

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7512522号
(P7512522)

(45)発行日 令和6年7月8日(2024.7.8)

(24)登録日 令和6年6月28日(2024.6.28)

(51)国際特許分類		F I	
H 1 0 K	50/12 (2023.01)	H 1 0 K	50/12
H 1 0 K	85/60 (2023.01)	H 1 0 K	85/60
H 1 0 K	85/30 (2023.01)	H 1 0 K	85/30
H 1 0 K	59/10 (2023.01)	H 1 0 K	59/10
H 1 0 K	50/13 (2023.01)	H 1 0 K	50/13
請求項の数 14 (全307頁) 最終頁に続く			
(21)出願番号	特願2023-517814(P2023-517814)	(73)特許権者	512187343
(86)(22)出願日	令和3年9月17日(2021.9.17)		三星ディスプレイ株式會社
(65)公表番号	特表2023-541977(P2023-541977 A)		S a m s u n g D i s p l a y C o . , L t d .
(43)公表日	令和5年10月4日(2023.10.4)		大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1
(86)国際出願番号	PCT/EP2021/075642		1, S a m s u n g - r o , G i h e u n g - g u , Y o n g i n - s i ,
(87)国際公開番号	WO2022/058515		G y e o n g g i - d o , R e p u b l i c o f K o r e a
(87)国際公開日	令和4年3月24日(2022.3.24)		
審査請求日	令和5年9月14日(2023.9.14)	(74)代理人	110002619
(31)優先権主張番号	20197076.1		弁理士法人 P O R T
(32)優先日	令和2年9月18日(2020.9.18)	(72)発明者	リメス, コディ
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)		ドイツ連邦共和国 7 6 1 3 7 カールスルーエ, シュトゥットガルトーシュトラ ーセ 2 7 エー
(31)優先権主張番号	20197075.3		
(32)優先日	令和2年9月18日(2020.9.18)		
最終頁に続く		最終頁に続く	

(54)【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子および光発生方法

(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

4 個の成分 (i) ~ (i v) を含む発光層 B を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子：

(i) 最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^E)$ 及び最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^E)$ を有する T A D F 材料 E^B 、

(i i) 最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^{EE T-2})$ 及び最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^{EE T-2})$ を有し、燐光材料 P^B である、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ 、

(i i i) 最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^S)$ 及び最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^S)$ を有し、 0.25 eV 以下の半値幅 (F W H M) を有する光を放出する小半値幅 (F W H M) エミッタ S^B 、及び

(i v) 最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^H)$ 及び最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^H)$ を有するホスト材料 H^B 、

ここで、前記小 F W H M エミッタ S^B は、 $440\sim 480\text{ nm}$ の最大発光を有する光を放出する。

【請求項 2】

下記条件のうち 1 つを満たす、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

(i) $E(T1^{EE T-2}) \geq E(T1^E)$ 及び $E(T1^{EE T-2}) - E(S1^S) \leq 0.3\text{ eV}$ 、または

(i i) $E(T1^E) > E(T1^{EE T-2})$ 及び $E(T1^E) - E(S1^S) \leq 0.3$ eV。

【請求項 3】

下記条件のうち 1 つを満たす、請求項 1 または 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

(i) $E(T1^{EE T-2}) \geq E(T1^E)$ 及び $E(T1^{EE T-2}) - E(S1^S) \leq 0.2$ eV、または

(i i) $E(T1^E) > E(T1^{EE T-2})$ 及び $E(T1^E) - E(S1^S) \leq 0.2$ eV。

【請求項 4】

下記条件のうち 1 つを満たす、請求項 1 ～ 3 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

(i) $E(T1^{EE T-2}) \geq E(T1^E)$ 及び $E(T1^{EE T-2}) - E(T1^S) \leq 0.3$ V、または

(i i) $E(T1^E) > E(T1^{EE T-2})$ 及び $E(T1^E) - E(T1^S) \leq 0.3$ eV。

【請求項 5】

前記小 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、請求項 1 ～ 4 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

(i) ボロン (B) 含有エミッタであり、これは、それぞれの小 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、及び／または

(i i) 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。

【請求項 6】

前記 TADF 材料 E^B は、

(i) 最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^E)$ とのエネルギー差に対応する ΔE_{ST} 値が 0.4 eV 未満であることを特徴とし、

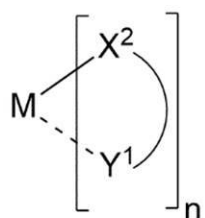
(i i) 30% より大きいフォトルミネッセンス量子収率 (PLQY) を示す、

請求項 1 ～ 5 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

前記燐光材料 P^B は、化学式 $P^B - I$ による構造を含むか、あるいはそれから構成される、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

【化 1】



・・・化学式 $P^B - I$

ここで、M は、Ir、Pd、Pt、Au、Eu、Ru、Re、Ag 及び Cu から構成される群から選択され、

n は、1 ～ 3 の整数であり、

X^2 及び Y^1 は、共にそれぞれの場合に互いに独立して、二座モノアニオン性リガンドを形成する。

【請求項 8】

下記条件のうち 1 つを満たす、請求項 1 ～ 7 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

10

20

30

40

50

(i) $\text{HOMO}(\text{S}^{\text{B}}) > \text{HOMO}(\text{E}^{\text{B}})$ 及び $\text{HOMO}(\text{S}^{\text{B}}) > \text{HOMO}(\text{EET}-2)$ 、または

(ii) $\text{HOMO}(\text{E}^{\text{B}}) > \text{HOMO}(\text{S}^{\text{B}})$ 及び $\text{HOMO}(\text{E}^{\text{B}}) > \text{HOMO}(\text{EET}-2)$ 。

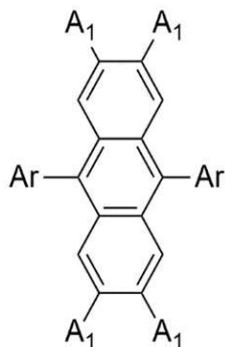
【請求項 9】

前記発光層 B に隣接した 1 層の隣接層は、三重項・三重項消滅 (TTA) 材料を含む、請求項 1～8 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

前記 TTA 材料は、下記化学式 4 で表される構造を含む、請求項 9 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子：

【化 2】



・・・化学式 4

ここで、

それぞれの Ar は、独立して、下記から構成される群から選択され、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される 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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C₃–C₅₇ヘテロアリール、

それぞれの A₁ は、独立して、下記から構成され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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される 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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される 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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C₁–C₄₀ (ヘテロ) アルキル。

【請求項 11】

前記隣接層は、少なくとも 1 つの追加エミッタを含む、請求項 9 または 10 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

前記隣接層内の前記追加エミッタは、0.25 eV 以下の半値幅 (FWHM) 及び 440～480 nm の最大発光を有する小半値幅 (FWHM) エミッタ S^B である、請求項 11 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 13】

10

20

30

40

50

下記ステップを含む、光発生方法：

(i) 請求項 1 ～ 1.2 のうちいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び

(ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加すること。

【請求項 1.4】

主発光ピークの最大発光が 440 nm ～ 480 nm、または、450 nm ～ 475 nm、または、460 nm ～ 475 nm の波長内にある光を発生させる、請求項 1.3 に記載の光発生方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

10

【0001】

本発明は、TADF材料E^B、励起エネルギー移動成分EET-2、0.25 eV以下の半値幅(FWHM)を有する、青色光を発する1以上の小半値幅(FWHM)エミッタS^B、及びホスト材料H^Bを含む発光層Bを含む有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。また、本発明は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子による青色光生成方法に関する。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0002】

例えば、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のような有機物を用いる1層以上の発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子の重要性が増加しつつある。特に、OLEDは、スクリーン、ディスプレイ及び照明装置のような電子製品のための有望な素子である。実質的に無機物を用いほとんどのエレクトロルミネッセンス素子とは対照的に、有機物を用いる有機エレクトロルミネッセンス素子は、通常、柔軟かつ特に薄膜で生産可能である。今日すでに使用可能なOLEDを用いるスクリーン及びディスプレイは、優れた効率及び長い寿命、または優れた色純度及び長い寿命を提供するが、優れた効率、長い寿命及び優れた色純度の三つの特性をいずれも有していない。

20

【0003】

OLEDの色純度または色点は、一般的にCIE_x及びCIE_y座標により提供される一方、次世代ディスプレイの色領域は、いわゆるBT-2020及びDCPI3値により提供される。一般的に、そのような色座標を得るためには、トップエミッション素子がキャビティを変更し、色座標を調整することが必要である。そのような色領域を目標としつつ、トップエミッション素子において高効率を達成するためには、ボトムエミッション素子において狭い発光スペクトルが必要である。

30

【0004】

最新の燐光エミッタは、多少ブロードな発光を示し、これは、一般的に0.25 eVより大きい発光スペクトルの半値幅(FWHM)を有する燐光を用いるOLED(PHOLED)のブロードな発光によって反映される。ボトム素子におけるPHOLEDのブロードな発光スペクトルは、BT-2020及びDCPI3色領域を目標とするトップエミ

40

ッション素子構造に対し、アウトカップリング効率の大きな損失をもたらす。

【0005】

また、燐光材料は、典型的に、遷移金属、例えば、イリジウムを使用し、これは、一般的に豊富ではないため、OLEDスタック内で非常に高価な材料である。したがって、遷移金属使用の材料は、OLEDのコスト低減のための可能性が最も大きい。OLEDスタック内の遷移金属含量を低くすることは、OLED適用製品の値策定のための重要業績評価指標である。

【0006】

近年、多少狭い発光スペクトルを示す一部蛍光エミッタまたはTADF(thermally-activated-delayed-fluorescence)エミッタが

50

開発されており、これは、一般的に 0.25 eV 以下の発光スペクトルの FWHM を示し、したがって、BT-2020 及び DCPI3 色領域を達成するのに適している。しかし、そのような蛍光エミッタ及び TADF エミッタは、一般的に、例えば、励起子・ポーロン消滅または励起子・励起子消滅により、寿命が短いだけでなく、さらに高い輝度で効率低下（すなわち、OLED のロールオフ挙動）により、低い効率という問題を抱えている。

【0007】

そのような短所は、いわゆるハイパーアプローチを適用し、ある程度克服することができる。後者は、前述のように、好ましくは、狭い発光スペクトルを示す蛍光エミッタにエネルギーを移動させるエネルギーポンプの使用に依存する。エネルギーポンプは、例えば、逆項間交差（reverse-inter-system crossing: RISC）を示す TADF 材料、または効率的な項間交差（ISC）を示す遷移金属錯体であってもよい。しかし、そのようなアプローチは、前述の好ましい特徴、すなわち、優れた効率、長い寿命及び優れた色純度をいずれも有する有機エレクトロルミネッセンス素子を依然として提供することができない。

【0008】

光を発生させるための有機エレクトロルミネッセンス素子の中心要素は、典型的に、正極と負極との間に位置した少なくとも 1 層の発光層である。有機エレクトロルミネッセンス素子に電圧（及び電流）を印加すれば、正極から正孔が注入され、負極から電子が注入される。通常、正孔輸送層は、発光層と正極との間に位置し、電子輸送層は、通常、発光層と負極との間に位置する。相異なる層が順次に配置される。高いエネルギーの励起子は、発光層において正孔と電子との再結合によって生成される。そのような励起状態（例えば、S1 のような一重項状態及び／または T1 のような三重項状態）が基底状態（S0）に減衰することにより、好ましくは、発光を引き起こす。

【課題を解決するための手段】

【0009】

驚いたことに、TADF 材料 E^B、励起エネルギー移動成分 EET-2、 0.25 eV 以下の半値幅（FWHM）を有する、青色光を発する 1 以上の小半値幅（FWHM）エミッタ S^B、及びホスト材料 H^B を含む有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層が、長い寿命、高い量子収率、並びに青色 BT-2020 及び DCPI3 色領域を達成するのに理想的に適している、狭い発光を示す有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することを見つけた。

【0010】

ここで、TADF 材料 E^B 及び／または EET-2 は、発光する小 FWHM（full width at half maximum）エミッタ S^B に励起エネルギーを移動させることができる。

【発明を実施するための形態】

【0011】

本発明は、4 個の成分（i）～（iv）を含むか、あるいはそれから構成される発光層 B を含む有機エレクトロルミネッセンス素子に係わるものである：

（i）最低励起一重項状態エネルギーレベル E（S1^E）及び最低励起三重項状態エネルギーレベル E（T1^E）を有する TADF 材料 E^B、

（ii）最低励起一重項状態エネルギーレベル E（S1^{EET-2}）及び最低励起三重項状態エネルギーレベル E（T1^{EET-2}）を有し、TADF 材料及び燐光材料から構成される群から選択される、励起エネルギー移動成分 EET-2、

（iii）最低励起一重項状態エネルギーレベル E（S1^S）及び最低励起三重項状態エネルギーレベル E（T1^S）を有し、 0.25 eV 以下の半値幅（FWHM）を有する光を放出する小半値幅（FWHM）エミッタ S^B、

（iv）最低励起一重項状態エネルギーレベル E（S1^H）及び最低励起三重項状態エネルギーレベル E（T1^H）を有するホスト材料 H^B、及び

10

20

30

40

50

(v) 選択的な1以上の溶媒。

【0012】

ここで、前記小FWHMエミッタ S^B は、440～480nmの最大発光を有する光を放出する。

【0013】

前述の要求事項を満たせば、長い寿命、高い量子収率及び狭い発光を示し、青色BT-2020及びDCPI3色領域を達成するのに理想的に適している有機エレクトロルミネッセンス素子が得られる。

【0014】

本文の全般にわたって、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層B内の成分の励起状態、軌道、最大発光などのエネルギー間の関係を参照するであろう。2つの特定成分のエネルギーを含む関係式は、そのような特定成分をいずれも含む発光層Bにのみ適用されるということが理解される。また、一関係が本発明による素子に適用されるという事実は、本発明の全ての素子が前記関係で言及される全成分を含まなければならないということの意味しない。そのような一般的な事項は、本発明の全ての実施形態に適用可能である。

【0015】

発光層(EML)Bの組成

以下、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bの組成をより具体的に記述するにあたって、場合によって特定材料の含量を百分率で示す。特定の実施形態に対して特に言及しない限り、全ての百分率は、重量百分率を示し、これは、重量パーセントまたは重量%((重量/重量)、(w/w)、wt.%)と同一の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、特定の組成において、1以上の小FWHMエミッタ S^B の含量が例示的に1%と言及するとき、これは、1以上の小FWHMエミッタ S^B (すなわち、全ての S^B 分子の合算)は、1重量%、すなわち、各発光層Bの全体重量の1%を占める。発光層Bの組成がその成分の好ましい含量を重量%で提供することによって特定される度に、全成分の総含量を合算すれば、100重量%(すなわち、それぞれの発光層Bの総重量)となるものと理解される。

【0016】

ホスト材料 H^B 、TADF材料 E^B 、励起エネルギー移動成分EET-2及び小FWHMエミッタ S^B は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に任意の量及び割合で含まれる。

【0017】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

(i) 12～60重量%のTADF材料 E^B 、

(ii) 0.1～30重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、

(iii) 0.1～10重量%の小FWHMエミッタ S^B 、

(iv) 30～87.8重量%のホスト材料 H^B 、及び選択的に

(v) 0～57.8重量%の1以上の溶媒、及び選択的に

(vi) 0～57.8重量%の(好ましくは、前述の成分(i)～(iv)と異なる)

、TADF材料、燐光材料、ホスト材料及び小FWHMエミッタの群から選択された材料。

【0018】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

(i) 12～60重量%のTADF材料 E^B 、

(ii) 0.1～30重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、

(iii) 0.1～10重量%の小FWHMエミッタ S^B 、

(iv) 30～87.8重量%のホスト材料 H^B 、及び選択的に

(v) 0～57.8重量%の1以上の溶媒。

【0019】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 12～60重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～30重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～10重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 30～87.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～3重量%の1以上の溶媒。

【0020】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 15～50重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～15重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～5重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 30～84.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～54.8重量%の1以上の溶媒。

【0021】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 15～50重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～15重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～5重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 30～84.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～3重量%の1以上の溶媒。

【0022】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～50重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～10重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～39.8重量%の1以上の溶媒。

【0023】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～50重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～10重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～3重量%の1以上の溶媒。

【0024】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～45重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～5重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～39.8重量%の1以上の溶媒。

【0025】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において

10

20

30

40

50

、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～45重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～5重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～7重量%の1以上の溶媒。

【0026】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～45重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～3重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～39.8重量%の1以上の溶媒。

【0027】

好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層Bは、下記を含むか、あるいはそれから構成される：

- (i) 20～45重量%のTADF材料E^B、
- (ii) 0.1～3重量%の励起エネルギー移動成分EET-2、
- (iii) 0.1～3重量%の小FWHMエミッタS^B、
- (iv) 40～79.8重量%のホスト材料H^B、及び選択的に
- (v) 0～9重量%の1以上の溶媒。

【0028】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として5重量%以下の励起エネルギー移動成分EET-2を含む（それぞれの発光層Bにおいて、EET-2の総含量は5重量%以下を意味する）。

【0029】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として5重量%以下の励起エネルギー移動成分EET-2を含む（それぞれの発光層Bにおいて、EET-2の総含量は5重量%以下を意味する）。

【0030】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として3重量%以下の励起エネルギー移動成分EET-2を含む（それぞれの発光層Bにおいて、EET-2の総含量は3重量%以下を意味する）。

【0031】

本発明の一実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として5重量%以下の小FWHMエミッタS^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、S^Bの総含量は5重量%以下を意味する）。

【0032】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として3重量%以下の小FWHMエミッタS^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、S^Bの総含量は3重量%以下を意味する）。

【0033】

本発明の一実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として1重量%以下の小FWHMエミッタS^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、S^Bの総含量は1重量%以下を意味する）。

【0034】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として15～50重量%のTADF材料E^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、E^Bの総含量は15～50重量%の範囲であることを意味する）。

10

20

30

40

50

【0035】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として20～50重量%のTADF材料E^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、E^Bの総含量は20～50重量%の範囲であることを意味する）。

【0036】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bは、発光層Bの総重量を基準として20～45重量%のTADF材料E^Bを含む（それぞれの発光層Bにおいて、E^Bの総含量は20～45重量%の範囲であることを意味する）。

【0037】

S1-T1-エネルギー関係

10

本発明の文脈において、

(i) TADF材料E^Bは、エネルギーレベルE(S1^E)を有する最低励起一重項状態S1^E、及びエネルギーレベルE(T1^E)を有する最低励起三重項状態T1^Eを有し、

(ii) 励起エネルギー移動成分EET-2は、エネルギーレベルE(S1^{EET-2})を有する最低励起一重項状態S1^{EET-2}、及びエネルギーレベルE(T1^{EET-2})を有する最低励起三重項状態T1^{EET-2}を有し、

(iii) 小半値幅(FWHM)エミッタS^Bは、エネルギーレベルE(S1^S)を有する最低励起一重項状態S1^S、及びエネルギーレベルE(T1^S)を有する最低励起三重項状態T1^Sを有し、

(iv) ホスト材料H^Bは、エネルギーレベルE(S1^H)を有する最低励起一重項状態S1^H、及びエネルギーレベルE(T1^H)を有する最低励起三重項状態T1^Hを有する。

20

【0038】

本発明の一実施形態において、下記式(7)～(9)で表される関係は、発光層Bに含まれた材料に適用される：

$$E(S1^H) > E(S1^E) \quad (7)$$

$$E(S1^H) > E(S1^{EET-2}) \quad (8)$$

$$E(S1^H) > E(S1^S) \quad (9)。$$

【0039】

したがって、ホスト材料H^Bの最低励起一重項状態S1^Hは、好ましくは、TADF材料E^Bの最低励起一重項状態S1^Eよりエネルギーが高く(式7)、励起エネルギー移動成分EET-2の最低励起一重項状態S1^{EET-2}よりエネルギーが高く(式8)、小FWHMエミッタS^Bの最低励起一重項状態S1^Sよりエネルギーが高い(式9)。

30

【0040】

一実施形態において、式(7)～(9)で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれた材料に適用される。

【0041】

本発明の一実施形態において、下記式(10)及び(11)で表される関係のうち1つまたは両方は、同一の発光層Bに含まれた材料に適用される：

$$E(S1^E) > E(S1^S) \quad (10)$$

$$E(S1^{EET-2}) > E(S1^S) \quad (11)。$$

40

【0042】

したがって、TADF材料E^Bの最低励起一重項状態S1^E(式10)及び／または励起エネルギー移動成分EET-2の最低励起一重項状態S1^{EET-2}(式11)は、好ましくは、小FWHMエミッタS^Bの最低励起一重項状態S1^Sよりエネルギーが高い。

【0043】

一実施形態において、式(10)及び(11)で表される前述の関係のうち1つまたは両方は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれた材料に適用される。

【0044】

50

本発明の好ましい実施形態において、下記式（７）～（１１）で表される関係は、同一の発光層Ｂに含まれた材料に適用される：

$$E(S1^H) > E(S1^E) \quad (7)$$

$$E(S1^H) > E(S1^{EET-2}) \quad (8)$$

$$E(S1^H) > E(S1^S) \quad (9)$$

$$E(S1^E) > E(S1^S) \quad (10)$$

$$E(S1^{EET-2}) > E(S1^S) \quad (11)。$$

【００４５】

一実施形態において、式（７）～（１１）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００４６】

本発明の好ましい実施形態において、下記式（１３）及び（１４）で表される関係は、発光層Ｂに含まれた材料に適用される：

$$E(T1^H) > E(T1^E) \quad (13)$$

$$E(T1^E) \geq E(T1^{EET-2}) \quad (14)。$$

【００４７】

したがって、ホスト材料 H^B の最低励起三重項状態 $T1^H$ は、好ましくは、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ よりエネルギーが高い（式１３）。また、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、好ましくは、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより高い（式１４）。

【００４８】

一実施形態において、式（１３）及び（１４）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００４９】

本発明の好ましい実施形態において、下記式（１４）～（１６）で表される関係は、同一な発光層Ｂに含まれた材料に適用される：

$$E(T1^E) \geq E(T1^{EET-2}) \quad (14)$$

$$E(T1^{EET-2}) > E(S1^S) \quad (15)$$

$$E(T1^{EET-2}) > E(T1^S) \quad (16)。$$

【００５０】

したがって、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、好ましくは、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより高く（式１４）、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ は、好ましくは、小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ よりエネルギーが高く（式１５）、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ は、好ましくは、小FWHMエミッタ S^B の最低励起三重項状態 $T1^S$ よりエネルギーが高い（式１６）。

【００５１】

一実施形態において、式（１４）～（１６）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００５２】

本発明の好ましい実施形態において、下記式（７）～（１０）及び下記式（１５）で表される関係が適用される：

$$E(S1^H) > E(S1^E) \quad (7)$$

$$E(S1^H) > E(S1^{EET-2}) \quad (8)$$

$$E(S1^H) > E(S1^S) \quad (9)$$

$$E(S1^E) > E(S1^S) \quad (10)$$

$$E(T1^{EET-2}) > E(S1^S) \quad (15)。$$

【００５３】

10

20

30

40

50

一実施形態において、式（７）～（１０）及び式（１５）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００５４】

本発明の代替的な実施形態において、下記式（１７）及び（１０）で表される関係は、発光層Ｂに含まれた材料に適用される：

$$E(T1^{EE T-2}) > E(T1^E) \quad (17)$$

$$E(S1^E) > E(S1^S) \quad (10)。$$

【００５５】

したがって、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ は、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ よりエネルギーが高く（式１７）、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起一重項状態 $S1^E$ は、小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ よりエネルギーが高い（式１０）。

【００５６】

代替的な実施形態において、式（１７）及び（１０）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００５７】

本発明の好ましい実施形態において、下記式（１８）、（１５）、（１９）及び（２０）で表される関係は、発光層Ｂに含まれた材料に適用される：

$$E(T1^H) > E(T1^{EE T-2}) \quad (18)$$

$$E(T1^{EE T-2}) > E(S1^S) \quad (15)$$

$$E(T1^H) > E(S1^E) \quad (19)$$

$$E(T1^E) > E(T1^{EE T-2}) \quad (20)。$$

【００５８】

したがって、ホスト材料 H^B の最低励起三重項状態 $T1^H$ は、好ましくは、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ よりエネルギーが高く（式１８）、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ は、好ましくは、小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ よりエネルギーが高く（式１５）、ホスト材料 H^B の最低励起三重項状態 $T1^H$ は、好ましくは、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起一重項状態 $S1^E$ よりエネルギーが高く（式１９）、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、好ましくは、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ よりエネルギーが高い（式２０）。

【００５９】

一実施形態において、式（１８）、（１５）、（１９）及び（２０）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Ｂに含まれた材料に適用される。

【００６０】

本発明の一実施形態において、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ は、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより高く、

$$E(T1^{EE T-2}) \geq E(T1^E)$$

励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^{EE T-2}) - E(S1^S)$ は、 0.3 eV 以下である：

$$E(T1^{EE T-2}) - E(S1^S) \leq 0.3 \text{ eV}。$$

【００６１】

本発明の一実施形態において、 $TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、励起エネルギー移動成分 $EE T-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EE T-2}$ よりエネルギーが高く、

$$E(T1^E) > E(T1^{EE T-2})$$

$TADF$ 材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項

10

20

30

40

50

状態 $S1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^E) - E(S1^S)$ は、 0.3 eV 以下である：

$$E(T1^E) - E(S1^S) \leq 0.3 \text{ eV}.$$

【0062】

本発明の好ましい実施形態において、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ は、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより高く、

$$E(T1^{EET-2}) \geq E(T1^E)$$

励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^{EET-2}) - E(S1^S)$ は、 0.2 eV 以下である：

$$E(T1^{EET-2}) - E(S1^S) \leq 0.2 \text{ eV}.$$

【0063】

本発明の好ましい実施形態において、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ よりエネルギーが高く、

$$E(T1^E) > E(T1^{EET-2})$$

TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起一重項状態 $S1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^E) - E(S1^S)$ は、 0.2 eV 以下である：

$$E(T1^E) - E(S1^S) \leq 0.2 \text{ eV}.$$

【0064】

本発明の一実施形態において、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ は、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより高く、

$$E(T1^{EET-2}) \geq E(T1^E)$$

励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起三重項状態 $T1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^{EET-2}) - E(T1^S)$ は、 0.3 eV 以下である：

$$E(T1^{EET-2}) - E(T1^S) \leq 0.3 \text{ eV}.$$

【0065】

本発明の一実施形態において、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ よりエネルギーが高く、

$$E(T1^E) > E(T1^{EET-2})$$

励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起三重項状態 $T1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^{EET-2}) - E(T1^S)$ は、 0.3 eV 以下である：

$$E(T1^E) - E(T1^S) \leq 0.3 \text{ eV}.$$

【0066】

本発明の一実施形態において、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ は、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ よりエネルギーが高く、

$$E(T1^{EET-2}) > E(T1^E)$$

励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ と小FWHMエミッタ S^B の最低励起三重項状態 $T1^S$ とのエネルギー差 $E(T1^{EET-2}) - E(T1^S)$ は、 0.2 eV 以下である：

$$E(T1^{EET-2}) - E(T1^S) \leq 0.2 \text{ eV}.$$

【0067】

本発明の一実施形態において、TADF材料 E^B の最低励起三重項状態 $T1^E$ は、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ よりエネルギーが高く、

10

20

30

40

50

$$E(T1^E) > E(T1^{EET-2})$$

励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最低励起三重項状態 $T1^{EET-2}$ と小 FWHM エミッタ S^B の最低励起三重項状態 $T1^S$ とのエネルギー $E(T1^{EET-2}) - E(T1^S)$ は、 0.2 eV 以下である：

$$E(T1^{EET-2}) - E(T1^S) \leq 0.2 \text{ eV}.$$

【0068】

HOMO-、LUMO-エネルギー関係

本発明の文脈において、

(i) TADF 材料 E^B は、エネルギー $E^{HOMO}(E^B)$ を有する最高被占軌道 HOMO (E^B)、及びエネルギー $E^{LUMO}(E^B)$ を有する最低空軌道 LUMO (E^B) を有し、

10

(ii) 小半値幅 (FWHM) エミッタ S^B は、エネルギー $E^{HOMO}(S^B)$ を有する最高被占軌道 HOMO (S^B)、及びエネルギー $E^{LUMO}(S^B)$ を有する最低空軌道 LUMO (S^B) を有し、

(iii) ホスト材料 H^B は、エネルギー $E^{HOMO}(H^B)$ を有する最高被占軌道 HOMO (H^B)、及びエネルギー $E^{LUMO}(H^B)$ を有する最低空軌道 LUMO (H^B) を有し、

(iv) 選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、エネルギー $E^{HOMO}(EET-2)$ を有する最高被占軌道 HOMO ($EET-2$)、及びエネルギー $E^{LUMO}(EET-2)$ を有する最低空軌道 LUMO ($EET-2$) を有する。

20

【0069】

好ましい実施形態において、下記式 (1) ~ (3) で表される関係は、発光層 B に含まれた材料に適用される：

$$E^{LUMO}(E^B) < E^{LUMO}(H^B) \quad (1)$$

$$E^{LUMO}(E^B) < E^{LUMO}(EET-2) \quad (2)$$

$$E^{LUMO}(E^B) < E^{LUMO}(S^B) \quad (3)。$$

【0070】

好ましい実施形態において、下記式 (4) ~ (6) で表される関係は、同一な発光層 B に含まれた材料に適用される：

$$E^{HOMO}(EET-2) \geq E^{HOMO}(H^B) \quad (4)$$

$$E^{HOMO}(EET-2) \geq E^{HOMO}(E^B) \quad (5)$$

$$E^{HOMO}(EET-2) \geq E^{HOMO}(S^B) \quad (6)。$$

30

【0071】

好ましい実施形態において、前述の式 (1) ~ (6) で表される関係は、発光層 B に含まれた材料に適用される。

【0072】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E^{HOMO}(S^B)$ を有する小半値幅 (FWHM) エミッタ S^B の最高被占軌道 HOMO (S^B) は、エネルギー $E^{HOMO}(H^B)$ を有するホスト材料 H^B の最高被占軌道 HOMO (H^B) よりエネルギーが高い：

$$E^{HOMO}(S^B) > E^{HOMO}(H^B)。$$

40

【0073】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E^{HOMO}(S^B)$ を有する小半値幅 (FWHM) エミッタ S^B の最高被占軌道 HOMO (S^B) は、エネルギー $E^{HOMO}(E^B)$ を有する TADF 材料 E^B の最高被占軌道 HOMO (E^B) よりエネルギーが高い：

$$E^{HOMO}(S^B) > E^{HOMO}(E^B)。$$

【0074】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E^{HOMO}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 HOMO ($EET-2$) は、エネルギー $E^{HOMO}(E^B)$ を有する TADF 材料 E^B の最高被占軌道 HOMO (E^B) よりエネルギーが高い：

50

$$E_{\text{HOMO}}(EET-2) > E_{\text{HOMO}}(E^B)。$$

【0075】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ は、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(H^B)$ を有するホスト材料 H^B の最高被占軌道 $HOMO(H^B)$ よりエネルギーが高い：

$$E_{\text{HOMO}}(EET-2) > E_{\text{HOMO}}(H^B)。$$

【0076】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ は、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(S^B)$ を有する小半値幅(FWHM)エミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ よりエネルギーが高い：

$$E_{\text{HOMO}}(EET-2) > E_{\text{HOMO}}(S^B)。$$

【0077】

本発明の一実施形態において、TADF材料 E^B の最高被占軌道 $HOMO(E^B)$ は、小FWHMエミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ とエネルギーが同一であるか、またはそれより低い：

$$E_{\text{HOMO}}(E^B) \leq E_{\text{HOMO}}(S^B)。$$

【0078】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ と、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(S^B)$ を有する小半値幅(FWHM)エミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ とのエネルギー差は、 0.3 eV より小さい：

$$E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) < 0.3\text{ eV}。$$

【0079】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ と、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(S^B)$ を有する小半値幅(FWHM)エミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ とのエネルギー差は、 0.2 eV より小さい：

$$E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) < 0.2\text{ eV}。$$

【0080】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ と、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(S^B)$ を有する小FWHMエミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ とのエネルギー差は、 0.0 eV より大きく、 0.8 eV より小さい：

$$0.0\text{ eV} < E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) < 0.8\text{ eV}。$$

【0081】

本発明の好ましい実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ と、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(S^B)$ を有する小半値幅(FWHM)エミッタ S^B の最高被占軌道 $HOMO(S^B)$ とのエネルギー差は、 0 eV より大きく($E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) > 0\text{ eV}$)、好ましくは、 0.1 eV より大きく($E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) > 0.1\text{ eV}$)、より好ましくは、 0.2 eV より大きく($E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) > 0.2\text{ eV}$)、またははなはだしくは、 0.3 eV より大きい($E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(S^B) > 0.3\text{ eV}$)。

【0082】

本発明の好ましい実施形態において、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(EET-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最高被占軌道 $HOMO(EET-2)$ と、エネルギー $E_{\text{HOMO}}(E^B)$ を有するTADF材料 E^B の最高被占軌道 $HOMO(E^B)$ とのエネルギー差は、 0 eV より大きく($E_{\text{HOMO}}(EET-2) - E_{\text{HOMO}}(E^B) > 0$

10

20

30

40

50

eV)、好ましくは、0.1eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.1 \text{ eV}$)、より好ましくは、0.2eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.2 \text{ eV}$)、より一層好ましくは、0.3eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.3 \text{ eV}$)、さらに好ましくは、0.4eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.4 \text{ eV}$)、特に、0.5eVより大きい ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.5 \text{ eV}$)。

【0083】

本発明の好ましい実施形態において、エネルギー $E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $\text{EET}-2$ の最高被占軌道 $\text{HOMO}(\text{EET}-2)$ と、エネルギー $E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}})$ を有するホスト材料 H^{B} の最高被占軌道 $\text{HOMO}(\text{H}^{\text{B}})$ とのエネルギー差は、0eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0 \text{ eV}$)、好ましくは、0.1eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0.1 \text{ eV}$)、より好ましくは、0.2eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0.2 \text{ eV}$)、より一層好ましくは、0.3eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0.3 \text{ eV}$)、さらに好ましくは、0.4eVより大きく ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0.4 \text{ eV}$)、特に、0.5eVより大きい ($E^{\text{HOMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{B}}) > 0.5 \text{ eV}$)。

【0084】

本発明の一実施形態において、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}})$ を有する小半値幅 (FWHM) エミッタ S^{B} の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{S}^{\text{B}})$ と、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}})$ を有する TADF 材料 E^{B} の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{E}^{\text{B}})$ とのエネルギー差は、0.0eVより大きく、0.3eVより小さい：

$$0.0 \text{ eV} < E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) < 0.3 \text{ eV}.$$

【0085】

本発明の好ましい実施形態において、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}})$ を有する小 FWHM エミッタ S^{B} の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{S}^{\text{B}})$ と、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}})$ を有する TADF 材料 E^{B} の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{E}^{\text{B}})$ とのエネルギー差は、0eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0 \text{ eV}$)、好ましくは、0.1eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.1 \text{ eV}$)、より好ましくは、0.2eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.2 \text{ eV}$)、特に好ましくは、0.3eVより大きい ($E^{\text{LUMO}}(\text{S}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.3 \text{ eV}$)。

【0086】

本発明の好ましい実施形態において、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2)$ を有する選択的な励起エネルギー移動成分 $\text{EET}-2$ の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{EET}-2)$ と、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}})$ を有する TADF 材料 E^{B} の最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{E}^{\text{B}})$ とのエネルギー差は、0eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0 \text{ eV}$)、好ましくは、0.1eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.1 \text{ eV}$)、より好ましくは、0.2eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.2 \text{ eV}$)、より一層好ましくは、0.3eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.3 \text{ eV}$)、さらに好ましくは、0.4eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.4 \text{ eV}$)、特に、0.5eVより大きい ($E^{\text{LUMO}}(\text{EET}-2) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.5 \text{ eV}$)。

【0087】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料 H^{B} のエネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}})$ を有する最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{H}^{\text{B}})$ と、エネルギー $E^{\text{LUMO}}(\text{H}^{\text{B}})$ を有する最低空軌道 $\text{LUMO}(\text{E}^{\text{B}})$ とのエネルギー差は、0eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{H}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0 \text{ eV}$)、好ましくは、0.1eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{H}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.1 \text{ eV}$)、より好ましくは、0.2eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{H}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.2 \text{ eV}$)、より一層好ましくは、0.3eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{H}^{\text{B}}) - E^{\text{LUMO}}(\text{E}^{\text{B}}) > 0.3 \text{ eV}$)。

3 eV)、さらに好ましくは、0.4 eVより大きく ($E^{\text{LUMO}}(\text{HB}) - E^{\text{LUMO}}(\text{EB}) > 0.4 \text{ eV}$)、特に、0.5 eVより大きい ($E^{\text{LUMO}}(\text{HB}) - E^{\text{LUMO}}(\text{EB}) > 0.5 \text{ eV}$)。

【0088】

最大発光 (emission maxima) の関係

本発明の一実施形態において、式 (21) 及び式 (22) で表される関係のうち1つまたは両方は、発光層Bに含まれた材料に適用される：

$$|E^{\lambda \max}(\text{EET}-2) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.30 \text{ eV} \quad (21)$$

$$|E^{\lambda \max}(\text{EB}) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.30 \text{ eV} \quad (22)。$$

【0089】

これは、以下を意味する：発光層B内において、電子ボルト (eV) で与えられた励起エネルギー移動成分 EET-2 の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EET}-2)$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.30 eVより小さく (式21)、及び／または、電子ボルト (eV) で与えられた TADF 材料 EB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EB})$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.30 eVより小さい (式22)。

【0090】

一実施形態において、式 (21) 及び式 (22) で表される前述の関係のうち1つまたは両方は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれた材料に適用される。

【0091】

本発明の好ましい実施形態において、式 (23) 及び式 (24) で表される関係のうち1つまたは両方は、発光層Bに含まれた材料に適用される：

$$|E^{\lambda \max}(\text{EET}-2) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.20 \text{ eV} \quad (23)$$

$$|E^{\lambda \max}(\text{EB}) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.20 \text{ eV} \quad (24)。$$

【0092】

これは、以下を意味する：発光層B内において、電子ボルト (eV) で与えられた励起エネルギー移動成分 EET-2 の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EET}-2)$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.20 eVより小さく (式23)、及び／または、電子ボルト (eV) で与えられた TADF 材料 EB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EB})$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.20 eVより小さい (式24)。

【0093】

一実施形態において、式 (23) 及び式 (24) で表される前述の関係のうち1つまたは両方は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれた材料に適用される。

【0094】

本発明のより好ましい実施形態において、式 (25) 及び式 (26) で表される関係のうち1つまたは両方は、発光層Bに含まれた材料に適用される：

$$|E^{\lambda \max}(\text{EET}-2) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.10 \text{ eV} \quad (25)$$

$$|E^{\lambda \max}(\text{EB}) - E^{\lambda \max}(\text{SB})| < 0.10 \text{ eV} \quad (26)。$$

【0095】

これは、以下を意味する：発光層B内において、電子ボルト (eV) で与えられた励起エネルギー移動成分 EET-2 の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EET}-2)$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.10 eVより小さく (式25)、及び／または、電子ボルト (eV) で与えられた TADF 材料 EB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{EB})$ と、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ SB の最大発光エネルギー $E^{\lambda \max}(\text{SB})$ とのエネルギー差は、0.10 eVより小さい (式26)。

10

20

30

40

50

B) とのエネルギー差は、 0.10 eV より小さい (式 26)。

【0096】

一実施形態において、式 (25) 及び式 (26) で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層 B に含まれた材料に適用される。

【0097】

本発明の一実施形態において、式 (27) で表される関係は、発光層 B に含まれた材料に適用される：

$$E_{\lambda \max}(EET-2) > E_{\lambda \max}(S^B) \quad (27)。$$

【0098】

これは、発光層 B 内において、電子ボルト (eV) で与えられた励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の最大発光エネルギー $E_{\lambda \max}(EET-2)$ が、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ S^B の最大発光エネルギー $E_{\lambda \max}(S^B)$ より大きいということの意味する。

【0099】

本発明の一実施形態において、式 (28) で表される関係は、発光層 B に含まれた材料に適用される：

$$E_{\lambda \max}(E^B) > E_{\lambda \max}(S^B) \quad (28)。$$

【0100】

これは、発光層 B 内において、電子ボルト (eV) で与えられた TADF 材料 E^B の最大発光エネルギー $E_{\lambda \max}(E^B)$ が、電子ボルト (eV) で与えられた小 FWHM エミッタ S^B の最大発光エネルギー $E_{\lambda \max}(S^B)$ より大きいということの意味する。

【0101】

素子色相及び性能

本発明の更なる実施形態は、明確な色点で発光するエレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) に係わるものである。本発明によれば、エレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) は、狭い発光バンド (小半値幅 (FWHM)) で発光する。好ましい実施形態において、本発明によるエレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) は、 0.25 eV 未満、好ましくは、 0.20 eV 未満、より好ましくは、 0.15 eV 未満、またははなはだしくは、 0.13 eV 未満の主発光ピークの FWHM を有する光を放出する。

【0102】

好ましい実施形態において、エレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) は、定電流密度 $J_0 = 15\text{ mA/cm}^2$ において、LT95 値は、100 時間超過、好ましくは、200 時間超過、より好ましくは、300 時間超過、より一層好ましくは、400 時間超過、さらに好ましくは、750 時間超過、またさらには、1000 時間超過を示す。

【0103】

本発明の更なる実施形態は、明確な色点で発光するエレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) に係わるものである。本発明によれば、エレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) は、狭い発光バンド (小半値幅 (FWHM)) で発光する。好ましい実施形態において、本発明によるエレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) は、 0.25 eV 未満、好ましくは、 0.20 eV 未満、より好ましくは、 0.15 eV 未満、またさらには、 0.13 eV 未満の主発光ピークの FWHM を有する光を放出する。

【0104】

本発明の更なる実施形態は、 1000 cd/m^2 において、10% 超過、好ましくは、13% 超過、より好ましくは、15% 超過、より一層好ましくは、18% 以上、またさらには、20% 以上の外部量子効率を示し、 $440\text{ nm} \sim 480\text{ nm}$ において最大発光を示すエレクトロルミネッセンス素子 (例えば、OLED) に係わるものである。

【0105】

本発明の更なる実施形態は、 1000 cd/m^2 において、10% 超過、好ましくは、13% 超過、より好ましくは、15% 超過、より一層好ましくは、18% 以上、またさら

10

20

30

40

50

には、20%以上の外部量子効率を示し、450nm～475nmにおいて最大発光を示すエレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）に係わるものである。

【0106】

本発明の更なる実施形態は、1000cd/m²において、10%超過、好ましくは、13%超過、より好ましくは、15%超過、より一層好ましくは、18%以上、またさらには、20%以上の外部量子効率を示し、460nm～475nmにおいて最大発光を示すエレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）に係わるものである。

【0107】

本発明の更なる実施形態は、1000cd/m²において、10%超過、好ましくは、13%超過、より好ましくは、15%超過、より一層好ましくは、18%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、440nm～480nm、好ましくは、450nm～475nm、より好ましくは、460nm～475nmにおいて最大発光を示し、及び／または、500cd/m²において、100時間超過、好ましくは、200時間超過、より好ましくは、400時間超過、より一層好ましくは、750時間超過、またさらには、1000時間超過のLT80値を示すエレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）に係わるものである。

【0108】

本発明の更なる実施形態は、明確な色点で発光するエレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）に係わるものである。本発明によれば、エレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）は、狭い発光バンド（小半値幅（FWHM））で発光する。好ましい実施形態において、本発明によるエレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）は、0.25eV未満、好ましくは、0.20eV未満、より好ましくは、0.15eV未満、またさらには、0.13eV未満の主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

【0109】

本発明の他の態様は、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。商業的応用において、典型的にトップエミッション素子（上部電極が透明である）が使用される一方、本発明の全般にわたって使用されるテスト素子は、ボトムエミッション素子（下部電極及び基板が透明である）である。青色素子のCIEy 色座標は、ボトムエミッション素子からトップエミッション素子に変更するとき、最大2倍まで減少するが、CIEx はほとんど変わらない (Okinak et al., Society for Information Display International Symposium Digest of Technical Papers, 2015, 46 (1): 312-313, DOI: 10.1002/sdtp.10480)。したがって、本発明の他の態様は、0.02～0.30、好ましくは、0.03～0.25、より好ましくは、0.05～0.20、より一層好ましくは、0.08～0.18、またさらには、0.10～0.15のCIEx 色座標、及び／または、0.00～0.45、好ましくは、0.01～0.30、より好ましくは、0.02～0.20、より一層好ましくは、0.03～0.15、またさらには、0.04～0.10のCIEy 色座標の発光を示すOLEDに係わるものである。

【0110】

有機エレクトロルミネッセンス素子の関心のある目的のうち1つは、光の生成であってもよい。したがって、本発明は、また、任意の本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することを含む、所望の波長範囲の光を発生させる方法に係わるものである。

【0111】

したがって、本発明の他の態様は、下記ステップを含む、所望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) 本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び
- (ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加すること。

【0112】

本発明の他の態様は、前述の要素を構成して有機エレクトロルミネッセンス素子を作製する方法に係わるものである。本発明は、また、特に有機エレクトロルミネッセンス素子を使用することにより、青色光を発生させる方法に係わるものである。

【0113】

本発明の他の態様は、下記式(29)が発光層Bに含まれた材料に適用される有機エレクトロルミネッセンス素子に係わるものである：

$$440\text{ nm} \leq \lambda_{\text{max}}(S^B) \leq 480\text{ nm} \quad (29)$$

ここで、 $\lambda_{\text{max}}(S^B)$ は、小FWHMエミッタ S^B の最大発光であり、ナノメートル(nm)で与えられる。

【0114】

本発明の更なる態様は、下記ステップを含む光発生方法に係わるものである：

- (i) 本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する段階、及び
- (ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加する段階。

【0115】

本発明の更なる態様は、下記段階を含む光発生方法に係わるものである：

- (i) 本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び
- (ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加すること、

前記方法は、440 nm～480 nmの波長範囲において光を発生させるためのものである。

【0116】

本発明の更なる態様は、下記ステップを含む光発生方法に係わるものである：

- (i) 本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び
- (ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加すること、

前記方法は、450 nm～475 nmの波長範囲において光を発生させるためのものである。

【0117】

本発明の更なる態様は、下記ステップを含む光発生方法に係わるものである：

- (i) 本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び
- (ii) 前記有機エレクトロルミネッセンス素子に電流を印加すること、

前記方法は、460 nm～475 nmの波長範囲において光を発生させるためのものである。

【0118】

当業者は、それらの構造により、TADF材料 E^B (以下参照)及び励起エネルギー移動成分 $EET-2$ (以下参照)が有機エレクトロルミネッセンス素子においてエミッタとして使用可能であることを理解する。しかし、好ましくは、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、TADF材料 E^B 及び励起エネルギー移動成分 $EET-2$ の主要機能は、発光するものではない。好ましい実施形態において、電圧(及び電流)を印加するとき、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は発光し、当該発光は、主に(すなわち、50%より多く、好ましくは、60%より多く、より好ましくは、70%より多く、より一層好ましくは、80%より多く、またさらには、90%より多く)小FWHMエミッタ S^B によって発光された蛍光に起因する。結果として、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は、好ましくは、0.25 eV未満、より好ましくは、0.20 eV未満、より一層好ましくは、0.15 eV未満、またはさらには、0.13 eV未満の主発光ピークの小FWHMで表される狭い発光を示す。

【0119】

本発明の好ましい実施形態において、下記式(32)で表される関係が適用される：

【数1】

$$\frac{\text{FWHM}^{\text{D}}}{\text{FWHM}^{\text{S B}}} \leq 1.50 \quad (32)$$

【0120】

ここで、

FWHM^Dは、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の主発光ピークの電子ボルト（eV）単位の半値幅（FWHM）を意味し、

FWHM^{S B}は、FWHM^DのFWHMを有する有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層（EML）に使用された1以上のホスト材料H^B内の1以上の小FWHMエミッタS^Bのスピコーティング膜のフォトルミネッセンススペクトル（室温、すなわち、（約）20℃で測定された蛍光スペクトル）の電子ボルト（eV）へのFWHMを示す。すなわち、FWHM^{S B}が決定されるスピコーティング膜は、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bと同一の重量比で同一の小FWHMエミッタまたはエミッタS^Bを含む。

【0121】

例えば、発光層Bがそれぞれ1重量%の濃度を有する2種の小FWHMエミッタS^Bを含む場合、スピコーティング膜は、好ましくは、2種の小FWHMエミッタS^Bそれぞれを1重量%含む。その例示的な場合、スピコーティング膜のマトリックス材料は、スピコーティング膜の98重量%に至るであろう。そのようなスピコーティング膜のマトリックス材料は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれたホスト材料H^Bの重量比を反映するように選択されうる。前述の例において、発光層Bが単一ホスト材料H^Bを含むならば、当該ホスト材料は、好ましくは、スピコーティング膜の唯一のマトリックス材料であってもよい。しかし、前述の例において、発光層Bが2種のホスト材料H^Bを含む場合、1つは60重量%の含量を有し、他の1つは20重量%の含量（すなわち、3：1の割合）を有する場合、スピコーティング膜の前述のマトリックス材料（2種の小FWHMエミッタS^Bそれぞれの1重量%を含む）は、好ましくは、EMLに存在する2種のホスト材料H^Bの3：1混合物であってもよい。

【0122】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に1以上の発光層Bが含まれる場合、前記式（32）で表される関係は、好ましくは、素子に含まれる全ての発光層Bに適用される。

【0123】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bは、前述のFWHM^D：FWHM^{S B}の割合が1.50以下、好ましくは、1.40以下、より好ましくは、1.30、より一層好ましくは、1.20、またさらには、1.10である。

【0124】

本発明の文脈において小FWHMエミッタS^Bとして使用するための蛍光エミッタの選択のために、FWHM値が本文後の下位節に述べられたように決定されることに留意しなければならない（簡単に、好ましくは、1～5重量%、特に2重量%の濃度を有するポリ（メチルメタクリレート）PMMA内のそれぞれのエミッタのスピコーティング膜から、または溶液から、以下参照）。すなわち、表1Sに示された例示的な小FWHMエミッタS^BのFWHM値は、式（32）及び本発明の関連した好ましい実施形態の文脈においてFWHM^{S B}値と理解されない。

【0125】

実施例及び特許請求の範囲が本発明をさらに説明する。

【0126】

ホスト材料H^B

本発明によれば、任意の1以上の発光層Bに含まれた任意の1以上のホスト材料 H^B は、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両極性ホスト材料 H^{BP} であってもよい。

【0127】

本発明の文脈において、高い電子移動度を示すn-ホスト H^N は、好ましくは、 -2.50 eV 以下 ($E^{LUMO}(H^N) \leq -2.50\text{ eV}$)、より好ましくは、 $E^{LUMO}(H^N) \leq -2.60\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{LUMO}(H^N) \leq -2.65\text{ eV}$ 、さらに好ましくは、 $E^{LUMO}(H^N) \leq -2.70\text{ eV}$ のLUMOエネルギー $E^{LUMO}(H^N)$ を有する。LUMOは、最低空軌道である。LUMOのエネルギーは、本文後の下位節に述べられたように決定される。

10

【0128】

本発明の文脈において、高い正孔移動度を示すp-ホスト H^P は、好ましくは、 -6.30 eV 以上 ($E^{HOMO}(H^P) \geq -6.30\text{ eV}$)、より好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.90\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.70\text{ eV}$ 、さらに好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.40\text{ eV}$ のHOMOエネルギー $E^{HOMO}(H^P)$ を有する。HOMOは、最高被占軌道である。HOMOのエネルギーは、本文後の下位節に述べられたように決定される。

【0129】

本発明の好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の各発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのホスト材料 H^B は、 -6.30 eV 以上 ($E^{HOMO}(H^P) \geq -6.30\text{ eV}$)、好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.90\text{ eV}$ 、より好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.70\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{HOMO}(H^P) \geq -5.40\text{ eV}$ のHOMOエネルギー $E^{HOMO}(H^P)$ を有する。HOMOは、最高被占軌道である。

20

【0130】

本発明の一実施形態において、それぞれの発光層B内において、発光層Bに含まれた少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのp-ホスト H^P は、 -5.60 eV より小さいHOMOエネルギー $E^{HOMO}(H^P)$ を有する。

【0131】

本発明の文脈において、高い電子移動度を示す両極性ホスト H^{BP} は、好ましくは、 -2.50 eV 以下 ($E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.50\text{ eV}$)、より好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.60\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.65\text{ eV}$ 、さらに好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.70\text{ eV}$ のLUMOエネルギー $E^{LUMO}(H^{BP})$ を有する。LUMOは、最低空軌道である。LUMOのエネルギーは、本文後の下位節に述べられたように決定される。

30

【0132】

本発明の文脈において、高い正孔移動度を示す両極性ホスト H^{BP} は、好ましくは、 -6.30 eV 以上 ($E^{HOMO}(H^{BP}) \geq -6.30\text{ eV}$)、より好ましくは、 $E^{HOMO}(H^{BP}) \geq -5.90\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{HOMO}(H^{BP}) \geq -5.70\text{ eV}$ 、さらに好ましくは、 $E^{HOMO}(H^{BP}) \geq -5.40\text{ eV}$ のHOMOエネルギー $E^{HOMO}(H^{BP})$ を有する。HOMOは、最高被占軌道である。HOMOのエネルギーは、本文後の下位節に述べられたように決定される。

40

【0133】

本発明の一実施形態において、両極性ホスト材料 H^{BP} 、好ましくは、それぞれの両極性ホスト材料 H^{BP} は、以下の要件をいずれも満たす：

(i) -2.50 eV 以下 ($E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.50\text{ eV}$)、好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.60\text{ eV}$ 、より好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.65\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{LUMO}(H^{BP}) \leq -2.70\text{ eV}$ のLUMOエネルギー $E^{LUMO}(H^{BP})$ を有し、

(ii) -6.30 eV 以上 ($E^{HOMO}(H^{BP}) \geq -6.30\text{ eV}$)、好ましくは、

50

$E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{BP}}) \geq -5.90 \text{ eV}$ 、より好ましくは、 $E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{BP}}) \geq -5.70 \text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{BP}}) \geq -5.40 \text{ eV}$ のHOMOエネルギー $E^{\text{HOMO}}(\text{H}^{\text{BP}})$ を有する。

【0134】

当業者は、いかなる材料が本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するのに適しているホスト材料であるかが分かっている。以下の例示を参照する：Y. Tao, C. Yang, J. Quin, Chemical Society Reviews 2011, 40, 2943, DOI: 10.1039/C0CS00160K; K. S. Yook, J. Y. Lee, The Chemical Record 2015, 16 (1), 159, DOI: 10.1002/tcr.201500221; T. Chatterjee, K. -T. Wong, Advanced Optical Materials 2018, 7 (1), 1800565, DOI: 10.1002/adom.201800565; Q. Wang, Q. -S. Tian, Y. -L. Zhang, X. Tang, L. -S. Liao, Journal of Materials Chemistry C 2019, 7, 11329, DOI: 10.1039/C9TC03092A.

