

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7359151号
(P7359151)

(45)発行日 令和5年10月11日(2023.10.11)

(24)登録日 令和5年10月2日(2023.10.2)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 F 5/02 (2006.01)

C 0 7 F 5/02

D C S P

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K 11/06

6 6 0

H 0 5 B 33/12 (2006.01)

C 0 9 K 11/06

H 1 0 K 50/10 (2023.01)

H 0 5 B 33/12

E

H 0 5 B 33/14

B

請求項の数 8 (全50頁)

(21)出願番号 特願2020-542031(P2020-542031)
 (86)(22)出願日 令和2年7月10日(2020.7.10)
 (86)国際出願番号 PCT/JP2020/027138
 (87)国際公開番号 WO2021/015020
 (87)国際公開日 令和3年1月28日(2021.1.28)
 審査請求日 令和4年1月28日(2022.1.28)
 (31)優先権主張番号 特願2019-136072(P2019-136072)
 (32)優先日 令和1年7月24日(2019.7.24)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 日本国(JP)

(73)特許権者 000003159
 東レ株式会社
 東京都中央区日本橋室町2丁目1番1号
 (74)代理人 110002147
 弁理士法人酒井国際特許事務所
 (72)発明者 小林 和紀
 滋賀県大津市園山1丁目1番1号 東レ
 株式会社 滋賀事業場内
 (72)発明者 田中 大作
 滋賀県大津市園山1丁目1番1号 東レ
 株式会社 滋賀事業場内
 (72)発明者 市橋 泰宜
 滋賀県大津市園山1丁目1番1号 東レ
 株式会社 滋賀事業場内
 審査官 前田 憲彦

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 ピロメテンハウ素錯体、色変換組成物、色変換フィルム、光源ユニット、ディスプレイおよび照明装置

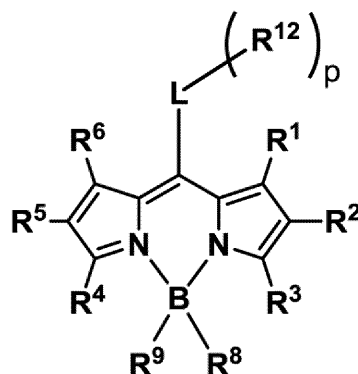
(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記の一般式(3)で表される、分子量が1000以上の化合物であり、
 前記一般式(3)における $R^1 \sim R^6$ のうち少なくとも2つは、下記の一般式(2)で表される基である、

ことを特徴とするピロメテンハウ素錯体。

【化1】



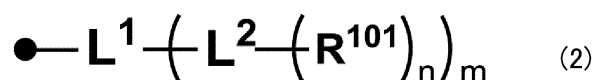
(3)

(一般式(3)において、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^8 および R^9 は、 $R^1 \sim R^6$ のうち下記の一般式(2)で表される基であるものを除き、それぞれ同じでも異なってもよく、水素原子、ア

ルキル基、シクロアルキル基、複素環基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、アルデヒド基、カルボキシル基、アシル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シロキサニル基、および隣接置換基との間に形成される縮合環の中から選ばれる。 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 のうち少なくとも1つは、アルキル基またはシクロアルキル基である。 R^2 および R^5 は、下記の一般式(2)で表される基である。 R^8 および R^9 は、シアノ基またはフッ素原子である。 R^{12} は、それぞれ独立に、アリール基またはヘテロアリール基である。 L は、アリーレン基またはヘテロアリーレン基である。 p は1～5の整数である。)

【化2】

10



(一般式(2)において、 L^1 は、それぞれ独立して、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)N<$ 、および $-S(=O)_2-$ の中から選ばれる。 L^2 は、アリーレン基である。 R^{101} は、それぞれ独立して、シアノ基、アリール基、シクロアルキル基の中から選ばれる基である。 n はそれぞれ独立して0～5の整数であり、 m はそれぞれ独立して1または2である。 m 個の $- (L^2 - (R^{101})_n)$ は、それぞれ3つ以上の環構造を含む。)

【請求項2】

前記一般式(3)において、 R^8 および R^9 のうち少なくとも1つはシアノ基である、
ことを特徴とする請求項1に記載のピロメテンハウ素錯体。

20

【請求項3】

前記一般式(3)で表される化合物は、励起光を用いることによりピーク波長が500nm以上580nm未満の領域に観測される発光を呈する、
ことを特徴とする請求項1または2に記載のピロメテンハウ素錯体。

【請求項4】

入射光を、その入射光よりも長波長の光に変換する色変換組成物であって、
請求項1～3のいずれか一つに記載のピロメテンハウ素錯体と、
バインダー樹脂と、
を含むことを特徴とする色変換組成物。

30

【請求項5】

請求項4に記載の色変換組成物またはその硬化物からなる層を含む、
ことを特徴とする色変換フィルム。

【請求項6】

光源と、
請求項5に記載の色変換フィルムと、
を備えることを特徴とする光源ユニット。

【請求項7】

請求項5に記載の色変換フィルムを備える、
ことを特徴とするディスプレイ。

40

【請求項8】

請求項5に記載の色変換フィルムを備える、
ことを特徴とする照明装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、ピロメテンハウ素錯体、色変換組成物、色変換フィルム、光源ユニット、ディスプレイおよび照明装置に関する。

【背景技術】

【0002】

50

色変換方式によるマルチカラー化技術を液晶ディスプレイや有機ＥＬディスプレイ、照明装置などへ応用することが、盛んに検討されている。色変換とは、発光体からの発光をより長波長な光へと変換することであり、例えば青色発光を緑色発光や赤色発光へと変換することを表す。この色変換機能を有する組成物（以下、「色変換組成物」という）をフィルム化し、例えば青色光源と組み合わせることにより、青色光源から、青、緑、赤色の３原色を取り出すこと、すなわち白色光を取り出すことが可能となる。このような青色光源と色変換機能を有するフィルム（以下、「色変換フィルム」という）とを組み合わせた白色光源を光源ユニットとし、この光源ユニットと、液晶駆動部分と、カラーフィルターと組み合わせることで、フルカラーディスプレイの作製が可能になる。また、液晶駆動部分が無ければ、そのまま白色光源として用いることができ、例えばＬＥＤ照明などの白色光源として応用できる。

10

【０００３】

液晶ディスプレイの課題として、色再現性の向上が挙げられる。色再現性の向上には、光源ユニットの青、緑、赤の各発光スペクトルの半値幅を狭くし、青、緑、赤各色の色純度を高めることが有効である。これを解決する手段として、無機半導体微粒子による量子ドットを色変換組成物の成分として用いる技術が提案されている（例えば、特許文献１参照）。この量子ドットを用いる技術は、確かに緑、赤色の発光スペクトルの半値幅が狭く、色再現性は向上するが、反面、量子ドットは熱、空気中の水分や酸素に弱く、耐久性が十分でなかった。

【０００４】

20

また、量子ドットの代わりに有機物の発光材料を色変換組成物の成分として用いる技術も提案されている。有機発光材料を色変換組成物の成分として用いる技術の例としては、ピロメテン誘導体を用いたもの（例えば、特許文献１および２参照）が開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００５】

【文献】特開２０１１－２４１１６０号公報

特開２０１４－１３６７７１号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

30

【０００６】

しかし、これらの有機発光材料を用いて色変換組成物を作製しても、色再現性および耐久性の向上という観点では、未だ不十分であった。特に、高色純度の緑色発光と高い耐久性とを両立できる技術が不十分であった。

【０００７】

本発明が解決しようとする課題は、液晶ディスプレイ等のディスプレイやＬＥＤ照明等の照明装置に用いられる色変換材料として好適な有機発光材料を提供し、色再現性の向上と高い耐久性とを両立させることである。

【課題を解決するための手段】

【０００８】

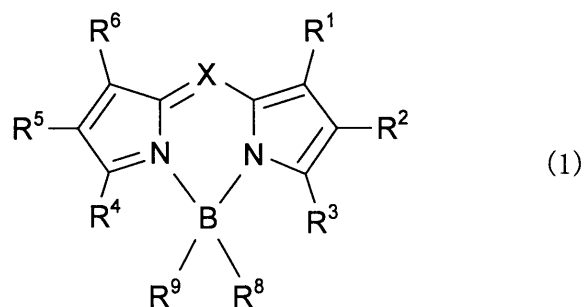
40

すなわち、上述した課題を解決し、目的を達成するために、本発明に係るピロメテンホウ素錯体は、下記の一般式（１）で表される、分子量が１０００以上の化合物であり、前記一般式（１）における $R^1 \sim R^6$ のうち少なくとも２つは、下記の一般式（２）で表される基である、ことを特徴とする。

【０００９】

50

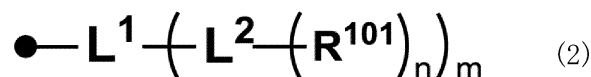
【化 1】



(一般式 (1) において、X は、C - R⁷ または N である。R¹ ~ R⁹ は、R¹ ~ R⁶ のうち下記的一般式 (2) で表される基であるものを除き、それぞれ同じでも異なってもよく、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、複素環基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、アルデヒド基、カルボニル基、カルボキシ基、アシル基、エステル基、アミド基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基、ボリル基、スルホキシド基、スルホニル基、ホスフィンオキシド基、および隣接置換基との間に形成される縮合環の中から選ばれる。)

【0010】

【化 2】



(一般式 (2) において、L¹ は、それぞれ独立して、酸素原子、窒素原子、硫黄原子、アルケニレン基、シクロアルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、カルボニル基、-C(=O)O-、-C(=O)N<、イミノ基、-S(=O)₂-、-P(=O)<の中から選ばれる。L² は、それぞれ独立して、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、複素環基、ヘテロアリーレン基の中から選ばれる。L² がアルキレン基である場合、当該アルキレン基中の L¹ に結合した炭素原子は、第二級炭素または第三級炭素である。R¹⁰¹ は、それぞれ独立して、シアノ基、アリール基、シクロアルキル基の中から選ばれる基である。n はそれぞれ独立して 0 ~ 5 の整数であり、m はそれぞれ独立して 1 ~ 5 の整数である。m 個の -(L² - (R¹⁰¹)_n) は、それぞれ 3 つ以上の環構造を含む。)

【0011】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式 (2) における L¹ は、それぞれ独立して、カルボニル基、-C(=O)O-、-C(=O)N<、-S(=O)₂-、および -P(=O)<の中から選ばれる、ことを特徴とする。

【0012】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式 (1) における R¹、R³、R⁴ および R⁶ のうち少なくとも 1 つが、アルキル基、またはシクロアルキル基である、ことを特徴とする。

【0013】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式 (2) で表される基の少なくとも 1 つでは、n が 1 ~ 5 であり、かつ、少なくとも 1 つの R¹⁰¹ がフッ素原子を含む基を有する、ことを特徴とする。

【0014】

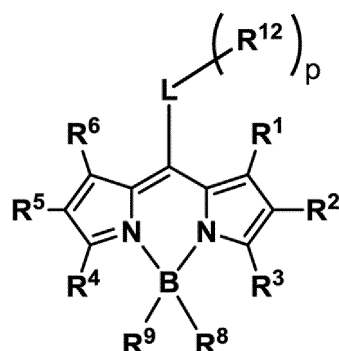
また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式 (1) における X が C - R⁷ であり、R⁷ がアリール基またはヘテロアリール基である、ことを特徴とする。

【0015】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式（1）で表される化合物が、下記的一般式（3）で表される化合物である、ことを特徴とする。

【0016】

【化3】



(3)

10

（一般式（3）において、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^8 および R^9 は、前記一般式（1）または前記一般式（2）におけるものと同様である。 R^{12} は、それぞれ独立に、アリール基またはヘテロアリール基である。L は、アリーレン基またはヘテロアリーレン基である。p は 1 ～ 5 の整数である。）

【0017】

20

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式（1）における R^8 および R^9 のうち少なくとも 1 つはシアノ基である、ことを特徴とする。

【0018】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、上記の発明において、前記一般式（1）で表される化合物は、励起光を用いることによりピーク波長が 500 nm 以上 580 nm 未満の領域に観測される発光を呈する、ことを特徴とする。

【0019】

また、本発明に係る色変換組成物は、入射光を、その入射光よりも長波長の光に変換する色変換組成物であって、上記の発明のいずれか一つに記載のピロメテンハウ素錯体と、バインダー樹脂と、を含むことを特徴とする。

30

【0020】

また、本発明に係る色変換フィルムは、上記の発明に記載の色変換組成物またはその硬化物からなる層を含む、ことを特徴とする。

【0021】

また、本発明に係る光源ユニットは、光源と、上記の発明に記載の色変換フィルムと、を備えることを特徴とする。

【0022】

また、本発明に係るディスプレイは、上記の発明に記載の色変換フィルムを備える、ことを特徴とする。

【0023】

40

また、本発明に係る照明装置は、上記の発明に記載の色変換フィルムを備える、ことを特徴とする。

【発明の効果】

【0024】

本発明によれば、色再現性の向上と高い耐久性とを両立させ得る色変換材料として好適なピロメテンハウ素錯体および色変換組成物を実現できるという効果を奏する。本発明に係るピロメテンハウ素錯体や色変換組成物を用いた色変換フィルムは、高色純度の発光と高い耐久性とが両立されているため、色再現性の向上と高い耐久性とを両立させることが可能となるという効果を奏する。本発明に係る光源ユニット、ディスプレイおよび照明装置は、このような色変換フィルムを用いるため、色再現性の向上と高い耐久性とを両立さ

50

せることが可能となるという効果を奏する。

【図面の簡単な説明】

【0025】

【図1】図1は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第一例を示す模式断面図である。

【図2】図2は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第二例を示す模式断面図である。

【図3】図3は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第三例を示す模式断面図である。

【図4】図4は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第四例を示す模式断面図である。

10

【発明を実施するための形態】

【0026】

以下、本発明に係るピロメテンハウ素錯体、色変換組成物、色変換フィルム、光源ユニット、ディスプレイおよび照明装置の好適な実施形態を具体的に説明するが、本発明は以下の実施形態に限定されるものではなく、目的や用途に応じて種々に変更して実施することができる。

【0027】

<ピロメテンハウ素錯体>

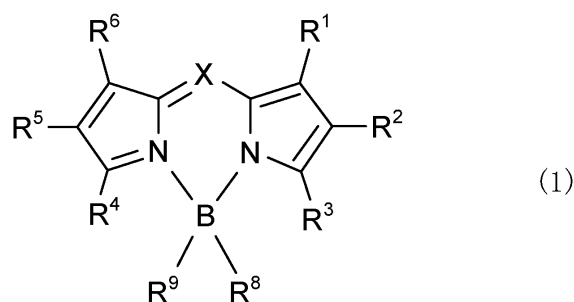
本発明の実施形態に係るピロメテンハウ素錯体について詳細に説明する。本発明の実施形態に係るピロメテンハウ素錯体は、色変換組成物や色変換フィルムなどを構成する色変換材料である。詳細には、このピロメテンハウ素錯体は、下記の一般式(1)で表される、分子量が1000以上の化合物である。かつ、このピロメテンハウ素錯体において、一般式(1)における $R^1 \sim R^6$ のうち少なくとも2つは、後述する一般式(2)で表される基である。以下、本実施形態に係るピロメテンハウ素錯体としての「一般式(1)で表される、分子量が1000以上の化合物」は、「一般式(1)で表される化合物」と略記する場合がある。まず、一般式(1)で表される化合物に着目して、本実施形態に係るピロメテンハウ素錯体を詳細に説明する。

20

【0028】

【化4】

30



【0029】

40

一般式(1)において、Xは、C- R^7 またはNである。 $R^1 \sim R^9$ は、 $R^1 \sim R^6$ のうち後述の一般式(2)で表される基であるものを除き、それぞれ同じでも異なってもよく、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、複素環基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリーールエーテル基、アリーールチオエーテル基、アリーール基、ヘテロアリーール基、ハロゲン、シアノ基、アルデヒド基、カルボニル基、カルボキシ基、アシル基、エステル基、アミド基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基、ボリル基、スルホキシド基、スルホニル基、ホスフィンオキシド基、および隣接置換基との間に形成される縮合環、の中から選ばれる。

【0030】

50

上記の全ての基において、水素は重水素であってもよい。このことは、以下に説明する化合物またはその部分構造においても同様である。また、上記の全ての基は、置換もしくは無置換の基であってもよい。以下に説明する化合物またはその部分構造においても同様に、置換もしくは無置換の化合物またはその部分構造であってもよい。以下の説明において、例えば、炭素数 6 ～ 40 の置換もしくは無置換のアリール基とは、アリール基に置換した置換基に含まれる炭素数も含めて全ての炭素数が 6 ～ 40 となるアリール基である。炭素数を規定している他の置換基も、これと同様である。

【0031】

また、上記の全ての基において、置換される場合における置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、複素環基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、アルデヒド基、カルボニル基、アシル基、エステル基、アミド基、カルボキシ基、オキシカルボニル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基、ボリル基、ホスフィンオキシド基が好ましく、さらには、各置換基の説明において好ましいとする具体的な置換基が好ましい。また、これらの置換基は、さらに上述の置換基により置換されていてもよい。

【0032】

「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは、水素原子または重水素原子が置換したことを意味する。以下に説明する化合物またはその部分構造において、「置換もしくは無置換の」という場合についても、上記と同様である。

【0033】

上記の全ての基のうち、アルキル基とは、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基等の飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。置換されている場合の追加の置換基には特に制限は無く、例えば、アルキル基、ハロゲン、アリール基、ヘテロアリール基等を挙げることができ、この点は、以下の記載にも共通する。また、アルキル基の炭素数は、特に限定されないが、入手の容易性やコストの点から、好ましくは 1 以上 20 以下、より好ましくは 1 以上 8 以下の範囲である。

【0034】

アルキレン基とは、メチル基、エチル基等の飽和脂肪族炭化水素基から導かれる 2 価以上の基を示し、これらは、置換基を有していても有していなくてもよい。好ましいアルキレン基としては、メチレン基、エチレン基、*n*-プロピレン基、イソプロピレン基、*n*-ブチレン基、ペンチレン基、ヘキシレン基が挙げられる。アルキレン基部分の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは 1 以上 20 以下、より好ましくは 1 以上 6 以下の範囲である。

【0035】

シクロアルキル基とは、例えば、シクロプロピル基、シクロヘキシル基、ノルボルニル基、アダマンチル基等の飽和脂環式炭化水素基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。アルキル基部分の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、3 以上 20 以下の範囲である。

