(19)日本国特許庁(JP)　(12)公表特許公報(A)　(11)公表番号
特表2025-505544
(P2025-505544A)
(43)公表日　令和7年2月28日(2025.2.28)

(51)国際特許分類			FI			テーマコード（参考）
C07F	*5/02*	*(2006.01)*	C07F	5/02	ＤＣＳＰ	３Ｋ１０７
C09K	*11/06*	*(2006.01)*	C09K	11/06	６６０	４Ｈ０４８
H10K	*85/60*	*(2023.01)*	H10K	85/60		
H10K	*85/30*	*(2023.01)*	H10K	85/30		
H10K	*50/12*	*(2023.01)*	H10K	50/12		

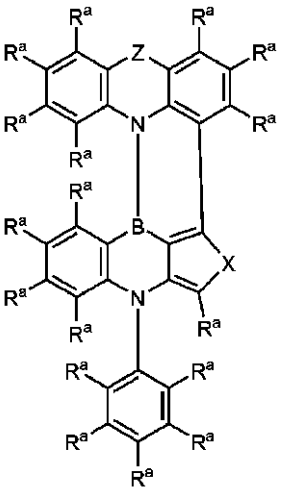
審査請求　未請求　予備審査請求　未請求　（全98頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2024-545054(P2024-545054)
(86)(22)出願日　令和5年2月3日(2023.2.3)
(85)翻訳文提出日　令和6年7月29日(2024.7.29)
(86)国際出願番号　PCT/KR2023/001612
(87)国際公開番号　WO2023/149756
(87)国際公開日　令和5年8月10日(2023.8.10)
(31)優先権主張番号　22155149.2
(32)優先日　令和4年2月4日(2022.2.4)
(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)
(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
最終頁に続く

(71)出願人　512187343
三星ディスプレイ株式會社
Ｓａｍｓｕｎｇ Ｄｉｓｐｌａｙ Ｃｏ．，Ｌｔｄ．
大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路１１，Ｓａｍｓｕｎｇ－ｒｏ，Ｇｉｈｅｕｎｇ－ｇｕ，Ｙｏｎｇｉｎ－ｓｉ，Ｇｙｅｏｎｇｇｉ－ｄｏ，Ｒｅｐｕｂｌｉｃ ｏｆ Ｋｏｒｅａ
(74)代理人　100121382
弁理士　山下 託嗣
(72)発明者　デュック，セバスチアン
ドイツ連邦共和国，ハイデルベルク ６９１１５，プファッフェングルンダーテラッセ １
最終頁に続く

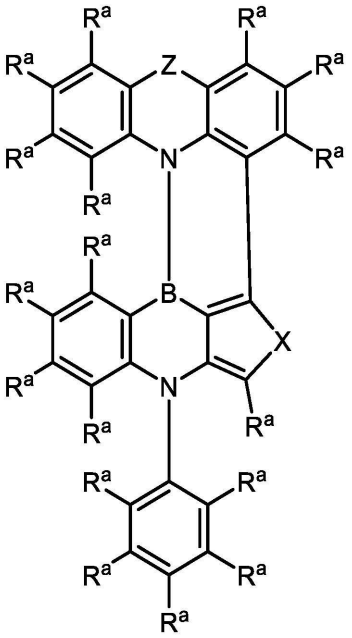
(54)【発明の名称】　光電子素子用有機分子

(57)【要約】
本発明は、光電子素子に使用するための有機分子に関する。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。式中、ＸはＯまたはＳであり、Ｚは、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^a、R^3及びR^4は、独立して、水素、重水素、$N(R^5)_2$、OR^5、$Si(R^5)_3$、$B(OR^5)_2$、$B(R^5)_2$、OSO_2R^5、CF_3、ＣＮ、Ｆ、Ｂｒ、Ｉ、C_1－C_{40}アルキル、C_1－C_{40}アルコキシ、C_1－C_{40}チオアルコキシ、C_2－C_{40}アルケニル、C_2－C_{40}アルキニル、C_6－C_{60}アリール、及びC_2－C_{57}ヘテロアリールからなる群から選択される。
［化学式Ｉ］



Formula I

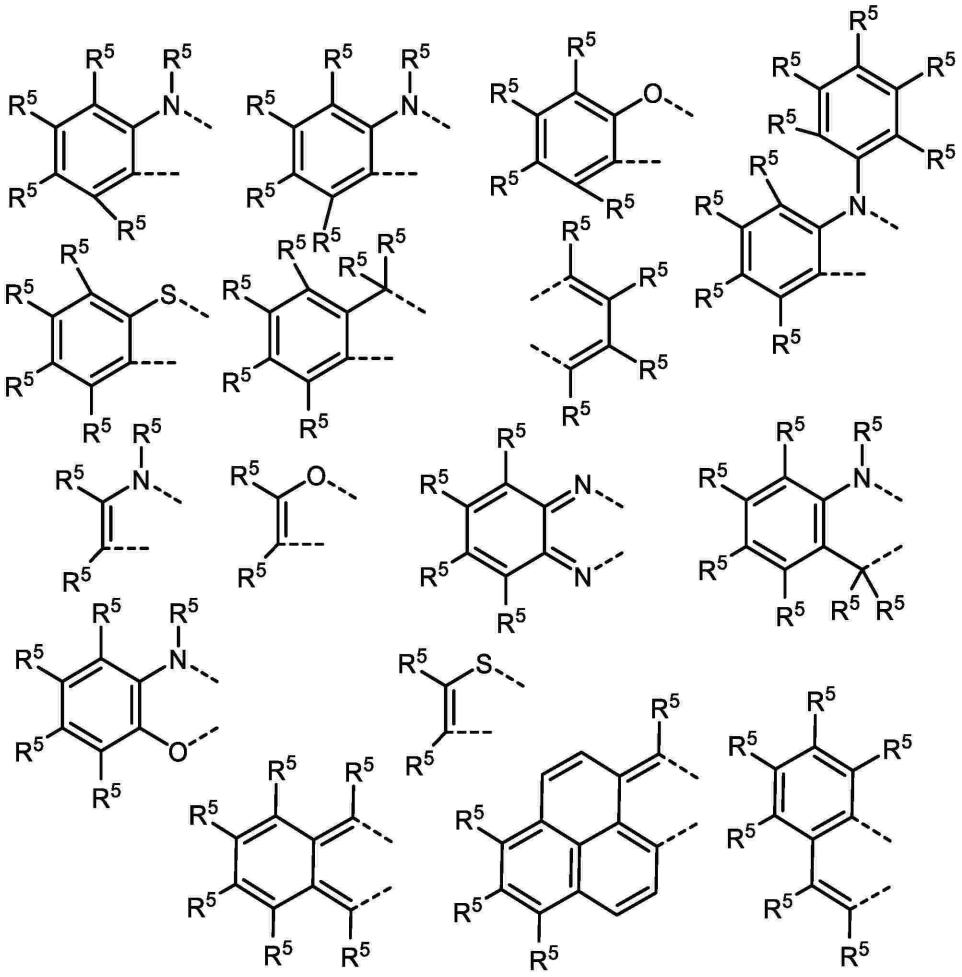
【特許請求の範囲】
【請求項１】
化学式Ｉの構造を含む、有機分子：
［化学式Ｉ］



ここで、
ＸはＯまたはＳであり、
Ｚは、それぞれの場合に、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^a、R^3及びR^4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、$N(R^5)_2$、OR^5、$Si(R^5)_3$、$B(OR^5)_2$、$B(R^5)_2$、OSO_2R^5、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^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≡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、
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≡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≡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、
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≡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≡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_2－C_{57}ヘテロアリール、
R^5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、$N(R^6)_2$、OR^6、$Si(R^6)_3$、$B(OR^6)_2$、$B(R^6)_2$、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≡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≡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≡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≡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≡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_2－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（Ph＝フェニル）、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、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、
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、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、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、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_2-C_{17}ヘテロアリール、
$N(C_6-C_{18}アリール)_2$、
$N(C_2-C_{17}ヘテロアリール)_2$、及び
Ｎ（C_2-C_{17}ヘテロアリール）（C_6-C_{18}アリール）、
ここで、任意の置換基R^a、R^3、R^4、R^5及びR^6は、独立して、１以上の置換基R^a、R^3、R^4、R^5及び／またはR^6と共に、単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系を選択的に形成する。
【請求項２】
前記Ｚは直接結合である、請求項１に記載の有機分子。
【請求項３】
前記ＸはＳである、請求項１または２に記載の有機分子。
【請求項４】
前記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、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：
水素、重水素、Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリジニル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリミジニル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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カルバゾリル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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トリアジニル、及び
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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$N(Ph)_2$、
ここで、選択的に、２つ以上の隣接した置換基R^aは、下記からなる群から選択された環系のための付着点を形成し、



ここで、それぞれの破線は、前記表した環系のうち１つを２つの隣接した置換基Ｒ^{a}の位置に連結し、前記表した群の環系が化学式Ｉで表される構造に縮合されるようにする直接結合を示す。

【請求項５】

前記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、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：

水素、重水素、Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリジニル、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリミジニル、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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カルバゾリル、

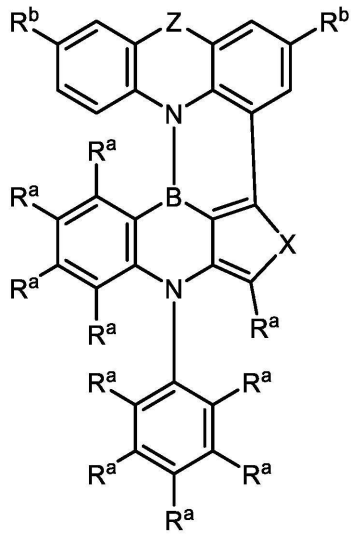
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたトリアジニル、及び

Ｎ（Ｐｈ）$_{2}$。

【請求項６】

化学式ＩＩの構造を含む、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：

［化学式ＩＩ］

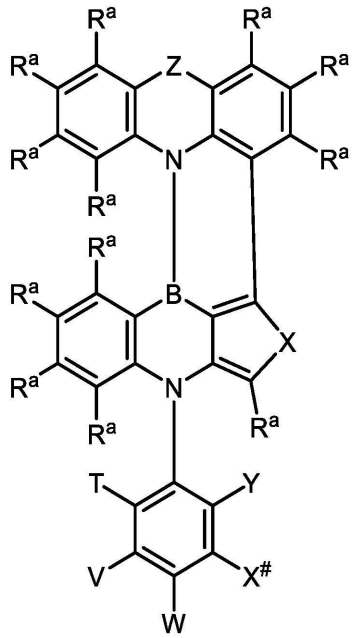


ここで、R^bは、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択される：
水素、重水素、$N(R^5)_2$、OR^5、$Si(R^5)_3$、$B(OR^5)_2$、OSO_2R^5、CF_3、CN、F、Br、I、
C_1－C_{40}アルキル、
これは、選択的に１以上の置換基R^5で置換され、
ここで、１以上の隣接しないCH_2基は、選択的に$R^5C=CR^5$、C≡C、$Si(R^5)_2$、$Ge(R^5)_2$、$Sn(R^5)_2$、C＝O、C＝S、C＝Se、$C=NR^5$、$P(=O)(R^5)$、SO、SO_2、NR^5、O、SまたはCONR^5で置換され、
C_1－C_{40}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、
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≡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≡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、
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≡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≡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_2－C_{57}ヘテロアリール。

【請求項７】
前記R^b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、請求項６に記載の有機分子：
水素、重水素、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリジニル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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カルバゾリル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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トリアジニル、及び
$N(Ph)_2$。

【請求項８】
化学式ＩＩＩの構造を含む、請求項１ないし７のうちいずれか１項に記載の有機分子：
［化学式ＩＩＩ］

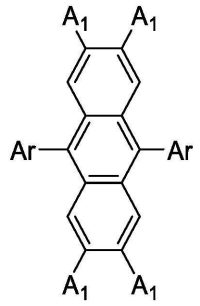


ここで、Ｔ、Ｖ、Ｗ、$X^{\#}$及びＹそれぞれは、独立して、下記からなる群から選択される：
水素、
Ｍｅ、
^{i}Ｐｒ、
^{t}Ｂｕ、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたＰｈ。

【請求項９】
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８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１０】
０．１～３０重量％、または０．８～１５重量％、特に１．５～５重量％の前記有機分子を含む、請求項９に記載の組成物。

【請求項１１】
前記ホスト材料は、化学式４の構造を含む、請求項９または１０に記載の組成物：
［化学式４］



ここで、
それぞれのＡｒは、互いに独立して、下記からなる群から選択され、
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ６－Ｃ６０アリール、及び
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ５７ヘテロアリール、
それぞれのＡ１は、互いに独立して、下記からなる群から選択される：
水素、
重水素、
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ６－Ｃ６０アリール、
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ５７ヘテロアリール、及び
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキル。

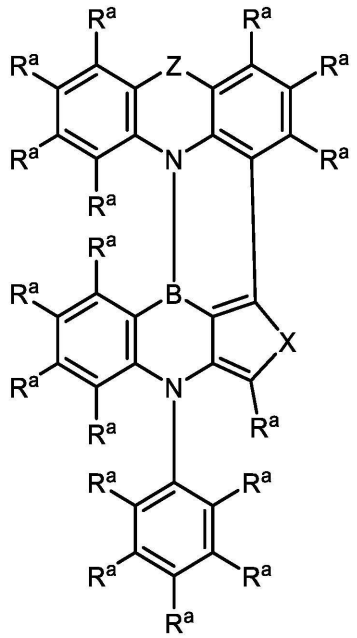
【請求項１２】
ＴＡＤＦ材料及び燐光材料からなる群から選択された材料を含む、請求項９または１０に記載の組成物。

【請求項１３】
特に発光エミッタとしての請求項１ないし８のうちいずれか１項に記載の有機分子、または請求項９ないし１２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１４】
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１３に記載の光電子素子：
・有機ダイオード、特に有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、
・発光電気化学電池、
・ＯＬＥＤセンサ、
・有機太陽電池、
・有機トランジスタ、特に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１５】
－基板、
－アノード、
－カソード、及び
－発光層を含み、
前記アノードまたは前記カソードは、前記基板上に配置され、

前記発光層は、前記アノードと前記カソードとの間に配置され、前記有機分子または前記組成物を含む、請求項１３または１４に記載の光電子素子。
【請求項１６】
（ｉ）請求項１３ないし１５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。
【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。
【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、光電子素子に使用することが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。
【発明の効果】
【０００５】
本発明によれば、前記有機分子は、青色または空色のスペクトル範囲において最大発光を示す。前記有機分子は、特に４２０ｎｍないし５２０ｎｍ、好ましくは、４４０ｎｍないし４９５ｎｍ、より好ましくは、４５０ｎｍないし４７０ｎｍ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、特に５０％以上である。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、素子のより高い効率、または発光の半値幅（ＦＷＨＭ）で表されるより高い色純度をもたらす。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する。ホスト材料、特に、三重項・三重項消滅（triplet-triplet annihilation）ホスト材料と共に本発明の有機分子を含む発光層を有するＯＬＥＤは、高い安定性を有する。
【発明を実施するための形態】
【０００６】
本発明による有機発光分子は、化学式Ｉの構造を含むか、あるいはそれからなる：
【０００７】
［化学式Ｉ］



ここで、
XはOまたはSであり、
Zは、それぞれの場合に、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^a、R^3及びR^4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、$N(R^5)_2$、OR^5、$Si(R^5)_3$、$B(OR^5)_2$、$B(R^5)_2$、OSO_2R^5、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^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≡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、
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≡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≡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、
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≡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≡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$_{2}$－Ｃ$_{57}$ヘテロアリール、
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}）$_{2}$、Ｂ（Ｒ^{6}）$_{2}$、ＯＳＯ$_{2}$Ｒ^{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^{6}Ｃ＝ＣＲ^{6}、Ｃ≡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^{6}Ｃ＝ＣＲ^{6}、Ｃ≡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^{6}Ｃ＝ＣＲ^{6}、Ｃ≡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^{6}Ｃ＝ＣＲ^{6}、Ｃ≡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^{6}Ｃ＝ＣＲ^{6}、Ｃ≡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$_{2}$－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（Ｐｈ＝フェニル）、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、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、
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、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、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、独立して、重水素、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$またはＦで置換され、

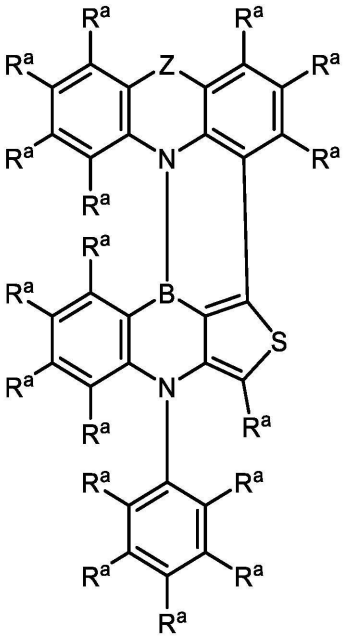
選択的に１以上のＣ１－Ｃ５アルキル置換基で置換されたＣ６－Ｃ１８アリール、
選択的に１以上のＣ１－Ｃ５アルキル置換基で置換されたＣ２－Ｃ１７ヘテロアリール、
Ｎ（Ｃ６－Ｃ１８アリール）２、
Ｎ（Ｃ２－Ｃ１７ヘテロアリール）２、及び
Ｎ（Ｃ２－Ｃ１７ヘテロアリール）（Ｃ６－Ｃ１８アリール）、
ここで、任意の置換基Ｒ^{a}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、独立して、１以上の置換基Ｒ^{a}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及び／またはＲ^{6}と共に、単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系を選択的に形成する。

【０００８】

特定実施形態において、本発明による前記有機分子は、化学式Ｉ－１またはＩ－２の構造を含むか、あるいはそれからなる：

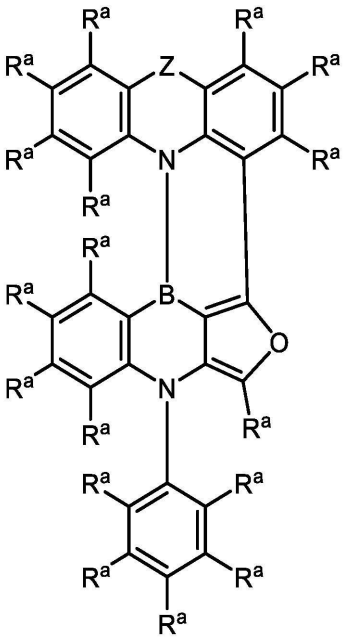
【０００９】

［化学式Ｉ－１］



【００１０】

［化学式Ｉ－２］



。

【００１１】

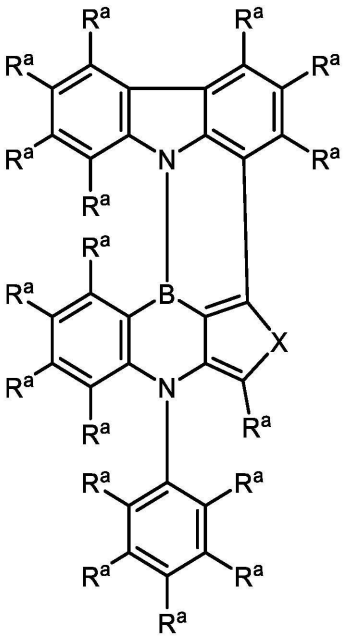
好ましい実施形態において、前記有機分子は、化学式Ｉ－１の構造を含むか、あるいはそれからなる。

【００１２】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式Ｉａ、化学式Ｉｂ、化学式Ｉｃ、化学式Ｉｄ、化学式Ｉｅ、化学式Ｉｆ、化学式Ｉｇ、化学式Ｉｈ、化学式Ｉｉ、化学式Ｉｊ、または化学式Ｉｋの構造を含むか、あるいはそれからなる：

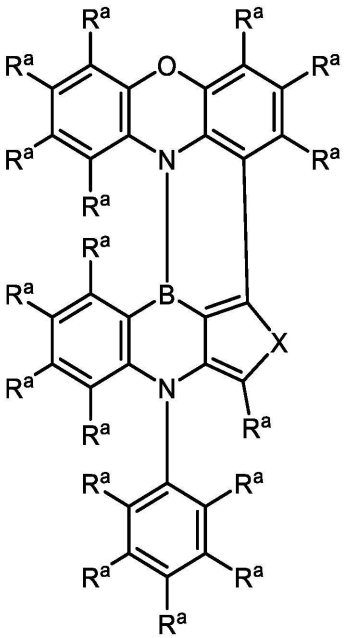
【００１３】

［化学式Ｉａ］



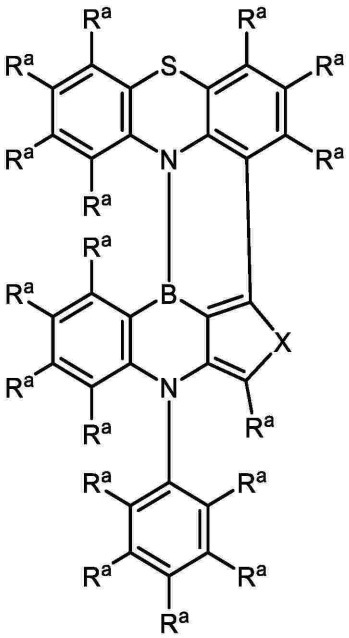
【００１４】

［化学式Ｉｂ］

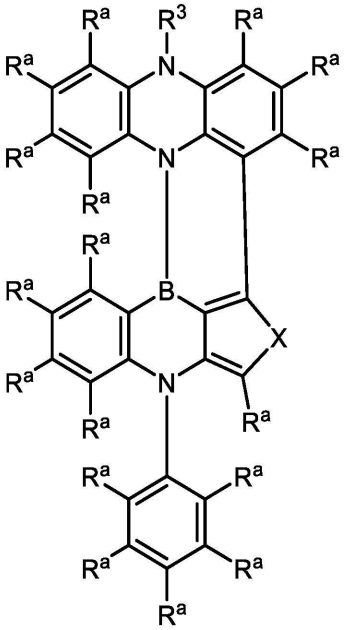


【００１５】

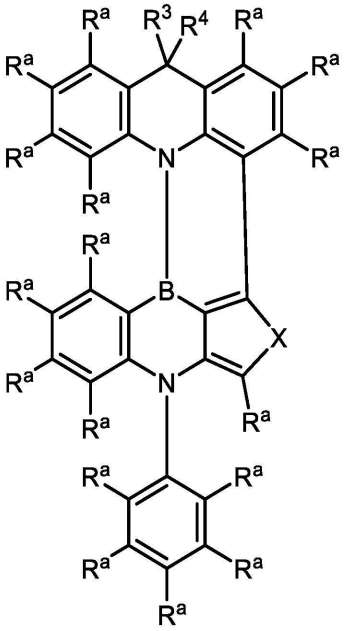
［化学式Ｉｃ］



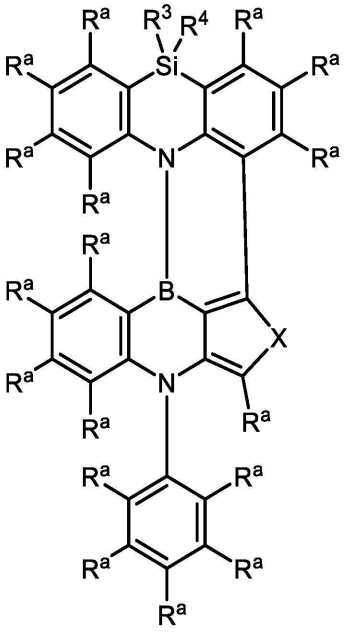
【００１６】
［化学式Ｉｄ］



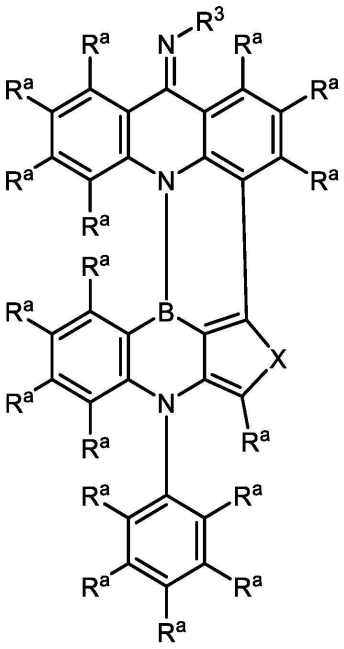
【００１７】
［化学式Ｉｅ］



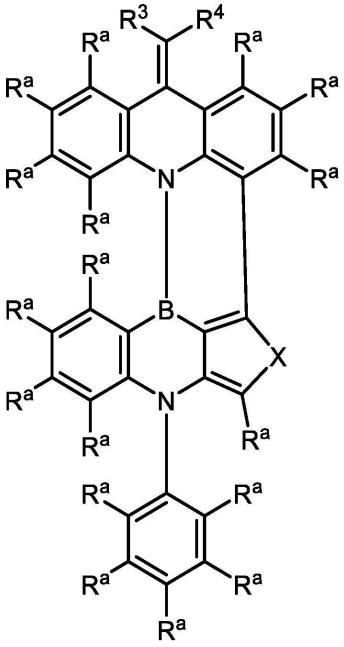
【００１８】
［化学式Ｉｆ］



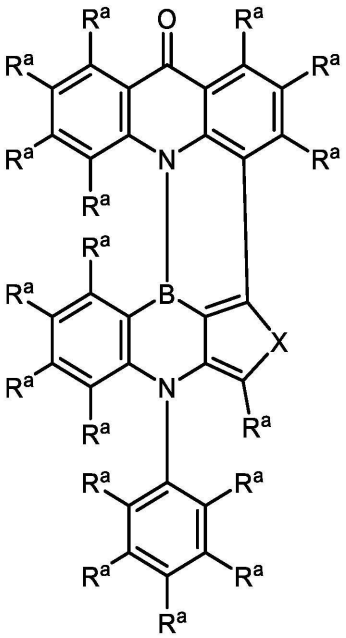
【００１９】
［化学式Ｉｇ］



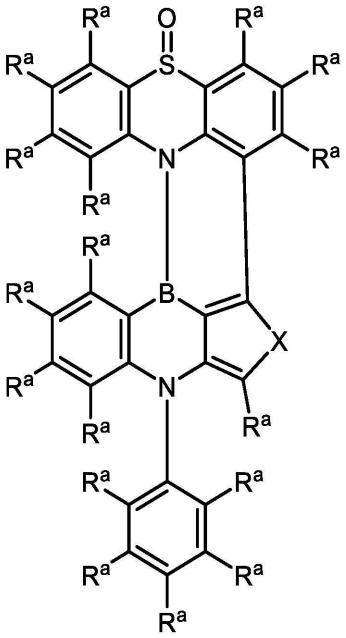
【００２０】
［化学式Ｉｈ］



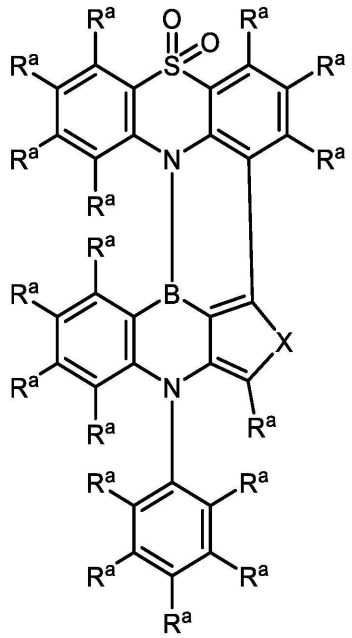
【００２１】
［化学式Ｉｉ］



【００２２】
［化学式Ｉｊ］



【００２３】
［化学式Ｉｋ］



。

【００２４】

好ましい実施形態において、前記有機分子は、化学式Ｉａの構造を含むか、あるいはそれからなる。

【００２５】

本発明の一実施形態において、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、

水素、

重水素、

Ｍｅ、

^{i}Ｐｒ、

^{t}Ｂｕ、

ＣＮ、

CF_3、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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ピリジニル、