【0135】

また、例えば、US 2006006365 (A1)、US 2006208221 (A1)、US 2005069729 (A1)、EP 1205527 (A1)、US 2009302752 (A1)、US 20090134784 (A1)、US 2009302742 (A1)、US 2010187977 (A1)、US 2010187977 (A1)、US 2012068170 (A1)、US 2012097899 (A1)、US 2006121308 (A1)、US 2006121308 (A1)、US 2009167166 (A1)、US 2007176147 (A1)、US 2015322091 (A1)、US 2011105778 (A1)、US 2011201778 (A1)、US 2011121274 (A1)、US 2009302742 (A1)、US 2010187977 (A1)、US 2010244009 (A1)、US 2009136779 (A1)、EP 2182040 (A2)、US 2012202997 (A1)、US 2019393424 (A1)、US 2019393425 (A1)、US 2020168819 (A1)、US 2020079762 (A1) 及び US 2012292576 (A1) は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に使用可能なホスト材料を開示する。これは、本発明が、引用された参考文献に開示されたホスト材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子に限定されるということを意味しないと理解される。また、最新技術で使用される任意のホスト材料が、本発明の文脈において好適なホスト材料 H^{B} であることが理解される。

【0136】

本発明の好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、1以上のp-ホスト H^{P} を含む。本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、単一ホスト材料 H^{B} のみを含み、当該ホスト材料は、p-ホスト H^{P} である。

【0137】

本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、1以上のn-ホスト H^{N} を含む。本発明の他の実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、単一ホスト材料 H^{B} のみを含み、当該ホスト材料は、n-ホスト H^{N} である。

【0138】

本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、1以上の両極性ホスト H^{BP} を含む。本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層Bは、単一ホスト材料 H^{B} のみを含み、当該ホスト材料は、両極性ホスト H^{BP} である。

【0139】

本発明の他の実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の少なくとも1つの発光層Bは、少なくとも2種の相異なるホスト材料 H^B を含む。この場合、それぞれの発光層Bに存在する1以上のホスト材料 H^B は、いずれもp-ホスト H^P であるか、いずれもn-ホスト H^N であるか、いずれも両極性ホスト H^{BP} であるが、それらの組み合わせであってもよい。

【0140】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子が1以上の発光層Bを含む場合、それらのうちいずれか1つは、1以上の他の発光層Bと独立して、前述の定義が適用される1以上のホスト材料 H^B を含むことが理解される。また、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれた相異なる発光層Bは、必ずしも全て同一材料、またははなはだしくは、同一濃度または割合の同一材料を含むものではないと理解される。

10

【0141】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bが1以上の副層から構成される場合、それらのうち任意の副層は、1以上の他の副層と独立して、前述の定義が適用される1以上のホスト材料 H^B を含むことが理解される。また、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれた発光層Bの異なる副層は、必ずしも全て同一材料、またさらには、同一濃度または割合の同一材料を含むものではないと理解される。

【0142】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の同一の発光層Bに含まれる場合、少なくとも1つのp-ホスト H^P 及び少なくとも1つのn-ホスト H^N は、選択的にエキサイプレックスを形成することができる。当業者は、エキサイプレックスを形成する H^P 及び H^N の対を選択する方法、並びに H^P 及び H^N のHOMO-及び／またはLUMO-エネルギー準位要求事項を含む選択基準が分かっている。すなわち、エキサイプレックス形成が要求される場合、p-ホスト材料 H^P の最高被占軌道(HOMO)は、n-ホスト材料 H^N のHOMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVより高く、p-ホスト材料 H^P の最低空軌道(LUMO)は、n-ホスト材料 H^N のLUMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVより高い。

20

【0143】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つのホスト材料 H^B (例えば、 H^P 、 H^N 及び／または H^{BP}) は、有機ホスト材料であり、これは、本発明の文脈においてそれがいかなる遷移金属も含まないということを意味する。本発明の好ましい実施形態において、本発明のエレクトロルミネッセンス素子の全てのホスト材料 H^B (H^P 、 H^N 及び／または H^{BP}) は、有機ホスト材料であり、これは、本発明の文脈においてそれが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、少なくとも1つのホスト材料 H^B 、より好ましくは、全てのホスト材料 H^B (H^P 、 H^N 及び／または H^{BP}) は、主に水素(H)、炭素(C)及び窒素(N)から構成されるが、例えば、酸素(O)、ボロン(B)、シリコン(Si)、フッ素(F)及び臭素(Br)を含んでもよい。

30

【0144】

本発明の一実施形態において、それぞれのホスト材料 H^B は、p-ホスト H^P である。

【0145】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、それぞれのホスト材料 H^B は、p-ホスト H^P である。

40

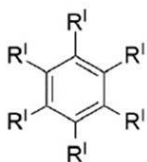
【0146】

本発明の好ましい実施形態において、全体として(1つの(下位)層から構成されるか、または1以上の副層を含む)任意の少なくとも1層の発光層Bに選択的に含まれるp-ホスト H^P は、以下を含むか、あるいはそれから構成される：

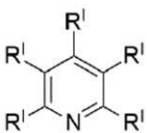
化学式 H^P-I 、 H^P-II 、 H^P-III 、 H^P-IV 、 H^P-V 、 H^P-VI 、 H^P-VII 、 H^P-VIII 、 H^P-IX 及び H^P-X のうちいずれか1つによる構造を含むか、あるいはそれから構成される1つの第1化学的部分構造、及び

50

【化 1】

・・・化学式 H^P – I

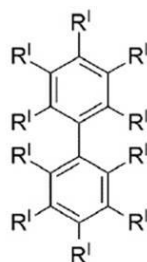
【化 2】



10

・・・化学式 H^P – I I

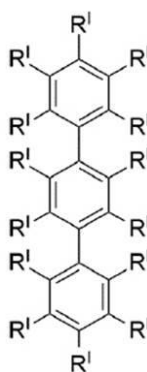
【化 3】



20

・・・化学式 H^P – I I I

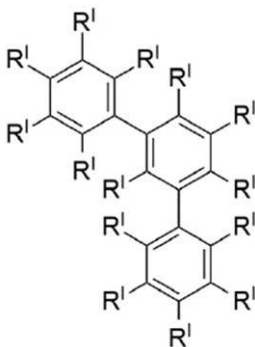
【化 4】



30

・・・化学式 H^P – I V

【化 5】

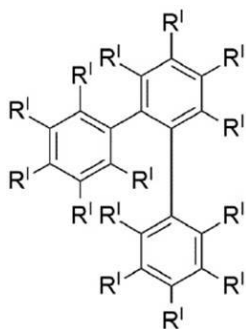


40

・・・化学式 H^P – V

50

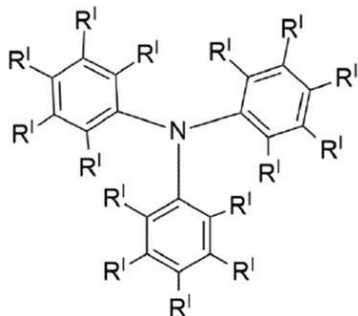
【化 6】



10

・・・化学式 $H^P - VI$

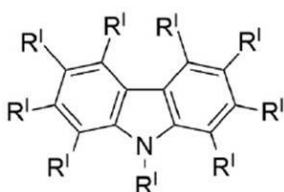
【化 7】



20

・・・化学式 $H^P - VII$

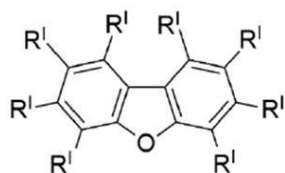
【化 8】



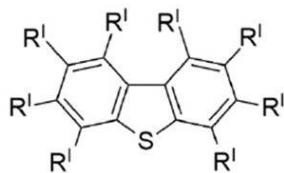
30

・・・化学式 $H^P - VIII$

【化 9】

・・・化学式 $H^P - IX$

【化 10】



40

・・・化学式 $H^P - X$

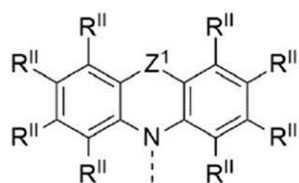
【0147】

それぞれ化学式 $H^P - XI$ 、 $H^P - XII$ 、 $H^P - XIII$ 、 $H^P - XIV$ 、 $H^P - XV$ 、 $H^P - XVI$ 、 $H^P - XVII$ 、 $H^P - XVIII$ 及び $H^P - XIX$ のうちいずれか 1 つ

50

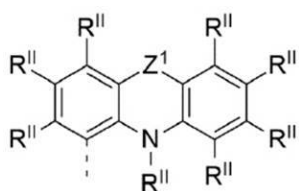
による構造を含むか、あるいはそれから構成される 1 以上の第 2 化学的部分構造、

【化 1 1】



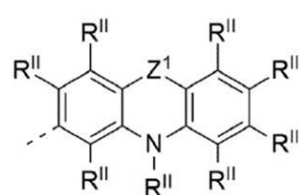
・・・化学式 $H^P - X I$

【化 1 2】



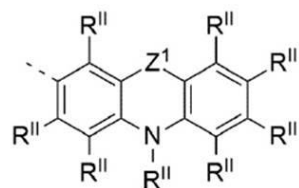
・・・化学式 $H^P - X I I$

【化 1 3】



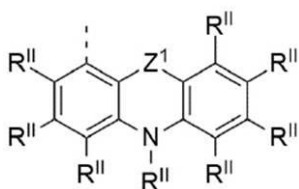
・・・化学式 $H^P - X I I I$

【化 1 4】



・・・化学式 $H^P - X I V$

【化 1 5】



・・・化学式 $H^P - X V$

10

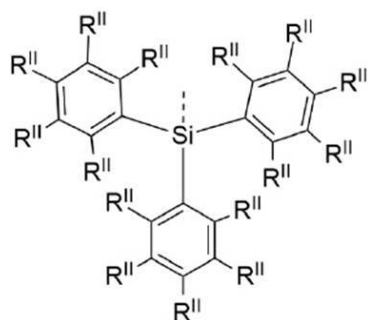
20

30

40

50

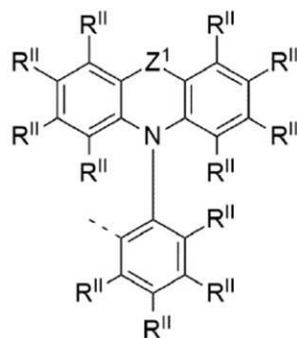
【化 1 6】



10

・・・化学式 $H^P - XVI$

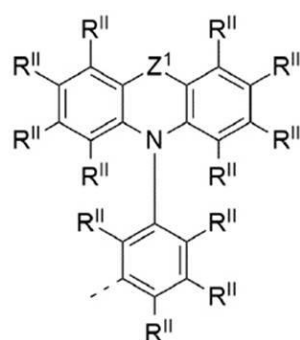
【化 H 1 7】



20

・・・化学式 $H^P - XVII$

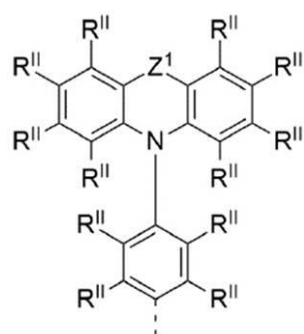
【化 1 8】



30

・・・化学式 $H^P - XVIII$

【化 1 9】



40

・・・化学式 $H^P - XIX$

【0 1 4 8】

ここで、 p -ホスト材料 H^P に存在する 1 以上の第 2 化学的部分構造それぞれは、前記化学式において点線で表される単結合を介して第 1 化学的部分構造に結合され、

50

ここで、

Z^I は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 $C(R^{II})_2$ 、 $C=C(R^{II})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^{II}$ 、 NR^{II} 、 O 、 $Si(R^{II})_2$ 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

R^I は、それぞれの場合に互いに独立して、第1化学的部分構造を第2化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph から構成され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る Ph 、

ここで、少なくとも1つの R^I は、第1化学的部分構造を第2化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であり、

R^{II} は、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph から構成され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る Ph 、

ここで、2以上の隣接した置換基 R^{II} は、選択的に単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、化学式 H^P-X^I 、 H^P-X^{II} 、 H^P-X^{III} 、 H^P-X^{IV} 、 H^P-X^V 、 H^P-X^{VI} 、 H^P-X^{VII} 、 H^P-X^{VIII} 及び H^P-X^X のうちいずれか1つによる構造だけでなく、隣接した置換基 R^{II} によって選択的に形成される追加の環から構成される縮合環系は、計8～60個の炭素原子、好ましくは、12～40個の炭素原子、より好ましくは、14～32個の炭素原子を含む。

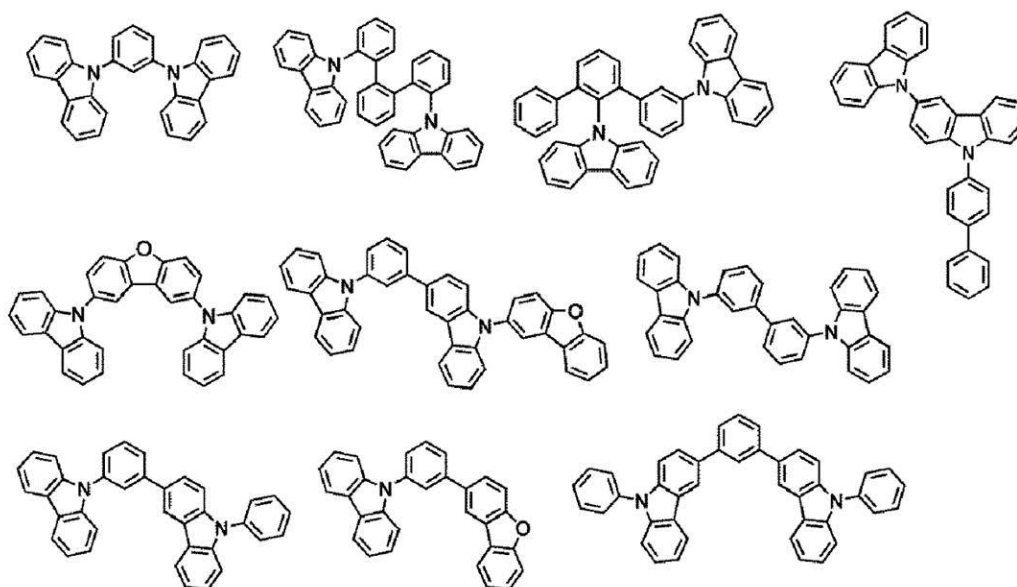
【0149】

本発明のより好ましい実施形態において、 Z^I は、それぞれの場合に直接結合であり、隣接した置換基 R^{II} は結合して追加の環系を形成しない。

【0150】

本発明のより好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に選択的に含まれるp-ホスト H^P は、下記構造から構成される群から選択される：

【化20】



10

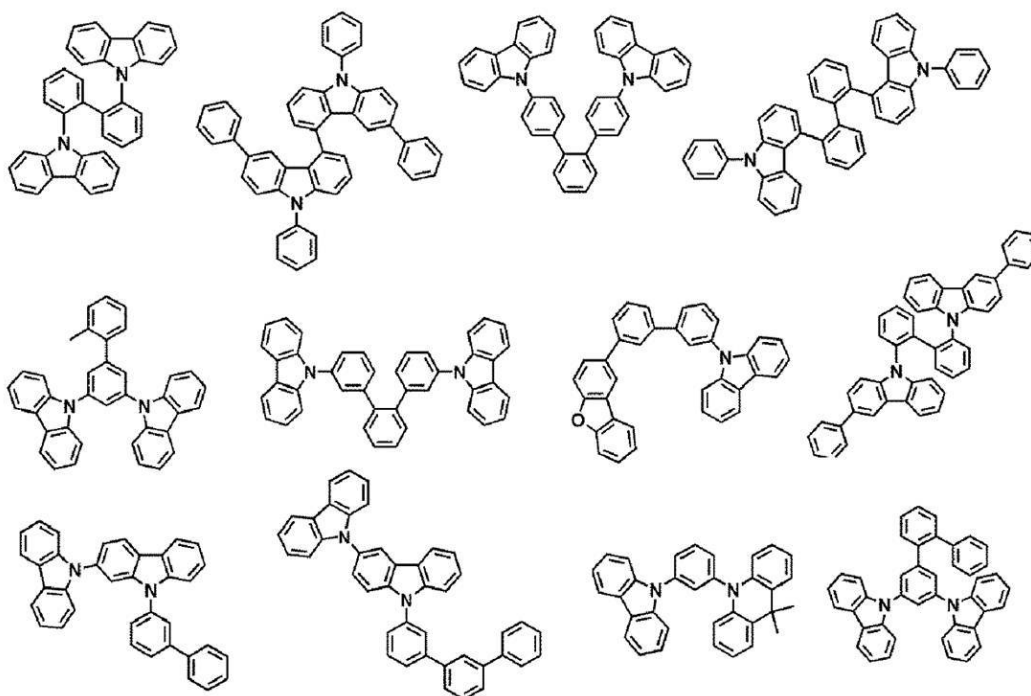
20

30

40

50

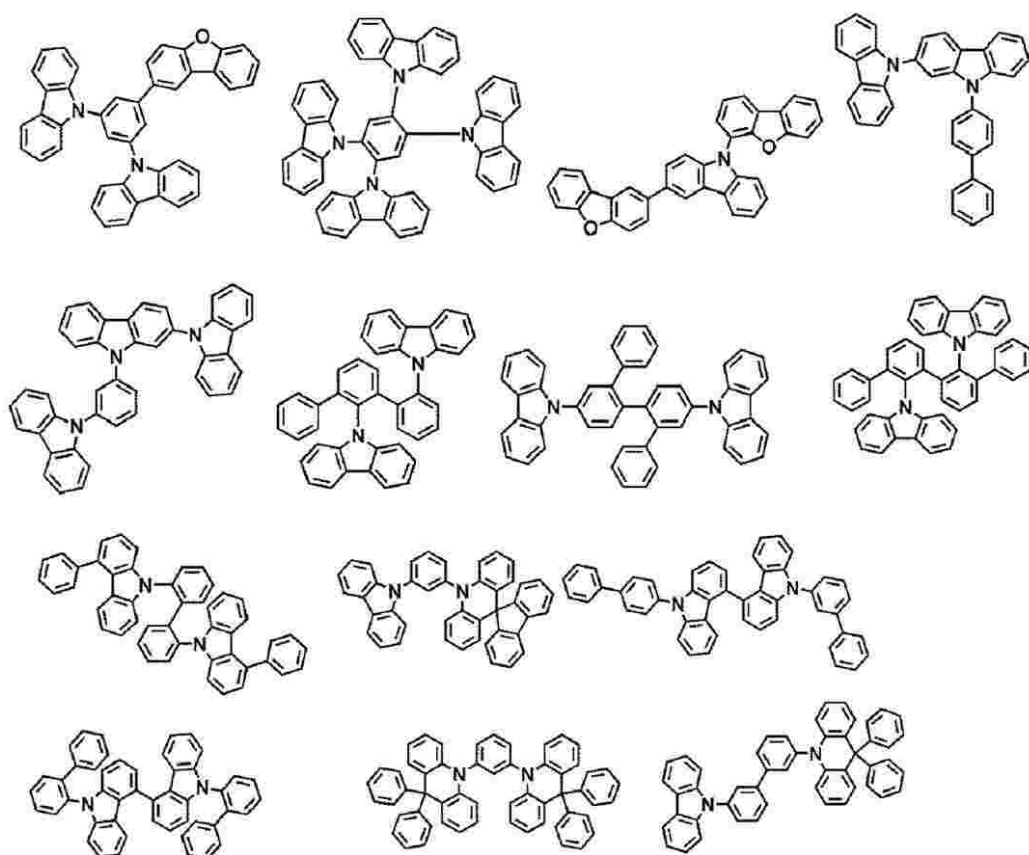
【化 2 1】



10

20

【化 2 2】

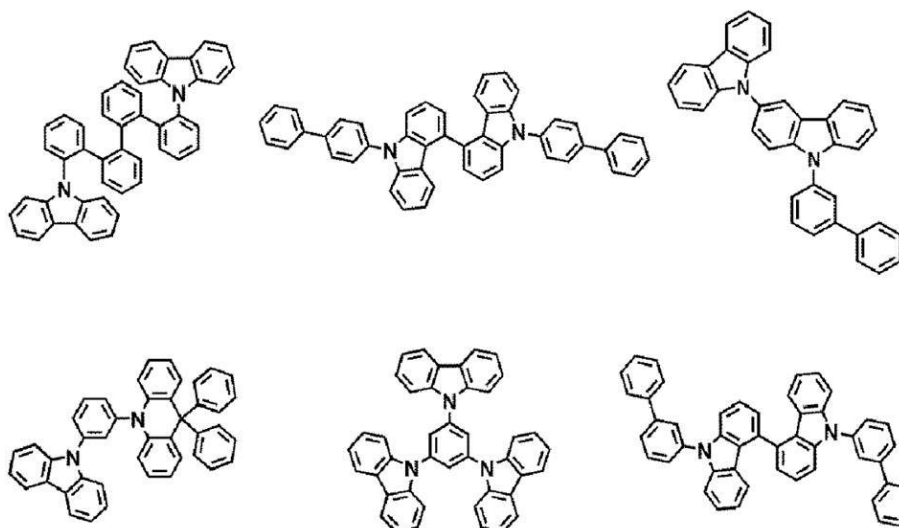


30

40

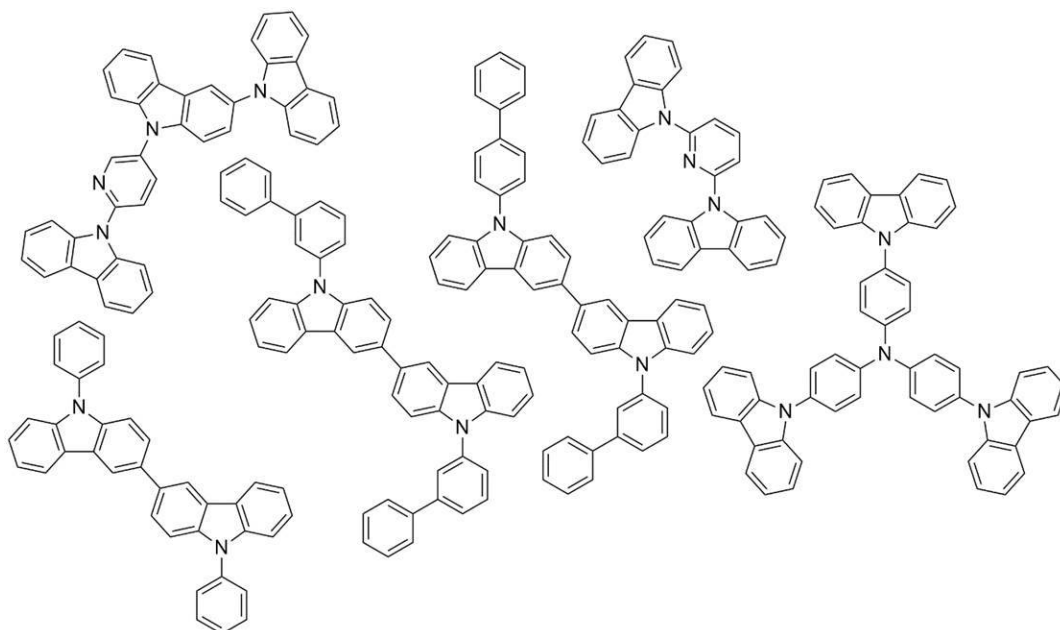
50

【化 2 3】



10

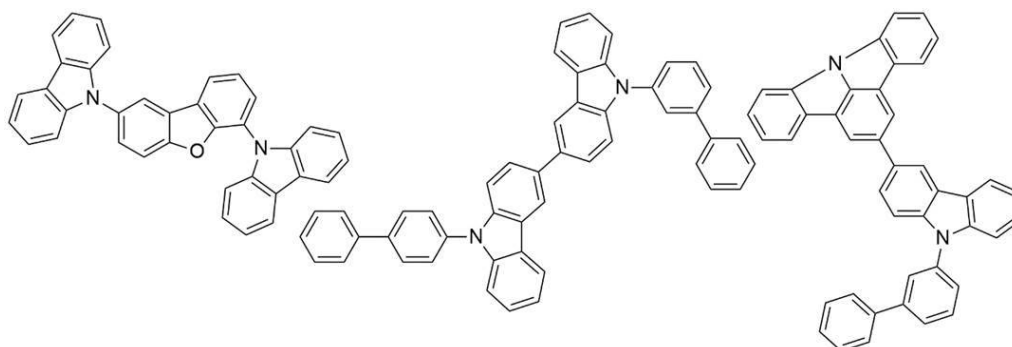
【化 2 4】



20

30

【化 2 5】



40

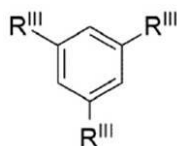
【0151】

本発明の好ましい実施形態において、全体として（1つの（下位）層から構成されるか、または1以上の副層を含む）任意の1以上の発光層Bに選択的に含まれるn-ホストH^Nは、化学式H^N-I、H^N-I I及びH^N-I I Iのうちいずれか1つによる構造を含む

50

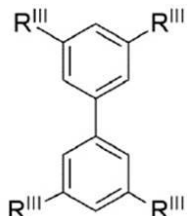
か、あるいはそれから構成される：

【化 2 6 H N - I】



・・・化学式 H^N - I

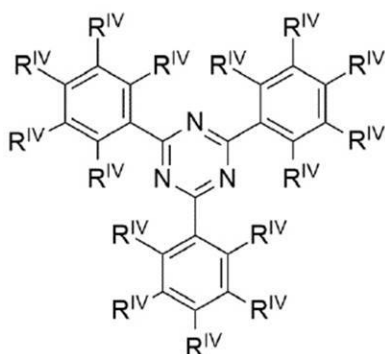
【化 2 7】



10

・・・化学式 H^N - I I

【化 2 8】



20

・・・化学式 H^N - I I I

【0 1 5 2】

30

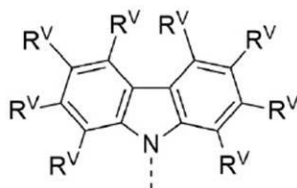
ここで、R^{I I I}及びR^{I V}は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF₃、

Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhから構成され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るPh、及び

化学式H^N - I V、H^N - V、H^N - V I、H^N - V I I、H^N - V I I I、H^N - I X、H^N - X、H^N - X I、H^N - X I I、H^N - X I I I及びH^N - X I Vのうちいずれか1つで表される構造、

【化 2 9】

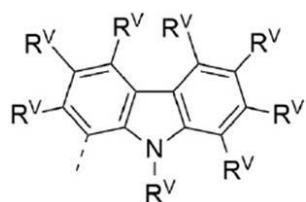


40

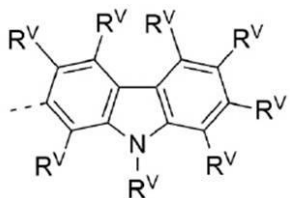
・・・化学式 H^N - I V

50

【化 3 0】

・・・化学式 $H^N - V$

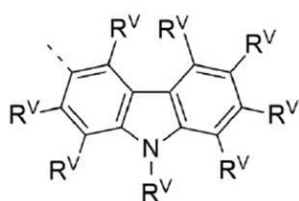
【化 3 1】



10

・・・化学式 $H^N - V I$

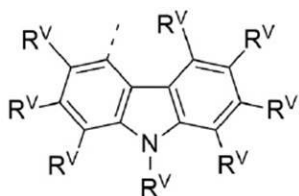
【化 3 2】



20

・・・化学式 $H^N - V I I$

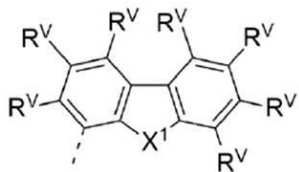
【化 3 3】



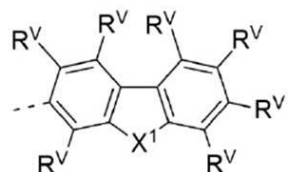
30

・・・化学式 $H^N - V I I I$

【化 3 4】

・・・化学式 $H^N - V I X$

【化 3 5】

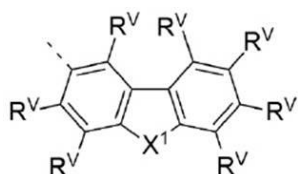


40

・・・化学式 $H^N - X$

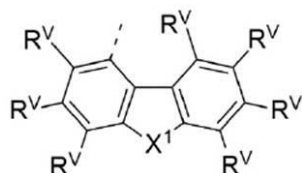
50

【化 3 6】



・・・化学式 $H^N - XI$

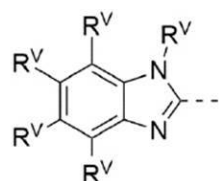
【化 3 7】



10

・・・化学式 $H^N - XII$

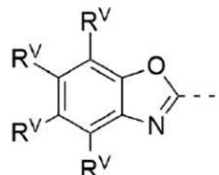
【化 3 8】



20

・・・化学式 $H^N - XIII$

【化 3 9】



30

・・・化学式 $H^N - XIV$

ここで、

点線は、化学式 $H^N - IV$ 、 $H^N - V$ 、 $H^N - VI$ 、 $H^N - VII$ 、 $H^N - VIII$ 、 $H^N - IX$ 、 $H^N - X$ 、 $H^N - XI$ 、 $H^N - XII$ 、 $H^N - XIII$ 及び $H^N - XIV$ のうちいずれか 1 つによる構造を $H^N - I$ 、 $H^N - II$ 及び $H^N - III$ のうちいずれか 1 つによる構造に結合する単結合の結合位置を示し、

X^1 は、酸素 (O)、硫黄 (S) または $C(R^V)_2$ であり、

R^V は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、及び

40

Me、*i*Pr、*t*Bu 及び Ph から構成され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る Ph、

ここで、2 以上の隣接した置換基 R^V は、選択的に単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、化学式 $H^N - IV$ 、 $H^N - V$ 、 $H^N - VI$ 、 $H^N - VII$ 、 $H^N - VIII$ 、 $H^N - IX$ 、 $H^N - X$ 、 $H^N - XI$ 、 $H^N - XII$ 、 $H^N - XIII$ 及び $H^N - XIV$ のうちいずれか 1 つによる構造だけでなく、隣接した置換基 R^V によって選択的に形成される追加環から構成される縮合環系は、計 8 ～ 60 個の炭素原子、好ましくは、12 ～ 40 個の炭素原子、より好ましくは、14 ～ 32 個の炭素原子を含み、

ここで、化学式 $H^N - I$ 及び $H^N - II$ において、少なくとも 1 つの置換基 R^{III} は C

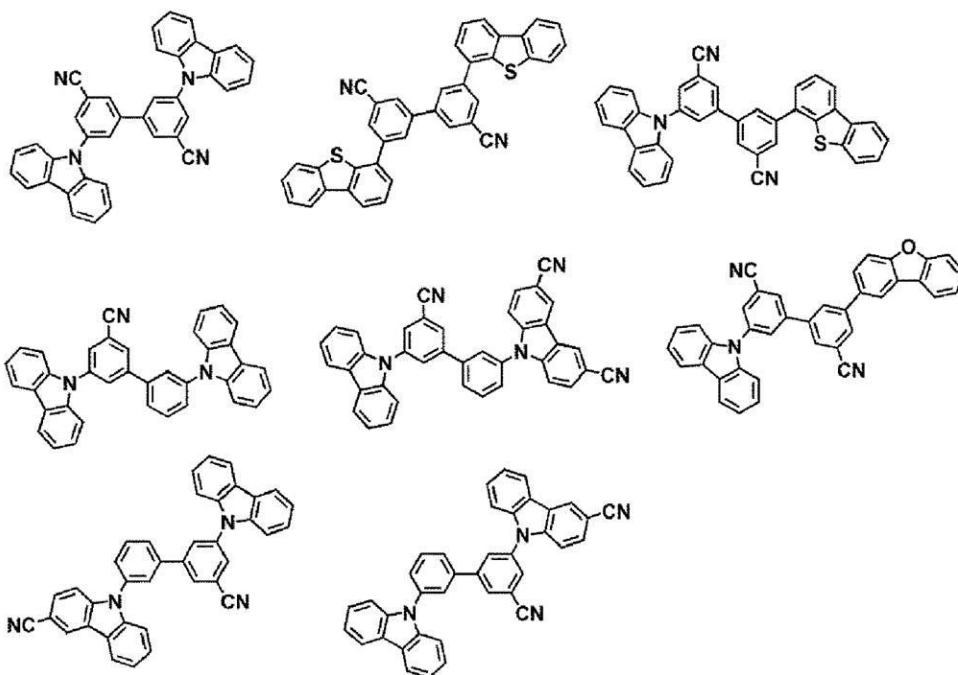
50

Nである。

【0153】

本発明のより好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に選択的に含まれるn-ホストH^Nは、下記構造から構成される群から選択される：

【化40】



10

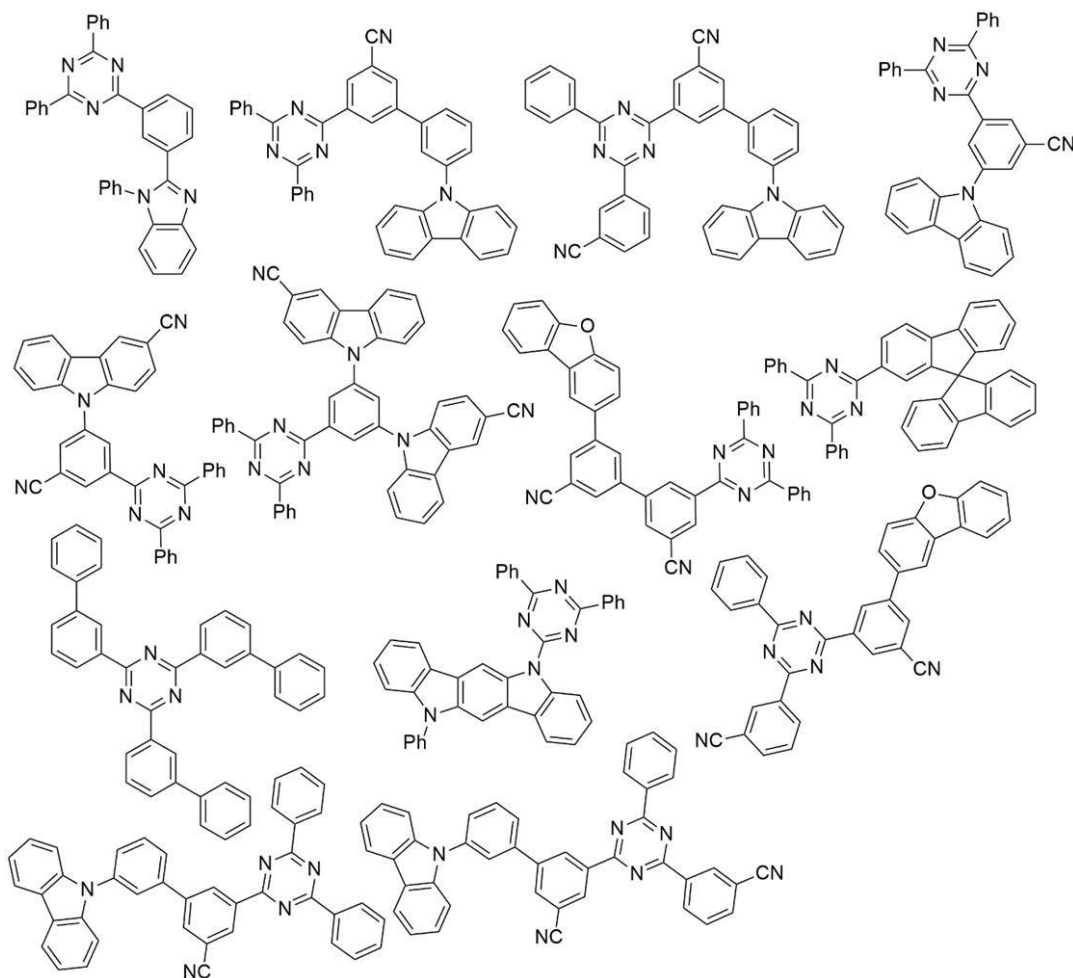
20

30

40

50

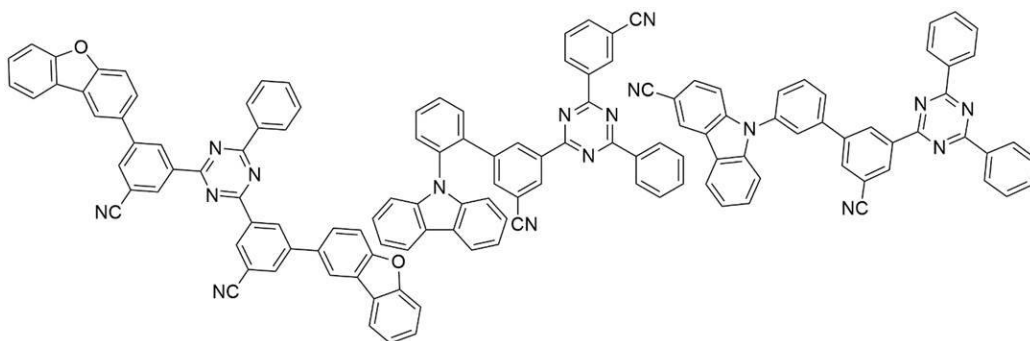
【化 4 1】



10

20

【化 4 2】



30

【0 1 5 4】

本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の任意の発光層 B に含まれた n-ホスト H^N は、任意のフォスフィンオキシド基を含まず、特に、n-ホスト H^N は、ビス〔2-（ジフェニルホスフィノ）フェニル〕エーテルオキシド（DPEPO）ではない。

40

【0 1 5 5】

励起エネルギー移動成分 EET-2

発光層 B に対し、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の同一の発光層 B に含まれた小 FWHM エミッタ S^B に励起エネルギーを移動させるように、TADF 材料 E^B 及び励起エネルギー移動成分 EET-2 が好ましく選択される。

【0 1 5 6】

そのようなエネルギー移動を可能にするために、好ましくは、室温（すなわち、（約）

50

20℃)での発光スペクトル(例えば、TADF材料E^Bの蛍光スペクトル)と、E^Bがエネルギーを伝達しなければならない小FWHMエミッタS^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある。したがって、好ましい実施形態において、発光層B内において、TADF材料E^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での発光スペクトルと、小FWHMエミッタS^Bの吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある。吸収スペクトル及び発光スペクトルは、本文後の下位節に述べられたように記録される。

【0157】

本発明の好ましい実施形態において、発光層B内において、励起エネルギー移動成分EET-2は、励起エネルギーを小FWHMエミッタS^Bに移動させる。

10

【0158】

そのようなエネルギー移動を可能にするために、好ましくは、室温(すなわち、(約)20℃)で励起エネルギー移動成分EET-2の発光スペクトル(例えば、EET-2がTADF材料E^Bである場合に蛍光スペクトル、及びEET-2が燐光材料P^Bである場合に燐光スペクトル、後述する)と、EET-2がエネルギーを伝達しなければならない小FWHMエミッタS^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある。したがって、好ましい実施形態において、発光層B内において、励起エネルギー移動成分EET-2の室温(すなわち、(約)20℃)での発光スペクトルと、小FWHMエミッタS^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある。吸収スペクトル及び発光スペクトルは、本文後の下位節に述べられたように記録される。

20

【0159】

本発明のより好ましい実施形態において、発光層B内において、発光層Bに含まれた励起エネルギー移動成分EET-2だけでなく、TADF材料E^Bは、小FWHMエミッタS^Bにエネルギーを移動させる。

【0160】

本発明の好ましい実施形態において、発光層B内において、以下の2つの条件が満たされる：

(i) TADF材料E^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での発光スペクトルと、小FWHMエミッタS^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある

30

(ii) 励起エネルギー移動成分EET-2の室温(すなわち、(約)20℃)での発光スペクトルと、小FWHMエミッタS^Bの室温(すなわち、(約)20℃)での吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある。

【0161】

ここで、吸収スペクトル及び発光スペクトルは、本文後の下位節に述べられたように記録される。

【0162】

好ましい実施形態において、発光層B、TADF材料E^Bの最低空軌道LUMO(E^B)は、-2.3 eV未満のエネルギーE^{LUMO}(E^B)を有する： $E^{LUMO}(E^B) < -2.3 \text{ eV}$ 。

40

【0163】

好ましい実施形態において、発光層B、TADF材料E^Bの最低空軌道LUMO(E^B)は、-2.6 eV未満のエネルギーE^{LUMO}(E^B)を有する： $E^{LUMO}(E^B) < -2.6 \text{ eV}$ 。

【0164】

好ましい実施形態において、発光層B内において、TADF材料E^Bの最高被占軌道HOMO(E^B)は、-6.3 eVより高いエネルギーE^{HOMO}(E^B)を有する： $E^{HOMO}(E^B) > -6.3 \text{ eV}$ 。

【0165】

50

好ましい実施形態において、発光層B内において、以下の2つの条件が満たされる：

(i) TADF材料 E^B の最低空軌道LUMO (E^B)は、 -2.6 eV 未満のエネルギー $E^{\text{LUMO}}(E^B)$ を有する： $E^{\text{LUMO}}(E^B) < -2.6\text{ eV}$ 、及び

(ii) TADF材料 E^B の最高被占軌道HOMO (E^B)は、 -6.3 eV より高いエネルギー $E^{\text{HOMO}}(E^B)$ を有する： $E^{\text{HOMO}}(E^B) > -6.3\text{ eV}$ 。

【0166】

本発明の一実施形態において、発光層B内において、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、以下の2つの条件のうち少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つを満たす：

(i) 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またさらには、 0.05 eV 未満の、 $E(S1^{EET-2})$ と $E(T1^{EET-2})$ とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値を示し、及び／または

(ii) 少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの標準原子量が40を超える遷移金属を含む($EET-2$ 内の少なくとも1つの原子が、原子量が40を超える(遷移)金属であることを意味し、ここで、遷移金属は、任意の酸化状態であってもよい)。

【0167】

好ましい実施形態において、発光層B内において、TADF材料 E^B は、 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またさらには、 0.05 eV 未満の、最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^E)$ とのエネルギー差に対応する ΔE_{ST} 値を示す。

【0168】

好ましい実施形態において、発光層B内において、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの標準原子量が40より大きい遷移金属を含む(すなわち、 $EET-2$ は、40より大きい原子量を有する(遷移)金属、ここで、遷移金属は、任意の酸化状態であってもよい)。

【0169】

本発明の好ましい実施形態において、それぞれの発光層B内において、以下の2つの条件を満たす：

(i) TADF材料 E^B は、 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またさらには、 0.05 eV 未満の、最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^E)$ とのエネルギー差に対応する ΔE_{ST} 値を示し、及び

(ii) 励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの標準原子量が40より大きい遷移金属を含む(すなわち、 $EET-2$ は、40より大きい原子量を有する(遷移)金属、ここで、遷移金属は、任意の酸化状態であってもよい)。

【0170】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、以下の2つの条件のうち少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つを満たす：

(i) 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またさらには、 0.05 eV 未満の、 $E(S1^{EET-2})$ と $E(T1^{EET-2})$ とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値を示し(以下参照)、及び／または

(ii) イリジウム(Ir)、パラジウム(Pd)または白金(Pt)($EET-2$ 内の少なくとも1つの原子がイリジウム(Ir)、パラジウム(Pd)または白金(Pt)であることを意味し、ここで、Ir、Pd及びPtは、任意の酸化状態であってもよい、以下参照)。

【0171】

好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層B内にお

いて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、イリジウム (Ir) または白金 (Pt) を含む (それぞれの $EET-2$ の少なくとも1つの原子がイリジウム (Ir) または白金 (Pt) であることを意味し、ここで、Ir 及び Pt は、任意の酸化状態であってもよい、以下参照)。

【0172】

前述のように、本発明の文脈において、発光層 B は、TADF 材料 E^B 及び励起エネルギー移動成分 $EET-2$ を含み、ここで、それらは同一ではない (すなわち、同一の化学式を有しない)。これは、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のそれぞれの発光層 B 内において、TADF 材料 E^B 及び励起エネルギー移動成分 $EET-2$ が、例えば、互いに独立して、TADF 材料 E^B から構成される群から選択可能であることを意味するが、いかなる場合にも化学構造が同一ではない。すなわち、発光層 B 内において、 E^B は、 $EET-2$ と同一の化学式 (または、構造) を有しない。

【0173】

特に好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれる励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、本願に定義されたような燐光材料 P^B である。

【0174】

特に好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれる励起エネルギー移動成分 $EET-2$ は、本願に定義されたような TADF 材料 E^B に対して定義されたような構造的特性を有することができる TADF 材料である。

【0175】

励起エネルギー移動成分が TADF 材料であるように選択される場合、TADF 材料 E^B に対して後述する任意の好ましい特徴、特性及び実施例が励起エネルギー移動成分 $EET-2$ にも適用可能であることを理解する。

【0176】

また、励起エネルギー移動成分が燐光材料 P^B であるように選択される場合、燐光材料 P^B に対して後述する任意の好ましい特徴、特性及び実施例が励起エネルギー移動成分 $EET-2$ にも適用可能であることを理解する。

【0177】

TADF 材料 E^B

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、発光ドーパント) からの発光は、励起された一重項状態 (一般的に、最低励起一重項状態 $S1$) からの蛍光、及び励起された三重項状態 (一般的に、最低励起三重項状態 $T1$) からの燐光を含む。

【0178】

本発明の文脈において、蛍光エミッタは、室温 (すなわち、(約) 20°C) で電子励起時に発光することができ (例えば、有機エレクトロルミネッセンス素子において)、ここで、発光励起状態は、一重項状態である (一般的に、最低励起一重項状態 $S1$)。蛍光エミッタは、一般的に、初期の (例えば、電子正孔再結合による) 電子励起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 (prompt fluorescence) を示す。