【0036】

シクロアルキレン基とは、シクロプロピル基、シクロヘキシル基等の飽和脂環式炭化水素基から導かれる 2 価以上の基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。好ましいシクロアルキレン基としては、シクロプロピレン基、シクロヘキシレン基、ノルボルニレン基、アダマンチレン基等の飽和脂環式炭化水素基が挙げられる。シクロアルキレン基部分の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、3 以上 20 以下の範囲である。

【0037】

複素環基とは、例えば、ピラン環、ピペリジン環、環状アミド等の炭素以外の原子を環

10

20

30

40

50

内に有する脂肪族環を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。複素環基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上20以下の範囲である。

【0038】

アルケニル基とは、例えば、ビニル基、アリル基、ブタジエニル基等の二重結合を含む不飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。アルケニル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上20以下の範囲である。

【0039】

シクロアルケニル基とは、例えば、シクロペンテニル基、シクロペンタジエニル基、シクロヘキセニル基等の二重結合を含む不飽和脂環式炭化水素基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。シクロアルケニル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは3以上20以下の範囲である。

10

【0040】

アルキニル基とは、例えば、エチニル基等の三重結合を含む不飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。アルキニル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上20以下の範囲である。

【0041】

アルコキシ基とは、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基等のエーテル結合を介して脂肪族炭化水素基が結合した官能基を示し、この脂肪族炭化水素基は、置換基を有していても有していなくてもよい。アルコキシ基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上20以下の範囲である。

20

【0042】

アルキルチオ基とは、アルコキシ基のエーテル結合の酸素原子が硫黄原子に置換されたものである。アルキルチオ基の炭化水素基は、置換基を有していても有していなくてもよい。アルキルチオ基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上20以下の範囲である。

【0043】

アリールエーテル基とは、例えば、フェノキシ基等、エーテル結合を介した芳香族炭化水素基が結合した官能基を示し、芳香族炭化水素基は、置換基を有していても有していなくてもよい。アリールエーテル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、6以上40以下の範囲である。

30

【0044】

アリールチオエーテル基とは、アリールエーテル基のエーテル結合の酸素原子が硫黄原子に置換されたものである。アリールチオエーテル基における芳香族炭化水素基は、置換基を有していても有していなくてもよい。アリールチオエーテル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、6以上40以下の範囲である。

【0045】

アリール基とは、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントリル基、アントラセニル基、ベンゾフェナントリル基、ベンゾアントラセニル基、クリセニル基、ピレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾフルオランテニル基、ジベンゾアントラセニル基、ペリレニル基、ヘリセニル基等の芳香族炭化水素基を示す。中でも、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントリル基、アントラセニル基、ピレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基が好ましい。アリール基は、置換基を有していても有していなくてもよい。アリール基が置換基を有する場合、置換基同士が環状構造を形成してもよい。置換基同士が環状構造を形成したアリール基としては、例えば、スピロフルオレニル基などが挙げられる。アリール基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは6以上40以下、より好ましくは6以上30以下の範囲である。

40

【0046】

50

一般式(2)で表される基を除く $R^1 \sim R^9$ が置換もしくは無置換のアリール基の場合、アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントリル基、アントラセニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基がより好ましい。さらに好ましくは、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基であり、フェニル基が特に好ましい。なお、「一般式(2)で表される基を除く $R^1 \sim R^9$ 」は、「 $R^1 \sim R^9$ のうち、一般式(2)で表される基($R^1 \sim R^6$ のうち少なくとも2つが該当する基)を除いたもの」である。

【0047】

それぞれの置換基がさらにアリール基で置換される場合、アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントリル基、アントラセニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基がより好ましい。特に好ましくは、フェニル基である。

【0048】

ヘテロアリール基とは、例えば、ピリジル基、フラニル基、チエニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ピラジニル基、ピリミジル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、ナフチリジニル基、シンノリニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、カルボリニル基、インドロカルバゾリル基、ベンゾフロカルバゾリル基、ベンゾチエノカルバゾリル基、ジヒドロインデノカルバゾリル基、ベンゾキノリニル基、アクリジニル基、ジベンゾアクリジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イミダゾピリジル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェナントロリニル基等の、炭素以外の原子を一個または複数個環内に有する環状芳香族基を示す。ただし、ナフチリジニル基とは、1,5-ナフチリジニル基、1,6-ナフチリジニル基、1,7-ナフチリジニル基、1,8-ナフチリジニル基、2,6-ナフチリジニル基、2,7-ナフチリジニル基のいずれかを示す。ヘテロアリール基は、置換基を有していても有していなくてもよい。ヘテロアリール基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上40以下、より好ましくは2以上30以下の範囲である。

【0049】

一般式(2)で表される基を除く $R^1 \sim R^9$ が置換もしくは無置換のヘテロアリール基である場合、ヘテロアリール基としては、ピリジル基、フラニル基、チエニル基、キノリニル基、ピリミジル基、トリアジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、イミダゾピリジル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェナントロリニル基が好ましく、ピリジル基、フラニル基、チエニル基、キノリニル基がより好ましい。特に好ましくは、ピリジル基である。

【0050】

それぞれの置換基がさらにヘテロアリール基で置換される場合、ヘテロアリール基としては、ピリジル基、フラニル基、チエニル基、キノリニル基、ピリミジル基、トリアジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、イミダゾピリジル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェナントロリニル基が好ましく、ピリジル基、フラニル基、チエニル基、キノリニル基がより好ましい。特に好ましくは、ピリジル基である。

【0051】

ハロゲンとは、フッ素、塩素、臭素およびヨウ素から選ばれる原子を示す。また、カルボニル基、カルボキシ基、オキシカルボニル基、カルバモイル基は、置換基を有していても有していなくてもよい。ここで、置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等が挙げられ、これらの置換基は、さらに置換されてもよい。カルボニル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは6以上40以下の範囲である。

10

20

30

40

50

【0052】

エステル基とは、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等がエステル結合を介して結合した官能基を示し、この置換基は、さらに置換されていてもよい。エステル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上20以下の範囲である。より具体的には、エステル基として、例えば、メトキシカルボニル基等のメチルエステル基、エトキシカルボニル基等のエチルエステル基、プロポキシカルボニル基等のプロピルエステル基、ブトキシカルボニル基等のブチルエステル基、イソプロポキシメトキシカルボニル基等のイソプロピルエステル基、ヘキシロキシカルボニル基等のヘキシルエステル基、フェノキシカルボニル基等のフェニルエステル基が挙げられる。

【0053】

アミド基とは、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等の置換基がアミド結合を介して結合した官能基を示し、この置換基は、さらに置換されていてもよい。アミド基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上20以下の範囲である。より具体的には、アミド基として、メチルアミド基、エチルアミド基、プロピルアミド基、ブチルアミド基、イソプロピルアミド基、ヘキシルアミド基、フェニルアミド基等が挙げられる。

【0054】

アミノ基とは、置換もしくは無置換のアミノ基である。アミノ基は、置換基を有していても有していなくてもよく、置換する場合の置換基としては、例えば、アリール基、ヘテロアリール基、直鎖アルキル基、分岐アルキル基が挙げられる。アリール基、ヘテロアリール基としては、フェニル基、ナフチル基、ピリジル基、キノリニル基が好ましい。これらの置換基は、さらに置換されてもよい。炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上50以下、より好ましくは6以上40以下、特に好ましくは6以上30以下の範囲である。

【0055】

シリル基とは、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、tert-ブチルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基等のアルキルシリル基や、フェニルジメチルシリル基、tert-ブチルジフェニルシリル基、トリフェニルシリル基、トリナフチルシリル基等のアリールシリル基を示す。ケイ素上の置換基は、さらに置換されてもよい。シリル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。

【0056】

シロキサニル基とは、例えば、トリメチルシロキサニル基等のエーテル結合を介したケイ素化合物基を示す。ケイ素上の置換基は、さらに置換されてもよい。シロキサニル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。また、ボリル基とは、置換もしくは無置換のボリル基である。ボリル基は、置換基を有していても有していなくてもよく、置換する場合の置換基としては、例えば、アリール基、ヘテロアリール基、直鎖アルキル基、分岐アルキル基、アリールエーテル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基が挙げられる。中でも、アリール基、アリールエーテル基が好ましい。ボリル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。

【0057】

アシル基とは、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等の置換基がカルボニル結合を介して結合した官能基を示し、この置換基は、さらに置換されていてもよい。アシル基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上20以下の範囲である。より具体的には、アシル基として、アセチル基、プロピオニル基、ベンゾイル基、アクリリル基等が挙げられる。

【0058】

スルホニル基とは、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等の置換基が-S(=O)₂-結合を介して結合した官能基を示し、この置換基は、さらに置換されていてもよい。スルホニル基の炭素数は、特に限定されないが、好まし

10

20

30

40

50

くは、1以上30以下の範囲である。

【0059】

スルホキシド基とは、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等の置換基が $-S(=O)-$ 結合を介して結合した官能基を示し、この置換基は、さらに置換されていてもよい。スルホキシド基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。

【0060】

また、ホスフィンオキシド基とは、 $-P(=O)R^{10}R^{11}$ で表される基である。ホスフィンオキシド基の R^{10} および R^{11} は、一般式(1)中の $R^1 \sim R^9$ と同様に選ばれる。ホスフィンオキシド基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。

10

【0061】

一般式(1)で表される化合物は、ピロメテンハウ素錯体骨格を有する。ピロメテンハウ素錯体骨格は、強固で平面性の高い骨格である。このため、ピロメテンハウ素錯体骨格を有する一般式(1)で表される化合物は、高い発光量子収率を示し、かつ、一般式(1)で表される化合物の発光スペクトルのピーク半値幅は小さい。したがって、一般式(1)で表される化合物は、高効率の色変換と高い色純度とを達成することができる。

【0062】

また、本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、一般式(1)で表される化合物であって、その分子量は1000以上である。ピロメテンハウ素錯体が一般式(1)で表されるものの分子量が1000より小さい化合物である場合、たとえピロメテンハウ素錯体を樹脂組成物として用いたとしても、樹脂内での分子移動が盛んとなり、分子同士の凝集によって消光が生じる恐れがある。それ故、当該ピロメテンハウ素錯体では、色再現性の向上と高い耐久性との両立を達成することが困難となる。したがって、本発明に係るピロメテンハウ素錯体の分子量は、1000以上とする必要がある。本発明に係るピロメテンハウ素錯体の分子量は、1200以上であることが好ましく、1600以上であることがより好ましく、2000以上であることが特に好ましい。

20

【0063】

また、ピロメテンハウ素錯体を樹脂組成物として用いる場合、バインダー樹脂や溶媒に対する溶解性を向上させ、量子収率や耐久性をより向上させる観点から、本発明に係るピロメテンハウ素錯体の分子量は、10000以下であることが好ましい。さらに、上記の観点から、本発明に係るピロメテンハウ素錯体の分子量は、7000以下であることがより好ましく、5000以下であることが特に好ましい。

30

【0064】

また、一般式(1)において、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 のうちの少なくとも1つは、アルキル基またはシクロアルキル基であることが好ましい。何故ならば、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 のうちの少なくとも1つが上記のいずれかの基である場合、一般式(1)で表される化合物は、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 が全て水素原子である場合に比べ、より良い熱的安定性および光安定性を示すからである。

【0065】

また、一般式(1)において、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 のうちの少なくとも1つがアルキル基またはシクロアルキル基である場合、一般式(1)で表される化合物は、色純度の優れた発光を得られる。この場合、アルキル基としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基といった炭素数1~6のアルキル基が好ましい。また、シクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロヘキシル基、ノルボルニル基、アダマンチル基等の飽和脂環式炭化水素基が好ましい。このシクロアルキル基は、置換基を有していても有していなくてもよい。このシクロアルキル基におけるアルキル基部分の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、3以上20以下の範囲である。

40

【0066】

50

さらに、一般式（１）におけるアルキル基としては、熱的安定性に優れるという観点から、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基が好ましい。また、濃度消光を防ぎ、発光量子収率を向上させるという観点では、このアルキル基として、立体的にかさ高い*tert*-ブチル基がより好ましい。また、合成の容易さ、原料入手の容易さという観点から、このアルキル基として、メチル基も好ましく用いられる。一般式（１）におけるアルキル基は、置換もしくは無置換のアルキル基と、置換もしくは無置換のシクロアルキル基におけるアルキル基部分との双方を意味する。

【００６７】

また、一般式（１）において、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 の全ては、それぞれ同じでも異なってもよく、アルキル基またはシクロアルキル基であることが好ましい。何故ならば、この場合、一般式（１）で表される化合物のバインダー樹脂や溶媒への溶解性が良好になるからである。一般式（１）におけるアルキル基としては、合成の容易さ、原料入手の容易さという観点から、メチル基が好ましい。

10

【００６８】

また、一般式（１）において、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 のうちの少なくとも１つは、アリール基またはヘテロアリール基であることが好ましい。この場合、一般式（１）で表される化合物の光安定性がより向上する。一般式（１）におけるアリール基としては、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基が好ましく、中でも、フェニル基、ピフェニル基がより好ましく、フェニル基が特に好ましい。一般式（１）におけるヘテロアリール基としては、ピリジル基、キノリニル基、チエニル基が好ましく、中でも、ピリジル基、キノリニル基がより好ましく、ピリジル基が特に好ましい。

20

【００６９】

また、一般式（１）において、 R^1 、 R^3 、 R^4 および R^6 の全てが、それぞれ同じでも異なってもよく、アリール基またはヘテロアリール基であることが好ましい。何故ならば、この場合、一般式（１）で表される化合物のより良い熱的安定性および光安定性が得られるからである。

【００７０】

また、一般式（１）において、 R^1 および R^6 のうち少なくとも１つは、炭素数２以上の有機基であることがより好ましい。本発明に係るピロメテンハウ素錯体は、励起光により励起され、励起光とは異なる波長の光を発光することで光の色変換を行う。ピロメテンハウ素錯体骨格上の R^1 および R^6 のうち少なくとも１つが炭素数２以上の有機基である場合、かさ高い有機基によってピロメテンハウ素錯体のメソ位を立体的に保護することができる。これにより、ピロメテンハウ素錯体における励起および発光のサイクルの繰り返しにおいて、色変換組成物中に含まれる酸素との相互作用による、当該ピロメテンハウ素錯体のメソ位の酸化に起因する消光を抑制し、耐久性をより向上させることができる。このような炭素数２以上の有機基としては、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、ノルボルニル基、アダマンチル基が好ましい。中でも、さらに耐久性を向上させるという観点から、イソプロピル基、*tert*-ブチル基、シクロヘキシル基がより好ましい。これらの置換基は、置換基を有していてもよいし、有していなくてもよい。

30

40

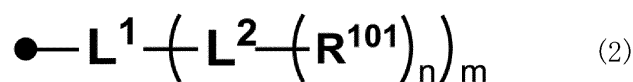
【００７１】

つぎに、一般式（２）で表される基に着目して、本発明の実施形態に係るピロメテンハウ素錯体を詳細に説明する。本実施形態では、ピロメテンハウ素錯体の耐久性を向上させるという観点から、上述した一般式（１）において、 $R^1 \sim R^6$ のうち少なくとも２つは、下記の一般式（２）で表される基である。特に、 $R^1 \sim R^6$ のうちの２つが一般式（２）で表される基であることが好ましく、 R^2 および R^5 がそれぞれ一般式（２）で表される基であることがより好ましい。一般式（２）において、 L^1 の左の黒点は、 $R^1 \sim R^6$ が結合している炭素原子を示す。

50

【0072】

【化5】



【0073】

一般式(2)において、 L^1 は、それぞれ独立して、酸素原子、窒素原子、硫黄原子、アルケニレン基、シクロアルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、カルボニル基、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)N<$ 、イミノ基、 $-S(=O)_2-$ 、 $-P(=O)<$ の中から選ばれる。 L^2 は、それぞれ独立して、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、複素環基、ヘテロアリーレン基の中から選ばれる。 L^2 がアルキレン基である場合、当該アルキレン基中の L^1 に結合した炭素原子は、第二級炭素または第三級炭素である。 R^{101} は、それぞれ独立して、シアノ基、アリール基、シクロアルキル基の中から選ばれる基である。 n はそれぞれ独立して0～5の整数であり、 m はそれぞれ独立して1～5の整数である。 m 個の $-(L^2-(R^{101})_n)$ は、それぞれ3つ以上の環構造を含む。

10

【0074】

アルケニレン基とは、ビニル基、アリル基、ブタジエニル基等の二重結合を含む不飽和脂肪族炭化水素基から導かれる2個以上の基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。好ましいアルケニレン基としては、ビニレン基、プロピニレン基、ブタジエニレン基等が挙げられる。アルケニレン基部分の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上20以下の範囲である。

20

【0075】

アリーレン基とは、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン等の芳香族炭化水素基から導かれる2個以上の基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。好ましくは、2個もしくは3個のアリーレン基である。アリーレン基としては、具体的には、フェニレン基、ビフェニレン基、ナフチレン基等が挙げられる。アリーレン基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、1以上30以下の範囲である。

【0076】

ヘテロアリーレン基とは、ピリジン、キノリン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、キノキサリン、キナゾリン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン等の炭素以外の原子を一個または複数個環内に有する芳香族基から導かれる2個以上の基を示し、これは、置換基を有していても有していなくてもよい。好ましくは、2個もしくは3個のヘテロアリーレン基である。ヘテロアリーレン基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2～30の範囲である。ヘテロアリーレン基としては、具体的には、2,6-ピリジレン基、2,5-ピリジレン基、2,4-ピリジレン基、3,5-ピリジレン基、3,6-ピリジレン基、2,4,6-ピリジレン基、2,4-ピリミジニレン基、2,5-ピリミジニレン基、4,6-ピリミジニレン基、2,4,6-ピリミジニレン基、2,4,6-トリアジニレン基、4,6-ジベンゾフラニレン基、2,6-ジベンゾフラニレン基、2,8-ジベンゾフラニレン基、3,7-ジベンゾフラニレン基等が挙げられる。

30

40

【0077】

イミノ基とは、置換もしくは無置換のイミノ基である。イミノ基は、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基等の置換基が $-NH-$ 結合を介して結合した官能基を示し、この置換基はさらに置換されていてもよい。特に、置換のイミノ基とは、 $-NH-$ 結合の水素原子の部分が置換されたものを表す。イミノ基の炭素数は、特に限定されないが、好ましくは、2以上50以下、より好ましくは6以上40以下、特に好ましくは6以上30以下の範囲である。

