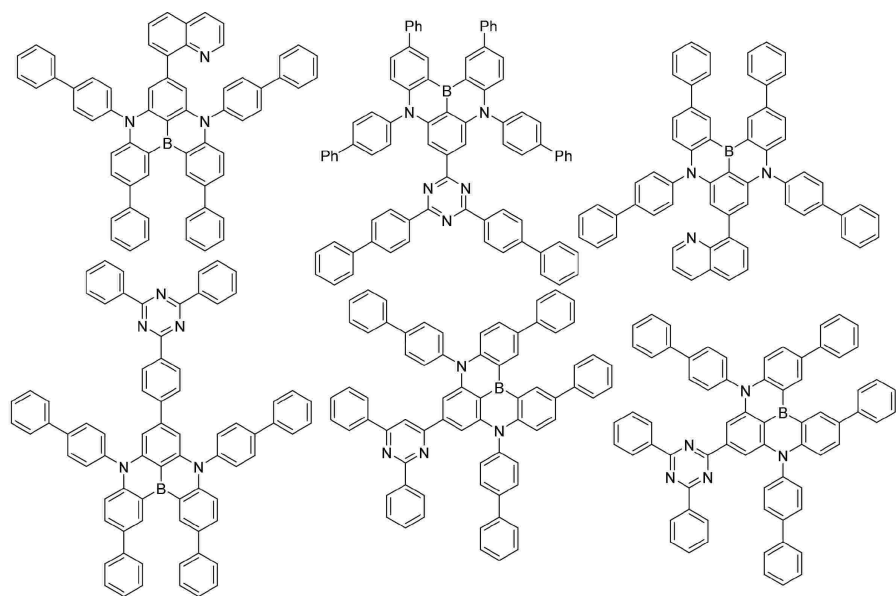
10

20

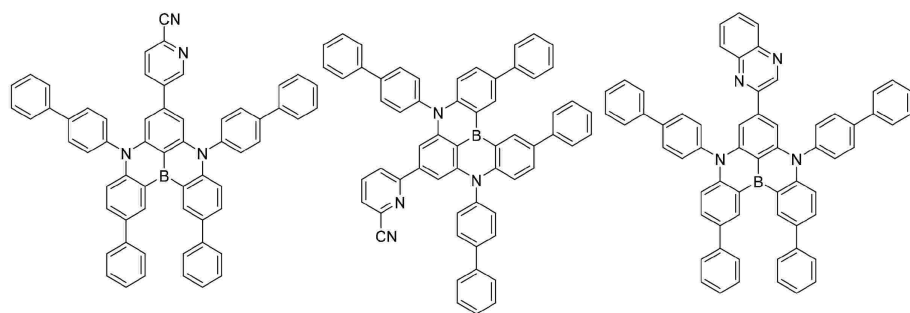
30

40

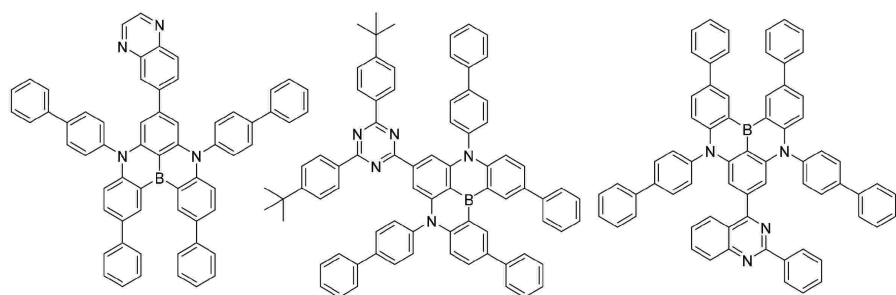
50



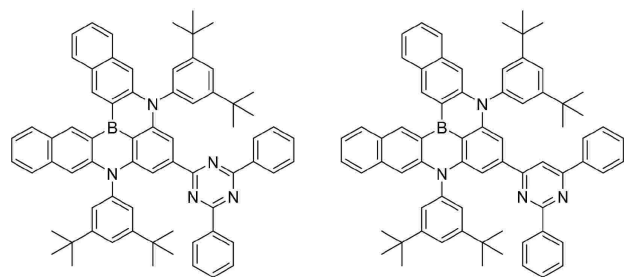
10



20

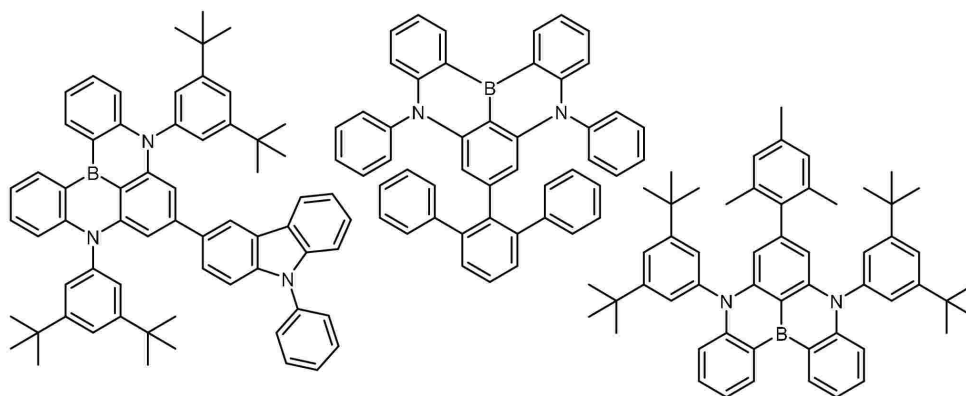


30



40

50



10

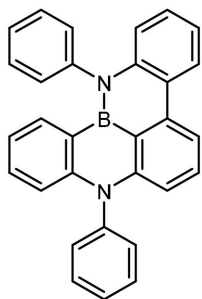
【0150】

ここで、これは、示された材料のみが本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B として使用されることを意味しない。

【0151】

小さいFWHMエミッタ S^B として使用可能な蛍光エミッタ F の他のグループは、正確に1つの直接 $B-N$ 結合を含むボロン含有エミッタである。当業者は、構造的に関連した化合物が本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B として同等に適しているものと理解する。小さいFWHMエミッタ S^B の非制限的な例は、下記構造を含むか、あるいはそれからなる、正確に1つの直接 $B-N$ 結合を含むボロン含有エミッタである：

20



30

【0152】

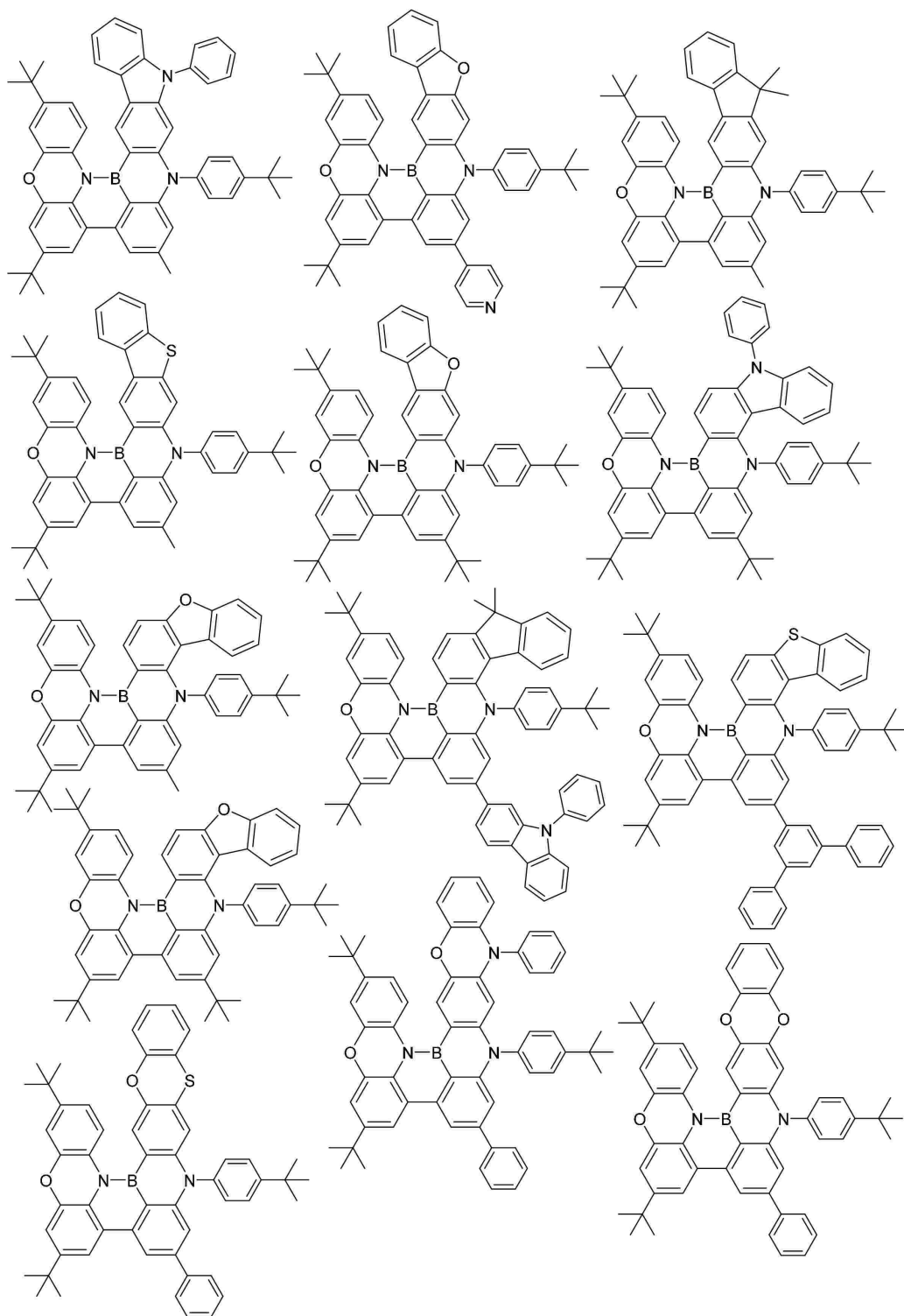
当該構造は、さらに置換され、構造単位及び／または置換基が結合されて縮合環系を形成することができる。

【0153】

小さいFWHMエミッタ S^B として使用可能なエミッタの特定例（非制限的）は、以下の通りである：

40

50



10

20

30

40

【0154】

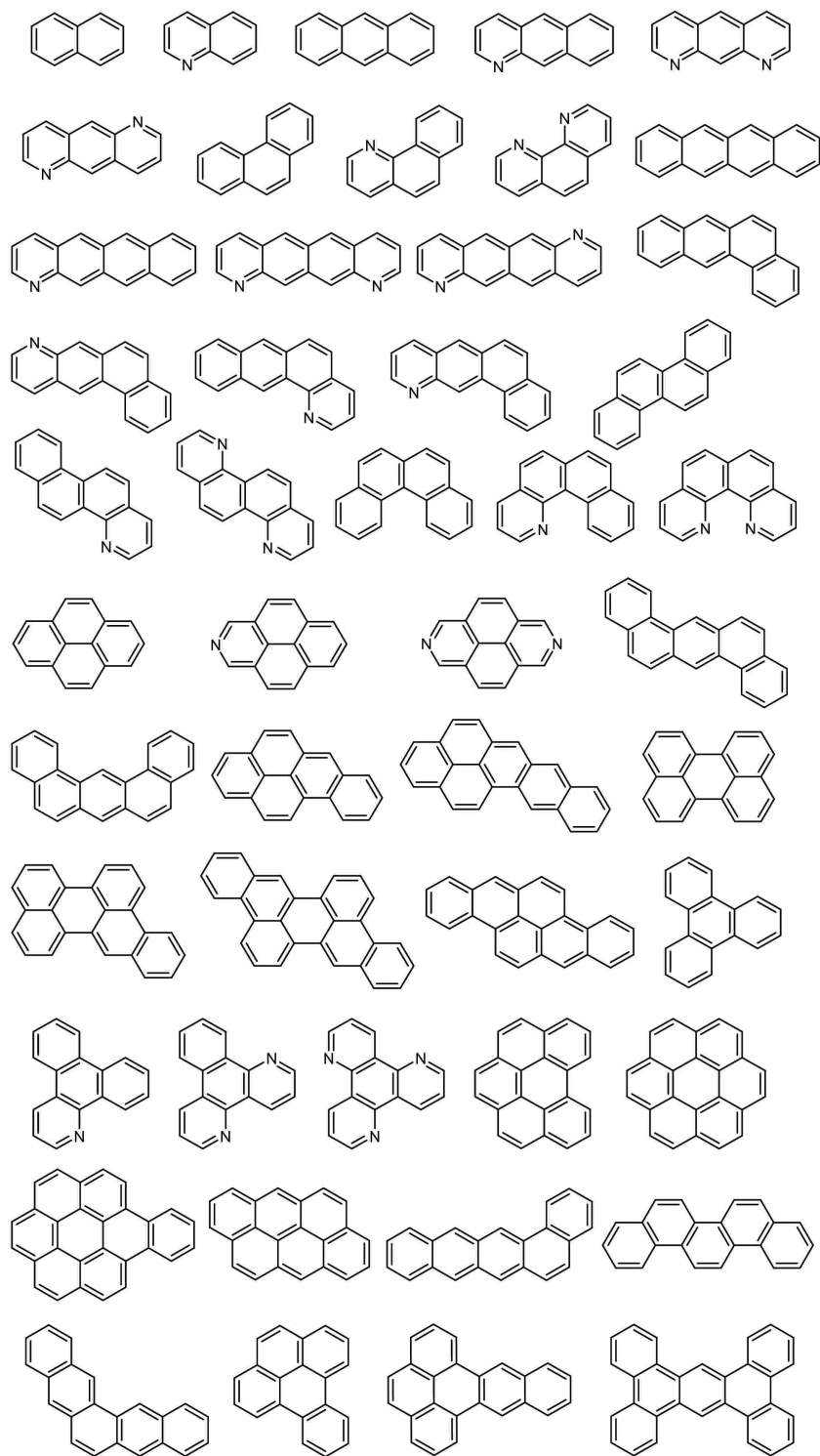
蛍光エミッタFを設計する1つのアプローチは、蛍光性の多環芳香族またはヘテロ芳香族コア構造の使用に依存する。後者は、本発明の文脈において、1以上の芳香族環またはヘテロ芳香族環、好ましくは、2以上の当該環を含む任意の構造であり、これは、より好ましくは、互いに縮合されるか、あるいは1以上の直接結合または連結原子を介して連結されている。すなわち、蛍光コア構造は、少なくとも1つ、好ましくは、単に1つの剛直な共役πシステムを含む。