【0179】

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) を介して、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

10

20

30

40

50

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 $TADF$ を発光することができる材料である。蛍光エミッタの最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1)$ と最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1)$ とのエネルギー差 ΔE_{ST} が減少するとき、 $RISC$ による最低励起三重項状態から最低励起一重項状態への移動は、高効率で起こりうる。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、当業者の一般的な知識の一部を形成する (以下参照)。

【0180】

(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、過度) フォトルミネセンス (PL) 測定から得た減衰曲線に基づいて分析される。 $TADF$ 材料からの PL 発光は、初期励起によって生成された励起一重項状態 (一般的に、 $S1$) からの発光成分と、 $RISC$ により、励起三重項状態 (一般的に、 $T1$) を介して生成された励起一重項状態 (一般的に、 $S1$) からの発光成分とに分けられる。一般的に、初期励起によって形成された励起一重項状態 (一般的に、 $S1$) と、励起三重項状態 (一般的に、 $T1$) から $RISC$ を介して達した励起一重項状態 (一般的に、 $S1$) との発光間には、相当な時間差がある。

【0181】

$TADF$ 材料は、好ましくは、全体減衰力学 ($full\ decay\ dynamics$) と係わり、以下の2つの条件を満たす：

(i) 減衰力学は、2つの時間領域を示し、1つは一般的にナノ秒 (ns) 範囲にあり、他の1つは一般的にマイクロ秒 (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。

【0182】

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。 PL 測定は、ポリ (メチルメタクリレート) ($PMMA$) 内の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を使用して行われてもよい。

【0183】

好ましい基準 (i) が満たされるか否かを評価するために (すなわち、減衰力学が2つの時間領域を示し、1つは一般的にナノ秒 (ns) 範囲であり、他の1つは一般的にマイクロ秒 (μs) 範囲である)、 $TCSPC$ ($Time-correlated\ single-photon\ counting$) が一般的に使用され (以下参照)、全体減衰力学は、一般的に後述するように分析される。または、スペクトル分解能を使用した過度フォトルミネセンス測定を行うことができる (以下参照)。

【0184】

好ましい基準 (ii) が満たされるか否かを評価するために (すなわち、2つの時間領域で発光スペクトルの形態が一致する)、スペクトル分解能を使用した過度フォトルミネセンス測定が一般的に行われてもよい (以下参照)。

【0185】

そのような測定に対する実験的細部事項は、本文後の下位節で提供される。

【0186】

遅延蛍光及び即時蛍光 (n 値) の割合は、本文後の下位節に述べられたように、経時的にそれぞれのフォトルミネセンス減衰を積分して計算することができる。

【0187】

本発明の文脈において、 $TADF$ 材料は、好ましくは、 0.05 より大きく ($n > 0.05$)、より好ましくは、 0.15 より大きく ($n > 0.15$)、より好ましくは、 0.25 より大きく ($n > 0.25$)、より好ましくは、 0.35 より大きく ($n > 0.35$)、より好ましくは、 0.45 より大きく ($n > 0.45$)、より好ましくは、 0.55 より大きく ($n > 0.55$)、より好ましくは、 0.65 より大きく ($n > 0.65$)、

10

20

30

40

50

より好ましくは、 0.75 より大きく ($n > 0.75$)、より好ましくは、 0.85 より大きく ($n > 0.85$)、またさらには、 0.95 より大きい ($n > 0.95$) n 値 (すなわち、遅延蛍光対即時蛍光の割合) を示す。

【0188】

本発明によれば、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 材料 E^B は、 0.4 eV 未満、好ましくは、 0.3 eV 未満、より好ましくは、 0.2 eV 未満、より一層好ましくは、 0.1 eV 未満、またさらには、 0.05 eV 未満の、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 $E(T1^E)$ とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値を示すことを特徴とする。したがって、本発明による TADF 材料 E^B の ΔE_{ST} は、室温 (RT、すなわち、(約) 20°C) で最低励起三重項状態 $T1^E$ から最低励起一重項状態 $S1^E$ の熱再充填 (thermal repopulation) (アップ項間交差または逆項間交差、RISCともいう) を許容するのに十分に小さい。

10

【0189】

好ましくは、本発明の文脈において、TADF 材料 E^B は、即時蛍光及び (発光 $S1^E$ 状態が $T1^E$ 状態から熱活性化された RISC を介して達されるとき) 遅延蛍光の両方を示す。

【0190】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層 B に含まれた小 FWHM エミッタ S^B は、選択的に 0.4 eV 未満の ΔE_{ST} 値を有することができ、熱活性化遅延蛍光 (TADF) を示すことが理解される。しかし、本発明の文脈において、任意の小 FWHM エミッタ S^B に対し、これは単に選択的な特徴だけである。

20

【0191】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも 1 つの TADF 材料 E^B の発光スペクトルと、少なくとも 1 つの小 FWHM エミッタ S^B の吸収スペクトルとの間にスペクトル重畳がある (両スペクトルが類似の条件下で測定されるとき)。この場合、TADF 材料 E^B は、少なくとも 1 つの小 FWHM エミッタ S^B にエネルギーを移動させることができる。

【0192】

本発明によれば、TADF 材料 E^B は、 $380\text{ nm} \sim 470\text{ nm}$ 、好ましくは、 $400\text{ nm} \sim 470\text{ nm}$ の深青色波長範囲において最大発光を有し、一般的に、室温 (すなわち、(約) 20°C) でポリ (メチルメタクリレート) PMMA 内の 10 重量% の TADF 材料 E^B でスピンコーティングされた膜から測定される。

30

【0193】

本発明の好ましい実施形態において、TADF 材料 E^B の最大発光 (ピーク発光) は、本発明の文脈において小 FWHM エミッタ S^B の最大発光 (ピーク発光) より短い波長にある。

【0194】

本発明の好ましい実施形態において、それぞれの TADF 材料 E^B は、有機 TADF 材料であり、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、本発明によるそれぞれの TADF 材料 E^B は、主に水素 (H)、炭素 (C) 及び窒素 (N) から構成されるが、例えば、酸素 (O)、ボロン (B)、シリコン (Si)、フッ素 (F) 及び臭素 (Br) を含んでもよい。

40

【0195】

本発明の好ましい実施形態において、それぞれの TADF 材料 E^B は、 800 g/mol 以下の分子量を有する。

【0196】

本発明の一実施形態において、TADF エミッタ E^B は、一般的に、室温 (すなわち、(約) 20°C) でポリ (メチルメタクリレート) PMMA 内の 10 重量% の TADF 材料 E^B でスピンコーティングされた膜から測定される、 30% 以上のフォトルミネッセンス量子収率 (PLQY) を示す。

50

【0197】

本発明の好ましい実施形態において、TADFエミッタ E^B は、一般的に、室温（すなわち、（約）20℃）でのポリ（メチルメタクリレート）PMMA内の10重量%のTADF材料 E^B でスピンコーティングされた膜から測定される、50%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0198】

本発明のより好ましい実施形態において、TADFエミッタ E^B は、一般的に、室温（すなわち、（約）20℃）でのポリ（メチルメタクリレート）PMMA内の10重量%のTADF材料 E^B でスピンコーティングされた膜から測定される、70%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

10

【0199】

本発明の一実施形態において、TADF材料 E^B は、

（i）最低励起一重項状態エネルギーレベル $E(S1^E)$ と最低励起三重項状態エネルギーレベル $E(T1^E)$ とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値が0.4 eV未満であることを特徴とし、

（ii）30%より大きいフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0200】

本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料 E^B の最低空軌道LUMO（ E^B ）のエネルギー $E^{LUMO}(E^B)$ は、-2.6 eVより小さい。

【0201】

20

一般的に、蛍光及び（熱的に活性化された）遅延蛍光を発光することができるが、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれたTADF材料 E^B は、好ましくは、主に「エネルギーポンプ」として機能し、エミッタ材料として機能しないという点に留意しなければならない。すなわち、発光層Bに含まれた燐光材料 P^B は、主に励起エネルギーを1以上の小FWHMエミッタ S^B に伝達し、それらは、主エミッタ材料の役割を行う。発光層Bにおける燐光材料 P^B の主な機能は、発光ではないことが好ましい。しかし、ある程度発光することができる。

【0202】

当業者は、本発明によるTADF材料（分子） E^B を設計する方法、及び当該分子が典型的に示す構造的特徴が分かっている。簡単には、逆項間交差（RISC）を容易にするために、 ΔE_{ST} は一般的に減少し、本発明の文脈において、 ΔE_{ST} は、前述のように0.4 eVより小さい。これは、頻繁にHOMO及びLUMOがそれぞれ（電子）ドナー基及び（電子）アクセプター基で空間的に大きく分離されるようにTADF分子 E^B を設計することによって達成される。当該基は、一般的に体積が大きいか、スピロ接合を介して結合されて捻じれており、HOMOとLUMOの空間的重畳が減少する。しかし、HOMOとLUMOの空間的重畳を最小化すれば、TADF材料のPLQY（Photoluminescence Quantum Yield）も低くなる短所がある。したがって、実際にその2つの効果の両方を考慮して、 ΔE_{ST} を減らし、高いPLQYを達成する。

30

【0203】

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）ドナー部分構造と、LUMOが分布された1以上の（電子）アクセプター部分構造とを、本願においてリンカー基と呼ばれる、同一な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、同一なアクセプター部分構造に結合された2つまたは3つのリンカー基を含み、更なるドナー部分構造及びアクセプター部分構造がそれら2つまたは3つのリンカー基それぞれに結合されてもよい。

40

【0204】

また、1以上のドナー部分構造及び1以上のアクセプター部分構造は、（リンカー基の存在なしに）互いに直接結合されてもよい。

【0205】

典型的なドナー部分構造は、ジフェニルアミン、カルバゾール、アクリジン、フェノキ

50

サジン及び関連構造の誘導体である。

【0206】

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

【0207】

ニトリル基は、TADF分子において非常に一般的なアクセプター部分構造であり、その周知の例は、以下を含む：

(i) 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)及びその誘導体のようなカルバゾリルジシアノベンゼン化合物、

(ii) 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)及びその誘導体のようなカルバゾリルシアノピリジン化合物、

(iii) 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)及びその誘導体のようなカルバゾリルシアノビフェニル化合物、

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

【0208】

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部分構造である。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。

【0209】

TADF材料の他の一群は、ドナー部分構造(主に、カルバゾリル置換基)が結合されたアクセプター部分構造として、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、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。

【0210】

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部分構造として一般的に使用され、周知の例は、4-PC-DPS (9-フェ

10

20

30

40

50

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-キサンテン-9-オン10,10-ジオキシド)を含む。

【0211】

特定の材料が前述の基本要求事項、すなわち、 ΔE_{ST} 値が0.4 eVより小さいという点を満たすことを考慮すれば、例示的に、前述の全ての群のTADF分子は、本発明によって使用するのに適しているTADF材料E^Bを提供することができる。

【0212】

当業者は、前記命名された構造だけでなく、より多い材料が本発明の文脈において好適なTADF材料E^Bであることが分かっている。当業者は、そのような分子の設計原理に慣れ、特定発光色相(例えば、青色、緑色または赤色発光)を有するそのような分子を設計する方法も分かっている。

【0213】

以下の例示を参照する：H. Tanaka, K. Shizu, H. Nakanotani, C. Adachi, *Chemistry of Materials* 2013, 25(18), 3766, DOI: 10.1021/cm402428a; J. Li, T. Nakagawa, J. MacDonald, Q. Zhang, H. Nomura, H. Miyazaki, C. Adachi, *Advanced Materials* 2013, 25(24), 3319, DOI: 10.1002/adma.201300575; K. Nasu, T. Nakagawa, H. Nomura, C.-J. Lin, C.-H. Cheng, M.-R. Tseng, T. Yasudaad, C. Adachi, *Chemical Communications* 2013, 49(88), 10385, DOI: 10.1039/c3cc44179b; Q. Zhang, B. Li, S. Huang, H. Nomura, H. Tanaka, C. Adachi, *Nature Photonics* 2014, 8(4), 326, DOI: 10.1038/nphoton.2014.12; B. Wex, B. R. Kaafarani, *Journal of Materials Chemistry C* 2017, 5, 8622, DOI: 10.1039/c7tc02156a; Y. Im, M. Kim, Y. J. Cho, J. A. Seo, K. S. Yook, J. Y. Lee, *Chemistry of Materials* 2017, 29(5), 1946, DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b05324; T.-T. Bui, F. Goubard, M. Ibrahim-Ouali, D. Gigmes, F. Dumur, *Beilstein Journal of Organic Chemistry* 2018, 14, 282, DOI: 10.3762/bjoc.14.18; X. Liang, Z.-L. Tu, Y.-X. Zheng, *Chemistry-A European Journal* 2019, 25(22), 5623, DOI: 10.1002/chem.201805952。

【0214】

また、例えば、US2015105564(A1)、US2015048338(A1)、US2015141642(A1)、US2014336379(A1)、US2014138670(A1)、US2012241732(A1)、EP3315581(A1)、EP3483156(A1)及びUS2018053901(A1)は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に使用可能なTADF材料E^Bを開示する。これは、本発明が、引用された参考文献に開示されたTADF材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子に限定されるということを意味しないものと理解される。最新技術で使用する任意のTADF材料が、本発明の文脈において好適なTADF材料E^Bであることが理解される。

【0215】

本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料E^Bは、CN、CF₃及び選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基から構成される群から互いに独立して選択される1以上の化学的部分構造を含む。

【0216】

本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料E^Bは、CN及び選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基から構成される群から互いに独立して選択される1以上の化学的部分構造を含む。

【0217】

本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料E^Bは、1以上の選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基を含む。

【0218】

本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料E^Bは、アミノ基、インドリル、カルバゾリル及びその誘導体から互いに独立して選択される1以上の化学的部分構造を含み、それらはいずれも選択的に置換され、ここで、それら基は、それぞれのTADF分子のコア構造と窒素(N)または炭素(C)原子を介して結合され、それら基に結合された置換基は、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成することができる。

【0219】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^Bは、以下を含む：

－アミノ基、インドリル、カルバゾリル及びそれらの誘導体から互いに独立して選択され、それらはいずれも選択的に置換され、ここで、それら基は、窒素(N)または炭素(C)原子を介してそれぞれのTADF分子のコア構造に結合され、それら基に結合された置換基は、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成することができる、1以上の第1化学的部分構造、及び
－CN、CF₃、及び選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基から構成される群から互いに独立して選択された1以上の第2化学的部分構造。

【0220】

本発明のより好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^Bは、以下を含む：

－アミノ基、インドリル、カルバゾリル及びそれらの誘導体から互いに独立して選択され、それらはいずれも選択的に置換され、ここで、それら基は、窒素(N)または炭素(C)原子を介してそれぞれのTADF分子のコア構造に結合され、それら基に結合された置換基は、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成することができる、1以上の第1化学的部分構造、及び
－CN、CF₃、及び選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基から構成される群から互いに独立して選択された1以上の第2化学的部分構造。

【0221】

本発明のより好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれのTADF材料E^Bは、以下を含む：

－アミノ基、インドリル、カルバゾリル及びそれらの誘導体から互いに独立して選択され、それらはいずれも選択的に置換され、ここで、それら基は、窒素(N)または炭素(C)原子を介してそれぞれのTADF分子のコア構造に結合され、それら基に結合された置換基は、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成することができる、1以上の第1化学的部分構造、及び
－1以上の選択的に置換された1, 3, 5-トリアジニル基。

【0222】

当業者は、「その誘導体」という表現が、それぞれの親構造が選択的に置換されるか、またはそれぞれの親構造内の任意の原子が、例えば、他の元素の原子に代替されることを意味するということが分かっている。

10

20

30

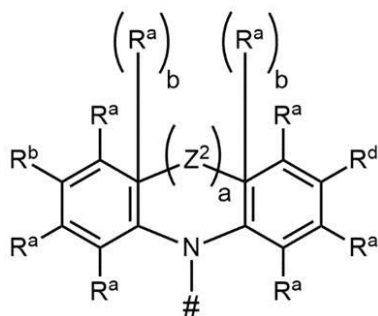
40

50

【 0 2 2 3 】

本発明の一実施形態において、それぞれの T A D F 材料 E^B は、以下を含む：
化学式 D - I による構造をそれぞれ含むか、あるいはそれから構成される 1 以上の第 1 化学的部分構造、

【化 4 3】

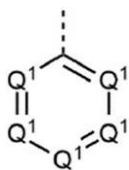


10

・・・化学式 D - 1

選択的に、C N、C F₃、並びに化学式 A - I、A - I I、A - I I I 及び A - I V のうちいずれか 1 つによる構造からそれぞれ互いに独立して選択される、1 以上の第 2 化学的部分構造、及び

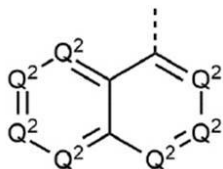
【化 4 4】



20

・・・化学式 A - 1

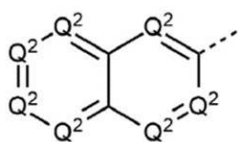
【化 4 5】



30

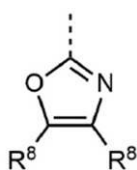
・・・化学式 A - I I

【化 4 6】



・・・化学式 A - I I I

【化 4 7】



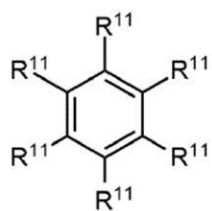
40

・・・化学式 A - I V

化学式 L - I、L - I I、L - I I I、L - I V、L V、L - V I、L - V I I 及び L - V I I I のうちいずれか 1 つによる構造を含むか、あるいはそれから構成される 1 つの第 3 化学的部分構造、

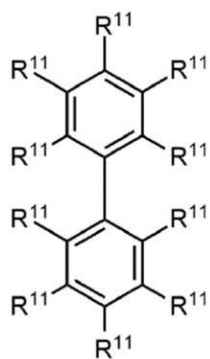
50

【化 4 8】



・・・化学式 L - 1

【化 4 9】

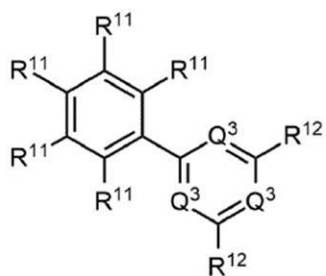


10

・・・化学式 L - 1 I

20

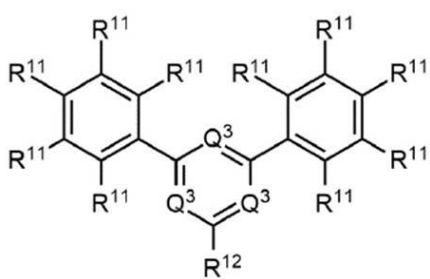
【化 5 0】



・・・化学式 L - 1 I I

30

【化 5 1】

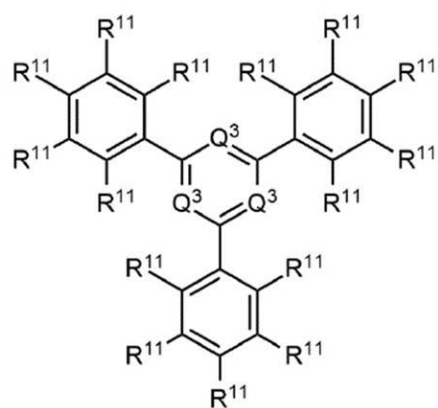


・・・化学式 L - V 1

40

50

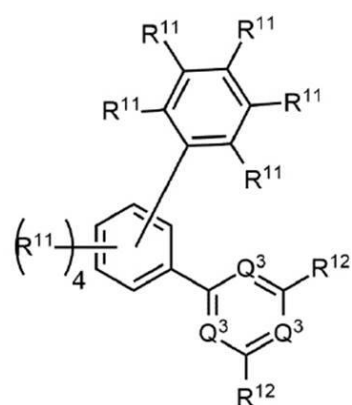
【化 5 2】



10

• • 化学式 L - V

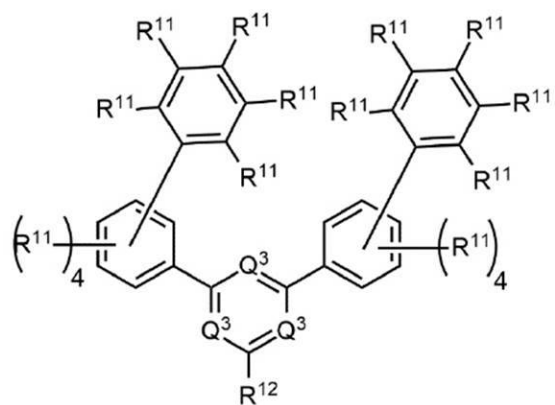
【化 5 3】



20

• • 化学式 L - V I

【化 5 4】



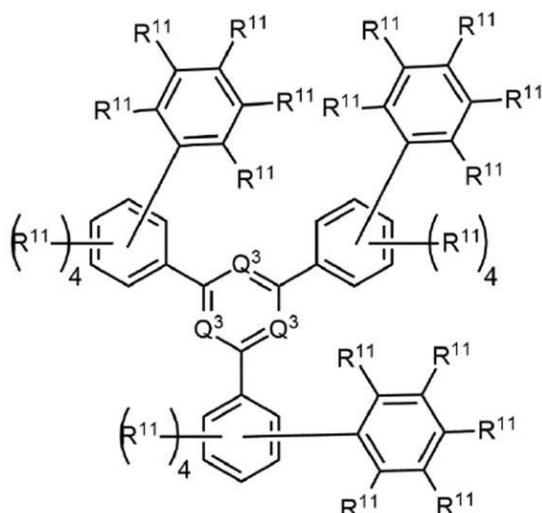
30

• • 化学式 L - V I I

40

50

【化 5 5】



10

・ ・ 化学式 L - V I I I

【 0 2 2 4】

ここで、1 以上の第 1 化学的部分構造及び選択的な 1 以上の第 2 化学的部分構造は、単結合を介して第 3 化学的部分構造に共有結合され、

化学式 D - I において、

20

は、化学式 D - I によるそれぞれの第 1 化学的部分構造を第 3 化学的部分構造に結合する単結合の結合位置を示し、

Z² は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、C R¹ R²、C = C R¹ R²、C = O、C = N R¹、N R¹、O、S i R¹ R²、S、S (O) 及び S (O)₂ から構成される群から選択され、

R^a、R^b、R^d、R¹ 及び R² は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N (R³)₂、O R³、S i (R³)₃、B (O R³)₂、O S O₂ R³、C F₃、C N、F、C l、B r、I、

C₁ - C₄₀ アルキル、

30

これは、1 以上の置換基 R³ で選択的に置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H₂ 基は、R³ C = C R³、C ≡ C、S i (R³)₂、G e (R³)₂、S n (R³)₂、C = O、C = S、C = S e、C = N R³、P (=O) (R³)、S O、S O₂、N R³、O、S または C O N R³ で選択的に置換され、

C₁ - C₄₀ アルコキシ、

これは、1 以上の置換基 R³ で選択的に置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H₂ 基は、R³ C = C R³、C ≡ C、S i (R³)₂、G e (R³)₂、S n (R³)₂、C = O、C = S、C = S e、C = N R³、P (=O) (R³)、S O、S O₂、N R³、O、S または C O N R³ で選択的に置換され、

C₁ - C₄₀ チオアルコキシ、

40

これは、1 以上の置換基 R³ で選択的に置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H₂ 基は、R³ C = C R³、C ≡ C、S i (R³)₂、G e (R³)₂、S n (R³)₂、C = O、C = S、C = S e、C = N R³、P (=O) (R³)、S O、S O₂、N R³、O、S または C O N R³ で選択的に置換され、

C₂ - C₄₀ アルケニル、

これは、1 以上の置換基 R³ で選択的に置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H₂ 基は、R³ C = C R³、C ≡ C、S i (R³)₂、G e (R³)₂、S n (R³)₂、C = O、C = S、C = S e、C = N R³、P (=O) (R³)、S O、S O₂、N R³、O、S または C O N R³ で選択的に置換され、

C₂ - C₄₀ アルキニル、

50

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、 O 、 S または $CONR^3$ で選択的に置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{60} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

R^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^4)_2$ 、 OR^4 、 $Si(R^4)_3$ 、 $B(OR^4)_2$ 、 OSO_2R^4 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^4C=CR^4$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $Ge(R^4)_2$ 、 $Sn(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^4$ 、 $P(=O)(R^4)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^4 、 O 、 S または $CONR^4$ で選択的に置換され、

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^4C=CR^4$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $Ge(R^4)_2$ 、 $Sn(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^4$ 、 $P(=O)(R^4)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^4 、 O 、 S または $CONR^4$ で選択的に置換され、

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^4C=CR^4$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $Ge(R^4)_2$ 、 $Sn(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^4$ 、 $P(=O)(R^4)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^4 、 O 、 S または $CONR^4$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^4C=CR^4$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $Ge(R^4)_2$ 、 $Sn(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^4$ 、 $P(=O)(R^4)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^4 、 O 、 S または $CONR^4$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^4C=CR^4$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $Ge(R^4)_2$ 、 $Sn(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^4$ 、 $P(=O)(R^4)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^4 、 O 、 S または $CONR^4$ で選択的に置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 は、互いに独立して、 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

R^4 は、それぞれの場合に、下記から構成される群から選択され、

素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

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

C_1-C_5 アルコキシ、

10

20

30

40

50

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

$\text{C}_1 - \text{C}_5$ チオアルコキシ、

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

$\text{C}_2 - \text{C}_5$ アルケニル、

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

$\text{C}_2 - \text{C}_5$ アルキニル、

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

$\text{C}_6 - \text{C}_{18}$ アリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 $\text{C}_1 - \text{C}_5$ アルキル、 Ph または CN によって置換され、

$\text{C}_3 - \text{C}_{17}$ ヘテロアリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Ph または $\text{C}_1 - \text{C}_5$ アルキルによって置換され、

$\text{N}(\text{C}_6 - \text{C}_{18}\text{アリール})_2$ 、

$\text{N}(\text{C}_3 - \text{C}_{17}\text{ヘテロアリール})_2$ 、及び

$\text{N}(\text{C}_3 - \text{C}_{17}\text{ヘテロアリール})(\text{C}_6 - \text{C}_{18}\text{アリール})$ 、

a は整数であり、0または1であり、

b は整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方の b は常に同一であり、

ここで、整数 a が1であるとき、両方の整数 b は0であり、両方の整数 b が1であるとき、整数 a は0であり、

化学式 A-I 、 A-II 、 A-III 及び A-IV において、

点線は、化学式 A-I 、 A-II 、 A-III または A-IV によるそれぞれの第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合を示し、

Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式 A-I において、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素(N)ではなく、ここで、化学式 A-I の基 Q^1 のうち何も窒素(N)ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも1つは CR^7 であり、

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^6 から選択され、但し、化学式 A-II 及び A-III において、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素(N)であり、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素(N)ではなく、

R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $\text{N}(\text{R}^9)_2$ 、 OR^9 、 $\text{Si}(\text{R}^9)_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}^9)_2$ 、 OSO_2R^9 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

$\text{C}_1 - \text{C}_{40}$ アルキル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $\text{R}^9\text{C}=\text{CR}^9$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^9$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^9)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、 O 、 S または CONR^9 で選択的に置換され、

$\text{C}_1 - \text{C}_{40}$ アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $\text{R}^9\text{C}=\text{CR}^9$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^9)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^9$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^9)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、 O 、 S または CONR^9 で選択的に置換され、

$\text{C}_1 - \text{C}_{40}$ チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^9C=CR^9$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 $Ge(R^9)_2$ 、 $Sn(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^9$ 、 $P(=O)(R^9)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、 O 、 S または $CONR^9$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^9C=CR^9$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 $Ge(R^9)_2$ 、 $Sn(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^9$ 、 $P(=O)(R^9)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、 O 、 S または $CONR^9$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^9C=CR^9$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 $Ge(R^9)_2$ 、 $Sn(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^9$ 、 $P(=O)(R^9)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、 O 、 S または $CONR^9$ で選択的に置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{60} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

R^9 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{10})_2$ 、 OR^{10} 、 $Si(R^{10})_3$ 、 $B(OR^{10})_2$ 、 OSO_2R^{10} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、 O 、 S または $CONR^{10}$ で選択的に置換され、

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、 O 、 S または $CONR^{10}$ で選択的に置換され、

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、 O 、 S または $CONR^{10}$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、 O 、 S または $CONR^{10}$ で選択的に置換され、

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、 O 、 S または $CONR^{10}$ で選択的に置換され、

10

20

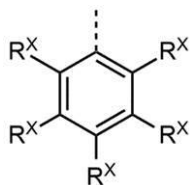
30

40

50

C_6-C_{60} アリール、
 これは、1 以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、及び
 C_3-C_{60} ヘテロアリール、
 これは、1 以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、
 R^{10} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
 水素、重水素、OPh、 CF_3 、CN、F、
 C_1-C_5 アルキル、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 F によって置換され、
 C_1-C_5 アルコキシ、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 F によって置換され、
 C_1-C_5 チオアルコキシ、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 F によって置換され、
 C_2-C_5 アルケニル、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 F によって置換され、
 C_2-C_5 アルキニル、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 F によって置換され、
 C_6-C_{18} アリール、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 C_1-C_5 アルキル
 、Ph または CN によって置換され、
 C_3-C_{17} ヘテロアリール、
 ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、Ph または C_1-C_5
 アルキルによって置換され、
 $N(C_6-C_{18}$ アリール) $_2$ 、
 $N(C_3-C_{17}$ ヘテロアリール) $_2$ 、及び
 $N(C_3-C_{17}$ ヘテロアリール)(C_6-C_{18} アリール)、
 R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、CN、 CF_3 及び化学式 EWG-I による
 構造から構成される群から選択される：

【化 56】



・・・化学式 EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義され、但し、化学式 EWG-I において、少なくとも
 も1つの R^X 基は、CN または CF_3 であり、

化学式 A-IV において、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これ
 は化学式 A-IV の構造に縮合され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は
 、計9～18個の環原子を含み、

化学式 L-I、L-II、L-III、L-IV、L-V、L-VI、L-VII 及び
 L-VIII において、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^{12} から選択され、但し
 、1以上の Q^3 は窒素 (N) であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化

学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、F、Cl、Br、I、

C₁–C₅アルキル、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に重水素で置換され、

C₆–C₁₈アリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、C₁–C₅アルキル基、C₆–C₁₈アリール基、F、Cl、Br及びIによって置換され、

R¹²は、R⁶のように定義される。

【0225】

本発明の好ましい実施形態において、

Z²は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、CR¹R²、C=CR¹R²、C=O、C=NR¹、NR¹、O、SiR¹R²、S、S(O)及びS(O)₂から構成される群から選択され、

R^a、R^b、R^d、R¹及びR²は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(R³)₂、OR³、Si(R³)₃、CF₃、CN、F、Cl、Br、I、

C₁–C₄₀アルキル、

これは、1以上の置換基R³で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、R³C=CR³、C≡C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、SまたはCONR³で選択的に置換され、

C₆–C₆₀アリール、

これは、1以上の置換基R³で選択的に置換され、及び

C₃–C₆₀ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基R³で選択的に置換され、

R³は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(R⁴)₂、OR⁴、Si(R⁴)₃、CF₃、CN、F、Br、I、

C₁–C₄₀アルキル、

これは、1以上の置換基R⁴で選択的に置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、R⁴C=CR⁴、C≡C、Si(R⁴)₂、Ge(R⁴)₂、Sn(R⁴)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁴、P(=O)(R⁴)、SO、SO₂、NR⁴、O、SまたはCONR⁴で選択的に置換され、

C₆–C₆₀アリール、

これは、1以上の置換基R⁴で選択的に置換され、及び

C₃–C₅₇ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基R⁴で選択的に置換され、

ここで、選択的に、任意の置換基R^a、R^b、R^d、R¹、R²、R³及びR⁴は、互いに独立して、R^a、R^b、R^d、R¹、R²、R³及びR⁴から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

R⁴は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、CF₃、CN、F、

C₁–C₅アルキル、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、CF₃またはFによって置換され、

C₆–C₁₈アリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、C₁–C₅アルキル、PhまたはCNによって置換され、

10

20

30

40

50

$C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 $C_1 - C_5$ アルキル
 またはPhによって置換され、
 $N(C_6 - C_{18}$ アリール) $_2$ 、
 $N(C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール) $_2$ 、及び
 $N(C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール)($C_6 - C_{18}$ アリール)、
 a は整数であり、0または1であり、
 b は整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方の b は常に同一で
 あり、
 ここで、整数 a が1であるとき、両方の整数 b は0であり、両方の整数 b が1であると
 き、整数 a は0であり、
 Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され
 、但し、化学式A-Iにおいて、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素(N)ではなく
 、ここで、化学式A-Iの基 Q^1 のうち何も窒素(N)ではない場合、基 Q^1 のうち少な
 くとも1つは CR^7 であり、
 Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^6 から選択され、但し
 、化学式A-II及びA-IIIにおいて、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素(N)であり
 、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素(N)ではなく、
 R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択さ
 れ、
 水素、重水素、 $N(R^9)_2$ 、 OR^9 、 $Si(R^9)_3$ 、 $B(OR^9)_2$ 、 OSO_2R^9
 、 CF_3 、CN、F、Cl、Br、I、
 $C_1 - C_{40}$ アルキル、
 これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^9C=CR^9$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 Ge
 $(R^9)_2$ 、 $Sn(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^9$ 、 $P(=O)(R^9)$
 $_2$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^9 、O、Sまたは $CONR^9$ で選択的に置換され、
 $C_6 - C_{60}$ アリール、
 これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、及び
 $C_3 - C_{60}$ ヘテロアリール、
 これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、
 R^9 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
 水素、重水素、 $N(R^{10})_2$ 、 OR^{10} 、 $Si(R^{10})_3$ 、 $B(OR^{10})_2$ 、 OSO
 $_2R^{10}$ 、 CF_3 、CN、F、Cl、Br、I、
 $C_1 - C_{40}$ アルキル、
 これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{10}C=CR^{10}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{10})$
 $_2$ 、 $Ge(R^{10})_2$ 、 $Sn(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{10}$ 、 P
 $(=O)(R^{10})_2$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{10} 、O、Sまたは $CONR^{10}$ で選択的に置換
 され、
 $C_6 - C_{60}$ アリール、
 これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、及び
 $C_3 - C_{60}$ ヘテロアリール、
 これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、
 R^{10} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
 水素、重水素、OPh、 CF_3 、CN、F、
 $C_1 - C_5$ アルキル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、 CF_3 または
 Fによって置換され、
 $C_6 - C_{18}$ アリール、

10

20

30

40

50

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 C_1-C_5 アルキル、PhまたはCNによって置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、Phまたは C_1-C_5 アルキルによって置換され、

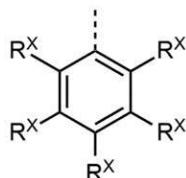
$N(C_6-C_{18}$ アリール)₂、

$N(C_3-C_{17}$ ヘテロアリール)₂、及び

$N(C_3-C_{17}$ ヘテロアリール)(C_6-C_{18} アリール)、

R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、CN、 CF_3 及び化学式EWG-Iによる構造から構成される群から選択される：

【化57】



・・・化学式EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義され、但し、少なくとも1つの R^X 基は、CNまたは CF_3 であり、

化学式A-IVにおいて、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式A-IVの構造に縮合され、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、総9～18個の環原子を含み、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素(N)であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に重水素で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 C_1-C_5 アルキル基及び C_6-C_{18} アリール基によって置換され、

R^{12} は、 R^6 のように定義され、

ここで、第3化学的部分構造に結合された第1及び第2化学的部分構造の最大個数は、第3化学的部分構造で利用可能な結合位置の個数(すなわち、置換基 R^{11} の数)のみによって限定され、前述の規定により、それぞれのTADF材料 E^B は、少なくとも1つの第1化学的部分構造、少なくとも1つの第2化学的部分構造及び正確に1つの第3化学的部分構造を含む。

【0226】

本発明のより好ましい実施形態において、

Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $C=CR^1R^2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^1$ 、 NR^1 、O、 SiR^1R^2 、S、S(O)及びS(O)₂から構成される群から選択され、

R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $Si(R^3)_3$ 、 CF_3 、CN、F、Cl、Br、I、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

$C_6 - C_{18}$ アリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、及び

$C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

R^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^4)_2$ 、 $Si(R^4)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

$C_1 - C_5$ アルキル、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

$C_6 - C_{18}$ アリール、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、及び

$C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^4 で選択的に置換され、

ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 、 R^2 及び R^3 は、互いに独立して、 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 、 R^2 及び R^3 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された環系は、1以上の置換基 R^5 で選択的に置換され、

R^4 及び R^5 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 F 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 $N(Ph)_2$ 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換された Ph 、

a は整数であり、0 または 1 であり、

b は整数であり、それぞれの場合、0 または 1 であり、ここで、両方の b は常に同一であり、

ここで、整数 a が 1 であるとき、両方の整数 b は 0 であり、両方の整数 b が 1 であるとき、整数 a は 0 であり、

Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式 $A-I$ において、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素 (N) ではなく、ここで、化学式 $A-I$ の基 Q^1 のうち何も窒素 (N) ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも1つは CR^7 であり、

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^6 から選択され、但し、化学式 $A-II$ 及び $A-III$ において、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素 (N) であり、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素 (N) ではなく、

R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^9)_2$ 、 OR^9 、 $Si(R^9)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

$C_1 - C_5$ アルキル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

$C_6 - C_{18}$ アリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、及び

$C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

R^9 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{10})_2$ 、 OR^{10} 、 $Si(R^{10})_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

$C_1 - C_5$ アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、

$C_6 - C_{18}$ アリール、

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、及び

$C_3 - C_{17}$ ヘテロアリール、

10

20

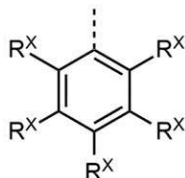
30

40

50

これは、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、
 R^{10} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
 水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、 CF_3 、CN、F、 $N(Ph)_2$ 、及び
 1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、Ph、C
 N、 CF_3 または F によって置換された Ph、
 R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、CN、 CF_3 及び化学式 EWG-I による
 構造から構成される群から選択される：

【化58】



10

・・・化学式 EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義され、但し、少なくとも1つの R^X 基は、CN または CF_3 であり、

化学式 A-IV において、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式 A-IV の構造に縮合され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計9～18個の環原子を含み、

20

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素 (N) であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に重水素で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu 及び Ph から構成され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、

30

R^{12} は、 R^6 のように定義される。

【0227】

本発明のより好ましい実施形態において、

Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $C=O$ 、 NR^1 、O、 SiR^1R^2 、S、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $Si(R^3)_3$ 、 CF_3 、CN、

C_1-C_5 アルキル、

40

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、

R^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、CN、F、Me、*i*Pr、*t*Bu、 $N(Ph)_2$ 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu 及び Ph で置換された Ph、

ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、互いに独立して、

50

R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的にこのように形成された、化学式D1による構造、及び隣接した置換基によって形成された結合された環から構成された縮合環系は、計13～40個の環原子、好ましくは、13～30個の環原子、より好ましくは、16～30個の環原子を含み、

a は整数であり、0または1であり、

b は整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方の b は常に同一であり、

ここで、整数 a が1であるとき、両方の整数 b は0であり、両方の整数 b が1であるとき、整数 a は0であり、

Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式A-Iにおいて、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素(N)ではなく、ここで、化学式A-Iの基 Q^1 のうち何も窒素(N)ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも1つは CR^7 であり、

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^6 から選択され、但し、化学式A-II及びA-IIIにおいて、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素(N)であり、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素(N)ではなく、

R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^9)_2$ 、 OR^9 、 $Si(R^9)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

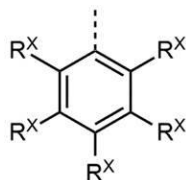
R^9 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 CF_3 、 CN 、 F 、 $N(Ph)_2$ 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph 、 CN 、 CF_3 または F によって置換された Ph 、

R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、 CN 、 CF_3 及び化学式EWG-Iによる構造から構成される群から選択される：

【化59】



・・・化学式EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義され、但し、少なくとも1つの R^X 基は、 CN または CF_3 であり、

化学式A-IVにおいて、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式A-IVの構造に縮合され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計9～18個の環原子を含み、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素(N)であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、及び
Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhから構成され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るPh、
 R^{12} は、 R^6 のように定義される。

【0228】

本発明のより好ましい実施形態において、
 Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $C=O$ 、 NR^1 、 O 、 SiR^1R^2 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、
 R^a 、 R^b 及び R^d は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
水素、重水素、 $N(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $Si(R^3)_3$ 、 CF_3 、 CN 、Me、*i*Pr、*t*Bu、
Ph、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、
カルバゾリル、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、
トリアジニル、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、
ピリミジニル、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、
ピリジニル、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、
 R^1 及び R^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $Si(R^3)_3$ 、 CF_3 、 CN 、
 C_1-C_5 アルキル、
これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、
 C_6-C_{18} アリール、
これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、及び
 C_3-C_{17} ヘテロアリール、
これは、1以上の置換基 R^3 で選択的に置換され、
 R^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、
水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 F 、Me、*i*Pr、*t*Bu、及び
1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換されたPh、
ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、互いに独立して、 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、
ここで、選択的にこのように形成された、化学式D1による構造、及び隣接した置換基によって形成された結合された環から構成された縮合環系は、計13～40個の環原子、
好ましくは、13～30個の環原子、より好ましくは、16～30個の環原子を含み、
 a は整数であり、0または1であり、
 b は整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方の b は常に同一であり、
ここで、整数 a が1であるとき、両方の整数 b は0であり、両方の整数 b が1であるとき、整数 a は0であり、
 Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式A-Iにおいて、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素(N)ではなく、ここで、化学式A-Iの基 Q^1 のうち何も窒素(N)ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも1つは CR^7 であり、

10

20

30

40

50

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素（N）及び CR^6 から選択され、但し、化学式A-I I及びA-I I Iにおいて、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素（N）であり、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素（N）ではなく、 R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^9)_2$ 、 OR^9 、 $Si(R^9)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、 C_1-C_5 アルキル、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、及び

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^9 で選択的に置換され、

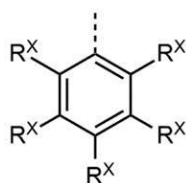
R^9 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 CF_3 、 CN 、 F 、 $N(Ph)_2$ 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph 、 CN 、 CF_3 または F によって置換された Ph 、

R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、 CN 、 CF_3 及び化学式EWG-Iによる構造から構成される群から選択される：

【化60】



・・・化学式EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義され、但し、少なくとも1つの R^X 基は、 CN または CF_3 であり、

化学式A-IVにおいて、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式A-IVの構造に縮合され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計9～18個の環原子を含み、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素（N）及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素（N）であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph から構成され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る Ph 、

R^{12} は、 R^6 のように定義される。

【0229】

本発明のより好ましい実施形態において、

Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $C=O$ 、 NR^1 、 O 、 SiR^1R^2 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

R^a 、 R^b 及び R^d は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $Si(R^3)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 Me 、 iPr 、 tBu 、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換された Ph 、及び

カルbazリル、ここで、1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、ⁱPr、^tBu及びPhで置換され、

R¹及びR²は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、OR³、Si(R³)₃、

C₁–C₅アルキル、

これは、1以上の置換基R³で選択的に置換され、

C₆–C₁₈アリール、

これは、1以上の置換基R³で選択的に置換され、

R³は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、CF₃、CN、F、Me、ⁱPr、^tBu、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、ⁱPr、^tBu及びPhで置換されたPh、

ここで、選択的に、任意の置換基R^a、R^b、R^d、R¹及びR²は、互いに独立して、R^a、R^b、R^d、R¹及びR²から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的にこのように形成された、化学式D1による構造、及び隣接した置換基によって形成された結合された環から構成された縮合環系は、計13～40個の環原子、好ましくは、13～30個の環原子、より好ましくは、16～30個の環原子を含み、

aは整数であり、0または1であり、

bは整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方のbは常に同一であり、

ここで、整数aが1であるとき、両方の整数bは0であり、両方の整数bが1であるとき、整数aは0であり、

Q¹は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)、CR⁶及びCR⁷から選択され、但し、化学式A–Iにおいて、2つの隣接した基Q¹は、両方とも窒素(N)ではなく、ここで、化学式A–Iの基Q¹のうち何も窒素(N)ではない場合、基Q¹のうち少なくとも1つはCR⁷であり、

Q²は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及びCR⁶から選択され、但し、化学式A–II及びA–IIIにおいて、少なくとも1つの基Q²は窒素(N)であり、2つの隣接した基Q²は、両方とも窒素(N)ではなく、

R⁶及びR⁸は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

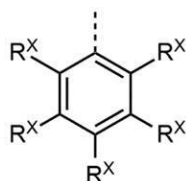
水素、重水素、OPh、N(Ph)₂、Si(Me)₃、Si(Ph)₃、CF₃、CN、F、Me、ⁱPr、^tBu、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、ⁱPr、^tBu及びPhで置換されたPh、

カルbazリル、ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、Me、ⁱPr、^tBu及びPhで置換され、

R⁷は、それぞれの場合に互いに独立して、CN、CF₃及び化学式EWG–Iによる構造から構成される群から選択される：

【化61】



・・・化学式EWG–I

ここで、R^Xは、R⁶のように定義され、但し、少なくとも1つのR^X基は、CNまたは

10

20

30

40

50

CF_3 であり、

化学式 $\text{A}-\text{IV}$ において、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式 $\text{A}-\text{IV}$ の構造に縮合され、1以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計9～18個の環原子を含み、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素 (N) であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換されるPh、

R^{12} は、 R^6 のように定義される。

【0230】

本発明のより好ましい実施形態において、

Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 NR^1 、O、 SiR^1R^2 、S、S(O) 及び S(O)₂ から構成される群から選択され、

R^a 、 R^b 及び R^d は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(Ph)₂、Si(Me)₃、Si(Ph)₃、 CF_3 、CN、Me、*i*Pr、*t*Bu、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換されたPh、及び

カルバゾリル、ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換され、

R^1 及び R^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu及びPhで置換されたPh、

ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、互いに独立して、 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的にこのように形成された、化学式 D1 による構造、及び隣接した置換基によって形成された結合された環から構成された縮合環系は、計13～40個の環原子、好ましくは、13～30個の環原子、より好ましくは、16～30個の環原子を含み、

aは整数であり、0または1であり、

bは整数であり、それぞれの場合、0または1であり、ここで、両方のbは常に同一であり、

ここで、整数aが1であるとき、両方の整数bは0であり、両方の整数bが1であるとき、整数aは0であり、

Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式 $\text{A}-\text{I}$ において、2つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素 (N) ではなく、ここで、化学式 $\text{A}-\text{I}$ の基 Q^1 のうち何も窒素 (N) ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも1つは CR^7 であり、

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^6 から選択され、但し、化学式 $\text{A}-\text{II}$ 及び $\text{A}-\text{III}$ において、少なくとも1つの基 Q^2 は窒素 (N) であり、2つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素 (N) ではなく、

R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

10

20

30

40

50

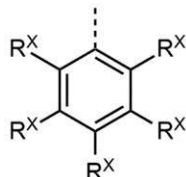
水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 $Si(Me)_3$ 、 $Si(Ph)_3$ 、 Me 、 iPr 、 tBu

、
1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換された Ph 、

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換されたカルバゾリル、

R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、 CN 、 CF_3 及び化学式EWG-Iによる構造から構成される群から選択される：

【化62】



10

・・・化学式EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義されるが、 CN または CF_3 であり、但し、少なくとも1つの R^X 基は、 CN または CF_3 であり、

化学式A-IVにおいて、2つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式A-IVの構造に縮合され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計9～18個の環原子を含み、

20

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素(N)及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも1つの Q^3 は窒素(N)であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換される Ph 、

R^{12} は、 R^6 のように定義される。

30

【0231】

本発明の特に好ましい実施形態において、

Z^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、直接結合、 CR^1R^2 、 $C=O$ 、 NR^1 、 O 、 SiR^1R^2 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

R^a 、 R^b 及び R^d は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換された Ph 、

R^1 及び R^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

40

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

1以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 及び Ph で置換された Ph 、

ここで、選択的に、任意の置換基 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 は、互いに独立して、 R^a 、 R^b 、 R^d 、 R^1 及び R^2 から選択された1以上の隣接した置換基と共に、単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された、化学式D1による構造、及び隣接した置換基によって形成された結合された環から構成された縮合環系は、計13～40個の環原子、好ましくは、13～30個の環原子、より好ましくは、16～30個の環原子を含み、

50

a は整数であり、0 または 1 であり、

b は整数であり、それぞれの場合、0 または 1 であり、ここで、両方の b は常に同一であり、

ここで、整数 a が 1 であるとき、両方の整数 b は 0 であり、両方の整数 b が 1 であるとき、整数 a は 0 であり、

Q^1 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N)、 CR^6 及び CR^7 から選択され、但し、化学式 A-I において、2 つの隣接した基 Q^1 は、両方とも窒素 (N) ではなく、ここで、化学式 A-I の基 Q^1 のうち何も窒素 (N) ではない場合、基 Q^1 のうち少なくとも 1 つは CR^7 であり、

Q^2 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^6 から選択され、但し、化学式 A-II 及び A-III において、少なくとも 1 つの基 Q^2 は窒素 (N) であり、2 つの隣接した基 Q^2 は、両方とも窒素 (N) ではなく、

R^6 及び R^8 は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

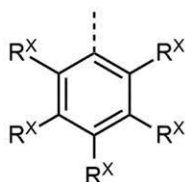
水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、Me、iPr、tBu、

1 以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、iPr、tBu 及び Ph で置換された Ph、

カルbazolil、ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、Me、iPr、tBu 及び Ph で置換され、

R^7 は、それぞれの場合に互いに独立して、CN、 CF_3 及び化学式 EWG-I による構造から構成される群から選択される：

【化 63】



・・・化学式 EWG-I

ここで、 R^X は、 R^6 のように定義されるが、CN または CF_3 であり、但し、少なくとも 1 つの R^X 基は、CN または CF_3 であり、

化学式 A-IV において、2 つの隣接した基 R^8 は、選択的に芳香族環を形成し、これは化学式 A-IV の構造に縮合され、1 以上の置換基 R^{10} で選択的に置換され、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、計 9 ～ 18 個の環原子を含み、

Q^3 は、それぞれの場合に互いに独立して、窒素 (N) 及び CR^{12} から選択され、但し、少なくとも 1 つの Q^3 は窒素 (N) であり、

R^{11} は、それぞれの場合に互いに独立して、第 1 または第 2 化学的部分構造を第 3 化学的部分構造に結合する単結合の結合位置であるか、または互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、Me、iPr、tBu、及び