【0078】

また、 L^1 は、上記 L^1 の連結基のうち、任意の2つ以上の連結基を組み合わせたもの

50

であってもよい。例えば、アリーレン基および酸素原子の2つを連結させた連結基も、 L^1 とみなしてもよい。

【0079】

また、一般式(2)において、 n は0～5の整数であり、 m は1～5の整数である。この n でくくられた R^{101} は、 n がとり得る各整数について独立であり、それぞれ同じでも異なってもよい。この n が2～5のとき、 n 個の R^{101} は、それぞれ同じでも異なってもよい。また、この m が2～5のとき、 m 個の $-(L^2 - (R^{101})n)$ は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0080】

一般式(2)において、整数 m は、1または2であることが好ましく、1であることがより好ましい。一般式(2)において、整数 n は、1～3であることが好ましく、2または3であることがより好ましい。また、一般式(2)において、 $m=1$ かつ $n=2$ であること、または、 $m=1$ かつ $n=3$ であることがさらに好ましい。

【0081】

また、 L^2 が置換もしくは無置換のアルキレン基である場合、当該アルキレン基中の L^1 に直接結合した原子は、第二級炭素または第三級炭素である。当該アルキレン基中の L^1 に直接結合する L^2 の位置は、分子同士の相互作用に大きく影響する置換位置である。当該アルキレン基中の L^1 に直接結合した炭素が第一級炭素である場合、 L^1-L^2 は、立体的に空いているので分子同士が相互作用しやすくなり、凝集しやすい傾向にある。一方、当該アルキレン基中の L^1 に直接結合した炭素が第二級炭素または第三級炭素である場合、 L^1-L^2 は、その結合部位の立体反発によって分子同士が相互作用しにくく、分子同士の凝集を防ぐことができる。そのため、一般式(1)で表される化合物の耐久性をより向上させることができる。

【0082】

また、一般式(2)において、 m 個の $-(L^2 - (R^{101})n)$ は、それぞれ3つ以上の環構造を含む。この環構造としては、例えば、単環構造、縮合環構造、スピロ構造などが挙げられる。具体的には、 L^2 は、置換もしくは無置換のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基の中から選ばれる基であることが好ましい。 L^2 は、置換もしくは無置換のアリーレン基であることがより好ましい。 R^{101} は、シアノ基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基の中から選ばれる基であることが好ましい。置換のアリール基としては、上述したアリール基で挙げたものを選択できるが、置換基同士が環状構造を形成したフルオレニル基やスピロフルオレニル基等も選択することができる。また、 R^{101} は、シアノ基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基であることがより好ましい。 R^{101} は、置換もしくは無置換のアリール基であることがさらに好ましい。

【0083】

また、耐久性を向上させる観点から、一般式(2)において、例えば、 m が1である場合、1個の $-(L^2 - (R^{101})n)$ は3つ以上の環構造を含み、 m が2～5のいずれかである場合、 m 個の $-(L^2 - (R^{101})n)$ の各々は3つ以上の環構造を含む。ここで、環構造の数は、独立した環構造を1つとし、縮合環化合物の場合も環構造は1つとし、スピロ構造の場合も1つとする。独立した環構造の具体例としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、ピレン環、ピリジン環、シクロアルキル基、スピロフルオレニル基等が挙げられる。一方、ビフェニル構造は、2つのベンゼン環が単結合で共有結合されているため、環構造は2つとする。

【0084】

一般式(2)において、 m 個の $-(L^2 - (R^{101})n)$ は、各々が環構造を含むことにより、環構造を含まない場合に比べて立体的に嵩高くなり、分子同士の凝集を抑制することから、一般式(1)で表される化合物の耐久性が向上する。何故ならば、環構造を含む環式化合物は、その環構造に起因して自由度が低減し、樹脂内での分子移動を抑制す

ることができ、一般式(2)における $-(L^2 - (R^{101})_n)$ が立体障害基として働くことで、ピロメテンホウ素錯体同士で相互作用を起こすことなく、安定性がさらに向上するためであると考えられる。環構造の数は、 m がとり得る各整数について3以上20以下であることが好ましい。

【0085】

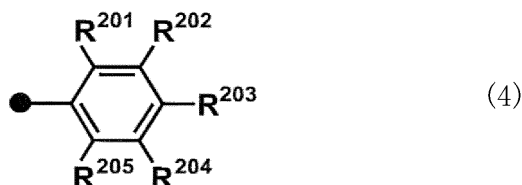
また、一般式(2)において、 $-(L^2 - (R^{101})_n)$ は、一般式(4)で表される基であることが、耐久性を向上させるという観点からより好ましい。一般式(2)において、 $-(L^2 - (R^{101})_n)$ は、一般式(4)で表される基であることにより、分子の凝集をより防ぐことができる。この結果、一般式(1)で表される化合物の耐久性をより向上させることができる。一般式(4)で表される基の $R^{201} \sim R^{205}$ は、 R^{101} 、含フッ素アルキル基、アルキル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、ハロゲン、アルデヒド基、カルボニル基、カルボキシ基、アシル基、エステル基、アミド基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基、ボリル基、スルホキシド基、スルホニル基、ホスフィンオキシド基および水素原子の中から選ばれる。また、一般式(4)で表される基において、 $R^{201} \sim R^{205}$ のうち少なくとも1つは R^{101} であることが好ましい。これら $R^{201} \sim R^{205}$ のうち2つが R^{101} であることがより好ましく、これら $R^{201} \sim R^{205}$ のうち3つが R^{101} であることが特に好ましい。

10

【0086】

【化6】

20



【0087】

一般式(4)において、 R^{201} および R^{205} のうち少なくとも1つは、アリール基であることが好ましい。 R^{201} および R^{205} のうち少なくとも1つがアリール基であることにより、一般式(4)で表される基が他の分子と相互作用しにくくなり、分子の凝集を防ぐことができる。これにより、一般式(1)で表される化合物の耐久性を向上させることができる。

30

【0088】

また、一般式(4)において、 R^{201} および R^{205} は、アリール基であることがより好ましい。 R^{201} および R^{205} がアリール基であることにより、一般式(4)で表される基の耐久性をより向上させることができる。 R^{201} および R^{205} は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0089】

一般式(2)において、 L^1 は、それぞれ独立して、カルボニル基、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)N<$ 、 $-S(=O)_2-$ 、および $-P(=O)<$ の中から選ばれることが好ましい。何故なら、これらの基は、化学的に分解しにくいからである。この場合、一般式(2)において、 n はそれぞれ独立して0~5の整数であり、 m はそれぞれ独立して1または2である。

40

【0090】

これらの中でも、より好ましい L^1 としては、カルボニル基、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)N<$ 、 $-S(=O)_2-$ が挙げられる。何故なら、これらの基は、濃度消光を防ぎ、発光量子収率を向上させる効果につながるからである。

【0091】

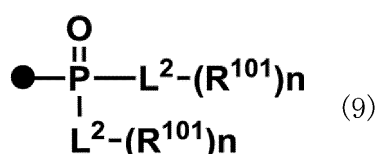
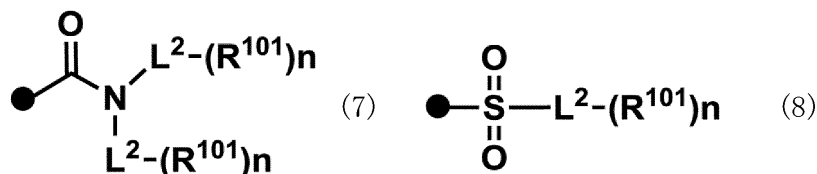
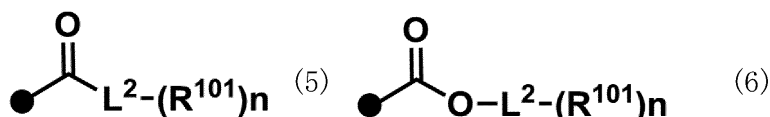
L^1 がカルボニル基、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)N<$ 、 $-S(=O)_2-$ 、 $-P(=O)<$ である場合、一般式(2)で表される基の具体例としては、例えば、一般式(

50

5) ~ (9) で各々表される基が挙げられる。

【0092】

【化7】



【0093】

また、上述した一般式(1)における $\text{R}^1 \sim \text{R}^6$ の少なくとも2つを表す複数の一般式(2)のうち少なくとも1つの一般式(2)において、 n は1~5であり、かつ、少なくとも1つの R^{101} はフッ素原子を含む基を有することが好ましい。本発明に係るピロメテンホウ素錯体は、励起光により励起され、励起光とは異なる波長の光を発光することで光の色変換を行う。フッ素原子は強い電子求引性を有するため、上記のように少なくとも1つの R^{101} がフッ素原子を含む基を有することで、ピロメテンホウ素錯体骨格の電子密度を下げるができる。これにより、一般式(1)で表される化合物の酸素に対する安定性が向上し、耐久性をより向上させることができる。

【0094】

以上より、一般式(1)で表される化合物は、分子中にピロメテンホウ素錯体骨格とフッ素原子を含む基とを有していることにより、高効率発光および高色純度と、高い耐久性とを両立することが可能となる。

【0095】

また、一般式(1)において、 X が $\text{C}-\text{R}^7$ である場合、 R^7 は、耐久性向上の観点から、アリール基またはヘテロアリール基であることが好ましい。中でも、光安定性の観点から、 R^7 は、アリール基であることが好ましい。具体的には、 R^7 として、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基がより好ましい。

【0096】

また、溶媒との相溶性を高めるという観点や発光効率を向上させるという観点から、 R^7 が置換される場合における置換基は、アルキル基またはアルコキシ基であることが好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*tert*-ブチル基またはメトキシ基であることがより好ましい。これらの置換基の中でも、分散性の観点からは、*tert*-ブチル基またはメトキシ基が特に好ましい。何故ならば、分子同士の凝集による消光を防ぐことができるからである。

【0097】

R^7 のより好ましい例としては、フェニル基が挙げられる。具体的には、フェニル基、2-トリル基、3-トリル基、4-トリル基、2-メトキシフェニル基、3-メトキシフェニル基、4-メトキシフェニル基、4-エチルフェニル基、4-*n*-プロピルフェニル基、4-イソプロピルフェニル基、4-*n*-ブチルフェニル基、4-*t*-ブチルフェニル

10

20

30

40

50

基、2,4-キシリル基、3,5-キシリル基、2,6-キシリル基、2,4-ジメトキシフェニル基、3,5-ジメトキシフェニル基、2,6-ジメトキシフェニル基、2,4,6-トリメチルフェニル基（メシチル基）、2,4,6-トリメトキシフェニル基、フルオレニル基等が挙げられる。

【0098】

また、一般式（1）で表される化合物の酸素に対する安定性の向上によって耐久性を向上させるという観点から、 R^7 が置換される場合における置換基としては、電子求引基が好ましい。好ましい電子求引基としては、フッ素、含フッ素アルキル基、アシル基、エステル基、アミド基、スルホニル基、ニトロ基、シリル基、シアノ基または芳香族複素環基等が挙げられる。

【0099】

R^7 のさらに好ましい例としては、フルオロフェニル基、トリフルオロメチルフェニル基、カルボキシラートフェニル基、アシルフェニル基、アミドフェニル基、スルホニルフェニル基、ニトロフェニル基、シリルフェニル基またはベンゾニトリル基が挙げられる。より具体的には、2-フルオロフェニル基、3-フルオロフェニル基、4-フルオロフェニル基、2,3-ジフルオロフェニル基、2,4-ジフルオロフェニル基、2,5-ジフルオロフェニル基、2,6-ジフルオロフェニル基、3,5-ジフルオロフェニル基、2,3,4-トリフルオロフェニル基、2,3,5-トリフルオロフェニル基、2,4,5-トリフルオロフェニル基、2,4,6-トリフルオロフェニル基、2,3,4,5-テトラフルオロフェニル基、2,3,4,6-テトラフルオロフェニル基、2,3,5,6-テトラフルオロフェニル基、2,3,4,5,6-ペンタフルオロフェニル基、2-トリフルオロメチルフェニル基、3-トリフルオロメチルフェニル基、4-トリフルオロメチルフェニル基、2,3-ビス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,4-ビス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,5-ビス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,6-ジビス（トリフルオロメチル）フェニル基、3,5-ビス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,4-トリス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,5-トリス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,4,5-トリス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,4,6-トリス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,4,5-テトラキス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,4,6-テトラキス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,5,6-テトラキス（トリフルオロメチル）フェニル基、2,3,4,5,6-ペンタ（トリフルオロメチル）フェニル基、2-メトキシカルボニルフェニル基、3-メトキシカルボニルフェニル基、4-メトキシカルボニルフェニル基、3,5-ビス（メトキシカルボニル）フェニル基、4-ニトロフェニル基、4-トリメチルシリルフェニル基、3,5-ビス（トリメチルシリル）フェニル基または4-ベンゾニトリル基が挙げられる。これらの中でも、より好ましいものは、3-メトキシカルボニルフェニル基、4-メトキシカルボニルフェニル基、3,5-ビス（メトキシカルボニル）フェニル基、3-トリフルオロメチルフェニル基、4-トリフルオロメチルフェニル基、3,5-ビス（トリフルオロメチル）フェニル基である。

【0100】

一般式（1）で表される化合物のさらに好ましい例（第1例）としては、下記の一般式（3）で表される構造の化合物が挙げられる。

【0101】

10

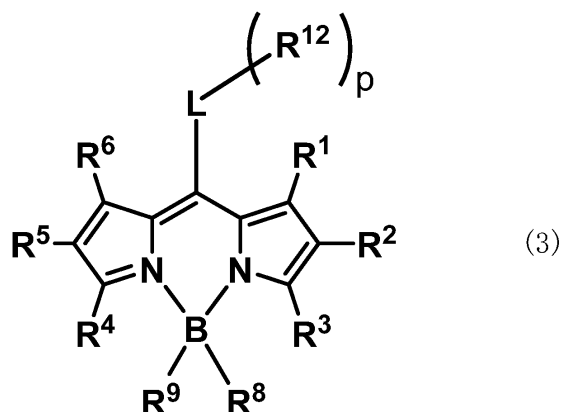
20

30

40

50

【化 8】



10

【0102】

一般式(3)において、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^8 および R^9 は、一般式(1)におけるものと同様である。 R^{12} は、 p がとり得る各整数についてそれぞれ独立に、アリール基またはヘテロアリール基である。 L は、アリーレン基またはヘテロアリーレン基である。 p は1～5の整数である。 p が2～5のとき、 R^{12} は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0103】

一般式(3)で表される化合物に L として含まれるアリーレン基またはヘテロアリーレン基は、適度なかさ高さを有することにより、分子の凝集を防ぐことができる。この結果、一般式(3)で表される化合物の発光効率や耐久性がより向上する。

20

【0104】

一般式(3)において、 L は、光安定性の観点から、アリーレン基であることが好ましい。 L がアリーレン基である場合、発光波長を損なうことなく、分子の凝集を防ぐことができる。この結果、一般式(3)で表される化合物の耐久性を向上させることができる。具体的には、このアリーレン基として、フェニレン基、ビフェニレン基、ナフチレン基が好ましい。

【0105】

一般式(3)において、 R^{12} は、光安定性の観点から、アリール基であることが好ましい。 R^{12} がアリール基である場合、発光波長を損なうことなく、分子の凝集を防ぐことができる。この結果、一般式(3)で表される化合物の耐久性を向上させることができる。具体的には、このアリール基として、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基がより好ましい。

30

【0106】

また、溶媒との相溶性を高めるという観点や発光効率を向上させるという観点から、 L および R^{12} が置換される場合における置換基としては、アルキル基またはアルコキシ基が好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*tert*-ブチル基、メトキシ基がより好ましい。これらの中でも、分散性の観点からは、*tert*-ブチル基、メトキシ基が特に好ましい。何故ならば、分子同士の凝集による消光を防ぐことができるからである。

40

【0107】

このような基が置換する観点からの、 R^{12} の特に好ましい例としては、フェニル基が挙げられる。具体的には、フェニル基、2-トリル基、3-トリル基、4-トリル基、2-メトキシフェニル基、3-メトキシフェニル基、4-メトキシフェニル基、4-エチルフェニル基、4-*n*-プロピルフェニル基、4-イソプロピルフェニル基、4-*n*-ブチルフェニル基、4-*tert*-ブチルフェニル基、2,4-キシリル基、3,5-キシリル基、2,6-キシリル基、2,4-ジメトキシフェニル基、3,5-ジメトキシフェニル基、2,6-ジメトキシフェニル基、2,4,6-トリメチルフェニル基(メシチル基)、2,4,6-トリメトキシフェニル基、フルオレニル基等が挙げられる。

【0108】

50

また、一般式(3)で表される化合物の酸素に対する安定性の向上によって耐久性を向上させるという観点から、Lおよび $R^{1,2}$ が置換される場合における置換基としては、電子求引基が好ましい。好ましい電子求引基としては、フッ素原子、含フッ素アルキル基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、エステル基、アミド基、スルホニル基、ニトロ基、シリル基、シアノ基または芳香族複素環基等が挙げられる。

【0109】

電子求引基が置換する観点からの、 $R^{1,2}$ の特に好ましい例としては、フルオロフェニル基、トリフルオロメチルフェニル基、アルコキシカルボニルフェニル基、アリールオキシカルボニルフェニル基、アシルフェニル基、アミドフェニル基、スルホニルフェニル基、ニトロフェニル基、シリルフェニル基またはベンゾニトリル基が挙げられる。より具体的には、フッ素原子、トリフルオロメチル基、シアノ基、メトキシカルボニル基、アミド基、アシル基、ニトロ基、2-フルオロフェニル基、3-フルオロフェニル基、4-フルオロフェニル基、2,3-ジフルオロフェニル基、2,4-ジフルオロフェニル基、2,5-ジフルオロフェニル基、2,6-ジフルオロフェニル基、3,5-ジフルオロフェニル基、2,3,4-トリフルオロフェニル基、2,3,5-トリフルオロフェニル基、2,4,5-トリフルオロフェニル基、2,4,6-トリフルオロフェニル基、2,3,4,5-テトラフルオロフェニル基、2,3,4,6-テトラフルオロフェニル基、2,3,5,6-テトラフルオロフェニル基、2,3,4,5,6-ペンタフルオロフェニル基、2-トリフルオロメチルフェニル基、3-トリフルオロメチルフェニル基、4-トリフルオロメチルフェニル基、2,3-ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,6-ジビス(トリフルオロメチル)フェニル基、3,5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,4-トリス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,5-トリス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,4,5-トリス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,4,6-トリス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,4,5-テトラキス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,4,6-テトラキス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,5,6-テトラキス(トリフルオロメチル)フェニル基、2,3,4,5,6-ペンタ(トリフルオロメチル)フェニル基、2-メトキシカルボニルフェニル基、3-メトキシカルボニルフェニル基、4-メトキシカルボニルフェニル基、3,5-ビス(メトキシカルボニル)フェニル基、4-ニトロフェニル基、4-トリメチルシリルフェニル基、3,5-ビス(トリメチルシリル)フェニル基または4-ベンゾニトリル基が挙げられる。これらの中でも、より好ましいものは、4-メトキシカルボニルフェニル基、3,5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル基である。