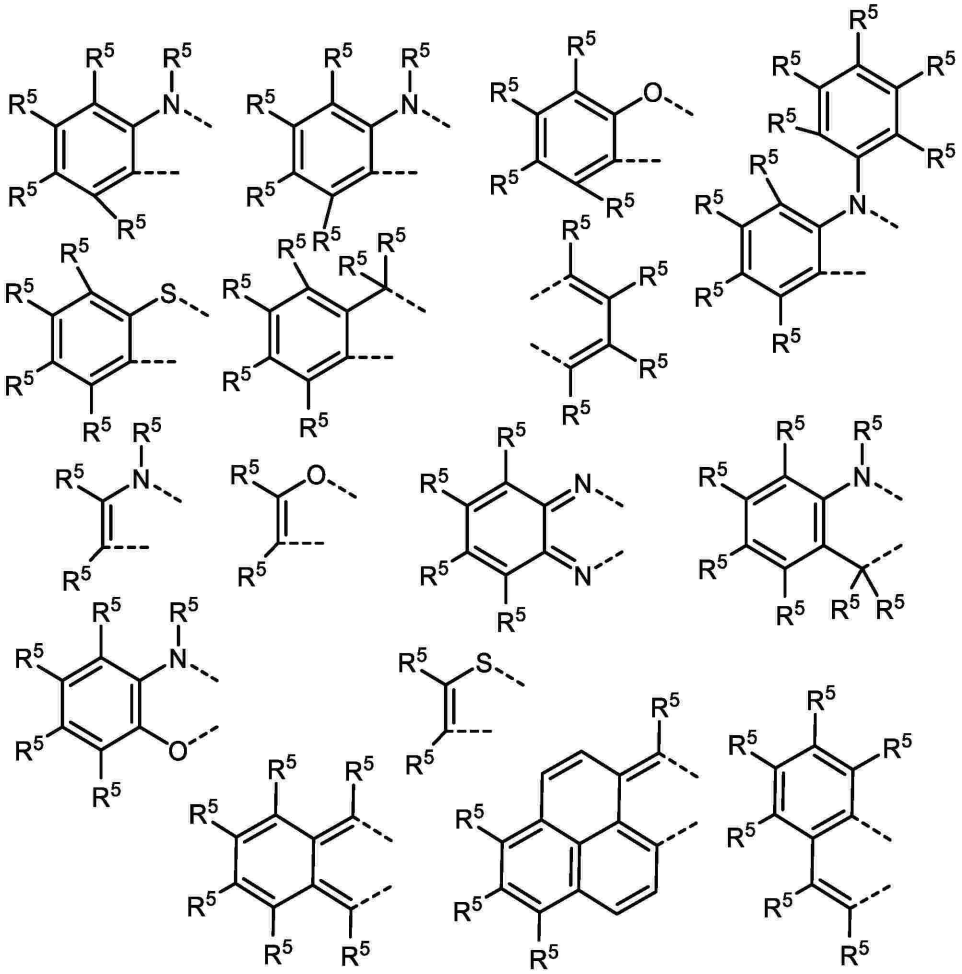
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたピリミジニル、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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カルバゾリル、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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トリアジニル、及び

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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Ｎ（Ｐｈ）$_2$、

ここで、２つ以上の隣接した置換基Ｒ^{a}は、下記からなる群から選択された環系のための付着点を形成することができ、



ここで、それぞれの破線は、前記表した環系のうち１つを２つの隣接した置換基Ｒ^{a}の位置に連結し、前記表した群の環系が化学式Ｉで表される構造に縮合されるようにする直接結合を示す。

【００２６】

一実施形態において、少なくとも１つの単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系が、１以上の更なる置換基Ｒ^{a}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及び／またはＲ^{6}と共に、置換基Ｒ^{a}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}によって形成される。

【００２７】

一実施形態において、Ｒ^{6}は、それぞれの場合に、互いに独立して、水素（Ｈ）、メチル（Ｍｅ）、ｉ－プロピル（ＣＨ（ＣＨ$_{3}$）$_{2}$）（^{i}Ｐｒ）、ｔ－ブチル（^{t}Ｂｕ）、フェニル（Ｐｈ）、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$及びジフェニルアミン（ＮＰｈ$_{2}$）からなる群から選択される。

【００２８】

一実施形態において、Ｒ^{5}は、それぞれの場合に、互いに独立して、水素（Ｈ）、メチル（Ｍｅ）、ｉ－プロピル（ＣＨ（ＣＨ$_{3}$）$_{2}$）（^{i}Ｐｒ）、ｔ－ブチル（^{t}Ｂｕ）、フェニル（Ｐｈ）、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$及びジフェニルアミン（ＮＰｈ$_{2}$）からなる群から選択される。

【００２９】

本発明の一実施形態において、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、重水素、Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$、

Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、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、

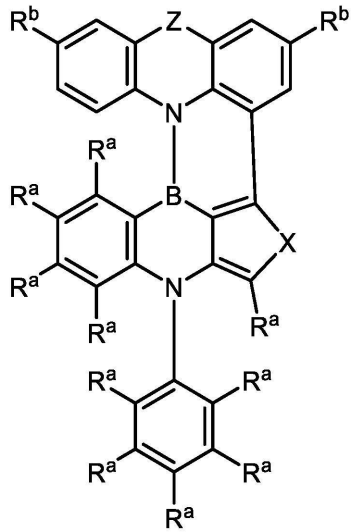
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたピリジニル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたピリミジニル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、CF_3及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたトリアジニル、及び
$N(Ph)_2$。

【００３０】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式ＩＩの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【００３１】

［化学式ＩＩ］



ここで、R^b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：
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、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≡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、
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≡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≡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、

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≡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≡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_2－C_{57}ヘテロアリール。

【００３２】

一実施形態において、R^b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、重水素、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、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、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、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ピリジニル、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、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カルバゾリル、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、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トリアジニル、及び
$N(Ph)_2$。

【００３３】

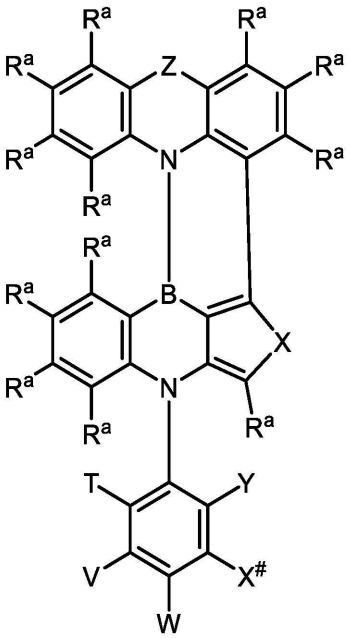
一実施形態において、R^bは、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：
重水素、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3及びPhからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたPh、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3及びPhからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたピリジニル、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3及びPhからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、
Me、^{i}Pr、^{t}Bu、CN、CF_3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トリアジニル、及び
$N(Ph)_2$。

【００３４】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式ＩＩＩの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【００３５】

［化学式ＩＩＩ］



ここで、Ｔ、Ｖ、Ｗ、Ｘ＃及びＹそれぞれは、独立して、下記からなる群から選択される：

水素、

Ｍｅ、

^{i}Ｐｒ、

^{t}Ｂｕ、

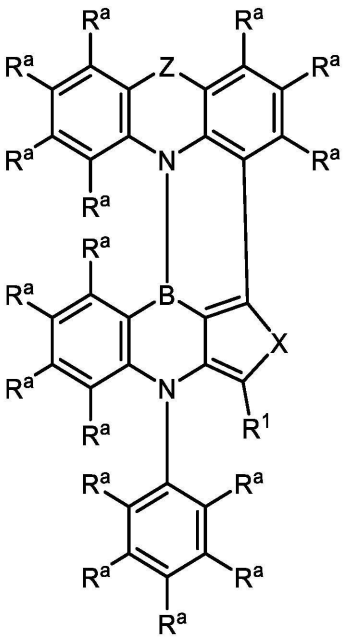
Ｍｅ、^{i}Ｐｒ、^{t}Ｂｕ、ＣＮ、ＣＦ$_{3}$及びＰｈからなる群から互いに独立して選択される１以上の置換基で選択的に置換されたＰｈ。

【００３６】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式ＩＶの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【００３７】

［化学式ＩＶ］



ここで、Ｒ^{1}は、水素、Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$アルキル、及び１以上のＣ$_{1}$－Ｃ$_{6}$アルキル置換基

で選択的に置換されるＣ６－Ｃ１２アリールからなる群から選択される。

【００３８】

一実施形態において、少なくとも３つ（すなわち、３、４、５または超過）の置換基Ｒａは水素ではない。

【００３９】

一実施形態において、少なくとも３つの置換基Ｒａは、Ｃ１－Ｃ６アルキル、及び１以上のＣ１－Ｃ６アルキル置換基で選択的に置換されるＣ６－Ｃ１２アリールからなる群から選択される。

【００４０】

好ましい実施形態において、少なくとも４つの置換基Ｒａは水素ではない。

【００４１】

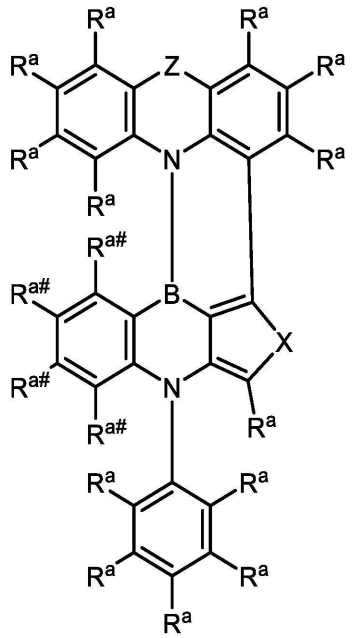
好ましい実施形態において、少なくとも４つの置換基Ｒａは、Ｃ１－Ｃ６アルキル、及び１以上のＣ１－Ｃ６アルキル置換基で選択的に置換されるＣ６－Ｃ１２アリールからなる群から選択される。

【００４２】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式Ｖの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【００４３】

［化学式Ｖ］



ここで、Ｒａ＃は、Ｒａから選択され、ここで、少なくとも１つの単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系が２つの隣接した置換基Ｒａ＃によって形成される。

【００４４】

定義

ここで、用語「層」は、広範囲な平面の幾何学的構造を有するボディを意味する。光電子素子が複数の層で構成されるということは、当業者の常識の一部を形成する。

【００４５】

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。

【００４６】
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（下記参照）。エミッタ材料が一般的に「発光性ドーパント」材料であるということを、当業者であれば、知っており、ドーパント材料（発光性如何にかかわらず）が、通常（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ということは、当業者であれば、理解することができる。本明細書において、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光電子素子、好ましくは、ＯＬＥＤに含まれるとき、一般的にH^Bと称される。
【００４７】
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。
【００４８】
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。
【００４９】
本発明の文脈において、用語「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。
【００５０】
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。
【００５１】
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はいうまでもなく、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はいうまでもなく、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。
【００５２】
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、異なっていてもよく、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はいうまでもなく、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。
【００５３】
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。
【００５４】
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。本明細書において、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、脂肪族環状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。

【００５５】

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、異なっていてもよく、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）を記述するのにも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。

【００５６】

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に含まれる場合、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。

【００５７】

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、「C_6-C_{60}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、「C_1-C_{40}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。

【００５８】

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。

【００５９】

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、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン；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。

【００６０】

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ル置換基を意味する。

【００６１】

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。

【００６２】

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。

【００６３】

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（さらに多くの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、二回ではなく一回とカウントされる。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。
【００６４】
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。
【００６５】
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（^{n}Ｐｒ）、ｉ－プロピル（^{i}Ｐｒ）、シクロプロピル、ｎ－ブチル（^{n}Ｂｕ）、ｉ－ブチル（^{i}Ｂｕ）、ｓ－ブチル（^{s}Ｂｕ）、ｔ－ブチル（^{t}Ｂｕ）、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－ビシクロ［２，２，２］オクチル、２－ビシクロ［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。
【００６６】
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。
【００６７】
本明細書におい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。
【００６８】
本明細書におい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。
【００６９】
本明細書におい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。

【００７０】
本明細書において使用されているように、用語「チオアルコキシ」は、直鎖状、分枝状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。
【００７１】
本明細書において使用されているように、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。
【００７２】
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。
【００７３】
また、本明細書において「Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{60}$アリール」または「Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{40}$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、「Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{60}$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、「Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{40}$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。
【００７４】
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質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、置換基として、用語「ターフェニル」は、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部位を示す。
【００７５】
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。
【００７６】
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。したがって、これを達成することができる多くの周知の方法と一部レビュー論文がある。
【００７７】
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０．４ｅＶ未満と決定されれば、同

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（ＰＬＱＹ）の比較は、ＰＬＱＹ値の決定が同一反応条件（室温、１０％ ＰＭＭＡフィルムにおける測定）で行われた場合にのみ有効である。同様に、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必要がある。

【００７８】

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

本発明の更なる側面は、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に係わるものである。

【００７９】

一実施形態において、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（ＯＬＥＤ）、
・発光電気化学電池、
・ＯＬＥＤ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。

【００８０】

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。

【００８１】

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光電子素子は、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電気化学電池（ＬＥＣ）、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。

【００８２】

より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光電子素子は、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）である。

【００８３】

一実施形態において、少なくとも１つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記層構造を有するＯＬＥＤである：

１．基板
２．アノード層Ａ
３．正孔注入層（ＨＩＬ）
４．正孔輸送層（ＨＴＬ）
５．電子阻止層（ＥＢＬ）
６．発光層（放出層とも称される）（ＥＭＬ）
７．正孔阻止層（ＨＢＬ）
８．電子輸送層（ＥＴＬ）
９．電子注入層（ＥＩＬ）
１０．カソード層Ｃ

ここで、該ＯＬＥＤは、アノード層Ａ、カソード層Ｃ及びＥＭＬ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ＯＬＥＤは、前述のところで定義された各層類型のうち１層以上の層を含むものであってもよい。

【００８４】

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。

【００８５】

一実施形態において、少なくとも１つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記の逆積み層（inverted layer）構造を有するＯＬＥＤである：

１．基板
２．カソード層Ｃ
３．電子注入層（ＥＩＬ）
４．電子輸送層（ＥＴＬ）
５．正孔阻止層（ＨＢＬ）
６．発光層（放出層とも称される）（ＥＭＬ）
７．電子阻止層（ＥＢＬ）
８．正孔輸送層（ＨＴＬ）
９．正孔注入層（ＨＩＬ）
１０．アノード層Ａ

ここで、該ＯＬＥＤ（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ＥＭＬ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ＯＬＥＤは、前述のところで定義された各層類型のうち１層以上の層を含むものであってもよい。

【００８６】

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。

【００８７】

一実施形態において、少なくとも１つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、積層構造を有することができるＯＬＥＤである。前記構造においては、ＯＬＥＤ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ＯＬＥＤによって生成され、特に、白色光は、青色ＯＬＥＤ、緑色ＯＬＥＤ及び赤色ＯＬＥＤを積層して生成される。また、積層構造を示すＯＬＥＤは、選択的に電荷生成層（ＣＧＬ）を含んでもよく、それは、一般的に、２つのＯＬＥＤ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ＣＧＬ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。

【００８８】

一実施形態において、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ＯＬＥＤである。特に、いわゆるタンデムＯＬＥＤ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ＯＬＥＤ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。

【００８９】

一実施形態において、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、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。また、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（下記参照）。

【００９０】

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、０．５重量％ないし８０重量％、特に０．５重量％ないし１０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、前記有機分子の割合は１００重量％である。

【００９１】

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、当業者の常識である。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。これは、下記に列挙された全ての類型の層が、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。同一類型の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類型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。

【００９２】

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ス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一つは（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。

【００９３】

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、$(In_2O_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$）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、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ェン：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ェン（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。

【００９４】

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（F_4－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が使用されうる。

【００９５】

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－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。

【００９６】

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、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、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。

【００９７】

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、本明細書の後項でさらに詳細に説明する（以下参照）。

【００９８】

発光層（ＥＭＬ）に隣接し、電子輸送層（ＥＴＬ）が位置しうる。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）（Alq_3）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキシド（ＴＳＰＯ１）、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（Ｌｉｑ）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。

【００９９】

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）（$Ａｌｑ_3$）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキシド（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’－スピロビフルオレン－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。

【０１００】

電子輸送層（ＥＴＬ）に隣接し、カソード層Ｃが位置しうる。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、あるいはそれから構成される。

【０１０１】

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）、$Ｌｉ_2Ｏ$、$ＢａＦ_2$、ＭｇＯ及び／またはＮａＦを含むものであってもよい。

【０１０２】

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。

【０１０３】

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。

【０１０４】

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、＞６２０～８００ｎｍ範囲で最大発光を有する。

【０１０５】

深青色エミッタは、好ましくは、４７５ｎｍ未満、より好ましくは、４７０ｎｍ未満、より一層好ましくは、４６５ｎｍ未満、またははなはだしくは、４６０ｎｍ未満の最大発光を有することができる。これは、一般的に、４２０ｎｍ超過、好ましくは、４３０ｎｍ

超過、より好ましくは、４４０ｎｍ超過、またははなはだしくは、４５０ｎｍ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、４２０ないし５００ｎｍ、好ましくは、４３０ないし４９０ｎｍ、より好ましくは、４４０ないし４８０ｎｍ、最も好ましくは、４５０ないし４７０ｎｍにおいて最大発光を示し、一般的に、ポリ（メチルメタクリレート）（ＰＭＭＡ）、ｍＣＢＰ内の１～５重量％、好ましくは、２重量％の本発明による有機分子でスピンコーティングされた膜、あるいは代案としては、有機溶媒、好ましくは、ＤＣＭまたはトルエン内の０．００１ｍｇ／ｍＬの本発明による有機分子から、室温（すなわち、（約）２０℃）で測定される。

【０１０６】

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（ＣＩＥｘ＝０．１３１及びＣＩＥｙ＝０．０４６）のＣＩＥｘ（＝０．１３１）及びＣＩＥｙ（＝０．０４６）の色座標に近いＣＩＥｘ及びＣＩＥｙ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ＣＩＥｘ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ＣＩＥｙ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。

【０１０７】

さらに他の実施形態は、１０００ｃｄ／ｍ^{2}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、４２０ｎｍないし５００ｎｍ、好ましくは、４３０ｎｍないし４９０ｎｍ、より好ましくは、４４０ｎｍないし４８０ｎｍ、最も好ましくは、４５０ｎｍないし４７０ｎｍの最大発光を示し、及び／または、５００ｃｄ／ｍ^{2}において、１００ｈ超過、好ましくは、２００ｈ超過、より好ましくは、４００ｈ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。

【０１０８】

緑色エミッタ材料は、好ましくは、５００ｎｍないし５６０ｎｍ、より好ましくは、５１０ｎｍないし５５０ｎｍ、より一層好ましくは、５２０ｎｍないし５４０ｎｍの最大発光を有することができる。

【０１０９】

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、０．３０ｅＶ未満、好ましくは、０．２５ｅＶ未満、より好ましくは、０．２０ｅＶ未満、より一層好ましくは、０．１ｅＶ未満、または０．１７ｅＶ未満の、主発光ピークのＦＷＨＭを有する光を放出する。

【０１１０】

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。

【０１１１】

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、当業者の一般知識の一部を形成する。

【０１１２】

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。

【０１１３】

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。

【０１１４】

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。

【０１１５】

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。

【０１１６】

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、これは、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光する。

【０１１７】

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。

【０１１８】

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。

【０１１９】

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）。

【０１２０】

（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が維持される。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（２００ｎｓ、１μｓ、２０μｓ及び＞８０μｓ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）。

【０１２１】

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（μｓ）範囲にある、及び

（ｉｉ）２つの時間領域で発光スペクトルの形態が一致する。

【０１２２】

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。

【０１２３】

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：

【０１２４】

【数１】

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

【０１２５】

本発明の文脈において、ＴＡＤＦ材料は、好ましくは、０．０５より大きいか（ｎ＞０．０５）、より好ましくは、０．１より大きいか（ｎ＞０．１）、より一層好ましくは、０．１５より大きいか（ｎ＞０．１５）、特に好ましくは、０．２より大きいか（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。

【０１２６】

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。

【０１２７】

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}値が０．４ｅＶ未満、好ましくは、０．３ｅＶ未満、より好ましくは、０．２ｅＶ未満、より一層好ましくは、０．１ｅＶ未満、またははなはだしくは、０．０５ｅＶ未満の値を示すことを特徴とする。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。

【０１２８】

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。

【０１２９】

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。

【０１３０】

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。

【０１３１】

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。

【０１３２】

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

２ＣｚＰＮ（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）、４ＣｚＰＮ（３，４，５，６－テトラ（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）フタロニトリル）、４ＣｚＩＰＮ（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）、４ＣｚＴＰＮ（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

４ＣｚＣＮＰｙ（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（CF_3）にも代替される。

【０１３３】

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。

【０１３４】

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－ＸＴ（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。

【０１３５】

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。

【０１３６】

蛍光エミッタＦは、また、本明細書に定義されたようなＴＡＤＦ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ＴＡＤＦ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ような小さいＦＷＨＭエミッタS^Bは、本明細書に定義されたようなＴＡＤＦ材料E^Bであってもよく、そうでなくてもよい。

【０１３７】

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。

【０１３８】

本明細書において、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）。

【０１３９】

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

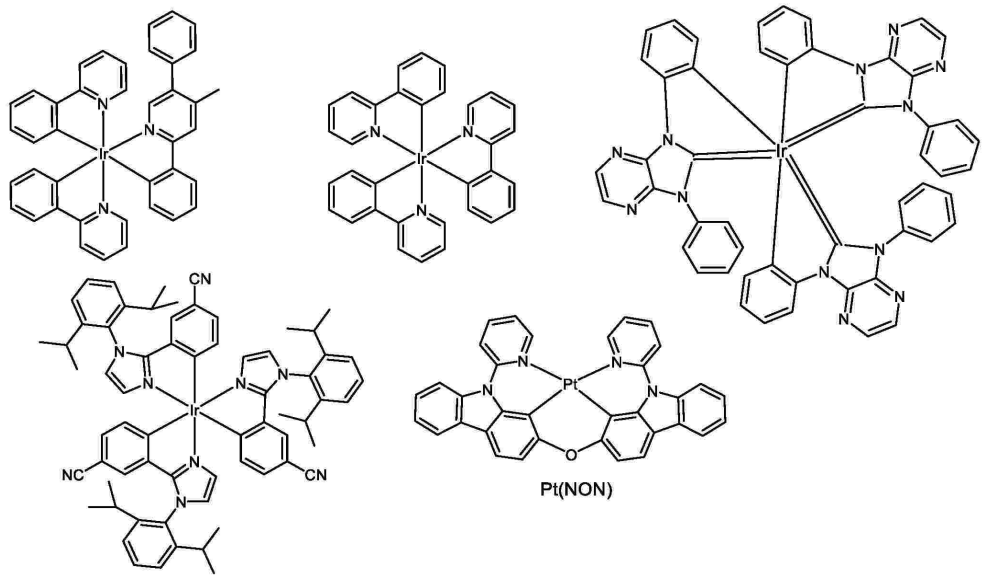
っている。また、当業者は、光電子素子において燐光材料として使用するための燐光錯体の設計原理に精通しており、構造的変化を介して錯体の放出を調整する方法を知っている。

【０１４０】

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。

【０１４１】

本発明による有機分子と共に使用可能な燐光材料P^Bの例（例えば、組成物の形態または光電子素子のＥＭＬ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：



【０１４２】

本発明の文脈において、小さい半値幅（ＦＷＨＭ）エミッタS^Bは、０．３５ｅＶ以下（≦０．３５ｅＶ）、好ましくは、０．３０ｅＶ以下（≦０．３０ｅＶ）、特に０．２５ｅＶ以下（≦０．２５ｅＶ）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）である。他に明示されない限り、これは、室温（すなわち、（約）２０℃）で、各エミッタの発光スペクトルを基準に判断され、一般的に、ポリ（メチルメタクリレート）（ＰＭＭＡ）またはｍＣＢＰ内の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℃）で、ジクロロメタンまたはトルエンに０．００１～０．２ｍｇ／ｍＬのエミッタS^Bがある溶液で測定されうる。

【０１４３】

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。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℃）で、ポリ（メチルメタクリレート）（ＰＭＭＡ）内の１０重量％のそれぞれの材料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。

【０１４４】

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（本明細

書において、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、本明細書において）、以下の方程式を使用して決定される：

【０１４５】

【数２】

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

。

【０１４６】

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を意味する。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。

【０１４７】

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。

【０１４８】

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）。

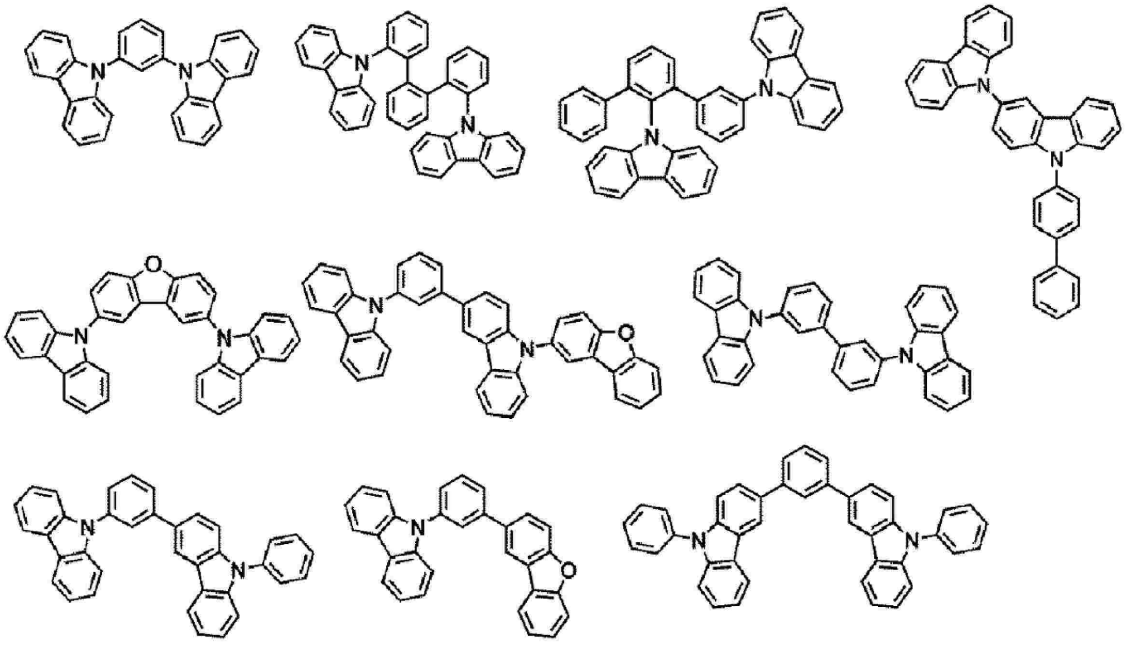
【０１４９】

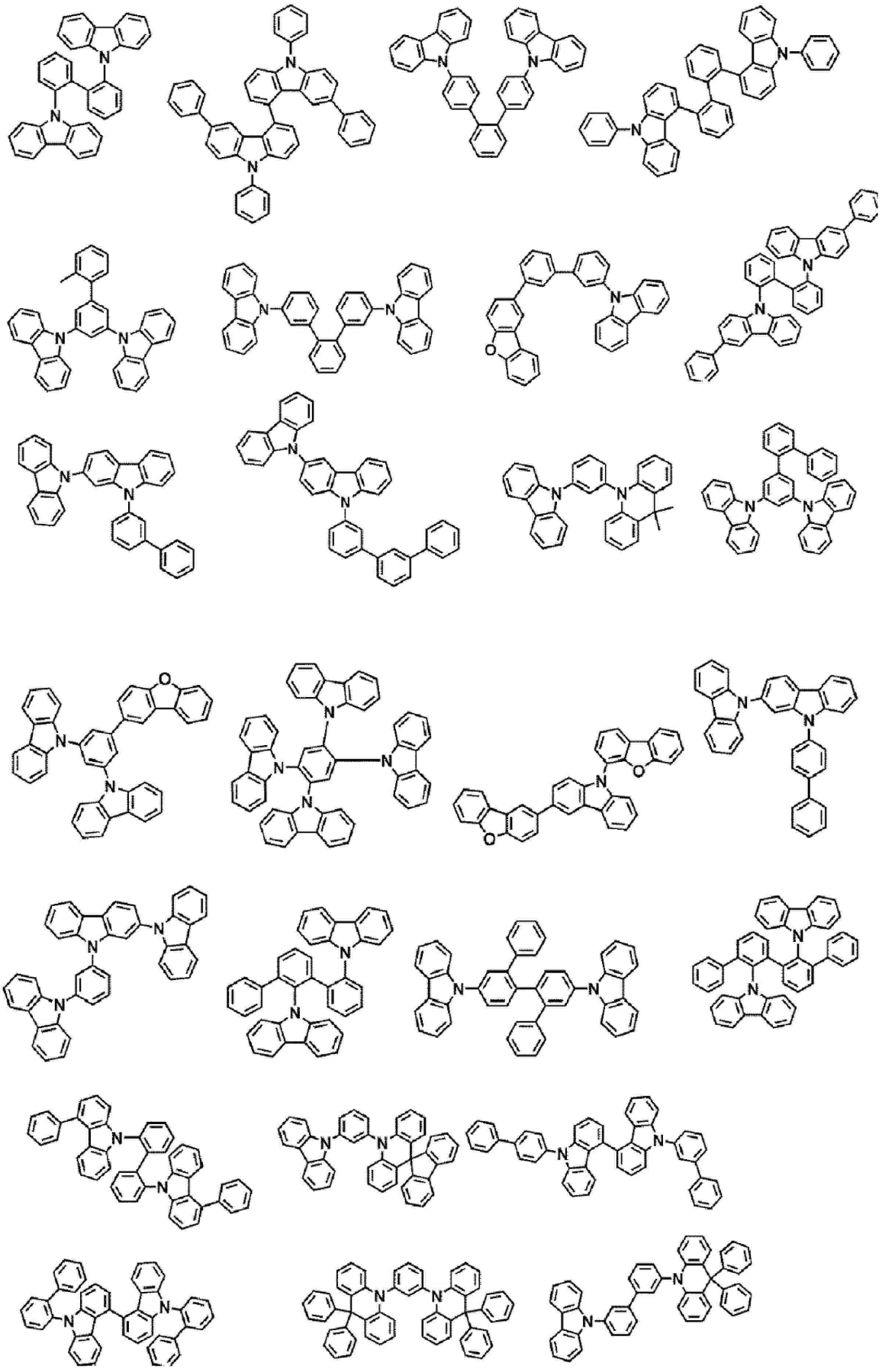
当業者に知られているように、ＥＭＬのホスト材料Ｈ^{B}は、前記ＥＭＬを通過し、電子または正電荷を輸送することができ、ホスト材料Ｈ^{B}にドーピングされた少なくとも１つのエミッタ材料に励起エネルギーを伝達することができる。当業者は、光電子素子（例えば、ＯＬＥＤ）のＥＭＬに含まれたホスト材料Ｈ^{B}が、一般的に電圧及び電流を印加するとき、前記素子からの発光に大きく関与しないということを理解する。当業者は、また、任意のホスト材料Ｈ^{B}が、高い正孔移動度を示すｐ－ホストＨ^P、高い電子移動度を示すｎ－ホストＨ^N、または高い正孔移動度及び高い電子移動度の両方を示す双極性ホスト材料Ｈ^{BP}であるという事実を知っている。