1 以上の水素原子が選択的に互いに独立して重水素、Me、iPr、tBu 及び Ph で置換される Ph、

R^{12} は、 R^6 のように定義される。

【0232】

本発明の好ましい実施形態において、a は常に 1 であり、b は常に 0 である。

【0233】

本発明の好ましい実施形態において、 Z^2 は、それぞれの場合に直接結合である。

【0234】

本発明の好ましい実施形態において、 R^a は、それぞれの場合に水素である。

【0235】

10

20

30

40

50

本発明の好ましい実施形態において、 R^a 及び R^d は、それぞれの場合に水素である。

【0236】

本発明の好ましい実施形態において、 Q^3 は、それぞれの場合に窒素（N）である。

【0237】

本発明の一実施形態において、化学式 EWG-I において、少なくとも1つの基 R^X は CN である。

【0238】

本発明の好ましい実施形態において、化学式 EWG-I において、正確に1つの基 R^X は CN である。

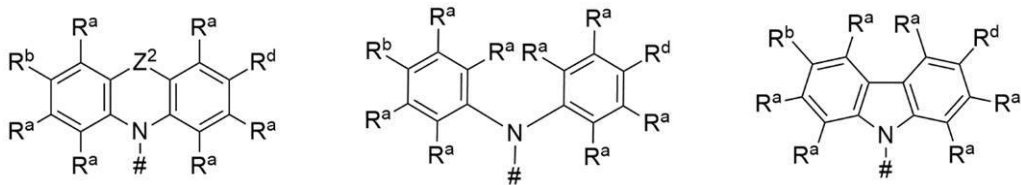
【0239】

本発明の好ましい実施形態において、化学式 EWG-I において、正確に1つの R^X 基は CN であり、化学式 EWG-I において、 R^X 基は CF_3 ではない。

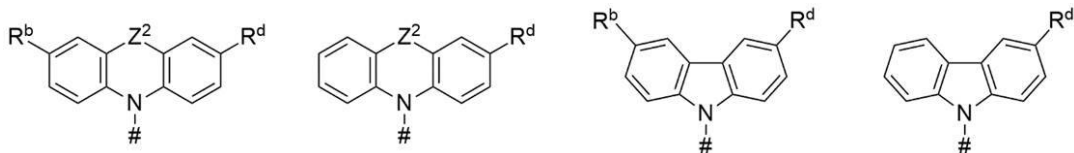
【0240】

本発明による第1化学的部分構造の例を下記に示すが、これは、本発明がそれら例に限定されることを意味するものではない：

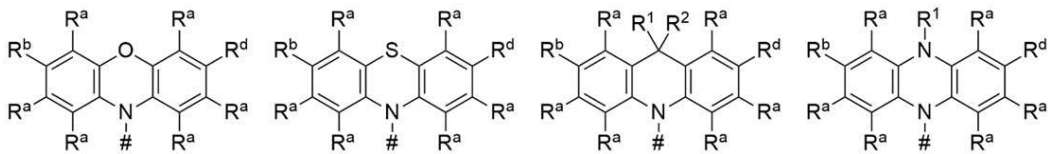
【化64】



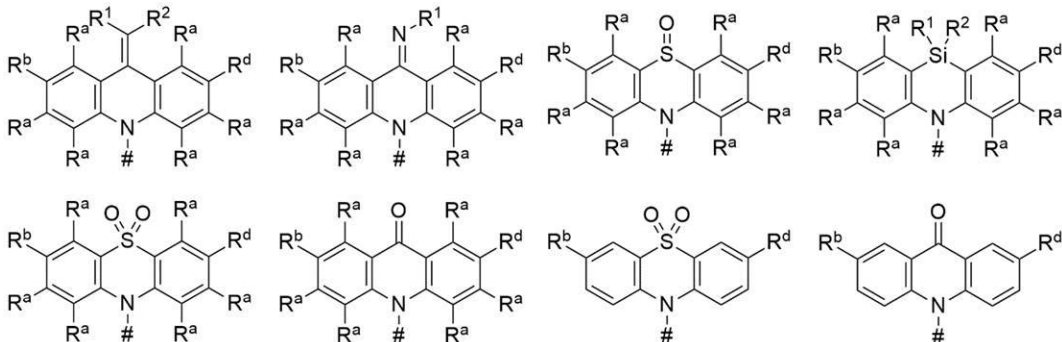
【化65】



【化66】



【化67】



10

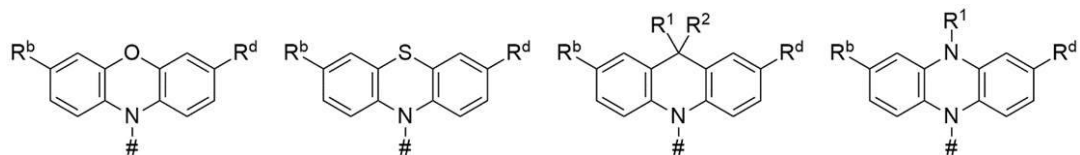
20

30

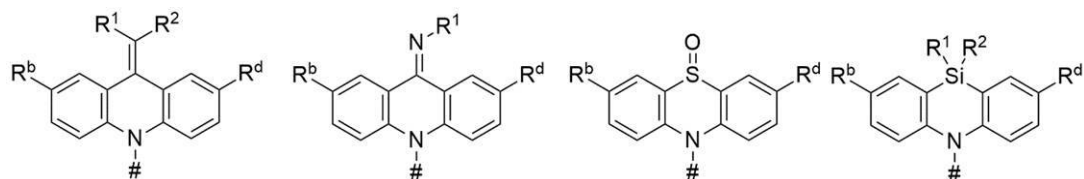
40

50

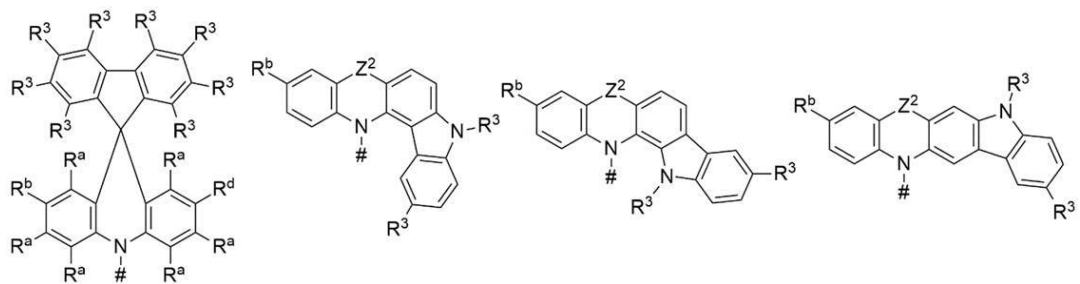
【化 6 8】



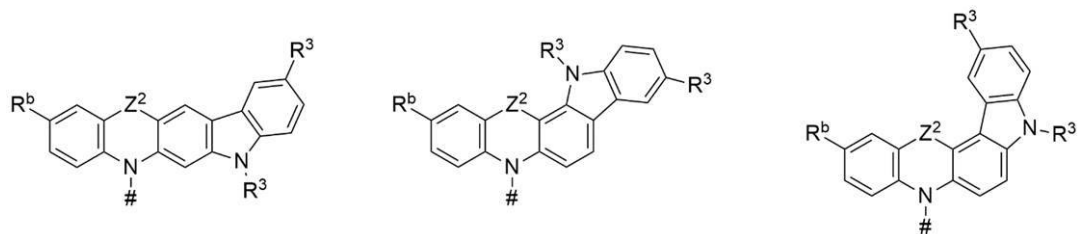
【化 6 9】



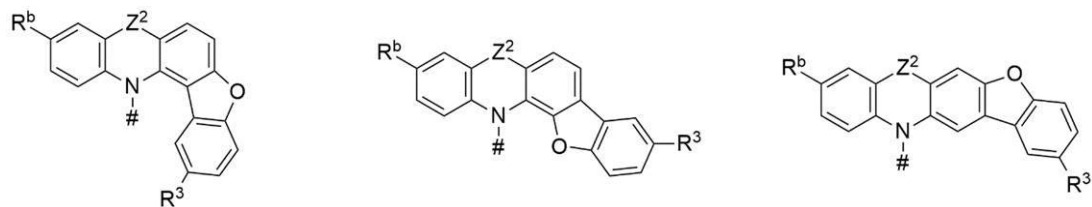
【化 7 0】



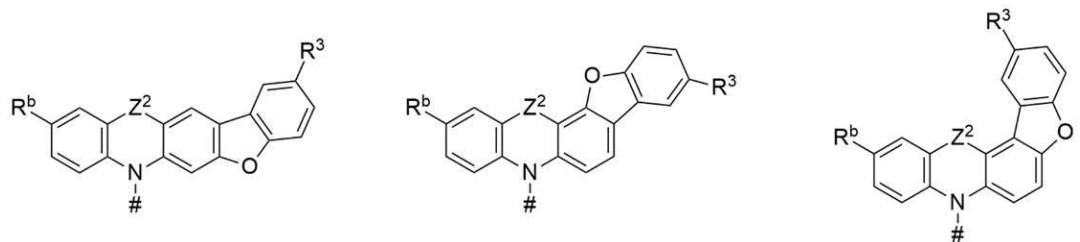
【化 7 1】



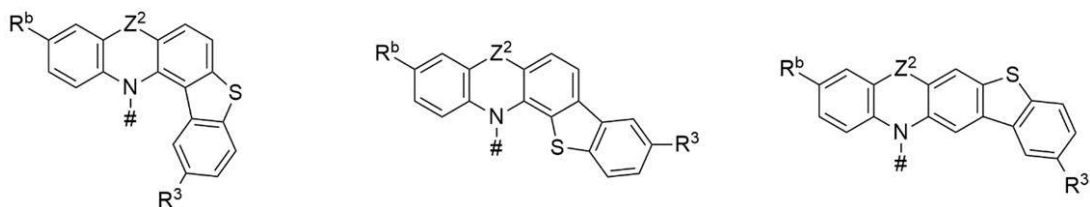
【化 7 2】



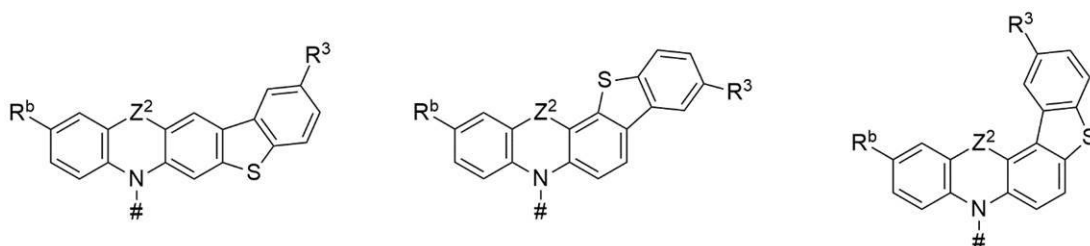
【化 7 3】



【化 7 4】

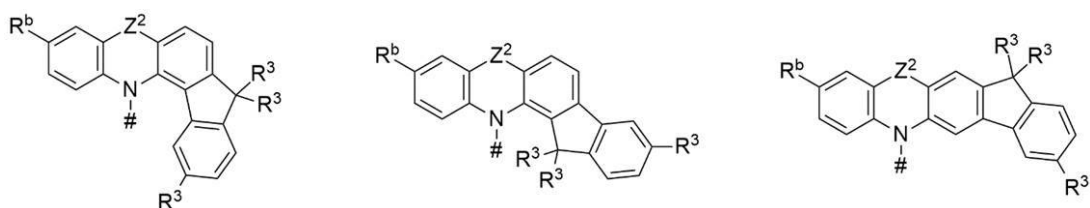


【化 7 5】



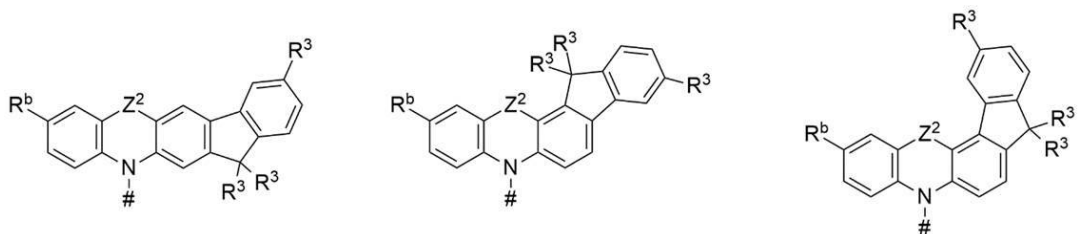
10

【化 7 6】



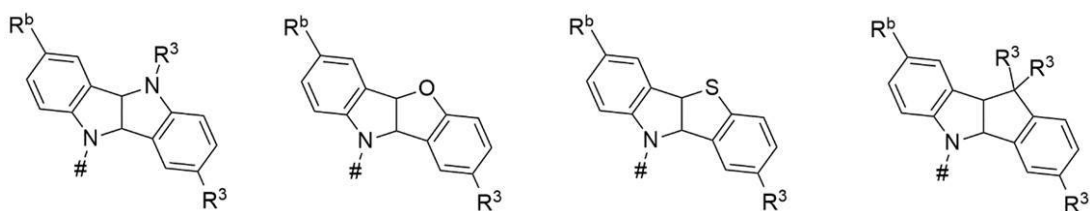
20

【化 7 7】

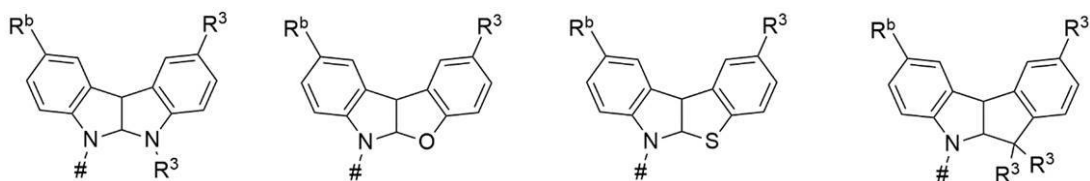


30

【化 7 8】



【化 7 9】



40

【0 2 4 1】

ここで、前述の定義が適用される。

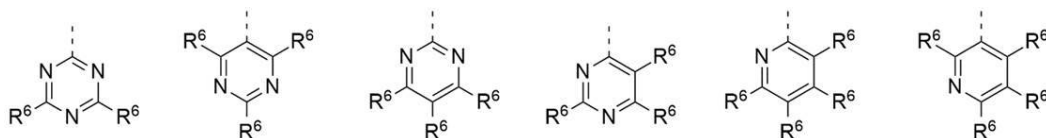
【0 2 4 2】

本発明による第2化学的部分構造の例を下記に示すが、これは、本発明がそれら例に限

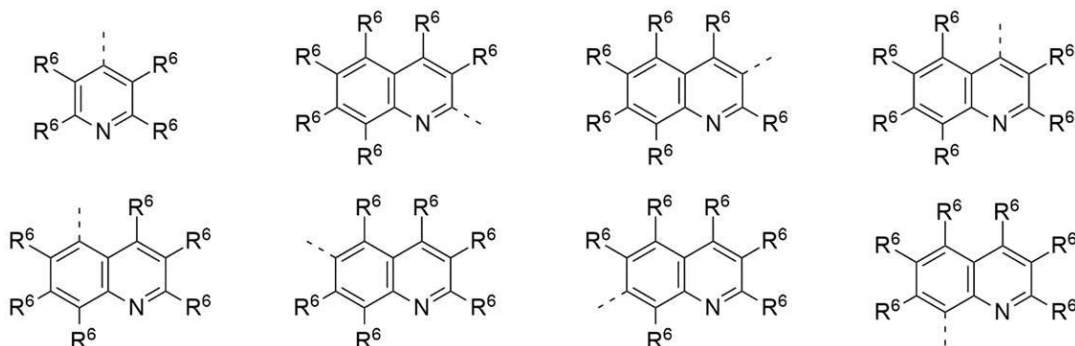
50

定されることを意味するものではない：

【化 8 0】

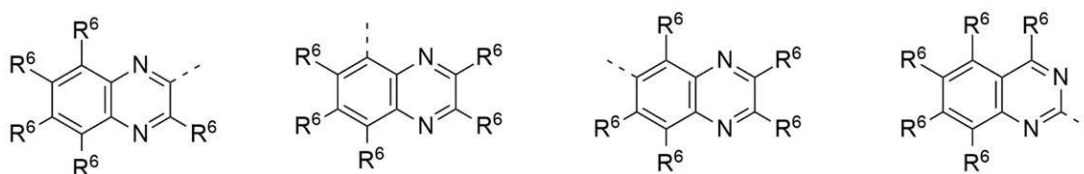


【化 8 1】



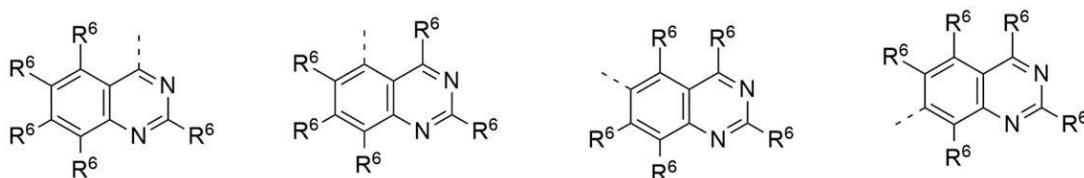
10

【化 8 2】



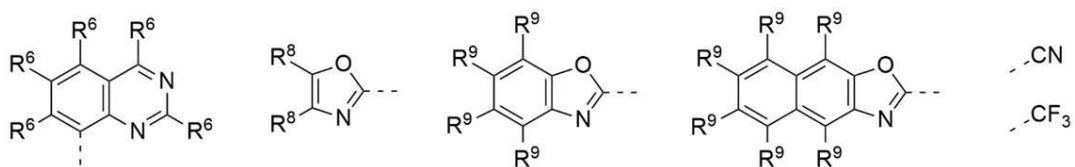
20

【化 8 3】

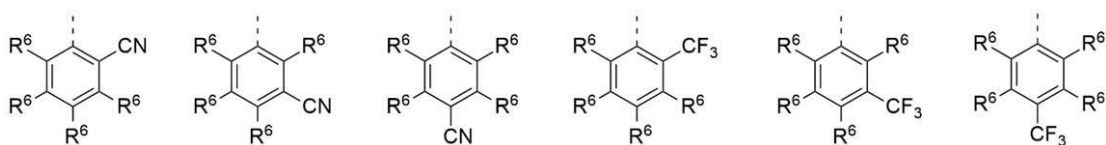


30

【化 8 4】

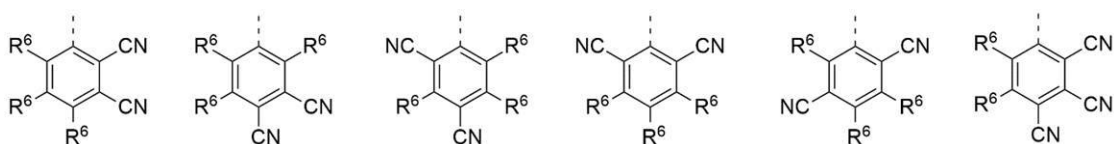


【化 8 5】



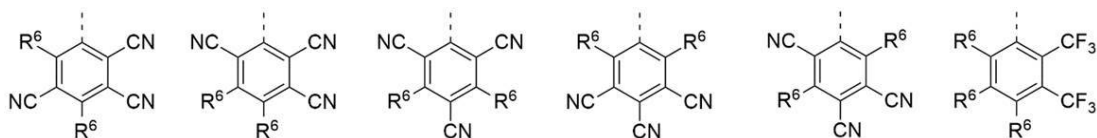
40

【化 8 6】

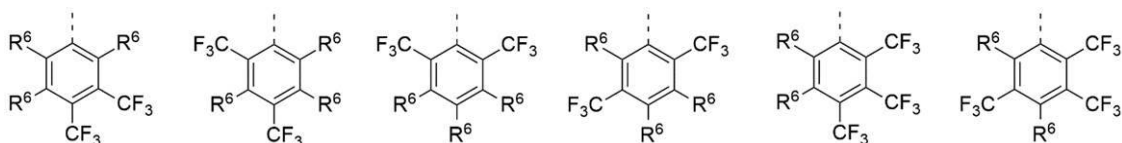


50

【化 8 7】

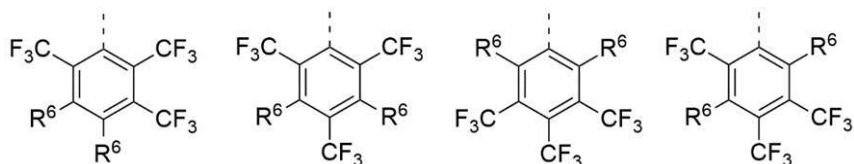


【化 8 8】



10

【化 8 9】



【 0 2 4 3】

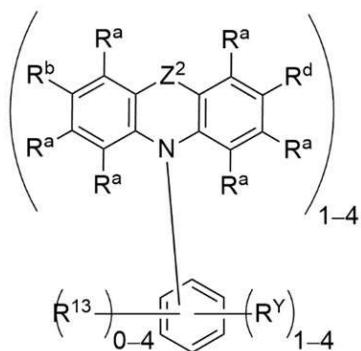
ここで、前述の定義が適用される。

20

【 0 2 4 4】

本発明の好ましい実施形態において、各 TADF 材料 E^B は、化学式 E^B-I 、 E^B-II 、 E^B-III 、 E^B-IV 、 E^B-V 、 E^B-VI 、 E^B-VII 、 E^B-VIII 、 E^B-IX 、 E^B-X 及び E^B-XI のうちいずれか 1 つで表される構造を有する：

【化 9 0】

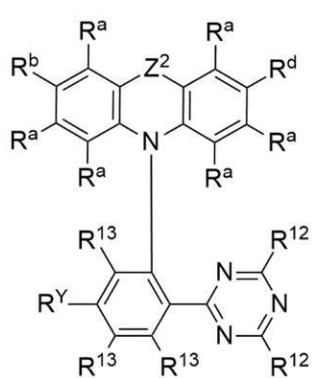
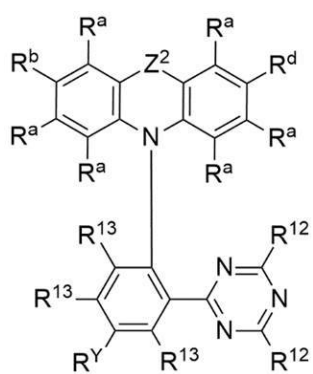


30

・・・化学式 E^B-I

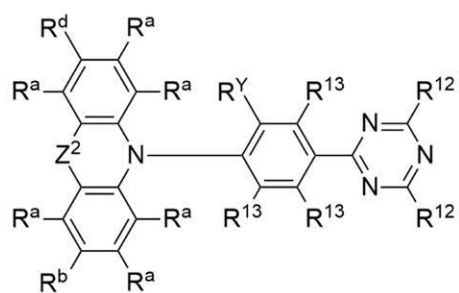
40

50



50

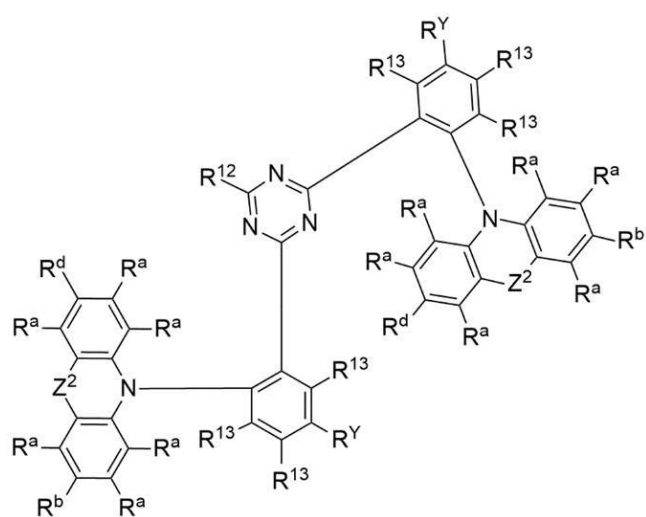
【化 9 4】



10

・・・化学式 E^B – V

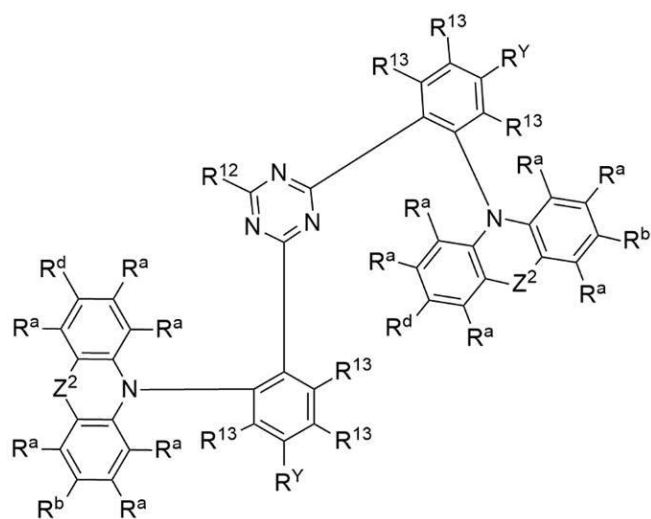
【化 E 9 5】



20

・・・化学式 E^B – V I

【化 9 6】



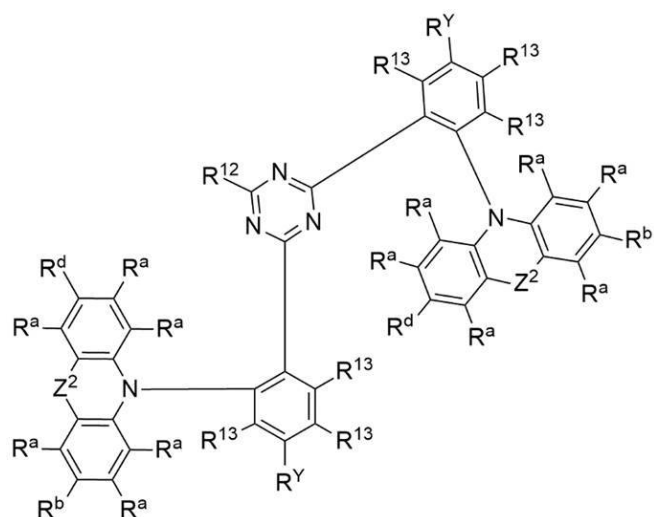
30

40

・・・化学式 E^B – V I I

50

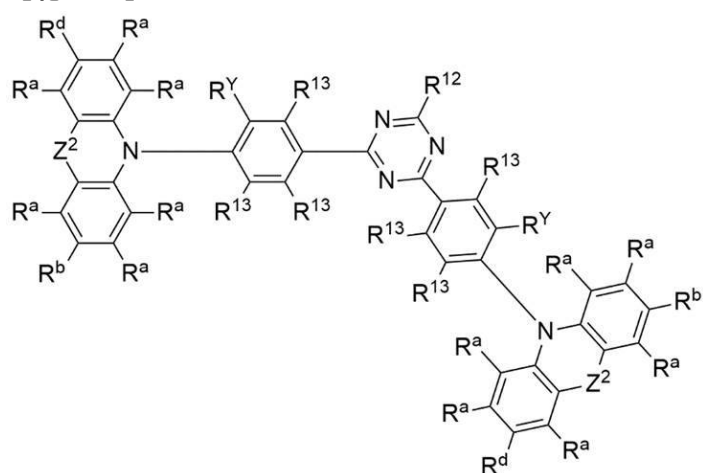
【化 9 7】



10

・・・化学式 E^B - V I I I

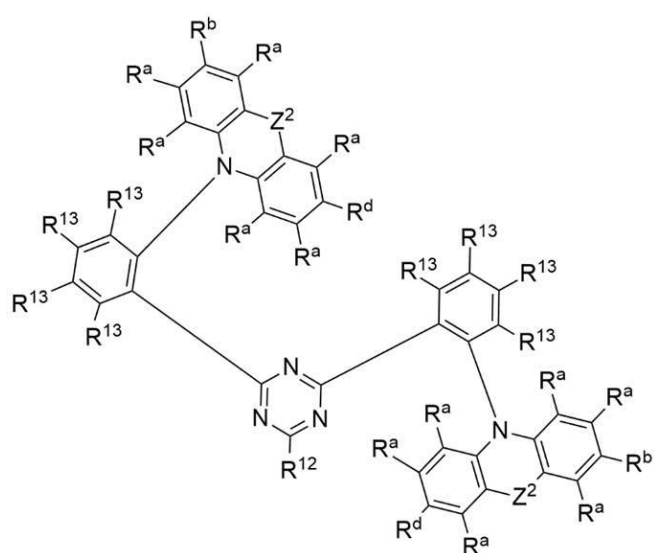
【化 9 8】



20

・・・化学式 E^B - I X

【化 9 9】

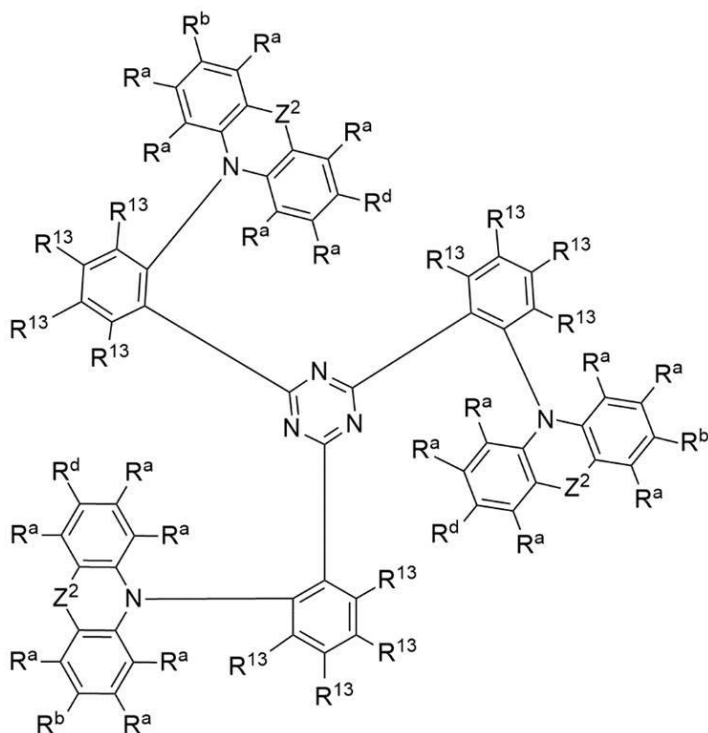


40

・・・化学式 E^B - X

50

【化 1 0 0】



10

20

・・・化学式 E^B - X I

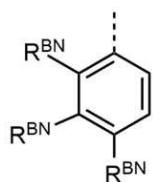
【 0 2 4 5】

ここで、

R¹³は、R¹¹のように定義され、但し、R¹³は、第1または第2化学的部分構造を第3化学的部分構造に結合する単結合の結合位置ではなく、

R^Yは、CN及びCF₃から選択されるか、またはR^Yは、下記化学式BN-Iによる構造を含むか、あるいはそれから構成される：

【化 1 0 2】



30

・・・化学式 BN - I

これは、点線で表される単結合により、化学式 E^B - I、E^B - II、E^B - III、E^B - IV、E^B - V、E^B - VI、E^B - VII、E^B - VIIIまたはE^B - IXの構造に結合され、ここで、正確に1つのR^{BN}基はCNであり、他の2つのR^{BN}基は、両方とも水素（H）であり、

40

その他には、前述の定義が適用される。

【 0 2 4 6】

本発明の好ましい実施形態において、R¹³は、それぞれの場合に水素である。

【 0 2 4 7】

本発明の一実施形態において、R^Yは、それぞれの場合にCNである。

【 0 2 4 8】

本発明の一実施形態において、R^Yは、それぞれの場合にCF₃である。

【 0 2 4 9】

本発明の一実施形態において、R^Yは、それぞれの場合に化学式BN-Iで表される構造である。

50

【0250】

本発明の好ましい実施形態において、 R^Y は、それぞれの場合に互いに独立して、 CN 及び化学式 $BN-I$ で表される構造から選択される。

【0251】

本発明の好ましい実施形態において、それぞれのTADF材料 E^B は、前述の定義が適用される化学式 E^B-I 、 E^B-II 、 E^B-III 、 E^B-IV 、 E^B-V 、 E^B-VI 、 E^B-VII 及び E^B-X のうち任意の化学式で表される構造を有する。

【0252】

本発明の好ましい実施形態において、それぞれのTADF材料 E^B は、前述の定義が適用される化学式 E^B-I 、 E^B-II 、 E^B-III 、 E^B-V 及び E^B-X のうち任意の化学式で表される構造を有する。

10

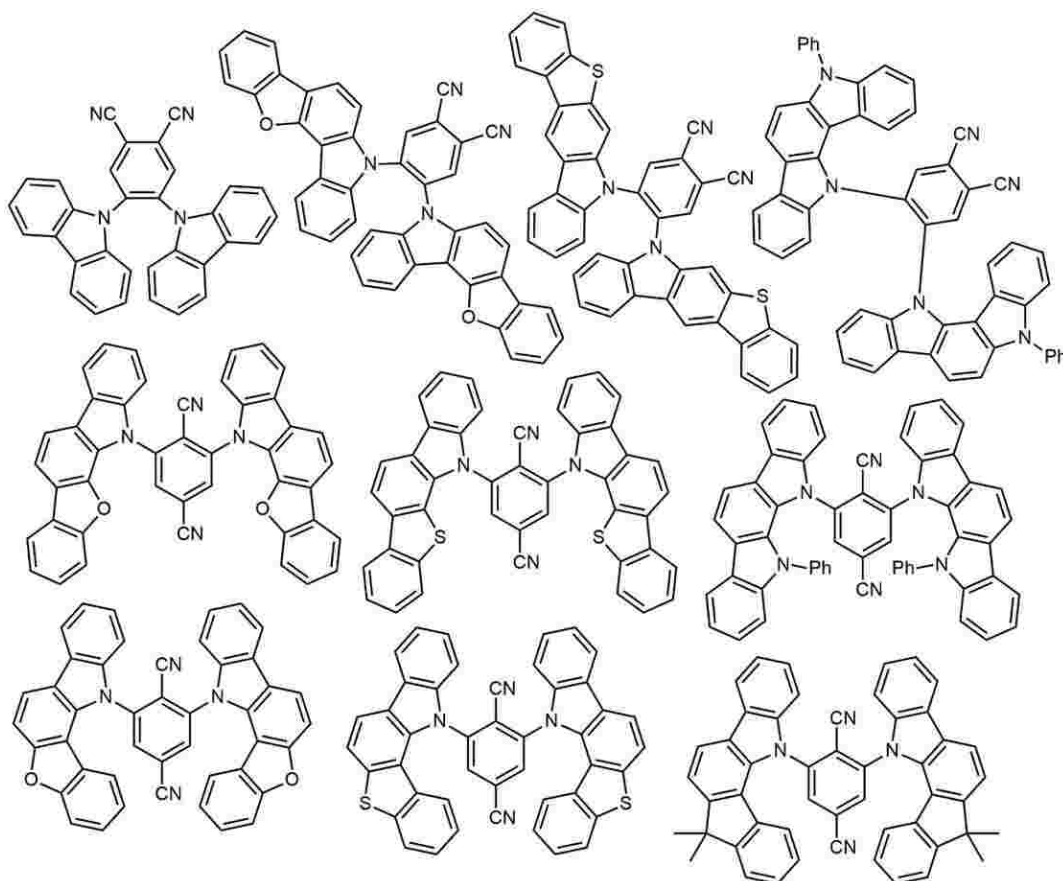
【0253】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するためのTADF材料 E^B の例が下記に示されるが、これは、単に示された例のみが本発明の文脈において好適なTADF材料 E^B ということの意味しない。