【0110】

より高い発光量子収率を与えるという観点、より熱分解しづらいという観点、および光安定性の観点から、一般式(3)のLは、フェニレン基であることが好ましい。

【0111】

一般式(3)において、整数pは、1または2であることが好ましく、2であることがより好ましい。すなわち、一般式(3)で表される化合物には、 $R^{1,2}$ が1つもしくは2つ含まれることが好ましく、 $R^{1,2}$ が2つ含まれることがより好ましい。嵩高い置換基もしくは電子求引基をもつ $R^{1,2}$ が一般式(3)で表される化合物に1つもしくは2つ、より好ましくは2つ含まれることにより、一般式(3)で表される化合物の高い発光量子収率を維持したまま、耐久性を向上させることができる。整数pが2である場合、 $R^{1,2}$ は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0112】

また、一般式(1)で表される化合物のさらに好ましい例(第2例)としては、下記の一般式(10)で表される構造の化合物が挙げられる。

【0113】

10

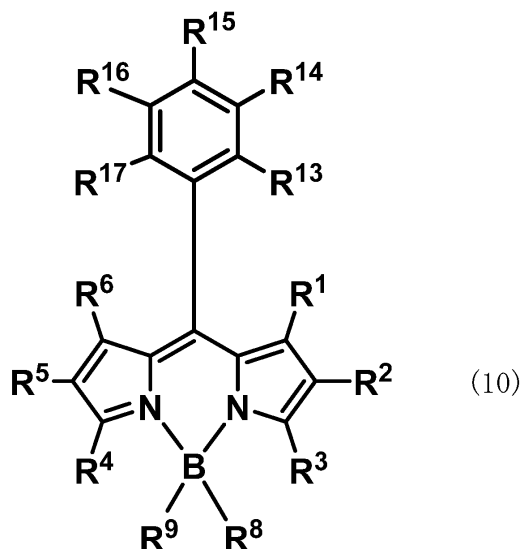
20

30

40

50

【化 9】



【0114】

一般式(10)において、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^8 および R^9 は、一般式(3)におけるものと同様である。 $R^{13} \sim R^{17}$ は、アリール基、ヘテロアリール基、含フッ素アルキル基、アルキル基、水酸基、チオール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、ハロゲン、アルデヒド基、カルボニル基、カルボキシ基、アシル基、エステル基、アミド基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基、ポリル基、スルホキシド基、スルホニル基、ホスフィンオキシド基および水素原子の中から選ばれる。 $R^{13} \sim R^{17}$ は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0115】

一般式(10)において、 R^{14} および R^{16} のうち少なくとも1つは、アリール基またはヘテロアリール基であることが好ましい。 R^{14} および R^{16} のうち少なくとも1つがアリール基またはヘテロアリール基である場合、一般式(10)で表される化合物は、適度なかさ高さを有することにより、分子の凝集を防ぐことができる。この結果、一般式(10)で表される化合物の発光効率や耐久性をより向上させることができる。

【0116】

また、 R^{14} および R^{16} は、双方とも、アリール基またはヘテロアリール基であることがより好ましい。 R^{14} および R^{16} が双方ともアリール基またはヘテロアリール基である場合、一般式(10)で表される化合物の分子全体がよりかさ高くなり、これにより、分子の凝集をより防ぐことができる。この結果、一般式(10)で表される化合物の発光効率や耐久性をより一層向上させることができる。

【0117】

また、一般式(10)において、 R^{13} および R^{17} のうち少なくとも1つは、アリール基またはヘテロアリール基であることが好ましい。 R^{13} および R^{17} のうち少なくとも1つがアリール基またはヘテロアリール基である場合、一般式(10)で表される化合物は、他の分子と相互作用しにくくなり、これにより、分子の凝集を防ぐことができる。この結果、一般式(10)で表される化合物の耐久性をより向上させることができる。

【0118】

また、 R^{13} および R^{17} は、双方とも、アリール基またはヘテロアリール基であることがより好ましい。 R^{13} および R^{17} が双方ともアリール基またはヘテロアリール基であることにより、一般式(10)で表される化合物の耐久性をより一層向上させることができる。 R^{13} および R^{17} は、それぞれ同じでも異なってもよい。

【0119】

また、一般式(1)において、 R^8 および R^9 のうち少なくとも1つは、シアノ基であることが好ましい。

【0120】

さらに、一般式(1)において、 R^8 および R^9 は、いずれもシアノ基であることが好ましい。この場合、ピロメテンハウ素錯体骨格のハウ素原子上に2つのシアノ基を導入することになるから、ピロメテンハウ素錯体骨格の電子密度をさらに下げることができる。これにより、一般式(1)で表される化合物の酸素に対する安定性がさらに向上し、この結果、一般式(1)で表される化合物の耐久性を大幅に向上させることができる。

【0121】

一般式(1)において、 R^8 および R^9 は、上述したようにシアノ基であることが好ましいが、シアノ基以外の基では、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、含フッ素アルキル基、含フッ素ヘテロアリール基、含フッ素アリール基、含フッ素アルコキシ基、含フッ素アリールオキシ基であることが好ましい。励起光に対して安定でより高い発光量子収率が得られるという観点から、 R^8 および R^9 は、フッ素原子、含フッ素アルキル基、含フッ素アルコキシ基または含フッ素アリール基であることがより好ましい。これらの中でも、合成の容易さの観点から、 R^8 および R^9 は、フッ素原子であることがさらに好ましい。

【0122】

以上より、一般式(1)で表される化合物は、分子量が1000以上であるピロメテンハウ素錯体骨格を有していることにより、高効率発光、高色純度、および高い耐久性を両立させることが可能となる。また、一般式(1)で表される化合物は、高い発光量子収率を示し、かつ、発光スペクトルのピーク半値幅が小さいため、効率的な色変換と高い色純度とを達成することができる。さらに、一般式(1)で表される化合物は、適切な置換基を適切な位置に導入することで、発光効率、色純度、熱的安定性、光安定性、および分散性などのさまざまな特性および物性を調整することができる。

【0123】

以下に、一般式(1)で表される化合物の一例を示すが、一般式(1)で表される化合物は、これらに限定されるものではない。

【0124】

10

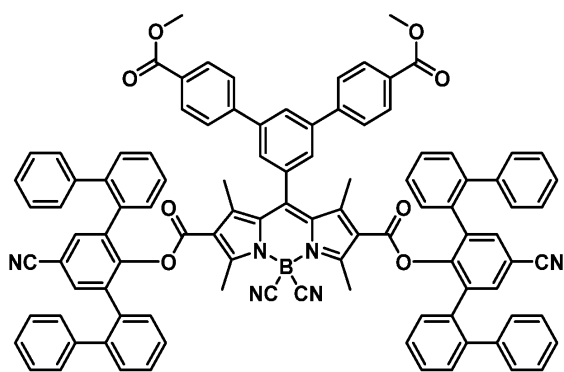
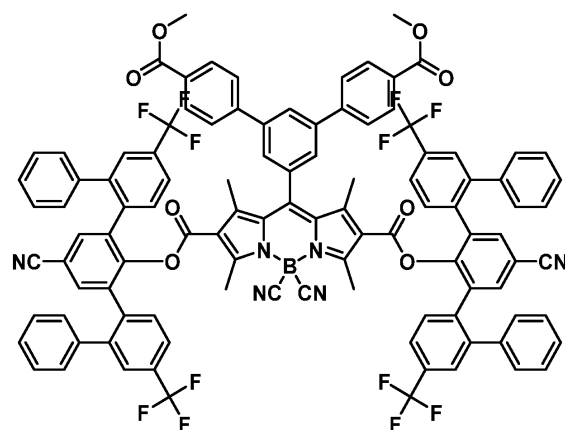
20

30

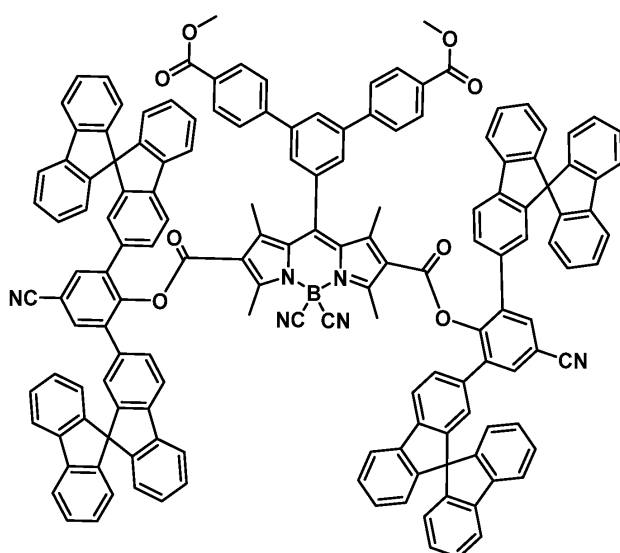
40

50

【化 1 0】

**Molecular Weight: 1505.51****Molecular Weight: 1777.50**

10

**Molecular Weight: 2154.27**

20

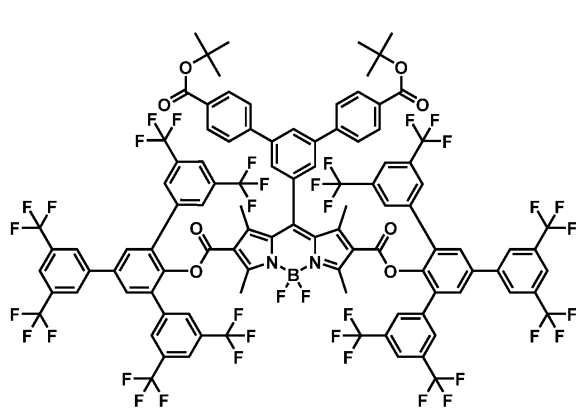
30

【 0 1 2 5】

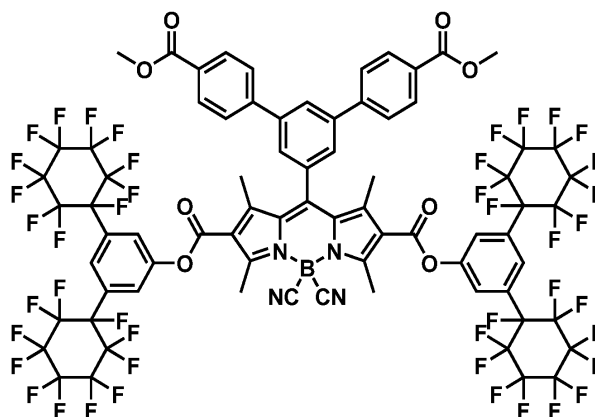
40

50

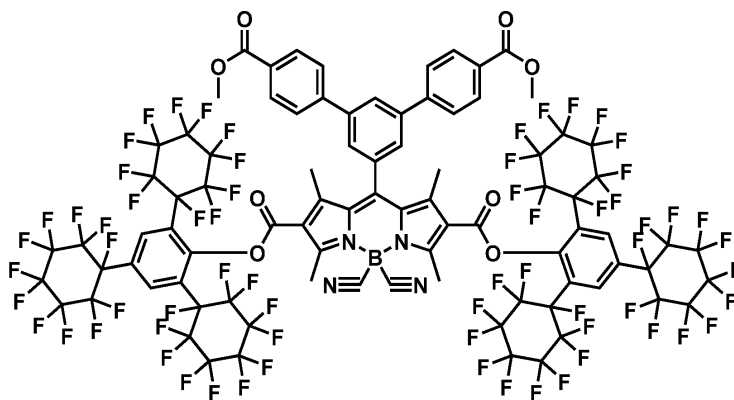
【化 1 1】



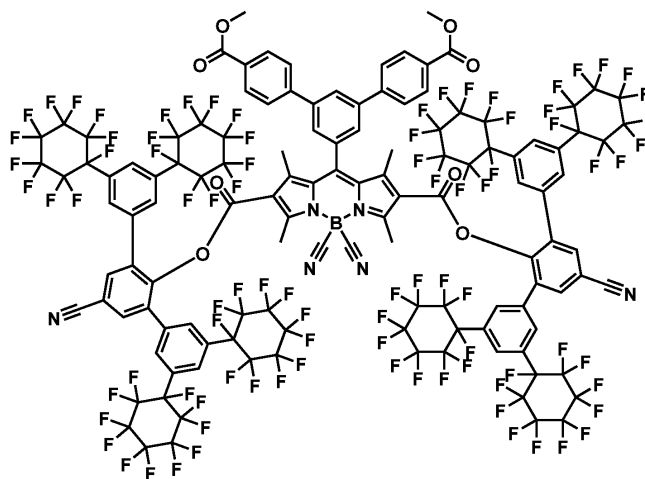
Molecular Weight: 2189.39



Molecular Weight: 1966.86



Molecular Weight: 2526.95



Molecular Weight: 3441.44

【0 1 2 6】

一般式(1)で表される化合物は、例えば、特表平8-509471号公報や特開2000-208262号公報に記載の方法で製造することができる。すなわち、ピロメテン化合物とハロゲン化ホウ素とを塩基共存下で反応することにより、目的とするピロメテン系ホウ素錯体が得られる。

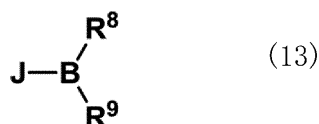
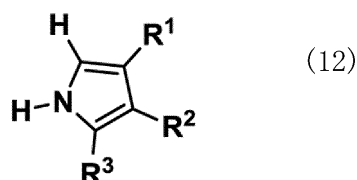
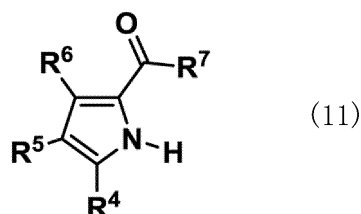
【0 1 2 7】

また、ピロメテン-フッ化ホウ素錯体の合成については、J. Org. Chem., vol. 64, No. 21, pp. 7813-7819 (1999)、Angew. Chem., Int. Ed. Engl., vol. 36, pp. 1333-1335 (1997)等に記載されている方法を参考にして、一般式(1)で表される化合物を合成すること

ができる。例えば、下記一般式（１１）で表される化合物と一般式（１２）で表される化合物とをオキシ塩化リン存在下、１，２－ジクロロエタン中で加熱した後、下記一般式（１３）で表される化合物をトリエチルアミン存在下、１，２－ジクロロエタン中で反応させ、これにより、一般式（１）で表される化合物を得る方法が挙げられる。しかし、本発明は、これに限定されるものではない。ここで、 $R^1 \sim R^9$ は、上記の説明と同様である。Jは、ハロゲンを表す。

【０１２８】

【化１２】



【０１２９】

さらに、アリール基やヘテロアリール基の導入の際は、ハロゲン化誘導体とボロン酸あるいはボロン酸エステル化誘導体とのカップリング反応を用いて炭素－炭素結合を生成する方法が挙げられるが、本発明は、これに限定されるものではない。同様に、アミノ基やカルbazol基の導入の際にも、例えば、パラジウムなどの金属触媒下でのハロゲン化誘導体とアミンあるいはカルbazol誘導体とのカップリング反応を用いて炭素－窒素結合を生成する方法が挙げられるが、本発明は、これに限定されるものではない。

【０１３０】

一般式（１）で表される化合物は、励起光を用いることにより、ピーク波長が５００ nm以上５８０ nm未満の領域に観測される発光を呈することが好ましい。以後、ピーク波長が５００ nm以上５８０ nm未満の領域に観測される発光は、「緑色の発光」という。

【０１３１】

一般式（１）で表される化合物は、波長４３０ nm以上５００ nm以下の範囲の励起光を用いることにより、緑色の発光を呈することが好ましい。一般に、励起光は、そのエネルギーが大きいほど、発光材料の分解を引き起こしやすい。しかし、波長４３０ nm以上５００ nm以下の範囲の励起光は、比較的小さい励起エネルギーのものである。このため、色変換組成物中の発光材料の分解を抑制し、色純度の良好な緑色の発光が得られる。

【０１３２】

一般式（１）で表される化合物は、励起光を用いることにより、ピーク波長が５８０ nm以上７５０ nm以下の領域に観測される発光を呈することが好ましい。以後、ピーク波長が５８０ nm以上７５０ nm以下の領域に観測される発光は、「赤色の発光」という。

【０１３３】

一般式（１）で表される化合物は、波長４３０ nm以上５００ nm以下の範囲の励起光を用いることにより、赤色の発光を呈することが好ましい。一般に、励起光は、そのエネルギーが大きいほど、発光材料の分解を引き起こしやすい。しかし、波長４３０ nm以上

500nm以下の範囲の励起光は、比較的小さい励起エネルギーのものである。このため、色変換組成物中の発光材料の分解を抑制し、色純度の良好な赤色の発光が得られる。

【0134】

＜色変換組成物＞

本発明の実施形態に係る色変換組成物について詳細に説明する。本発明の実施形態に係る色変換組成物は、光源等の発光体からの入射光を、その入射光よりも長波長の光に変換するものであって、上述した一般式（1）で表される化合物（ピロメテンホウ素錯体）およびバインダー樹脂を含むことが好ましい。

【0135】

本発明の実施形態に係る色変換組成物は、一般式（1）で表される化合物以外に、必要に応じてその他の化合物を適宜含有することができる。例えば、励起光から一般式（1）で表される化合物へのエネルギー移動効率を更に高めるために、ルブレンなどのアシストドーパントを含有してもよい。また、一般式（1）で表される化合物の発光色以外の発光色を加味したい場合は、所望の有機発光材料、例えば、クマリン誘導体やローダミン誘導体等の有機発光材料を添加することができる。その他、有機発光材料以外でも、無機蛍光体、蛍光顔料、蛍光染料、量子ドット等の公知の発光材料を組み合わせることも可能である。