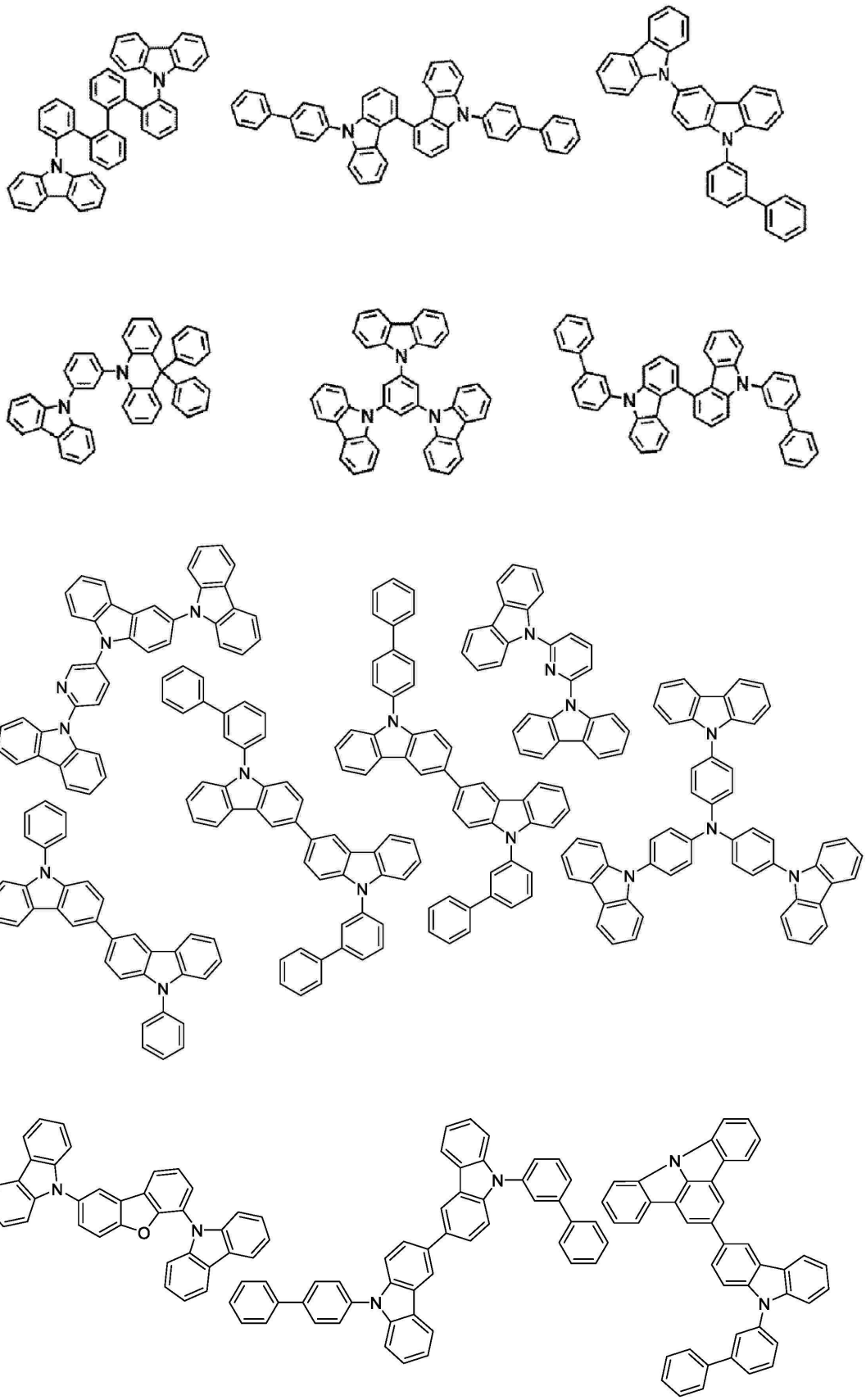
【０１５０】

当業者に知られているように、ＥＭＬ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、ＥＭＬ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（ビフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（Ｔ２Ｔ）、ｐ－ホストＨ^{P}としてのＣＢＰ、ｍＣＰ、ｍＣＢＰ、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］－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－ジベンゾフラニル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール、及び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。

【０１５１】
ＥＭＬ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}を有す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。
【０１５２】
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。
【０１５３】
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}の例は、下記に列挙されている：

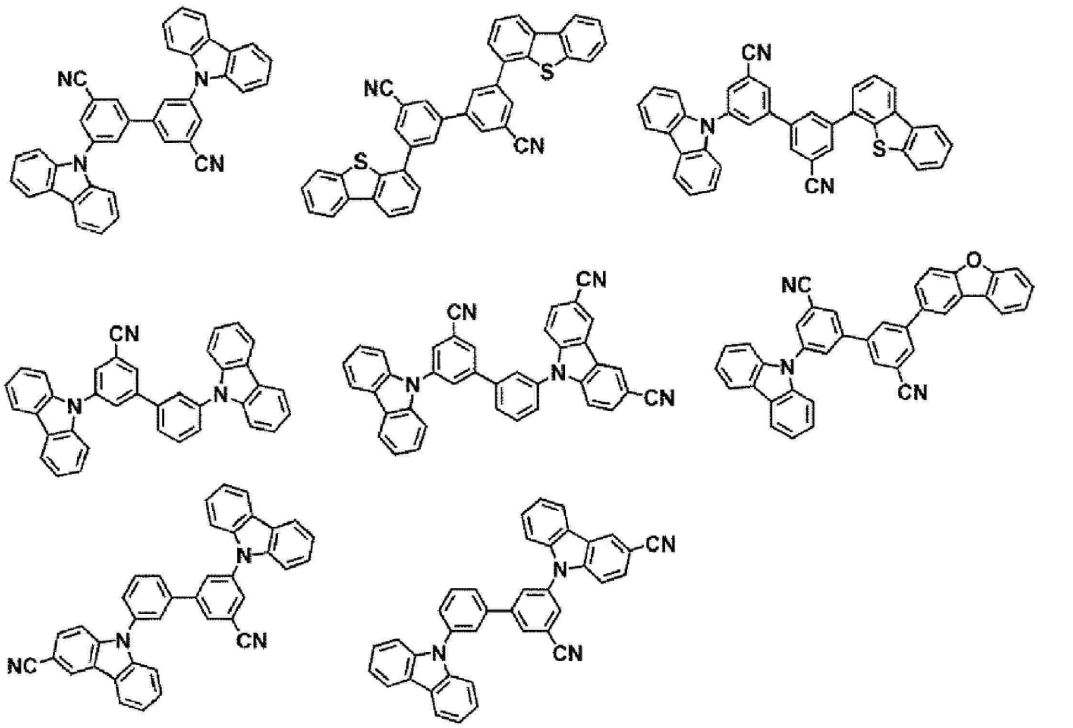


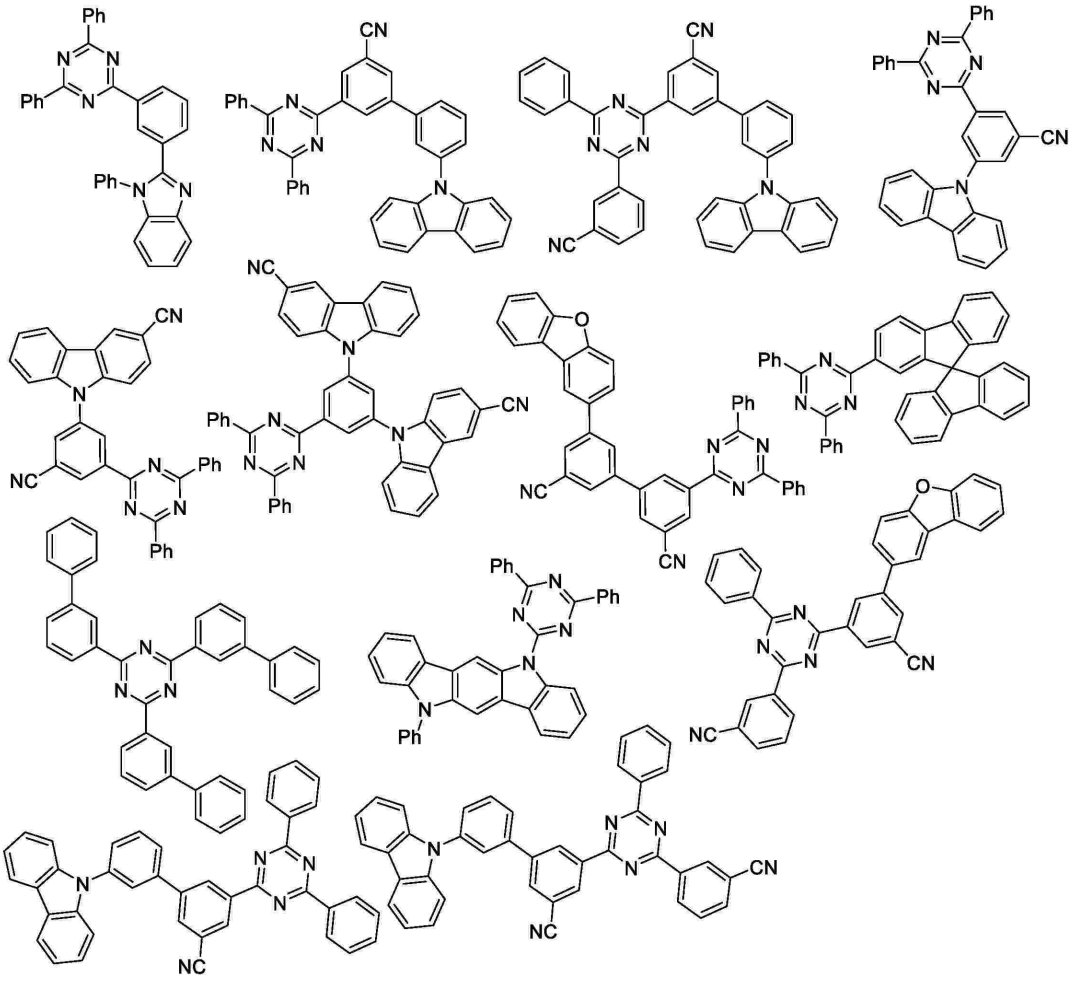


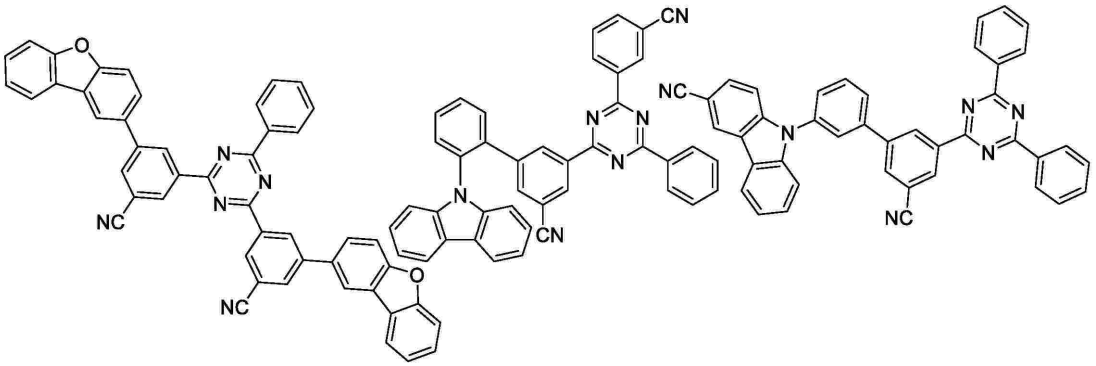


【０１５４】

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の例は、下記に列挙されている：







【０１５５】
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０．２０ｅＶ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０．２０ｅＶ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、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。

【０１５６】
当業者に知られているように、ＴＴＡ（三重項・三重項消滅）材料は、ホスト材料Ｈ^{B}としても使用される。ＴＴＡ材料は、三重項・三重項消滅を可能にする。三重項・三重項消滅は、好ましくは、光子アップコンバージョンを起こすことができる。したがって、２つ、３つまたはそれ以上の光子が、ＴＴＡ材料Ｈ^{TTA}の最低励起三重項状態（Ｔ１^{TTA}）から第１励起一重項状態Ｓ１^{TTA}への光子アップコンバージョンを容易にする。好ましい実施形態において、２つの光子は、Ｔ１^{TTA}からＳ１^{TTA}への光子アップコンバージョンを容易にする。したがって、三重項・三重項消滅は、多数のエネルギー伝達段階によって、２つ（または、選択的に２以上）の低周波数光子を１つの高周波数光子に結合することができる段階であってもよい。

【０１５７】
選択的に、ＴＴＡ材料は、吸収モイエティ、センシタイザーモイエティ及びエミッタモイエティ（または、消滅モイエティ）を含むものであってもよい。これと係わり、エミッタモイエティは、例えば、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレンのような多環式芳香族モイエティであってもよい。好ましい実施形態において、多環式芳香族モイエティは、アントラセンモイエティまたはその誘導体を含む。センシタイザーモイエティ及びエミッタモイエティは、２つの異なる化学的化合物（すなわち、分離した化学的実体）に位置するか、あるいは１つの化学的化合物に含まれた２つのモイエティであってもよい。

【０１５８】
本発明によれば、三重項・三重項消滅（ＴＴＡ）材料は、三重項・三重項消滅により、第１励起三重項状態Ｔ１^{N}から第１励起一重項状態Ｓ１^{N}にエネルギーを変換する。

【０１５９】

本発明によれば、ＴＴＡ材料は、最低励起三重項状態（T_1^N）から三重項・三重項消滅を示して、三重項・三重項消滅した第１励起一重項状態S_1^Nを生成し、T_1^Nのエネルギーの最大２倍のエネルギーを有することを特徴とする。

【０１６０】

本発明の一実施形態において、ＴＴＡ材料は、T_1^Nから三重項・三重項消滅を示してS_1^Nを生成し、T_1^Nエネルギーの１．０１ないし２倍、１．１ないし１．９倍、１．２ないし１．５倍、１．４ないし１．６倍、または１．５ないし２倍のエネルギーを有することを特徴とする。

【０１６１】

本明細書において、用語「ＴＴＡ材料」及び「ＴＴＡ化合物」は、互いに混用されうる。

【０１６２】

典型的な「ＴＴＡ材料」は、Ｋｏｎｄａｋｏｖ（Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2015, 373: 20140321）で説明したように、青色蛍光ＯＬＥＤと関連した先行技術で発見することができる。そのような青色蛍光ＯＬＥＤは、ＥＭＬの主成分（ホスト）として、アントラセン誘導体のような芳香族炭化水素を使用する。

【０１６３】

好ましい実施形態において、ＴＴＡ材料は、センシタイズされた三重項・三重項消滅を可能にする。選択的に、ＴＴＡ材料は、１以上の多環式芳香族構造を含んでもよい。好ましい実施形態において、ＴＴＡ材料は、少なくとも１つの多環式芳香族構造及び少なくとも１つの更なる芳香族残基を含む。

【０１６４】

好ましい実施形態において、ＴＴＡ材料は、より大きい一重項・三重項エネルギー分割、すなわち、少なくとも１．１倍、少なくとも１．２倍、少なくとも１．３倍、少なくとも１．５倍、好ましくは、２倍以下の、第１励起一重項状態S_1^Nと最低励起三重項状態T_1^Nとのエネルギー差を有する。

【０１６５】

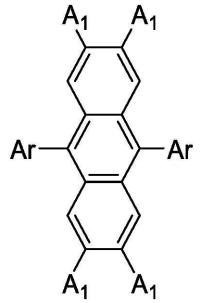
本発明の好ましい実施形態において、ＴＴＡ材料H^{TTA}は、アントラセン誘導体である。

【０１６６】

一実施形態において、前記ＴＴＡ材料H^{TTA}は、下記化学式４のアントラセン誘導体であり、

【０１６７】

［化学式４］



ここで、

それぞれのＡｒは、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

C_6－C_{60}アリール、C_3－C_{57}ヘテロアリール、ハロゲン及びC_1－C_{40}（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたC_6－C_{60}アリール、及び

C_6－C_{60}アリール、C_3－C_{57}ヘテロアリール、ハロゲン及びC_1－C_{40}（ヘテ

ロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ５７ヘテロアリール、
それぞれのＡ１は、互いに独立して、下記からなる群から選択される：
水素、
重水素、
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ６－Ｃ６０アリール、
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ５７ヘテロアリール、及び
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキル。

【０１６８】

一実施形態において、前記ＴＴＡ材料Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、
ここで、
それぞれのＡｒは、互いに独立して、下記からなる群から選択され、
Ｃ６－Ｃ２０アリール、Ｃ３－Ｃ２０ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ２１０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ６－Ｃ２０アリール、及び
Ｃ６－Ｃ２０アリール、Ｃ３－Ｃ２０ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ１０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ２０ヘテロアリール、
それぞれのＡ１は、互いに独立して、下記からなる群から選択される：
水素、
重水素、
Ｃ６－Ｃ２０アリール、Ｃ３－Ｃ２０ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ１０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ６－Ｃ２０アリール、
Ｃ６－Ｃ２０アリール、Ｃ３－Ｃ２０ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ１０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ３－Ｃ２０ヘテロアリール、及び
Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基で選択的に置換されたＣ１－Ｃ１０（ヘテロ）アルキル。

【０１６９】

一実施形態において、Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも１つのＡ１は水素である。一実施形態において、Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも２つのＡ１は水素である。一実施形態において、Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも３つのＡ１は水素である。一実施形態において、Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、全てのＡ１はそれぞれ水素である。

【０１７０】

一実施形態において、Ｈ^{TTA}は、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、１つのＡｒは、フェニル、ナフチル、フェナントリル、ピレニル、トリフェニレニル、ジベンゾアントラセニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、アントラセニル、フェナントレニル、ベンゾナフトフラニル、ベンゾナフトチオフェニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニルからなる群から選択された残基であり、これは、Ｃ６－Ｃ６０アリー

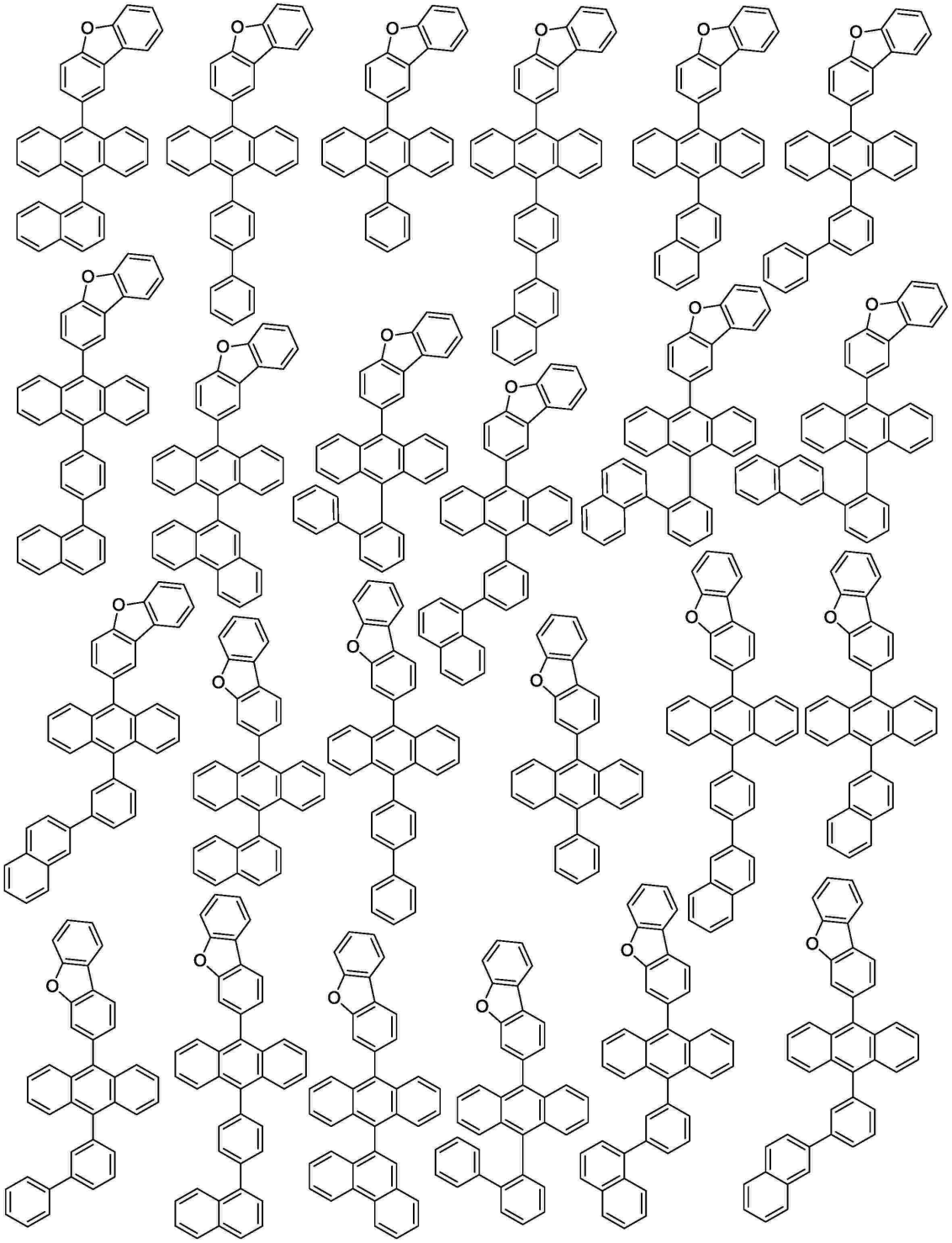
ル、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基でそれぞれ選択的に置換されうる。