【0254】

化学式 E^B-I によるTADF材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化103】



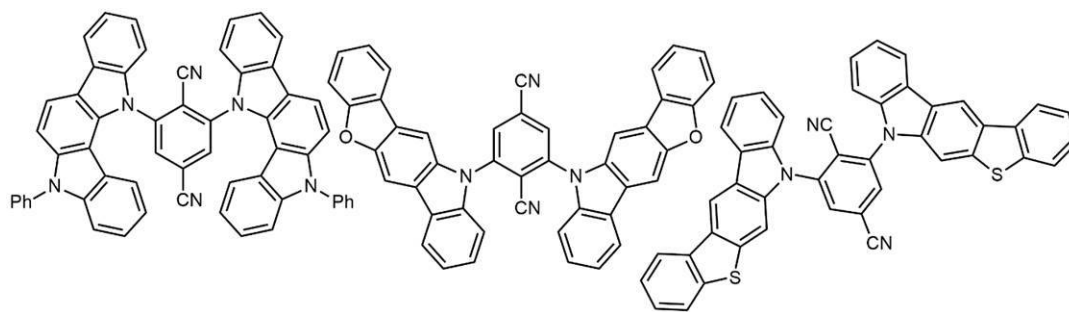
20

30

40

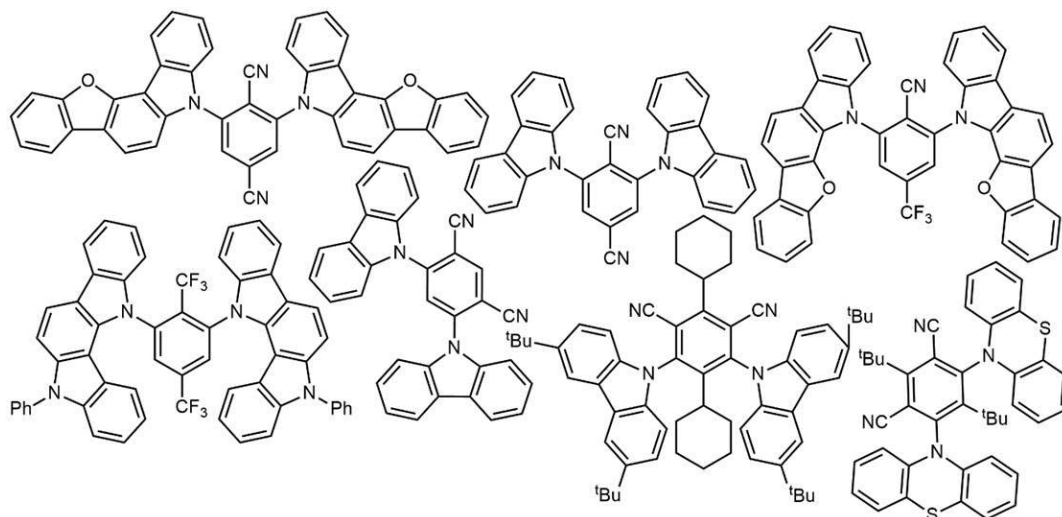
50

【化 1 0 4】



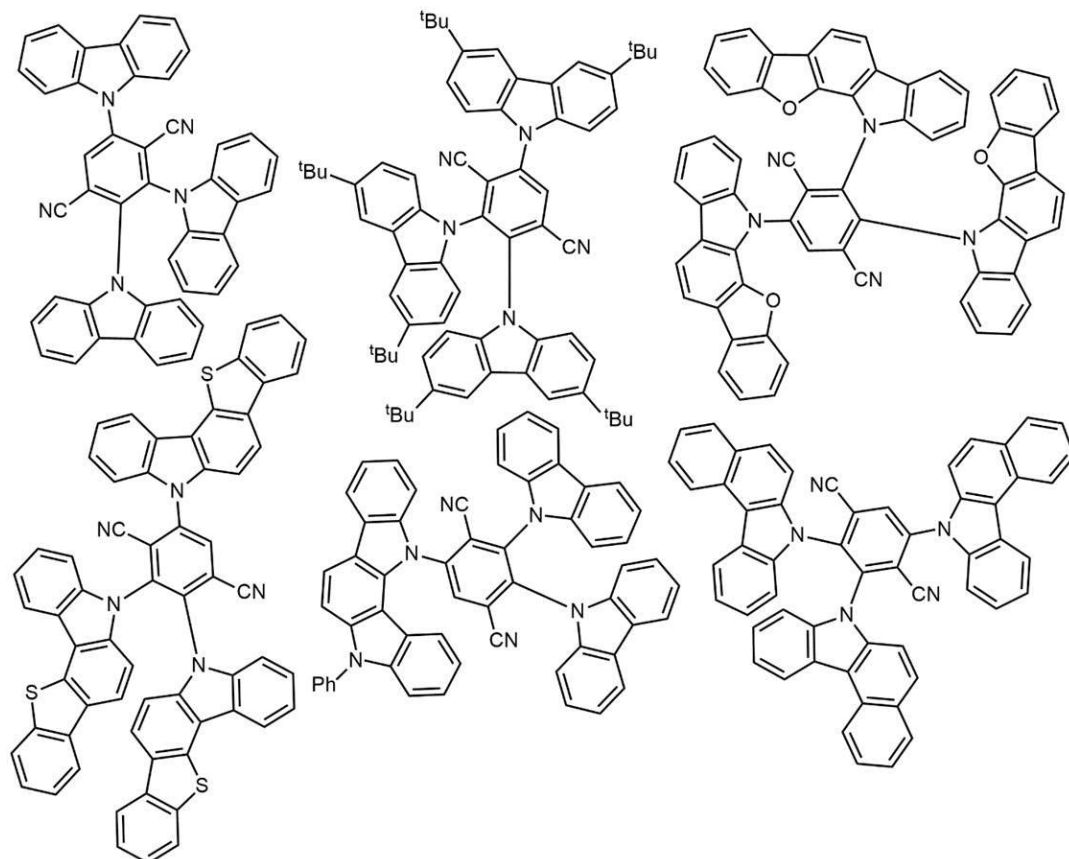
10

【化 1 0 5】



20

【化 1 0 6】

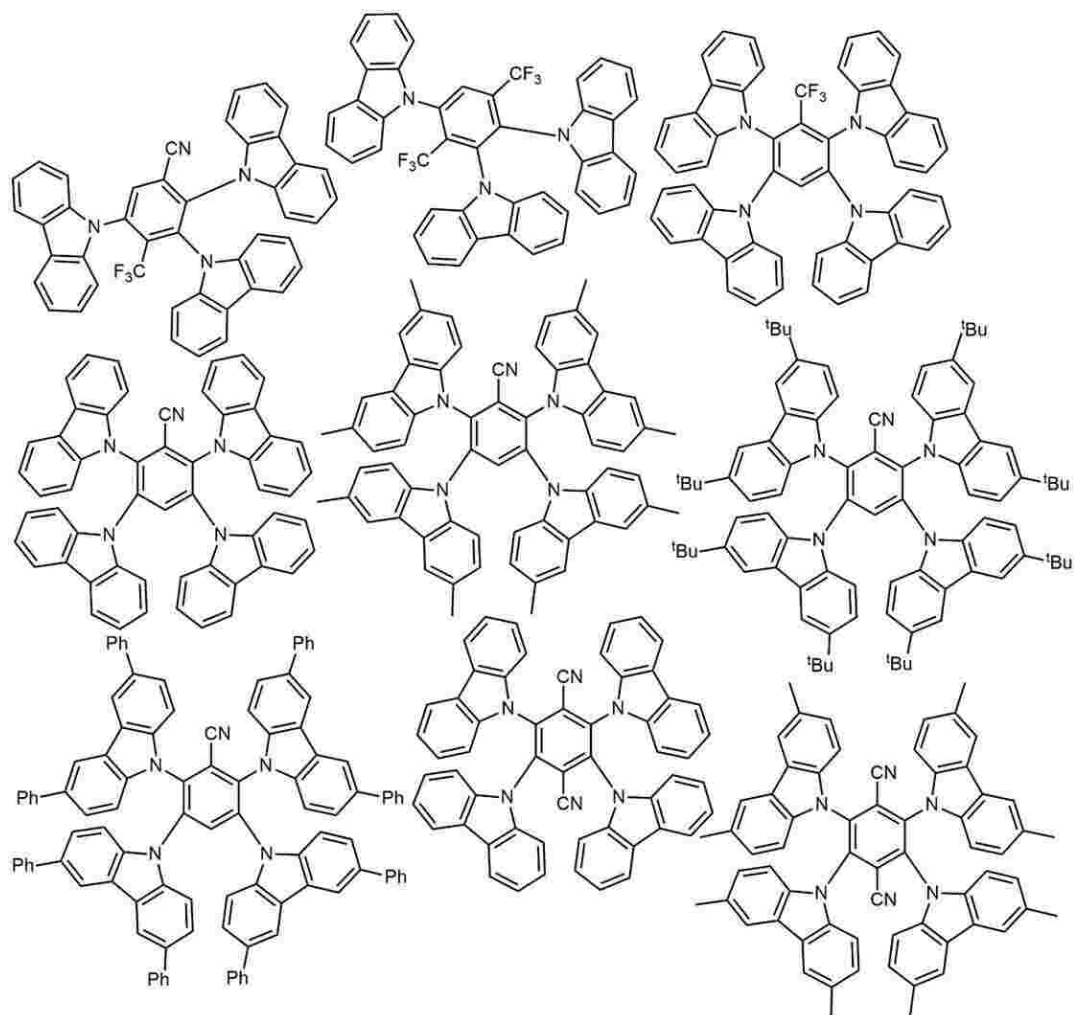


30

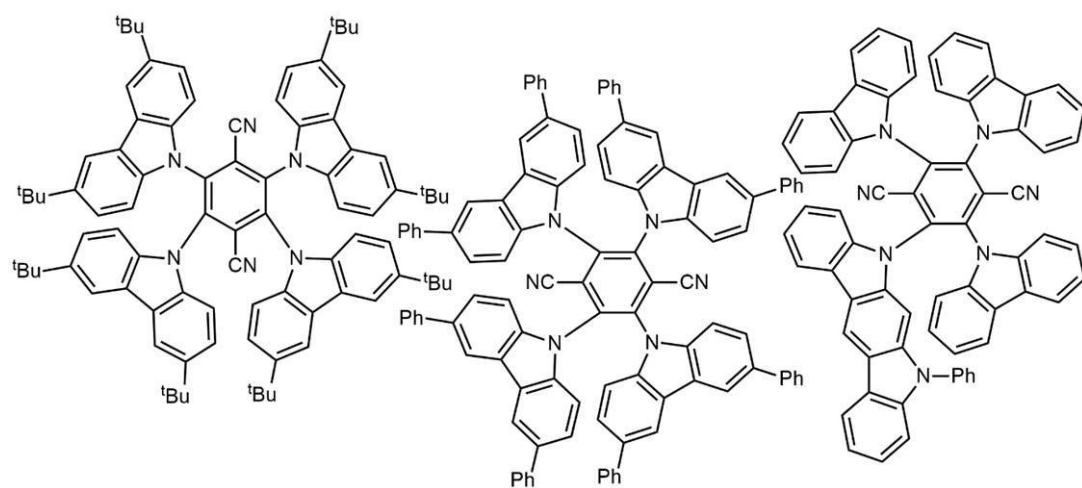
40

50

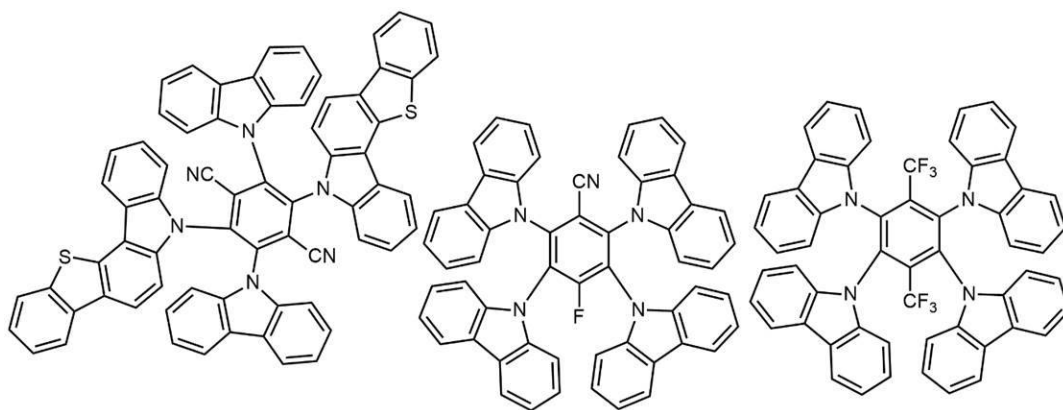
【化 1 0 7】



【化 1 0 8】

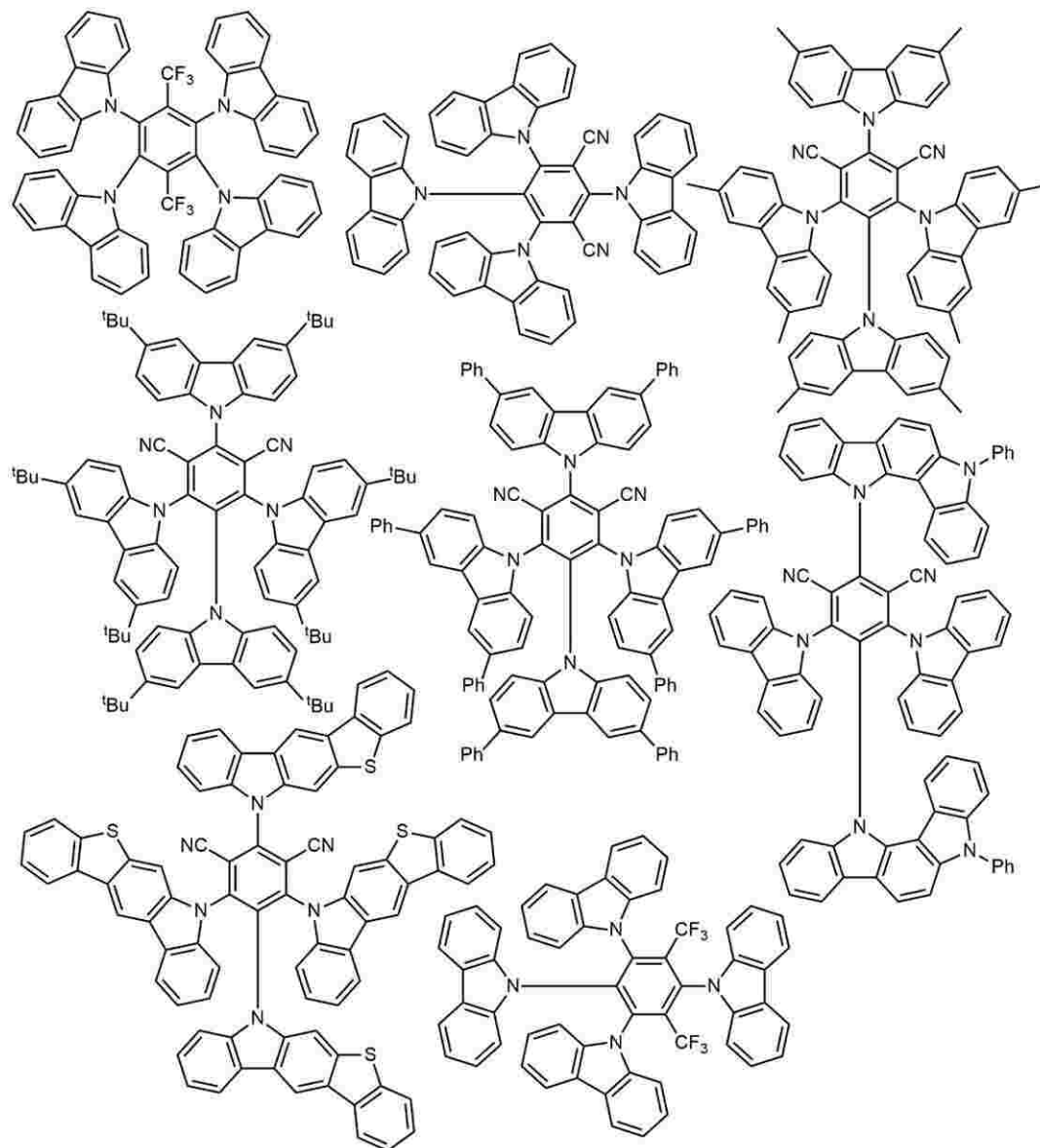


【化109】



10

【化110】



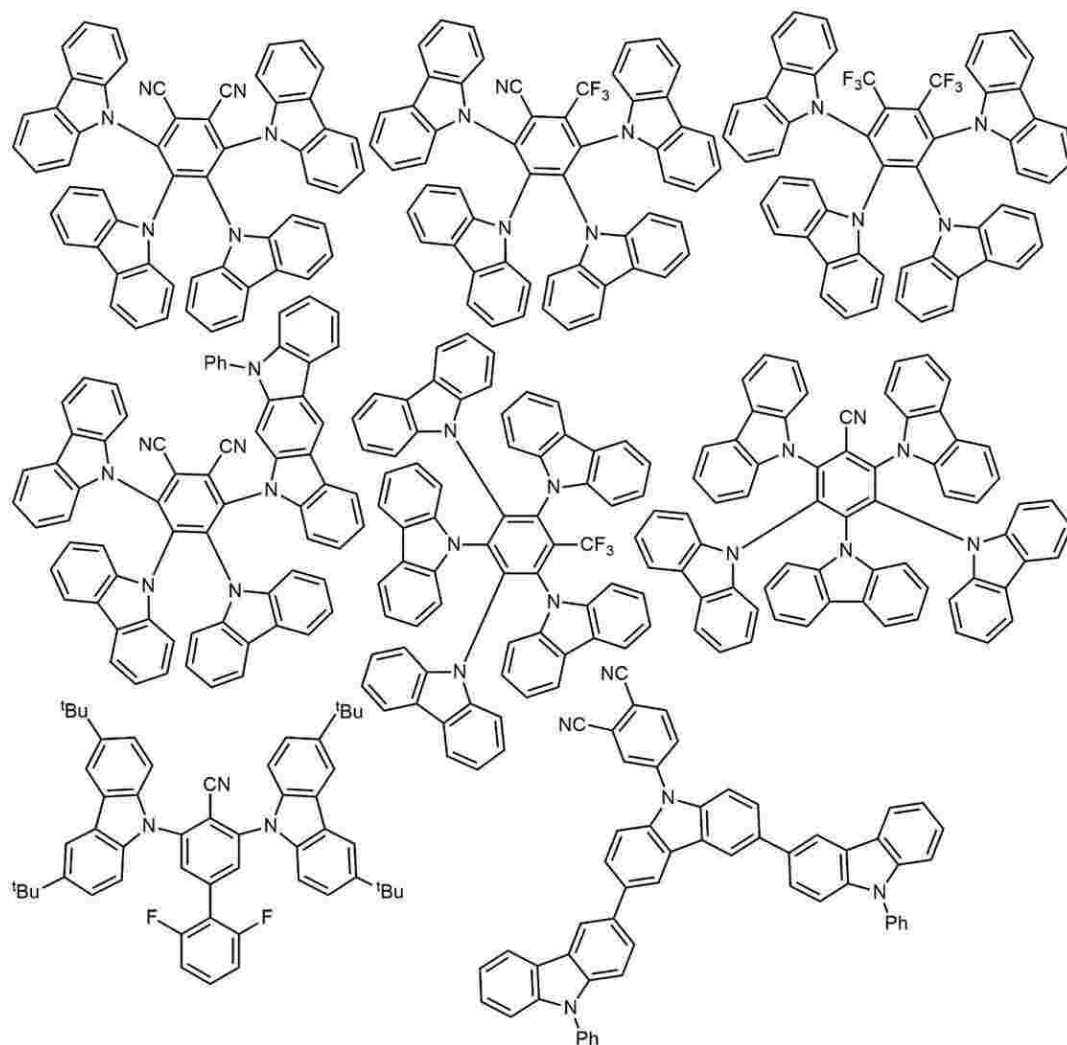
20

30

40

50

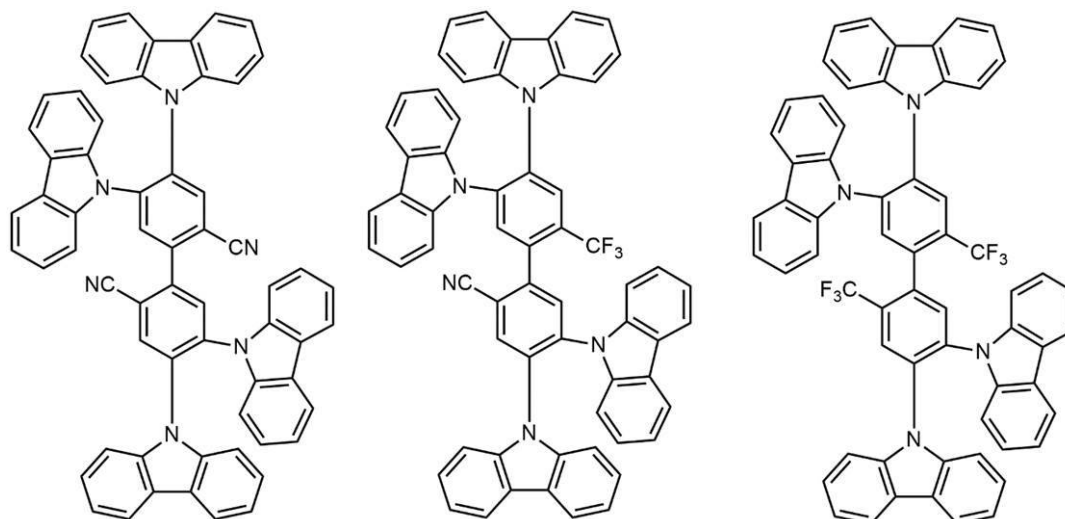
【化 1 1 1】



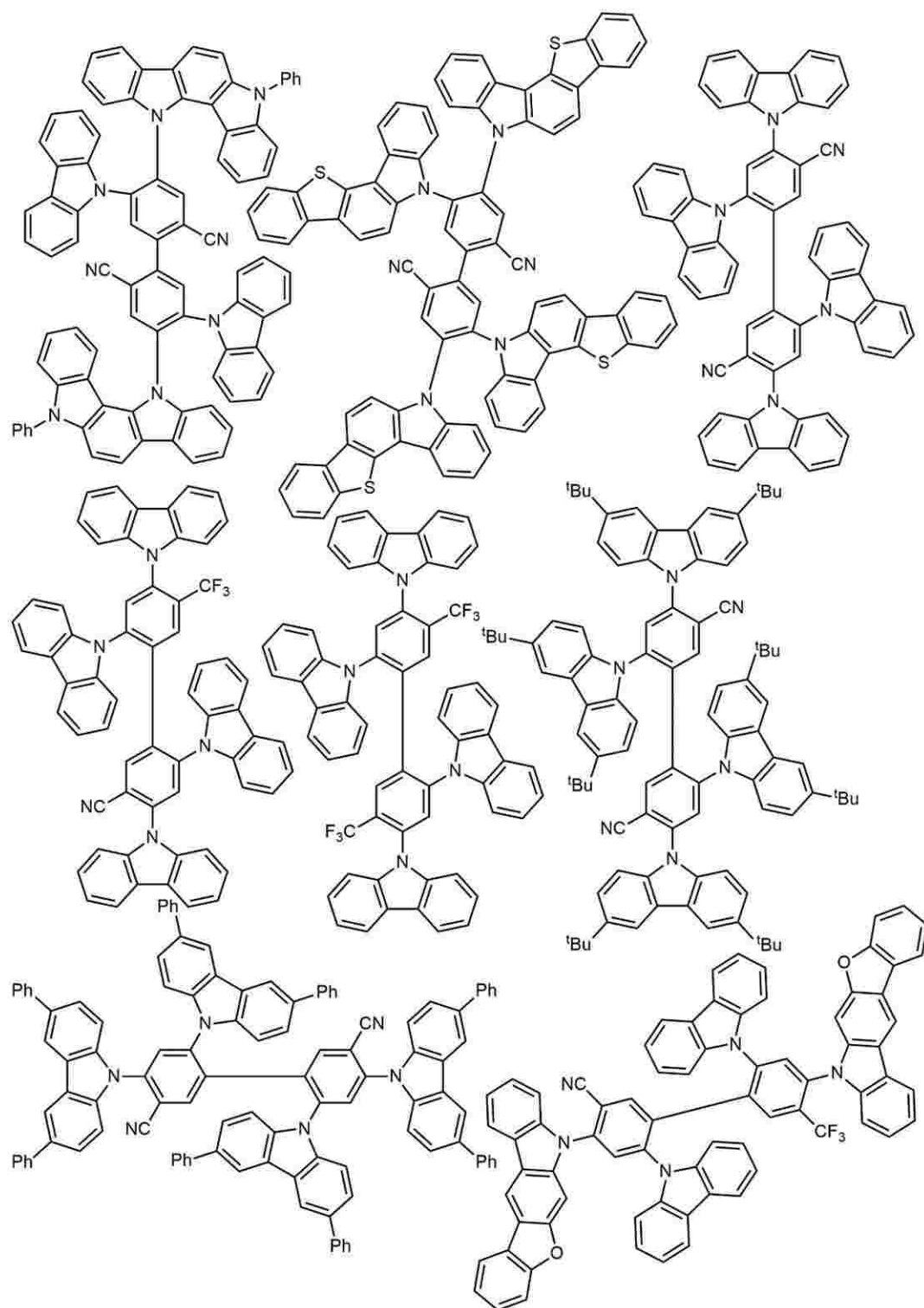
【 0 2 5 5】

化学式 E^B - I I による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化 1 1 2】



【化 1 1 3】



10

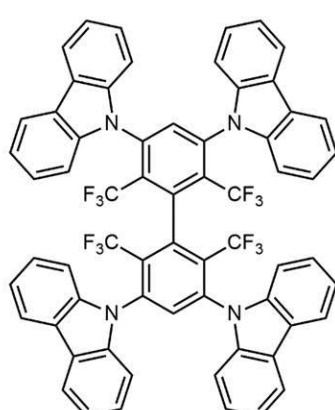
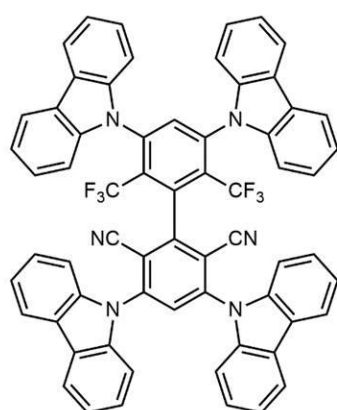
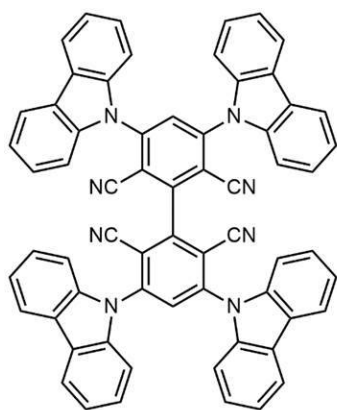
20

30

40

50

【化 1 1 4】



10

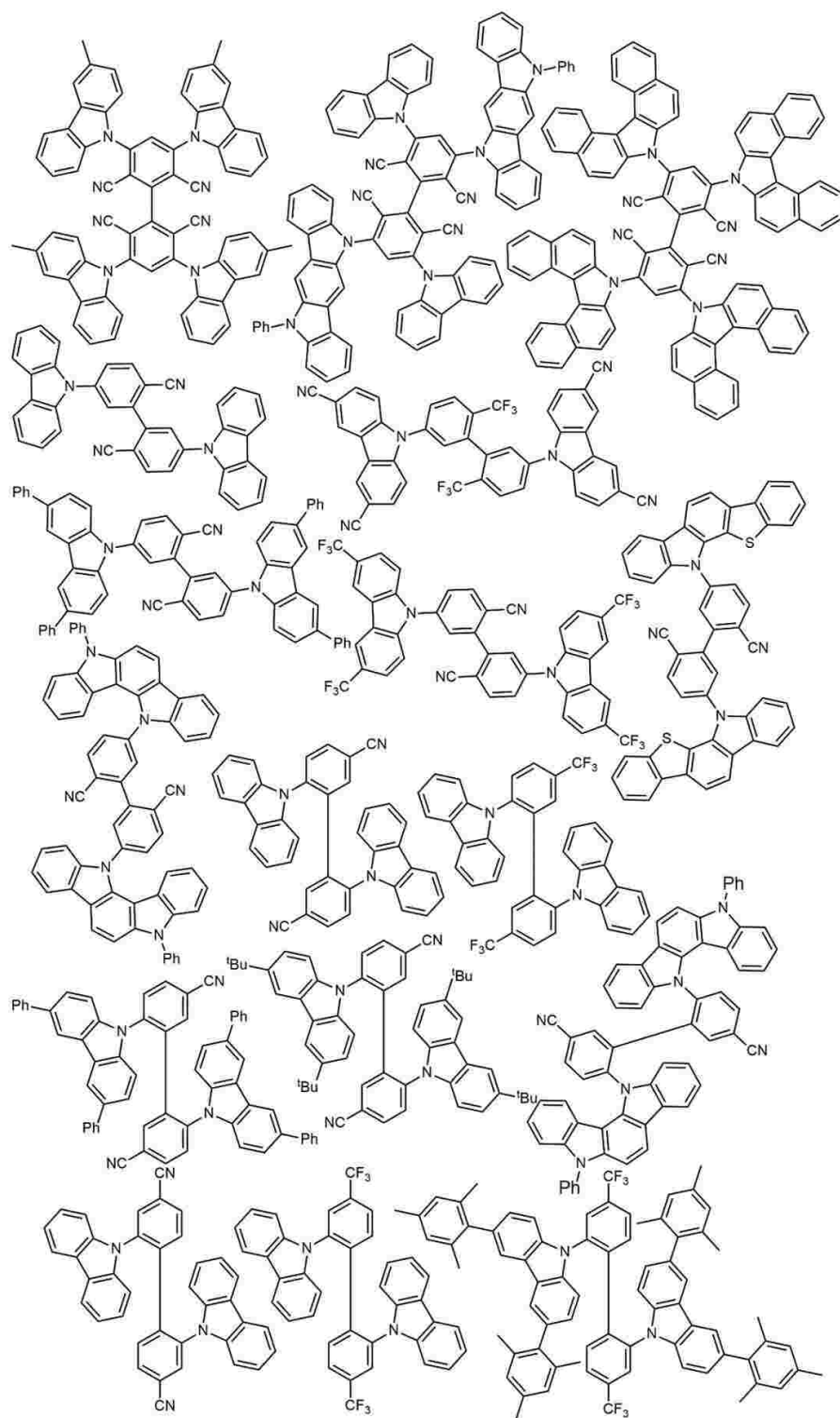
20

30

40

50

【化 1 1 5】



10

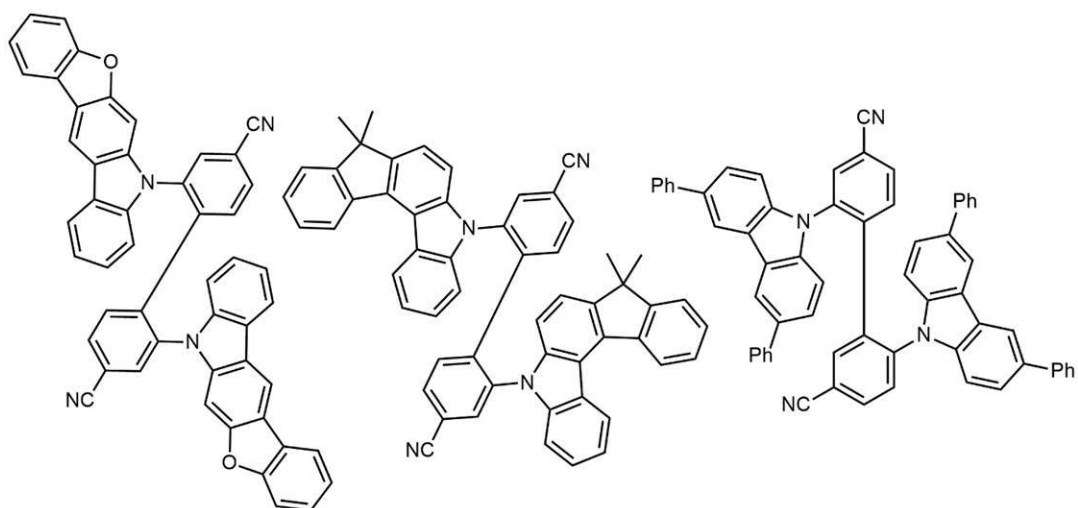
20

30

40

50

【化 1 1 6】

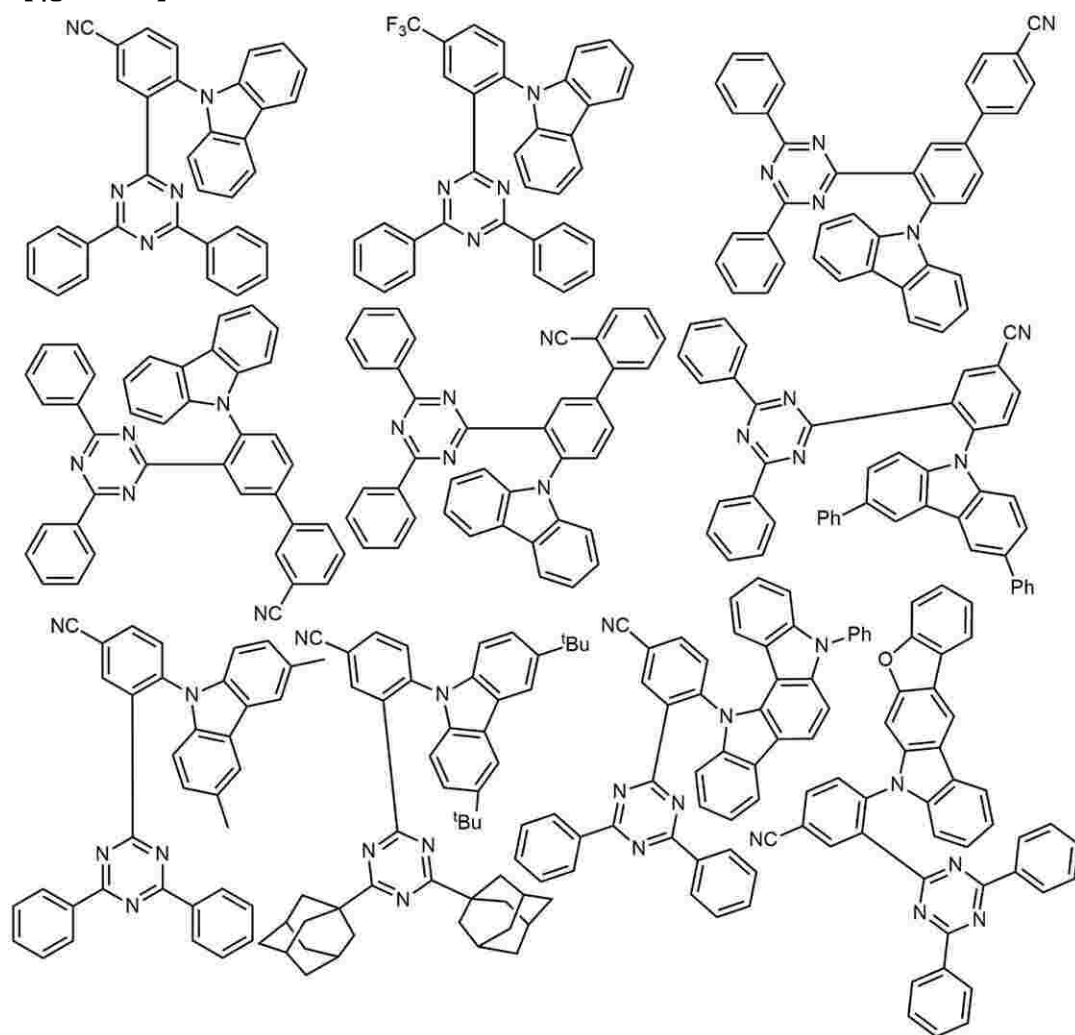


10

【 0 2 5 6】

化学式 E^B - I I I による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化 1 1 7】



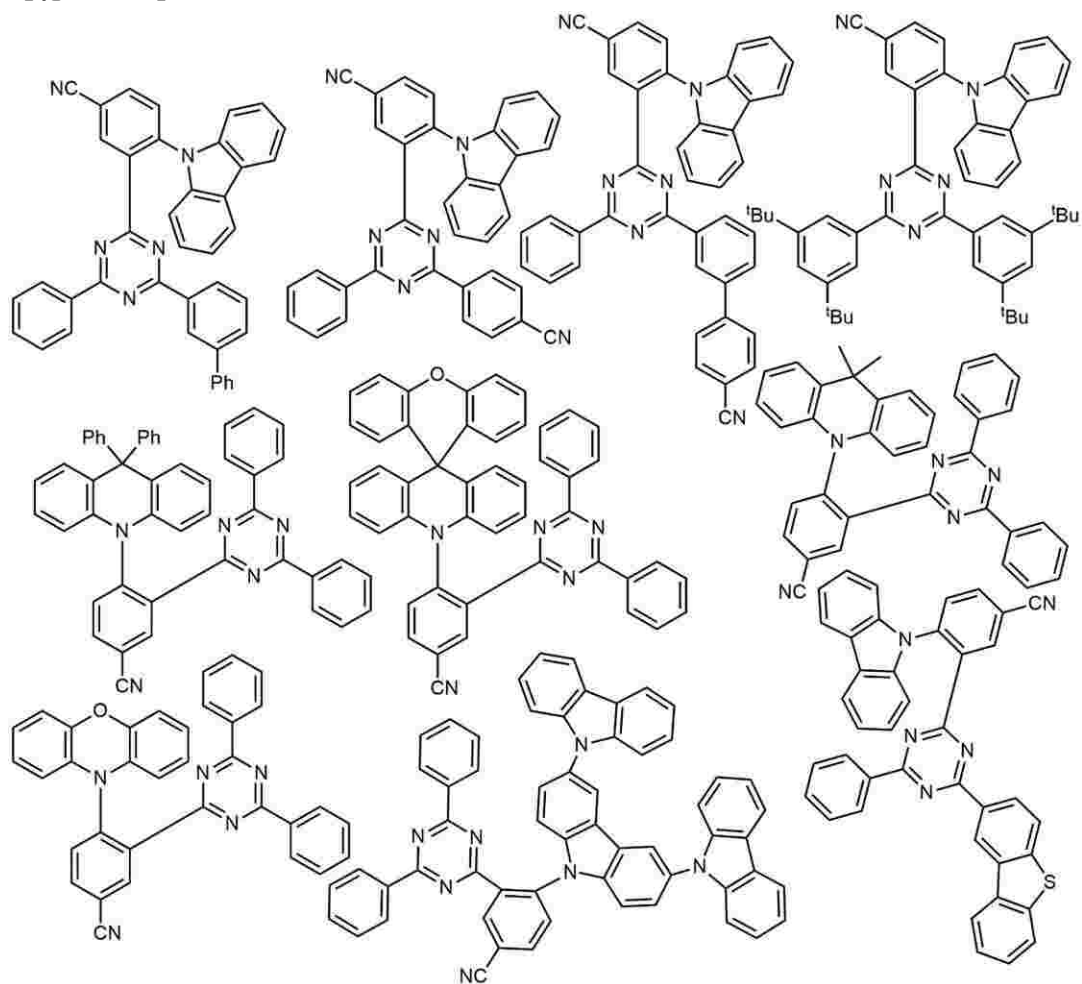
20

30

40

50

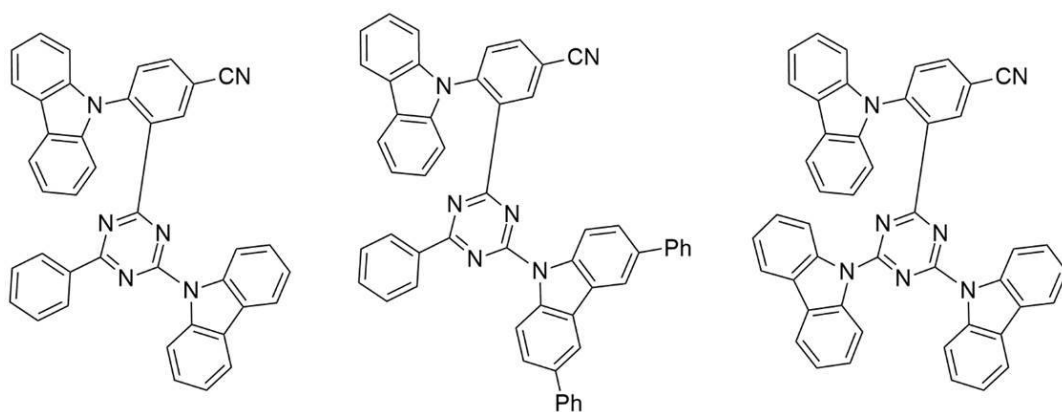
【化 1 1 8】



10

20

【化 1 1 9】

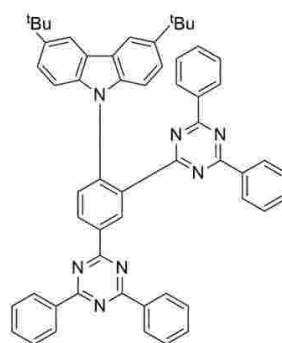
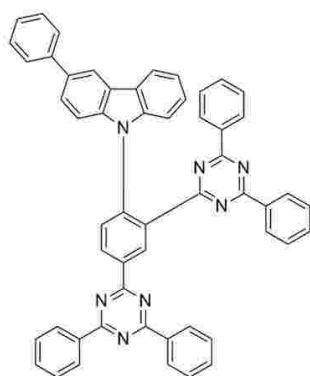
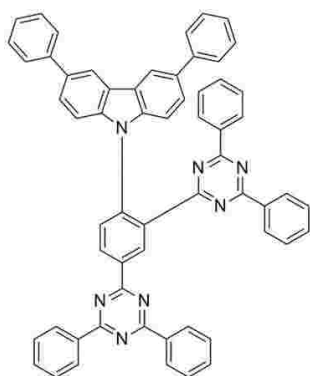


30

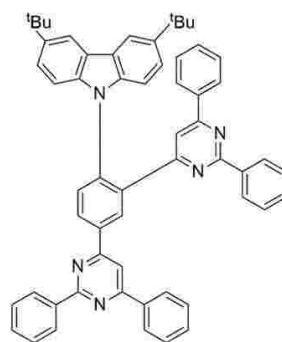
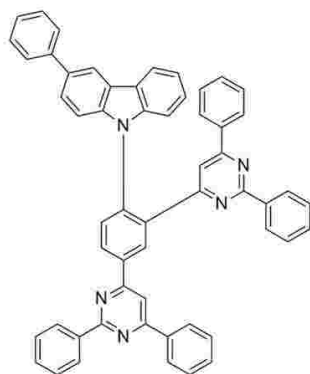
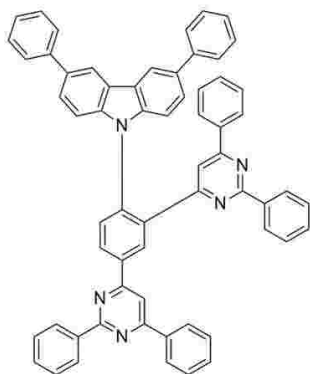
40

50

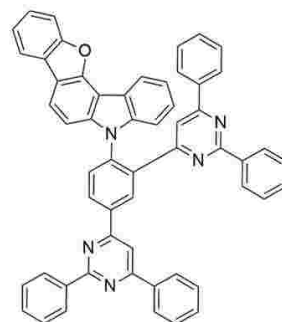
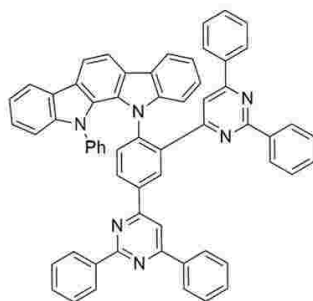
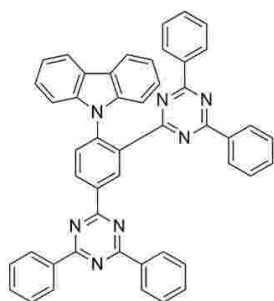
【化 1 2 0】



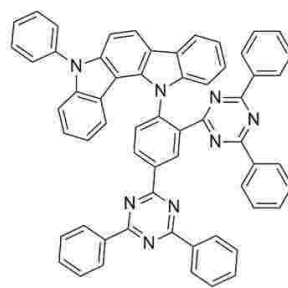
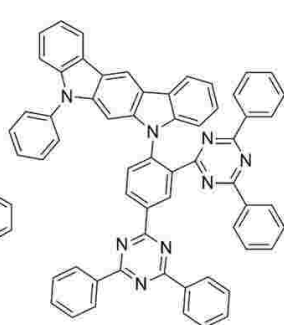
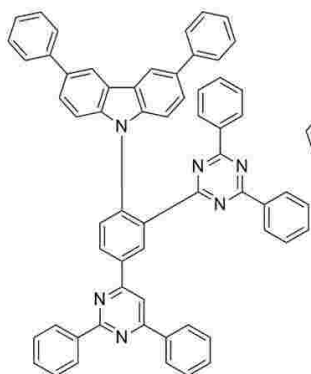
10



20



30

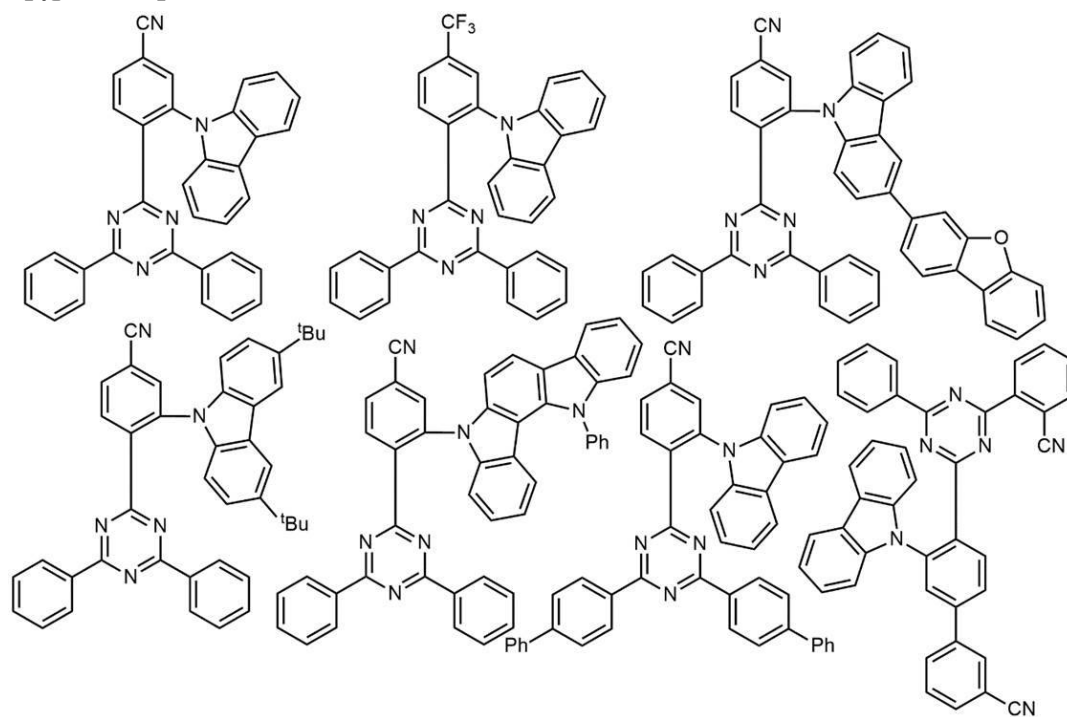


40

【 0 2 5 7】

化学式 E^B - I V による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化 1 2 1】



10

20

【 0 2 5 8】

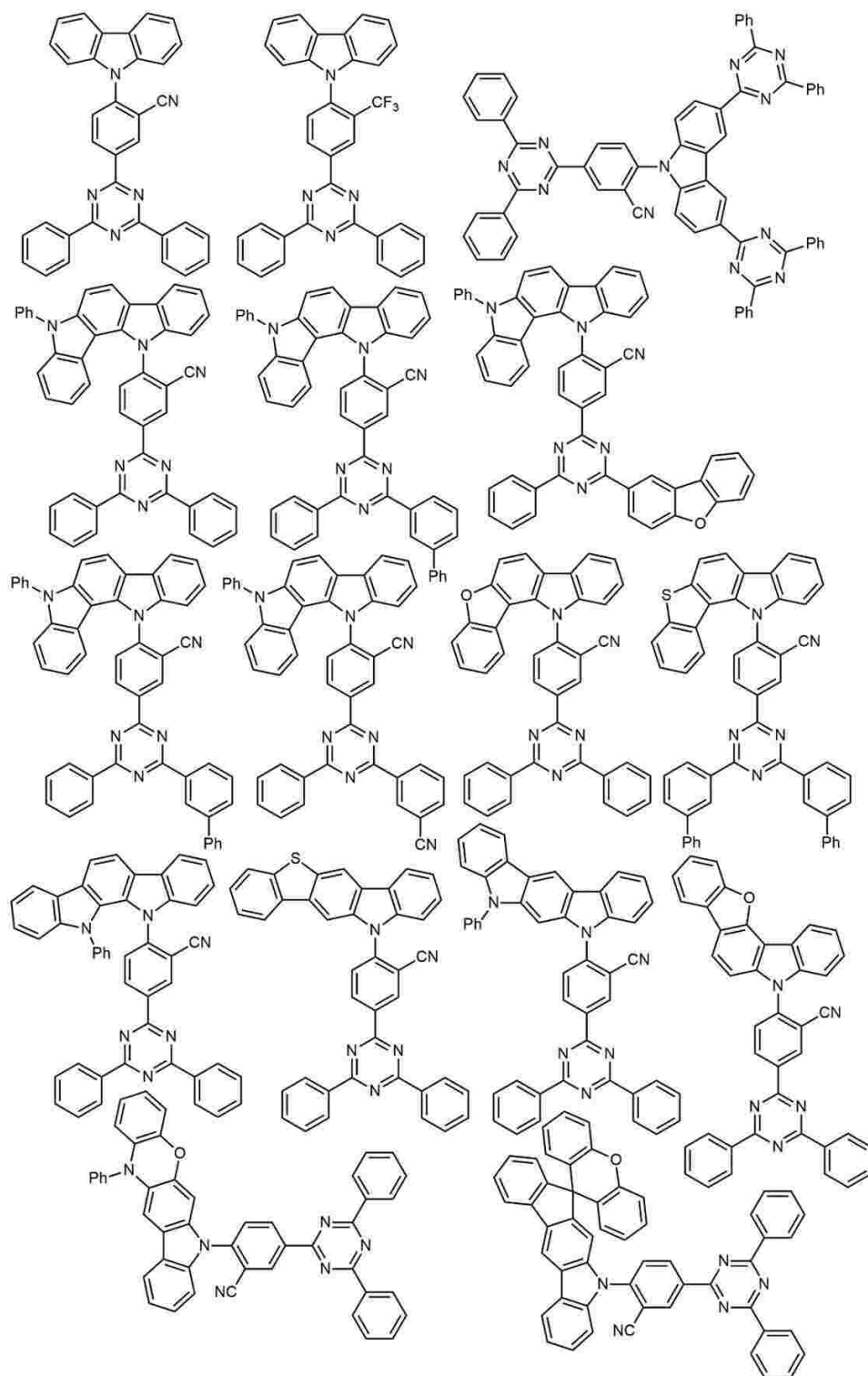
化学式 E^B - V による TADF 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

30

40

50

【化 1 2 2】



10

20

30

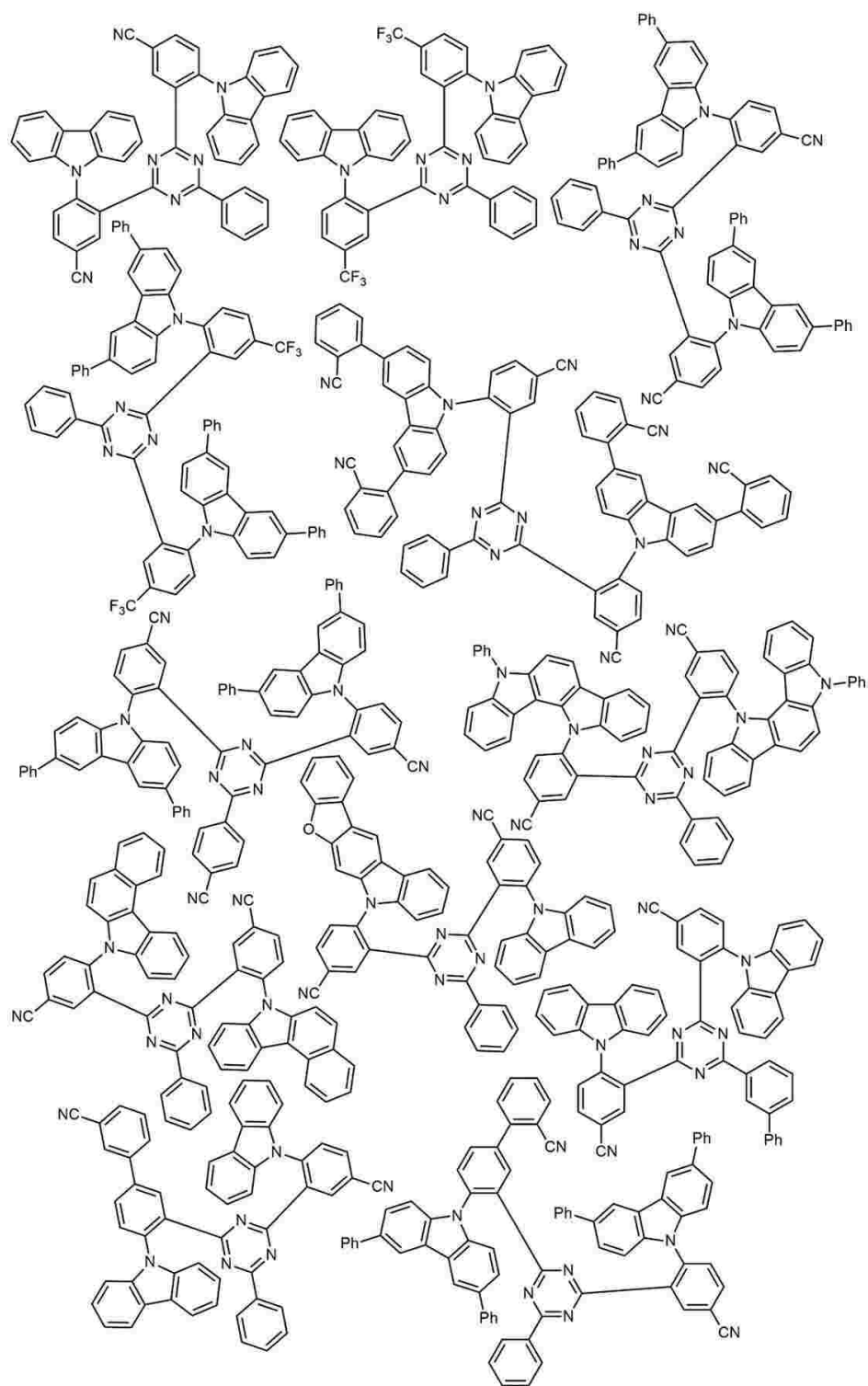
40

【 0 2 5 9】

化学式 E^B - V I による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

50

【化 1 2 3】



10

20

30

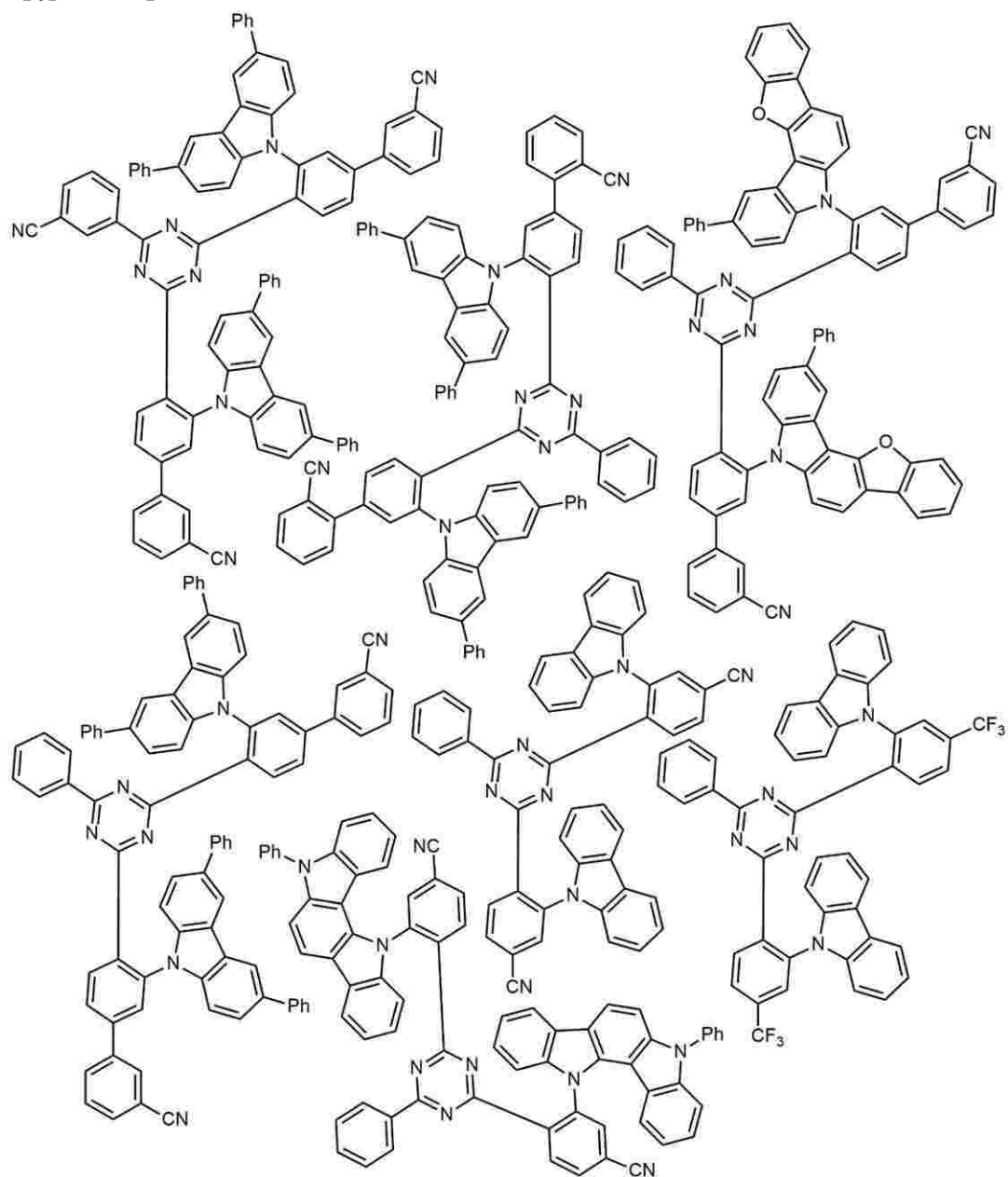
40

【 0 2 6 0】

化学式 E^B - V I I による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

50

【化 1 2 4】



【 0 2 6 1】

化学式 E^B - V I I I による T A D F 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

10

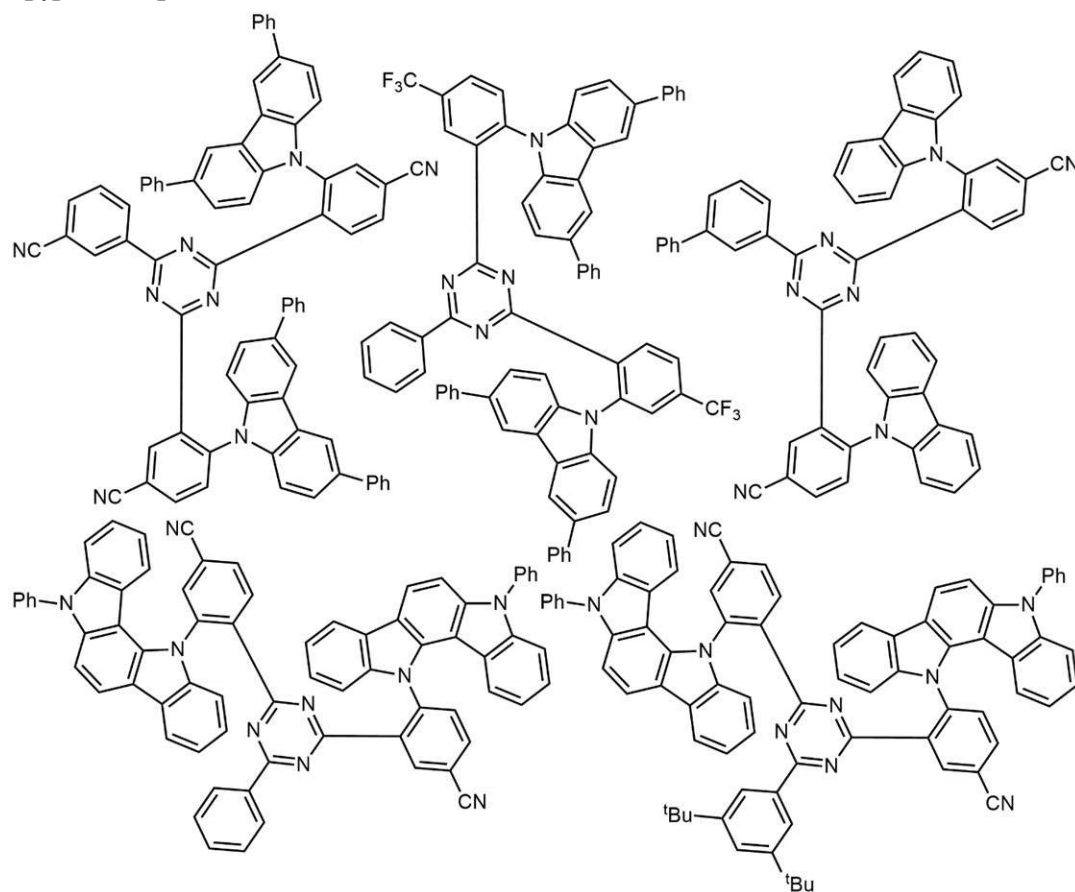
20

30

40

50

【化 1 2 5】



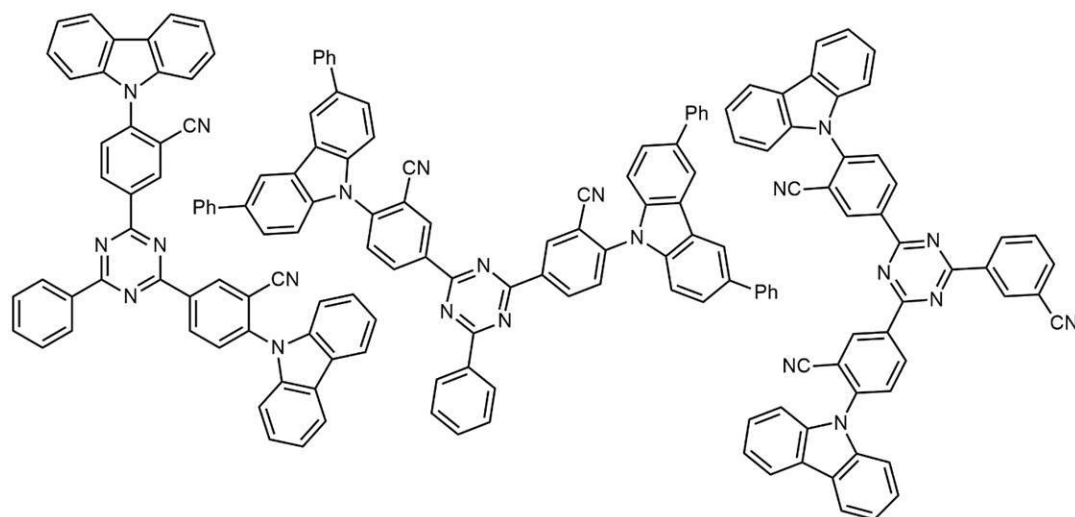
10

20

【 0 2 6 2】

化学式 E^B - I X による TADF 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化 1 2 6】