【0136】

以下に、一般式（1）で表される化合物以外の有機発光材料の一例を示すが、本発明は、特にこれらに限定されるものではない。

【0137】

10

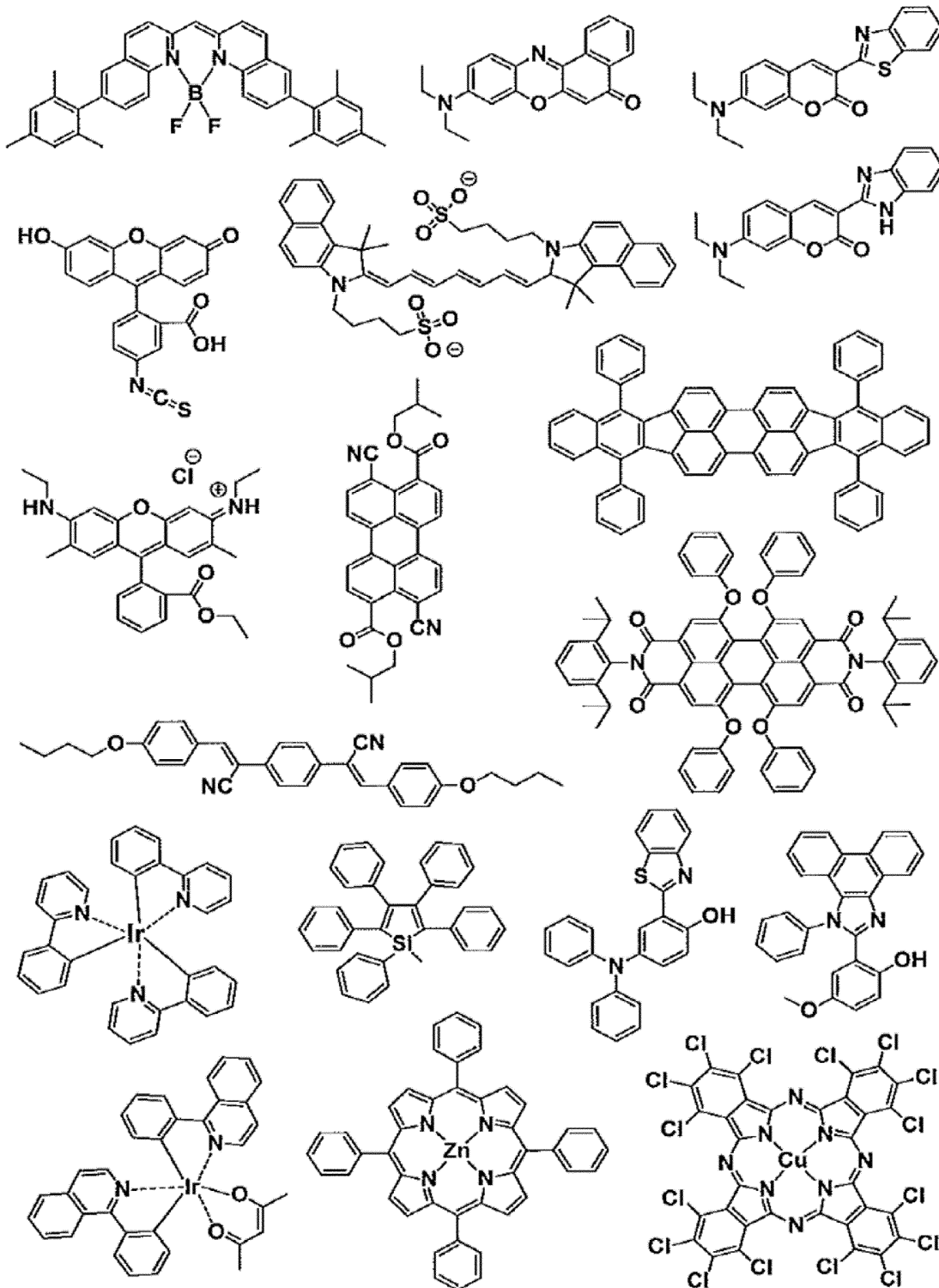
20

30

40

50

【化 1 3】



【 0 1 3 8】

本発明において、色変換組成物は、励起光を用いることにより、緑色の発光を呈することが好ましい。また、色変換組成物は、励起光を用いることにより、赤色の発光を呈することが好ましい。

【 0 1 3 9】

すなわち、本発明の実施形態に係る色変換組成物は、以下の発光材料（a）と発光材料（b）とを含有することが好ましい。発光材料（a）は、励起光を用いることによって緑色の発光を呈する発光材料である。発光材料（b）は、励起光もしくは発光材料（a）からの発光の少なくとも一方によって励起されることにより、赤色の発光を呈する発光材料

である。これらの発光材料 (a) および発光材料 (b) のうちの少なくとも1つは、一般式 (1) で表される化合物 (ピロメテンホウ素錯体) であることが好ましい。また、上記の励起光として、波長 430 nm 以上 500 nm 以下の範囲の励起光を用いることがより好ましい。

【0140】

波長 430 nm 以上 500 nm 以下の範囲の励起光の一部は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムを一部透過するため、発光ピークが鋭い青色 LED を使用した場合、青、緑、赤の各色において鋭い形状の発光スペクトルを示し、色純度の良い白色光を得ることができる。その結果、特にディスプレイにおいては、色彩が一層鮮やかな、より大きな色域を効率的に作ることができる。また、照明用途においては、現在主流となっている青色 LED と黄色蛍光体とを組み合わせた白色 LED に比べ、特に緑色領域および赤色領域の発光特性が改善されるため、演色性が向上した好ましい白色光源を得ることができる。

【0141】

発光材料 (a) としては、クマリン 6、クマリン 7、クマリン 153 等のクマリン誘導体、インドシアニングリーン等のシアニン誘導体、フルオレセイン、フルオレセインイソチオシアネート、カルボキシフルオレセインジアセテート等のフルオレセイン誘導体、フタロシアニングリーン等のフタロシアニン誘導体、ジイソブチル-4, 10-ジシアノペリレン-3, 9-ジカルボキシレート等のペリレン誘導体、他にピロメテン誘導体、スチルベン誘導体、オキサジン誘導体、ナフタルイミド誘導体、ピラジン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、ベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、イミダゾピリジン誘導体、アゾール誘導体、アントラセン等の縮合アリール環を有する化合物やその誘導体、芳香族アミン誘導体、有機金属錯体化合物等が好適なものとして挙げられる。しかし、発光材料 (a) は、特にこれらに限定されるものではない。これらの化合物の中でも、ピロメテン誘導体は、高い発光量子収率を与え、色純度の高い発光を示すことから、特に好適な化合物である。ピロメテン誘導体の中でも、一般式 (1) で表される化合物は、耐久性が大幅に向上するため、好ましい。

【0142】

発光材料 (b) としては、4-ジシアノメチレン-2-メチル-6-(p-ジメチルアミノスチルリル)-4H-ピラン等のシアニン誘導体、ローダミン B、ローダミン 6 G、ローダミン 101、スルホローダミン 101 等のローダミン誘導体、1-エチル-2-(4-(p-ジメチルアミノフェニル)-1, 3-ブタジエニル)-ピリジニウム-パークロレート等のピリジン誘導体、N, N'-ビス(2, 6-ジイソプロピルフェニル)-1, 6, 7, 12-テトラフェノキシペリレン-3, 4:9, 10-ビスジカルボイミド等のペリレン誘導体、他にポルフィリン誘導体、ピロメテン誘導体、オキサジン誘導体、ピラジン誘導体、ナフタセンやジベンゾジインデノペリレン等の縮合アリール環を有する化合物やその誘導体、有機金属錯体化合物等が好適なものとして挙げられる。しかし、発光材料 (b) は、特にこれらに限定されるものではない。これらの化合物の中でも、ピロメテン誘導体は、高い発光量子収率を与え、色純度の高い発光を示すことから、特に好適な化合物である。ピロメテン誘導体の中でも、一般式 (1) で表される化合物は、耐久性が飛躍的に向上するため、好ましい。

【0143】

また、発光材料 (a) および発光材料 (b) は、双方とも一般式 (1) で表される化合物である場合、高効率発光および高色純度と、高い耐久性とを両立させることが可能となるため、好ましい。

【0144】

本発明の実施形態に係る色変換組成物における一般式 (1) で表される化合物の含有量は、化合物のモル吸光係数、発光量子収率および励起波長における吸収強度、ならびに作製するフィルムの厚みや透過率にもよるが、通常はバインダー樹脂の 100 重量部に対して、 1.0×10^{-4} 重量部 ~ 30 重量部である。この化合物の含有量は、バインダー樹脂の 100 重量部に対して、 1.0×10^{-3} 重量部 ~ 10 重量部であることがさらに好

ましく、 1.0×10^{-2} 重量部～5 重量部であることが特に好ましい。

【0145】

また、色変換組成物に、緑色の発光を呈する発光材料（a）と、赤色の発光を呈する発光材料（b）とを両方含有する場合、緑色の発光の一部が赤色の発光に変換されることから、上記の発光材料（a）の含有量 w_a と、発光材料（b）の含有量 w_b とは、 $w_a \geq w_b$ の関係であることが好ましい。また、これらの発光材料（a）および発光材料（b）の含有比率は、 $w_a : w_b = 1000 : 1 \sim 1 : 1$ であり、 $500 : 1 \sim 2 : 1$ であることがさらに好ましく、 $200 : 1 \sim 3 : 1$ であることが特に好ましい。ただし、含有量 w_a および含有量 w_b は、バインダー樹脂の重量に対する重量パーセントである。

【0146】

<バインダー樹脂>

バインダー樹脂は、連続相を形成するものであり、成型加工性、透明性、耐熱性等に優れる材料であればよい。バインダー樹脂の例としては、例えば、アクリル酸系、メタクリル酸系、ポリケイ皮酸ビニル系、環ゴム系等の反応性ビニル基を有する光硬化型レジスト材料、エポキシ樹脂、シリコーン樹脂（シリコーンゴム、シリコーンゲル等のオルガノポリシロキサン硬化物（架橋物）を含む）、ウレア樹脂、フッ素樹脂、ポリカーボネート樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、メラミン樹脂、ポリビニル樹脂、ポリアミド樹脂、フェノール樹脂、ポリビニルアルコール樹脂、セルロース樹脂、脂肪族エステル樹脂、芳香族エステル樹脂、脂肪族ポリオレフィン樹脂、芳香族ポリオレフィン樹脂等の公知のものが挙げられる。また、バインダー樹脂としては、これらの共重合樹脂を用いても構わない。これらの樹脂を適宜設計することで、本発明の実施形態に係る色変換組成物および色変換フィルムに有用なバインダー樹脂が得られる。これらの樹脂の中でも、フィルム化のプロセスが容易であることから、熱可塑性樹脂がさらに好ましい。熱硬化性樹脂の中でも、透明性、耐熱性等の観点から、エポキシ樹脂、シリコーン樹脂、アクリル樹脂、エステル樹脂、オレフィン樹脂またはこれらの混合物を好適に用いることができる。また、耐久性の観点から特に好ましい熱可塑性樹脂は、アクリル樹脂、エステル樹脂、シクロオレフィン樹脂である。

【0147】

また、バインダー樹脂には、添加剤として、塗布膜安定化のための分散剤やレベリング剤等を添加することも、フィルム表面の改質剤として、シランカップリング剤等の接着補助剤等を添加することも可能である。また、バインダー樹脂には、色変換材沈降抑制剤として、シリカ粒子やシリコーン微粒子等の無機粒子を添加することも可能である。

【0148】

本発明の実施形態に係る色変換フィルム作製用の色変換組成物において、バインダー樹脂には、その他の成分として、常温での硬化を抑制してポットライフを長くするためにアセチレンアルコール等のヒドロシリル化反応遅延剤を配合することが好ましい。また、バインダー樹脂には、本発明の効果が損なわれない範囲で、必要に応じて、フェームドシリカ、ガラス粉末、石英粉末等の微粒子、酸化チタン、酸化ジルコニア、チタン酸バリウム、酸化亜鉛等の無機充填剤や顔料、難燃剤、耐熱剤、酸化防止剤、分散剤、溶剤、シランカップリング剤やチタンカップリング剤等の接着性付与剤等を配合してもよい。

【0149】

<その他の成分>

本発明の実施形態に係る色変換組成物は、上述した一般式（1）で表される化合物およびバインダー樹脂以外に、光安定化剤、酸化防止剤、加工および熱安定化剤、紫外線吸収剤等の耐光性安定化剤、シリコーン微粒子およびシランカップリング剤等、その他の成分（添加剤）を含有してもよい。

【0150】

光安定化剤としては、例えば、3級アミン、カテコール誘導体およびニッケル化合物を挙げることができるが、特に限定されるものではない。また、これらの光安定化剤は、単独で使用してもよいし、複数併用してもよい。

【0151】

酸化防止剤としては、例えば、2,6-ジ-tert-ブチル-p-クレゾール、2,6-ジ-tert-ブチル-4-エチルフェノール等のフェノール系酸化防止剤を挙げることができるが、特にこれらに限定されるものではない。また、これらの酸化防止剤は、単独で使用してもよいし、複数併用してもよい。

【0152】

加工および熱安定化剤としては、例えば、トリブチルホスファイト、トリシクロヘキシルホスファイト、トリエチルホスフィン、ジフェニルブチルホスフィン等のリン系安定化剤を挙げることができるが、特にこれらに限定されるものではない。また、これらの安定化剤は、単独で使用してもよいし、複数併用してもよい。

10

【0153】

耐光性安定化剤としては、例えば、2-(5-メチル-2-ヒドロキシフェニル)ベンゾトリアゾール、2-[2-ヒドロキシ-3,5-ビス(α , α -ジメチルベンジル)フェニル]-2H-ベンゾトリアゾール等のベンゾトリアゾール類を挙げることができるが、特にこれらに限定されるものではない。また、これらの耐光性安定化剤は、単独で使用してもよいし、複数併用してもよい。

【0154】

本発明の実施形態に係る色変換組成物において、これらの添加剤の含有量は、化合物のモル吸光係数、発光量子収率および励起波長における吸収強度、ならびに作製する色変換フィルムの厚みや透過率にもよるが、通常はバインダー樹脂の100重量部に対して、 1.0×10^{-3} 重量部以上30重量部以下であることが好ましい。また、これらの添加剤の含有量は、バインダー樹脂の100重量部に対して、 1.0×10^{-2} 重量部以上15重量部以下であることがさらに好ましく、 1.0×10^{-1} 重量部以上10重量部以下であることが特に好ましい。

20

【0155】

<溶剤>

本発明の実施形態に係る色変換組成物は、溶剤を含んでいてもよい。溶剤は、流動状態の樹脂の粘度を調整でき、発光物質の発光および耐久性に過度な影響を与えないものであれば、特に限定されない。このような溶媒として、例えば、トルエン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、ヘキサン、アセトン、テルピネオール、テキサノール、メチルセルソルブ、ブチルカルビトール、ブチルカルビトールアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート等が挙げられる。これらの溶剤を2種類以上混合して使用することも可能である。これらの溶剤の中で特にトルエンは、一般式(1)で表される化合物の劣化に影響を与えず、乾燥後の残存溶媒が少ない点で好適に用いられる。

30

【0156】

<色変換組成物の製造方法>

以下に、本発明の実施形態に係る色変換組成物の製造方法の一例を説明する。この製造方法では、前述した一般式(1)で表される化合物、バインダー樹脂、溶剤等を所定量混合する。上記の成分を所定の組成になるよう混合した後、ホモジナイザー、自公転型攪拌機、3本ローラー、ボールミル、遊星式ボールミル、ビーズミル等の攪拌・混練機で均質に混合分散することで、色変換組成物が得られる。混合分散後、もしくは混合分散の過程で、真空もしくは減圧条件下で脱泡することも好ましく行われる。また、ある特定の成分を事前に混合することや、エージング等の処理をしても構わない。エバポレーターによって溶剤を除去して所望の固形分濃度にすることも可能である。

40

【0157】

<色変換フィルムの作製方法>

本発明において、色変換フィルムは、上述した色変換組成物、またはそれを硬化した硬化物からなる層を含んでいれば、その構成に限定はない。色変換組成物の硬化物は、色変換組成物を硬化することによって得られる層(色変換組成物の硬化物からなる層)として色変換フィルムに含まれることが好ましい。色変換フィルムの代表的な構造例として、例

50

えば、以下の四つが挙げられる。

【０１５８】

図１は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第一例を示す模式断面図である。図１に示すように、この第一例の色変換フィルム１Ａは、色変換層１１によって構成される単層のフィルムである。色変換層１１は、上述した色変換組成物の硬化物からなる層である。

【０１５９】

図２は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第二例を示す模式断面図である。図２に示すように、この第二例の色変換フィルム１Ｂは、基材層１０と色変換層１１との積層体である。この色変換フィルム１Ｂの構造例では、色変換層１１が、基材層１０の上に積層されている。

10

【０１６０】

図３は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第三例を示す模式断面図である。図３に示すように、この第三例の色変換フィルム１Ｃは、複数の基材層１０と、色変換層１１との積層体である。この色変換フィルム１Ｃの構造例では、色変換層１１が、複数の基材層１０によって挟まれている。

【０１６１】

図４は、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの第四例を示す模式断面図である。図４に示すように、この第四例の色変換フィルム１Ｄは、複数の基材層１０と、色変換層１１と、複数のバリアフィルム１２との積層体である。この色変換フィルム１Ｄの構造例では、色変換層１１が、複数のバリアフィルム１２によって挟まれ、さらに、これら色変換層１１と複数のバリアフィルム１２との積層体が、複数の基材層１０によって挟まれている。すなわち、色変換フィルム１Ｄは、色変換層１１の酸素、水分や熱による劣化を防ぐために、図４に示すようにバリアフィルム１２を有していてもよい。

20

【０１６２】

（基材層）

基材層（例えば図２～４に示す基材層１０）としては、特に制限無く公知の金属、フィルム、ガラス、セラミック、紙等を使用することができる。具体的には、基材層として、アルミニウム（アルミニウム合金も含む）、亜鉛、銅、鉄等の金属板や箔、セルロースアセテート、ポリエチレンテレフタレート（ＰＥＴ）、ポリエチレン、ポリエステル、ポリアミド、ポリイミド、ポリフェニレンサルファイド、ポリスチレン、ポリプロピレン、ポリカーボネート、ポリビニルアセタール、アラミド、シリコーン、ポリオレフィン、熱可塑性フッ素樹脂、テトラフルオロエチレンとエチレンとの共重合体（ＥＴＦＥ）等のプラスチックのフィルム、α-ポリオレフィン樹脂、ポリカプロラクトン樹脂、アクリル樹脂、シリコーン樹脂およびこれらとエチレンとの共重合樹脂からなるプラスチックのフィルム、前記プラスチックがラミネートされた紙、または前記プラスチックによりコーティングされた紙、前記金属がラミネートまたは蒸着された紙、前記金属がラミネートまたは蒸着されたプラスチックフィルム等が挙げられる。また、基材層が金属板である場合、その表面にクロム系やニッケル系等のメッキ処理やセラミック処理が施されていてもよい。