【0155】

当業者は、蛍光エミッタFのための蛍光コア構造を選択する方法を知っている。蛍光エ

50

ミッタ F の一般的な蛍光コア構造の非制限的な例は、下記の通りである：



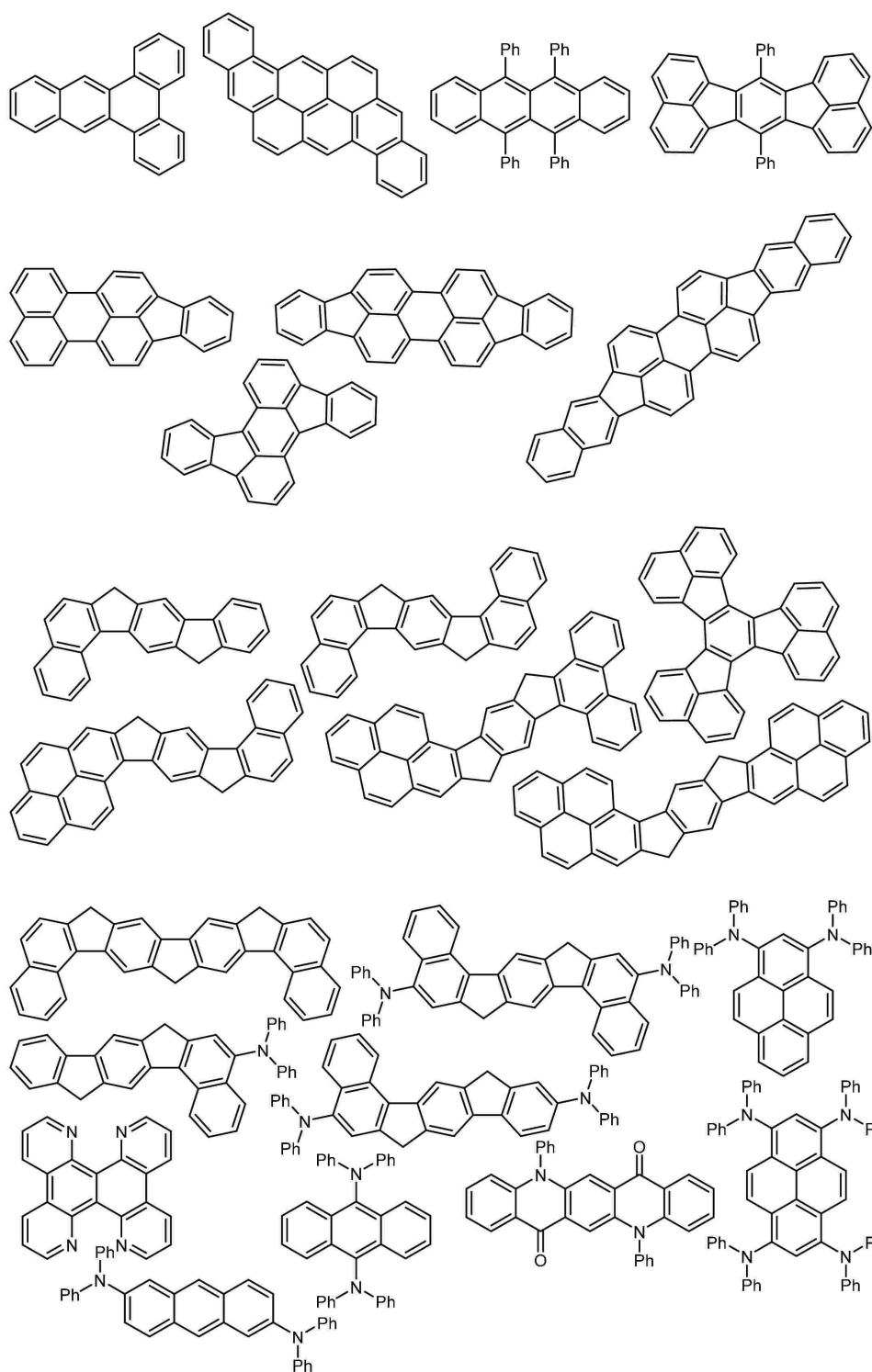
10

20

30

40

50



10

20

30

40

【0156】

当該文脈において、用語「蛍光コア構造」は、前記コアを含む任意の分子が潜在的に蛍光エミッターFとして使用可能であることを示す。当業者は、そのような蛍光エミッターFのコア構造が選択的に置換されていてもよく、どのような置換基がそれと係わって適しているということを知っている。

【0157】

当業者に知られているように、EMLのホスト材料H^Bは、前記EMLを通過し、電子または正電荷を輸送することができ、ホスト材料H^Bにドーピングされた少なくとも1つのエミッター材料に励起エネルギーを伝達することができる。当業者は、光電子素子（例え

50

ば、O L E D) の E M L に含まれたホスト材料 H^B が、一般的に電圧及び電流を印加するとき、前記素子からの発光に大きく関与しないということを理解する。当業者は、また、任意のホスト材料 H^B が、高い正孔移動度を示す p-ホスト H^P 、高い電子移動度を示す n-ホスト H^N 、または高い正孔移動度及び高い電子移動度の両方を示す双極性ホスト材料 H^{BP} であるという事実を知っている。

【0158】

当業者に知られているように、E M L は、また、少なくとも1つの p-ホスト H^P 及び1つの n-ホスト H^N を有するいわゆる混合ホストシステムを含む。特に、E M L は、本発明による正確に1つのエミッタ材料、及び n-ホスト H^N としての2, 4, 6-トリス(ピフェニル-3-イル)-1, 3, 5-トリアジン(T2T)、p-ホスト H^P としての C B P、m C P、m C B P、4, 6-ジフェニル-2-(3-(トリフェニルシリル)フェニル)-1, 3, 5-トリアジン、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9 H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9 H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾチオフエン-2-イル)フェニル]-9 H-カルバゾール、及び9-[3, 5-ビス(2-ジベンゾフラニル)フェニル]-9 H-カルバゾールから選択されたホストを含む混合ホストシステムを含む。

10

【0159】

E M L は、少なくとも1つの p-ホスト H^P と1つの n-ホスト H^N があるいわゆる混合ホストシステムを含む。ここで、n-ホスト H^N は、ピリジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、1, 3, 5-トリアジン、1, 2, 4-トリアジン及び1, 2, 3-トリアジンから誘導された基を含み、p-ホスト H^P は、インドール、イソインドール、好ましくは、カルバゾールから誘導された基を含む。

20

【0160】

当業者は、どのような材料が光電子素子に使用するのに適しているホスト材料であるかを知っている。先行技術で使用される任意のホスト材料が、本発明の文脈における好適なホスト材料 H^B であるものと理解される。

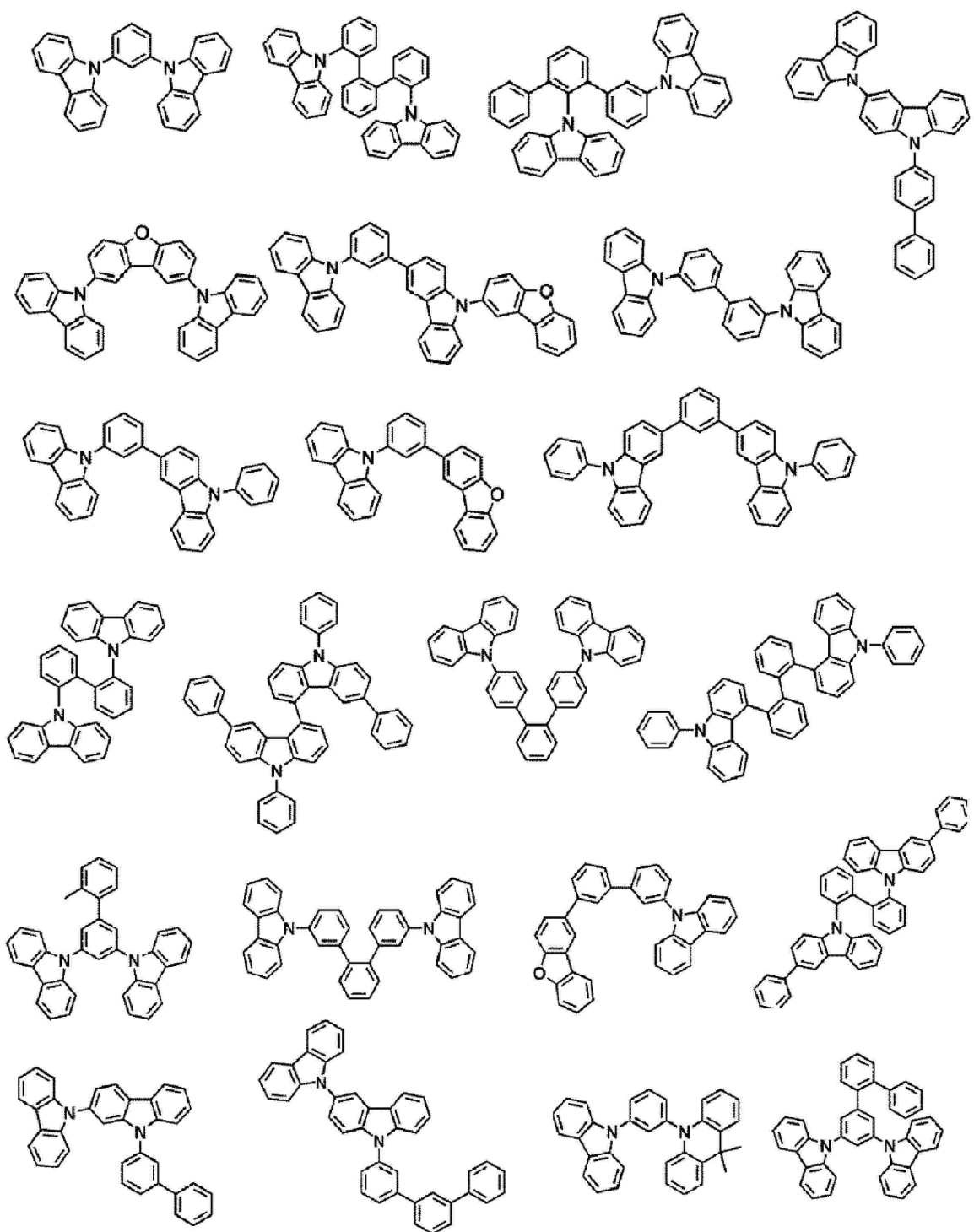
【0161】

本発明の文脈における p-ホスト材料 H^P である材料 H^B の非制限的な例は、下記に列挙されている：

30

40

50



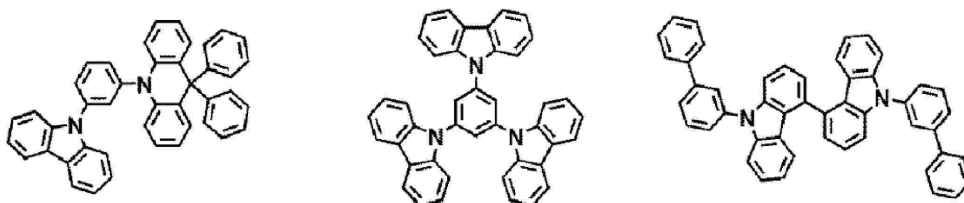
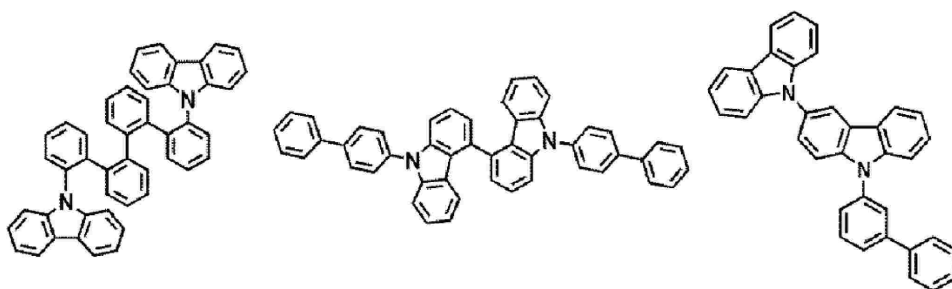
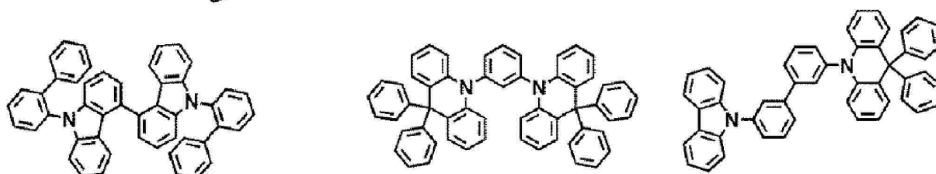
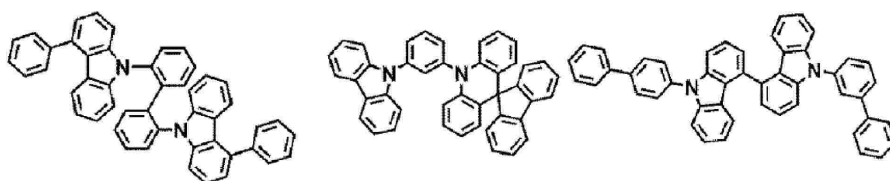
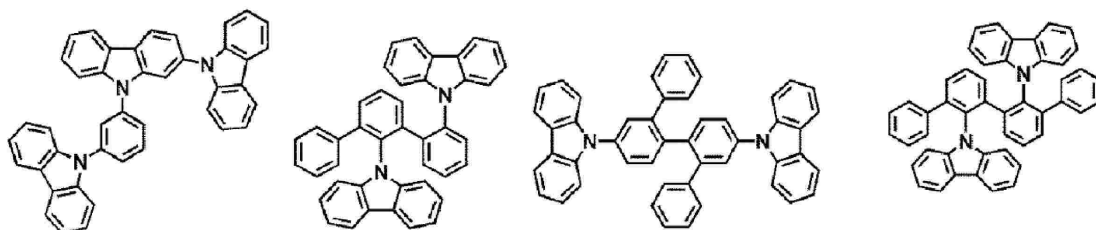
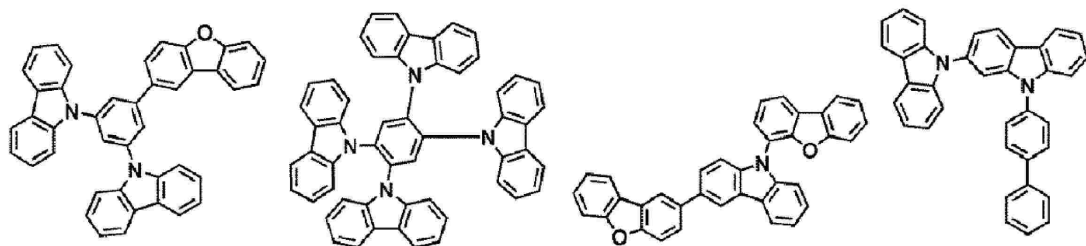
10