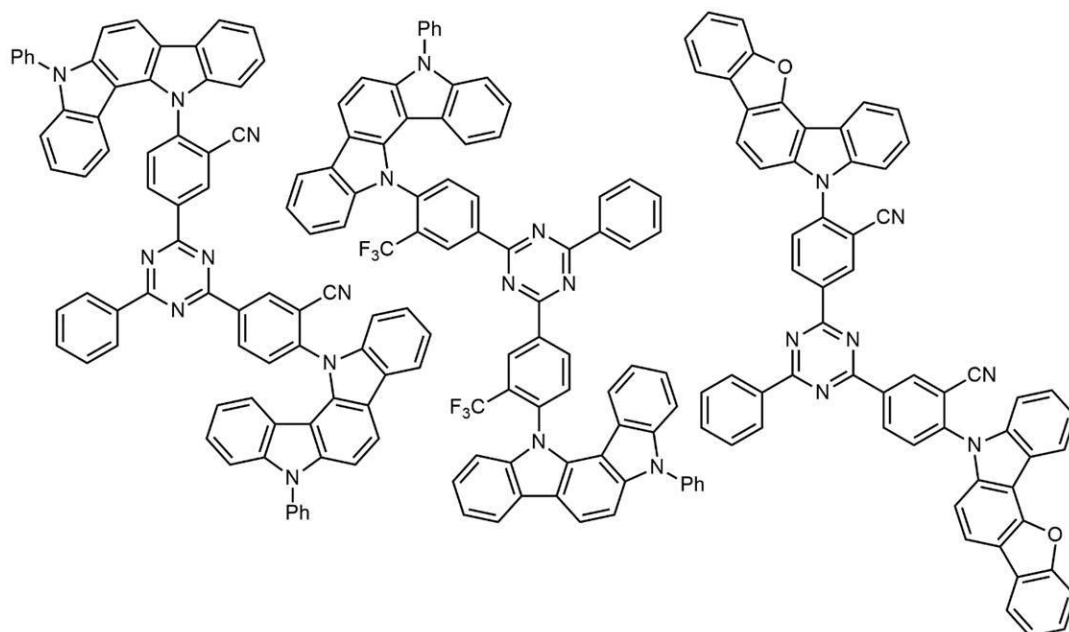


30

40

50

【化 1 2 7】



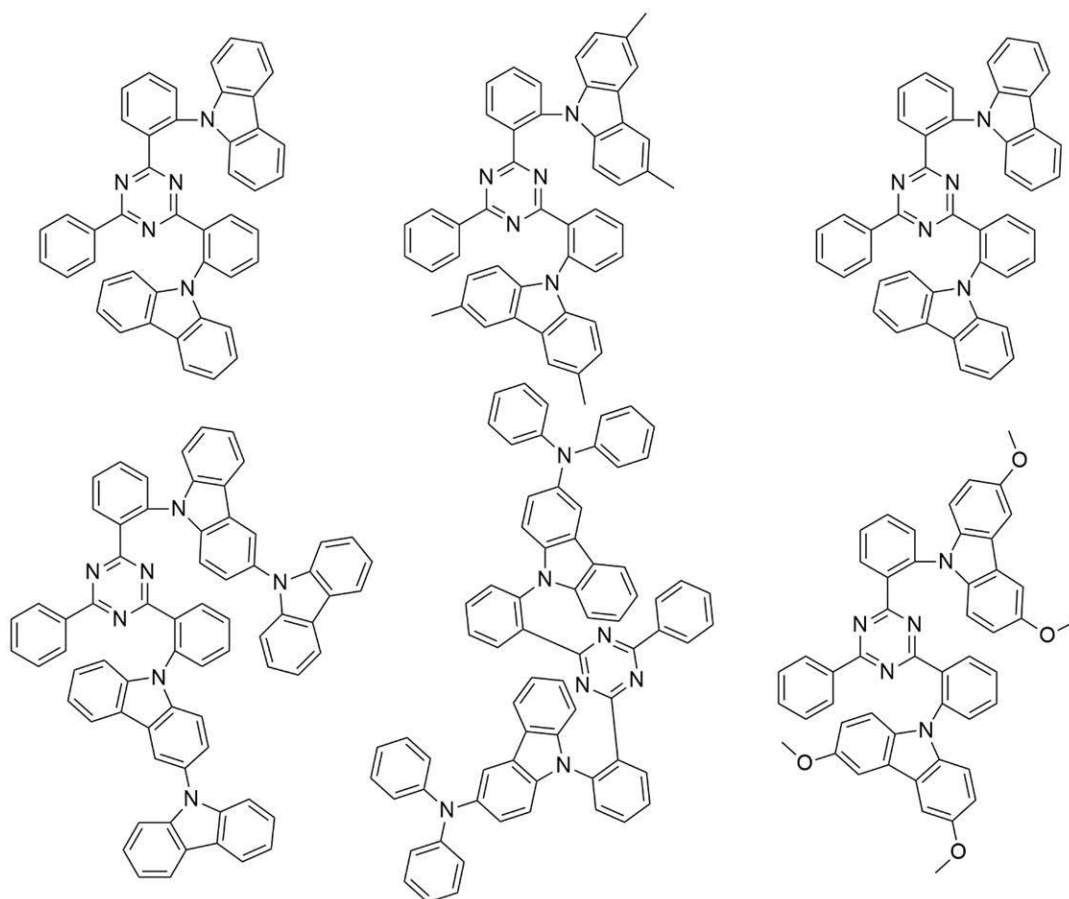
10

【 0 2 6 3】

化学式 E^B - X による TADF 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

20

【化 1 2 8】

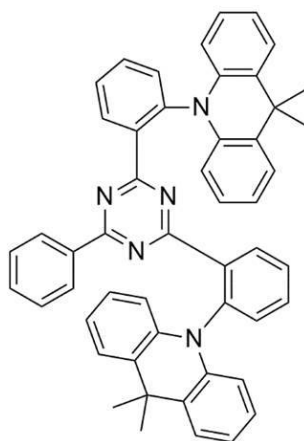
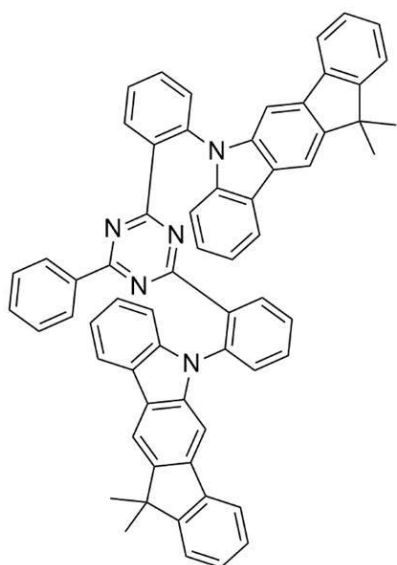


30

40

50

【化 1 2 9】

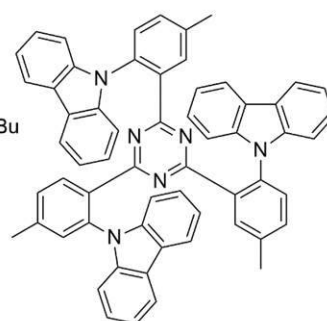
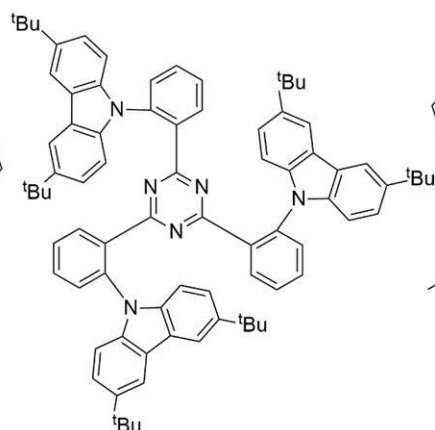
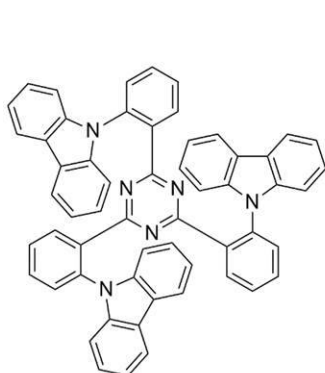


10

【 0 2 6 4】

化学式 $E^B - XI$ による TADF 材料 E^B の非限定的な例が下記に示される：

【化 1 3 0】



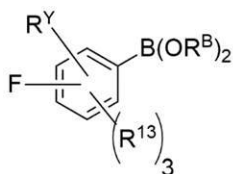
20

30

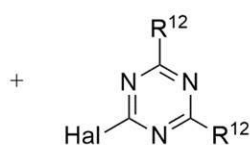
【 0 2 6 5】

TADF 材料 E^B の合成は、当業者に周知の標準反応及び反応条件を介して達成される。一般的に、第 1 ステップにおいて、カップリング反応、好ましくは、パラジウム触媒化されたカップリング反応が行われ、これを化学式 $E^B - III$ 、 $E^B - IV$ 及び $E^B - V$ のうちいずれか 1 つによる TADF 材料 E^B の合成に対して下記に例示的に示した：

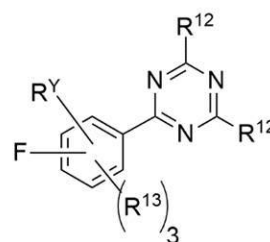
【化 1 3 1】



E1



E2



E3

40

【 0 2 6 6】

E 1 は、任意のボロン酸 ($R^B = H$) または対応するボロン酸エステル ($R^B =$ アルキルまたはアリール) であり、特に、2 つの R^B は環を形成し、例えば、ボロン酸ピナコー

50

【化 1 3 2】



20

30

40

50

ボロン酸エステルまたはカルバゾール-3-イル-ボロン酸のような相応するカルバゾリルボロン酸またはエステルを、例えば、(ピナコラート)ジボロン(CAS No. 73183-34-3)との反応を介して生成することができる。次いで、対応するハロゲン化反応物、例えば、 R^a-Hal 、好ましくは、 R^a-Cl 及び R^a-Br とのカップリング反応を介して、ボロン酸エステル基またはボロン酸基の代わりに、1以上の置換基 R^a 、 R^b または R^d が導入されてもよい。

【0271】

代案としては、置換基 R^a [$R^a-B(OH)_2$]、 R^b [$R^b-B(OH)_2$]または R^d [$R^d-B(OH)_2$]のボロン酸または対応するボロン酸エステルとの反応を介して、 $D-H$ を介して導入された1以上のハロゲン置換基の位置に1以上の置換基 R^a 、 R^b または R^d が導入されてもよい。

10

【0272】

また、TADF材料 E^B を類似して得ることができる。また、TADF材料 E^B を当該目的に適している任意の代替的な合成経路によって得ることができる。

【0273】

代替的な合成経路は、窒素ヘテロ環を、銅またはパラジウム触媒化されたカップリングを介して、アリールハライドまたはアリール擬ハライド、好ましくは、臭化アリール、ヨウ化アリール、アリールトリフラートまたはアリールトシレートに導入することを含んでもよい。

【0274】

燐光材料 P^B

20

本発明の文脈において燐光材料 P^B は、三重項(すなわち、励起三重項状態、一般的に、最低励起三重項状態 T_1)から発光を得るために、金属原子によって惹起される分子内スピン軌道相互作用(重原子効果)を利用する。すなわち、燐光材料 P^B は、室温(すなわち、(約)20℃)で燐光を発光することができ、これは、一般的にポリ(メチルメタクリレート)(PMMA)内の10重量%の P^B のスピンコーティング膜から測定される。

【0275】

定義によって燐光を発光することができるが、励起エネルギー移動成分 $EET-2$ として、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子に選択的に含まれる燐光材料 P^B は、好ましくは、主にエミッタ材料ではない「エネルギーポンプ」として機能する。すなわち、発光層 B に含まれた燐光材料 P^B は、主に励起エネルギーを1以上の小FWHMエミッタ S^B に伝達し、次いで、それらは主エミッタ材料の役割を行う。発光層 B における燐光材料 P^B の主な機能は、発光ではないことが好ましい。しかし、ある程度発光することができる。

30

【0276】

一般的に、最新技術において有機エレクトロルミネッセンス素子に使用される全ての燐光錯体が本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子にも使用可能であることが理解される。

【0277】

有機エレクトロルミネッセンス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の、本発明によれば、好ましくは、Ir、Pt及びPdの、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、有機エレクトロルミネッセンス素子においていかなる材料が燐光材料として適しているか、及びそれらを合成する方法が分かっている。また、当業者は、有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するための燐光錯体の設計原理に慣れ、構造的変化を介して錯体の発光を調整する方法が分かっている。

40

【0278】

以下の例示を参照する：C.-L. Ho, H. Li, W.-Y. Wong, Journal of Organometallic Chemistry 2014, 751, 261, DOI: 10.1016/j.jorganchem.2013.09

50

. 035; T. Fleetham, G. Li, J. Li, Advanced Science Previously Presented 2017, 29, 1601861, DOI: 10.1002/adma.201601861; A. R. B. M. Yusoff, A. J. Huckaba, M. K. Nazeeruddin, Topics in Current Chemistry (Z) 2017, 375:39, 1, DOI: 10.1007/s41061-017-0126-7; T. -Y. Li, J. Wuc, Z. -G. Wua, Y. -X. Zheng, J. -L. Zuo, Y. Pan, Coordination Chemistry Reviews 2018, 374, 55, DOI: 10.1016/j.ccr.2018.06.014.

【0279】

例えば、US2020274081 (A1)、US20010019782 (A1)、US20020034656 (A1)、US20030138657 (A1)、US2005123791 (A1)、US20060065890 (A1)、US20060134462 (A1)、US20070034863 (A1)、US20070111026 (A1)、US2007034863 (A1)、US2007138437 (A1)、US20080020237 (A1)、US20080297033 (A1)、US2008210930 (A1)、US20090115322 (A1)、US2009104472 (A1)、US20100244004 (A1)、US2010105902 (A1)、US20110057559 (A1)、US2011215710 (A1)、US2012292601 (A1)、US2013165653 (A1)、US20140246656 (A1)、US20030068526 (A1)、US20050123788 (A1)、US2005260449 (A1)、US20060127696 (A1)、US20060202194 (A1)、US20070087321 (A1)、US20070190359 (A1)、US2007104979 (A1)、US2007224450 (A1)、US20080233410 (A1)、US200805851 (A1)、US20090039776 (A1)、US20090179555 (A1)、US20100090591 (A1)、US20100295032 (A1)、US20030072964 (A1)、US20050244673 (A1)、US20060008670 (A1)、US20060134459 (A1)、US20060251923 (A1)、US20070103060 (A1)、US20070231600 (A1)、US2007104980 (A1)、US2007278936 (A1)、US20080261076 (A1)、US2008161567 (A1)、US20090108737 (A1)、US2009085476 (A1)、US20100148663 (A1)、US2010102716 (A1)、US2010270916 (A1)、US20110204333 (A1)、US2011285275 (A1)、US2013033172 (A1)、US2013334521 (A1)、US2014103305 (A1)、US2003068536 (A1)、US2003085646 (A1)、US2006228581 (A1)、US2006197077 (A1)、US2011114922 (A1)、US2011114922 (A1)、US2003054198 (A1) 及び EP2730583 (A1) は、本発明の文脈において燐光材料 P^B に使用可能な燐光材料を開示する。これは、本発明が命名された参照文献のうち1つに述べられた燐光材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子に制限されるということを意味しないものと理解される。

【0280】

US2020274081 (A1) に示されたように、本発明のもののような有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するための燐光錯体の例は、下記に示した錯体を含む。再び、本発明がそれら実施例に限定されないということが理解される。

10

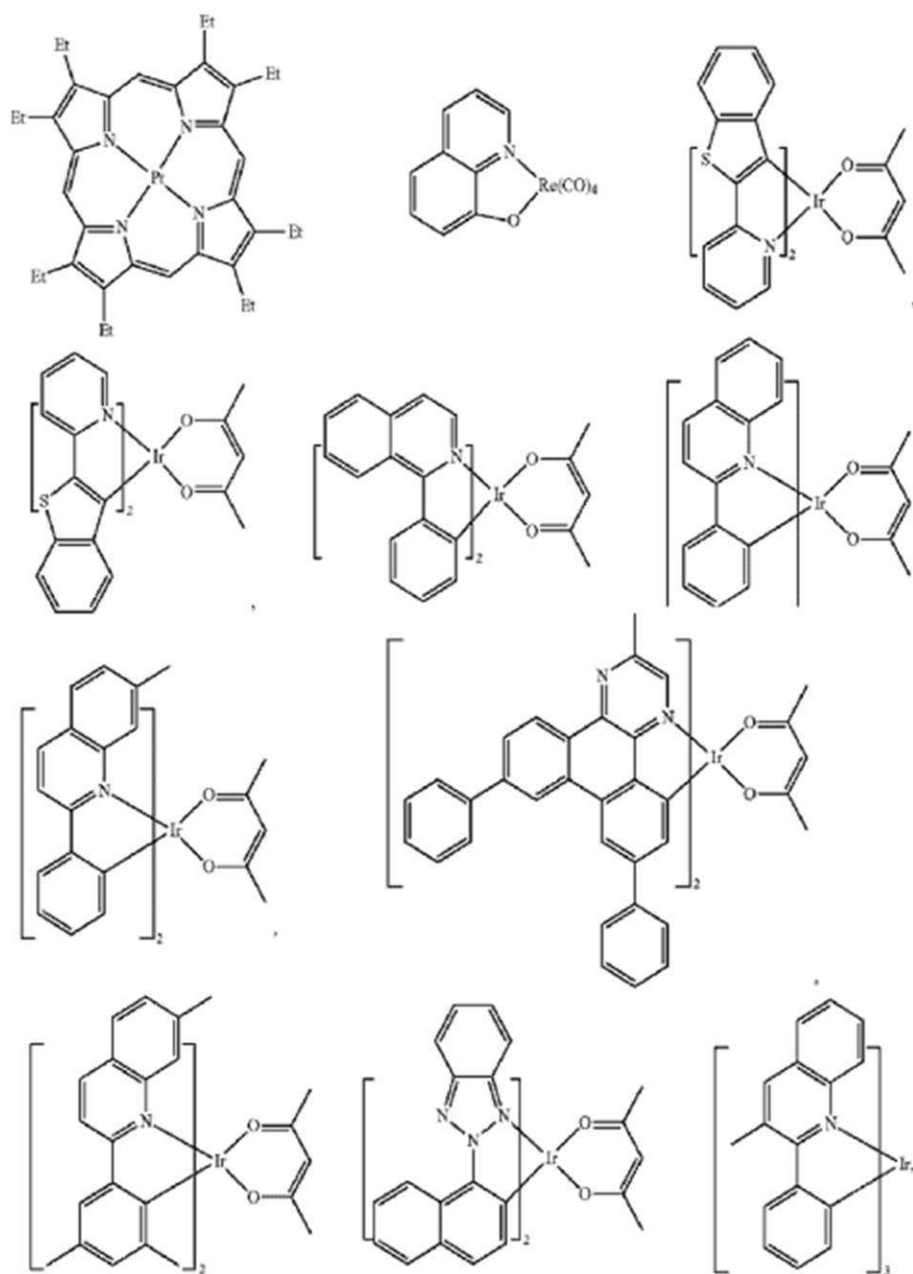
20

30

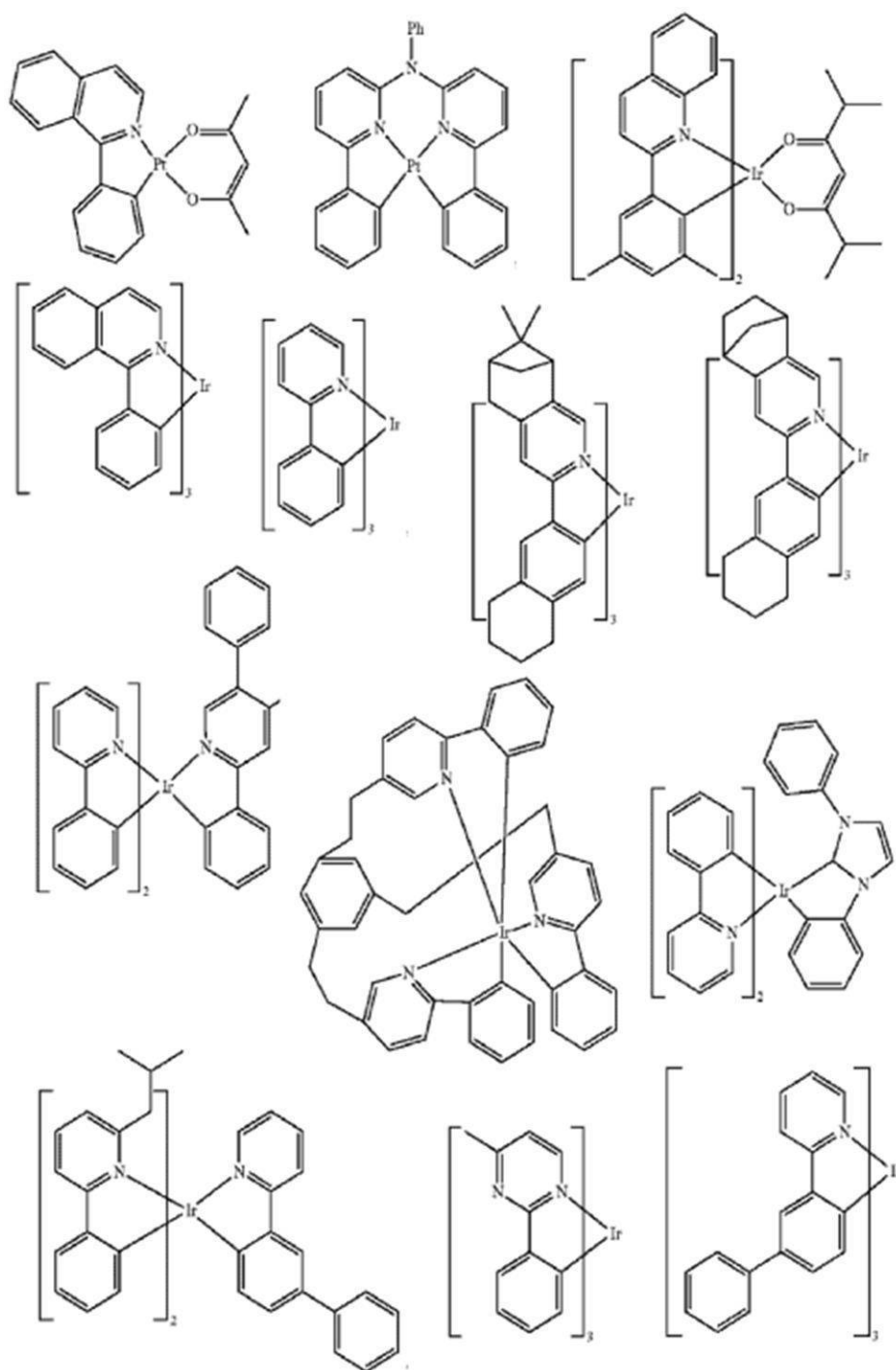
40

50

【化 1 3 4】



【化 1 3 5】



10

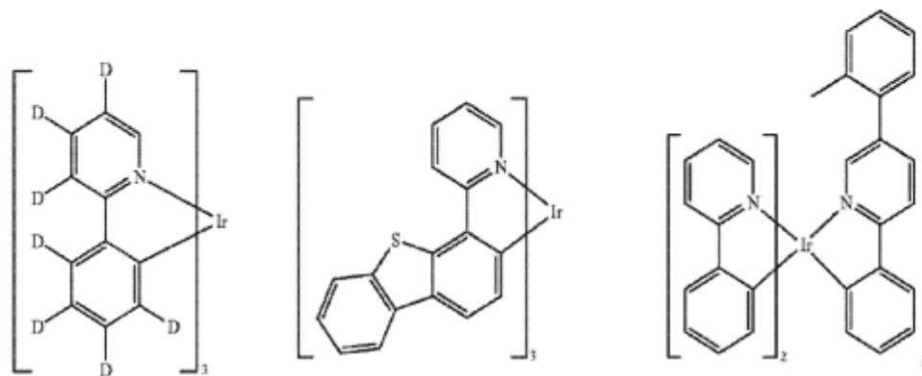
20

30

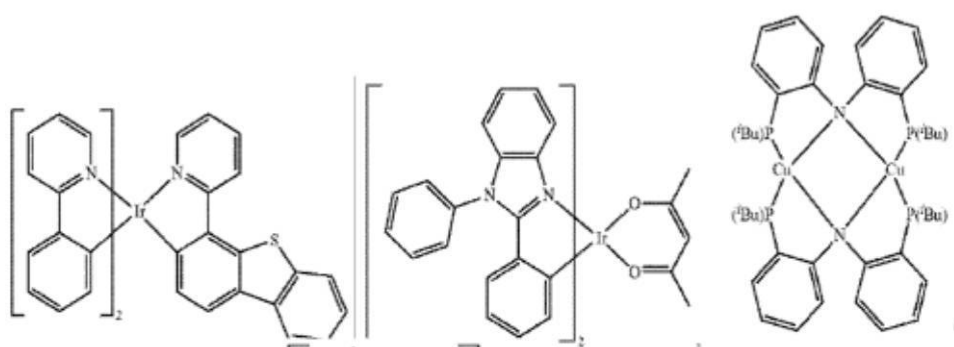
40

50

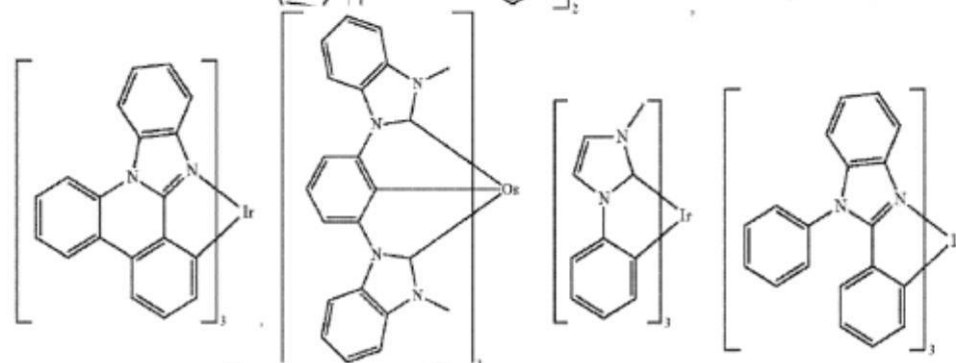
【化 1 3 6】



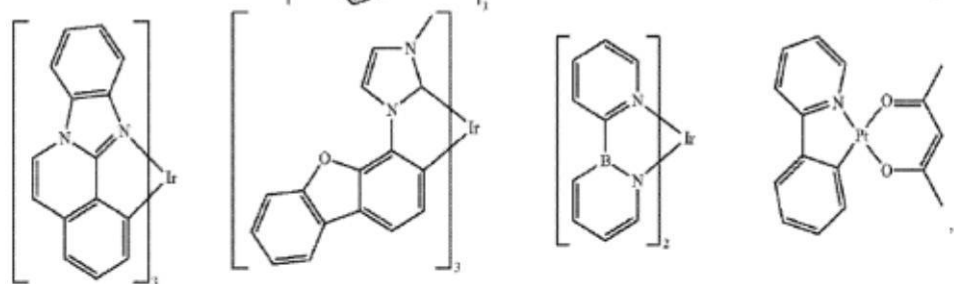
10



20



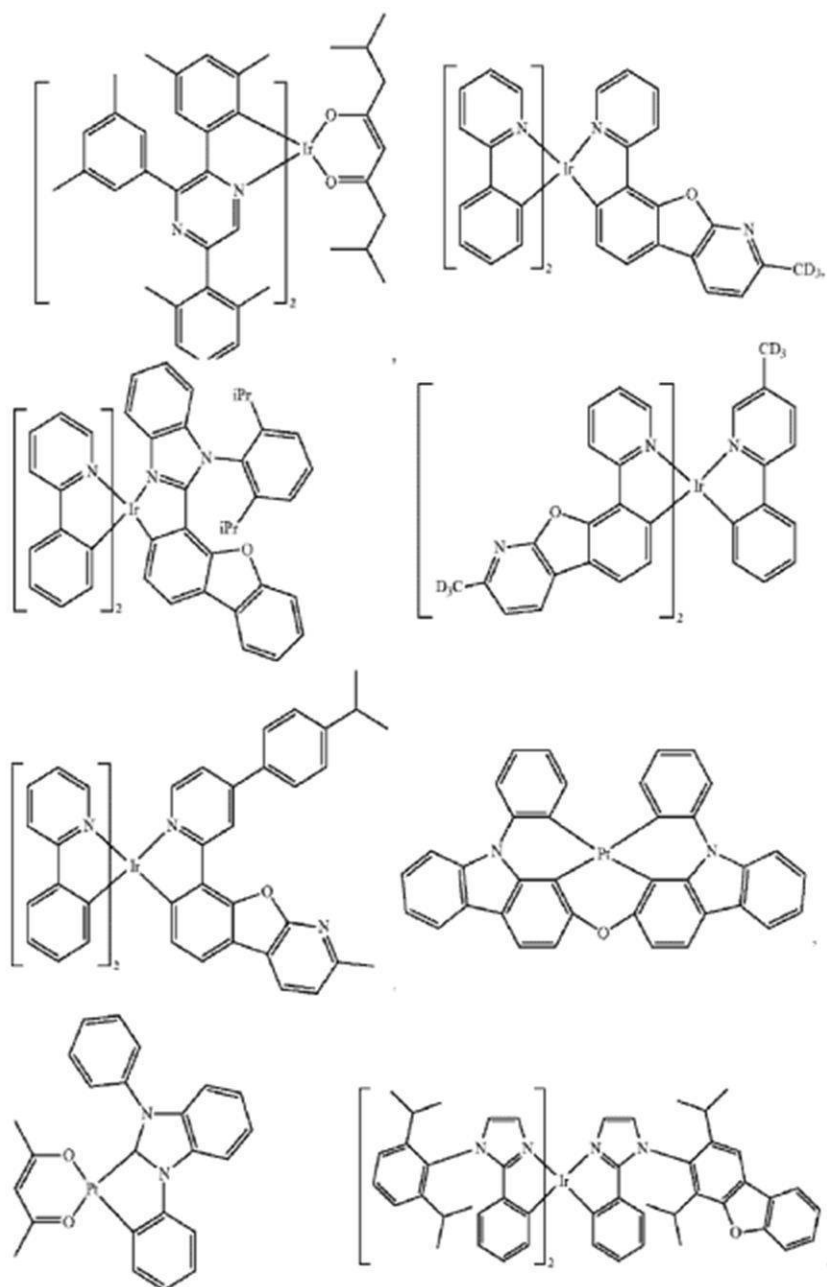
30



40

50

【化 1 3 8】



10

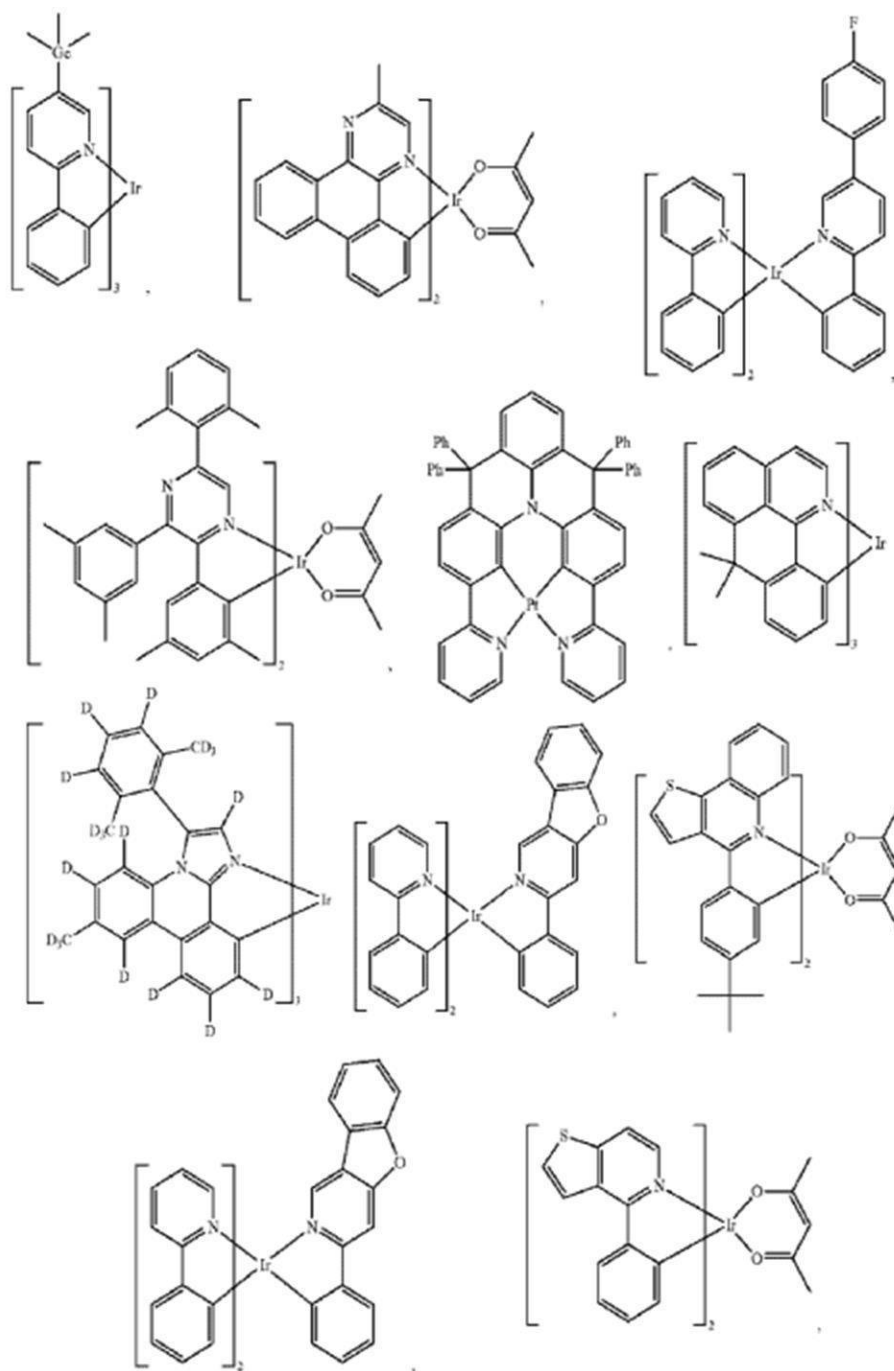
20

30

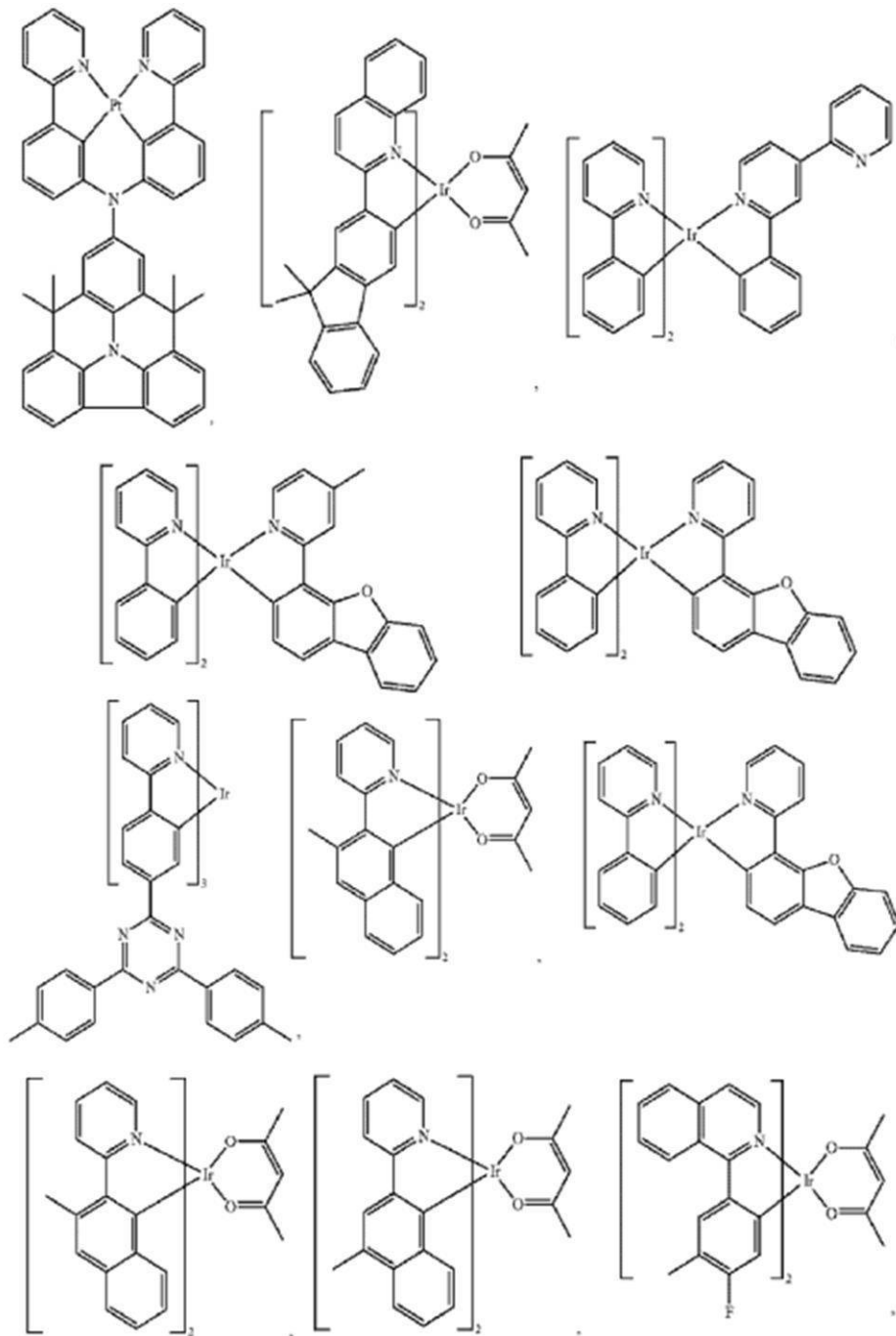
40

50

【化 1 3 9】



【化 1 4 0】



10

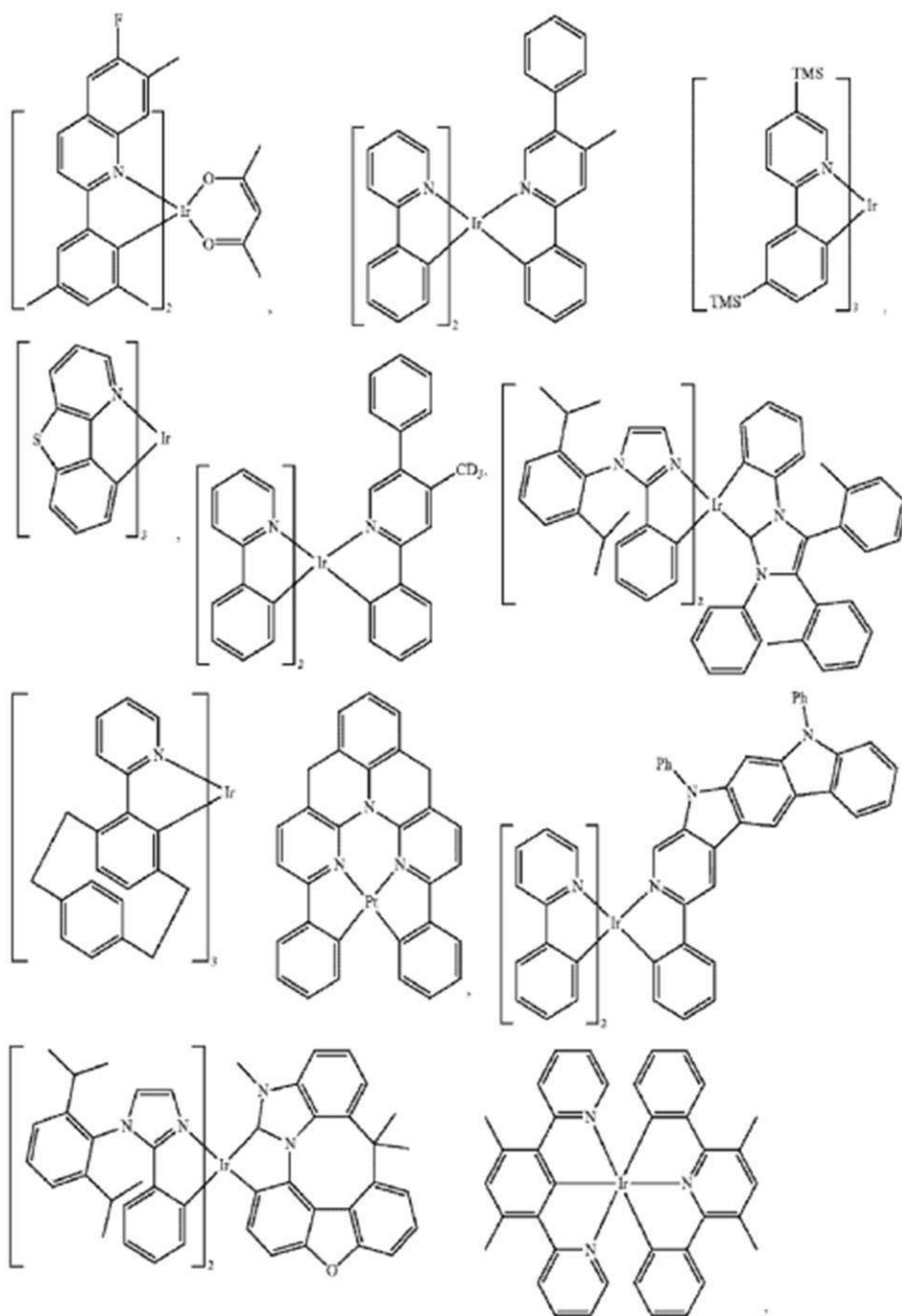
20

30

40

50

【化 1 4 1】



10

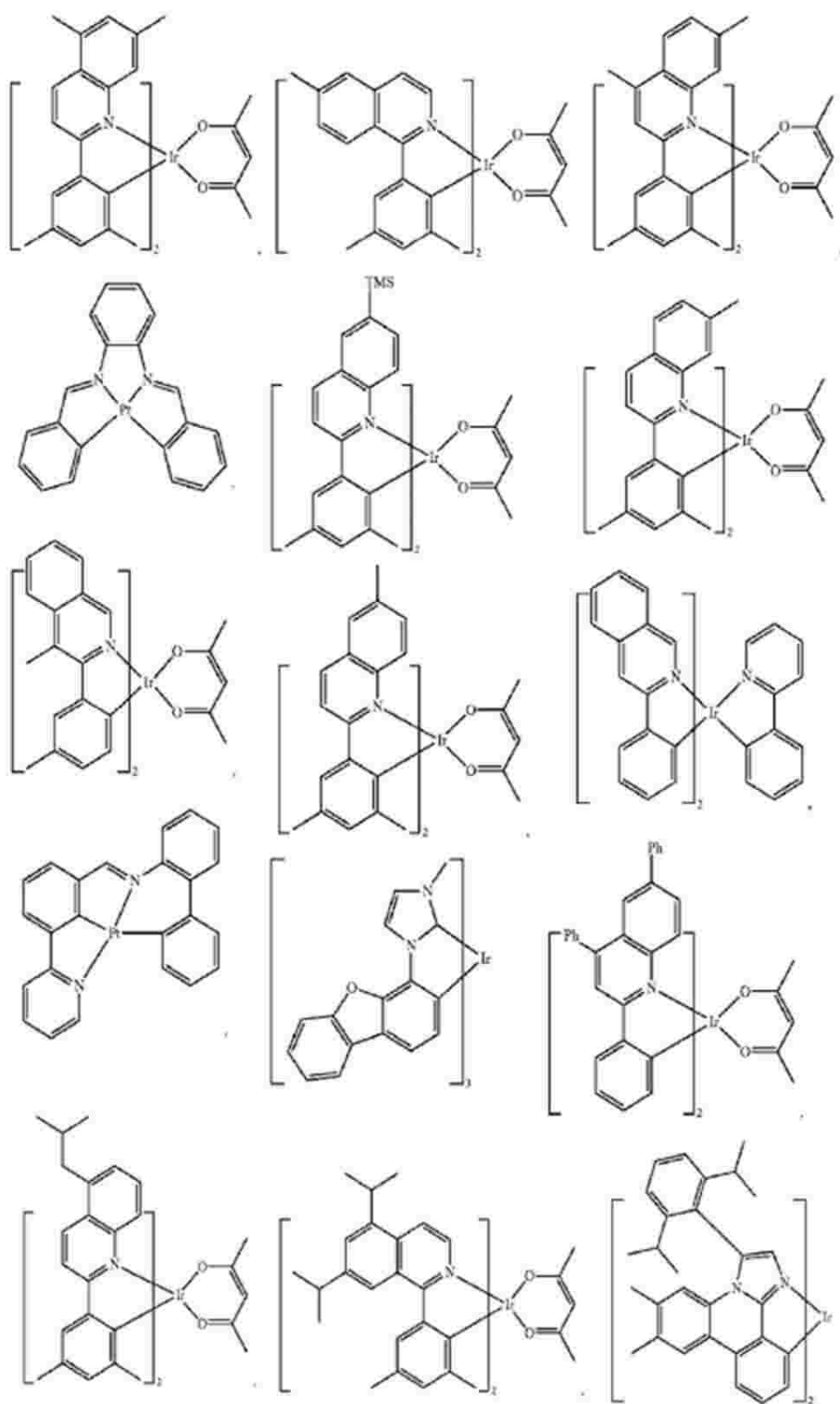
20

30

40

50

【化 1 4 2】



10

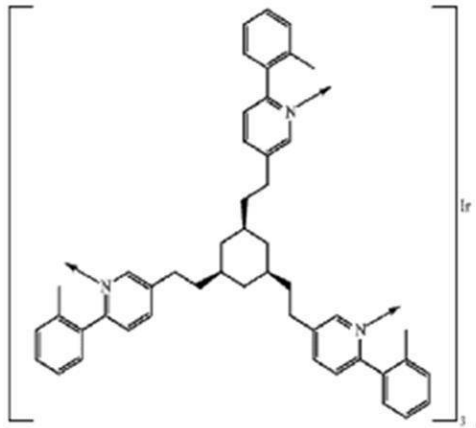
20

30

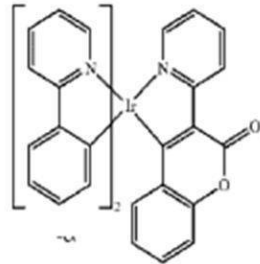
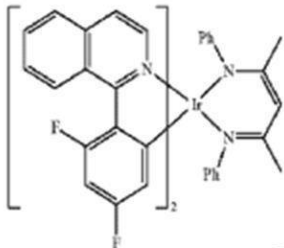
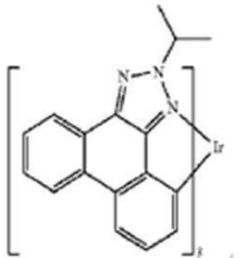
40

50

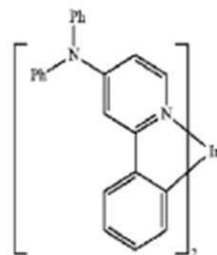
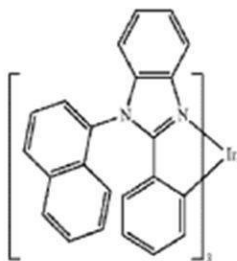
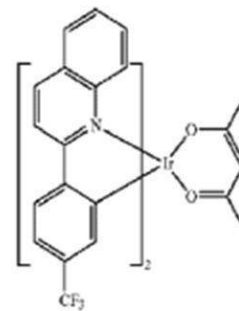
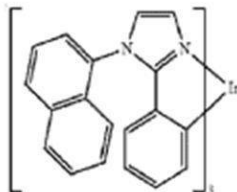
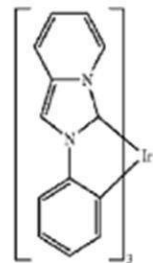
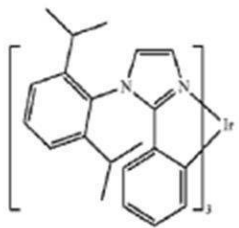
【化 1 4 3】



10

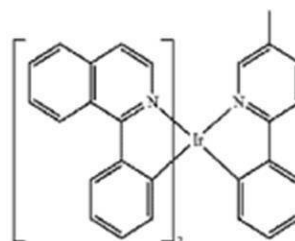
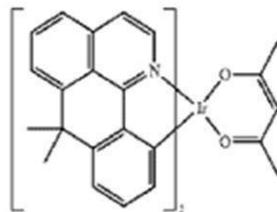
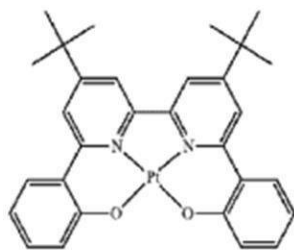


20



30

【化 1 4 4】



40

【0 2 8 1】

前述のように、当業者は、最新技術において使用される任意の燐光錯体が本発明の文脈において燐光材料 P^B として適していることを認識するであろう。

【0 2 8 2】

本発明の一実施形態において、発光層 B に含まれたそれぞれの燐光材料 P^B は、イリジウム (Ir) を含む。

50

【0283】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つの燐光材料 P^B 、好ましくは、発光層Bに含まれたそれぞれの燐光材料 P^B は、イリジウム(Ir)または白金(Pt)を含む有機金属錯体である。

【0284】

本発明の一実施形態において、発光層Bに含まれた少なくとも1つの燐光材料 P^B 、好ましくは、それぞれの燐光材料 P^B は、イリジウム(Ir)を含む有機金属錯体である。

【0285】

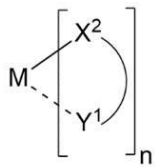
本発明の一実施形態において、発光層Bに含まれた少なくとも1つの燐光材料 P^B 、好ましくは、それぞれの燐光材料 P^B は、白金(Pt)を含む有機金属錯体である。

10

【0286】

また、燐光材料 P^B の非限定的な例は、下記一般化学式 P^B-I で表される化合物を含む：

【化145】



20

・・・化学式 P^B-I 。

【0287】

化学式 P^B-I において、Mは、Ir、Pt、Pd、Au、Eu、Ru、Re、Ag及びCuから構成される群から選択され、

nは、1～3の整数であり、

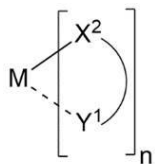
X^2 及び Y^1 は、共にそれぞれの場合に互いに独立して、二座モノアニオン性リガンドを形成する。