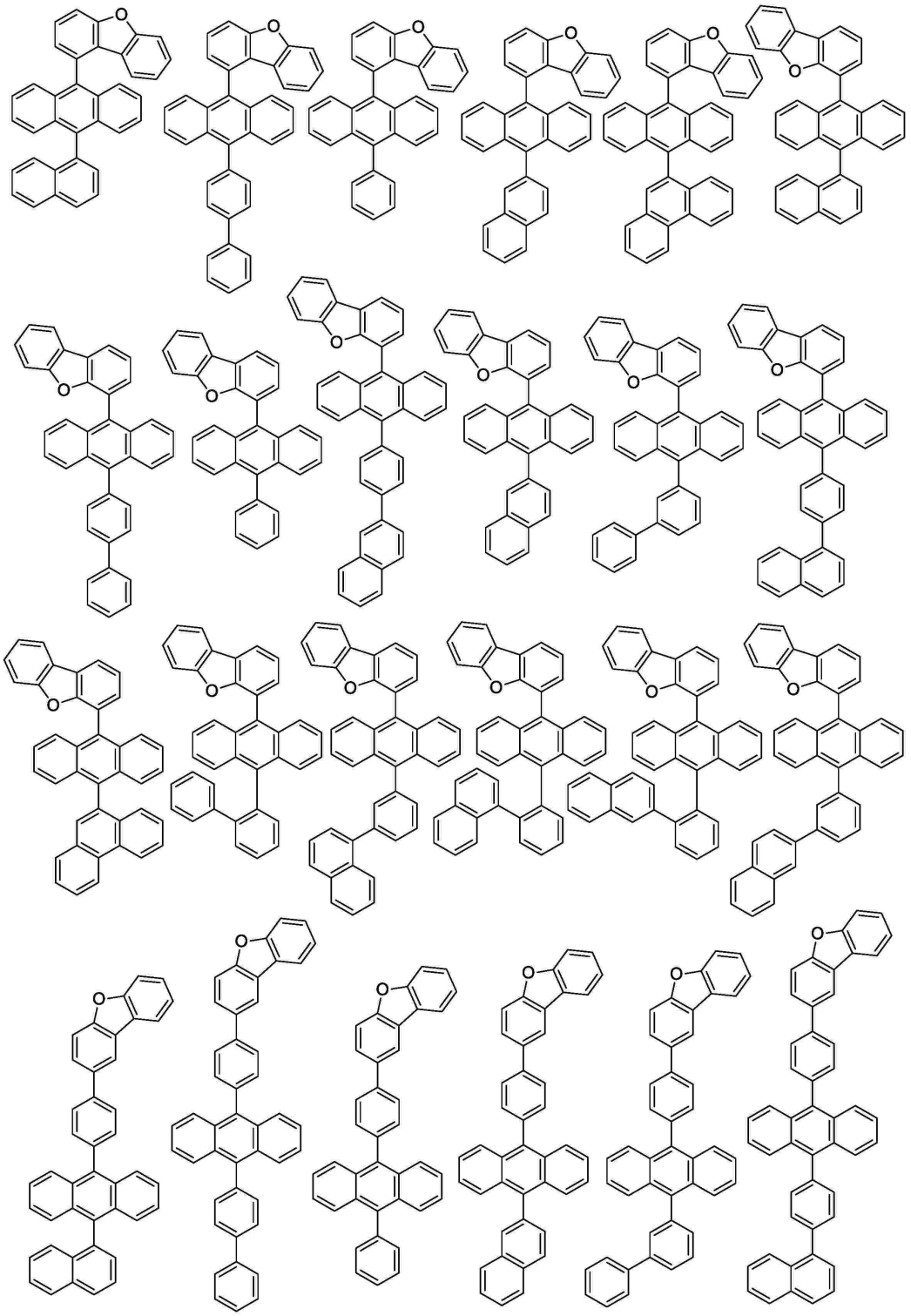
【０１７１】

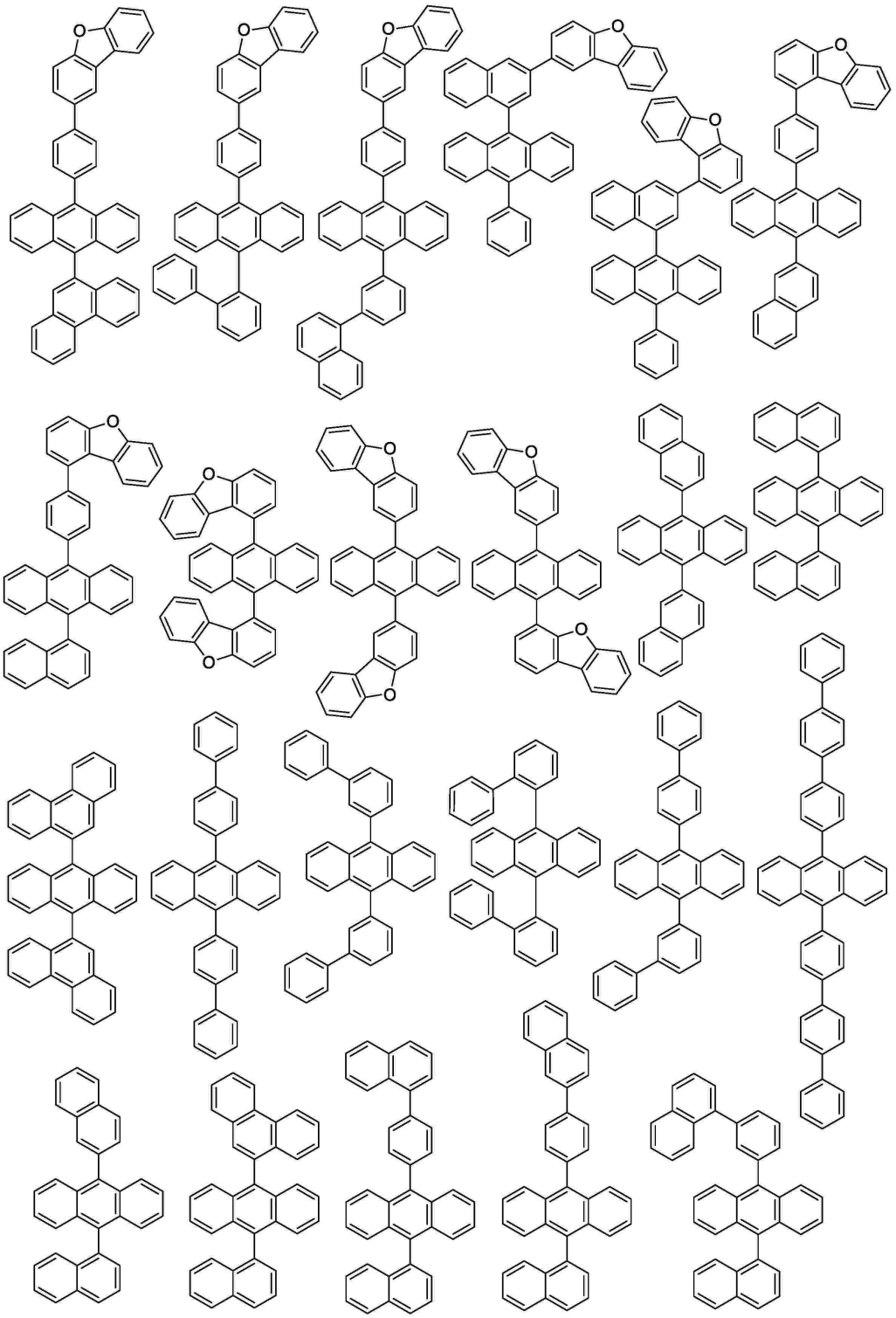
一実施形態において、ＨＴＴＡは、前記化学式４のアントラセン誘導体であり、ここで、２つのＡｒは、それぞれ、互いに独立して、フェニル、ナフチル、フェナントリル、ピレニル、トリフェニレニル、ジベンゾアントラセニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、アントラセニル、フェナントレニル、ベンゾナフトフラニル、ベンゾナフトチオフェニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニルからなる群から選択された残基であり、これは、Ｃ６－Ｃ６０アリール、Ｃ３－Ｃ５７ヘテロアリール、ハロゲン及びＣ１－Ｃ４０（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された１以上の残基でそれぞれ選択的に置換されうる。

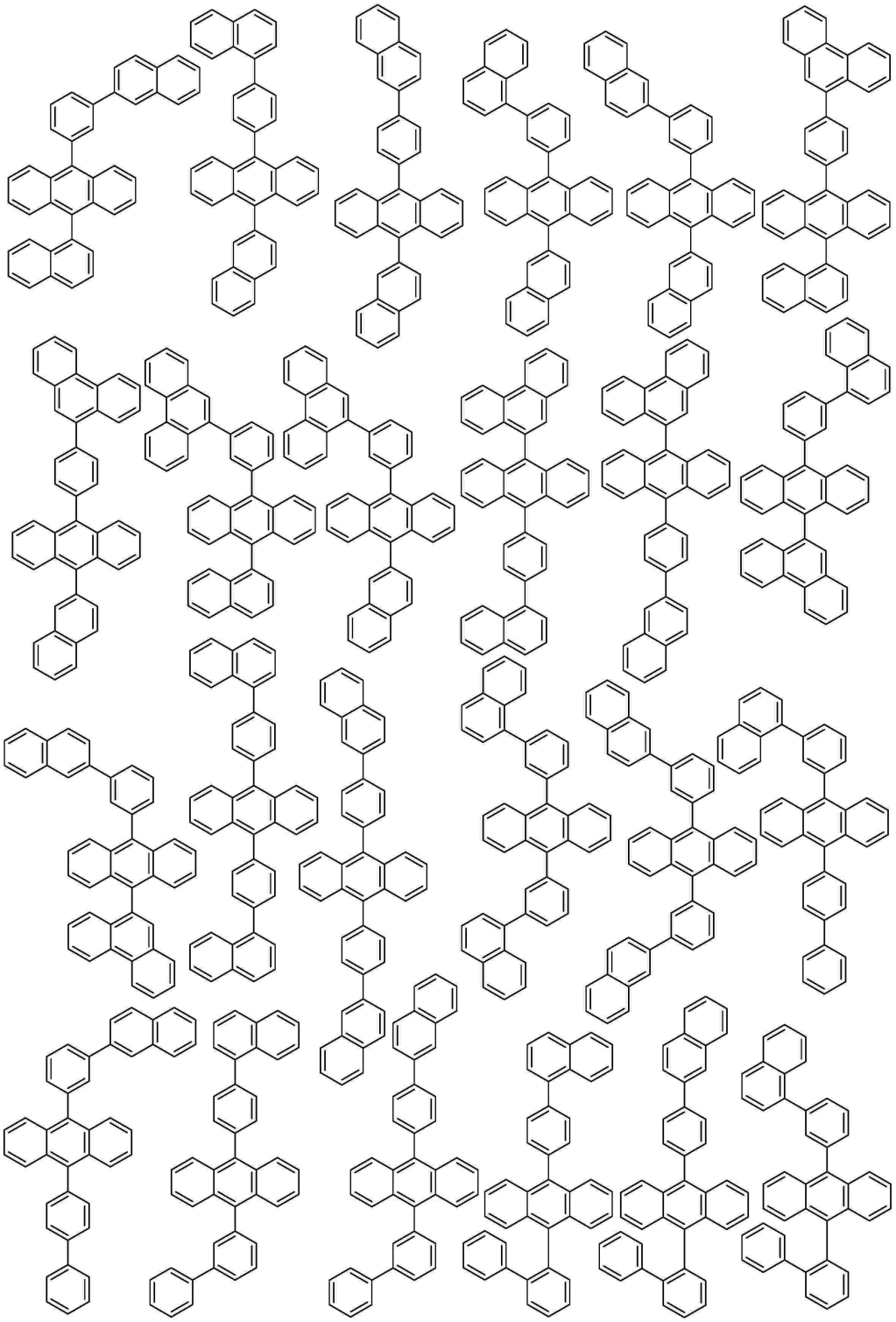
【０１７２】

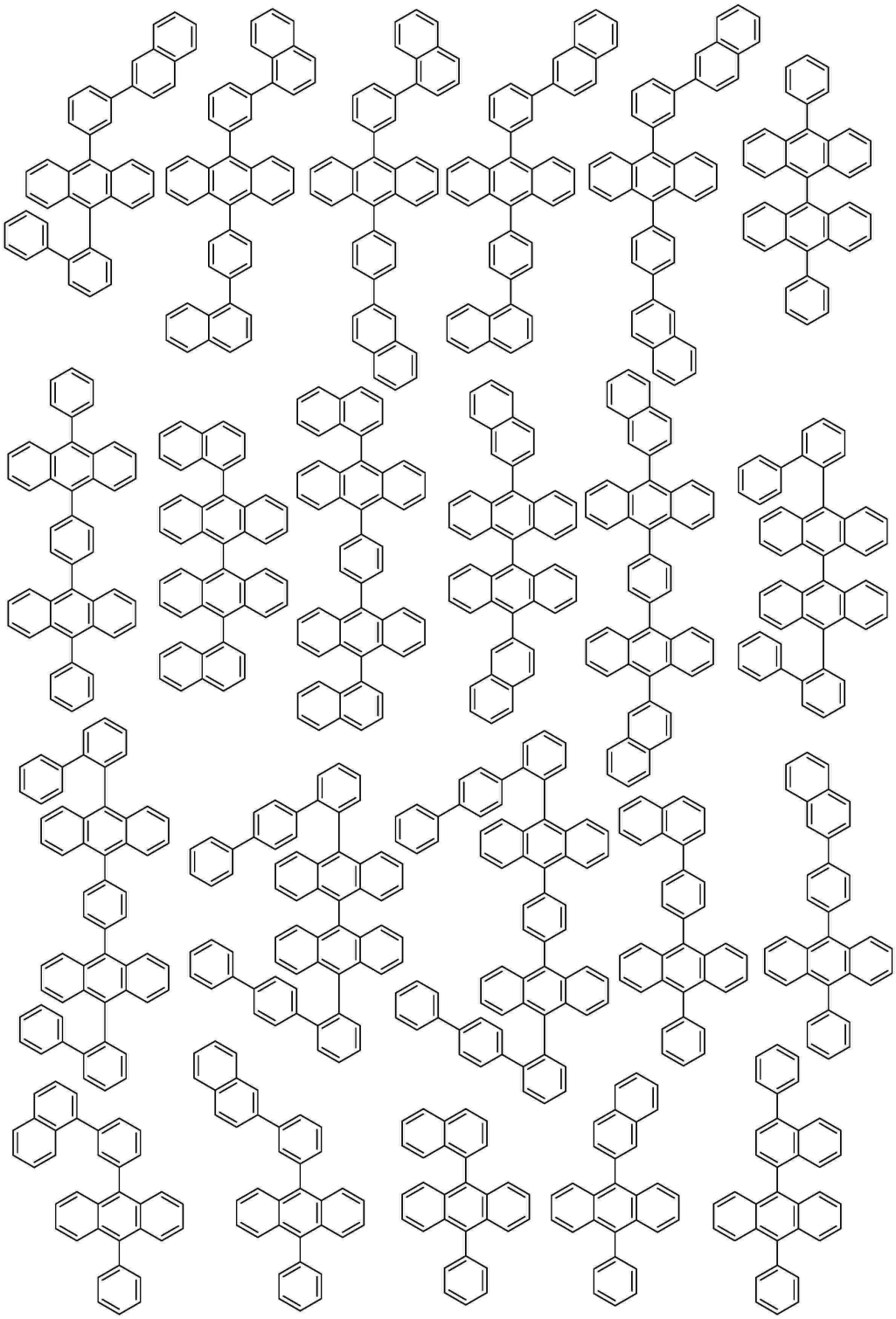
一実施形態において、ＴＴＡ材料ＨＴＴＡは、下記から選択されるアントラセン誘導体である：