20

30

40

50



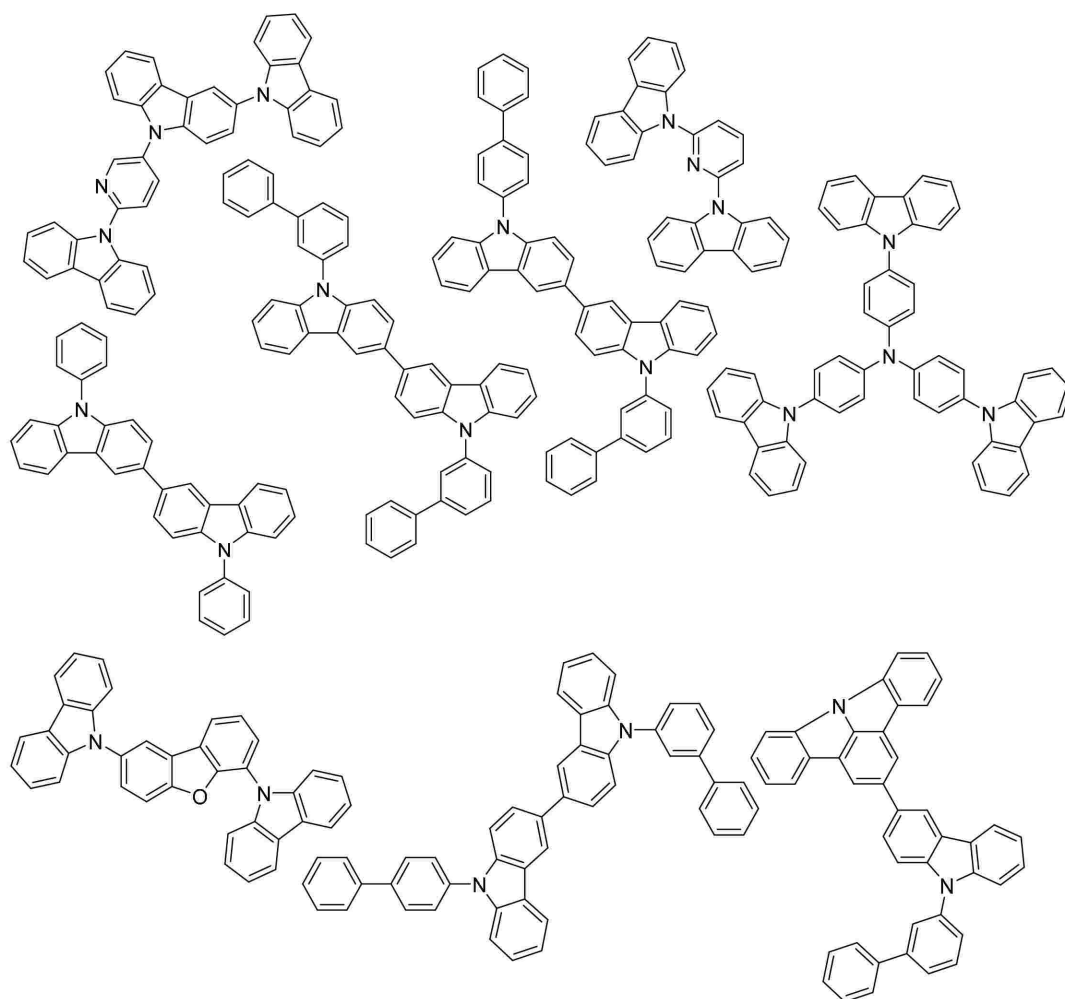
10

20

30

40

50



10

20

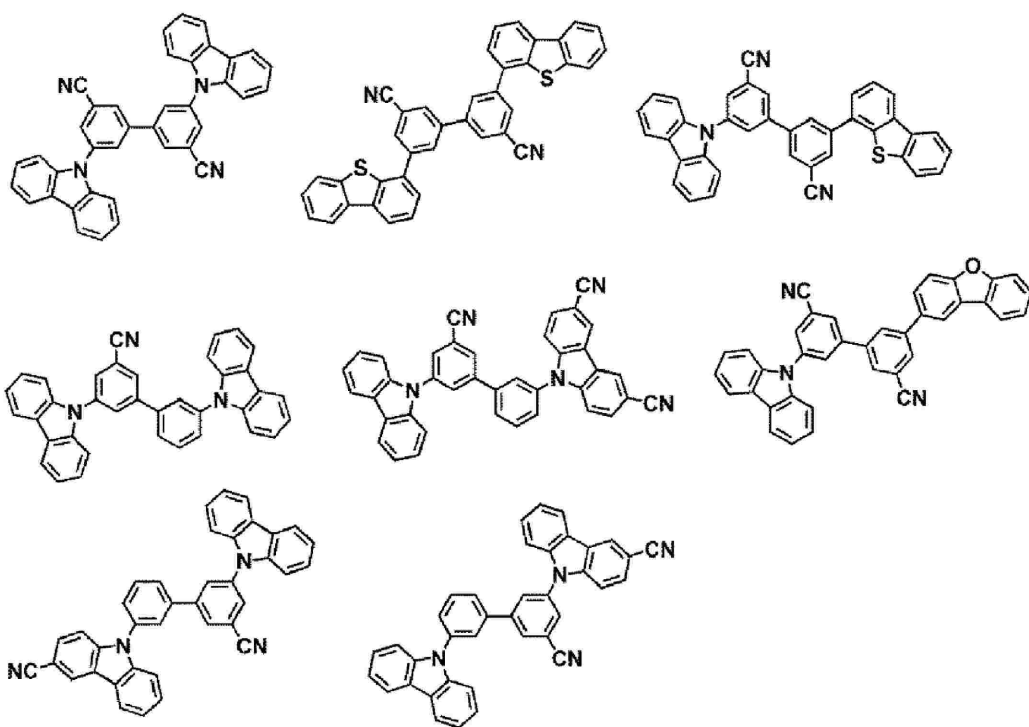
【 0 1 6 2 】

本発明の文脈における n - ホスト材料 H^N である材料 H^B の非制限的な例は、下記に列挙されている：

30

40

50



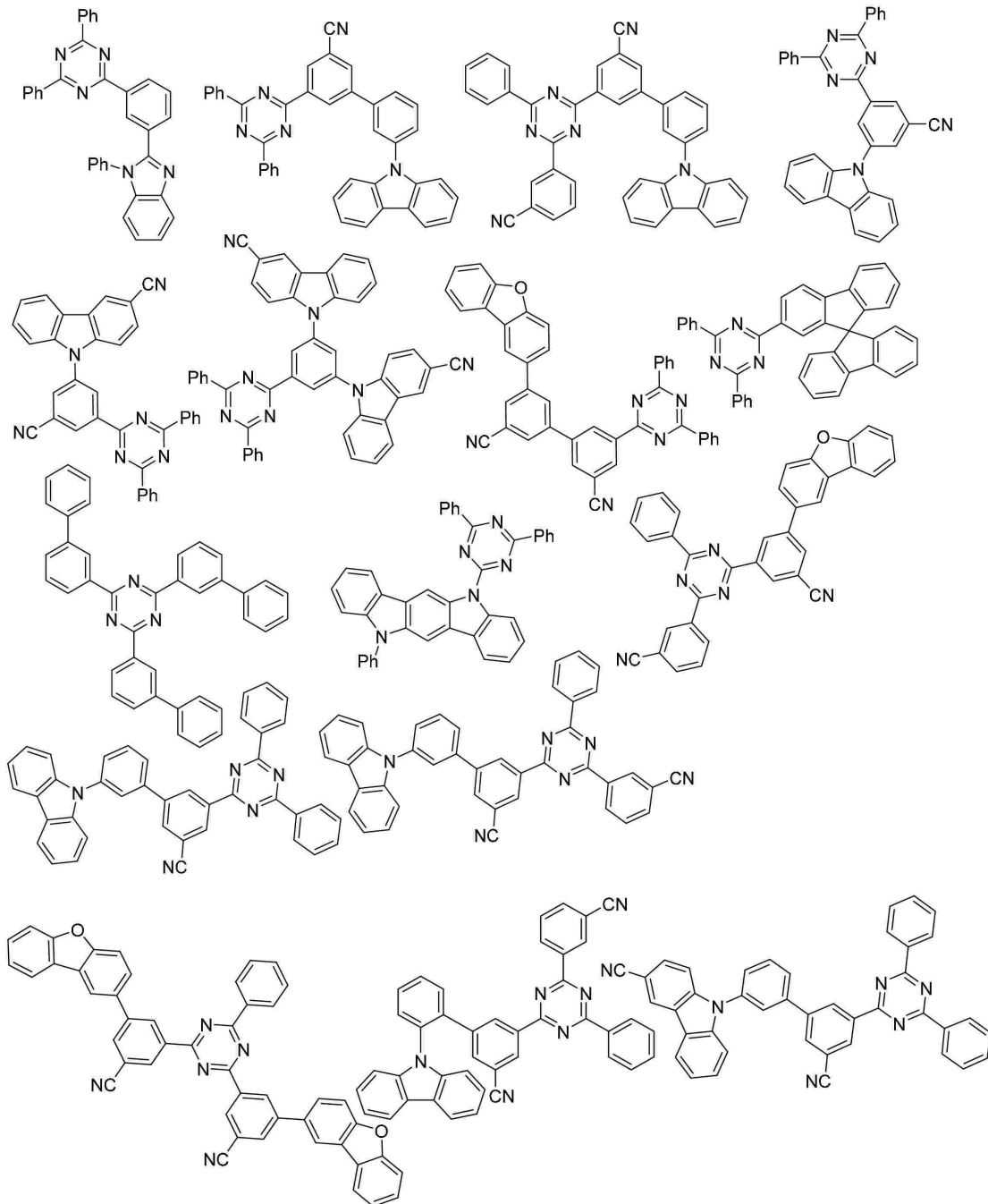
10

20

30

40

50



10

20

30

【0163】

当業者は、同一層、特に同一EMLに含まれた任意の材料だけでなく、隣接層にあり、それら隣接層間の界面で非常に近接した材料が共にエキシプレックスを形成することができるものと理解する。当業者は、エキシプレックスを形成する材料対、特にp-ホストH^P及びn-ホストH^Nの対を選択する方法、並びにHOMO及び／またはLUMOエネルギー要求量を含む前記材料対の2つの成分に対する選択基準を知っている。すなわち、エキシプレックス形成が要求される場合、一成分、例えば、p-ホスト材料H^PのHOMOは、他の成分、例えば、n-ホスト材料H^NのHOMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVさらに高く、一成分、例えば、p-ホスト材料H^PのLUMOは、他の成分、例えば、n-ホスト材料H^NのLUMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVさらに高い。エキシプレックスが光電子素子、特にOLEDのEMLに存在すれば、エキシプレックスがエミッタ材料の機能を有し、電圧と電流が当該素子に印加されるときに発光するこ

40

50

とができるということは、当業者の常識に属する。先行技術から、かつ一般的に知られているように、エキシプレックスは非発光性であってもよく、例えば、光電子素子の EML に含まれる場合、励起エネルギーをエミッタ材料に伝達することができる。

【0164】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

本発明の一側面は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物に係わるものである。本発明の一側面は、光電子素子、好ましくは、OLED、特に前記素子の EML における前記組成物の用途に係わるものである。

【0165】

以下、前述の組成物を説明するとき、場合によって、それぞれの組成物のうち、特定材料の含量を百分率の形態に言及する。特定実施形態において特に言及されない限り、全ての百分率は、重量百分率を示し、これは、重量百分率または重量%（（重量／重量）、（ w/w ）、 $wt\%$ ）と同じ意味を有するという点に留意しなければならない。例えば、特定組成物において、1以上の本発明による有機分子の含量が例示的に30%と言及する場合、これは、1以上の本発明による有機分子の（すなわち、結合されたそれら全ての分子の）総重量が30重量%、すなわち、それぞれの組成物の総重量の30%を占めることを意味するものと理解される。成分の好ましい含量を重量%で提供することにより、組成物が特定される度に、全ての成分の総含量は、100重量%（すなわち、組成物の総重量）まで合算されるものと理解される。

【0166】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物に係わる本発明の実施形態を説明する下記において、光電子素子、好ましくは、光電子素子の EML において、最も好ましくは、OLEDの EML において、前記組成物を使用するとき、それら組成物内の成分間で発生するエネルギー伝達工程を言及するであろう。当業者は、そのような励起エネルギー伝達工程が、光電子素子の EML において組成物を使用するときに発光効率を向上させることができるものと理解する。