【0288】

本発明の一実施形態において、発光層Bに含まれたそれぞれの燐光材料 P^B は、下記化学式 P^B-I による構造を含むか、あるいはそれから構成される：

30

【化146】



・・・化学式 P^B-I

ここで、Mは、Ir、Pt、Pd、Au、Eu、Ru、Re、Ag及びCuから構成される群から選択され、

40

nは、1～3の整数であり、

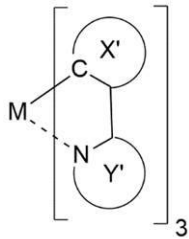
X^2 及び Y^1 は、共にそれぞれの場合に互いに独立して、二座モノアニオン性リガンドを形成する。

【0289】

化学式 P^B-I で表される化合物の例は、下記化学式 P^B-II または化学式 P^B-III で表される化合物を含む：

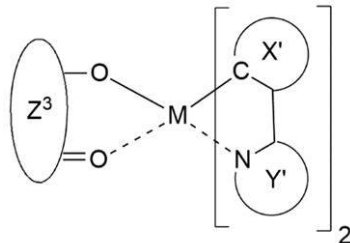
50

【化 1 4 7】

・・・化学式 $P^B - I I$

10

【化 1 4 8】

・・・化学式 $P^B - I I I$

20

化学式 $P^B - I I$ 及び $P^B - I I I$ において、 X' は、 M に炭素 (C) 結合された芳香族環であり、 Y' は、 M に窒素 (N) 配位されて環を形成する環である。

【0 2 9 0】

X' と Y' は結合され、 X' と Y' は、新たな環を形成することができる。化学式 $I I$ において、 Z^3 は、2つの酸素 (O) を有する二座リガンドである。化学式 $P^B - I I$ 及び $P^B - I I I$ において、 M は、高効率及び長寿命の観点から、好ましくは、Irである。

【0 2 9 1】

化学式 $P^B - I I$ 及び $P^B - I I I$ において、芳香族環 X' は、例えば、 $C_6 - C_{30}$ アリール、好ましくは、 $C_6 - C_{16}$ アリール、より好ましくは、 $C_6 - C_{12}$ アリール、特に好ましくは、 $C_6 - C_{10}$ アリールであり、ここで、 X' は、それぞれの場合に選択的に1以上の置換基 R^E で置換される。

30

【0 2 9 2】

化学式 $P^B - I I$ 及び $P^B - I I I$ において、 Y' は、例えば、 $C_2 - C_{30}$ ヘテロアリール、好ましくは、 $C_2 - C_{25}$ ヘテロアリール、より好ましくは、 $C_2 - C_{20}$ ヘテロアリール、より一層好ましくは、 $C_2 - C_{15}$ ヘテロアリール、特に好ましくは、 $C_2 - C_{10}$ ヘテロアリールであり、ここで、 Y' は、それぞれの場合に選択的に1以上の置換基 R^E で置換される。また、 Y' は、例えば、選択的に1以上の置換基 R^E で置換される $C_1 - C_5$ ヘテロアリールであってもよい。

【0 2 9 3】

40

化学式 $P^B - I I$ 及び $P^B - I I I$ において、2つの酸素 (O) を有する二座リガンド Z^3 は、例えば、2つの酸素を有する $C_2 - C_{30}$ 二座リガンド、好ましくは、2つの酸素を有する $C_2 - C_{25}$ 二座リガンド、より好ましくは、2つの酸素を有する $C_2 - C_{20}$ 二座リガンド、より一層好ましくは、2つの酸素を有する $C_2 - C_{15}$ 二座リガンド、特に好ましくは、2つの酸素を有する $C_2 - C_{10}$ 二座リガンドであり、ここで、 Z^3 は、それぞれの場合に選択的に1以上の置換基 R^E で置換される。また、 Z^3 は、例えば、選択的に1以上の置換基 R^E で置換される2つの酸素を有する $C_2 - C_5$ 二座リガンドであってもよい。

【0 2 9 4】

R^E は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

50

水素、重水素、 $N(R^{5E})_2$ 、 OR^{5E} 、 SR^{5E} 、 $Si(R^{5E})_3$ 、 CF_3 、 CN 、ハロゲン、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{5E} で選択的に置換され、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{5E}C=CR^{5E}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{5E})_2$ 、 $Ge(R^{5E})_2$ 、 $Sn(R^{5E})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{5E}$ 、 $P(=O)(R^{5E})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{5E} 、 O 、 S または $CONR^{5E}$ で選択的に置換され、

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{5E} で選択的に置換され、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{5E}C=CR^{5E}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{5E})_2$ 、 $Ge(R^{5E})_2$ 、 $Sn(R^{5E})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{5E}$ 、 $P(=O)(R^{5E})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{5E} 、 O 、 S または $CONR^{5E}$ で選択的に置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{5E} で選択的に置換され、及び

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{5E} で選択的に置換される。

【0295】

R^{5E} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、重水素、 $N(R^{6E})_2$ 、 OR^{6E} 、 SR^{6E} 、 $Si(R^{6E})_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{6E} で選択的に置換され、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{6E}C=CR^{6E}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{6E})_2$ 、 $Ge(R^{6E})_2$ 、 $Sn(R^{6E})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{6E}$ 、 $P(=O)(R^{6E})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{6E} 、 O 、 S または $CONR^{6E}$ で選択的に置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{6E} で選択的に置換され、及び

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{6E} で選択的に置換される。

【0296】

R^{6E} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

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

C_1-C_5 アルコキシ、

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

C_1-C_5 チオアルコキシ、

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

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

$N(C_6-C_{18}アリール)_2$ 、

$N(C_3-C_{17}ヘテロアリール)_2$ 、及び

$N(C_3-C_{17}ヘテロアリール)(C_6-C_{18}アリール)$ 。

【0297】

置換基 R^E 、 R^{5E} または R^{6E} は、互いに独立して選択的に1以上の置換基 R^E 、 R^{5E}

10

20

30

40

50

E、R^{6E}及び／またはX'、Y'及びZと共に、単環または多環、脂肪族環系、芳香族環系、ヘテロ芳香族環系を形成することができる。

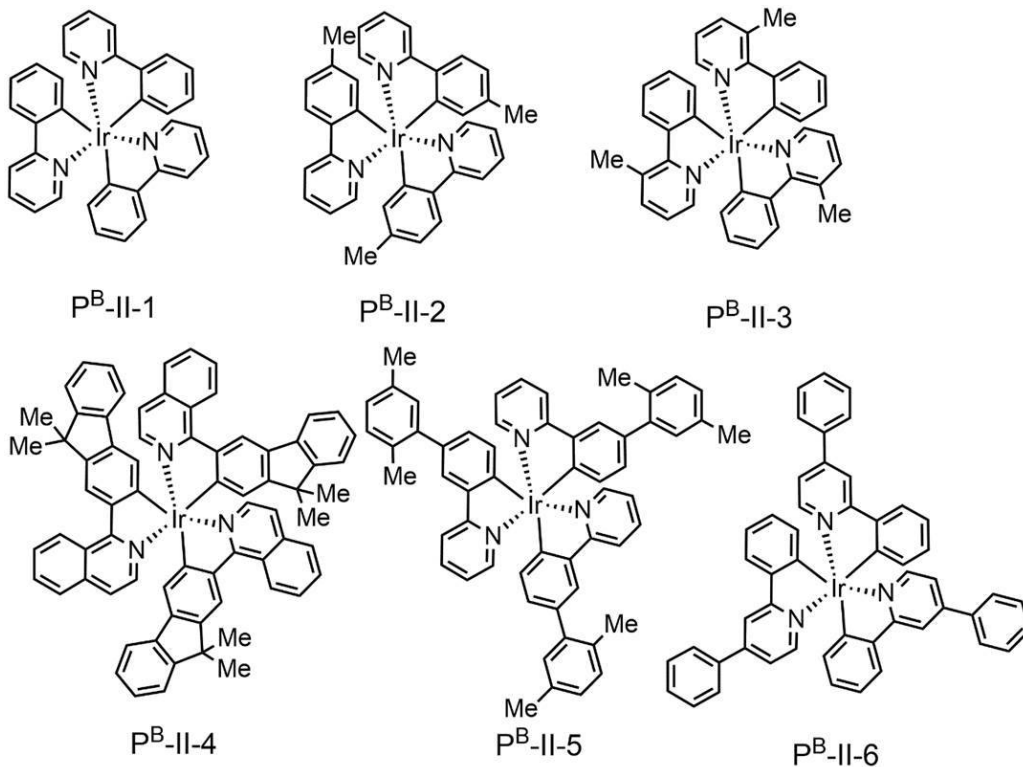
【0298】

化学式P^B-IIで表される化合物の非限定的な例には、Ir(ppy)₃、Ir(ppy)₂(acac)、Ir(mppy)₃、Ir(Ppy)₂(m-bppy)、Btp Ir(acac)、Ir(btp)₂(acac)、Ir(2-phq)₃、Hex-Ir(phq)₃、Ir(fbi)₂(acac)、fac-トリス(2-(3-p-キシリル)フェニル)ピリジンイリジウム(III)、Eu(dbm)₃(Phen)、Ir(piq)₃、Ir(piq)₂(acac)、Ir(Fiq)₂(acac)、Ir(Flq)₂(acac)、Ru(dtb-bpy)₃・2(PF₆)、Ir(2-phq)₃、Ir(BT)₂(acac)、Ir(DMP)₃、Ir(Mpq)₃、Ir(phq)₂tpy、fac-Ir(ppy)₂Pc、Ir(dp)PQ₂、Ir(Dpm)(Piq)₂、Hex-Ir(piq)₂(acac)、Hex-Ir(piq)₃、Ir(dmpq)₃、Ir(dmpq)₂(acac)、FPQIrpicなどがある。

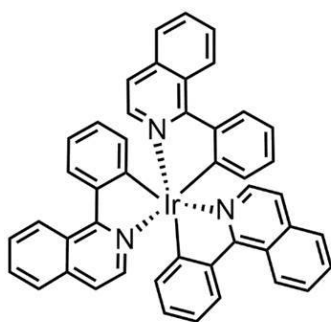
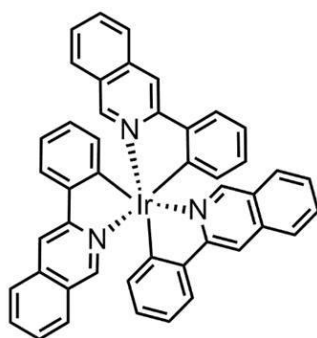
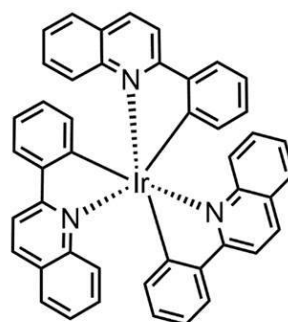
【0299】

化学式P^B-IIで表される化合物の他の非限定的な例は、下記化学式P^B-II-1～P^B-II-11で表される化合物を含む。構造式において、「Me」は、メチル基を示す。

【化149】

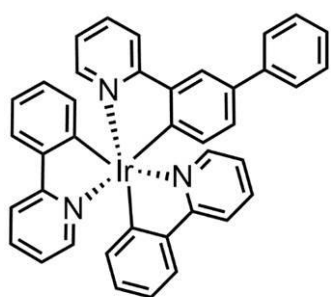
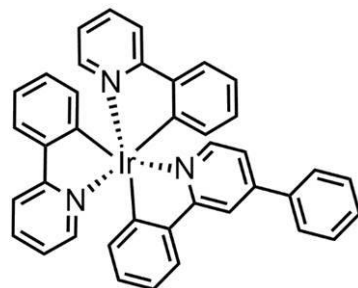


【化 1 5 0】

P^B-II-7P^B-II-8P^B-II-9

10

【化 1 5 1】

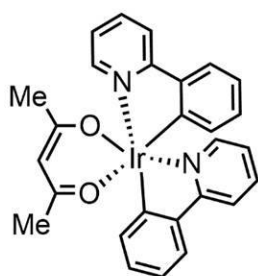
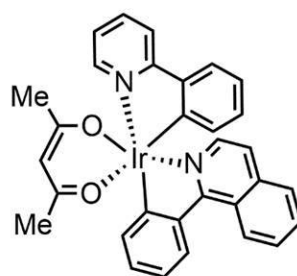
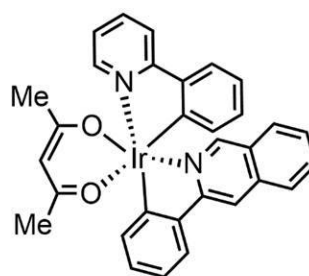
P^B-II-10P^B-II-11

20

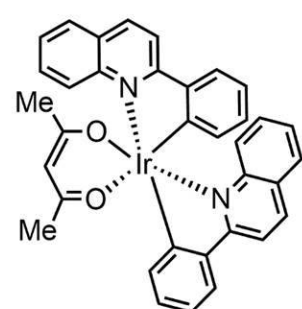
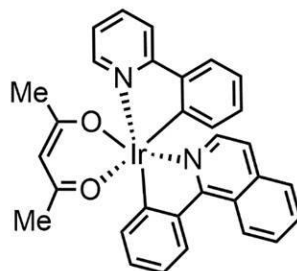
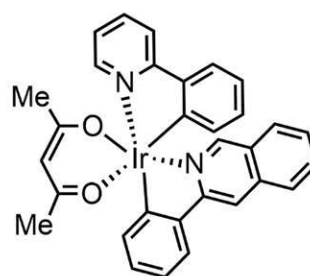
【0 3 0 0】

化学式 P^B-III で表される化合物の他の非限定的な例は、下記化学式 P^B-III-1 ~ P^B-III-6 で表される化合物を含む。構造式において、「Me」は、メチル基を示す。

【化 1 5 2】

P^B-III-1P^B-III-2P^B-III-3

30

P^B-III-4P^B-III-5P^B-III-6

40

50

【0301】

また、US2003017361 (A1)、US2004262576 (A1)、WO2010027583 (A1)、US2019245153 (A1)、US2013119354 (A1)、US2019233451 (A1)に記載されたイリジウム錯体を使用することができる。燐光材料の高効率観点から、 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ と $\text{Hex-Ir}(\text{ppy})_3$ が緑色発光によく使用される。

【0302】

エキサイプレックス

TADF材料は、逆項間交差(RISC)を介して、励起三重項状態(好ましくは、 T_1)を励起一重項状態(好ましくは、 S_1)に変換することができると明示されてきた。また、これは、一般的に小さい ΔE_{ST} 値を必要とし、これは、定義上TADF材料 E^B の場合、0.4 eVより小さいと明示されてきた。また、前述のように、これは、HOMO及びLUMOがそれぞれ(電子)ドナー基及び(電子)アクセプター基で空間的に大きく分離されるようにTADF分子 E^B を設計することによって達成される。しかし、 ΔE_{ST} 値が小さい種に達するための他の戦略は、エキサイプレックスを形成することである。当業者に知られているように、エキサイプレックスは、ドナー分子とアクセプター分子との間に形成された励起状態電荷移動複合体(すなわち、励起状態ドナー・アクセプター複合体)である。当業者は、エキサイプレックスにおいて(ドナー分子上の)HOMOと(アクセプター分子上の)LUMOとの空間的分離が典型的に多少小さい ΔE_{ST} 値を有するようにし、励起三重項状態(好ましくは、 T_1)を励起一重項状態(好ましくは、 S_1)に逆項間交差(RISC)を介して切り替えることができることを理解する。

【0303】

実際に、当業者に知られているように、TADF材料は、前述のように単にそれ自体で励起三重項状態から励起一重項状態にRISC可能であり、TADFの後続発光を有する材料ではない。また、TADF材料は、事実上2つの材料、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 (以下参照)から形成されるエキサイプレックスであることが当業者に周知であり、ホスト材料 H^B (一般的に、 H^P 及び H^N)自体がTADF材料であるものと理解される。

【0304】

当業者は、同一層、特に同一なEMLに含まれた任意の材料だけでなく、隣接した層に含まれており、それら隣接した層間の界面で非常に近接する材料が共にエキサイプレックスを形成することができることを理解する。当業者は、エキサイプレックスを形成する材料の対、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、及び前記材料の対の2つの成分に対するHOMO及び／またはLUMOエネルギーレベル要求事項を含む選択基準が分かっている。すなわち、エキサイプレックス形成が要求される場合、1つの成分、例えば、p-ホスト材料 H^P の最高被占軌道(HOMO)は、他の成分、例えば、n-ホスト材料 H^N のHOMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVより高く、1つの成分、例えば、p-ホスト材料 H^P の最低空軌道(LUMO)は、他の成分、例えば、n-ホスト材料 H^N のLUMOよりエネルギーが少なくとも0.20 eVより高い。

【0305】

有機エレクトロルミネッセンス素子、特にOLEDのEMLにエキサイプレックスが存在する場合、エキサイプレックスは、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れば発光することができるというのは、当業者の常識に属する。最新技術から、また一般的に知られているように、エキサイプレックスは、非放射性であり、例えば、有機エレクトロルミネッセンス素子のEMLに含まれた場合、励起エネルギーをエミッタ材料に移動させることができる。

【0306】

エキサイプレックスを共に形成可能なホスト材料 H^B の非限定的な例が下記に示されており、ここで、ドナー分子(すなわち、p-ホスト H^P)は、以下の構造から選択される：

10

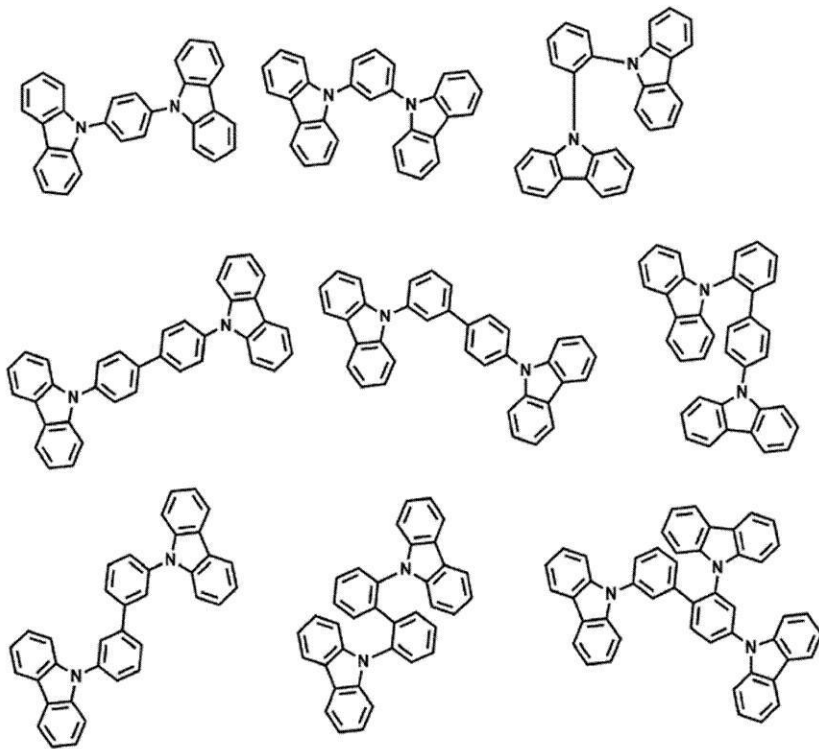
20

30

40

50

【化 1 5 3】



10

20

【0 3 0 7】

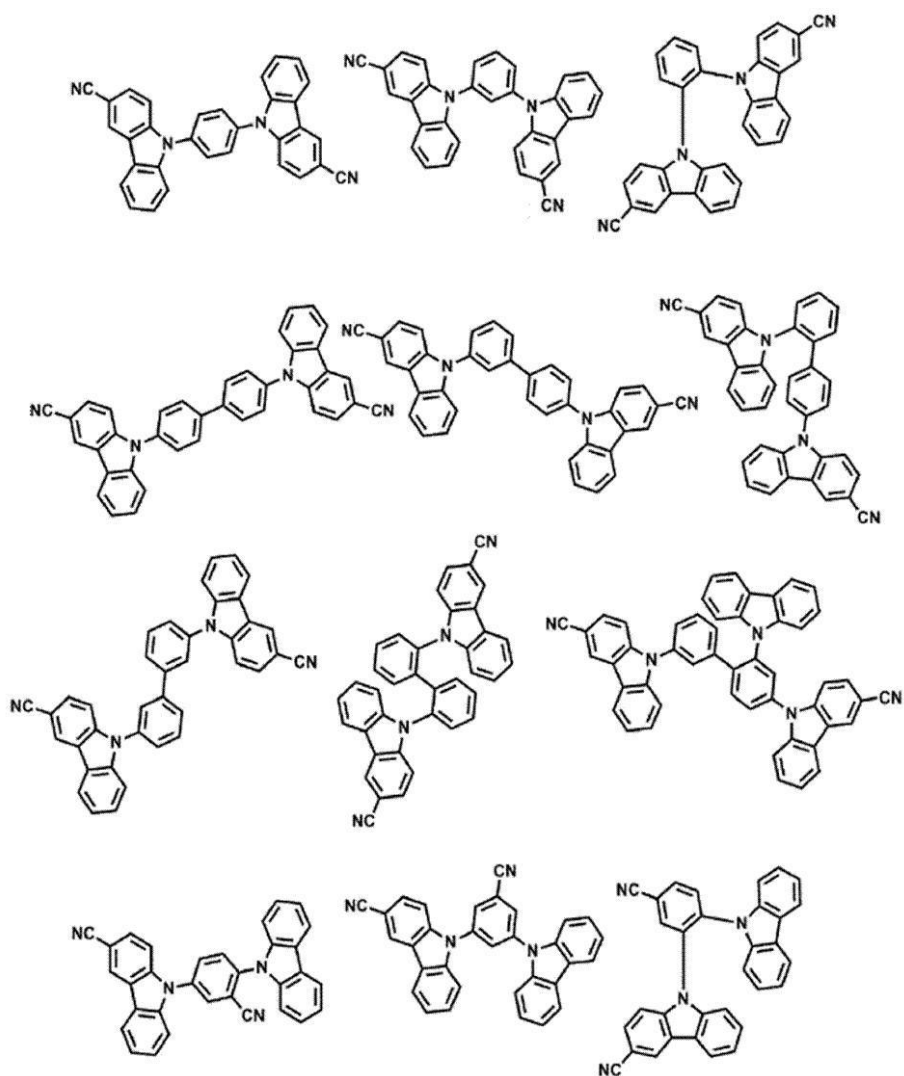
アクセプター分子（すなわち、 n -ホスト H^N ）は、以下の構造から選択される：

30

40

50

【化 1 5 4】



10

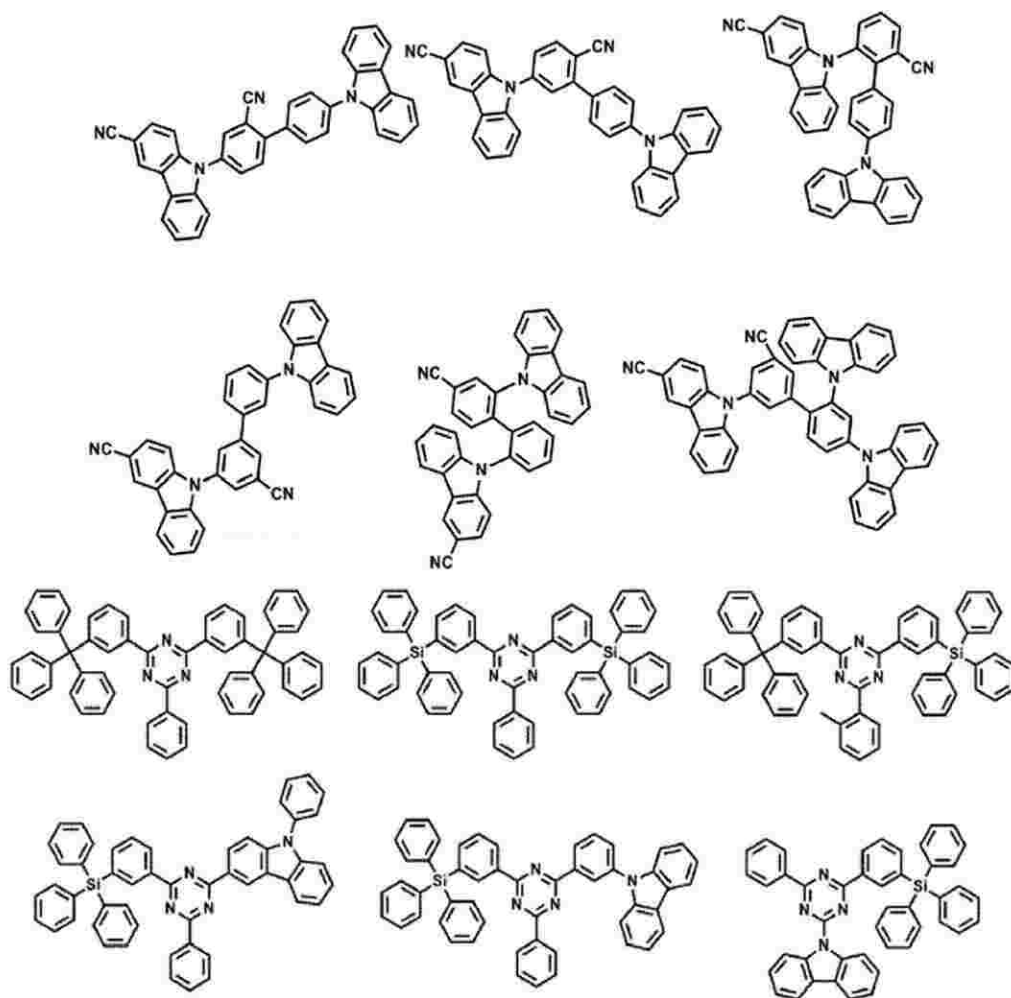
20

30

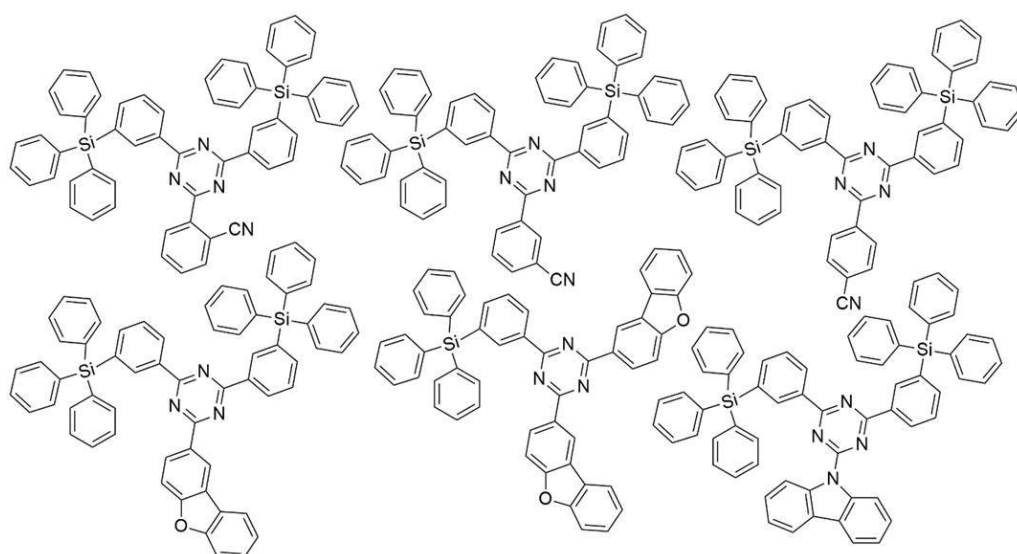
40

50

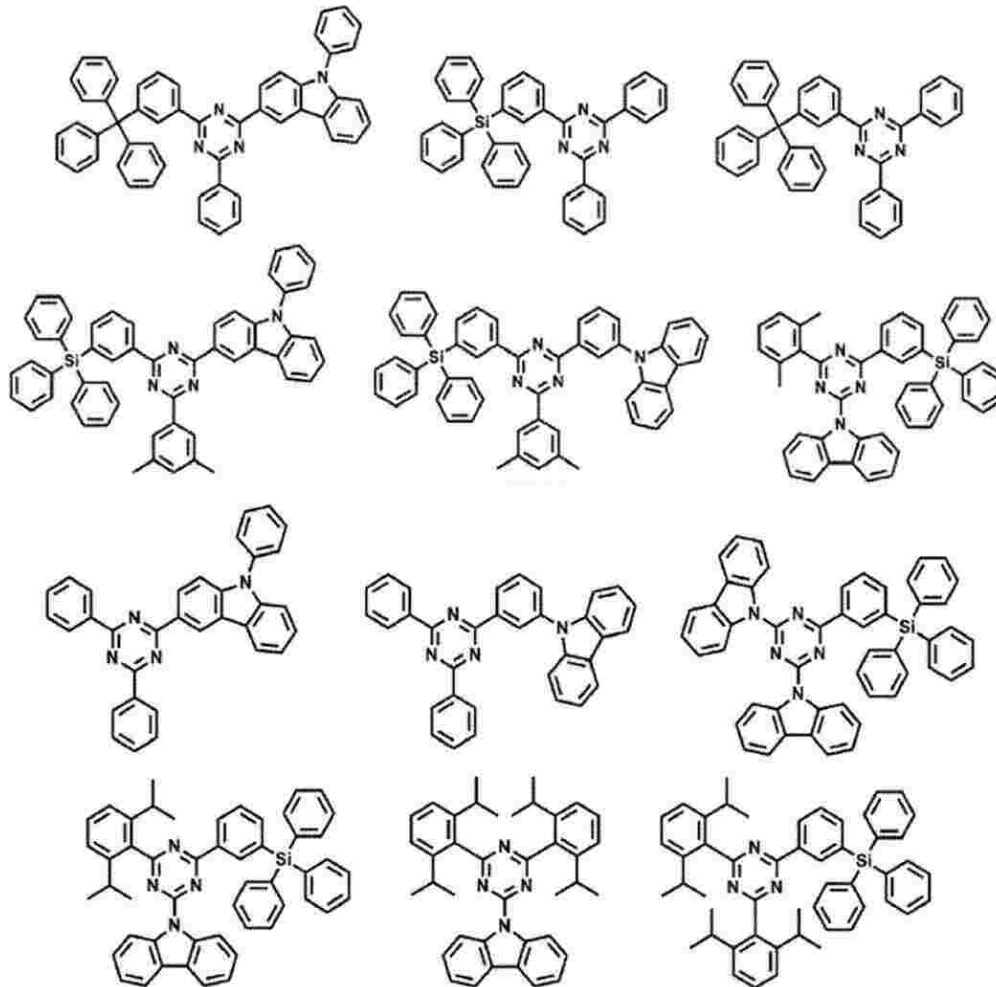
【化 1 5 5】



【化 1 5 6】



【化 1 5 7】



10

20

【0 3 0 8】

エキサイプレックスは、本発明の文脈において発光層 B に含まれた任意の材料、例えば、異なる励起エネルギー移動成分 (E^B 及び／または $EET-2$) だけでなく、励起エネルギー移動成分 (E^B 及び／または $EET-2$) 及び小 FWHM エミッタ S^B 、またはホスト材料 H^B 及び励起エネルギー移動成分 E^B または $EET-2$ または小 FWHM エミッタ S^B から形成されることが理解される。好ましくは、しかし、それらは、前述のように異なるホスト材料 H^B から形成される。また、エキサイプレックスが形成され、励起エネルギー移動成分それ自体では作用しないことがあるということも理解される。

30

【0 3 0 9】

小 FWHM エミッタ S^B

本発明による小半値幅 (FWHM) エミッタ S^B は、一般的に、室温 (すなわち、(約) 20°C) でポリ (メチルメタクリレート) PMMA 中の 1~5 重量%、特に 2 重量%のエミッタを有するスピンコーティング膜から測定された FWHM が 0.25 eV 以下 (≤ 0.25) を示す発光スペクトルを有する任意のエミッタであってもよい。代案としては、小 FWHM エミッタ S^B の発光スペクトルは、一般的に、室温 (すなわち、(約) 20°C) でジクロロメタンまたはトルエン中の $0.001\sim 0.2\text{ mg/mL}$ のエミッタ S^B がある溶液で測定されてもよい。

40

【0 3 1 0】

本発明の好ましい実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、室温 (すなわち、(約) 20°C) の PMMA において 1~5 重量%、特に 2 重量%のエミッタ S^B を有するスピンコーティング膜から測定された $\leq 0.24\text{ eV}$ 、より好ましくは、 $\leq 0.23\text{ eV}$ 、より一層好ましくは、 $\leq 0.22\text{ eV}$ 、 $\leq 0.21\text{ eV}$ 、または $\leq 0.20\text{ eV}$ の FWHM

50

Mを示す発光スペクトルを有する任意のエミッタである。あるいは、小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中の0.001～0.2mg/mLのエミッタ S^B がある溶液で測定されてもよい。本発明の他の実施形態において、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、 $\leq 0.19\text{ eV}$ 、 $\leq 0.18\text{ eV}$ 、 $\leq 0.17\text{ eV}$ 、 $\leq 0.16\text{ eV}$ 、 $\leq 0.15\text{ eV}$ 、 $\leq 0.14\text{ eV}$ 、 $\leq 0.13\text{ eV}$ 、 $\leq 0.12\text{ eV}$ 、または $\leq 0.11\text{ eV}$ のFWHMを示す。

【0311】

本発明の一実施形態において、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタ S^B の）PMMAで測定するとき、440nm～480nmの波長範囲の最大発光で発光する。

【0312】

本発明の一実施形態において、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタ S^B で測定するとき、440nm～480nmの波長範囲の最大発光で発光する。

【0313】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれたTADF材料 E^B は、選択的に0.25eV以下（ $\leq 0.25\text{ eV}$ ）のFWHMを示す発光スペクトルを有するエミッタであってもよい。選択的に、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれたTADF材料 E^B は、また、前述の波長範囲（すなわち、440nm～480nm）内で最大発光を示すことができる。

【0314】

本発明の一実施形態において、下記式（29）で表される関係が適用される：

【0315】

$$440\text{ nm} \leq \lambda_{\text{max}}(S^B) \leq 480\text{ nm} \quad (29)$$

【0316】

ここで、 $\lambda_{\text{max}}(S^B)$ は、本発明の文脈において小FWHMエミッタ S^B の最大発光を示す。

【0317】

一実施形態において、式（29）で表される前述の関係は、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bを構成する材料に適用される。

【0318】

本発明の好ましい実施形態において、小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、本発明による小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）から構成されるが、例えば、酸素（O）、シリコン（Si）、フッ素（F）及び臭素（Br）を含んでもよい。

【0319】

本発明の好ましい実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、蛍光エミッタであり、これは、本発明の文脈において、（例えば、本発明による光電子素子において）電子励起時にエミッタが常温で発光することができ、ここで、発光励起状態は一重項状態であることを意味する。

【0320】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタ S^B の）PMMAで測定するとき、50%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0321】

本発明の好ましい実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタ S^B の）PMMAで測定するとき、60%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0322】

10

20

30

40

50

本発明のより好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタS^Bの）PMMAで測定するとき、70%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0323】

本発明のより好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタS^Bの）PMMAで測定するとき、80%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0324】

本発明の特に好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温で（1～5重量%、特に2重量%のエミッタS^Bの）PMMAで測定するとき、90%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0325】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタS^Bで測定するとき、50%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0326】

本発明の好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタS^Bで測定するとき、60%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0327】

本発明のより好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタS^Bで測定するとき、70%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0328】

本発明のより好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタS^Bで測定するとき、80%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0329】

本発明の特に好ましい実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、室温（すなわち、（約）20℃）でジクロロメタンまたはトルエン中の0.001～0.2mg/mLのエミッタS^Bで測定するとき、90%以上のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）を示す。

【0330】

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

【0331】

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

【0332】

一般的なNRCTエミッタは、時間分解フォトルミネセンススペクトルで遅延された成分を示し、近距離HOMO-LUMO分離を示すものと文献に説明されている。以下の例示を参照する：T. Hatakeyama, K. Shiren, K. Nakajima, S. Nomura, S. Nakatsuka, K. Kinoshita, J. Ni, Y. Ono, and T. Ikuta, *Advanced Materials* 2016, 28(14), 2777, DOI: 10.1002/adma.201505491。

【0333】

一般的なNRCTエミッタは、発光スペクトルで1つの発光バンドのみを示し、一般的な蛍光エミッタは、振動進行(vibrational progression)により、複数の固有な発光バンドを示す。

【0334】

当業者は、本発明の文脈において小FWHMエミッタ S^B として適しているNRCTエミッタを設計及び合成する方法が分かっている。例えば、EP3109253(A1)に開示されたエミッタは、本発明の文脈において小FWHMエミッタ S^B としても使用される。

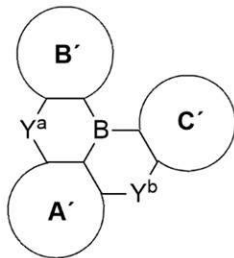
【0335】

また、例えば、US2014058099(A1)、US2009295275(A1)、US2012319052(A1)、EP2182040(A2)、US2018069182(A1)、US2019393419(A1)、US2020006671(A1)、US2020098991(A1)、US2020176684(A1)、US2020161552(A1)、US2020227639(A1)、US2020185635(A1)、EP3686206(A1)、EP3686206(A1)、WO2020217229(A1)、WO2020208051(A1)及びUS2020328351(A1)は、本発明による使用のための小FWHMエミッタ S^B として適しているエミッタ材料を開示する。

【0336】

本発明の文脈において小FWHMエミッタ S^B として使用可能な一群のエミッタは、下記化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれから構成されるボロン(B)含有エミッタである：

【化158】



・・・化学式DABNA-I

ここで、

それぞれの環A'、環B'及び環C'は、互いに独立して、それぞれ5～24個の環原子を含む芳香族環またはヘテロ芳香族環を示し、そのうち、ヘテロ芳香族環の場合、1～3個の環原子は、互いに独立して、N、O、S及びSeから選択されるヘテロ原子であり、

ここで、それぞれの芳香族環またはヘテロ芳香族環A'、B'及びC'において、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して置換基 $R^{DABNA-1}$ によって置換され、これは、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

重水素、 $N(R^{DABNA-2})_2$ 、 $OR^{DABNA-2}$ 、 $SR^{DABNA-2}$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_3$ 、 $B(OR^{DABNA-2})_2$ 、 $OSO_2R^{DABNA-2}$ 、 CF_3 、 CN 、ハロゲン(F、Cl、Br、I)、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}C=CR^{DABNA-2}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-2})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-2}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-2})_2$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-2}$ 、O、Sまたは $CONR^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}C=CR^{DABNA-2}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-2})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-2}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-2})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-2}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}C=CR^{DABNA-2}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-2})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-2}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-2})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-2}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}C=CR^{DABNA-2}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-2})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-2}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-2})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-2}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}$ 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 $R^{DABNA-2}C=CR^{DABNA-2}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-2})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-2})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-2}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-2})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-2}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-2}$ で置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、及び

4～18個の炭素原子及び1～3個の窒素原子を含む脂肪族環状アミン、

$R^{DABNA-2}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-6})_2$ 、 $OR^{DABNA-6}$ 、 $SR^{DABNA-6}$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_3$ 、 $B(OR^{DABNA-6})_2$ 、 $OSO_2R^{DABNA-6}$ 、 CF_3 、 CN 、ハロゲン (F 、 Cl 、 Br 、 I)、

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ 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 $R^{DABNA-6}C=CR^{DABNA-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-6}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-6}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-6}$ で置換され、

C_1-C_5 アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ 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 $R^{DABNA-6}C=CR^{DABNA-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-6}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-6}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-6}$ で置換さ

10

20

30

40

50

れ、

C_1-C_5 チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ 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 $R^{DABNA-6}C=CR^{DABNA-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-6}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-6}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-6}$ で置換され、

C_2-C_5 アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ 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 $R^{DABNA-6}C=CR^{DABNA-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-6}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-6}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-6}$ で置換され、

C_2-C_5 アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ 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 $R^{DABNA-6}C=CR^{DABNA-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-6})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-6}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-6}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-6}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、及び

4～18個の炭素原子及び1～3個の窒素原子を含む脂肪族環状アミン、

ここで、 $R^{DABNA-1}$ 及び $R^{DABNA-2}$ から選択される2以上の隣接した置換基は、選択的に、隣接した環 A' 、 B' または C' に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系（すなわち、それぞれの環 A' 、 B' または C' 及びそれに選択的に縮合される追加環）は、総8～30個の環原子を含み、

Y^a 及び Y^b は、互いに独立して、直接（単一）結合、 $NR^{DABNA-3}$ 、 O 、 S 、 $C(R^{DABNA-3})_2$ 、 $Si(R^{DABNA-3})_2$ 、 $BR^{DABNA-3}$ 及び Se から選択され、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-4})_2$ 、 $OR^{DABNA-4}$ 、 $SR^{DABNA-4}$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_3$ 、 $B(OR^{DABNA-4})_2$ 、 $OSO_2R^{DABNA-4}$ 、 CF_3 、 CN 、ハロゲン（ F 、 Cl 、 Br 、 I ）、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{DABNA-4}C=CR^{DABNA-4}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-4})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-4}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-4})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-4}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-4}$ 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 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{DABNA-4}C=CR^{DABNA-4}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-4})_2$

10

20

30

40

50

、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-4}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-4})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-4}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-4}$ 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 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{DABNA-4}C\equiv CR^{DABNA-4}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-4})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-4}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-4})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-4}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-4}$ 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 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{DABNA-4}C\equiv CR^{DABNA-4}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-4})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-4}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-4})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-4}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-4}$ 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 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{DABNA-4}C\equiv CR^{DABNA-4}$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Ge(R^{DABNA-4})_2$ 、 $Sn(R^{DABNA-4})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{DABNA-4}$ 、 $P(=O)(R^{DABNA-4})$ 、 SO 、 SO_2 、 $NR^{DABNA-4}$ 、 O 、 S または $CONR^{DABNA-4}$ で置換され、

C_6-C_{60} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、及び

4～18個の炭素原子及び1～3個の窒素原子を含む脂肪族環状アミン、

$R^{DABNA-4}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-5})_2$ 、 $OR^{DABNA-5}$ 、 $SR^{DABNA-5}$ 、 $Si(R^{DABNA-5})_3$ 、 $B(OR^{DABNA-5})_2$ 、 $OSO_2R^{DABNA-5}$ 、 CF_3 、 CN 、ハロゲン(F 、 Cl 、 Br 、 I)、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-5}$ で置換され、

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

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

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

10

20

30

40

50

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

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

10

C_6-C_{60} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ で置換され、

C_3-C_{57} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ で置換され、及び

4～18個の炭素原子及び1～3個の窒素原子を含む脂肪族環状アミン、

$\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $\text{N}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{OR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{SR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{OSO}_2\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 、 CF_3 、 C 、 N 、ハロゲン(F 、 Cl 、 Br 、 I)、

20

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 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 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}\text{C}=\text{CR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{DABNA}-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 O 、 S または $\text{CONR}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

C_1-C_5 アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 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 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}\text{C}=\text{CR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{DABNA}-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 O 、 S または $\text{CONR}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

30

C_1-C_5 チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 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 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}\text{C}=\text{CR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{DABNA}-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 O 、 S または $\text{CONR}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

40

C_2-C_5 アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 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 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}\text{C}=\text{CR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^{\text{DABNA}-6})_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{DABNA}-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-6}$ 、 O 、 S または $\text{CONR}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

C_2-C_5 アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

50

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

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ で置換され、及び

4～18個の炭素原子及び1～3個の窒素原子を含む脂肪族環状アミン、

ここで、 $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-4}$ 及び $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ から選択される2以上の隣接した置換基は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系は、総8～30個の環原子を含み、

$\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 OPh (Ph =フェニル)、 SPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、 $\text{Si}(\text{C}_1-\text{C}_5\text{アルキル})_3$ 、 $\text{Si}(\text{Ph})_3$ 、

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、 Ph 、 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 によって置換され、

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 によって置換され、

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 によって置換され、

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 によって置換され、

C_6-C_{18} アリール、

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 、 F 、 C_1-C_5 アルキル、 SiMe_3 、 SiPh_3 または C_6-C_{18} アリール置換基によって置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

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 、 F 、 C_1-C_5 アルキル、 SiMe_3 、 SiPh_3 または C_6-C_{18} アリール置換基によって置換され、

$\text{N}(\text{C}_6-\text{C}_{18}\text{アリール})_2$ 、

$\text{N}(\text{C}_3-\text{C}_{17}\text{ヘテロアリール})_2$ 、及び

$\text{N}(\text{C}_3-\text{C}_{17}\text{ヘテロアリール})(\text{C}_6-\text{C}_{18}\text{アリール})$ 、

ここで、 Y^a 及び Y^b のうち1つ、または Y^a 及び Y^b のうち両方が $\text{NR}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{C}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ または $\text{BR}^{\text{DABNA}-3}$ である場合、前記1つまたは2つの置換基 $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ は、選択的に互いに独立して、隣接した環 A' 及び B' ($\text{aY}=\text{NR}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{C}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ または $\text{BR}^{\text{DABNA}-3}$)、または A' 及び C' ($\text{bY}=\text{NR}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{C}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ または $\text{BR}^{\text{DABNA}-3}$)の1つまたは両方に直

10

20

30

40

50

接（単一）結合、あるいはそれぞれの場合に独立して、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-1}$ 、 O 、 S 、 $\text{C}(\text{R}^{\text{DABNA}-1})_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-1})_2$ 、 $\text{BR}^{\text{DABNA}-1}$ 及び Se から選択される連結原子または原子基を介して結合することができ、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の構造が互いに接合され、好ましくは、少なくとも1つの、より好ましくは、正確に1つの結合を共有することによって互いに縮合され、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の構造がエミッタ内に存在し、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の2つの構造の一部であってもよい）、当該環は、好ましくは、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の環 A' 、 B' 及び C' のうちいずれか1つであるが、また、 $\text{R}^{\text{DABNA}-1}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-2}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-4}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ 及び $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ 、特に $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述の2以上の隣接した置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基でもあり、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、エミッタ内に選択的に含まれた化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の2つの構造の環 C' であってもよく、共有環は、例えば、エミッタ内に選択的に含まれた化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の1つの構造の環 B' 及び他の構造の環 C' であってもよい）、

ここで、選択的に $\text{R}^{\text{DABNA}-1}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-2}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-4}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ 及び $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ のうち少なくとも1つが、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に $\text{R}^{\text{DABNA}-1}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-2}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-3}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-4}$ 、 $\text{R}^{\text{DABNA}-5}$ 及び $\text{R}^{\text{DABNA}-6}$ のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

【0337】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1以上の小FWHMエミッタ S^{B} のうち少なくとも1つは、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造を含む。

【0338】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、それぞれの小FWHMエミッタ S^{B} は、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造を含む。

【0339】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1以上の小FWHMエミッタ S^{B} のうち少なくとも1つは、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造から構成される。

【0340】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、それぞれの小FWHMエミッタ S^{B} は、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造から構成される。

【0341】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタ S^{B} は、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、 A' 、 B' 及び C' が全てそれぞれ6個の環原子を有する芳香族環（すなわち、全てベンゼン環）である。

【0342】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタ S^{B} は、化学式 $\text{DABNA}-\text{I}$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、 Y^{a} 及び Y^{b} は、互いに独立して、 $\text{NR}^{\text{DABNA}-3}$ 、 O 、 S 、 $\text{C}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ 及び $\text{Si}(\text{R}^{\text{DABNA}-3})_2$ から選択される。

A-3) ₂ から選択される。

【0343】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタS^Bは、化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、Y^a及びY^bは、互いに独立して、NR^{DABNA-3}、O及びSから選択される。

【0344】

本発明のより好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタS^Bは、化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、Y^a及びY^bは、互いに独立して、NR^{DABNA-3}及びOから選択される。

10

【0345】

本発明の特に好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタS^Bは、化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、Y^a及びY^bは、両方とも、NR^{DABNA-3}である。

【0346】

本発明の特に好ましい実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの、1以上の小FWHMエミッタS^Bは、化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、Y^a及びY^bは、互いに独立して同一であり、両方NR^{DABNA-3}である。

20

【0347】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタS^Bのうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、

R^{DABNA-1}は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(R^{DABNA-2})₂、OR^{DABNA-2}、SR^{DABNA-2}、Si(R^{DABNA-2})₃、CF₃、CN、F、

C₁-C₅アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-2}で置換され、

C₁-C₅アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-2}で置換され、

C₁-C₅チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-2}で置換され、

C₆-C₁₈アリール、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-2}で置換され、

C₃-C₁₇ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-2}で置換され、

R^{DABNA-2}は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

30

水素、重水素、N(R^{DABNA-6})₂、OR^{DABNA-6}、SR^{DABNA-6}、Si(R^{DABNA-6})₃、CF₃、CN、F、

C₁-C₅アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-6}で置換され、

C₆-C₁₈アリール、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-6}で置換され、

C₃-C₁₇ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基R^{DABNA-6}で置換され、

ここで、R^{DABNA-1}及びR^{DABNA-2}から選択される2以上の隣接した置換基は

40

50

、選択的に、隣接した環A'、B'またはC'に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系（すなわち、それぞれの環A'、B'またはC'及びそれに選択的に縮合される追加環）は、計8～30個の環原子を含む。

【0348】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-1}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-2})_2$ 、 $OR^{DABNA-2}$ 、 $SR^{DABNA-2}$ 、 $Si(R^{DABNA-2})_3$ 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

$R^{DABNA-2}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-6})_2$ 、 $OR^{DABNA-6}$ 、 $SR^{DABNA-6}$ 、 $Si(R^{DABNA-6})_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、

ここで、 $R^{DABNA-1}$ 及び $R^{DABNA-2}$ から選択される2以上の隣接した置換基は、選択的に、隣接した環A'、B'またはC'に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系（すなわち、それぞれの環A'、B'またはC'及びそれに選択的に縮合される追加環）は、計8～30個の環原子を含む。

【0349】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-1}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-2})_2$ 、 $OR^{DABNA-2}$ 、 $SR^{DABNA-2}$ 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-2}$ で置換され、

$R^{DABNA-2}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 OPh 、 CN 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 $Si(Me)_3$ 、 Ph 、

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

これは、選択的に1以上の置換基 $R^{DABNA-6}$ で置換され、

ここで、2以上の隣接した $R^{DABNA-1}$ は、隣接した環A'、B'またはC'に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された縮合環系（すなわち、それぞれの環A'、B'またはC'及びそれに選択的に縮合される追加環）は、計8〜30個の環原子を含む。