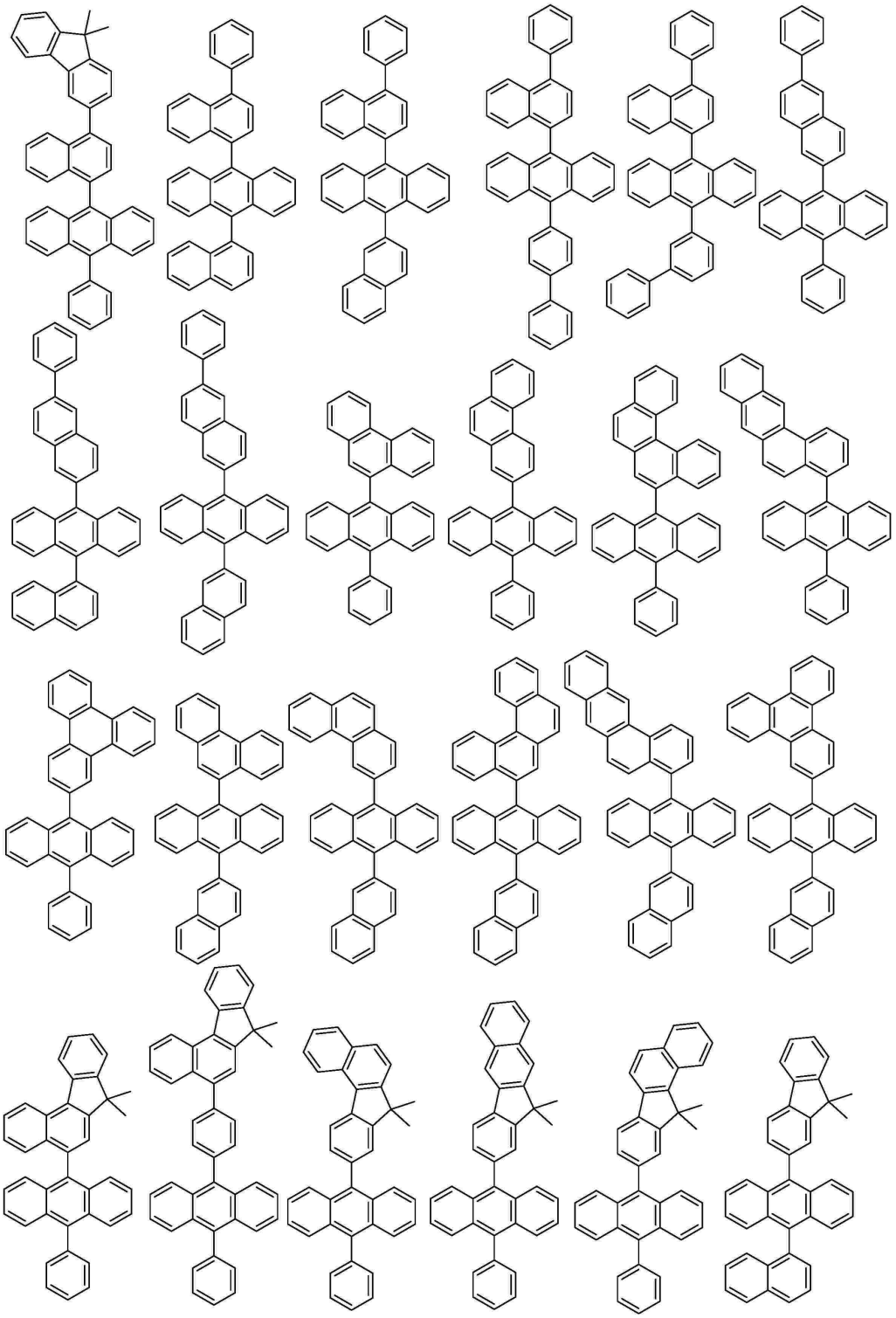


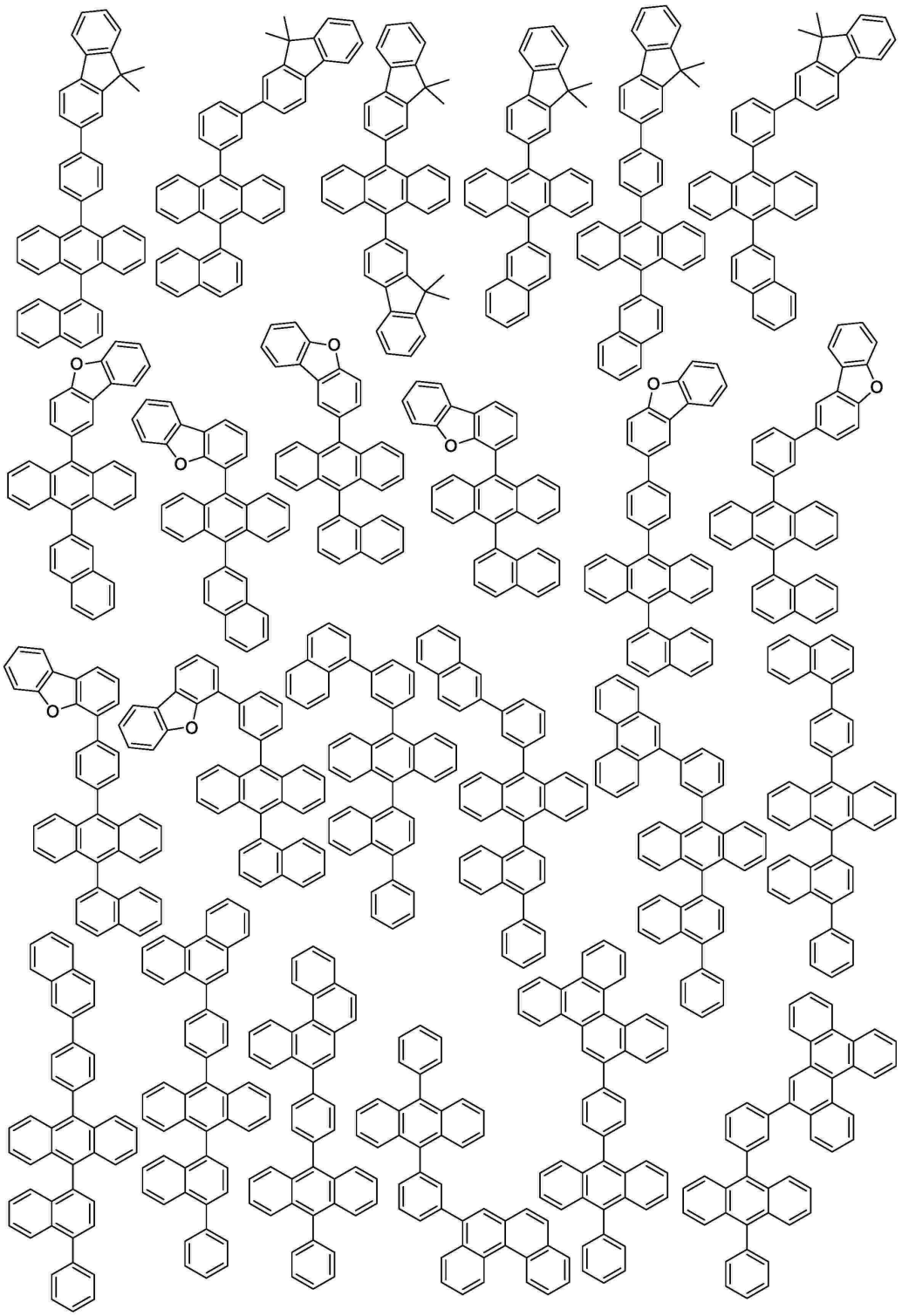


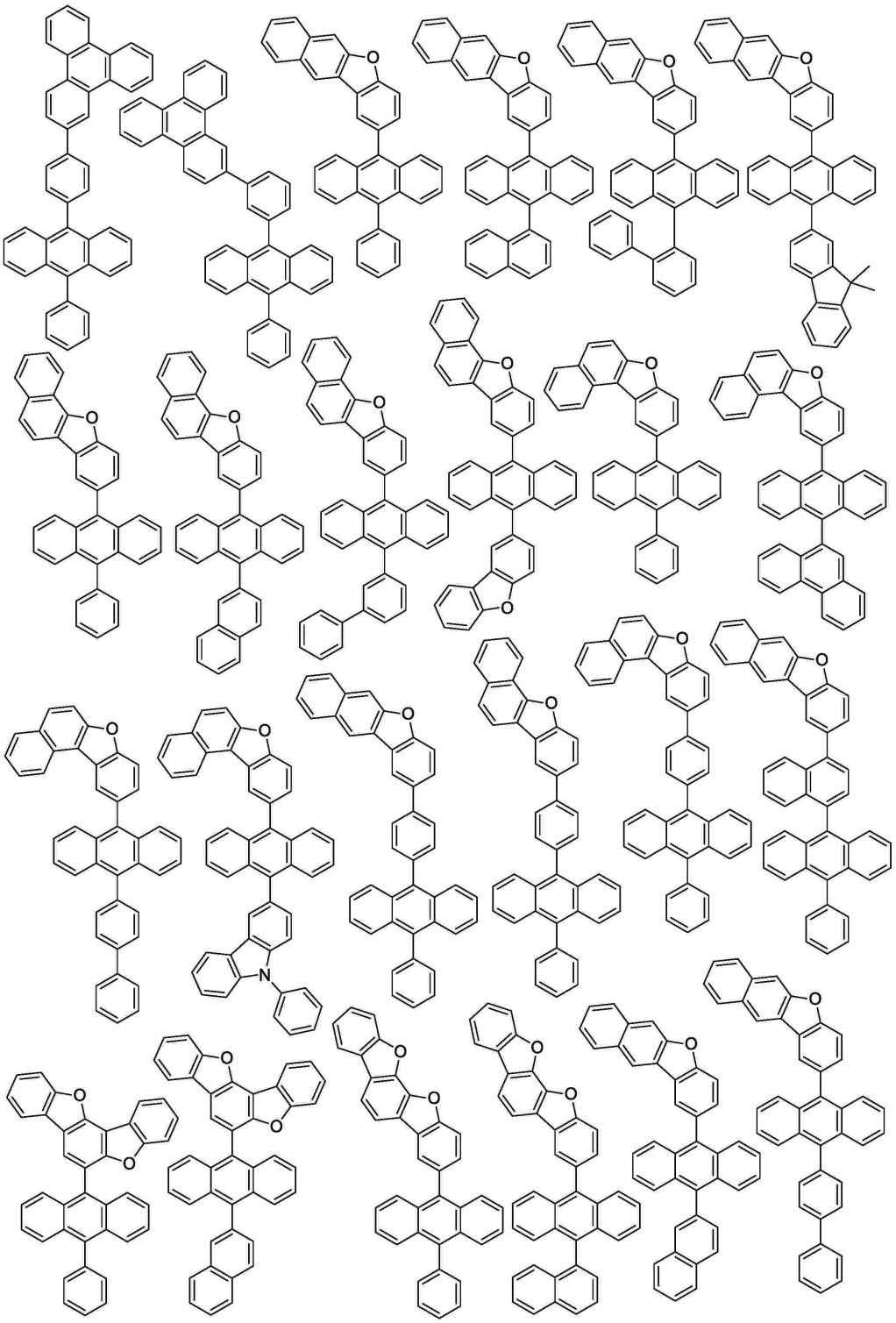


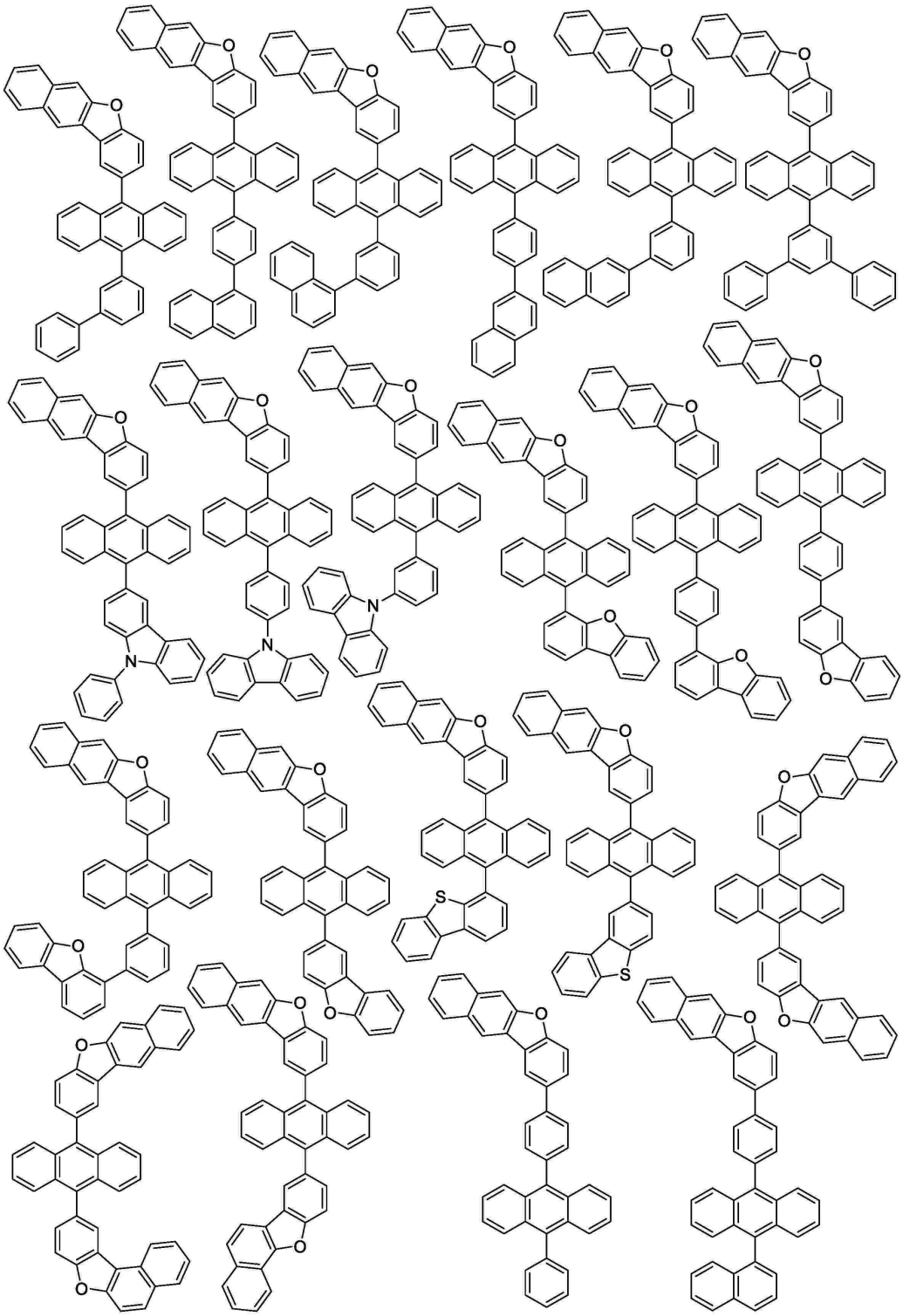


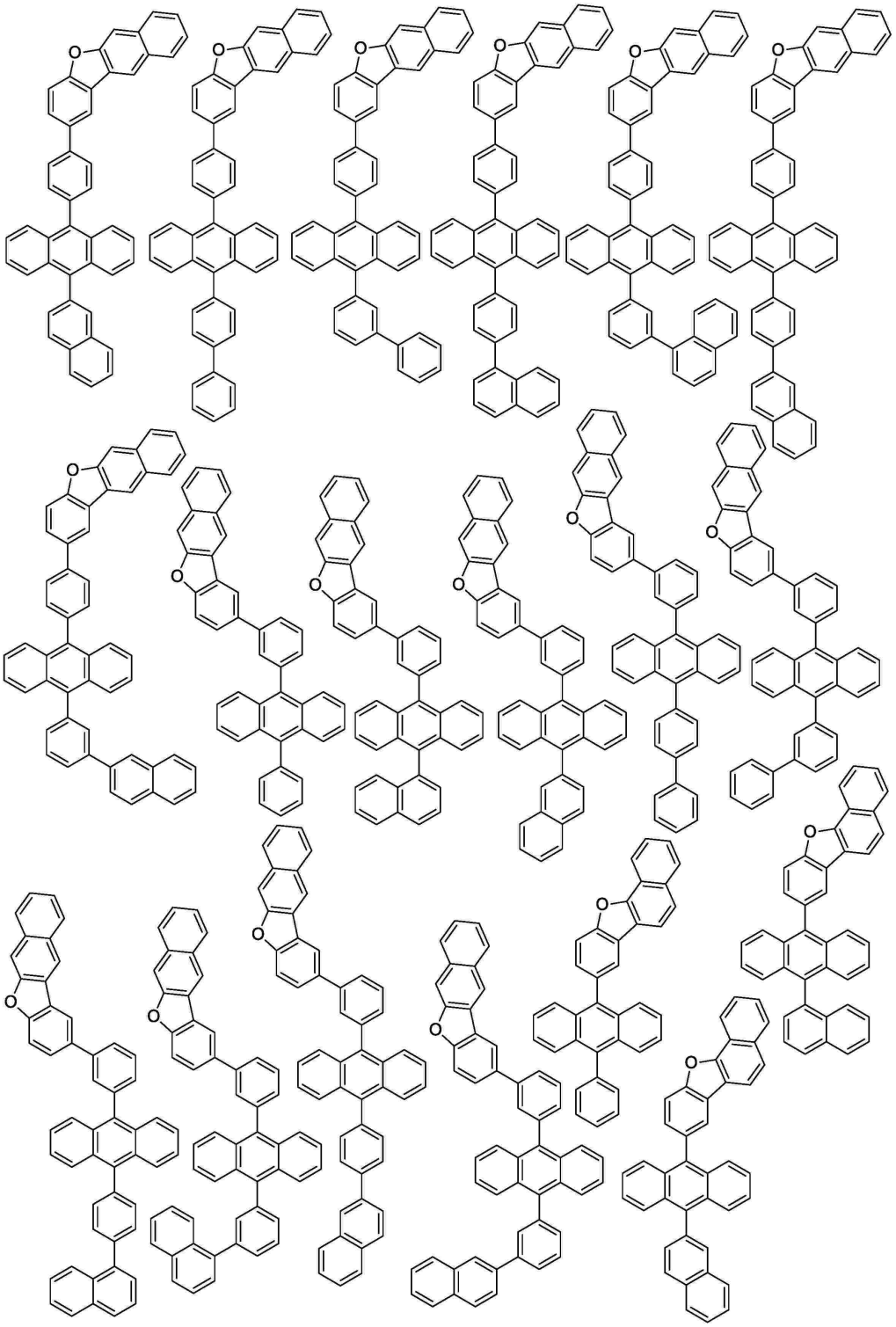


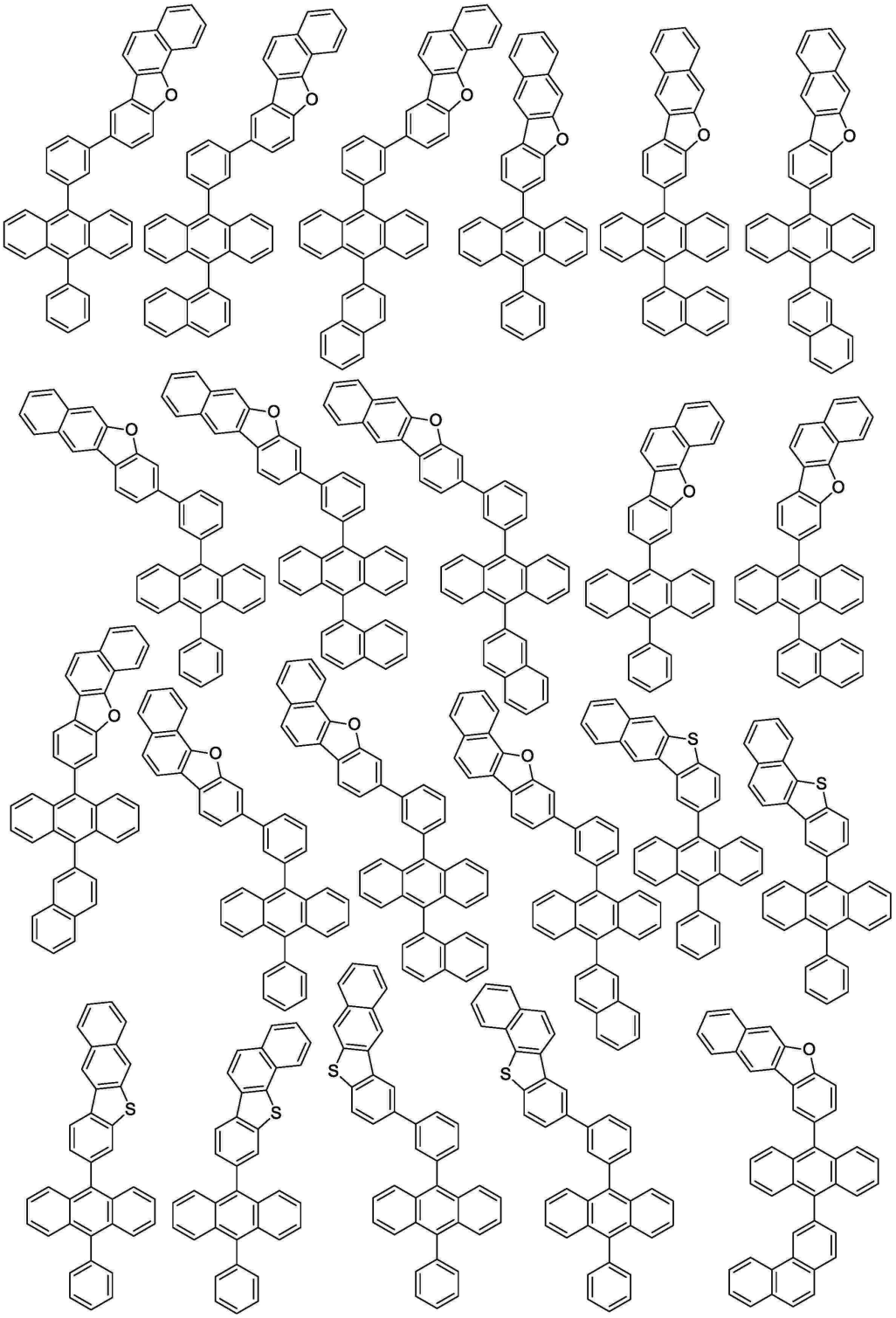


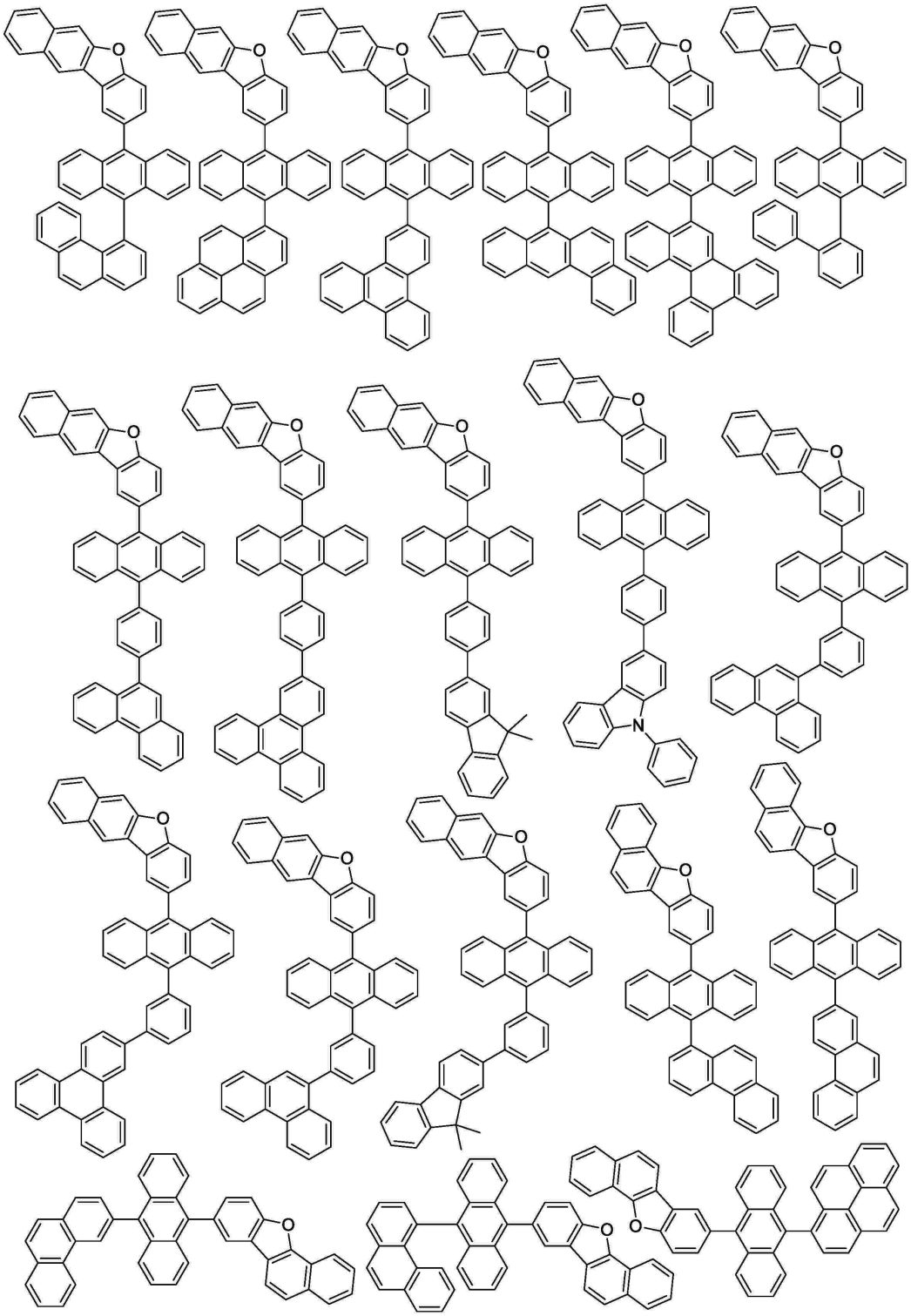


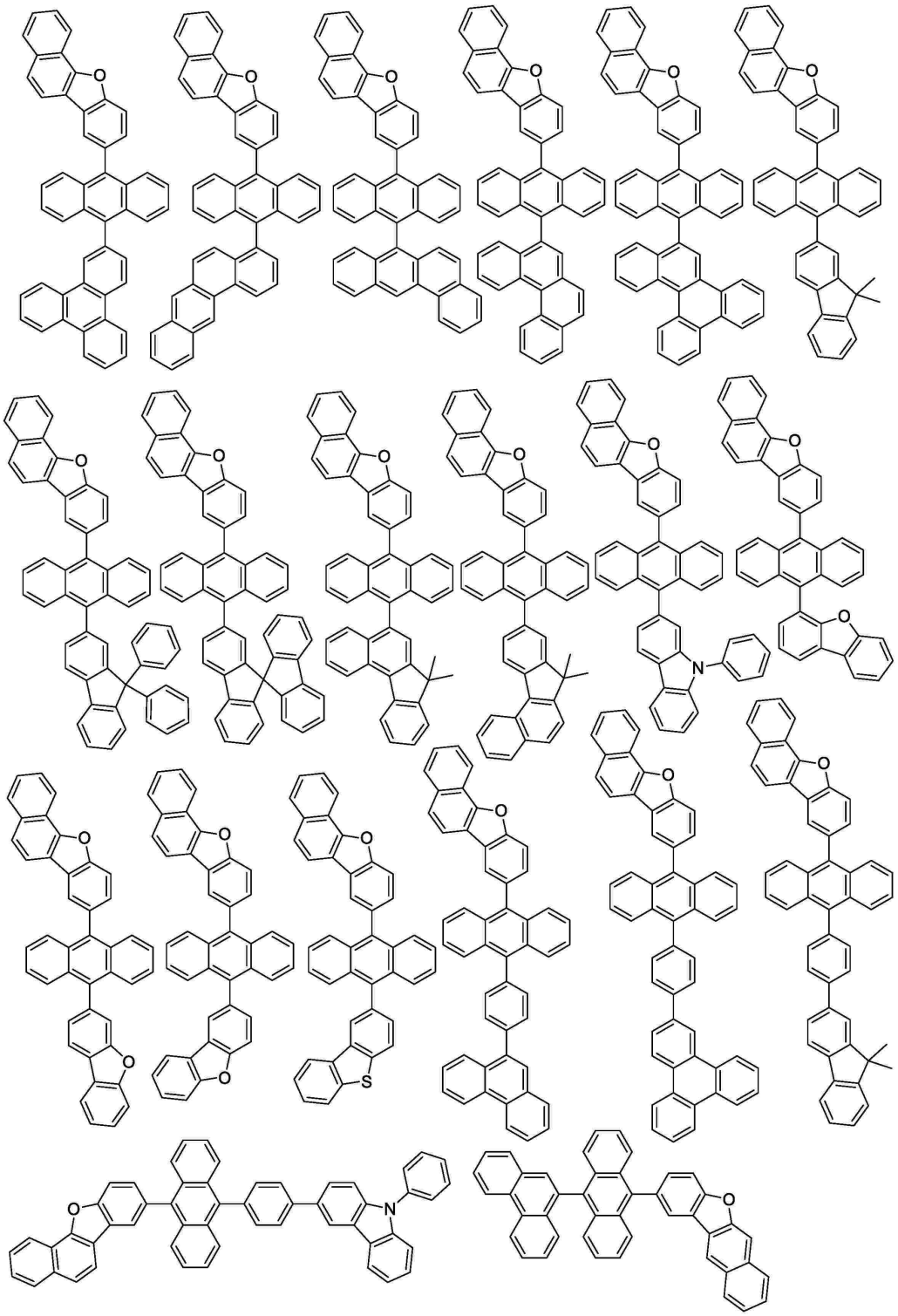


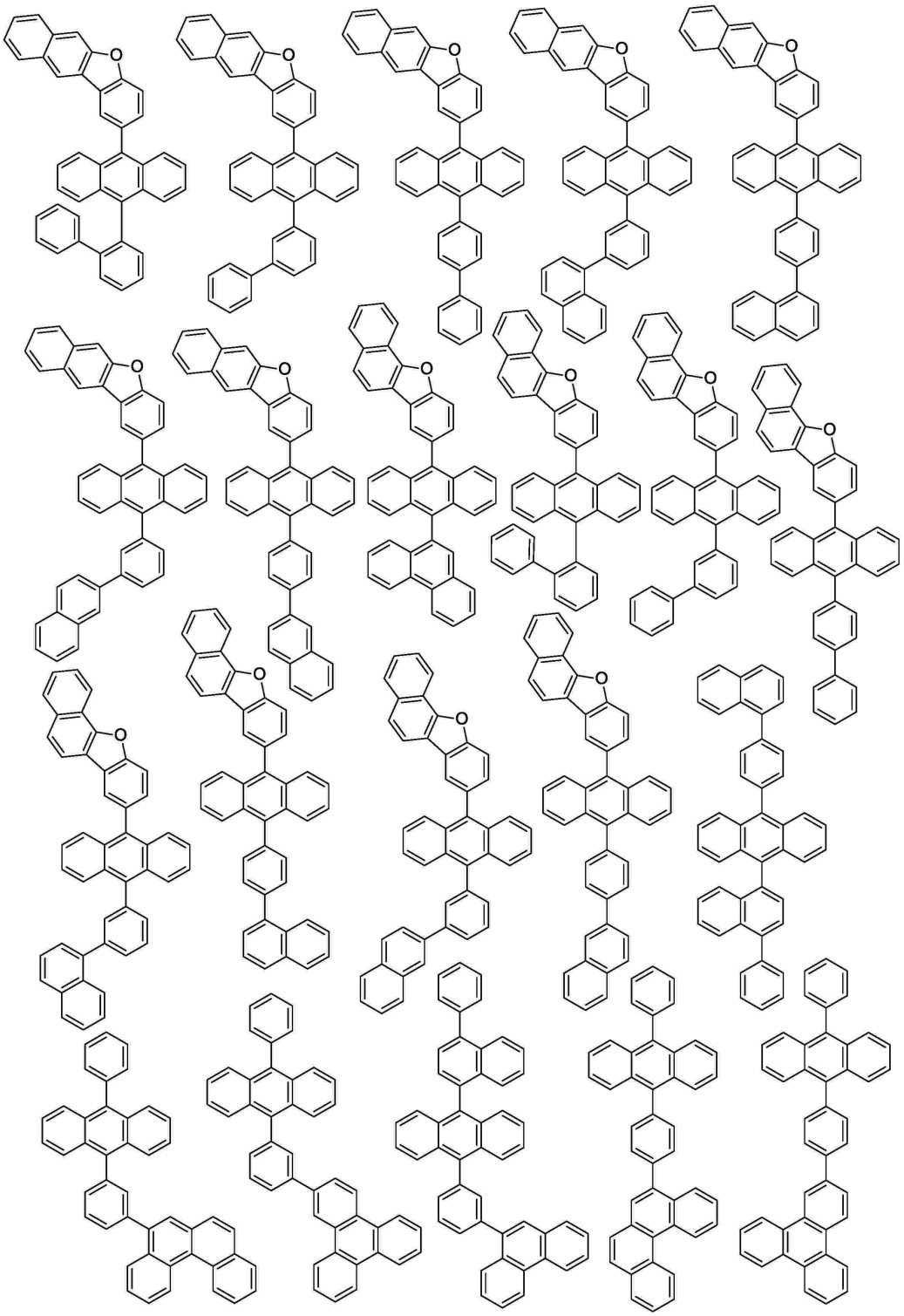


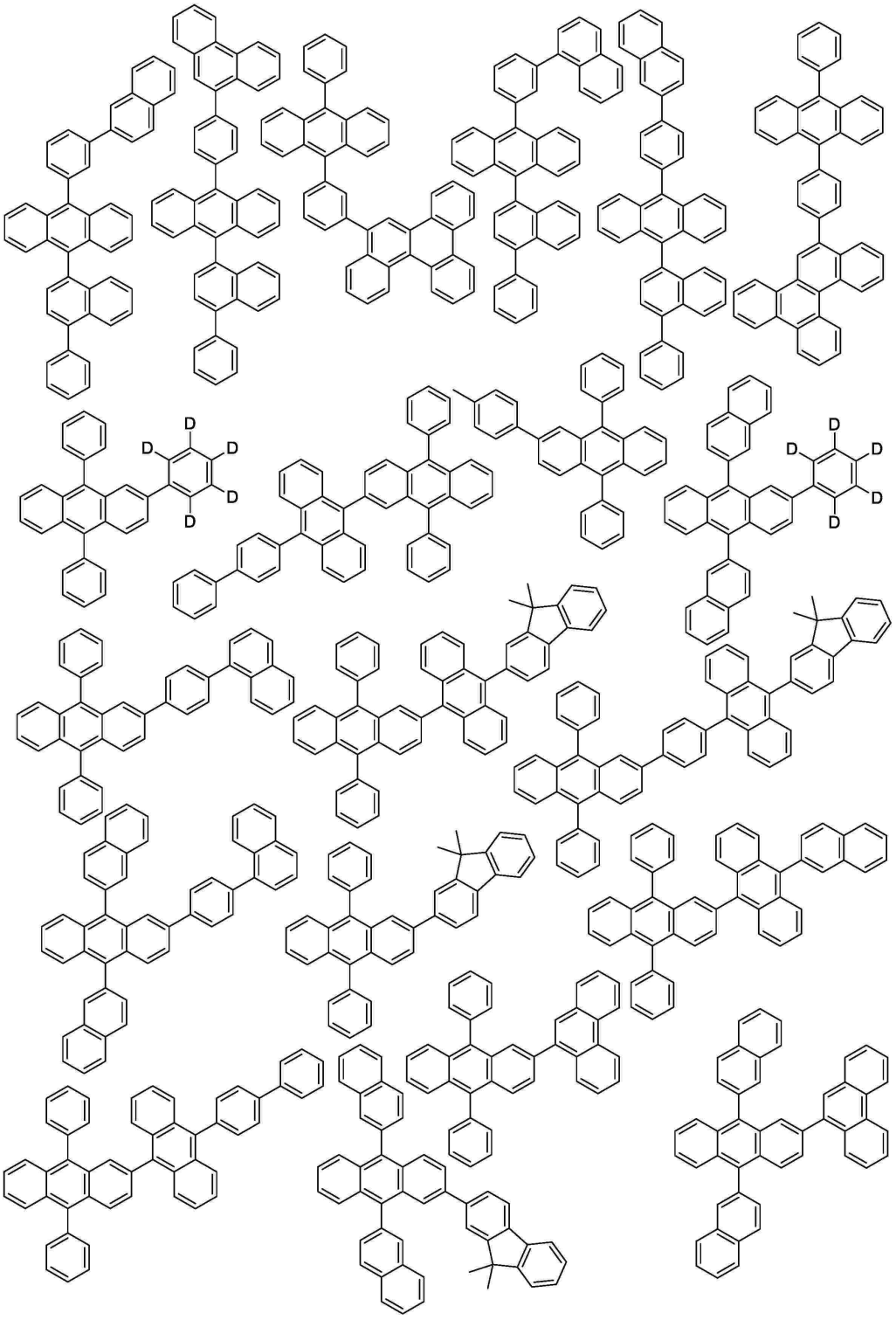


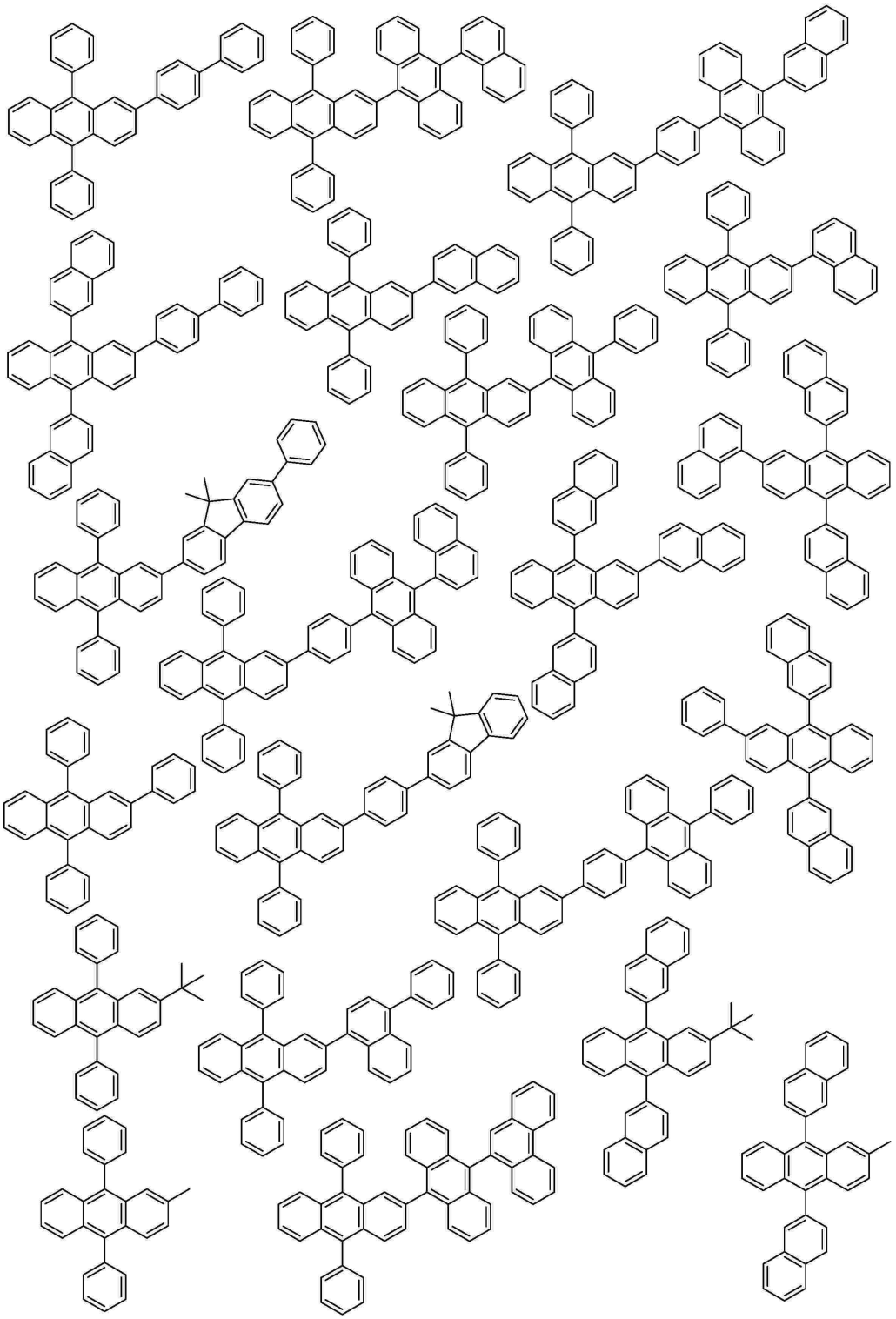


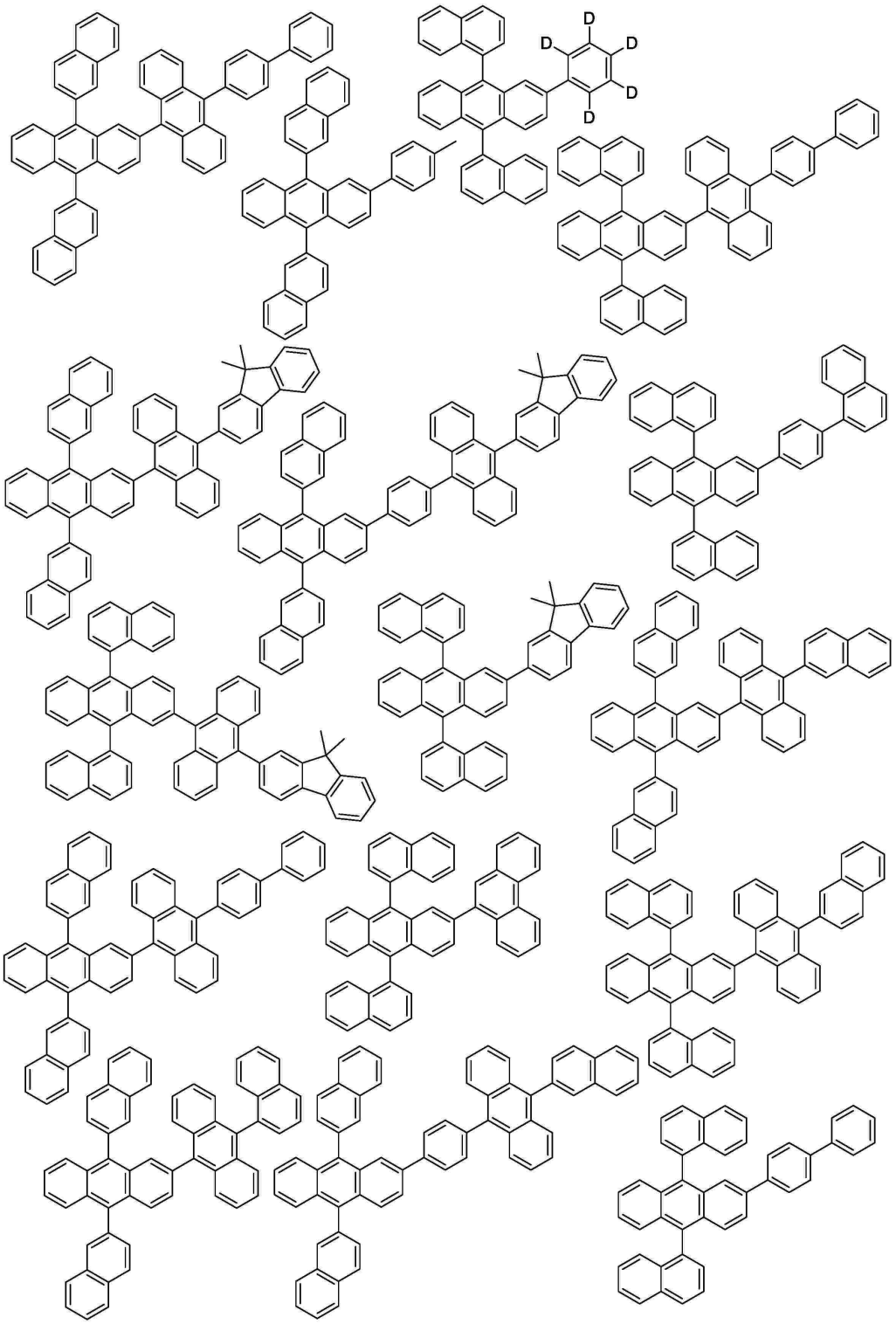


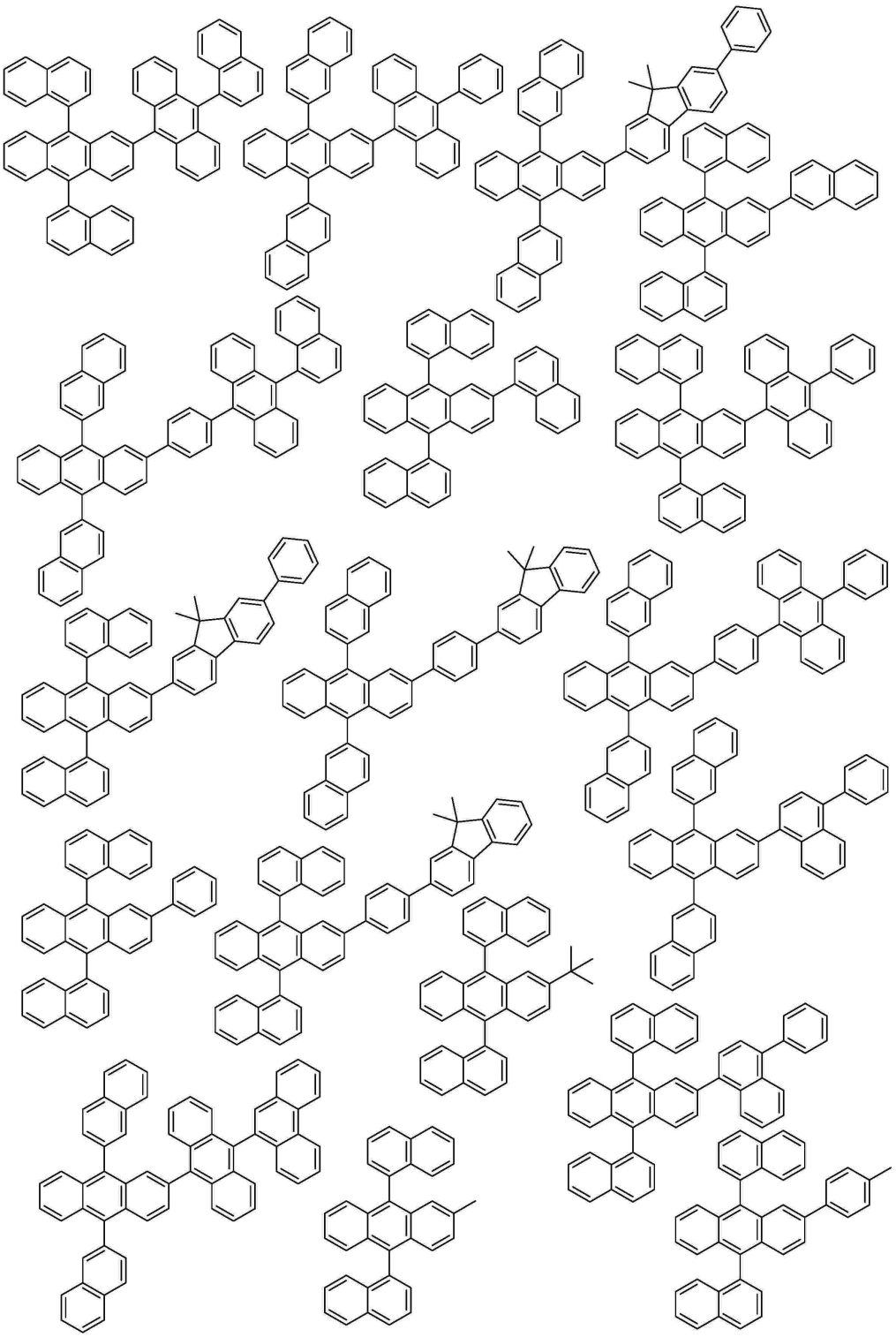


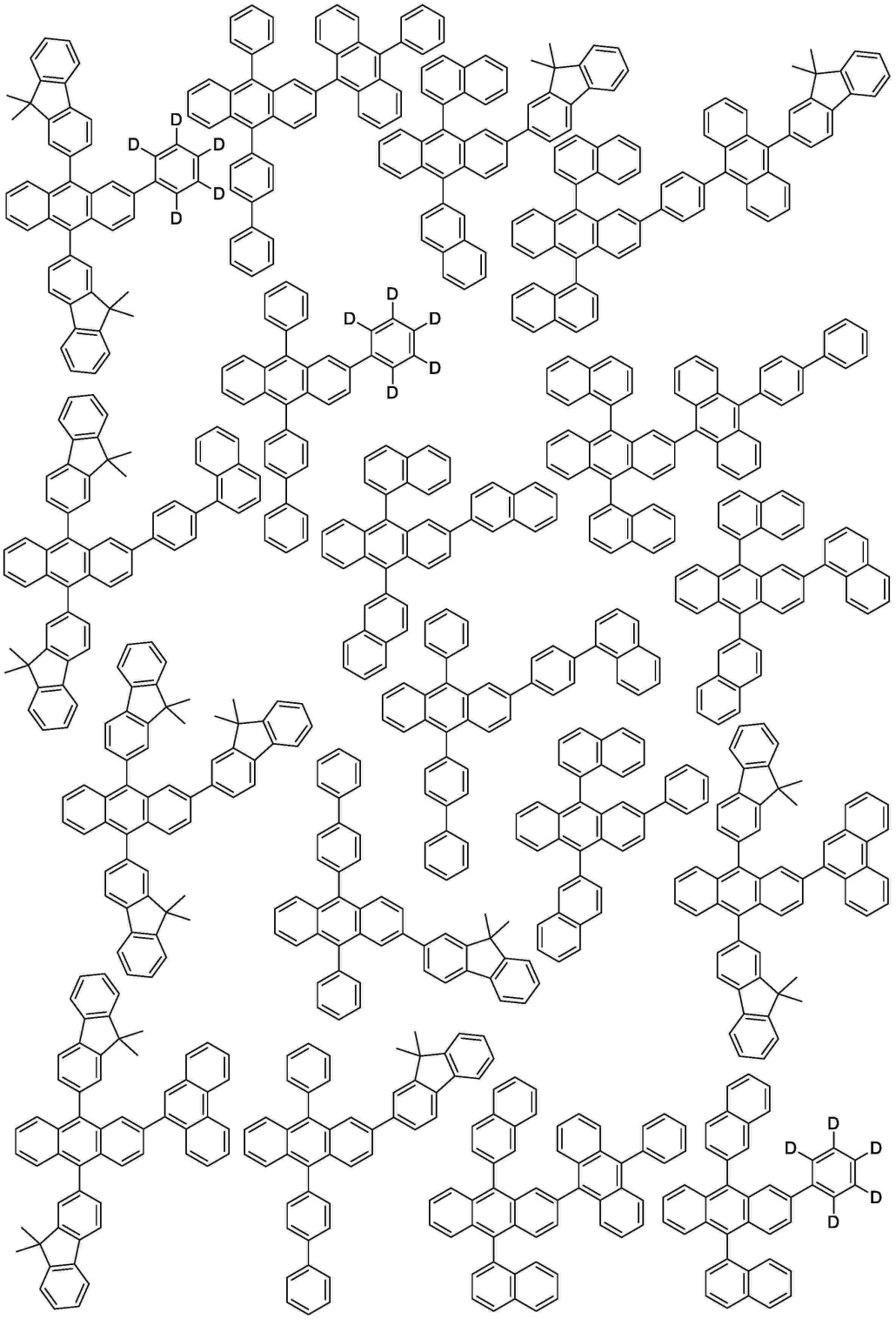


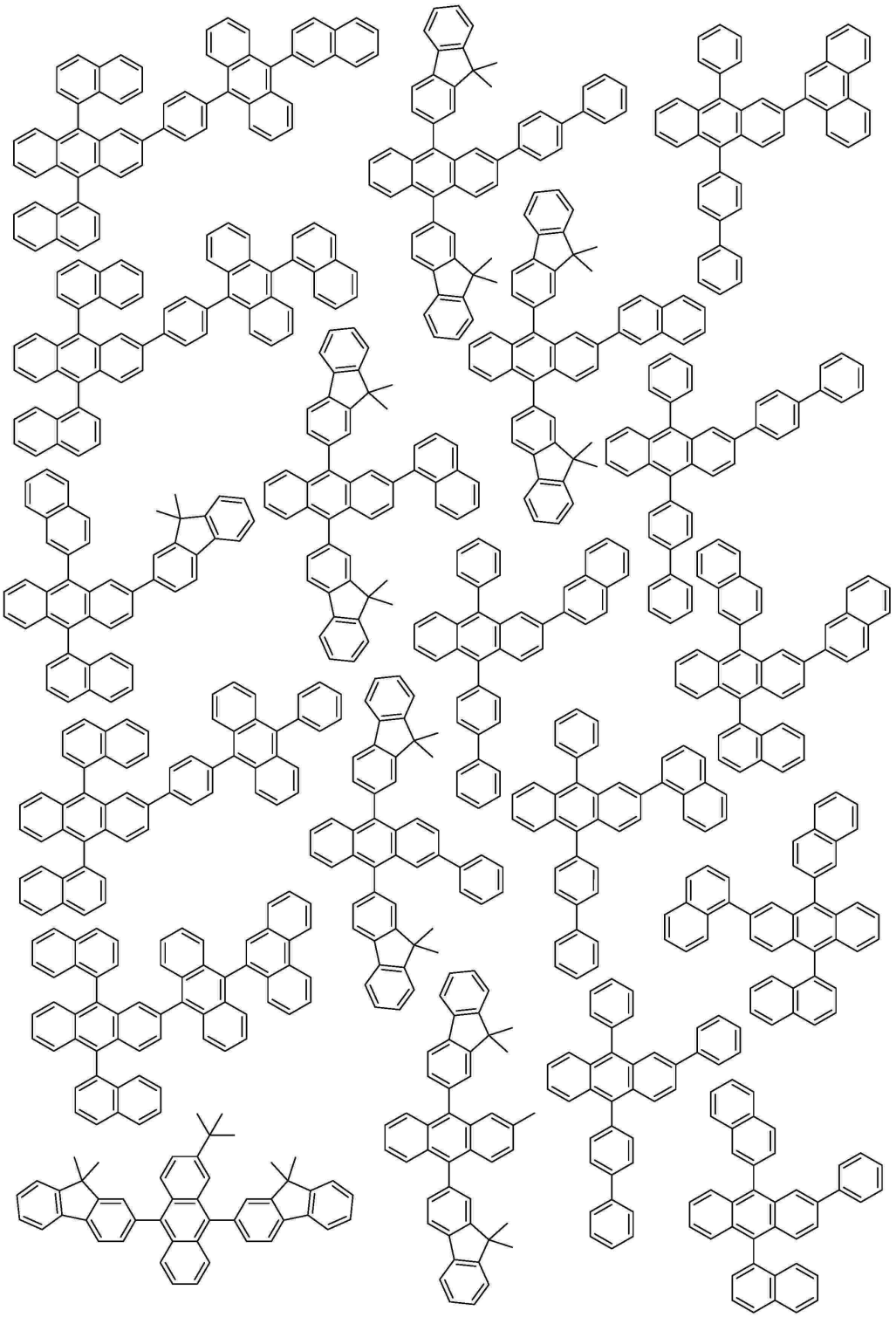

D
D
D
D
D
D
D
D
D

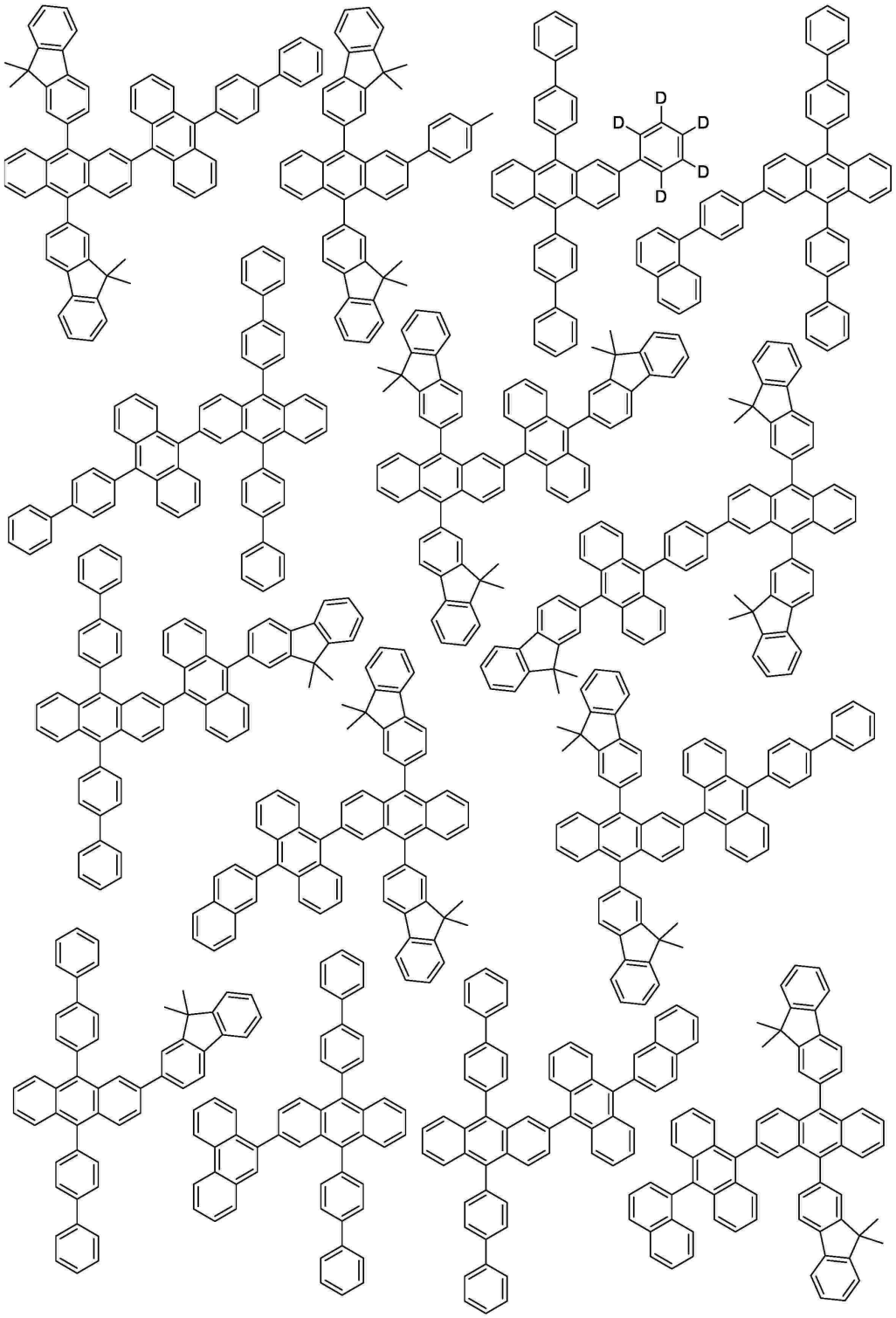


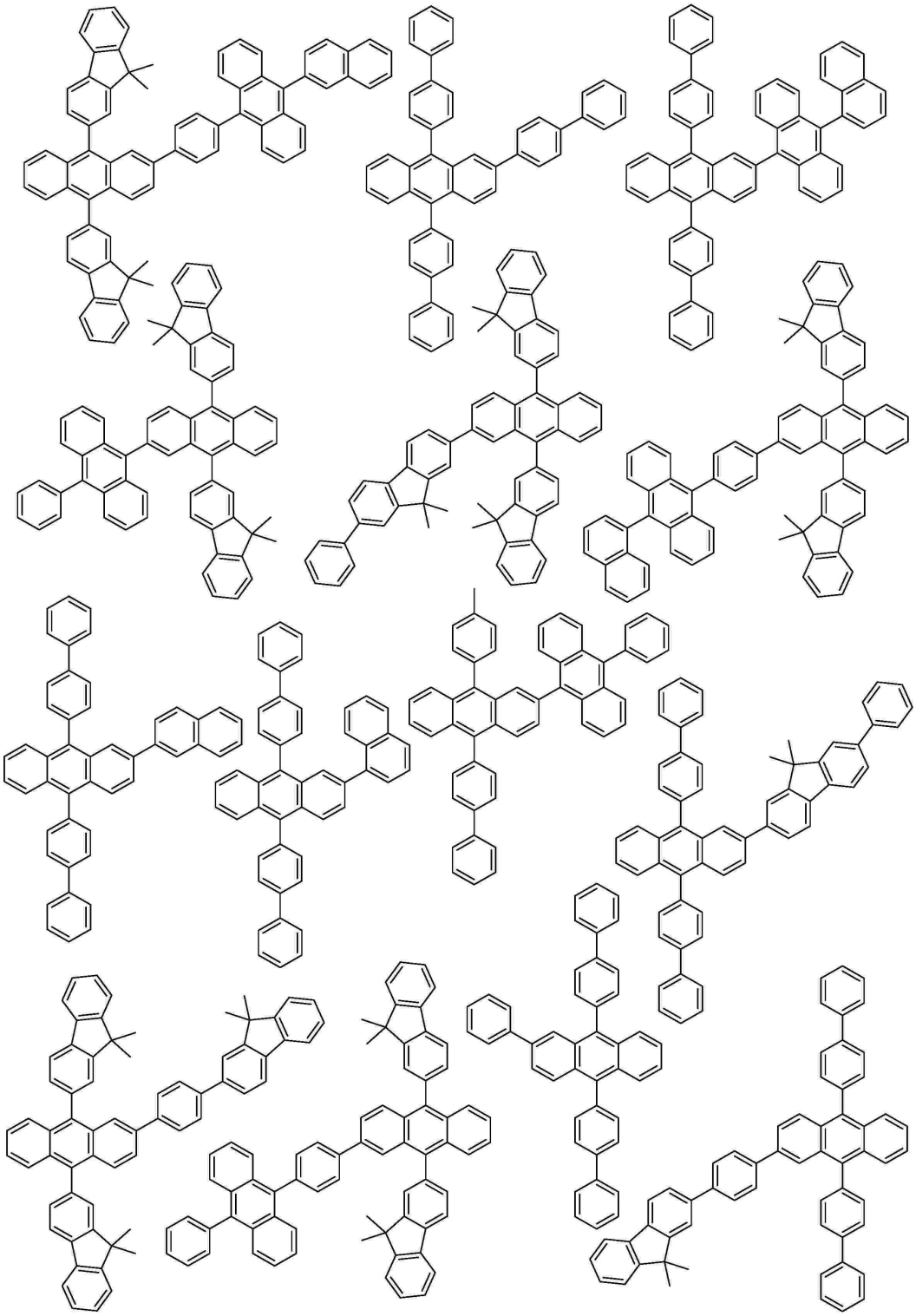

D
D
D
D
D

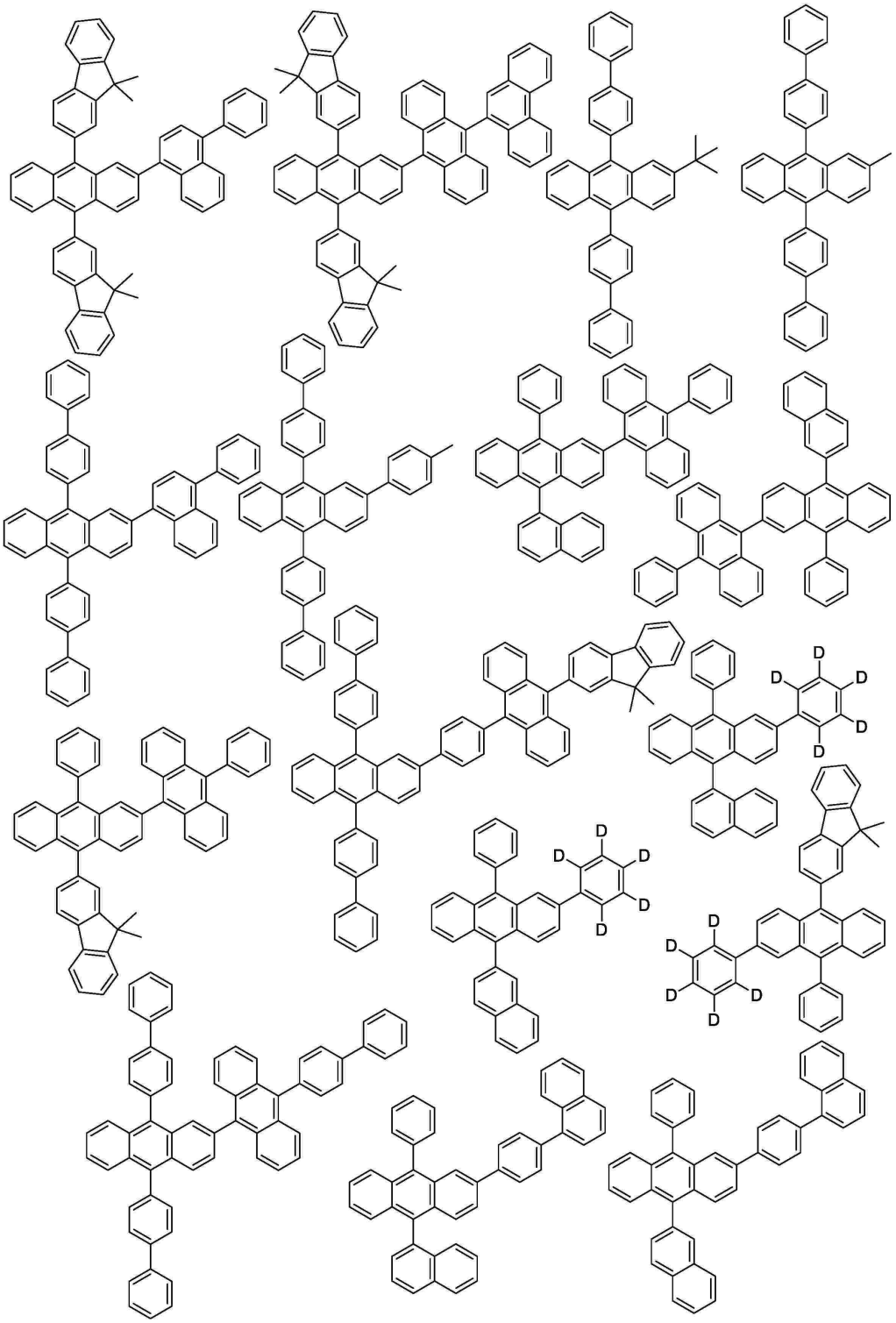


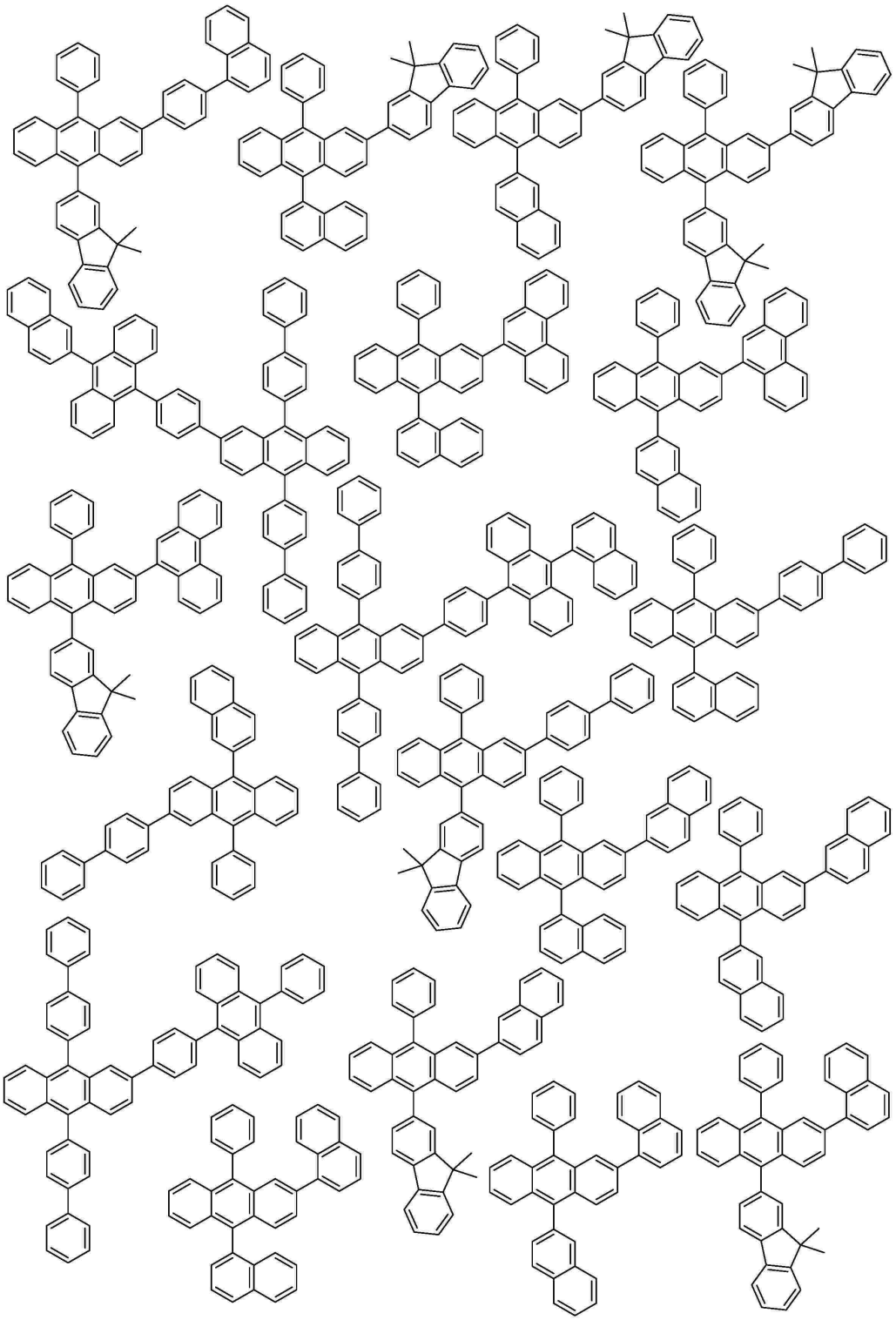

D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D

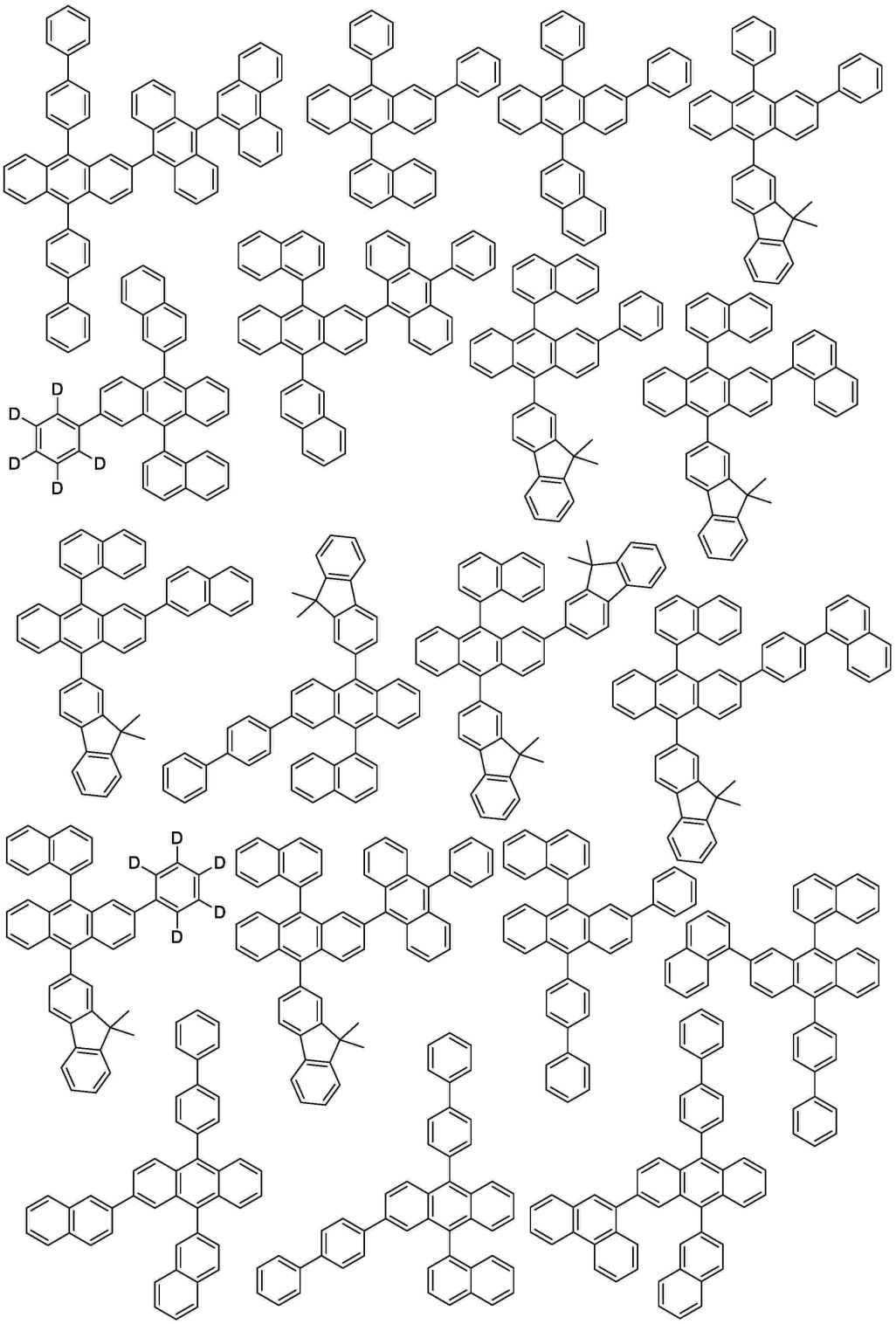


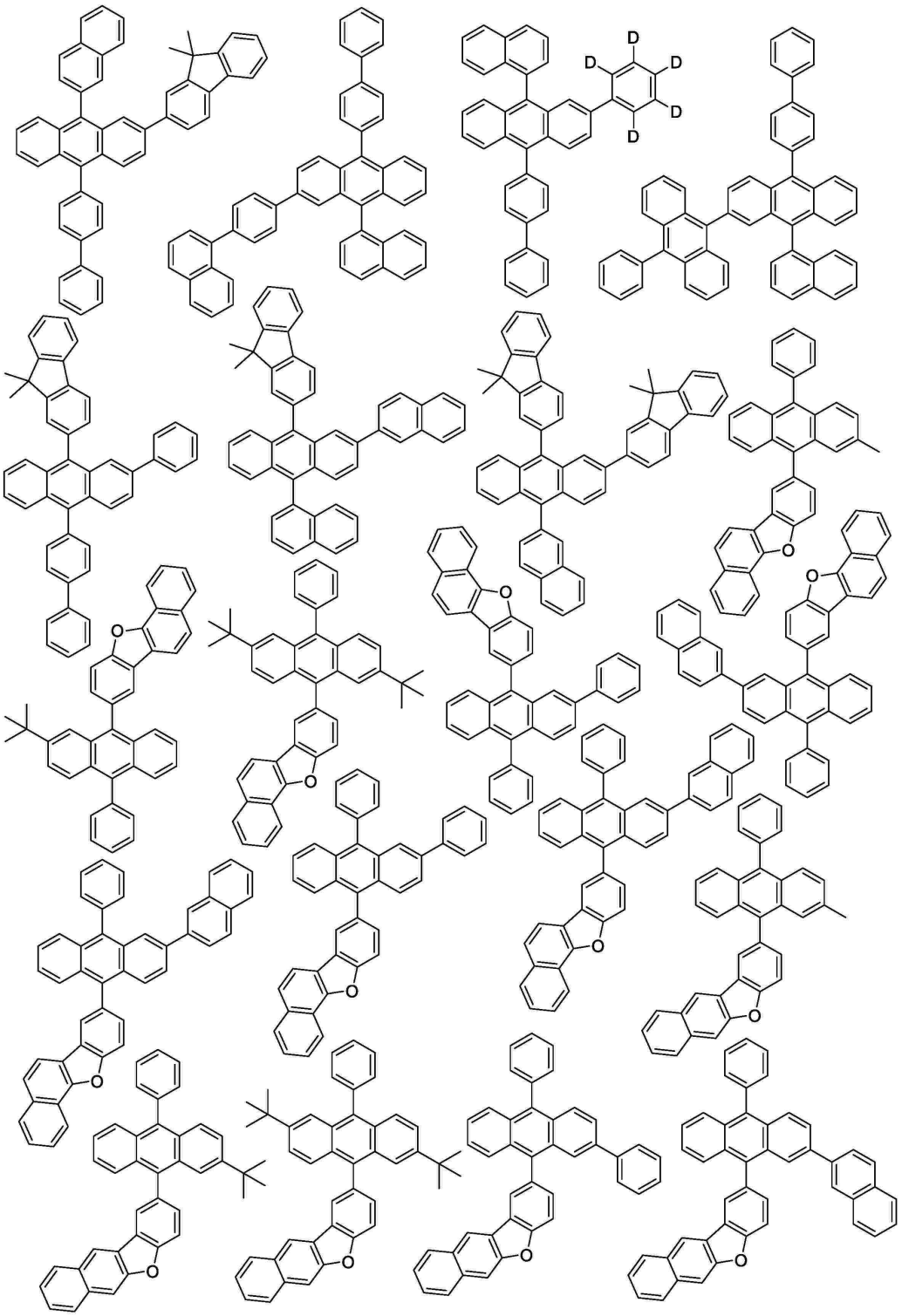

D
D
D
D
D

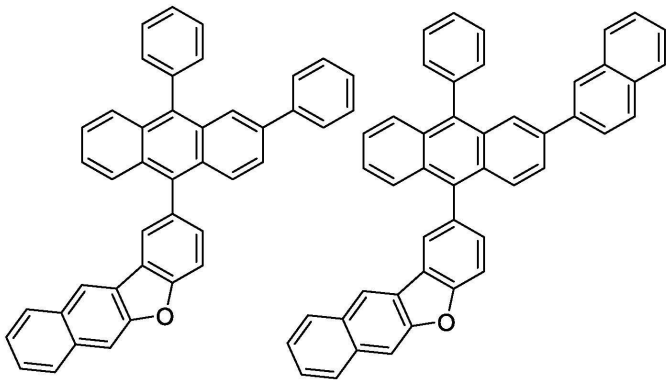



D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D
D




D
D
D
D
D
D
D
D
D


D
D
D
D
D
O
O
O
O
O
O
O
O
O
O



【０１７３】

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。

【０１７４】

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、本発明による１以上の有機分子の含量が例示的に３０％と言及する場合、これは、本発明による１以上の有機分子の（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。

【０１７５】

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。

【０１７６】

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」という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。

【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）本発明による１以上の有機分子、

（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。

【０１７８】

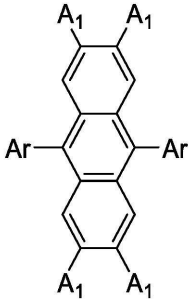
一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（ａ）本発明による１以上の有機分子、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、前記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、前記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倍以上高い。

【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）０．１～３０重量％、好ましくは、０．８～１５重量％、特に１．５～５重量％の本発明による有機分子、及び
（ｂ）下記化学式４によるホスト材料H^BとしてのＴＴＡ材料：
【０１８０】
［化学式４］



。
【０１８１】
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）本発明による有機分子、
（ｂ）（ａ）の有機分子と異なるホスト材料H^B、及び
（ｃ）ＴＡＤＦ材料E^B及び／または燐光材料P^B。
【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）０．１～２０重量％、好ましくは、０．５～１２重量％、特に１～５重量％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）１～９９．８重量％、好ましくは、５～５０重量％、特に１０～３０重量％の、（ａ）の有機分子と異なる１以上のＴＡＤＦ材料E^B、及び
（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。
【０１８３】
更なる側面において、本発明は、本明細書に記載された類型の有機分子または組成物を含む光電子素子、特に、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電気化学電池、ＯＬＥＤ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からなる群から選択された素子の形態に係わるものである。
【０１８４】
好ましい実施形態において、前記光電子素子は、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電気化学電池（ＬＥＣ）及び発光トランジスタからなる群から選択された素子である。
【０１８５】
本発明の光電子素子の一実施形態において、本発明による有機分子Ｅは、発光層ＥＭＬにおいてエミッタ材料として使用される。
【０１８６】
本発明の光電子素子の一実施形態において、発光層ＥＭＬは、本明細書に記載された本発明による組成物からなる。
【０１８７】

前記光電子素子がＯＬＥＤである場合、例えば、次のような層構造を有することができる：
１．基板
２．アノード層Ａ
３．正孔注入層（ＨＩＬ）
４．正孔輸送層（ＨＴＬ）
５．電子阻止層（ＥＢＬ）
６．発光層（ＥＭＬ）
７．正孔阻止層（ＨＢＬ）
８．電子輸送層（ＥＴＬ）
９．電子注入層（ＥＩＬ）
１０．カソード層
ここで、該ＯＬＥＤは、ＨＩＬ、ＨＴＬ、ＥＢＬ、ＨＢＬ、ＥＴＬ及びＥＩＬの群から選択された各層を選択的に含み、異なる層が併合され、該ＯＬＥＤは、前述のところで定義された各層類型のうち１層以上の層を含むものであってもよい。

【０１８８】

また、一実施形態において、前記光電子素子は、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以上の保護層を選択的に含んでもよい。

【０１８９】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、下記の逆積み層（inverted layer）構造を有するＯＬＥＤである：
１．基板
２．カソード層
３．電子注入層（ＥＩＬ）
４．電子輸送層（ＥＴＬ）
５．正孔阻止層（ＨＢＬ）
６．発光層Ｂ
７．電子阻止層（ＥＢＬ）
８．正孔輸送層（ＨＴＬ）
９．正孔注入層（ＨＩＬ）
１０．アノード層Ａ
ここで、該ＯＬＥＤは、ＨＩＬ、ＨＴＬ、ＥＢＬ、ＨＢＬ、ＥＴＬ及びＥＩＬの群から選択された各層を選択的に含み、異なる層が併合され、該ＯＬＥＤは、前述のところで定義された各層類型のうち１層以上の層を含むものであってもよい。

【０１９０】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、積層構造を有することができるＯＬＥＤである。前記構造においては、ＯＬＥＤ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ＯＬＥＤによって生成され、特に、白色光は、青色ＯＬＥＤ、緑色ＯＬＥＤ及び赤色ＯＬＥＤを積層して生成される。また、積層構造を示すＯＬＥＤは、電荷生成層（ＣＧＬ）を含んでもよく、それは、一般的に、２つのＯＬＥＤ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ＣＧＬ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。

【０１９１】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、アノードとカソードとの間に、２層以上の発光層を含むＯＬＥＤである。特に、いわゆるタンデムＯＬＥＤ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ＯＬＥＤ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。