【0167】

当業者は、励起エネルギー伝達が（効率的に）発生するために、好ましくは、エネルギードナーの発光スペクトルとエネルギーアクセプターの吸収スペクトルとの間にスペクトル重複があるものと理解する。また、当業者は、意図されたエネルギードナーが意図されたエネルギーアクセプターに比べてさらに高い励起状態エネルギー準位を有しなければならないものと理解し、すなわち、エネルギードナーの最低励起一重項状態 S1（ドナー）のエネルギー準位 E（S1）（ドナー）、及び／またはエネルギードナーの最低励起三重項状態 T1（ドナー）のエネルギー準位 E（T1）（ドナー）は、エネルギーアクセプターの最低励起一重項状態 S1（アクセプター）のエネルギー準位 E（S1）（アクセプター）、及び／またはエネルギーアクセプターの最低励起三重項状態 T1（アクセプター）のエネルギー準位 E（T1）（アクセプター）よりエネルギーが高いことが好ましい。前述の好ましい基準を満たす材料を選択することは、発明的な段階なしに当業者の標準知識に基づいて容易に達成され得る。励起状態エネルギーを決定する方法、吸収及び発光スペクトルを記録する方法についての実験的細部事項は、本文の後項で提供される。

【0168】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物を記述するとき、特定材料が他の材料と「異なる」点も指摘されるであろう。これは、互いに「異なる」材料が同一化学構造を有さないということを意味する。

【0169】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、
- (b) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料 H^B、
- (c) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上の TADF 材料 E^B、
- (d) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上の燐光材料 P^B、

(e) 選択的に (a) の有機分子と異なり、かつ (c) の T A D F 材料 E^B と異なる 1 以上の蛍光エミッタ F、及び

(f) 選択的に 1 以上の溶媒及び／または染料、

ここで、任意の (a) ないし (e) の材料（前記定義されたような同一グループの材料、及び／または前記定義されたような相異なるグループの材料）は、選択的に 1 以上のエキシプレックスを形成し、

ここで、(e) の蛍光エミッタ F が組成物に存在しない場合、(a) 及び／または (c) 及び／または (d) のうち少なくとも 1 つの材料、及び／または少なくとも 1 つのエキシプレックスは、エミッタ材料である。

【0170】

少なくとも 1 つの本発明による有機分子及び（選択的に）少なくとも 1 つのホスト材料 H^B を含む組成物

本発明による組成物の一実施形態は、少なくとも 1 つの本発明による有機分子、及び選択的に本発明の分子と構造的に異なる少なくとも 1 つのホスト材料 H^B を含む組成物に係わるものである。

【0171】

好ましくは、前記組成物の少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのエミッタ材料は、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の 10 重量%の各エミッタのスピコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、440 ないし 500 nm、好ましくは、445 ないし 495 nm、より好ましくは、450 ないし 490 nm の最大発光で光を放出する。存在する場合、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのホスト材料 H^B は、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのエミッタ材料の最低励起一重項状態よりエネルギーがさらに高い最低励起一重項状態 S₁（H^B）を有することが好ましい。存在する場合、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのホスト材料 H^B は、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのエミッタ材料に励起エネルギーを伝達することができることが好ましい。励起エネルギーは、また、本発明による相異なる有機分子間で伝達され、ここで、励起エネルギーが少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれのエミッタ材料に伝達されることが特に好ましい。

【0172】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1 以上の本発明による有機分子、

(b) (a) の有機分子と異なる 1 以上のホスト材料 H^B、及び

(c) 選択的に 1 以上の溶媒。

【0173】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1 以上の本発明による有機分子、及び

(b) (a) の有機分子と異なる 1 以上のホスト材料 H^B、

ここで、組成物中のホスト材料 H^B の分率（重量%）は、本発明による有機分子の分率（重量%）より高く、好ましくは、組成物中のホスト材料 H^B の分率（重量%）は、本発明による有機分子の分率（重量%）より 2 倍高い。

【0174】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1～50 重量%、好ましくは、5～40 重量%、特に 10～30 重量%の 1 以上の本発明による有機分子、

(b) 5～99 重量%、好ましくは、30～95 重量%、特に 40～90 重量%の、(a) の有機分子と異なる 1 以上のホスト材料 H^B、及び

(c) 0～94 重量%、好ましくは、0～65 重量%、特に 0～50 重量%の 1 以上の溶媒、

ここで、特定実施形態において、グループ (a) ないし (c) の材料の総重量は 100 重量%である。

10

20

30

40

50

【0175】

少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタFと共に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

前記組成物の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子、及び少なくとも1つの本発明の分子ではない蛍光エミッタF（前記定義された通り）を含む組成物に係わるものである（すなわち、本発明による有機分子が蛍光エミッタである場合、追加蛍光エミッタFが組成物に存在することができる）。

【0176】

この場合、本発明による任意の有機分子及び少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタFは、エミッタ材料の役割を行うことができるが、好ましくは、光電子素子のEMLで使用される場合、組成物からの発光は、主に（すなわち、50%以上、好ましくは、60%以上、より好ましくは、70%以上、より一層好ましくは、80%以上、またははなはだしくは、90%以上）少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの、本発明の分子と構造的に異なる（追加）蛍光エミッタFに起因する。さらに、励起エネルギーは、好ましくは、当該組成物内の相異なる材料間で、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料H^B（存在する場合）から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^B、及び少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFに伝達される。励起エネルギーは、また、以下から選択された組成物内の材料間に伝達されることが好ましい：少なくとも1つの本発明による有機分子及び少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタF、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFに。少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFは、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各S^Bのスピニング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bであることが特に好ましい。

【0177】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、
- (b) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上の蛍光エミッタF、及び
- (d) 選択的に1以上の溶媒、

ここで、グループ(c)の少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの蛍光エミッタFは、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各S^Bのスピニング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bであることが好ましい。

【0178】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、及び
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上の蛍光エミッタF、

ここで、グループ(a)の有機分子の分率（重量%）は、グループ(c)の蛍光エミッタFの分率（重量%）より高く、好ましくは、グループ(a)の有機分子の分率（重量%）は、グループ(c)の蛍光エミッタFの分率（重量%）より少なくとも5倍高い。

【0179】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1～50重量%、好ましくは、5～40重量%、特に10～30重量%の1以上

の本発明による有機分子、

(b) 30～98.9重量%、好ましくは、48～94.5重量%、特に65～89重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、

(c) 0.1～20重量%、好ましくは、0.5～12重量%、特に1～5重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上の(追加)蛍光エミッタF、及び

(d) 選択的に0～68.9重量%、好ましくは、0～46.5重量%、特に0～24重量%の1以上の溶媒、

ここで、グループ(c)の少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの蛍光エミッタFは、室温(すなわち、(約)20℃)で、ポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各S^Bのスピンコーティング膜から測定された発

10

光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bであることが好ましく、

ここで、特定実施形態において、グループ(a)ないし(d)の材料の総重量は100重量%である。

【0180】
少なくとも1つの(追加)TADF材料E^Bと共に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

前記組成物の他の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子、及び本発明の分子ではない、すなわち、構造的に異なる少なくとも1つのTADF材料E^B(前記定義された通り)を含む組成物に係わるものである。

20

【0181】

この場合、少なくとも1つの本発明による有機分子及び少なくとも1つのTADF材料E^Bから選択される任意の材料は、エミッタ材料の役割を行うことができる。さらに、励起エネルギーは、当該組成物内の相異なる材料間で、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料H^Bから、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^B、及び／または、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子に伝達される。励起エネルギーは、また、少なくとも1つの本発明による有機分子及び少なくとも1つのTADF材料E^Bから選択される組成物内の材料間で、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのエミッタ材料に伝達されることが好ましい。少なくとも1つの本発明による有機分子及び少なくとも1つのTADF材料E^Bから選択された、エミッタ材料として作用する少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの材料は、室温(すなわち、(約)20℃)で、ポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)内の10重量%の各エミッタのスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、440ないし500nm、より好ましくは、445ないし495nm、より一層好ましくは、450ないし490nmの最大発光を有する青色光を放出することが特に好ましい。

30

【0182】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、
- (b) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上のTADF材料E^B、及び
- (d) 選択的に1以上の溶媒。

40

【0183】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、及び
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上のTADF材料E^B、

ここで、グループ(c)のTADF材料E^Bの分率(重量%)は、グループ(a)の有機分子の分率(重量%)より高く、好ましくは、グループ(c)のTADF材料E^Bの分率(重量%)は、グループ(a)の有機分子の分率(重量%)より少なくとも2倍高い。

50

【0184】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1～50重量%、好ましくは、5～40重量%、特に10～30重量%の1以上の本発明による有機分子、

(b) 0～98.9重量%、好ましくは、20～94.5重量%、特に40～89重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、

(c) 0.1～50重量%、好ましくは、0.5～40重量%、特に1～30重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上のTADF材料E^B、及び

(d) 0～98.9重量%、好ましくは、20～74.5重量%、特に30～49重量%の1以上の溶媒、

10

ここで、(a)及び／または(c)のうち少なくとも1つの材料は、エミッタ材料であり、

ここで、特定実施形態において、グループ(a)ないし(c)の材料の総重量は100重量%である。

【0185】

少なくとも1つの(追加)TADF材料E^B及び少なくとも1つの(追加)蛍光エミッタFと共に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

前記組成物のさらに他の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子、本発明の有機分子ではない少なくとも1つのTADF材料E^B(前記定義された通り)、及び本発明の分子ではない少なくとも1つの(追加)蛍光エミッタF(前記定義された通り)を含む組成物に係わるものである。

20

【0186】

この場合、少なくとも1つの本発明による有機分子、少なくとも1つの(追加)TADF材料E^B及び少なくとも1つの(追加)蛍光エミッタFから選択された任意の材料は、エミッタ材料の役割を行うことができる。しかし、好ましくは、光電子素子のEMLに使用される場合、組成物からの発光は、主に(すなわち、50%以上、好ましくは、60%以上、より好ましくは、70%以上、より一層好ましくは、80%以上、またははなはだしくは、90%以上)本発明の分子ではない少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの(追加)蛍光エミッタFに起因する。少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの(追加)蛍光エミッタFは、室温(すなわち、(約)20℃)で、ポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各S^Bのスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bであることが特に好ましい。さらに、励起エネルギーは、好ましくは、当該組成物内の相異なる材料間で、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料H^B(存在する場合)から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^B、及び少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの(追加)蛍光エミッタFに伝達される。励起エネルギーは、また、以下から選択された組成物内の材料間で伝達されることが好ましい：少なくとも1つの本発明による有機分子、少なくとも1つの(追加)TADF材料E^B、及び少なくとも1つの(追加)蛍光エミッタF、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子、及び／または、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの(追加)TADF材料E^Bから、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの(追加)蛍光エミッタFに。

30

40

【0187】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1以上の本発明による有機分子、

(b) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、

(c) (a)の有機分子と異なる1以上の(追加)TADF材料E^B、

(d) (a)の有機分子と異なり、かつ(c)のTADF材料E^Bとも異なる1

50

以上の（追加）蛍光エミッタ F、及び

（e）選択的に 1 以上の溶媒、

ここで、（d）の少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの蛍光エミッタ F は、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の 1～5 重量%、好ましくは、2 重量%の各 S^B のスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450 ないし 500 nm、より好ましくは、455 ないし 485 nm、より一層好ましくは、460 ないし 470 nm の最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さい FWHM エミッタ S^B であることが好ましい。

【0188】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（a）1 以上の本発明による有機分子、

（c）（a）の有機分子と異なる 1 以上の TADF 材料 E^B、及び

（d）（a）の有機分子と異なり、かつ（c）の TADF 材料 E^B と異なる 1 以上の蛍光エミッタ F、

ここで、グループ（c）の TADF 材料 E^B の分率（重量%）は、グループ（a）の有機分子の分率（重量%）より高く、好ましくは、グループ（c）の TADF 材料 E^B の分率（重量%）は、グループ（a）の有機分子の分率（重量%）より少なくとも 2 倍高く、

ここで、グループ（a）の有機分子の分率（重量%）は、グループ（d）の蛍光エミッタ F の分率（重量%）より高く、好ましくは、グループ（a）の有機分子の分率（重量%）は、グループ（d）の蛍光エミッタ F の分率（重量%）より少なくとも 2 倍高い。

【0189】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（a）1～50 重量%、好ましくは、5～40 重量%、特に 10～30 重量%の 1 以上の本発明による有機分子、

（b）0～98.9 重量%、好ましくは、0～94 重量%、特に 0～88 重量%の、（a）の有機分子と異なる 1 以上のホスト材料 H^B、

（c）0.1～98.9 重量%、好ましくは、0.5～94.5 重量%、特に 1～89 重量%の、（a）の有機分子と異なる 1 以上の TADF 材料 E^B、

（d）0.1～20 重量%、好ましくは、0.5～12 重量%、特に 1～5 重量%の、

（a）の有機分子と異なり、かつ（c）の TADF 材料 E^B と異なる 1 以上の（追加）蛍光エミッタ F、及び

（e）0～98.8 重量%、好ましくは、0～94 重量%、特に 0～88 重量%の 1 以上の溶媒、

ここで、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタ F（すなわち、（d）の材料）は、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の 1～5 重量%、好ましくは、2 重量%の各 S^B のスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450 ないし 500 nm、より好ましくは、455 ないし 485 nm、より一層好ましくは、460 ないし 470 nm の最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さい FWHM エミッタ S^B であることが好ましく、

ここで、特定実施形態において、グループ（a）ないし（e）の材料の総重量は 100 重量%である。

【0190】

少なくとも 1 つの燐光材料 P^B と共に、少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む組成物

前記組成物のさらに他の好ましい実施形態は、少なくとも 1 つの本発明による有機分子、及び本発明の分子ではない少なくとも 1 つの燐光材料 P^B（前記定義された通り）を含む組成物に係わるものである。