30

【０１６３】

これらの中でも、色変換フィルムの作製のし易さや色変換フィルムの成形のし易さから、ガラスや樹脂フィルムが好ましく用いられる。また、フィルム状の基材層を取り扱う際に破断等の恐れがないように、強度が高いフィルムが好ましい。それらの要求特性や経済性の面で樹脂フィルムが好ましく、これらの中でも、経済性、取り扱い性の面でＰＥＴ、ポリフェニレンサルファイド、ポリカーボネート、ポリプロピレンからなる群より選ばれるプラスチックフィルムが好ましい。また、色変換フィルムを乾燥させる場合や色変換フィルムを押し出し機により２００℃以上の高温で圧着成形する場合は、耐熱性の面でポリイミドフィルムが好ましい。フィルムの剥離のし易さから、基材層は、予め表面が離型処理されていてもよい。

40

【０１６４】

50

基材層の厚さは、特に制限はないが、下限としては $25\text{ }\mu\text{m}$ 以上が好ましく、 $38\text{ }\mu\text{m}$ 以上がより好ましい。また、上限としては $5000\text{ }\mu\text{m}$ 以下が好ましく、 $3000\text{ }\mu\text{m}$ 以下がより好ましい。

【0165】

(色変換層)

つぎに、本発明の実施形態に係る色変換フィルムの色変換層の製造方法の一例を説明する。この色変換層の製造方法では、上述した方法で作製した色変換組成物を、基材層やバリアフィルム等の下地上に塗布し、乾燥させる。このようにして、色変換層（例えば図1～4に示す色変換層11）が形成される。塗布は、リバースロールコーター、ブレードコーター、スリットダイコーター、ダイレクトグラビアコーター、オフセットグラビアコーター、キスコーター、ナチュラルロールコーター、エアナイフコーター、ロールブレードコーター、リバースロールブレードコーター、トゥーストリームコーター、ロッドコーター、ワイヤーバーコーター、アプリケーター、ディップコーター、カーテンコーター、スピンコーター、ナイフコーター等により、行うことができる。色変換層の膜厚均一性を得るためには、スリットダイコーターで塗布することが好ましい。

【0166】

色変換層の乾燥は、熱風乾燥機や赤外線乾燥機等の一般的な加熱装置を用いて行うことができる。色変換フィルムの加熱には、熱風乾燥機や赤外線乾燥機等の一般的な加熱装置が用いられる。この場合、加熱条件は、通常、 $40^{\circ}\text{C}\sim 250^{\circ}\text{C}$ で1分～5時間、好ましくは $60^{\circ}\text{C}\sim 200^{\circ}\text{C}$ で2分～4時間である。また、ステップキュア等の段階的に加熱硬化することも可能である。

【0167】

色変換層を作製した後、必要に応じて基材層を変更することも可能である。この場合、簡易的な方法としては、例えば、ホットプレートを用いて貼り替えを行なう方法や、真空ラミネーターやドライフィルムラミネーターを用いた方法等が挙げられるが、これらに限定されない。

【0168】

色変換層の厚みは、特に制限はないが、 $10\text{ }\mu\text{m}\sim 1000\text{ }\mu\text{m}$ であることが好ましい。色変換層の厚みが $10\text{ }\mu\text{m}$ より小さいと、色変換フィルムの強靱性が小さくなるという問題がある。色変換層の厚みが $1000\text{ }\mu\text{m}$ を超えると、クラックが生じやすくなり、色変換フィルム成形が難しい。色変換層の厚みとして、より好ましくは、 $30\text{ }\mu\text{m}\sim 100\text{ }\mu\text{m}$ である。

【0169】

一方で、色変換フィルムの耐熱性を高めるという観点からは、色変換フィルムの膜厚は、 $200\text{ }\mu\text{m}$ 以下であることが好ましく、 $100\text{ }\mu\text{m}$ 以下であることがより好ましく、 $50\text{ }\mu\text{m}$ 以下であることがさらに好ましい。

【0170】

本発明における色変換フィルムの膜厚は、JIS K7130（1999）プラスチックフィルム及びシート厚さ測定方法における機械的走査による厚さの測定方法A法に基づいて測定される膜厚（平均膜厚）のことをいう。

【0171】

(バリアフィルム)

バリアフィルム（例えば図4に示すバリアフィルム12）は、色変換層に対してガスバリア性を向上する場合等において適宜用いられる。このバリアフィルムとしては、例えば、酸化ケイ素、酸化アルミニウム、酸化チタン、酸化タンタル、酸化亜鉛、酸化スズ、酸化インジウム、酸化イットリウム、酸化マグネシウム等の無機酸化物や、窒化ケイ素、窒化アルミニウム、窒化チタン、炭化窒化ケイ素等の無機窒化物、またはこれらの混合物、またはこれらに他の元素を添加した金属酸化物薄膜や金属窒化物薄膜、あるいはポリ塩化ビニリデン、アクリル系樹脂、シリコン系樹脂、メラミン系樹脂、ウレタン系樹脂、フッ素系樹脂、酢酸ビニルのケン化物等のポリビニルアルコール系樹脂等の各種樹脂から成る

膜を挙げることができる。また、水分に対してバリア機能を有するバリアフィルムとしては、例えば、ポリエチレン、ポリプロピレン、ナイロン、ポリ塩化ビニリデン、塩化ビニリデンと塩化ビニルとの共重合体、塩化ビニリデンとアクリロニトリルとの共重合体、フッ素系樹脂、酢酸ビニルのケン化物等のポリビニルアルコール系樹脂等の各種樹脂から成る膜を挙げることができる。

【0172】

バリアフィルムは、図4に例示したバリアフィルム12のように色変換層11の両面に設けられてもよいし、色変換層11の片面だけに設けられてもよい。また、色変換フィルムの要求される機能に応じて、反射防止機能、防眩機能、反射防止防眩機能、ハードコート機能（耐摩擦機能）、帯電防止機能、防汚機能、電磁波シールド機能、赤外線カット機能、紫外線カット機能、偏光機能、調色機能を有した補助層をさらに設けてもよい。

10

【0173】

<励起光>

励起光の種類は、一般式(1)で表される化合物等の混合する発光物質が吸収可能な波長領域に発光を示すものであれば、いずれの励起光でも用いることができる。例えば、熱陰極管や冷陰極管、無機エレクトロルミネッセンス(EL)等の蛍光性光源、有機EL素子光源、LED光源、白熱光源、あるいは太陽光等、いずれの励起光でも原理的には利用可能である。特に、LED光源からの光が好適な励起光である。ディスプレイや照明用途では、青色光の色純度を高められる点で、430nm～500nmの波長範囲の励起光を持つ青色LED光源からの光が、さらに好適な励起光である。

20

【0174】

励起光は、1種類の発光ピークを持つものでもよく、2種類以上の発光ピークを持つものでもよいが、色純度を高めるためには、1種類の発光ピークを持つものが好ましい。また、発光ピークの種類異なる複数の励起光源を任意に組み合わせて使用することも可能である。

【0175】

<光源ユニット>

本発明の実施形態に係る光源ユニットは、少なくとも光源および上述の色変換フィルムを備える構成である。本発明の実施形態に係る光源ユニットに含まれる光源は、上述の励起光の発生源となるものである。光源と色変換フィルムとの配置方法については特に限定されず、光源と色変換フィルムとを密着させた構成を取ってもよいし、光源と色変換フィルムとを離したりモートフォスファー形式を取ってもよい。また、光源ユニットは、色純度を高める目的で、さらにカラーフィルターを備える構成を取ってもよい。

30

【0176】

前述の通り、430nm～500nmの波長範囲の励起光は、比較的小さい励起エネルギーのものであり、一般式(1)で表される化合物等の発光物質の分解を防止できる。したがって、光源ユニットに用いる光源は、波長430nm以上500nm以下の範囲に極大発光を有する発光ダイオードであることが好ましい。さらに、この光源は、波長440nm以上470nm以下の範囲に極大発光を有することが好ましい。

【0177】

また、光源は、その発光波長ピークが430nm～470nmの範囲にあり、かつ発光波長領域が400nm～500nmの範囲にある発光ダイオードであって、発光スペクトルが、数式(f1)を満たす発光ダイオードであることが好ましい。

40

【0178】

【数1】

$$1 > \beta/\alpha \geq 0.15 \quad \dots (f1)$$

【0179】

数式(f1)において、 α は、発光スペクトルの発光波長ピークにおける発光強度であ

50

る。βは、発光波長ピークに15nmを加算した波長における発光強度である。

【0180】

本発明における光源ユニットは、ディスプレイ、照明、インテリア、標識、看板等の用途に使用できるが、特にディスプレイや照明用途に好適に用いられる。

【0181】

<ディスプレイ、照明装置>

本発明の実施形態に係るディスプレイは、少なくとも、上述した色変換フィルムを備える。例えば、液晶ディスプレイ等のディスプレイには、バックライトユニットとして、上述した光源および色変換フィルム等を有する光源ユニットが用いられる。また、本発明の実施形態に係る照明装置は、少なくとも、上述した色変換フィルムを備える。例えば、この照明装置は、光源ユニットとしての青色LED光源と、この青色LED光源からの青色光をこれよりも長波長の光に変換する色変換フィルムとを組み合わせ、白色光を発光するように構成される。

10

【0182】

<発光素子>

本発明の実施形態において、発光素子は、陽極および陰極と、これら陽極と陰極との間に介在する有機層と、を備える。この発光素子の有機層は、電気エネルギーによって発光する。本発明の実施形態に係るピロメテンホウ素錯体は、この発光素子において、いずれの層に用いられてもよいが、高い蛍光量子収率を有しているため、この発光素子の発光層に用いることが好ましい。特に、当該ピロメテンホウ素錯体は、優れた蛍光量子収率を有していることから、上記発光層のドーパント材料として用いることが好ましい。

20

【実施例】

【0183】

以下、実施例を挙げて本発明を説明するが、本発明は下記の実施例によって限定されるものではない。下記の実施例および比較例において、化合物G-1~G-36、G-101~G-106は、以下に示す化合物である。