【０１９２】

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ス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一つは（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。

【０１９３】

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、$(InO_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$）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、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ェン：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ェン（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。

【０１９４】

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、任意の正孔輸送化合物が使用されうる。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）、Ｓｐｉｒｏ－ＴＡＤ、ＤＮＴＰＤ、ＮＰＢ、ＮＰＮＰＢ、ＭｅＯ－ＴＰＤ、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（F_4－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が使用されうる。

【０１９５】

ＥＢＬは、例えば、１，３－ビス（カルバゾール－９－イル）ベンゼン（ｍＣＰ）、ＴＣＴＡ、２－ＴＮＡＴＡ、３，３－ジ（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）ビフェニル（ｍＣＢＰ）、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。

【０１９６】

正孔輸送層（ＨＴＬ）に隣接し、発光層（ＥＭＬ）が一般的に位置する。発光層（ＥＭＬ）は、少なくとも１つの発光分子を含む。特に、該ＥＭＬは、少なくとも１つの本発明による発光分子Ｅを含む。一実施形態において、発光層は、本発明による有機分子のみを含む。一般的に、ＥＭＬは、１以上のホスト材料Ｈをさらに含む。例えば、ホスト材料Ｈは、４，４’－ビス－（Ｎ－カルバゾリル）－ビフェニル（ＣＢＰ）、ｍＣＰ、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）、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。ホスト材料Ｈは、一般的に、前記有機分子の第１三重項（Ｔ１）及び第１一重項（Ｓ１）エネルギー準位よりエネルギー的にさらに高い、第１三重項（Ｔ１）及び第１一重項（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。

【０１９７】

本発明の一実施形態において、ＥＭＬは、少なくとも１つの正孔支配ホスト及び１つの電子支配ホストを有する、いわゆる、混合ホストシステムを含む。特定実施形態において、該ＥＭＬは、正確に１つの本発明による発光有機分子、電子支配ホストとしてＴ２Ｔ、及び正孔支配ホストとして、ＣＢＰ、ｍＣＰ、ｍＣＢＰ、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－ジベンゾフラニル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール及び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。更なる実施形態において、該ＥＭＬは、５０～８０重量％、好ましくは、６０～７５重量％のＣＢＰ

、ｍＣＰ、ｍＣＢＰ、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－ジベンゾフラニル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール及び９－［３，５－ビス（２－ジベンゾチオフェニル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾールから選択されたホスト、１０～４５重量％、好ましくは、１５～３０重量％のＴ２Ｔ、及び５～４０重量％、好ましくは、１０～３０重量％の本発明による発光分子を含む。

【０１９８】

発光層（ＥＭＬ）に隣接し、電子輸送層（ＥＴＬ）が位置しうる。ここで、任意の電子輸送体が使用されうる。例示的には、ベンズイミダゾール、ピリジン、トリアゾール、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。該電子輸送体は、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であってもよい。該ＥＴＬは、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）（$Ａｌｑ_{３}$）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキシド（ＴＳＰＯ１）、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、Ｌｉｑ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、正孔阻止層（ＨＢＬ）が導入される。

【０１９９】

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）、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）（$Ａｌｑ_{３}$）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキシド（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’－スピロビフルオレン－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。

【０２００】

電子輸送層（ＥＴＬ）に隣接し、カソード層Ｃが位置しうる。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、あるいはそれから構成される。

【０２０１】

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－ヒドロキシキノリンラトリチウム（Ｌｉｑ）、$Ｌｉ_{２}Ｏ$、$ＢａＦ_{２}$

、ＭｇＯ及び／またはＮａＦを含むものであってもよい。
【０２０２】
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以上のホスト化合物Ｈを含むものであってもよい。
【０２０３】
発光層ＥＭＬの発光スペクトル及び／または吸収スペクトルを追加して修正するために、発光層ＥＭＬは、１以上の追加エミッタ分子Ｆをさらに含んでもよい。そのようなエミッタ分子Ｆは、当業界に公知の任意のエミッタ分子であってもよい。好ましくは、そのようなエミッタ分子Ｆは、本発明による分子Ｅの構造と異なる構造を有する分子である。エミッタ分子Ｆは、選択的に、ＴＡＤＦエミッタであってもよい。代案としては、エミッタ分子Ｆは、選択的に、発光層ＥＭＬの発光スペクトル及び／または吸収スペクトルをシフトさせることができる蛍光性及び／またはリン光性のエミッタ分子であってもよい。例えば、三重項及び／または一重項励起子が、基底状態S_0に緩和される前に、本発明による有機エミッタ分子からエミッタ分子Ｆに伝達され、有機分子によって放出される光と比較し、典型的に、赤色偏移された光を放出することができる。選択的に、エミッタ分子Ｆは、また二光子効果（すなわち、最大吸収エネルギーの半分である２つの光子の吸収）を誘発することができる。
【０２０４】
選択的に、光電子素子（例えば、ＯＬＥＤ）は、例えば、本質的に白色光電子素子であってもよい。例えば、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。そして、選択的に、前述のように、２以上の分子間にエネルギー伝達がありうる。
【０２０５】
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。
【０２０６】
エミッタ分子と係わり、そのような色相は最大発光を示す。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、＞６２０～８００ｎｍ範囲で最大発光を有する。
【０２０７】
深青色エミッタは、好ましくは、４８０ｎｍ未満、より好ましくは、４７０ｎｍ未満、より一層好ましくは、４６５ｎｍ未満、またははなはだしくは、４６０ｎｍ未満の最大発光を有することができる。これは、一般的に、４２０ｎｍ超過、好ましくは、４３０ｎｍ超過、より好ましくは、４４０ｎｍ超過、またははなはだしくは、４５０ｎｍ超過である。