【0191】

この場合、少なくとも 1 つの本発明による有機分子及び少なくとも 1 つの燐光材料 P^B

10

20

30

40

50

から選択される任意の材料は、エミッタ材料の役割を行うことができる。

【0192】

光電子素子のEMLに使用される場合、前記組成物からの発光が、主に（すなわち、50%以上、好ましくは、60%以上、より好ましくは、70%以上、より一層好ましくは、80%以上、またははなはだしくは、90%以上）少なくとも1つの燐光材料P^Bに起因する場合、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子の最低励起一重項状態S₁が、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料P^Bの最低励起三重項状態T₁よりエネルギー的に高いことが好ましい。その後、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子が、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料P^Bに励起エネルギーを伝達することが好ましい。

10

【0193】

光電子素子のEMLに使用される場合、前記組成物からの発光が、主に（すなわち、50%以上、好ましくは、60%以上、より好ましくは、70%以上、より一層好ましくは、80%以上、またははなはだしくは、90%以上）少なくとも1つの本発明による有機分子に起因する場合、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料P^Bの最低励起三重項状態T₁が、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子の最低励起三重項状態T₁よりエネルギー的に高いことが好ましい。その後、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料P^Bが、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子に励起エネルギーを伝達することが好ましい。前述のように、本発明による有機分子は、本明細書で定義されたようなTADF材料E^Bであることが一般的に好ましい（前記参照）。この場合、前記組成物において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料P^Bは、当業者の常識の一部を形成する外部重原子効果により、組成物に含まれた少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^B内で、RISCプロセスの効率を向上させることができる。

20

【0194】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、
- (b) 選択的に(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上の燐光材料P^B、及び
- (d) 選択的に1以上の溶媒、

30

ここで、(a)及び／または(c)の少なくとも1つの材料は、エミッタ材料である。

【0195】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1以上の本発明による有機分子、及び
- (c) (a)の有機分子と異なる1以上の燐光材料P^B、

ここで、グループ(a)の有機分子の分率（重量%）は、グループ(c)の燐光材料P^Bの分率（重量%）より高く、好ましくは、グループ(a)の有機分子の分率（重量%）は、グループ(c)の燐光材料P^Bの分率（重量%）より少なくとも2倍高い。

【0196】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 1～99.5重量%、好ましくは、5～50重量%、特に10～30重量%の1以上の本発明による有機分子、
- (b) 0～98.5重量%、好ましくは、35～94重量%、特に60～88重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、
- (c) 0.5～20重量%、好ましくは、1～15重量%、特に2～10重量%の、(a)の有機分子と異なる1以上の燐光材料P^B、及び
- (d) 0～98.5重量%、好ましくは、0～59重量%、特に0～28重量%の1以上の溶媒、

40

ここで、(a)及び／または(c)のうち少なくとも1つの材料は、エミッタ材料であり、

50

ここで、特定実施形態において、グループ（a）ないし（d）の材料の総重量は100重量%である。

【0197】

少なくとも1つの燐光材料 P^B 及び少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタFと共に、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

前記組成物のさらに他の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子、本発明の分子ではない少なくとも1つの燐光材料 P^B （前記定義された通り）、及び本発明の分子ではない少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタF（前記定義された通り）を含む組成物に係わるものである。

【0198】

この場合、少なくとも1つの本発明による有機分子、少なくとも1つの燐光材料 P^B 及び少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタFから選択される任意の材料は、エミッタ材料の役割を行うことができる。しかし、好ましくは、光電子素子のEMLに使用される場合、組成物からの発光は、主に（すなわち、50%以上、好ましくは、60%以上、より好ましくは、70%以上、より一層好ましくは、80%以上、またははなはだしくは、90%以上）本発明の分子ではない、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの（追加）蛍光エミッタFに起因する。少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFは、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各 S^B のスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B であることが特に好ましい。さらに、励起エネルギーは、好ましくは、当該組成物内の相異なる材料間で、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料 H^B （存在する場合）から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料 P^B 、及び少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFに伝達される。励起エネルギーは、また、以下から選択される組成物内の材料間で伝達されることが好ましい：少なくとも1つの本発明による有機分子、少なくとも1つの燐光材料 P^B 、及び少なくとも1つの（追加）蛍光エミッタF、特に、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子、及び／または、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料 P^B から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタFに。好ましくは、励起エネルギーは、また、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの本発明による有機分子から、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの燐光材料 P^B に伝達される。

【0199】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（a）1以上の本発明による有機分子、

（b）選択的に（a）の有機分子と異なる1以上のホスト材料 H^B 、

（c）（a）の有機分子と異なる1以上の燐光材料 P^B 、

（d）（a）の有機分子と異なり、かつ（c）の燐光材料 P^B とも異なる1以上の蛍光エミッタF、及び

（e）選択的に1以上の溶媒、

ここで、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの（追加）蛍光エミッタF（すなわち、（d）の材料）は、室温（すなわち、（約）20℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の各 S^B のスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450ないし500nm、より好ましくは、455ないし485nm、より一層好ましくは、460ないし470nmの最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さいFWHMエミッタ S^B であることが好ましい。

【0200】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1 以上の本発明による有機分子、

(c) (a) の有機分子と異なる 1 以上の燐光材料 P^B 、及び

(d) (a) の有機分子と異なり、かつ (c) の燐光材料 P^B と異なる 1 以上の蛍光エミッタ F、

ここで、グループ (a) の有機分子の分率 (重量%) は、グループ (c) の燐光材料 P^B の分率 (重量%) より高く、好ましくは、グループ (a) の有機分子の分率 (重量%) は、グループ (c) の燐光材料 P^B の分率 (重量%) より少なくとも 2 倍高く、

ここで、グループ (a) の有機分子の分率 (重量%) は、グループ (d) の蛍光エミッタ F の分率 (重量%) より高く、好ましくは、グループ (a) の有機分子の分率 (重量%) は、グループ (d) の蛍光エミッタ F の分率 (重量%) より少なくとも 5 倍高い。

10

【0201】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

(a) 1～99.8 重量%、好ましくは、5～50 重量%、特に 10～30 重量% の 1 以上の本発明による有機分子、

(b) 0～98.8 重量%、好ましくは、35～94 重量%、特に 60～88 重量% の、本発明による有機分子と異なる 1 以上のホスト材料 H^B 、

(c) 0.1～20 重量%、好ましくは、0.5～10 重量%、特に 1～3 重量% の、(a) の有機分子と異なる 1 以上の燐光材料 P^B 、

(d) 0.1～20 重量%、好ましくは、0.5～12 重量%、特に 1～5 重量% の、(a) の有機分子と異なる 1 以上の (追加) 蛍光エミッタ F、及び

20

(e) 0～98.8 重量%、好ましくは、0～59 重量%、特に 0～28 重量% の 1 以上の溶媒、

ここで、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの (追加) 蛍光エミッタ F (すなわち、(d) の材料) は、室温 (すなわち、(約) 20℃) で、ポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) 内の 1～5 重量%、好ましくは、2 重量% の各 S^B のスピンコーティング膜から測定された発光スペクトルにおいて、好ましくは、450 ないし 500 nm、より好ましくは、455 ないし 485 nm、より一層好ましくは、460 ないし 470 nm の最大発光を有する青色光を放出する、本発明の文脈における小さい FWHM エミッタ S^B であることが好ましく、

30

ここで、特定実施形態において、グループ (a) ないし (e) の材料の総重量は 100 重量% である。

【0202】

本発明の更なる側面及び実施形態

好ましい実施形態において、本発明による有機分子は、フォトルミネッセンス量子収率 (PLQY) が 20% 以上、より好ましくは、30% 以上、より一層好ましくは、40% 以上、特に 50% 以上、特に 60% 以上、特に 70% 以上、またははなはだしくは、80% 以上であり、ここで、本発明による有機分子の PLQY は、本文の後項で説明されたように、室温 (すなわち、(約) 20℃) で、ポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) 内の 10 重量% の有機分子を有するスピンコーティング膜から決定される。

40

【0203】

本発明の一実施形態において、本発明による有機分子は、室温 (すなわち、(約) 20℃) で、10 重量% の有機分子を有するポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) フィルムにおいて測定するとき、50 μ s 以下、好ましくは、25 μ s 以下、より好ましくは、15 μ s 以下、より一層好ましくは、10 μ s 以下、特に 8 μ s 以下、特に 6 μ s 以下、特に好ましくは、4 μ s 以下の遅延励起状態寿命を有する。

【0204】

更なる実施形態において、本発明による有機分子は、室温 (すなわち、(約) 20℃) で、10 重量% の有機分子を有するポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) フィルムにおいて、0.60 eV 未満、好ましくは、0.50 eV 未満、より好ましくは、0.4

50

5 e V 未満、より一層好ましくは、0.43 e V 未満、またははなはだしくは、0.40 e V 未満の半値幅 (FWHM) を有する。

【0205】

更なる実施形態において、本発明による有機分子は、室温（すなわち、（約）20℃）で、10重量%の有機分子を有するポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）フィルムにおいて、50 μs 以下、好ましくは、25 μs 以下、より好ましくは、15 μs 以下、より一層好ましくは、10 μs 以下、特に8 μs 以下、特に6 μs 以下、特に好ましくは、4 μs 以下の遅延励起状態寿命を有し、0.60 e V 未満、好ましくは、0.50 e V 未満、より好ましくは、0.45 e V 未満、より一層好ましくは、0.43 e V 未満、またははなはだしくは、0.40 e V 未満の半値幅 (FWHM) を有する。

10

【0206】

本発明の更なる実施形態において、本発明による有機分子は、室温（すなわち、（約）20℃）で、10重量%の有機分子を有するポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）フィルムにおいて測定するとき、可視光線または近紫外線の範囲、すなわち、380ないし800 nmの波長範囲において発光ピークを有し、0.60 e V 未満、好ましくは、0.50 e V 未満、より好ましくは、0.45 e V 未満、より一層好ましくは、0.43 e V 未満、またははなはだしくは、0.40 e V 未満の半値幅 (FWHM) を有する。

【0207】

当業者は、窒素ヘテロ環のアリールハライドとの芳香族求核置換反応に適した多様な構造を知っている。

20

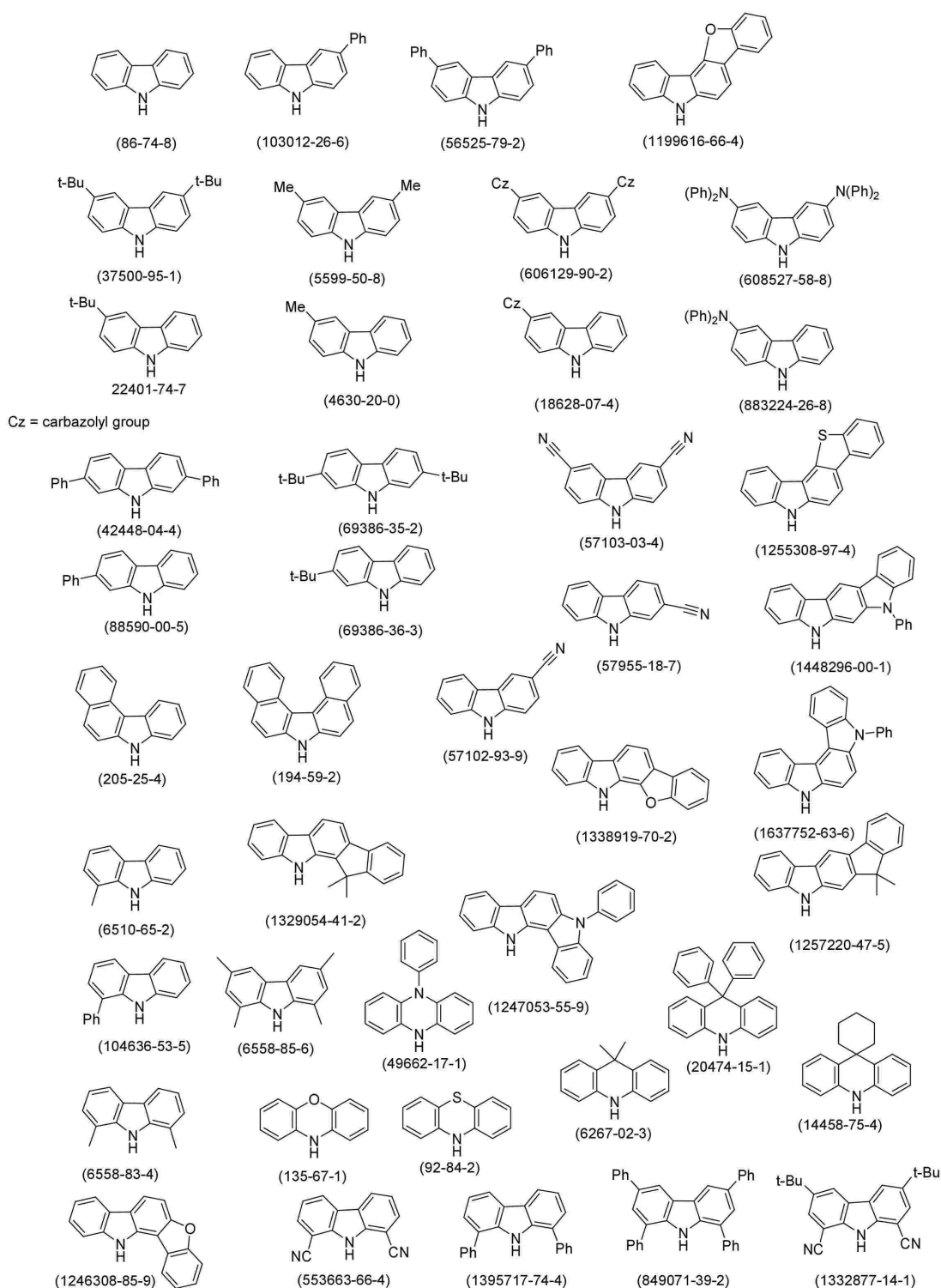
【0208】

以下、窒素ヘテロ環に係わる非制限的な例が羅列されている（CAS番号は、構造下の括弧内に表される）：

30

40

50



10

20

30

40

【0209】

本発明の更なる側面は、光電子部品または素子、好ましくは、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子の製造方法に係わるものである。