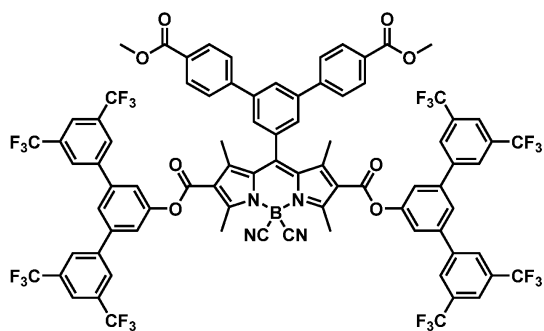
【0184】

30

40

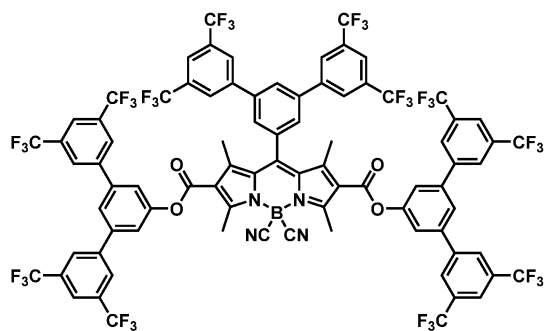
50

【化 1 4】



Molecular Weight: 1695.08

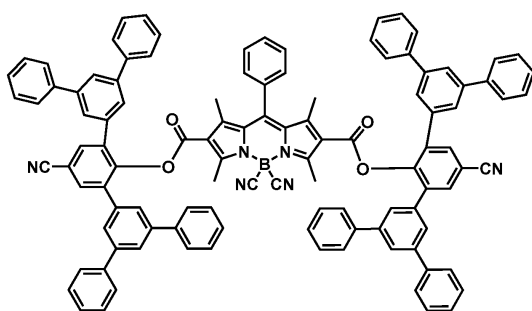
G-1



Molecular Weight: 1851.00

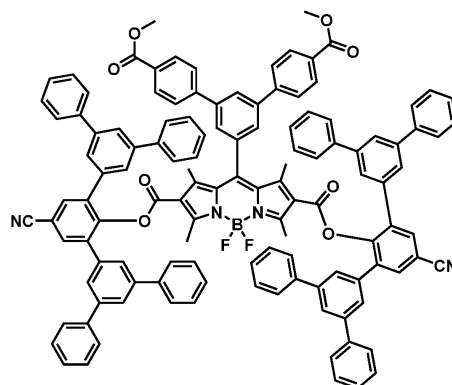
G-2

10



Molecular Weight: 1541.63

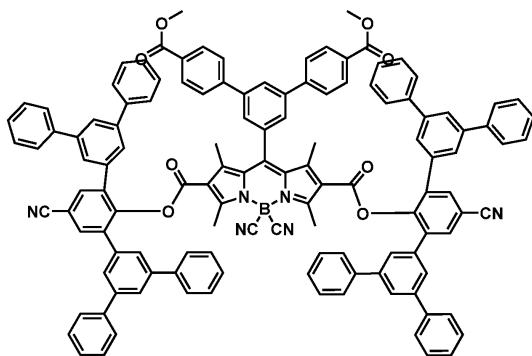
G-3



Molecular Weight: 1795.86

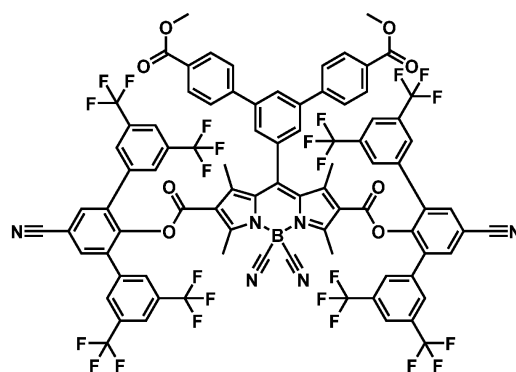
G-4

20



Molecular Weight: 1809.90

G-5



Molecular Weight: 1745.10

G-6

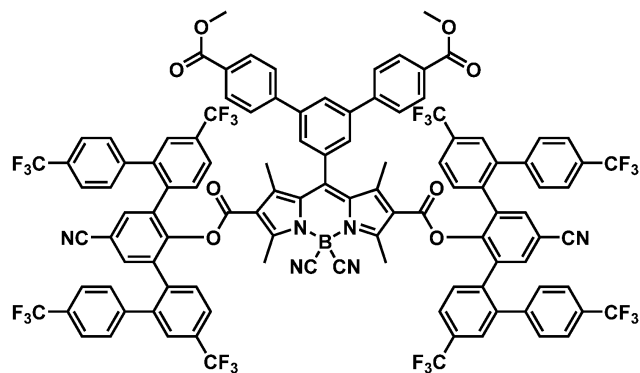
30

40

【 0 1 8 5 】

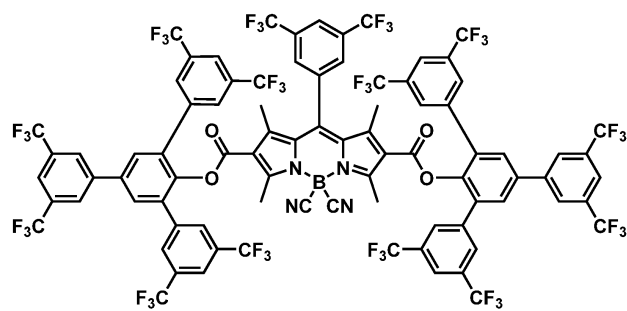
50

【化 1 5】



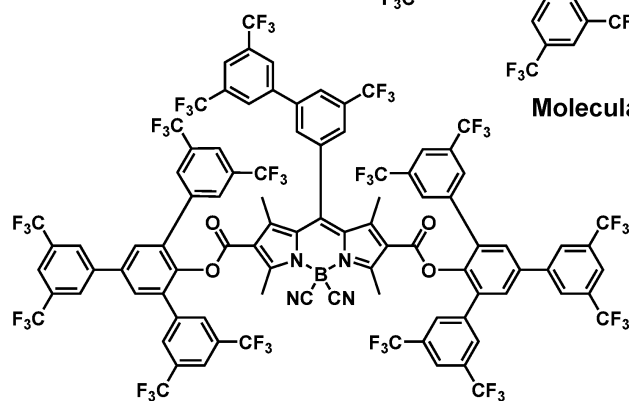
Molecular Weight: 2049.49

G-7



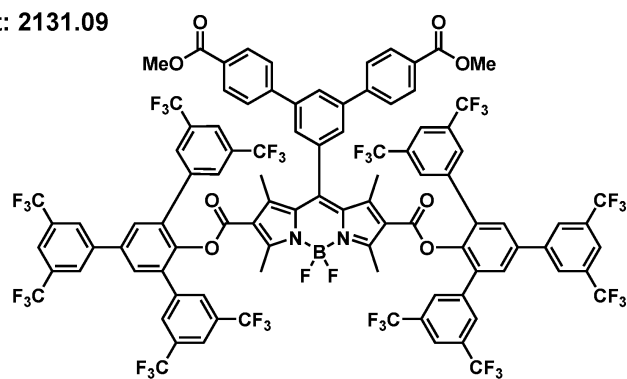
Molecular Weight: 1987.00

G-8



Molecular Weight: 2131.09

G-9



Molecular Weight: 2105.23

G-10

【 0 1 8 6】

10

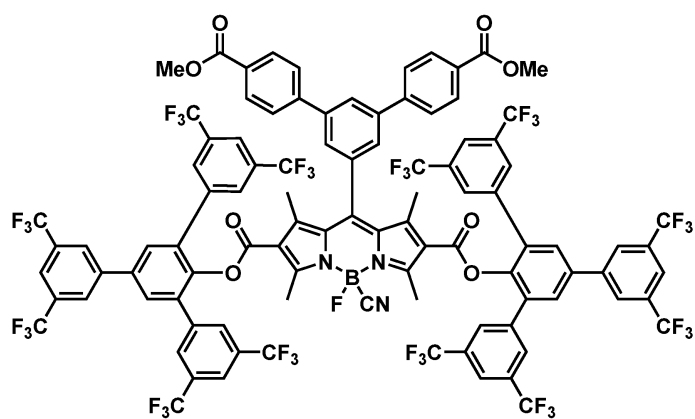
20

30

40

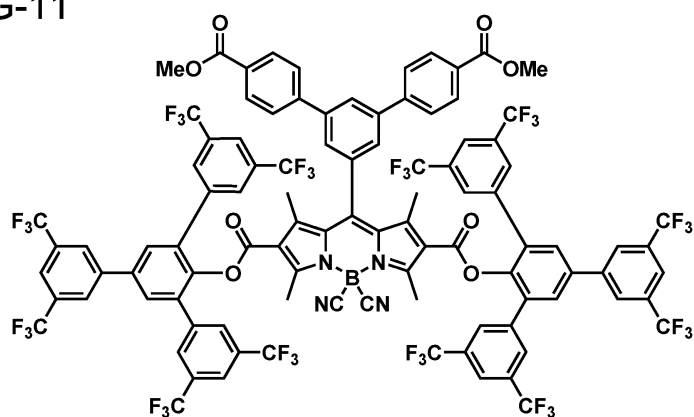
50

【化 1 6】



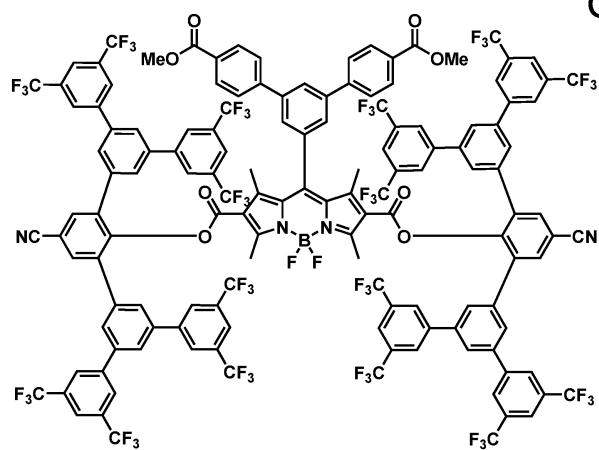
Molecular Weight: 2112.25

G-11



Molecular Weight: 2119.27

G-12



Molecular Weight: 2883.83

G-13

【 0 1 8 7】

10

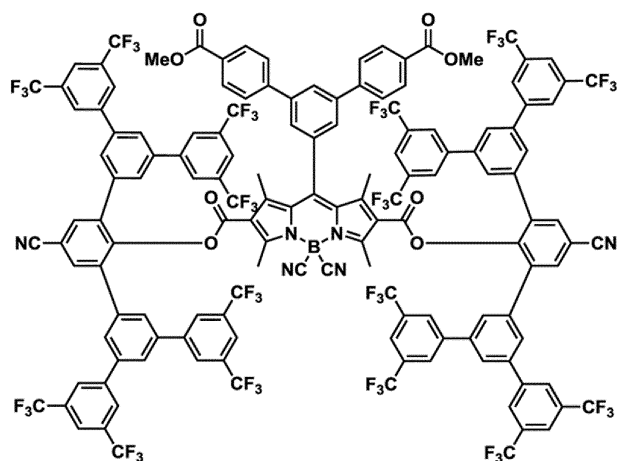
20

30

40

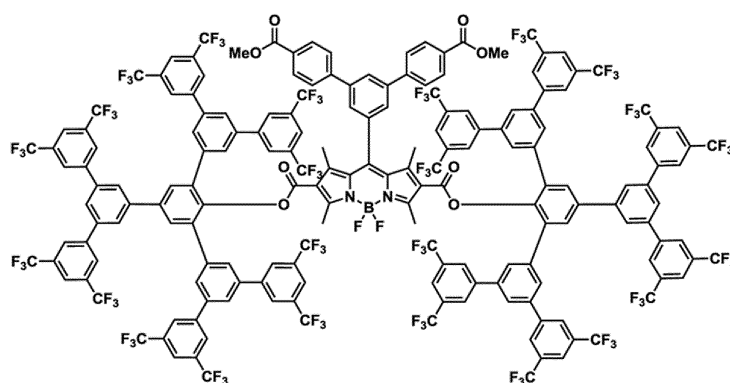
50

【化 1 7】



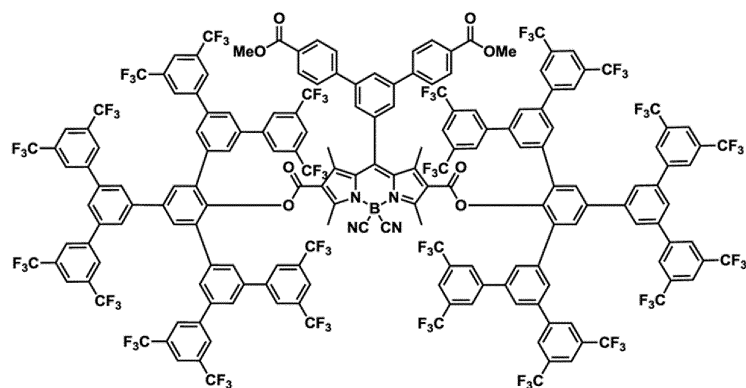
Molecular Weight: 2897.87

G-14



Molecular Weight: 3834.38

G-15



Molecular Weight: 3848.42

G-16

【 0 1 8 8 】

10

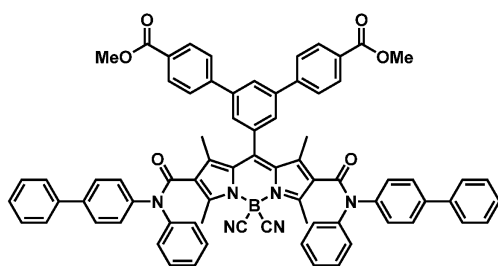
20

30

40

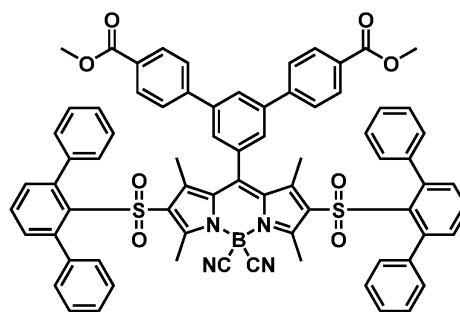
50

【化 1 8】



Molecular Weight: 1149.13

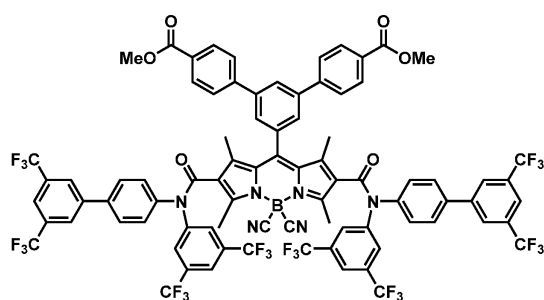
G-17



Molecular Weight: 1191.19

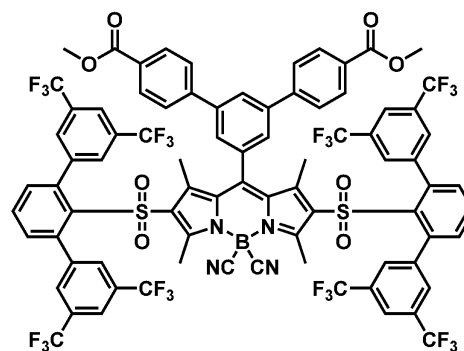
G-18

10



Molecular Weight: 1693.11

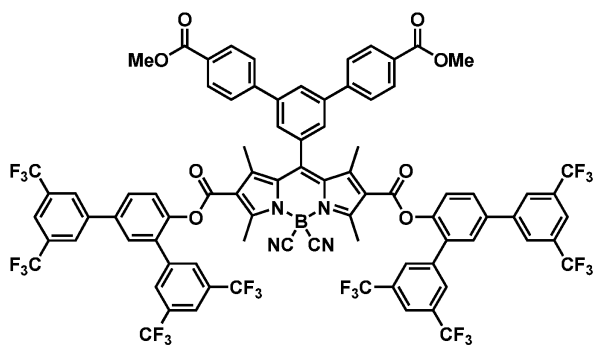
G-19



Molecular Weight: 1735.18

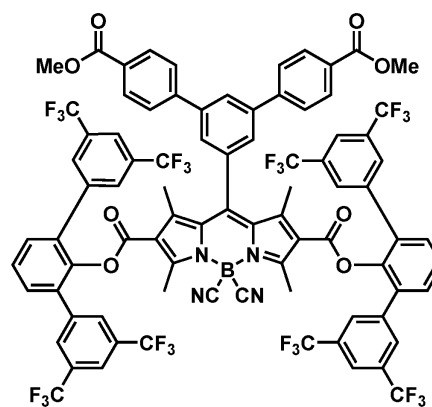
G-20

20



Molecular Weight: 1695.08

G-21



Molecular Weight: 1695.08

G-22

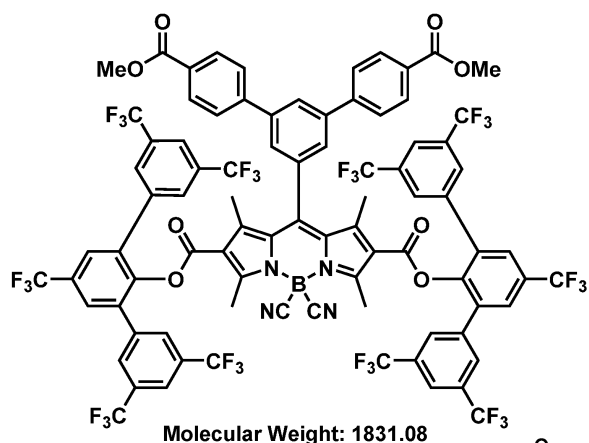
30

【 0 1 8 9】

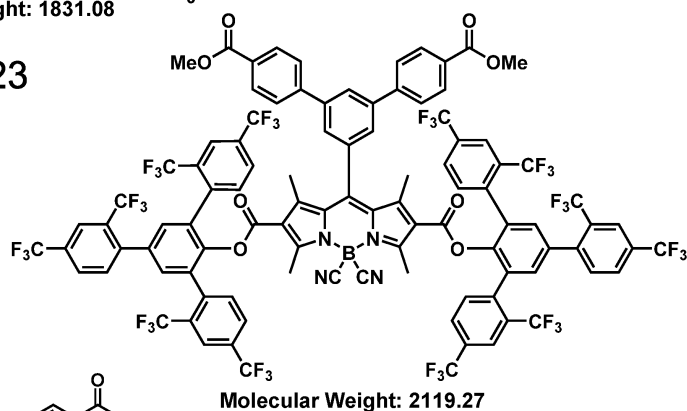
40

50

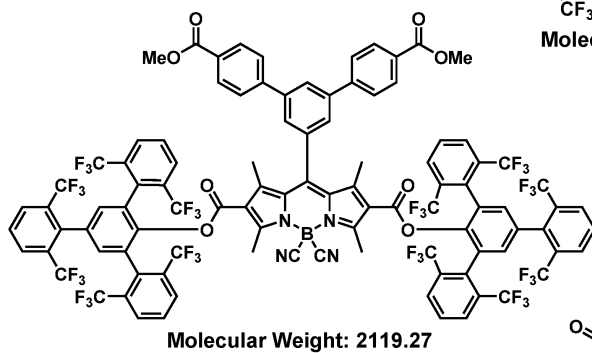
【化 1 9】



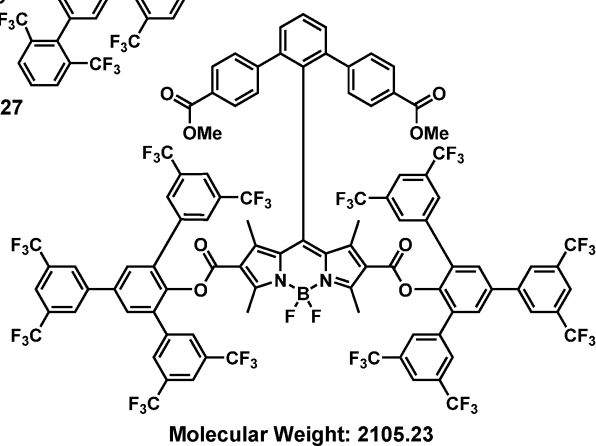
G-23



G-24



G-25



G-26

【 0 1 9 0】

10

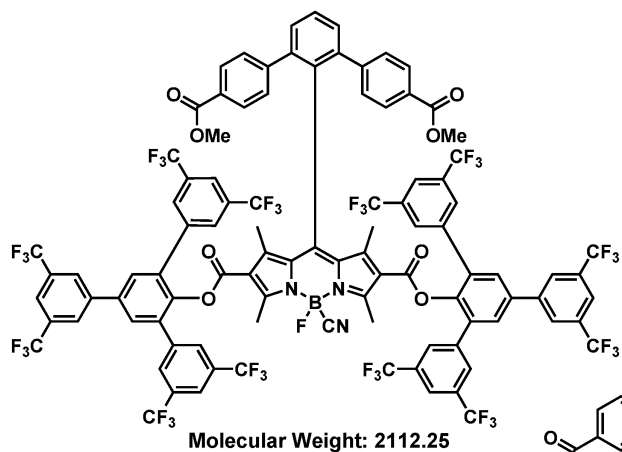
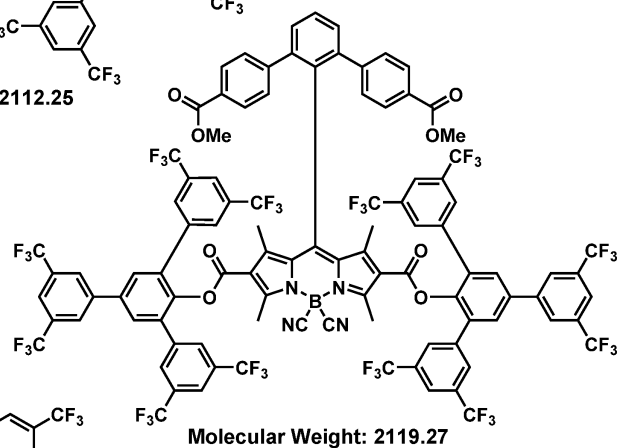
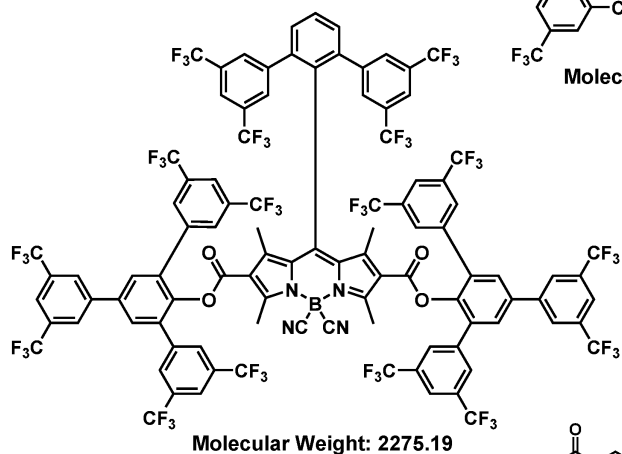
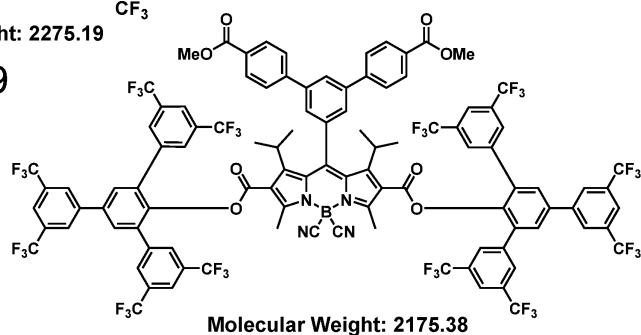
20