【０２０８】
緑色エミッタは、５６０ｎｍ未満、より好ましくは、５５０ｎｍ未満、より一層好ましくは、５４５ｎｍ未満、またははなはだしくは、５４０ｎｍ未満の最大発光を有する。これは、一般的に、５００ｎｍ超過、より好ましくは、５１０ｎｍ超過、より一層好ましくは、５１５ｎｍ超過、またははなはだしくは、５２０ｎｍ超過である。
【０２０９】

したがって、本発明の更なる側面は、１０００ｃｄ／ｍ^{2}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、４２０ｎｍないし５００ｎｍ、好ましくは、４３０ｎｍないし４９０ｎｍ、より好ましくは、４４０ｎｍないし４８０ｎｍ、より一層好ましくは、４５０ｎｍないし４７０ｎｍの最大発光を示し、及び／または、５００ｃｄ／ｍ^{2}において、１００ｈ超過、好ましくは、２００ｈ超過、より好ましくは、４００ｈ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ＬＴ８０値を示すＯＬＥＤに係わるものである。したがって、本発明の更なる側面は、発光が、０．４５未満、好ましくは、０．３０未満、より好ましくは、０．２０未満、より一層好ましくは、０．１５未満、またははなはだしくは、０．１０未満のＣＩＥｙ色座標を示すＯＬＥＤに係わるものである。

【０２１０】

本発明の更なる側面は、明確な色点で光を放出するＯＬＥＤに係わるものである。本発明によれば、ＯＬＥＤは、狭い発光帯域（小さいＦＷＨＭ）を有する光を放出する。一側面において、本発明によるＯＬＥＤは、０．２５ｅＶ未満、好ましくは、０．２０ｅＶ未満、より好ましくは、０．１７ｅＶ未満、より一層好ましくは、０．１５ｅＶ未満、またははなはだしくは、０．１３ｅＶ未満の主発光ピークのＦＷＨＭを有する光を放出する。

【０２１１】

本発明の更なる側面は、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（ＣＩＥｘ＝０．１３１及びＣＩＥｙ＝０．０４６）のＣＩＥｘ（＝０．１３１）及びＣＩＥｙ（＝０．０４６）の色座標に近いＣＩＥｘ及びＣＩＥｙ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ＣＩＥｘ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ＣＩＥｙ色座標を示すＯＬＥＤに係わるものである。

【０２１２】

本発明の更なる実施形態において、前記組成物は、室温で、２０％超過、好ましくは、３０％超過、より好ましくは、３５％超過、より好ましくは、４０％超過、より好ましくは、４５％超過、より好ましくは、５０％超過、より好ましくは、５５％超過、より一層好ましくは、６０％超過、またははなはだしくは、７０％超過のフォトルミネッセンス量子収率（ＰＬＱＹ）を有する。

【０２１３】

更なる側面において、本発明は、光電子部品の製造方法に係わるものである。この場合、本発明の有機分子が使用される。

【０２１４】

更なる側面において、本発明は、下記段階を含む、４４０ｎｍないし４７０ｎｍの波長範囲の光を発生させる方法に係わるものである：

（ｉ）本発明の有機分子を含む光電子素子を提供する段階、及び

（ｉｉ）前記光電子素子に電流を印加する段階。

【０２１５】

光電子素子、特に、本発明による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。したがって、少なくとも１層は、

－昇華工程によって製造されるか、

－有機気相蒸着工程によって製造されるか、

－キャリアガス昇華工程によって製造されるか、

－溶液処理またはプリントされる。

【０２１６】

本発明による光電子素子、特にＯＬＥＤを製造するのに使用される方法は、当業界に公知である。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。

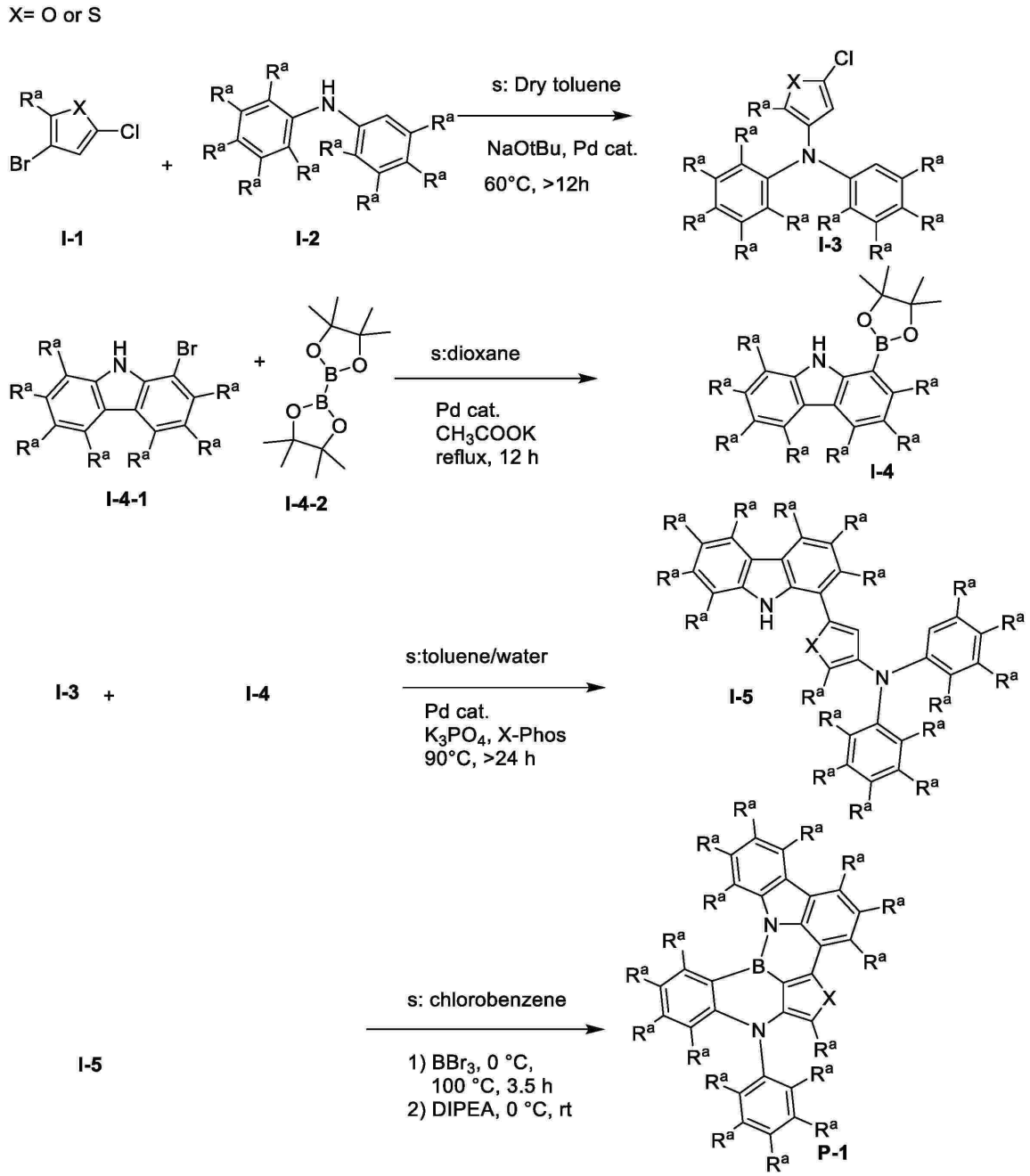
【０２１７】

例えば、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、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。

【０２１８】

実施例

一般合成方式Ｉ



【０２１９】

合成のための一般手順：

ＡＡＶ１：Ｉ－１（１．０当量；例えば、３－ブロモ－５－クロロ－２－メチルチオフェン、ＣＡＳ ６１０７４－７１－３）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）（０．０２当量；ＣＡＳ ５１３６４－５１－３）、トリ－ｔｅｒｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート（０．０９当量；ＣＡＳ１３１２７４－２２－１）、及びナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（２．０当量；ＣＡＳ８６５－４８－５）をフラスコに充電した。トルエンに溶解された脱水トルエン及びＩ－２（１．０当量；例えば、ビス（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）アミン、ＣＡＳ ４６２７－２２－９）を前記混合物に添加した。前記混合物を６０℃で１２時間以上撹拌した。冷却させた後、混合物に水を添加し、相を分離し、水分層を抽出した。合わせた有機層を収集し、$MgSO_4$で乾燥させ、Ｃｅｌｉｔｅ（登録商標）（ｋｉｅｓｅｌｇｕｈｒ）及び木炭で処理し、１時間撹拌し、シリカパッドを通じて濾過した。前記溶媒を完全に除去してＩ－３を得た。

【０２２０】

ＡＡＶ１－２：Ｉ－４－１（１．０当量）、Ｉ－４－２（１．７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（０．０２当量、ＣＡＳ－Ｎｏ．７２２８７－２６－４）及び酢酸カルシウム（ＣＡＳ－Ｎｏ．１２７－０８－２、４．５当量）の懸濁液を脱水ジオキサンにおいて１２時間還流撹拌した。冷却させた後、混合物に水を添加し、水とジオキサンとの間で抽出した。合わせた有機層を水で洗浄し、木炭／セライト／$MgSO_4$で処理し、濾過し、濃縮した。

【０２２１】

ＡＡＶ２：トルエンと水の脱気混合物（１０：３体積）内のＩ－３（１．０当量）、Ｉ－４（１．２当量）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）（０．０１当量；$Pd_2(dba)_3$；ＣＡＳ－Ｎｏ．５１３６４－５１－３）、Ｘ－Ｐｈｏｓ（０．０４当量、ＣＡＳ－Ｎｏ．５６４４８３－１８－７）及びK_3PO_4（ＣＡＳ－Ｎｏ．７７７８－５３－２、２．０当量）の懸濁液を９０℃で２４時間以上撹拌した。室温に冷却させた後、水性ウォークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィを通じて粗生成物を精製した。目標化合物Ｉ－５を固体として得た。

【０２２２】

ＡＡＶ３：０℃で、脱水クロロベンゼン（Ｉ－５　１ｍｍｏｌ当たり３５ｍＬ）内のＩ－５（１．０当量）溶液に三臭化ホウ素（９９％、ＣＡＳ－Ｎｏ．１０２９４－３３－４、４．０当量）を添加した。混合物を室温に加温した後、７０℃で３．５時間加熱した。前記混合物を室温に冷却させた。次いで、混合物を水とエチルアセテートとの間で抽出し、合わせた有機層を$MgSO_4$で乾燥させ、濾過し、濃縮した。再結晶化またはカラムクロマトグラフィを通じて精製した後、化合物Ｐ－１を固体として得た。

【０２２３】

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：０．１ｍｏｌ／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、有機分子の濃度が10^{-3}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、室温で行い、内部標準として、$FeCp_2$／$FeCp_2^+$を使用して補正する。ＨＯＭＯデータは、飽和カロメル電極（ＳＣＥ）に係わる内部標準として、フェロセンを使用して修正された。

【０２２４】

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。

【０２２５】

光物理的測定

試料前処理：スピンコーティング

装置：Ｓｐｉｎ１５０、ＳＰＳ ｅｕｒｏ

試料濃度は、適切な溶媒に溶解された１０ｍｇ／ｍｌである。

【０２２６】

プログラム：１）４００Ｕ／分で３秒、１０００Ｕ／分で２０秒（１０００Ｕｐｍ／ｓ）。３）４０００Ｕ／分で１０秒（１０００Ｕｐｍ／ｓ）。コーティング後、フィルムを７０℃で１分間乾燥させた。

【０２２７】

フォトルミネッセンス分光法及び時間相関単一光子計数（ＴＣＳＰＣ）

定常状態発光分光法は、１５０Ｗのキセノン－Ａｒｃランプ、励起及び発光単色計、Ｈ

amamatsu R928光電子増倍管及び時間相関単一光子計数オプションが装着されたModel FluoroMax-4（Horiba Scientific）を使用して測定される。標準補正フィット（standard correction fits）を使用し、発光スペクトル及び励起スペクトルを補正する。