【0210】

本発明の更なる側面は、本発明による有機分子、または本発明による有機分子を含む組成物が使用される光電子素子の製造方法に係わるものである。

【0211】

光電子素子、特に少なくとも1つの本発明による分子を含むOLEDは、任意の手段の気相蒸着及び／または液状工程によっても製造される。

50

【0212】

OLEDの個々の層を形成するための公知の方法は、下記を含む：

- －昇華工程による蒸着、
- －有機気相蒸着工程による蒸着、
- －キャリアガス昇華工程による蒸着、
- －溶液処理またはプリント。

【0213】

本発明の更なる側面は、光電子素子の製造方法に係わるものであり、ここで、本発明による有機分子、または本発明による有機分子を含む組成物が使用され、特に、真空蒸着方法を使用して、または溶液から有機分子を処理する段階を含む。

10

【0214】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子、好ましくは、OLEDのような光電子素子を製造するのに使用される方法は、当業者に公知である。異なる層は、後続蒸着工程により、適切な基板上に、個々に連続して蒸着される。個々の層は、同一であるか、あるいは異なる蒸着方法を使用して蒸着されうる。

【0215】

該気相蒸着工程は、熱（共）蒸着、化学的気相蒸着及び物理的気相蒸着を含む。アクティブマトリックスOLEDディスプレイの場合、AMOLEDバックプレーンが基板として使用される。個々の層は、適切な溶媒を使用する溶液または分散液からも処理される。例えば、溶液蒸着工程には、スピンコーティング、ディップコーティング及びジェットプリンティングが含まれる。溶液処理は、選択的に、不活性雰囲気（例えば、窒素雰囲気）において遂行され、該溶媒は、選択的に、当業界に公知の手段により、完全にまたは部分的に除去される。

20

【0216】

好ましくは、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、1以上の層が、材料が 10^{-5} mbarと1 barとの間の圧力で適用されるOVPD（有機気相蒸着）工程またはキャリアガス昇華の助けによってコーティングされることを特徴とする。この工程の特別な場合は、材料がノズルを介して直接適用されて構造化されるOVJP（有機気相ジェットプリンティング）工程である。

【0217】

また、好ましくは、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、1以上の層が、例えば、スピンコーティングにより、あるいは、例えば、スクリーン印刷、フレキソグラフィック印刷、ノズル印刷またはオフセット印刷、しかし、特に好ましくは、LITI（光誘導熱画像、熱転写印刷）またはインクジェット印刷のような任意の所望の印刷工程により、溶液から生成されることを特徴とする。このためには、溶解性化合物が必要である。化合物の適切な置換を通じて、高い溶解度を達成することができる。

30

【0218】

例えば、1以上の層が溶液から適用され、1以上の追加層が気相蒸着によって適用されるハイブリッド工程も可能である。したがって、例えば、溶液から発光層を適用し、蒸着によって電子輸送層を適用することができる。

40

【0219】

それらの工程／方法は、一般的に当業者に知られており、当業者によって少なくとも1つの本発明による分子を含む光電子素子に適用可能である。

【0220】

更なる好ましい側面において、本発明は、下記段階を含む、光を発生させる方法、特に450ないし490 nmの波長を有する青色光を発生させる方法に係わるものである：

- (i) 本発明による有機分子を含む光電子素子を提供する段階、及び
- (ii) 前記素子に電流を印加する段階。

【0221】

他の側面において、本発明は、下記段階を含む、光を発生させる方法、特に520ない

50

し 540 nm の波長を有する緑色光を発生させる方法に係わるものである：

(i) 本発明による有機分子を含む光電子素子を提供する段階、及び

(ii) 前記素子に電流を印加する段階。

【0222】

光を発生させる光電子素子の核心要素は、一般的に、正極と負極との間に位置した少なくとも1つの発光層 (EML) である。光電子素子の正極と負極に電圧 (及び電流) を加えれば、正極と負極からそれぞれ正孔と電子が注入される。正孔輸送層 (HTL) は、一般的に、発光層 (EML) と正極との間に位置し、電子輸送層 (ETL) は、一般的に、発光層 (EML) と負極との間に位置する。異なる層が順次に配置される。その後、EML において、正孔と電子との再結合により、高いエネルギーの励起子が生成される。そのような励起状態 (例えば、S1 のような一重項状態及び／または T1 のような三重項状態) の底状態 S0 への減衰は、好ましくは、光発光を引き起こす。

10

【0223】

軌道エネルギー、励起状態エネルギー及び ΔE_{ST} の決定

軌道エネルギー及び励起状態エネルギーは、実験方法や量子化学方法、特に、密度関数理論計算を利用する計算方法を介して決定される。最高被占軌道エネルギー E_{HOMO} は、当業者に公知の方法によって、サイクリックボルタンメトリー測定から 0.1 eV の精度で決定される。

【0224】

最低空軌道エネルギー E_{LUMO} は、当業者に公知の方法によって、サイクリックボルタンメトリー測定から 0.1 eV の精度で決定される。 E_{LUMO} がサイクリックボルタンメトリー測定によって決定される場合、

20

$$E_{CV}^{LUMO}$$

で表される。代案としては、ここで、好ましくは、 E_{LUMO} は、 $E_{HOMO} + E_{gap}$ によって計算され、ここで、 E_{gap} は、室温 (すなわち、(約) 20 °C) で、一般的にポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) のそれぞれの材料のスピンコーティング膜から測定されたフォトルミネッセンス (PL) スペクトル (正常状態スペクトル) の開始から決定される。本発明による有機分子の場合、一般的に TADF 材料 E^B の場合及び燐光材料 P^B の場合、スピンコーティングされた PMMA フィルム内のそれぞれの材料の濃度は、他に言及しない限り、10 重量% である。本発明の分子の一部を形成せず、本発明の分子と異なり (すなわち、一般式 X で表されず)、本明細書に定義された TADF 材料 E^B ではないホスト材料 H^B に対し、PL スペクトルは、一般的にそれぞれのホスト材料 H^B のニットフィルムから測定される。本発明の分子と異なる (すなわち、一般式 X で表されず) 蛍光エミッタ F の場合、特に、それらが本発明の文脈における小さい FWHM エミッタ S^B である場合、PL スペクトルは、典型的に PMMA 内の 1~5%、好ましくは、2 重量% の F 濃度を有するそれぞれのエミッタ材料のスピンコーティング膜から測定される。

30

【0225】

吸収スペクトルは、室温 (すなわち、(約) 20 °C) で、一般的にポリ (メチルメタクリレート) (PMMA) のそれぞれの材料のスピンコーティング膜から測定される。本発明による有機分子の場合、一般的に TADF 材料 E^B の場合及び燐光材料 P^B の場合、スピンコーティングされた PMMA フィルム内のそれぞれの材料の濃度は、他に言及しない限り、10 重量% である。本発明の分子と異なり、本明細書に定義された TADF 材料 E^B ではないホスト材料 H^B に対し、吸収スペクトルは、典型的にそれぞれのホスト材料 H^B のニットフィルムから測定される。

40

【0226】

本発明の分子ではない蛍光エミッタ F の場合、特に、それらが本発明の文脈における小さい FWHM エミッタ S^B である場合、吸収スペクトルは、典型的に PMMA 内の 1~5

50

%、好ましくは、2重量%のF濃度を有するそれぞれのエミッタ材料のスピコーティング膜から測定される。代案としては、吸収スペクトルは、また、例えば、ジクロロメタンまたはトルエン内の各分子の溶液から測定され、ここで、溶液の濃度は、一般的に、最大吸光度が好ましくは0.1ないし0.5範囲になるように選択される。

【0227】

他に言及しない限り、第1励起三重項状態T1のエネルギーは、一般的に、ポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)のそれぞれの材料のスピコーティング膜から、77K(正常状態スペクトル)での燐光スペクトル開始(onset)から決定される。燐光材料P^Bのみに対し、燐光スペクトルは、室温(すなわち、(約)20℃)で測定される。本発明による有機分子の場合、一般的にTADF材料E^Bの場合及び燐光材料P^Bの場合、スピコーティングされたPMMAフィルム内のそれぞれの材料の濃度は、他に言及しない限り、10重量%である。本発明の分子と異なっており、本明細書に定義されたTADF材料E^Bではないホスト材料H^Bに対し、吸収スペクトルは、典型的にそれぞれのホスト材料H^Bのニットフィルムから測定される。本発明の分子ではない蛍光エミッタFの場合、特に、それらが本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bである場合、吸収スペクトルは、典型的にPMMA内の1~5%、好ましくは、2重量%のF濃度を有するそれぞれのエミッタ材料のスピコーティング膜から測定される。 ΔE_{ST} 値が小さいTADF材料E^Bの場合、項間交差及び逆項間交差の両方が低温でも発生しうる。結果として、77Kでの発光スペクトルは、S1及びT1状態の両方からの発光を含む。しかし、三重項エネルギーの寄与/価値が一般的に優れているものと見なされる。

【0228】

他に言及しない限り、第1励起一重項状態S1のエネルギーは、室温(すなわち、(約)20℃)で、蛍光スペクトル(正常状態スペクトル)の開始から決定され、典型的にポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)内のそれぞれの材料のスピコーティング膜から決定される。本発明による有機分子及び一般的にTADF材料E^Bの場合、スピコーティングされたPMMAフィルム内のそれぞれの材料の濃度は、他に言及しない限り、10重量%である。本発明の分子と異なっており、本明細書に定義されたTADF材料E^Bではないホスト材料H^Bに対し、吸収スペクトルは、典型的にそれぞれのホスト材料H^Bのニットフィルムから測定される。本発明の分子ではない蛍光エミッタFの場合、特に、それらが本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bである場合、吸収スペクトルは、典型的にPMMA内の1~5%、好ましくは、2重量%のF濃度を有するそれぞれのエミッタ材料のスピコーティング膜から測定される。しかし、効率的な項間交差を示す燐光材料P^Bの場合、室温発光(一般的に、エミッタの10重量%を有するPMMA内のP^Bのスピコーティング膜から測定される)は、(ほとんど)蛍光ではない燐光である。この場合、常温(すなわち、(約)20℃)で発光スペクトルの開始は、前述の第1励起三重項状態T1のエネルギーを決定するのに使用され、第1励起一重項状態S1のエネルギーを決定するのに使用されない。

【0229】

他に言及しない限り、第1(すなわち、最低)励起一重項状態S1と第1(すなわち、最低)励起三重項状態T1とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値は、第1励起一重項状態エネルギー及び第1励起三重項状態エネルギーを基準に決定され、それらは前述の通りである。

【0230】

実施例

一般合成方式I

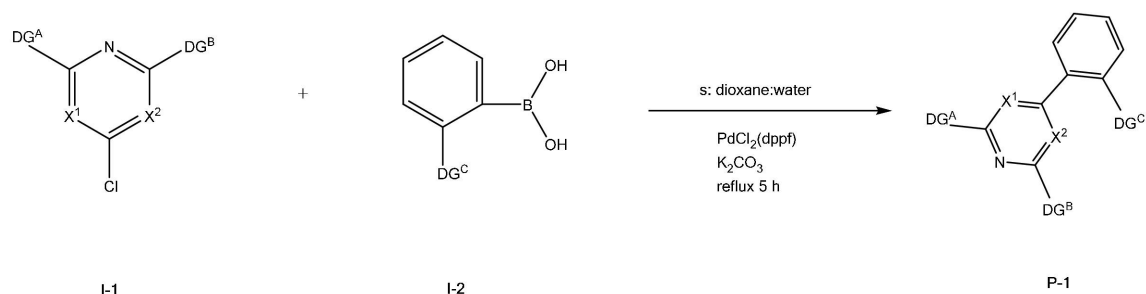
10

20

30

40

50



10

【0231】

AAV1: I-1 (1.0当量)、I-2 (1.5当量)、[1, 1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド(PdCl₂(dppf)、CAS番号: 72287-26-4、0.05当量)及び炭酸カリウム(CAS番号: 584-08-7、3.0当量)の懸濁液を脱水ジオキサン及び水において混合し、5時間還流撹拌した。室温に冷却した後、反応混合物を濾過し、水、エタノール(EtOH)及びn-ヘプタンで洗浄した。再結晶化またはカラムクロマトグラフィ後、P-1を固体として得る。

【0232】

特に、ドナー分子(DG)は、3, 6-置換されたカルバゾール(例えば、3, 6-ジメチルカルバゾール、3, 6-ジフェニルカルバゾール、3, 6-ジ-tert-ブチルカルバゾール)、2, 7-置換されたカルバゾール(例えば、2, 7-ジメチルカルバゾール、2, 7-ジフェニルカルバゾール、2, 7-ジ-tert-ブチルカルバゾール)、1, 8-置換されたカルバゾール(例えば、1, 8-ジメチルカルバゾール、1, 8-ジフェニルカルバゾール、1, 8-ジ-tert-ブチルカルバゾール)、1-置換されたカルバゾール(例えば、1-メチルカルバゾール、1-フェニルカルバゾール、1-tert-ブチルカルバゾール)、2-置換されたカルバゾール(例えば、2-メチルカルバゾール、2-フェニルカルバゾール、2-tert-ブチルカルバゾール)、または3-置換されたカルバゾール(例えば、3-メチルカルバゾール、3-フェニルカルバゾール、3-tert-ブチルカルバゾール)である。DG^A、DG^B及びDG^Cは、それぞれの場合に、互いに独立して選択され、同一であっても、異なってもよい。

20

30

【0233】

例示的には、ハロゲン置換されたカルバゾール、特に3-ブロモカルバゾールがDGとして使用可能である。後続反応において、ボロン酸エステル作用基またはボロン酸作用基が、DGを通じて導入された1つ以上のハロゲン置換基の位置に例示的に導入され、例えば、ビス(ピナコラート)ジボロン(CAS番号: 73183-34-3)との反応を通じて、対応するカルバゾール-3-イルボロン酸エステルまたはカルバゾール-3-イルボロン酸を生成することができる。続いて、1つ以上の置換基R^aが、対応するハロゲン化反応物R^a-Hal、好ましくは、R^a-Cl及びR^a-Brとのカップリング反応を通じて、ボロン酸エステル基またはボロン酸基の代わりに導入されうる。