30

40

50

【化 2 0】

**G-27****G-28****G-29****G-30**

【 0 1 9 1】

10

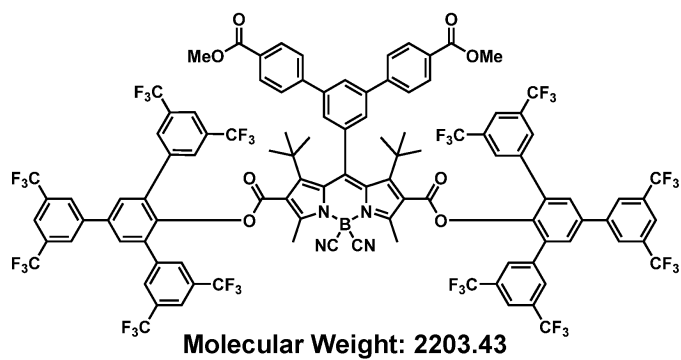
20

30

40

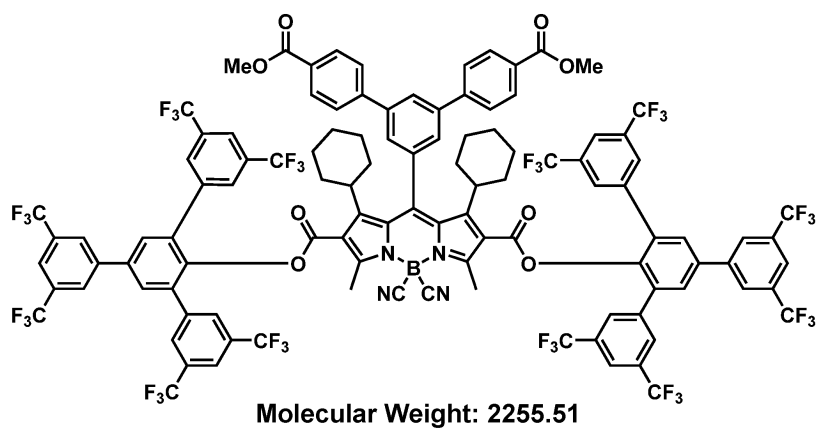
50

【化 2 1】



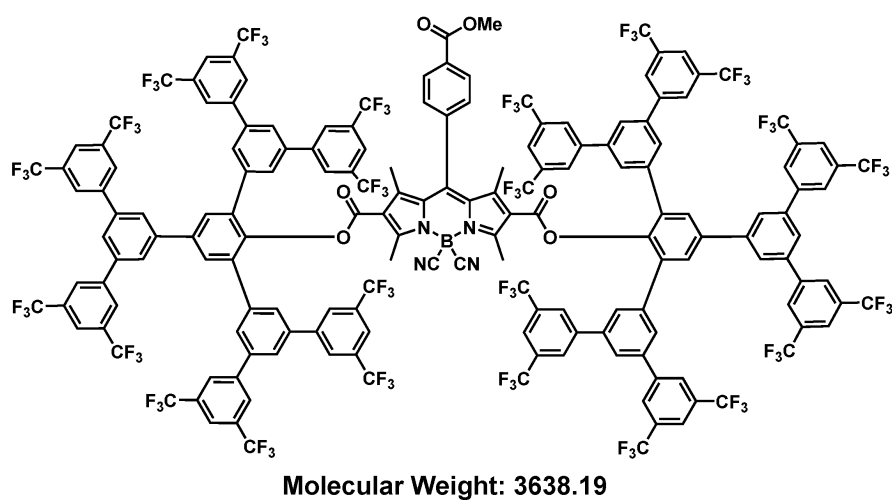
10

G-31



20

G-32



30

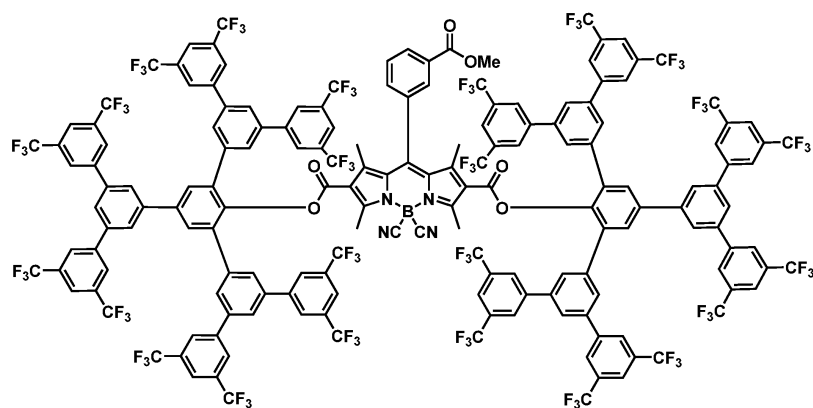
G-33

【 0 1 9 2】

40

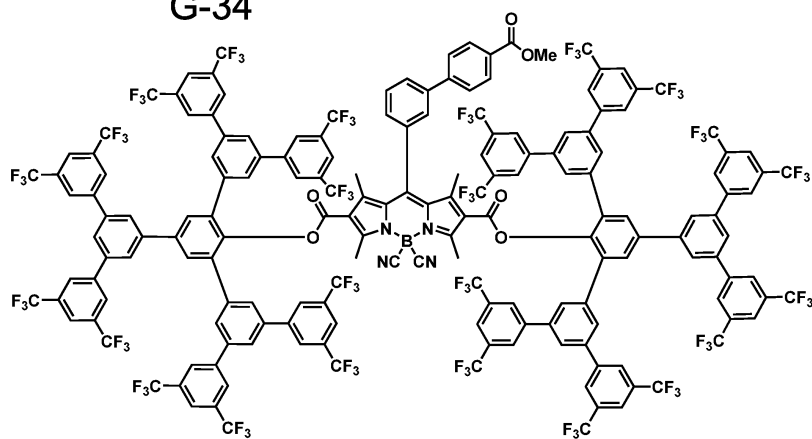
50

【化 2 2】



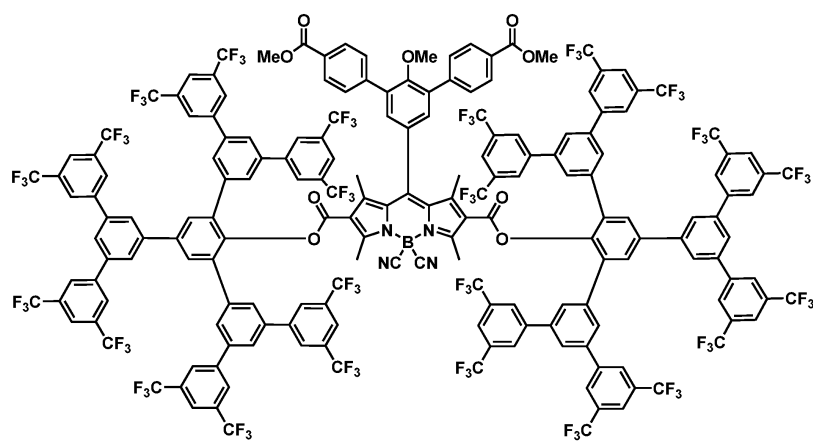
Molecular Weight: 3638.19

G-34



Molecular Weight: 3714.29

G-35



Molecular Weight: 3878.45

G-36

【 0 1 9 3 】

10

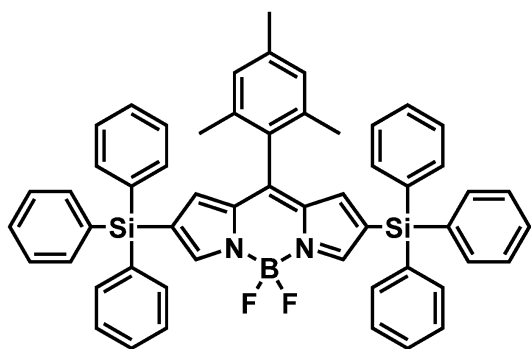
20

30

40

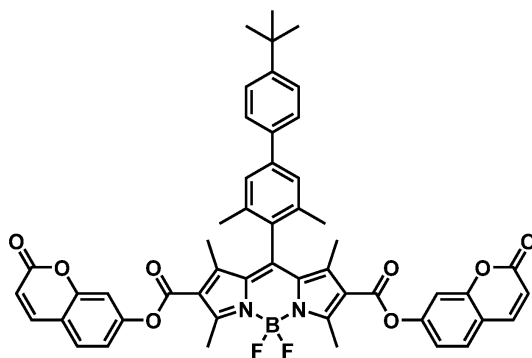
50

【化 2 3】



Molecular Weight: 826.94

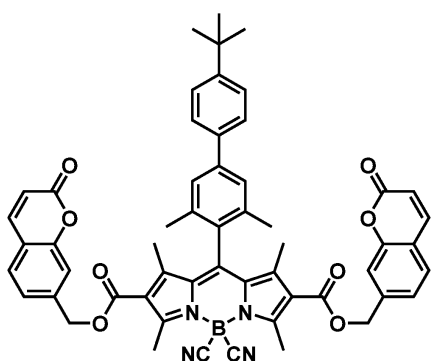
G-101



Molecular Weight: 860.72

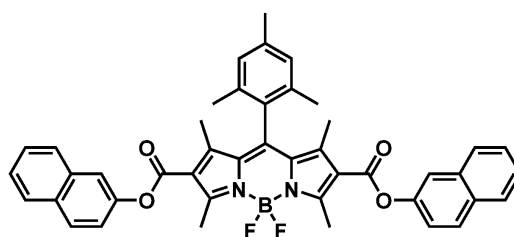
G-102

10



Molecular Weight: 902.81

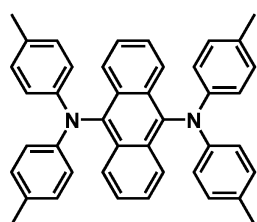
G-103



Molecular Weight: 706.60

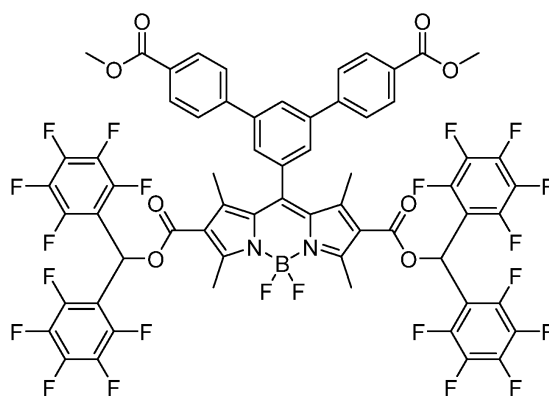
G-104

20



Molecular Weight: 568.76

G-105



Molecular Weight: 1372.72

G-106

30

40

【 0 1 9 4】

また、実施例および比較例における構造分析に関する評価方法は、以下に示す通りである。

【 0 1 9 5】

< $^1\text{H-NMR}$ の測定 >

化合物の $^1\text{H-NMR}$ は、超伝導 FTNMR EX-270（日本電子社製）を用い、重クロロホルム溶液にて測定を行った。

【 0 1 9 6】

< 蛍光スペクトルの測定 >

50

化合物の蛍光スペクトルは、F-2500形分光蛍光光度計（日立製作所社製）を用い、化合物をトルエンに $1 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度で溶解させ、波長460 nmで励起させた際の蛍光スペクトルを測定した。

【0197】

<発光量子収率の測定>

化合物の発光量子収率は、絶対PL量子収率測定装置（Quantaurus-QY、浜松ホトニクス社製）を用い、化合物をトルエンに $1 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度で溶解させ、波長460 nmで励起させた際の発光量子収率を測定した。

【0198】

（合成例1）

以下に、本発明における合成例1の化合物G-23の合成方法について説明する。化合物G-23の合成方法では、3, 5-ジブロモベンズアルデヒド（3.0 g）、4-メトキシカルボニルフェニルボロン酸（5.3 g）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）（0.4 g）、および炭酸カリウム（2.0 g）をフラスコに入れ、窒素置換した。これに、脱気したトルエン（30 mL）および脱気した水（10 mL）を加え、4時間還流した。その後、反応溶液を室温まで冷却し、有機層を、分液した後に飽和食塩水で洗浄した。この有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過後、溶媒を留去した。得られた反応生成物をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、3, 5-ビス（4-メトキシカルボニルフェニル）ベンズアルデヒド（3.5 g）を白色固体として得た。

【0199】

つぎに、3, 5-ビス（4-メトキシカルボニルフェニル）ベンズアルデヒド（1.5 g）と2, 4-ジメチル2, 4, 6-トリス（3, 5-ビストリフルオロメチルフェニル）フェニルエステルピロール（7.16 g）とを上記の反応溶液に入れ、脱水ジクロロメタン（200 mL）およびトリフルオロ酢酸（1滴）を加えて、窒素雰囲気下、4時間攪拌した。これに、2, 3-ジクロロ-5, 6-ジシアノ-1, 4-ベンゾキノン（0.85 g）の脱水ジクロロメタン溶液を加え、さらに1時間攪拌した。反応終了後、三フッ化ホウ素ジエチルエーテル錯体（7.0 mL）およびジイソプロピルエチルアミン（7.0 mL）を加えて、4時間攪拌した後、さらに水（100 mL）を加えて攪拌し、有機層を分液した。この有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過後、溶媒を留去した。得られた反応生成物をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、フッ化ホウ素錯体（0.4 g）を得た。

【0200】

つぎに、得られたフッ化ホウ素錯体（0.4 g）をフラスコに入れ、ジクロロメタン（5 mL）とトリメチルシリルシアニド（0.67 mL）と三フッ化ホウ素ジエチルエーテル錯体（0.20 mL）とを加えて、18時間攪拌した。その後、さらに水（5 mL）を加えて攪拌し、有機層を分液した。この有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過後、溶媒を留去した。得られた反応生成物をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、化合物（0.28 g）を得た。この得られた化合物の $^1\text{H-NMR}$ 分析結果は次の通りであり、これが化合物G-23であることが確認された。

$^1\text{H-NMR}$ （ CDCl_3 , ppm）：7.95–7.78（m, 11H）、7.63–7.48（m, 22H）、4.72（s, 6H）、2.58（s, 6H）、1.50（s, 6H）

【0201】

以下の実施例および比較例では、各色変換フィルム、青色LED素子（発光ピーク波長：445 nm）および導光板を備えたバックライトユニットに対し、導光板の一面に色変換フィルムを積層し且つ色変換フィルム上にプリズムシートを積層した後、電流を流して、この青色LED素子を点灯させ、分光放射輝度計（CS-1000、コニカミノルタ社製）を用いて初期発光特性を測定した。なお、初期発光特性の測定時は色変換フィルムを挿入せず、青色LED素子からの光の明るさが800 cd/m²となるように初期値を設定した。その後、室温下で青色LED素子からの光を連続照射し、輝度が5%低下するま

10

20

30

40

50

での時間を観測することで、光耐久性を評価した。

【0202】

(実施例1)

本発明の実施例1は、上述した実施形態に係るピロメテンホウ素錯体を発光材料（色変換材料）として用いた場合の実施例である。この実施例1では、バインダー樹脂としてアクリル樹脂を用い、このアクリル樹脂の100重量部に対して、発光材料として化合物G-1を0.25重量部、溶剤としてトルエンを400重量部、混合した。その後、これらの混合物を、遊星式攪拌・脱泡装置“マゼルスターKK-400”（クラボウ社製）を用いて300rpmで20分間攪拌・脱泡し、これにより、色変換組成物を得た。

【0203】

同様に、バインダー樹脂としてポリエステル樹脂を用い、このポリエステル樹脂の100重量部に対して、溶剤としてトルエンを300重量部、混合した。その後、この溶液を、遊星式攪拌・脱泡装置“マゼルスターKK-400”（クラボウ社製）を用いて300rpmで20分間攪拌・脱泡し、これにより、接着剤組成物を得た。

【0204】

つぎに、上述したように得られた色変換組成物を、スリットダイコーターを用いて第一の基材層である“ルミラー”U48（東レ社製、厚さ50μm）上に塗布し、100℃で20分加熱、乾燥して、平均膜厚16μmの（A）層を形成した。

【0205】

同様に、上述したように得られた接着剤組成物を、スリットダイコーターを用いて第二の基材層である光拡散フィルム“ケミカルマット”125PW（きもと社製、厚さ138μm）のPET基材層側に塗布し、100℃で20分加熱、乾燥して、平均膜厚48μmの（B）層を形成した。

【0206】

つぎに、これら二つの（A）層および（B）層を、（A）層の色変換層と（B）層の接着層とが直接積層されるように加温ラミネートすることで、「第一の基材層／色変換層／接着層／第二の基材層／光拡散層」という積層構成の色変換フィルムを作製した。

【0207】

この色変換フィルムを用いて青色LED素子からの光（青色光）を色変換させたところ、緑色光の発光領域のみを抜粋すると、ピーク波長529nm、ピーク波長における発光スペクトルの半値幅27nmの高色純度緑色発光が得られた。ピーク波長における発光強度は、後述の比較例1における量子収率を1.00としたときの相対値である。実施例1の当該量子収率は、1.34であった。また、室温下で青色LED素子からの光を連続照射したところ、輝度が5%低下する時間は、1010時間であった。実施例1の発光材料および評価結果は、後述の表1-1に示す。

【0208】

(実施例2～36および比較例1～6)

本発明の実施例2～36および本発明に対する比較例1～6では、発光材料として後述の表1-1～1-3に記載した化合物（化合物G-2～G-36、G-101～G-106）を適宜用いたこと以外は、実施例1と同様にして、色変換フィルムを作製して評価した。実施例2～36、比較例1～6の発光材料および評価結果は、表1-1～1-3に示す。ただし、表中の量子収率（相対値）は、ピーク波長における量子収率であり、実施例1と同様に、比較例1における強度を1.00としたときの相対値である。また、光耐久性は、長時間であればあるほど好ましく、具体的には800時間以上であることが好ましい。

【0209】

10

20

30

40

50

【表 1 - 1】

(表1-1)

	発光材料	ピーク波長 (nm)	半値幅 (nm)	量子収率 (相対値)	光耐久性 (h)
実施例1	G-1	529	27	1.34	1010
実施例2	G-2	528	28	1.30	1070
実施例3	G-3	527	27	1.35	1180
実施例4	G-4	527	26	1.28	1190
実施例5	G-5	529	28	1.29	1290
実施例6	G-6	528	28	1.31	1460
実施例7	G-7	527	27	1.30	1420
実施例8	G-8	527	28	1.35	1410
実施例9	G-9	529	28	1.32	1440
実施例10	G-10	526	27	1.33	1250
実施例11	G-11	528	27	1.35	1380
実施例12	G-12	527	28	1.37	1790
実施例13	G-13	528	28	1.28	1620
実施例14	G-14	528	28	1.35	1950
実施例15	G-15	528	27	1.31	1810
実施例16	G-16	527	26	1.32	2400
実施例17	G-17	530	27	1.29	1000
実施例18	G-18	526	28	1.31	1010

【 0 2 1 0 】

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

(表1-2)

	発光材料	ピーク波長 (nm)	半値幅 (nm)	量子収率 (相対値)	光耐久性 (h)
実施例19	G-19	529	28	1.33	1100
実施例20	G-20	525	28	1.29	1120
実施例21	G-21	527	27	1.31	1390
実施例22	G-22	527	28	1.36	1670
実施例23	G-23	527	28	1.36	1720
実施例24	G-24	527	27	1.39	1840
実施例25	G-25	527	28	1.38	1880
実施例26	G-26	541	29	1.30	1380
実施例27	G-27	540	28	1.29	1680
実施例28	G-28	541	29	1.31	1870
実施例29	G-29	545	28	1.32	1910
実施例30	G-30	528	28	1.33	2090
実施例31	G-31	528	28	1.37	2100
実施例32	G-32	527	28	1.36	2150
実施例33	G-33	527	27	1.30	2300
実施例34	G-34	527	27	1.31	2300
実施例35	G-35	527	27	1.32	2450
実施例36	G-36	525	27	1.33	2500

【 0 2 1 1 】

10

20

30

40

50

【表 1 - 3】

(表1-3)

	発光材料	ピーク波長 (nm)	半値幅 (nm)	量子収率 (相対値)	光耐久性 (h)
比較例1	G-101	541	40	1.00	100
比較例2	G-102	530	30	0.88	120
比較例3	G-103	527	31	0.79	80
比較例4	G-104	528	26	0.77	70
比較例5	G-105	540	58	1.13	20
比較例6	G-106	527	28	1.29	740

【産業上の利用可能性】

【0212】

以上のように、本発明に係るピロメテンハウ素錯体、色変換組成物、色変換フィルム、光源ユニット、ディスプレイ、および照明装置は、色再現性の向上と高い耐久性との両立に適している。

【符号の説明】

【0213】

1 A、1 B、1 C、1 D 色変換フィルム

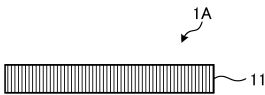
1 0 基材層

1 1 色変換層

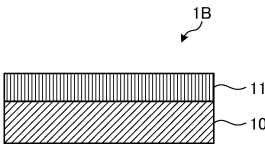
1 2 バリアフィルム

【図面】

【図 1】

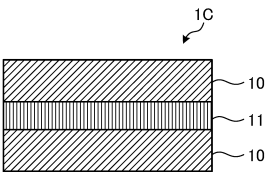


【図 2】

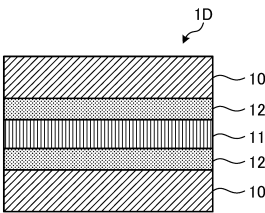


10

【図 3】



【図 4】



20

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献 特表2019-508377 (JP, A)
 特表2021-531319 (JP, A)
 特許第6693578 (JP, B2)
 国際公開第2020/080784 (WO, A1)
 韓国公開特許第10-2019-0004552 (KR, A)
 特表2018-505127 (JP, A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
 C07F 5/
 C09K 11/
 H05B 33/
 H10K 50/
 Caplus/REGISTRY (STN)