【０２２８】

励起状態寿命は、ＦＭ－２０１３装備及びHoriba Yvon TCSPCハブと共に、ＴＣＳＰＣ方法を使用する同一システムを使用して決定される。

【０２２９】

励起光源：

ＮａｎｏＬＥＤ ３７０（波長：３７１ｎｍ、パルス持続時間：１．１ｎｓ）

ＮａｎｏＬＥＤ ２９０（波長：２９４ｎｍ、パルス持続時間：＜１ｎｓ）

ＳｐｅｃｔｒａＬＥＤ ３１０（波長：３１４ｎｍ）

ＳｐｅｃｔｒａＬＥＤ ３５５（波長：３５５ｎｍ）

データ分析（指数フィット）は、ソフトウェア製品群DataStation及びＤＡＳ６分析ソフトウェアを使用して行われる。フィット（fit）は、カイ二乗検定（chi-squared-test）を使用して特定される。

【０２３０】

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。

【０２３１】

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。

【０２３２】

ＰＬＱＹは、次のプロトコルを使用して決定される：

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。

【０２３３】

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。

【０２３４】

３）測定

量子収率は、窒素雰囲気において、溶液またはフィルム試料について測定される。収率は、次の方程式を使用して計算される：

【０２３５】

【数３】

$$\Phi_{PL} = \frac{n_{光子、発光}}{n_{光子、吸収}} = \frac{\int \frac{\lambda}{hc}\left[Int^{試料}_{発光}(\lambda) - Int^{試料}_{吸収}(\lambda)\right] d\lambda}{\int \frac{\lambda}{hc}\left[Int^{基準}_{発光}(\lambda) - Int^{基準}_{吸収}(\lambda)\right] d\lambda}$$

ここで、$n_{光子}$は、光子数を示し、Ｉｎｔは、強度を示す。

【０２３６】

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。

【０２３７】

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、ＬＴ９５は、測定輝度が、初期輝度の９５％に低減した時点に該当する。

【０２３８】

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、５００ｃｄ／ｍ^{2}において、ＬＴ８０値は、次の式を使用して決定される：

【０２３９】

【数４】

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

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。

【０２４０】

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偏差が提供される。

【０２４１】

ＨＰＬＣ－ＭＳ

ＨＰＬＣ－ＭＳ分析は、ＭＳ－検出器（Thermo LTQ XL）があるＡｇｉｌｅｎｔのＨＰＬＣ（１１００シリーズ）で行われる。

【０２４２】

例えば、典型的なＨＰＬＣ方法は、次の通りである：Ａｇｉｌｅｎｔ（ＺＯＲＢＡＸ Eclipse Plus ９５Å　Ｃ１８、４．６×１５０mm、３．５μm　ＨＰＬＣカラム）から、逆相カラム４．６mm×１５０mm、粒子サイズ３．５μmがＨＰＬＣに使用される。ＨＰＬＣ－ＭＳ測定は、以下の勾配により、室温（ｒｔ）で行われる：

【０２４３】

【表１】

流速[ml/分]	時間[分]	A[%]	B[%]	C[%]
2.5	0	40	50	10
2.5	5	40	50	10
2.5	25	10	20	70
2.5	35	10	20	70
2.5	35.01	40	50	10
2.5	40.01	40	50	10
2.5	41.01	40	50	10

【０２４４】

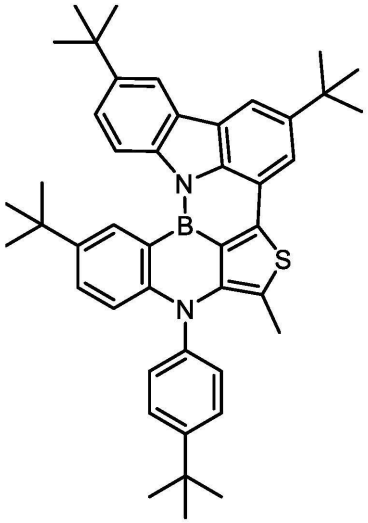
下記の溶媒混合物を使用した：

【０２４５】

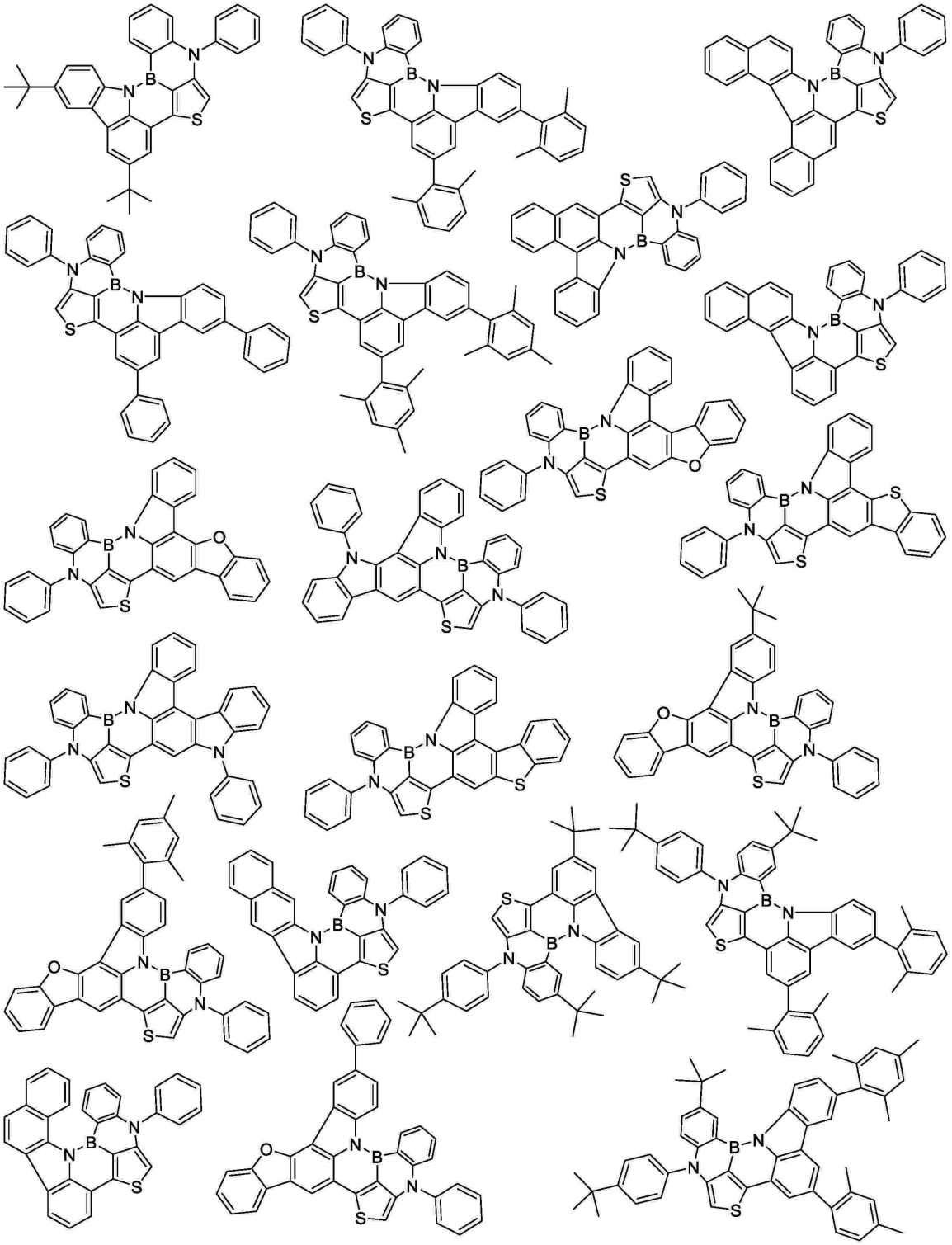
【表２】

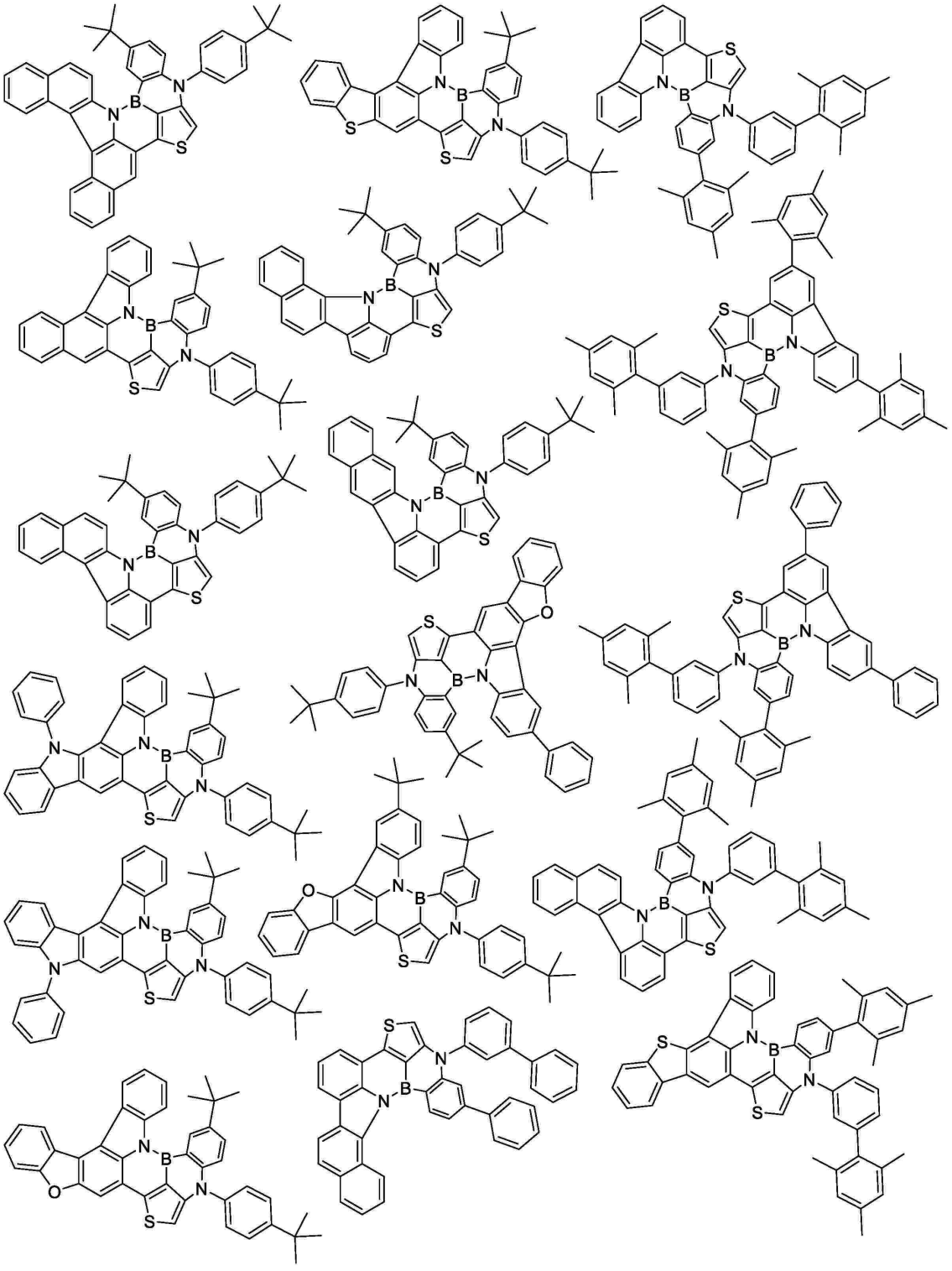
溶媒A:	H_2O (90%)	MeCN (10%)
溶媒B:	H_2O (10%)	MeCN (90%)
溶媒C:	THF (50%)	MeCN (50%)

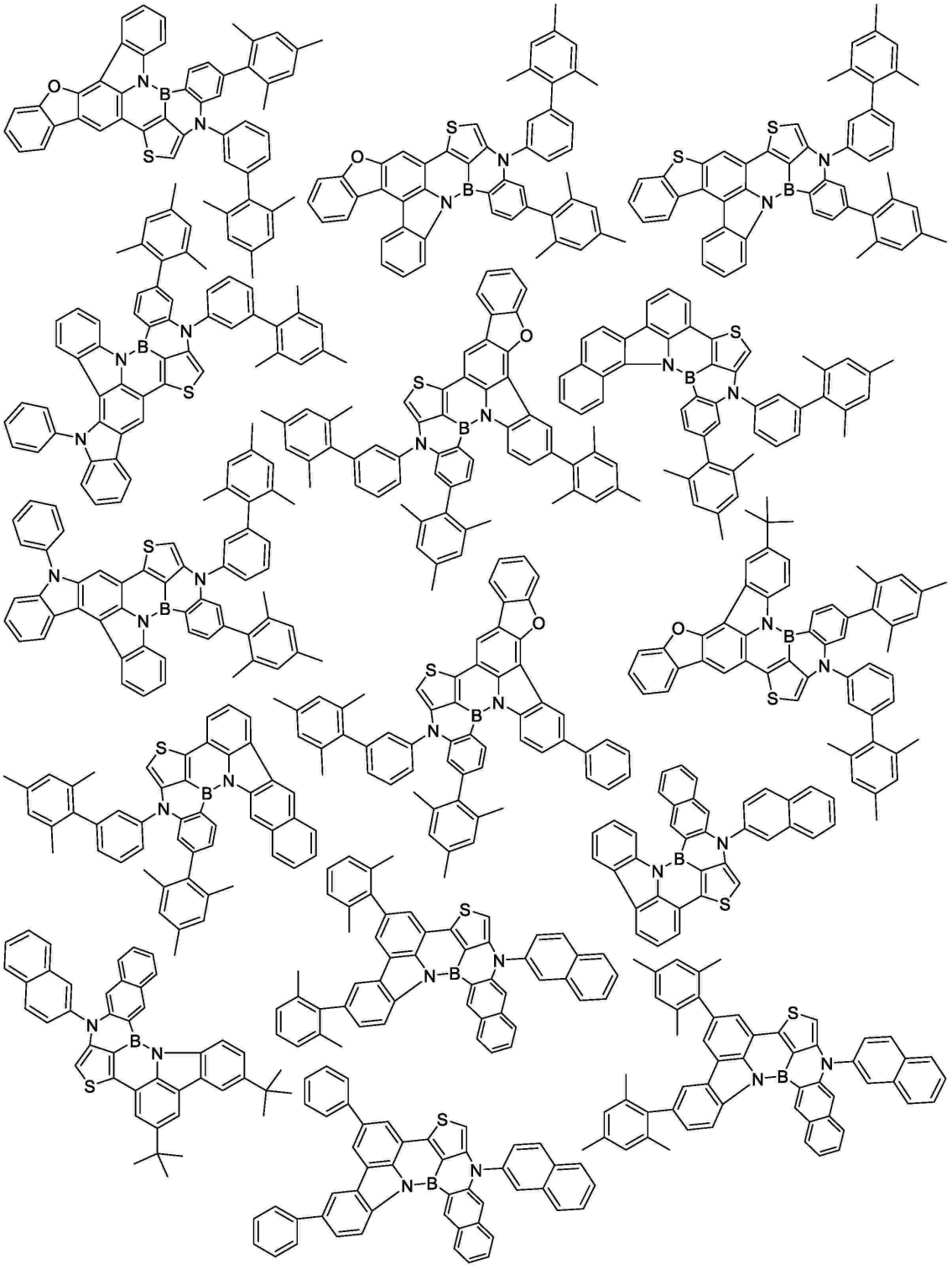
【０２４６】
０．５ｍｇ／ｍＬ濃度の分析物溶液から、注入体積５μＬを測定のために取る。
【０２４７】
プローブのイオン化は、陽（ＡＰＣＩ$^{+}$）イオン化モードまたは陰（ＡＰＣＩ$^{-}$）イオン化モードにおいて、ＡＰＣＩ（大気圧化学イオン化）ソースを使用して行われる。
【０２４８】
実施例１

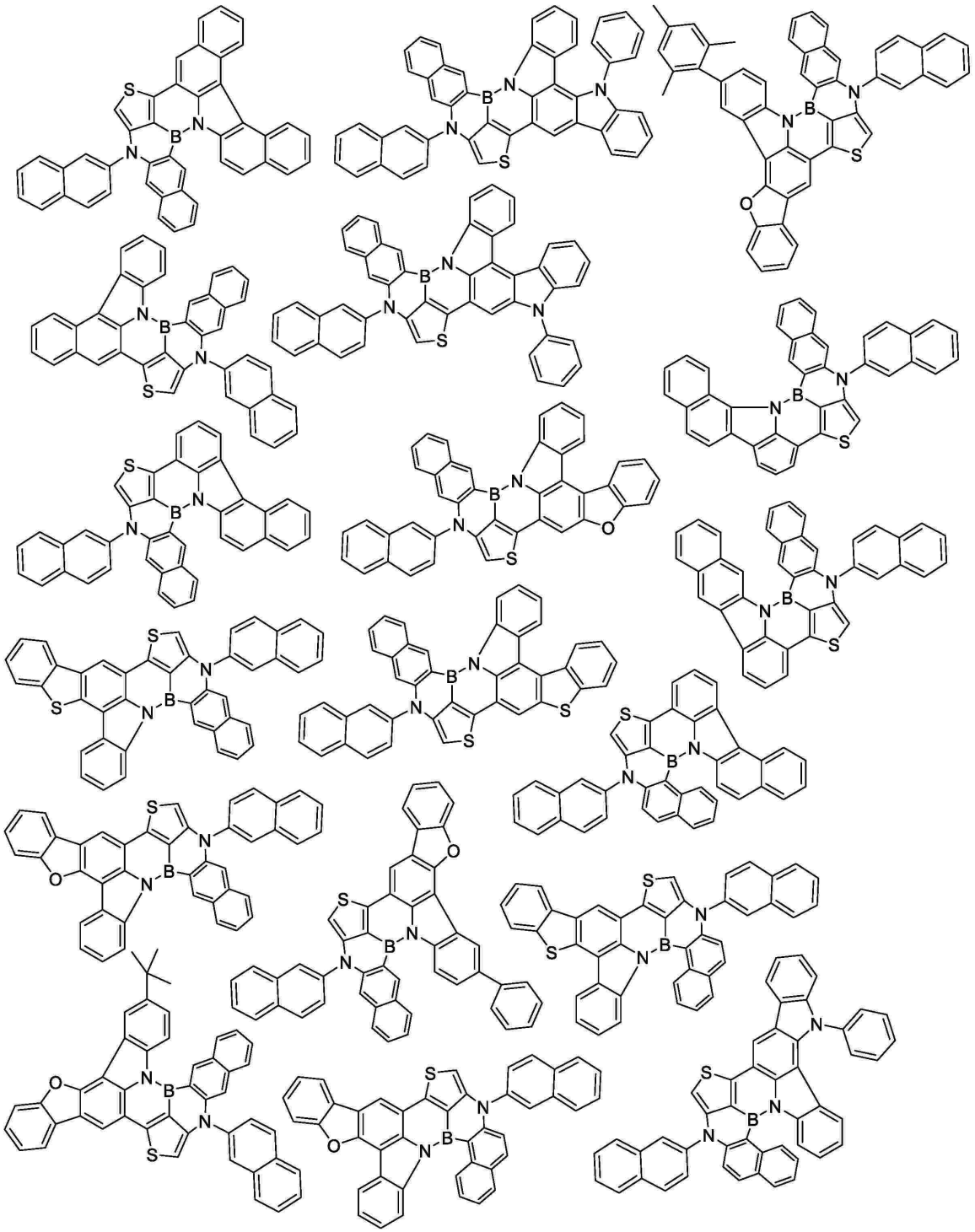


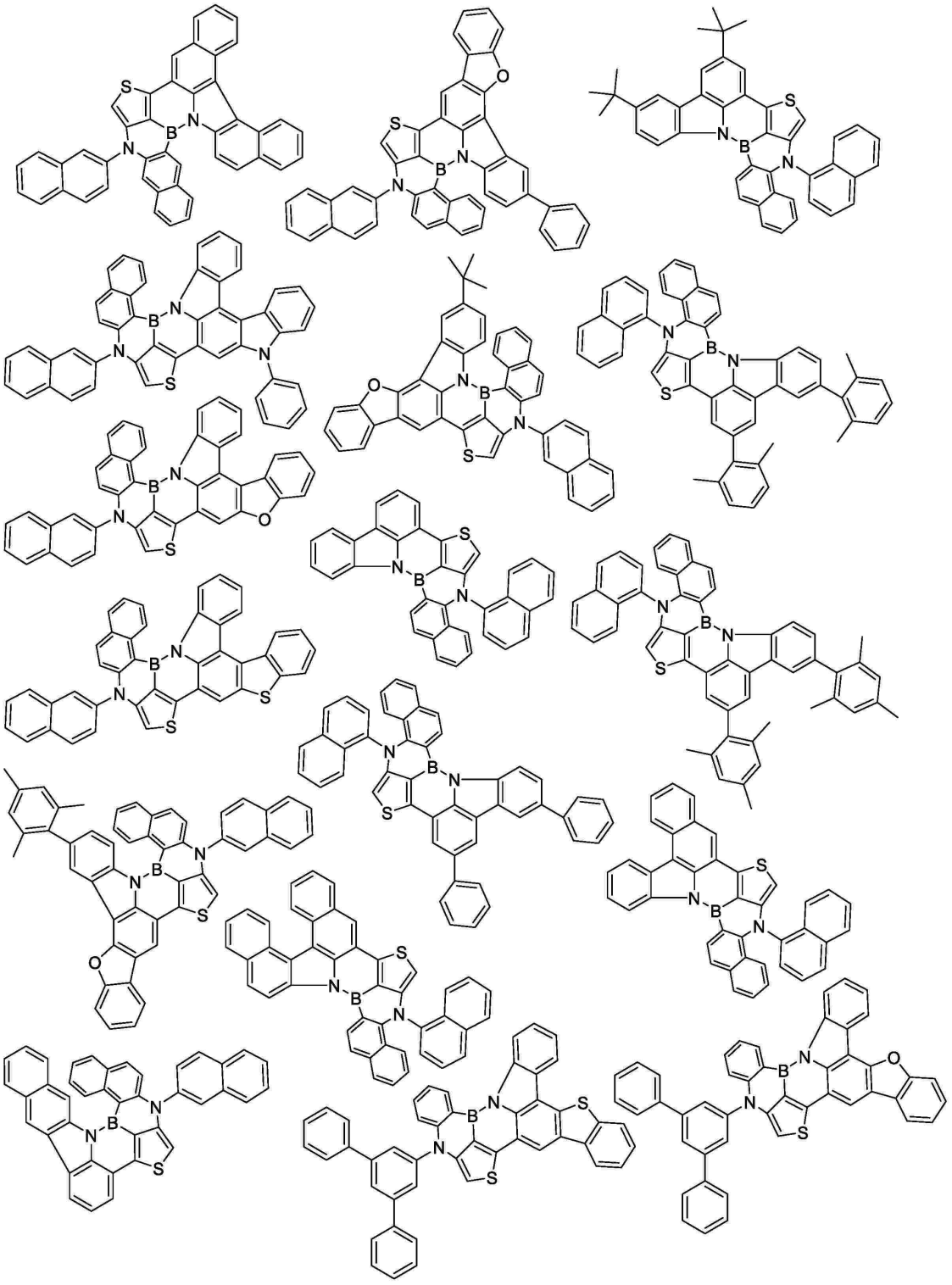
【０２４９】
実施例１を下記によって合成した：
ＡＡＶ１（５３％収率）、
ＡＡＶ２（９１％収率）、及び
ＡＡＶ３（０．５％収率）。
【０２５０】
ＭＳ（ＬＣ－ＭＳ、ＡＰＣＩイオンソース）：６６３ｍ／ｚ（滞留時間：８．５分）。
【０２５１】
実施例１（トルエン内の０．０１ｍｇ／ｍＬ）の最大発光は４９５ｎｍであり、ＣＩＥｘ座標は０．１６であり、ＣＩＥｙ座標は０．５６である。フォトルミネッセンス量子収率（ＰＬＱＹ）は４７％である。
【０２５２】
本発明の有機分子の追加例











【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2023/001612

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07F 5/02(2006.01)i; **H10K 85/60**(2023.01)i; **H10K 50/12**(2023.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i; **H10K 101/20**(2023.01)i

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)

C07F 5/02(2006.01); C09K 11/06(2006.01); H01L 51/00(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: optoelectronic device, organic light-emitting diode, organic molecules, boron, fused ring

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2021-255698 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 23 December 2021 (2021-12-23) abstract; claims 1, 4; pages 23, 32	1-3
A	KR 10-2021-0084601 A (CYNORA GMBH) 07 July 2021 (2021-07-07) claims 1-15	1-3
A	CN 112920211 A (JILIN OPTICAL AND ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD.) 08 June 2021 (2021-06-08) the whole document	1-3
A	WO 2021-214306 A1 (CYNORA GMBH) 28 October 2021 (2021-10-28) the whole document	1-3
A	CN 109422770 A (BEIJING XIA HE SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 05 March 2019 (2019-03-05) the whole document	1-3

☐ 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	Date of mailing of the international search report
01 May 2023	**01 May 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/KR2023/001612

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.: **7,10,14**
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 7, 10, 14 are regarded to be unclear because they refer to claims which do not comply with PCT Rule 6.4(a).

3. ☑ Claims Nos.: **4-6,8,9,11-13,15,16**
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Form PCT/ISA/210 (continuation of first sheet) (July 2022)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2023/001612

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO 2021-255698 A1	23 December 2021	CN 115715293 A	24 February 2023
		KR 10-2023-0026477 A	24 February 2023
KR 10-2021-0084601 A	07 July 2021	CN 113227106 A	06 August 2021
		EP 3902811 A1	03 November 2021
		EP 3902811 B1	28 December 2022
		JP 2022-514625 A	14 February 2022
		US 2022-0052265 A1	17 February 2022
		WO 2020-135953 A1	02 July 2020
CN 112920211 A	08 June 2021	None	
WO 2021-214306 A1	28 October 2021	CN 115443280 A	06 December 2022
		CN 115461348 A	09 December 2022
		CN 115461349 A	09 December 2022
		CN 115461350 A	09 December 2022
		EP 4139314 A1	01 March 2023
		EP 4139315 A1	01 March 2023
		EP 4139316 A1	01 March 2023
		EP 4139317 A1	01 March 2023
		KR 10-2023-0006858 A	11 January 2023
		KR 10-2023-0006859 A	11 January 2023
		KR 10-2023-0006860 A	11 January 2023
		KR 10-2023-0006861 A	11 January 2023
		WO 2021-214308 A1	28 October 2021
		WO 2021-214309 A1	28 October 2021
		WO 2021-214310 A1	28 October 2021
		WO 2022-223839 A1	27 October 2022
		WO 2022-223840 A1	27 October 2022
		WO 2022-223841 A1	27 October 2022
		WO 2022-223842 A2	27 October 2022
		WO 2022-223842 A3	01 December 2022
		WO 2022-223843 A2	27 October 2022
		WO 2022-223843 A3	05 January 2023
		WO 2022-223844 A1	27 October 2022
		WO 2022-223846 A1	27 October 2022
		WO 2022-223847 A1	27 October 2022
		WO 2022-223848 A1	27 October 2022
		WO 2022-223848 A9	22 December 2022
CN 109422770 A	05 March 2019	CN 109422770 B	11 March 2022
		US 10998506 B2	04 May 2021
		US 2019-0067577 A1	28 February 2019

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

フロントページの続き

(51)国際特許分類	FI	テーマコード（参考）
Ｈ１０Ｋ　50/135(2023.01)	Ｈ１０Ｋ　50/135	
Ｈ１０Ｋ　101/10　(2023.01)	Ｈ１０Ｋ　101:10	
Ｈ１０Ｋ　101/20　(2023.01)	Ｈ１０Ｋ　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

Ｆターム（参考）　3K107　AA01 BB01 BB02 BB05 CC04 CC07 CC21 DD53 DD59 DD66 DD67 DD68 DD69 DD70 FF13 FF14

4H048　AA01 AA03 AB92 VA32 VA42 VA77 VB10

【要約の続き】