40

【0234】

あるいは、1つ以上の置換基R^aは、置換基R^aのボロン酸[R^a-B(OH)₂]または対応するボロン酸エステルとの反応を通じて、DGを通じて導入された1つ以上のハロゲン置換基の位置に導入されうる。

【0235】

サイクリックボルタンメトリー

サイクリックボルタモグラムは、ジクロロメタン、または適する溶媒、及び適する支持電解質(例えば、0.1 mol/Lのテトラブチルアンモニウムヘキサフルオロホスフェート)において、各化合物(例えば、本発明による有機分子、一般的なTADF材料E^B、一般的なホスト材料H^B、一般的な燐光材料P^B、及び一般的な蛍光エミッタF)の濃

50

度が $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$ である溶液で測定される。該測定は、3 電極アセンブリ（作用電極及び相対電極：Ptワイヤ、基準電極：Ptワイヤ）を使用し、窒素雰囲気において、室温（すなわち、（約） 20°C ）で行い、内部標準として、 $\text{FeCp}_2/\text{FeCp}_2^+$ を使用して補正する。

【0236】

内部標準としてフェロセンを使用して、当該目的のために使用されたフェロセンの文献値と共に、HOMO及びLUMOデータを校正した。

【0237】

密度関数理論計算

分子構造は、BP86関数及びRI（Resolution of Identity）アプローチを使用して最適化された。励起エネルギーは、（BP86）最適化された構造を使用して、TD-DFT（Time-Dependent DFT）方法でもって計算される。軌道エネルギー及び励起状態エネルギーは、B3LYP関数により計算される。数値積分のために、Def2-SVP基本セット及びm4-gridが使用される。Turbomoleプログラムパッケージは、全ての計算に使用される。

【0238】

光物理的測定

試料前処理：スピンコーティング

他に言及しない限り、成分の光物理的測定は、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内のそれぞれの成分（例えば、本発明による有機分子、一般的なTADF材料E^B、一般的なホスト材料H^B、一般的な燐光材料P^B、及び一般的な蛍光エミッタF）のスピンコーティング膜から行われる。他に言及しない限り、そのようなスピンコーティングされたPMMAフィルムの成分濃度は、以下の通りである：

- ・本発明による全ての有機分子：PMMAにおいて10重量%
- ・本明細書に定義されたようなTADF材料E^B：PMMAにおいて10重量%
- ・本明細書に定義されたような燐光材料P^B：PMMAにおいて10重量%
- ・本発明による有機分子の一部を形成しない、本明細書に定義されたような蛍光エミッタF、特に、それらが本発明の文脈における小さいFWHMエミッタS^Bである場合：PMMAにおいて1～5重量%、好ましくは、2重量%。

【0239】

しかし、本発明による有機分子ではなく、本明細書に定義されたようなTADF材料E^Bまたは燐光材料P^Bまたは蛍光エミッタFではないホスト材料H^Bの場合、H^Bのスピンコーティングされたニットフィルムが、PMMAフィルムの代わりに使用される。

【0240】

装置：Spin150、SPS euro

試料濃度は 1.0 mg/mL であり、典型的に適切な溶媒であるトルエン／DCMに溶解される。

【0241】

プログラム：2000U／分で7～30秒。コーティング後、フィルムを 70°C で1分間乾燥させた。

【0242】

吸収測定

Thermo Scientific Evolution 201紫外可視分光光度計は、 270 nm 以上の波長領域においてサンプルの最大吸収波長を決定するのに使用される。当該波長は、フォトルミネッセンススペクトル及び量子収率の測定のための励起波長として使用される。

【0243】

フォトルミネッセンス分光法

フォトルミネッセンス分光法の測定のために、Horibaの蛍光分光計「Fluoromax 4 P」が使用される。

【0244】

10

20

30

40

50

燐光エミッタからの正常状態蛍光スペクトル及び燐光スペクトルは、室温で測定される。基本作動方式は、次の通りである：連続光源（キセノンアークランプ）を、適切な波長帯域を選択する励起単色計に照らす。この単色励起光は、発光を放出する試料に向かう。試料がスピンコーティングまたは蒸着されたフィルムである場合、測定する間、それをキュベットに入れ、窒素雰囲気気を維持する。発光は、測定中に変更される波長帯域を選択し、光子計数検出器（R 9 2 8 P 光電子増倍管）に照らす二番目の放出単色計に向かう。検出器からの信号は、データを処理及び表示可能なシステムコントローラとホストコンピュータに報告される。

【 0 2 4 5 】

T A D F エミッタからの燐光スペクトルは、7 7 K で測定される。基本作動方式は、次の通りである：励起には、パルス光源（パルスキセノンランプ）が使用され、2 5 H z で作動する。ゲート及び遅延生成器を含む制御モジュールは、励起と感知との間のタイミングを制御するのに使用される。一般的なデータ収集シーケンスは、制御モジュールが感知するパルスランプのフラッシュから始まる。光が励起単色計に入って分散される。単色計からの単色光は、サンプルを励起させる。サンプルは、測定する間、液体窒素で充填されたガラスデュワー容器に置かれる。サンプルからの光放出は、放出単色計を通じて、光子計数光電子増倍管—チューブ検出器に伝達される。制御モジュールは、検出器から信号をインターセプトし、既定のサンプリング時間（サンプルウィンドウ）の長さの間、フラッシュ（初期遅延）以後のゲーティングされた部分の信号のみを収集する。ゲーティング前後に到着する全ての信号は無視される。初期遅延は、0 ないし 1 0 0 0 0 m s で変更可能であり、初期蛍光放出及びランプ減衰の影響を排除するように設定され、好ましくは、5 0 m s である。サンプルウィンドウは、0 . 0 1 ないし 1 0 0 0 0 m s で変更可能であり、燐光放出を収集するように設定され、好ましくは、4 0 m s である。

【 0 2 4 6 】

μ s 範囲及び n s 範囲の時間分解（過渡）フォトルミネッセンス（P L）分光法（F S 5）

時間分解 P L 測定は、Edinburgh Instruments の F S 5 蛍光分光計で行われる。H O R I B A 設定における測定と比べてより良好な集光は、最適化された信号対雑音比を可能にし、特に、遅延蛍光特性の過渡 P L 測定において F S 5 システムが有利である。連続光源として、分光計は、1 5 0 W キセノンアークランプを含み、特定波長は、Czerny-Turner 単色計によって選択される。しかし、標準測定は、その代わりに、放出波長が 3 1 0 n m である外部 V P L E D 可変パルス L E D を使用して行われる。試料の発光は、敏感な R 9 2 8 P 光電子増倍管（photomultiplier tube: PMT）に向かい、2 0 0 n m ないし 8 7 0 n m のスペクトル範囲において最大 2 5 % のピーク量子効率を有する単一光子を検出することができる。検出器は、3 0 0 c p s （秒当たりカウント）未満のダークカウントを提供する温度安定化された P M T である。

【 0 2 4 7 】

データ収集は、よく確立された時間相関単一光子計数（T C S P C）技術を使用して行われる。F S 5 には、放出単色計、検出器ユニットとしての温度安定化された光電子増倍管、及び励起ソースとしてのパルス型 L E D （3 1 0 n m 中央波長、9 1 0 p s パルス幅）が装着されている。サンプルがスピンコーティングまたは蒸着されたフィルムである場合、測定する間、それをキュベットに入れ、窒素雰囲気気を維持する。

【 0 2 4 8 】

測定された過渡フォトルミネッセンス信号の平均減衰寿命

$\bar{\tau}$

を決定するために、データを、次の n の指数関数の和にフィットさせる：

【 0 2 4 9 】

【数 3】

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

ここで、 n は、1 ないし 3 である。特定寿命 τ_i をそれに相応する振幅 A_i によって加重することにより、遅延蛍光寿命 τ_{DF} が次のように決定される：

【0250】

【数4】

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

10

【0251】

時間相関単一光子計数（TCSPC）

励起状態分布ダイナミクスは、放出単色計、検出器ユニットとして温度安定化された光電子増倍管、及び励起ソースとしてパルス型LED（310nm中央波長、910psパルス幅）が装着されたEdinburgh Instruments FS5分光蛍光計を使用して決定される。サンプルをキュベットに入れ、測定する間に窒素でフラッシングする。

【0252】

全体の減衰ダイナミクス

20

時間及び信号強度で複数の次数（order）の大きさにわたった全体の励起状態分布減衰ダイナミクスは、4つの時間ウィンドウ（200ns、1μs、20μs及び>80μsのさらに長い測定期間）でTCSPC測定を行って達成される。測定された時間曲線は、その後、次のような方式によって処理される：

- 1．励起及び差し引き（subtracting）前の平均信号レベルを決定し、バックグラウンド補正が適用される。
- 2．主信号の初期上昇を基準として取り、時間軸が整列される。
- 3．重畳された測定時間領域を使用し、曲線が互いに対してスケールされる。
- 4．処理された曲線が1つの曲線に併合される。

【0253】

30

データ分析

データ分析は即時蛍光（PF）（一般的に、ナノ秒程度）及び遅延蛍光（DF）（一般的に、マイクロ秒程度）減衰の単一指数及び二重指数のフィッティングを使用して行われる。遅延蛍光と即時蛍光との割合（ n 値）は、それぞれのフォトルミネッセンス減衰を経時的に積分して計算される：

【0254】

【数5】

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

40

【0255】

平均励起状態寿命は、PF及びDFのそれぞれの寄与度で加重された即時蛍光及び遅延蛍光の減衰時間の平均を取って計算される。

【0256】

フォトルミネッセンス量子収率測定

フォトルミネッセンス量子収率（PLQY）測定のために、Absolute PL量子収率測定C9920-03Gシステム（浜松ホトニクス）が使用されている。量子収率及びCIE座標は、ソフトウェアU6039-05バージョン3.6.0を使用して決定された。

50

【0257】

最大発光は、nmで示され、量子収率 Φ は、%で示され、CIE座標は、x，y値で示される。

【0258】

PLQYは、次のプロトコルを使用して決定される：

【0259】

1) 品質保証：エタノール中におけるアントラセン（既知濃度）を基準に使用する。

【0260】

2) 励起波長：有機分子の最大吸収が決定され、該波長を使用し、分子が励起される。

【0261】

3) 測定

量子収率は、窒素雰囲気において、前述のスピンコーティング膜から室温（すなわち、（約）20℃）で測定される。PLQYは、次の方程式を用いて計算される：

【0262】

【数6】

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{\text{光子, 発光}}}{n_{\text{光子, 吸収}}} = \frac{\int_{\lambda_3}^{\lambda_4} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{試料}}(\lambda) - I_{\text{基準}}(\lambda)] d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{\lambda}{hc} [I_{\text{基準}}(\lambda) - I_{\text{試料}}(\lambda)] d\lambda}$$

ここで、 $n_{\text{光子}}$ は、光子数を示し、 I は、強度を示す。表示「基準」は、発光サンプルがない基準測定を示し、表示「試料」は、発光サンプルがある測定を示す。波長 λ_1 及び λ_2 は、励起光領域を表示し、波長 λ_3 及び λ_4 は、サンプル発光領域を表示する。

【0263】

光電子素子の製造及び特性化

本発明による有機分子を含む光電子素子、特にOLED素子は、真空蒸着方法によっても製造される。層が1以上の化合物を含む場合、1以上の化合物の重量百分率は%で示される。総重量百分率値は100%であるので、値が指定されていない場合、該化合物の分率は、指定された値と、100%との差と同じである。

【0264】

完全に最適化されていないOLEDは、標準方法を使用してエレクトロルミネセンススペクトルを測定し、光ダイオードによって検出された光及び電流を使用して計算された、強度及び電流に依存する外部量子効率(%)を測定して特性化される。OLED素子の寿命は、一定電流密度で動作する間、輝度の変化から抽出される。LT50値は、測定輝度が、初期輝度の50%に低減した時間に該当し、同様に、LT80は、測定輝度が、初期輝度の80%に低減した時点に該当し、LT97は、測定輝度が、初期輝度の97%に低減した時点に該当する。

【0265】

加速寿命測定が行われる（例：増大した電流密度適用）。例えば、500 cd/m²において、LT80値は、次の式を使用して決定される：

【0266】

【数7】

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

ここで、 L_0 は、印加された電流密度における初期輝度を示す。

【0267】

値は、複数のピクセル（一般的に、2～8個）の平均に該当し、当該ピクセル間の標準

10

20

30

40

50

偏差が提供される。図面は、1つのOLEDピクセルに対するデータシリーズを示す。

【0268】

HPLC-MS

有機化合物の純度は、質量分析法（MS）と結合された高圧液体クロマトグラフィ（HPLC）を使用して評価されうる。そのようなHPLC-MS分析は、単一四重極子MS検出器が装着されたAgilentのHPLC1260 infinity HPLC-MSシステムを使用して行われる。例えば、一般的なHPLC方法は、次の通りである：Agilent（Poroshell 120EC-C18、 3.0×100 mm、 $2.7 \mu\text{m}$ HPLCカラム）から、逆相カラム $3.0 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ 、粒子サイズ $2.7 \mu\text{m}$ がHPLCに使用される。HPLC-MS測定は、 45°C で行われ、一般的な勾配は下記表1に示された通りである：

10

【0269】

【表1】

流速[mL/分]	時間[分]	A[%]	B[%]	C[%]
2.1	0.0	40	50	10
2.1	1.00	40	50	10
2.1	3.50	10	65	25
2.1	6.00	10	40	50
2.1	8.00	10	10	80
2.1	11.50	10	10	80
2.1	11.51	40	50	10
2.1	12.50	40	50	10

20

【0270】

また、下記表2に示された溶媒混合物（全ての溶媒は、 0.1% （V/V）のギ酸を含む）を使用した：

【0271】

【表2】

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

30

【0272】

0.5 mg/mL 濃度の分析物溶液から、注入体積 $2 \mu\text{L}$ が測定のために使用される。

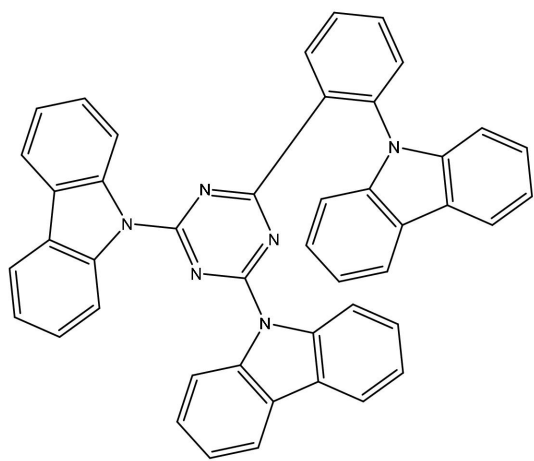
【0273】

プローブのイオン化は、APCI（大気圧化学イオン化）ソースにおいて陽（APCI⁺）イオン化モードまたは陰（APCI⁻）イオン化モードを使用して行われるか、あるいはAPPI（大気圧光イオン化）ソースを使用して行われる。

40

【0274】

実施例1



10

【0275】

実施例1を下記によって合成した：

AAV1（64%収率）、ここで、I-1及びI-2は、それぞれ9，9'-（6-クロロ-1，3，5-トリアジン-2，4-ジイル）ビス（9H-カルバゾール）（CAS番号：877615-05-9）及び（2-カルバゾール-9-イルフェニル）ポロン酸（CAS番号：1189047-28-6）を示す。

20

【0276】

MS（HPLC-MS）、m/z（滞留時間）：653（5.49分）。

【0277】

図1は、室温（すなわち、約20℃）で、実施例1（PMMA内の10重量%）の発光スペクトルを示す。最大発光（λ_{max}）は468nmである。フォトルミネッセンス量子収率（PLQY）は72%であり、半値幅（FWHM）は0.48eVであり、発光寿命は36.4μsである。結果のCIE_x座標は0.17で決定され、CIE_y座標は0.23で決定される。

【0278】

実施例D1

30

実施例1は、表3に示された下記層構造で作製されたOLED D1でテストされた：

【0279】

【表3】

層#	厚さ	D1
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	NBPhen
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(79.5%)： 実施例1(20%) MAT3(0.5%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

40

【0280】

OLED D1は、 1000 cd/m^2 において21.0%の外部量子効率（EQE）を示した。7.40Vにおいて20.0nmのFWHMを有する最大発光が470nmである。該当するCIE x値は0.128であり、CIE y値は0.151である。 1200 cd/m^2 において6.9時間のLT95値が決定された。

【0281】

実施例D2

実施例1は、表4に示された下記層構造で作製されたOLED D2でテストされた：

【0282】

【表4】

層#	厚さ	D2
9	100nm	Al
8	2nm	Liq
7	30nm	NBPhen
6	50nm	MAT2(80%) 実施例1(20%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

10

20

【0283】

OLED D2は、 1000 cd/m^2 において6.87%の外部量子効率（EQE）を示した。6.17Vにおいて82.0nmのFWHMを有する最大発光が479nmである。該当するCIE x値は0.168であり、CIE y値は0.273である。 1200 cd/m^2 において5.1時間のLT95値が決定された。

30

【0284】

実施例D3

実施例1は、表5に示された下記層構造で作製されたOLED D3でテストされた：

【0285】

【表5】

層#	厚さ	D3
9	100nm	Al
8	2nm	Liq
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(90%) 実施例1(10%)
5	10nm	MAT2
4	10nm	TCTA
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

40

50

【0286】

OLED D3は、 1000 cd/m^2 において3.4%の外部量子効率（EQE）を示した。6.64Vにおいて94.0nmのFWHMを有する最大発光が468nmである。該当するCIE x値は0.158であり、CIE y値は0.189である。 1200 cd/m^2 において1.0時間のLT95値が決定された。

【0287】

実施例D4

実施例1は、表6に示された下記層構造で作製されたOLED D4でテストされた：

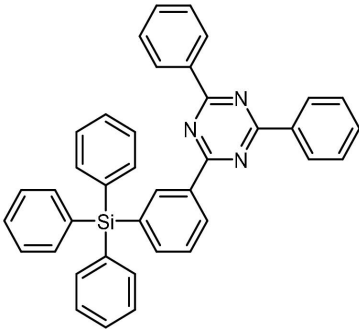
【0288】

【表6】

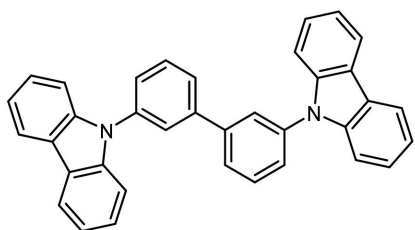
層#	厚さ	D4
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	MAT4(50%) Liq(50%)
7	10nm	MAT1
6	50nm	MAT2(64.5%)： 実施例1(20%) MAT5(15%) MAT3(0.5%)
5	5nm	MAT6
4	10nm	MAT7
3	45nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

【0289】

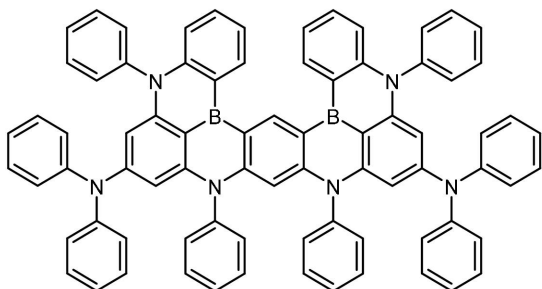
OLED D4は、 1000 cd/m^2 において27.8%の外部量子効率（EQE）を示した。5.66Vにおいて20.0nmのFWHMを有する最大発光が472nmである。該当するCIE x値は0.123であり、CIE y値は0.150である。 1200 cd/m^2 において35.0時間のLT95値が決定された。



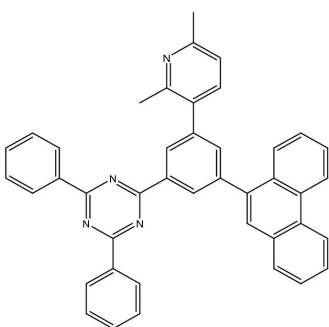
MAT1

**M A T 2**

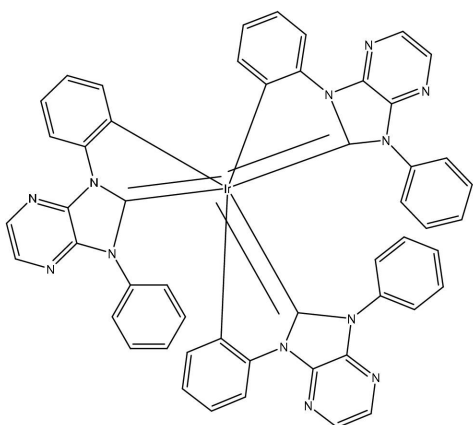
10

**M A T 3**

20

**M A T 4**

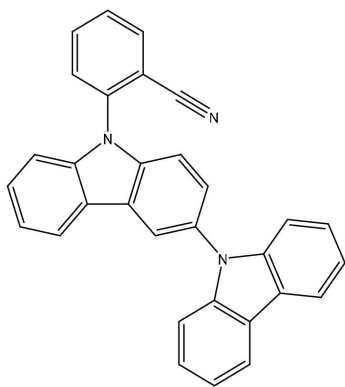
30



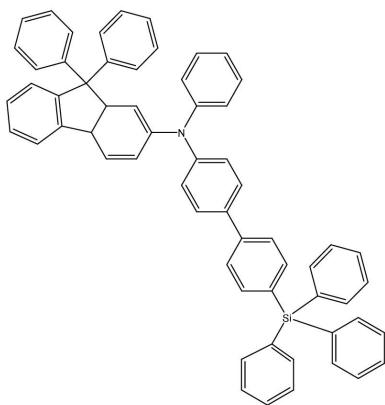
40

M A T 5

50



10

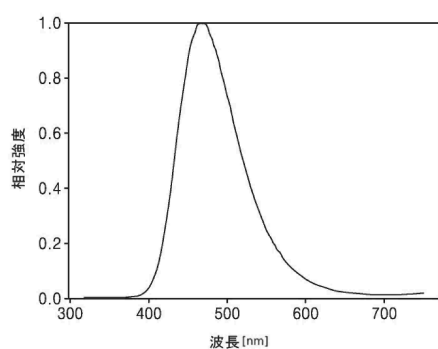
M A T 6

20

M A T 7

【図面】

【図 1】



30

40

50

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2023/000867
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C07D 403/14(2006.01); H10K 85/60(2023.01); H10K 50/11(2023.01); C09K 11/06(2006.01) 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) C07D 403/14(2006.01); C07D 209/86(2006.01); C07D 413/14(2006.01); C07F 15/00(2006.01); C09K 11/02(2006.01); C09K 11/06(2006.01); H01L 27/32(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01) Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models Japanese utility models and applications for utility models Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS(KIPO internal), STN(Registry, CAplus) & Keywords: OLED, organic light emitting diode, heteroaryl, phenyl		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2020-0168812 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 28 May 2020 (2020-05-28) claims 14, 19; page 108	1-2
X	WO 2021-095729 A1 (TOYOBO CO., LTD.) 20 May 2021 (2021-05-20) abstract; page 64; compound T2	1-2
A	US 2017-0012207 A1 (SEMICONDUCTOR ENERGY LABORATORY CO., LTD.) 12 January 2017 (2017-01-12) the whole document	1-2
A	US 2019-0058144 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 21 February 2019 (2019-02-21) the whole document	1-2
A	WO 2019-076965 A1 (CYNORA GMBH) 25 April 2019 (2019-04-25) the whole document	1-2
☐ 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 "D" document cited by the applicant in the international application "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 April 2023		Date of mailing of the international search report 19 April 2023
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office 189 Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon 35208, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer HEO, Joo Hyung Telephone No. +82-42-481-5373

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2022)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2023/000867

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☒ Claims Nos.: **8, 12, 13**
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:
Claims 8, 12 and 13 are regarded to be unclear because they refer to claims which do not comply with PCT Rule 6.4(a).
3. ☒ Claims Nos.: **3-7, 9-11, 14, 15**
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2023/000867

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
US	2020-0168812	A1	28 May 2020	CN	111233836	A	05 June 2020
				CN	111233868	A	05 June 2020
				CN	112794814	A	14 May 2021
				CN	112802982	A	14 May 2021
				CN	112802983	A	14 May 2021
				CN	113497210	A	12 October 2021
				EP	3823055	A1	19 May 2021
				JP	2020-090486	A	11 June 2020
				JP	2021-082801	A	27 May 2021
				KR	10-2020-0064932	A	08 June 2020
				KR	10-2020-0066228	A	09 June 2020
				KR	10-2021-0059590	A	25 May 2021
				KR	10-2021-0059652	A	25 May 2021
				KR	10-2021-0059658	A	25 May 2021
				KR	10-2021-0124922	A	15 October 2021
				US	11515489	B2	29 November 2022
				US	2020-0168811	A1	28 May 2020
				US	2020-0251670	A1	06 August 2020
				US	2021-0057654	A1	25 February 2021
				US	2021-0151692	A1	20 May 2021
				US	2021-0210700	A1	08 July 2021
				US	2021-0305520	A1	30 September 2021
WO	2021-095729	A1	20 May 2021	JP	2021-075491	A	20 May 2021
				WO	2021-095729	A9	17 June 2021
US	2017-0012207	A1	12 January 2017	CN	107710444	A	16 February 2018
				CN	113889586	A	04 January 2022
				DE	112016003078	T5	26 April 2018
				JP	2017-022378	A	26 January 2017
				JP	2019-117962	A	18 July 2019
				JP	2020-129702	A	27 August 2020
				JP	2021-072452	A	06 May 2021
				JP	2021-077898	A	20 May 2021
				JP	2021-097247	A	24 June 2021
				JP	2022-082793	A	02 June 2022
				JP	6524030	B2	05 June 2019
				JP	6816323	B2	20 January 2021
				JP	6858806	B2	14 April 2021
				JP	7058318	B2	21 April 2022
				JP	7058354	B2	21 April 2022
				KR	10-2018-0030081	A	21 March 2018
				TW	201711242	A	16 March 2017
				TW	202127700	A	16 July 2021
				TW	I718162	B	11 February 2021
				WO	2017-006222	A1	12 January 2017
US	2019-0058144	A1	21 February 2019	CN	109326733	A	12 February 2019
				CN	109326733	B	06 September 2022
				EP	3439063	A1	06 February 2019
				KR	10-2019-0013105	A	11 February 2019
				KR	10-2395782	B1	09 May 2022

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (July 2022)

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT Information on patent family members				International application No. PCT/KR2023/000867			
Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
WO 2019-076965 A1			25 April 2019	EP 3697782 A1			26 August 2020
				EP 3697782 B1			01 September 2021

フロントページの続き

(51)国際特許分類	F I	テーマコード (参考)
<i>H 1 0 K 71/16 (2023.01)</i>	H 1 0 K 71/16	1 6 4
<i>H 1 0 K 71/12 (2023.01)</i>	H 1 0 K 71/12	
<i>H 1 0 K 59/10 (2023.01)</i>	H 1 0 K 59/10	
<i>H 1 0 K 101/10 (2023.01)</i>	H 1 0 K 101:10	
<i>H 1 0 K 101/20 (2023.01)</i>	H 1 0 K 101:20	

,MC,ME,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,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
ドイツ連邦共和国, エッゲンシュタインーレオポルトスハーフェン 7 6 3 4 4, ナーゴルトシュ
トラッセ 7 ゲー

F ターム (参考) 3K107 AA01 AA03 BB01 BB02 CC04 CC07 CC22 DD53 DD59 DD66
DD67 DD68 DD70 DD71 DD74 DD78 FF13 FF14 GG04 GG06