【0350】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

10

$R^{DABNA-1}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 OPh 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 $Si(Me)_3$ 、 Ph 、

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

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

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

20

ここで、2以上の隣接した置換基 $R^{DABNA-1}$ は、選択的に、隣接した環A'、B'またはC'に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された環系（すなわち、それぞれの環A'、B'またはC'及びそれに選択的に縮合される追加環）は、計8〜30個の環原子を含む。

【0351】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-1}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

30

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph 、

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

カルバゾリル、

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

トリアジニル、

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

40

ピリミジニル、

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

ピリジニル、

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

ここで、2以上の隣接した置換基 $R^{DABNA-1}$ は、選択的に、隣接した環A'、B'またはC'に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された環系（すなわち、そ

50

れぞれの環 A'、B' または C' 及びそれに選択的に縮合される追加環) は、計 8 ~ 30 個の環原子を含む。

【0352】

本発明の一実施形態において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1 以上の小 FWHM エミッタ S^B のうち少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれが化学式 DABNA-I による構造を含むか、あるいはそれからなり、 $R^{DABNA-1}$ 及び $R^{DABNA-2}$ から選択された隣接した置換基は、隣接した環 A'、B' または C' に縮合された単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成しない。

【0353】

本発明の一実施形態において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1 以上の小 FWHM エミッタ S^B のうち少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれが化学式 DABNA-I による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C_1-C_4 アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

$R^{DABNA-4}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{DABNA-5})_2$ 、 $OR^{DABNA-5}$ 、 $SR^{DABNA-5}$ 、 $Si(C_1-C_5 \text{ アルキル})_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-5}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-5}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-5}$ で置換され、

$R^{DABNA-5}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 OPh 、 $Si(Me)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

ここで、 $R^{DABNA-3}$ 、 $R^{DABNA-4}$ 及び $R^{DABNA-5}$ から選択される 2 以上の隣接した置換基は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、ここで、選択的にこのように形成された環系は、計 8 ~ 30 個の環原子を含む。

【0354】

本発明の一実施形態において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1 以上の小 FWHM エミッタ S^B のうち少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれが

化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C_1-C_4 アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

$R^{DABNA-4}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 OPh 、 $Si(Me)_3$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

ここで、 $R^{DABNA-3}$ 及び $R^{DABNA-4}$ から選択される 2 以上の隣接した置換基は、互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成しない。

【0355】

本発明の一実施形態において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1 以上の小 FWHM エミッタ S^B のうち少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C_1-C_4 アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

これは、選択的に 1 以上の置換基 $R^{DABNA-4}$ で置換され、

$R^{DABNA-4}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

ここで、 $R^{DABNA-3}$ 及び $R^{DABNA-4}$ から選択される 2 以上の隣接した置換基は、互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテ

10

20

30

40

50

口環系を形成しない。

【0356】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、

C_6-C_{18} アリール、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

ここで、 $R^{DABNA-3}$ から選択された2以上の隣接した置換基は、互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成しない。

【0357】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-3}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、及び

Ph 、

ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、 Ph または CN によって置換され、

ここで、 $R^{DABNA-3}$ から選択された2以上の隣接した置換基は、互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成しない。

【0358】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-6}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、重水素、 OPh (Ph =フェニル)、 SPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、 $Si(C_1-C_5アルキル)_3$ 、 $Si(Ph)_3$ 、

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、 Ph 、 CN 、 CF_3 、または F で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

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 、 F 、 C_1-C_5 アルキル、 $SiMe_3$ 、 $SiPh_3$ または C_6-C_{18} アリールで置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

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 、 F 、 C_1-C_5 アルキル、 $SiMe_3$ 、 $SiPh_3$ または C_6-C_{18} アリールで置換され、

$N(C_6-C_{18}アリール)_2$ 、

$N(C_3-C_{17}ヘテロアリール)_2$ 、及び

$N(C_3-C_{17}ヘテロアリール)(C_6-C_{18}アリール)$ 。

【0359】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-6}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択

される：

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 OPh (Ph =フェニル)、 SPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、 $Si(Me)_3$ 、 $Si(Ph)_3$ 、

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、 Ph 、 CN 、 CF_3 または F で置換され、

C_6-C_{18} アリール、

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 、 F 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 $SiMe_3$ 、 $SiPh_3$ または Ph で置換され、

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

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 、 F 、 Me 、 iPr 、 tBu 、 $SiMe_3$ 、 $SiPh_3$ または Ph で置換される。

【0360】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-6}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、重水素、 $N(Ph)_2$ 、 CN 、 F 、 Me 、 iPr 、 tBu 、

Ph 、

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

C_3-C_{17} ヘテロアリール、

ここで、選択的に1以上の水素原子は、独立して、重水素、 CN 、 Me 、 iPr 、 tBu または Ph で置換される。

【0361】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

$R^{DABNA-6}$ は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu 、

Ph 、

ここで、選択的に1以上の水素原子は、独立して、重水素、 Me 、 iPr 、 tBu または Ph によって置換される。

【0362】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれが化学式 $DABNA-I$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、 Y^a 及び／または Y^b が $NR^{DABNA-3}$ 、 $C(R^{DABNA-3})_2$ 、 $Si(R^{DABNA-3})_2$ または $BR^{DABNA-3}$ である場合、1つまたは2つの置換基 $R^{DABNA-3}$ は、1つまたは2つの隣接した環 A' 及び B' ($a\gamma=NR^{DABNA-3}$ 、 $C(R^{DABNA-3})_2$ 、 $Si(R^{DABNA-3})_2$ または $BR^{DABNA-3}$ の場合)、または A' 及び C' ($b\gamma=NR^{DABNA-3}$ 、 $C(R^{DABNA-3})_2$ 、 $Si(R^{DABNA-3})_2$ または $BR^{DABNA-3}$)と結合しない。

【0363】

一実施形態において、本発明の文脈において小FWHMエミッタ S^B は、選択的に、前述の化学式 $DABNA-I$ の多量体 (例えば、二量体) でもあり、これは、それらの構造が1以上のサブユニットを含み、それらそれぞれは化学式 $DABNA-I$ による構造を有するということを意味する。この場合、当業者は、化学式 $DABNA-I$ による2以上の

10

20

30

40

50

サブユニットが、例えば、互いに共役し、好ましくは、互いに縮合していてもよいことを理解するであろう（すなわち、少なくとも1つの結合を共有し、ここで、その結合を形成する原子に結合されたそれぞれの置換基がそれ以上存在しない）。また、2以上のサブユニットは、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有することができる。これは、例えば、小FWHMエミッタ S^B がそれぞれ化学式 $DABNA-I$ の構造を有する2以上のサブユニットを含むということを意味し、ここで、それら2つのサブユニットは、1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有する（すなわち、それぞれの環は、2つのサブユニットの一部である）。その結果、それぞれの多量体（例えば、二量体）エミッタ S^B は、共有環が一個のみ存在し、化学式 $DABNA-I$ による2つの全体サブユニットを含まない。それにもかかわらず、当業者は、本願において当該エミッタが依然として化学式 $DABNA-I$ の多量体（例えば、化学式 $DABNA-I$ の構造を有する2つのサブユニットが含まれる場合、二量体）と見なされることを理解するであろう。1以上の環を共有する多量体に対しても同様である。多量体は、それぞれ化学式 $DABNA-I$ の構造を有する2つのサブユニットを含む二量体であることが好ましい。

【0364】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、前述のように、化学式 $DABNA-I$ の二量体であり、これは、エミッタがそれぞれ化学式 $DABNA-I$ による構造を有する2つのサブユニットを含むことを意味する。

【0365】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれは、2以上、好ましくは、正確に2つの化学式 $DABNA-I$ による構造（すなわち、サブユニット）を含むか、あるいはそれから構成される。

【0366】

ここで、それらサブユニットは、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式 $DABNA-I$ の2つの構造の一部であってもよい）、ここで、共有環は、化学式 $DABNA-I$ の環A'、B'及びC'のうちいずれか1つであってもよいが、 $R^{DABNA-1}$ 、 $R^{DABNA-2}$ 、 $R^{DABNA-3}$ 、 $R^{DABNA-4}$ 、 $R^{DABNA-5}$ 及び $R^{DABNA-6}$ 、特に $R^{DABNA-3}$ から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような2以上の隣接した置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環であってもよく、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式 $DABNA-I$ の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができる（すなわち、共有環は、例えば、エミッタ内に選択的に含まれた化学式 $DABNA-I$ の2つの構造の環C'であってもよく、共有環は、例えば、エミッタ内に選択的に含まれた化学式 $DABNA-I$ の1つの構造の環B'及び他の構造の環C'であってもよい）。

【0367】

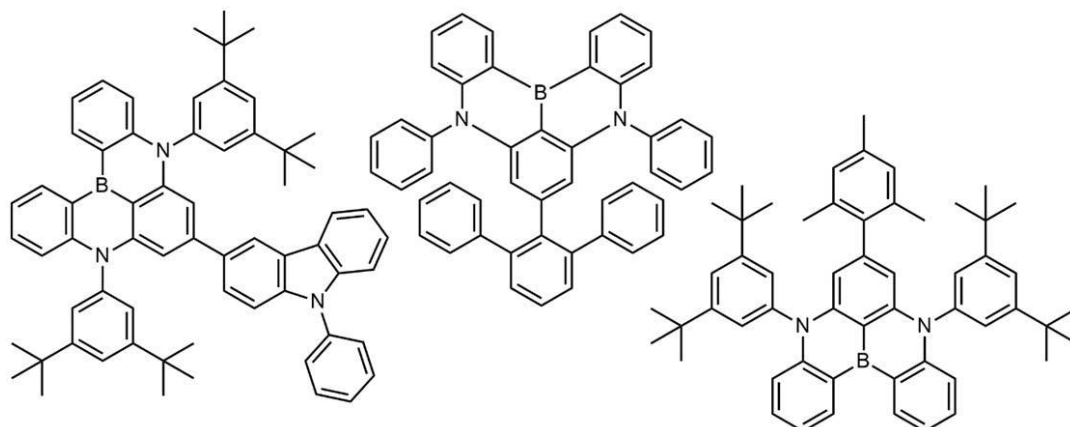
本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、1以上の小FWHMエミッタ S^B のうち少なくとも1つ、好ましくは、それぞれは、2以上、好ましくは、正確に2つの化学式 $DABNA-I$ による構造（すなわち、サブユニット）を含むか、あるいはそれからなり、

ここで、 $R^{DABNA-1}$ 、 $R^{DABNA-2}$ 、 $R^{DABNA-3}$ 、 $R^{DABNA-4}$ 、 $R^{DABNA-5}$ 及び $R^{DABNA-6}$ のうち少なくとも1つが、化学式 $DABNA-I$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、 $R^{DABNA-1}$ 、 $R^{DABNA-2}$ 、 $R^{DABNA-3}$ 、 $R^{DABNA-4}$ 、 $R^{DABNA-5}$ 及び $R^{DABNA-6}$ のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式 $DABNA-I$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

【0368】

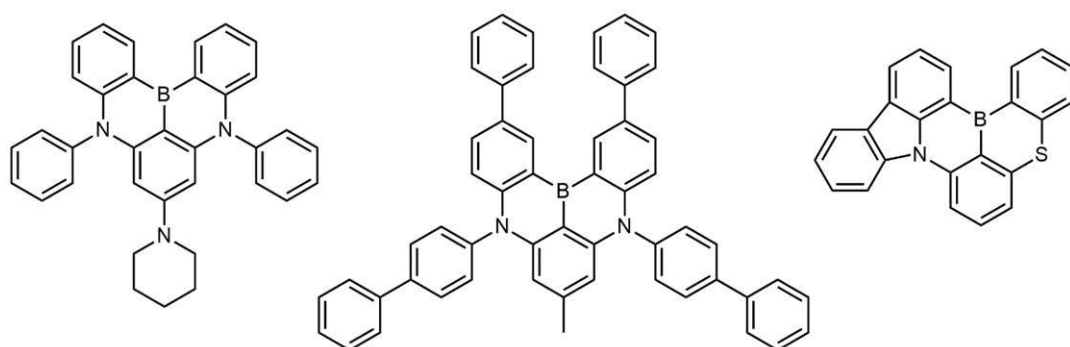
本発明による小FWHMエミッタ S^B として使用可能な、化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれから構成されるエミッタの非限定的な例が下記に示されている：

【化159】



10

【化160】



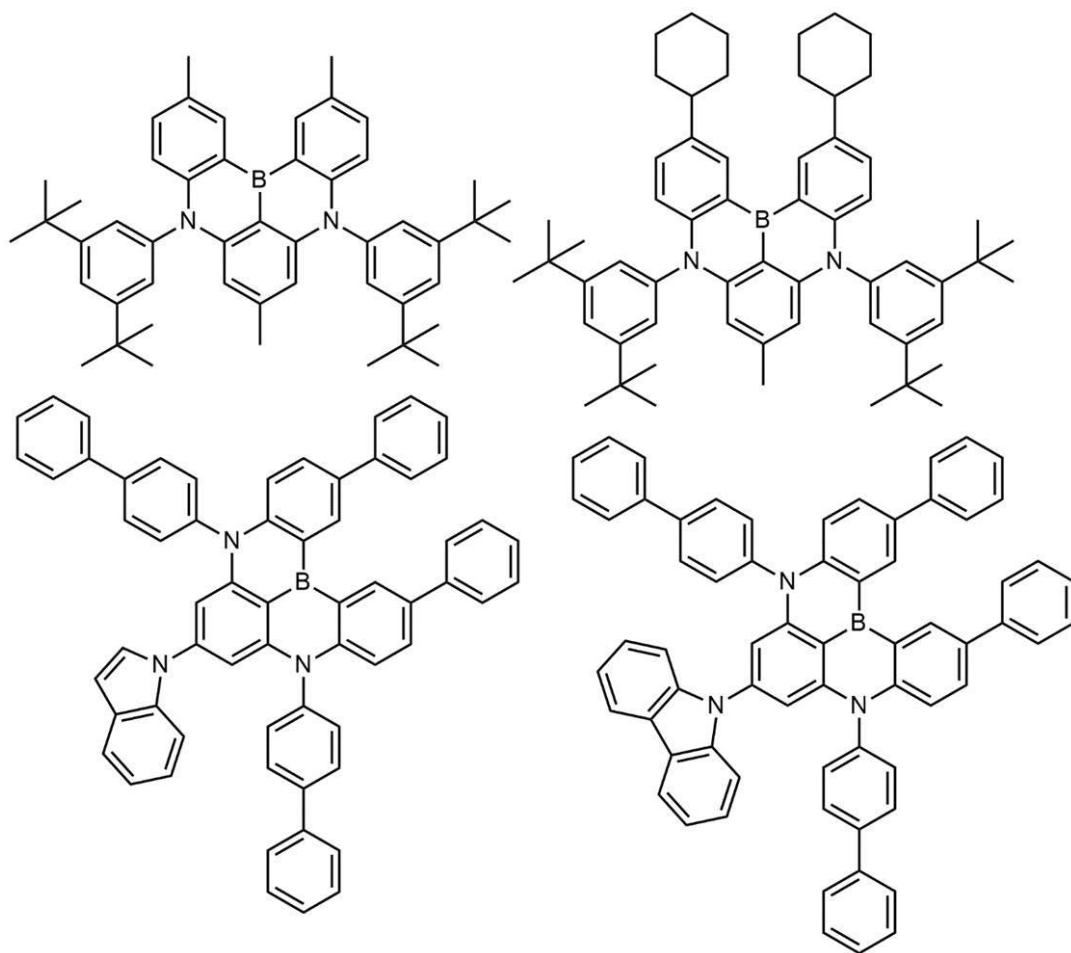
20

30

40

50

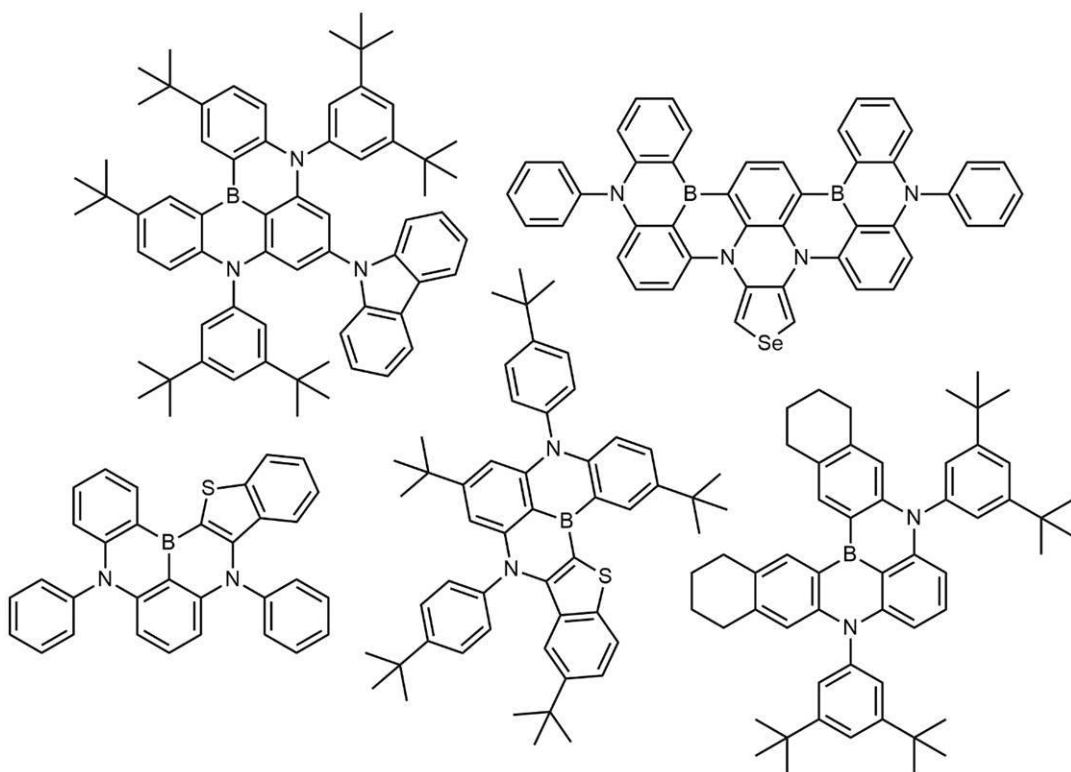
【化 1 6 1】



10

20

【化 1 6 2】

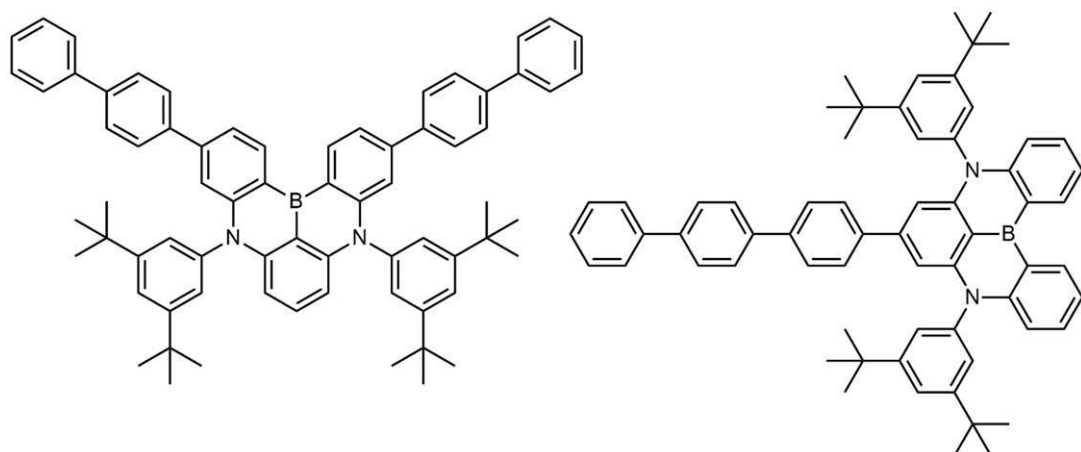


30

40

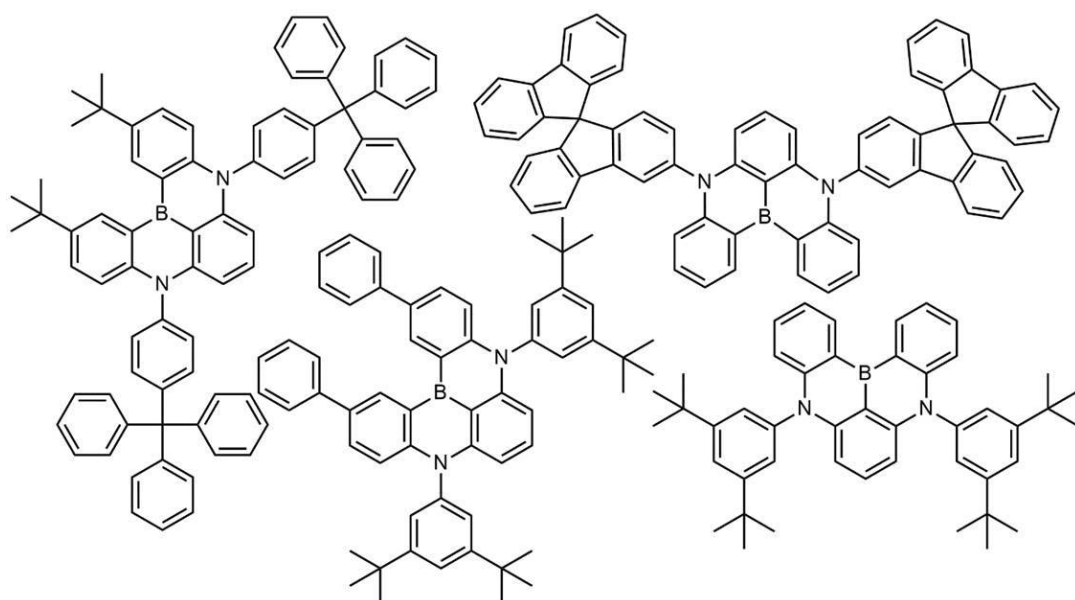
50

【化 1 6 3】



10

【化 1 6 4】



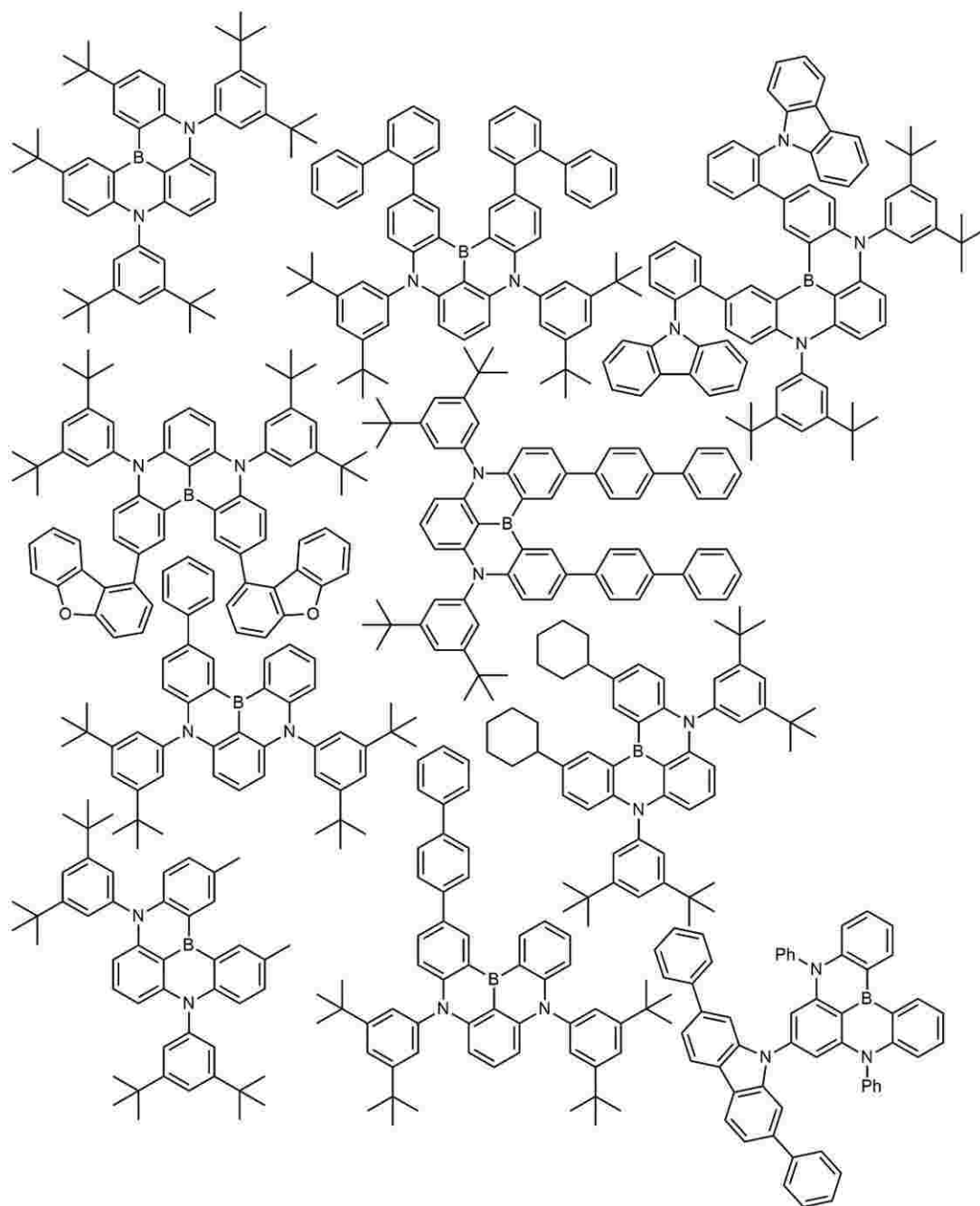
20

30

40

50

【化 1 6 5】



10

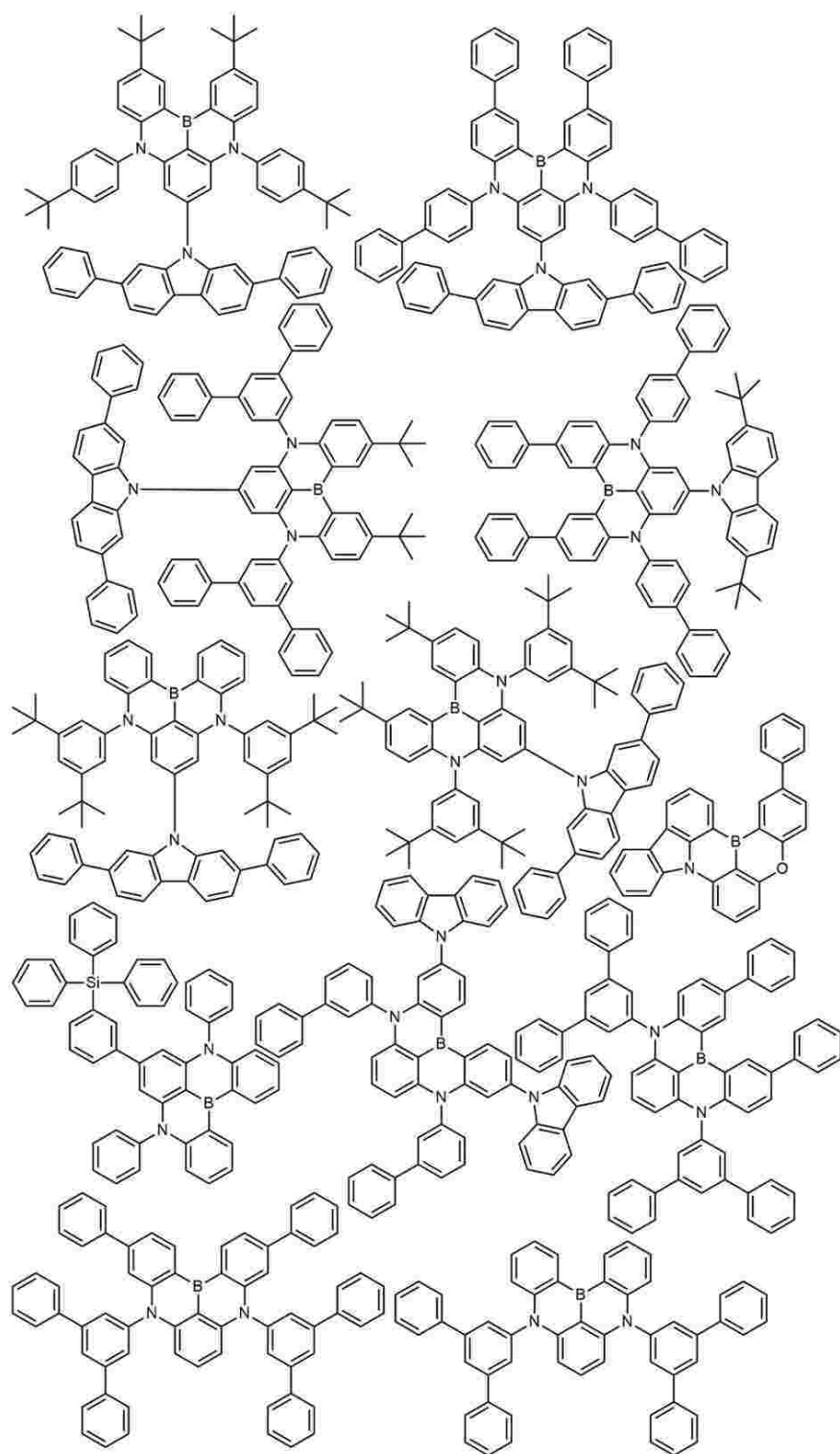
20

30

40

50

【化 1 6 6】



10

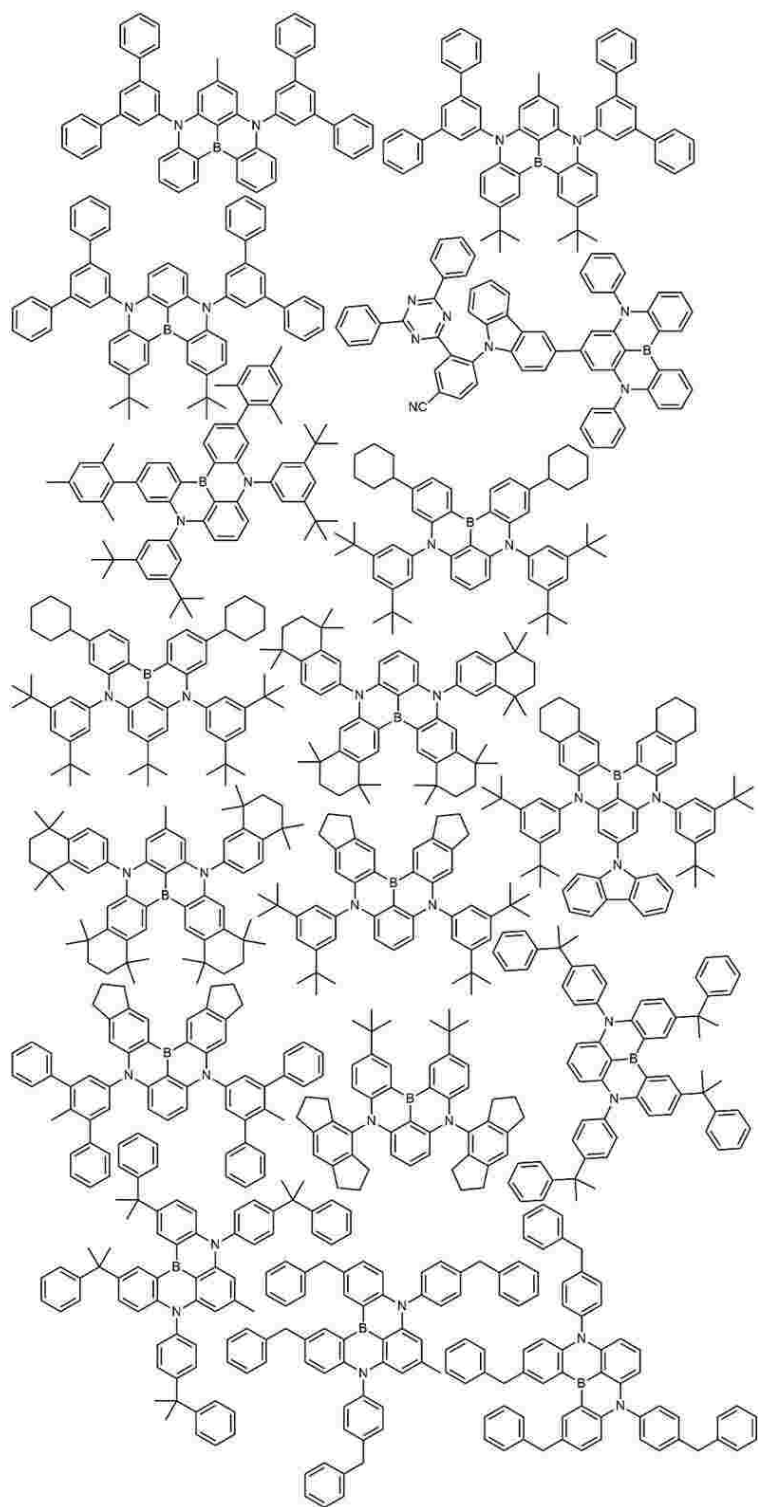
20

30

40

50

【化 1 6 7】



10

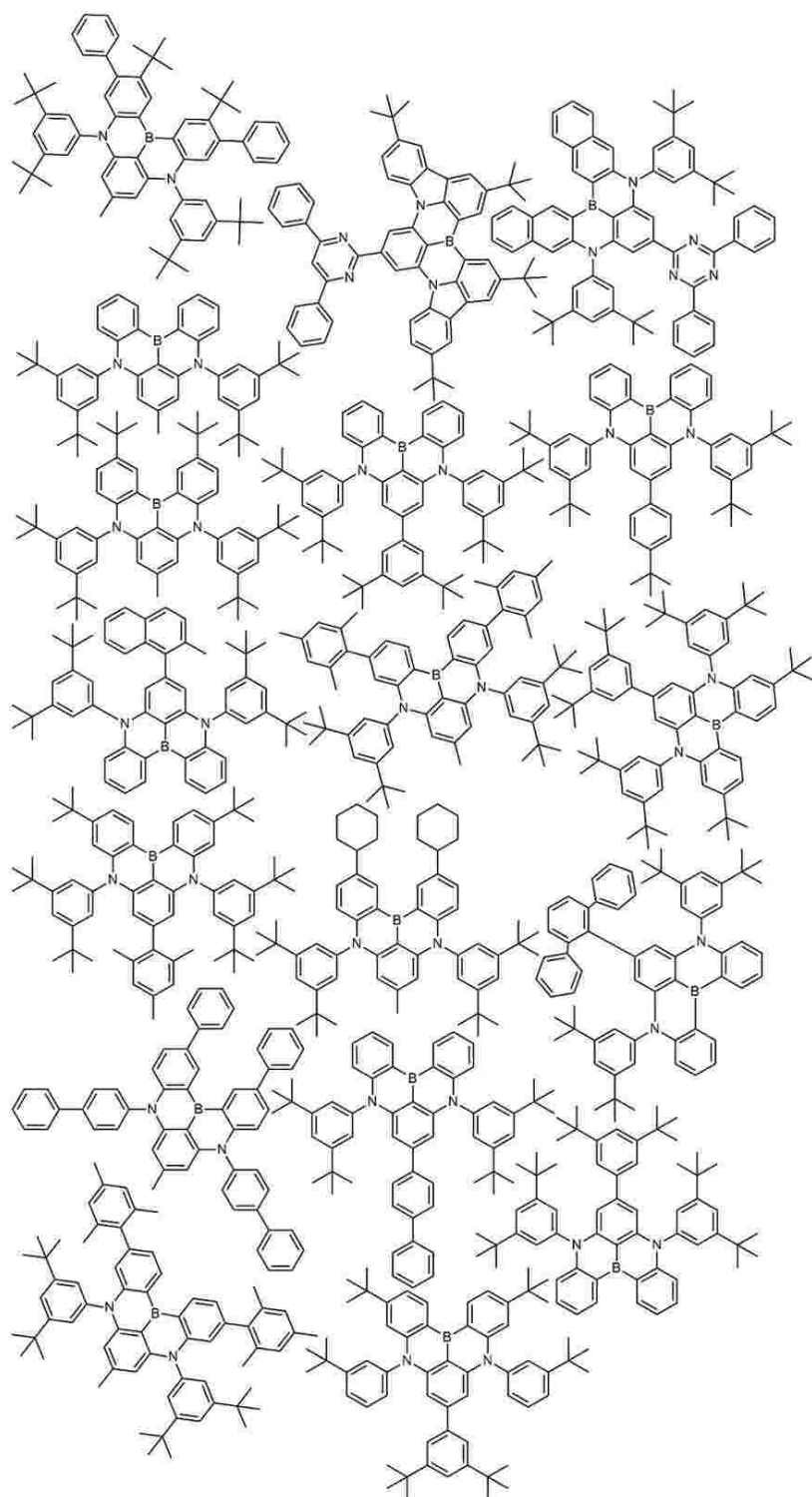
20

30

40

50

【化 1 6 8】



10

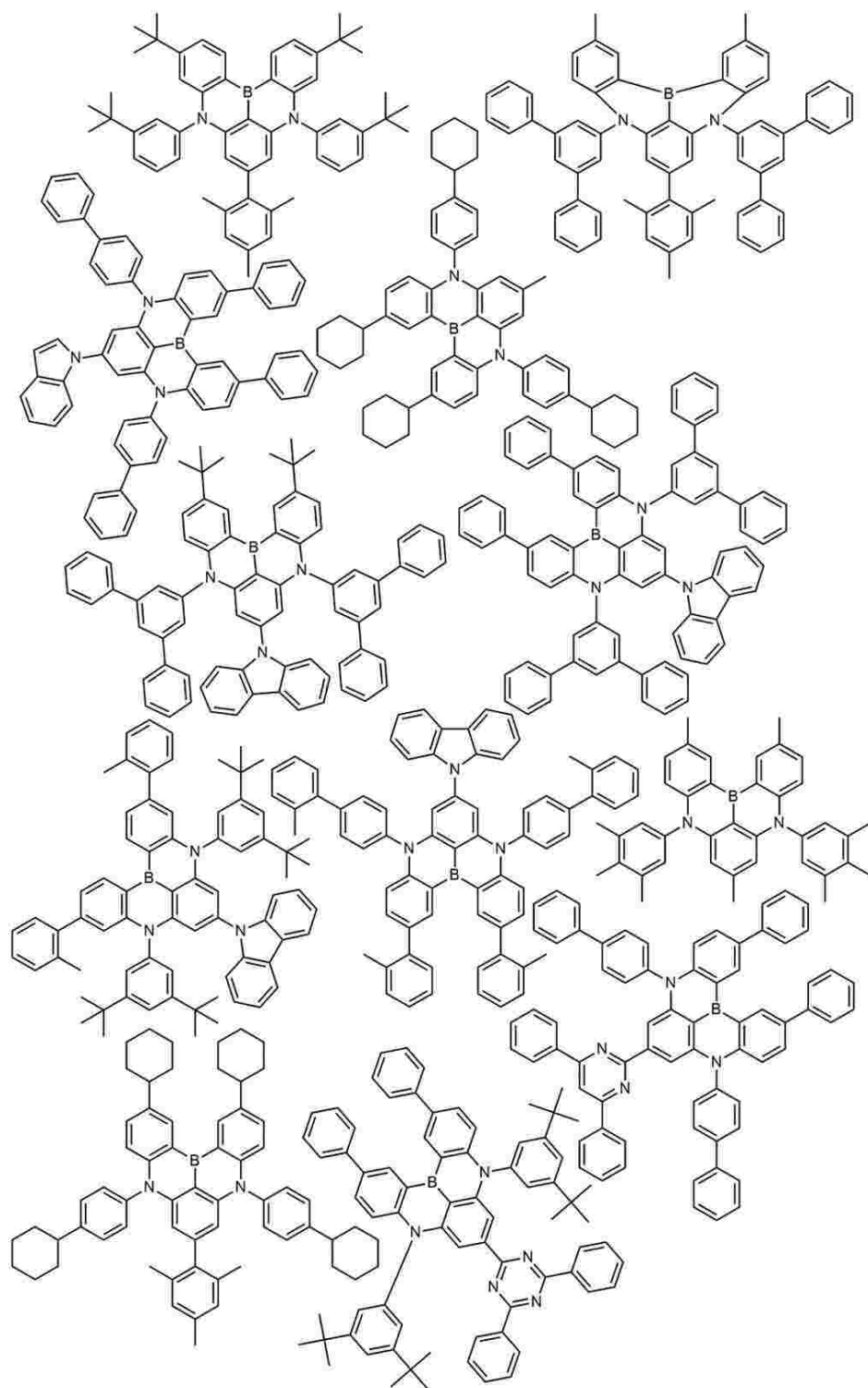
20

30

40

50

【化 1 6 9】



10

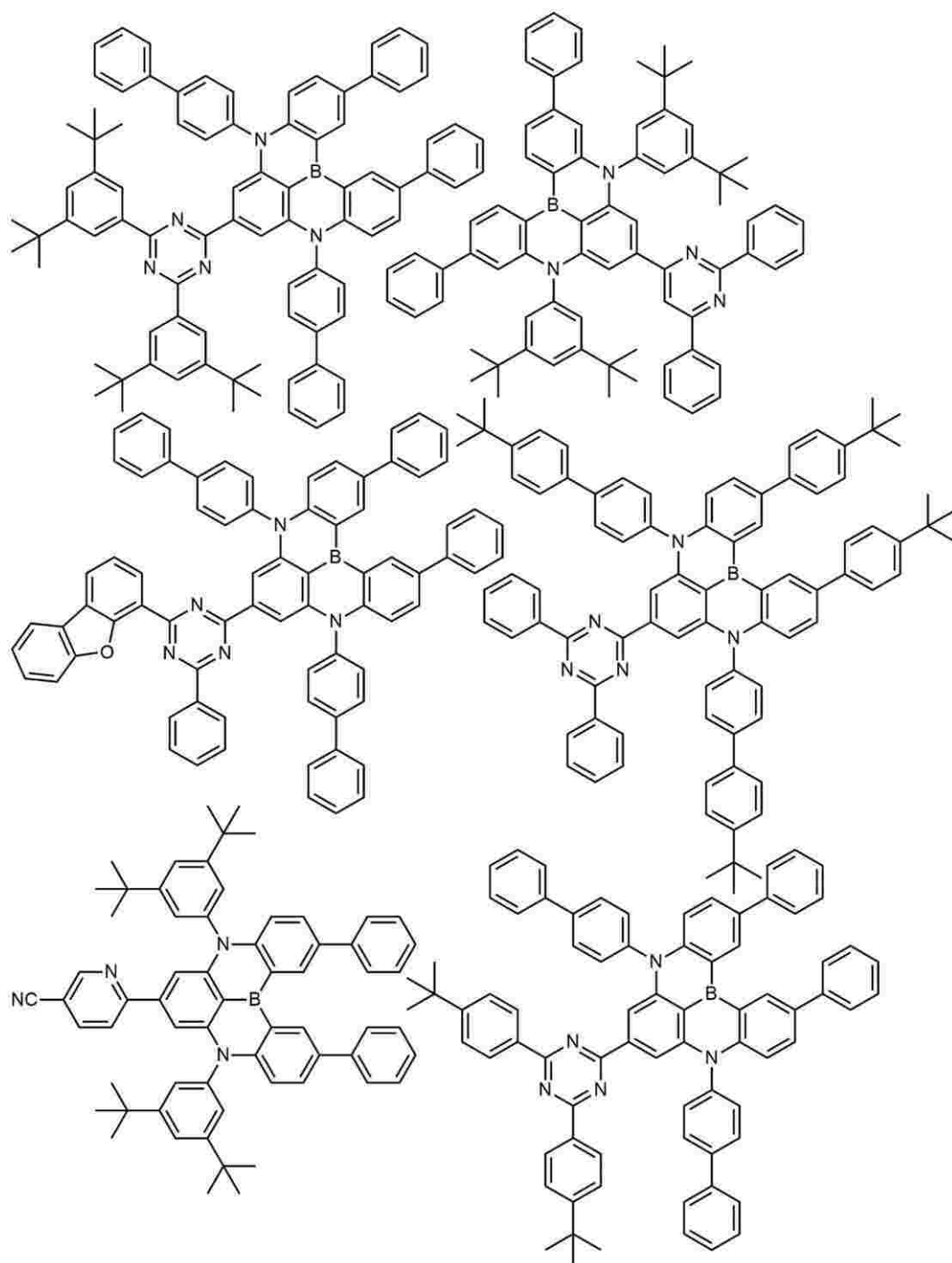
20

30

40

50

【化 1 7 0】



10

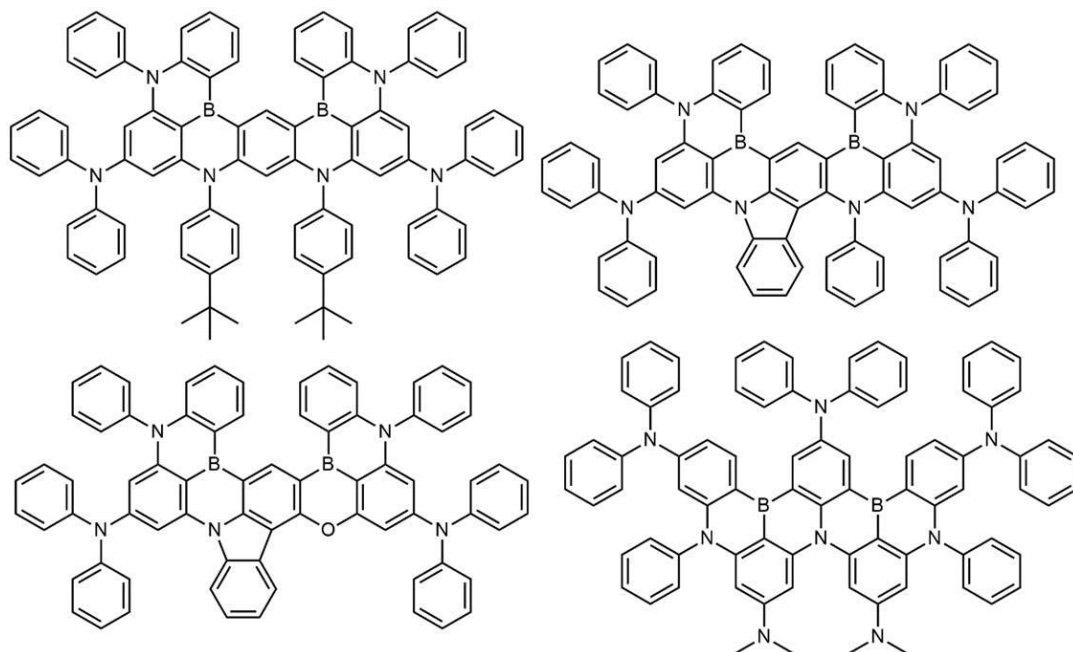
20

30

40

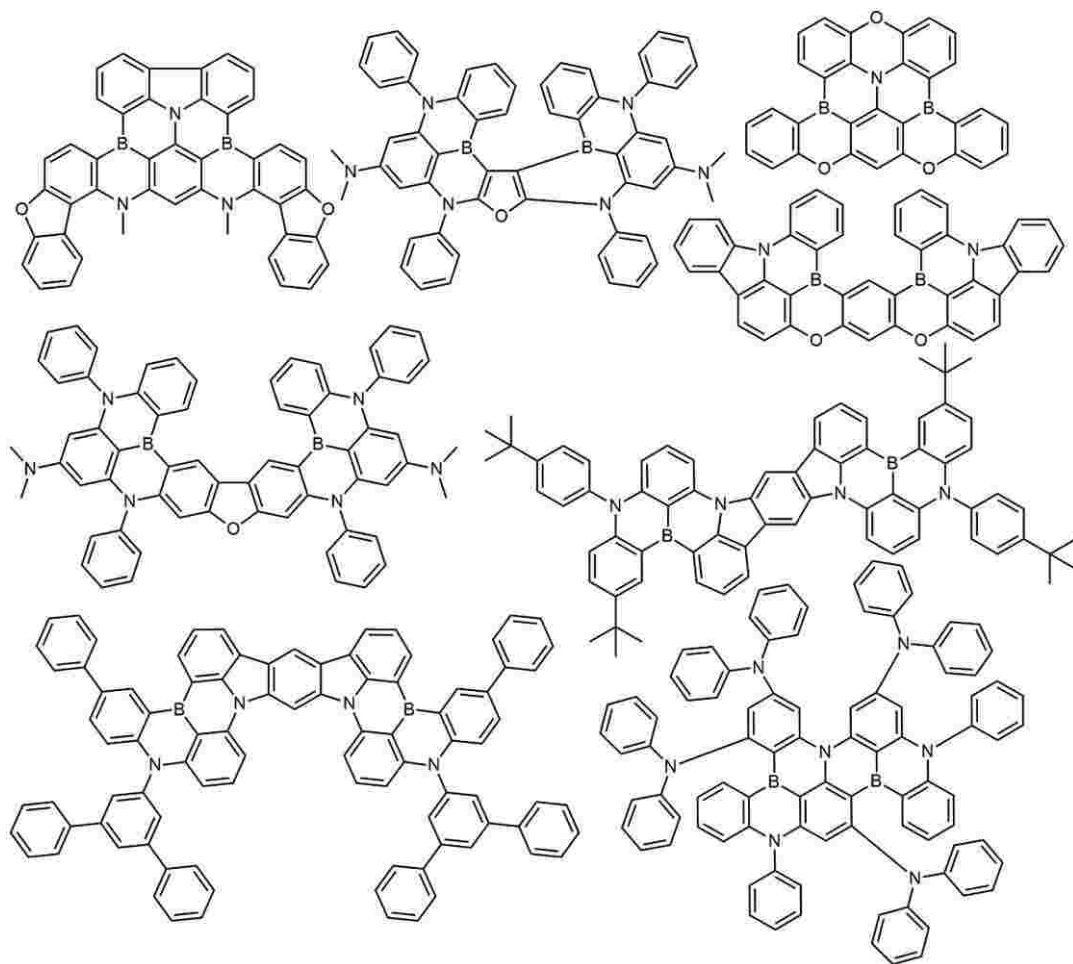
50

【化 1 7 1】



10

【化 1 7 2】



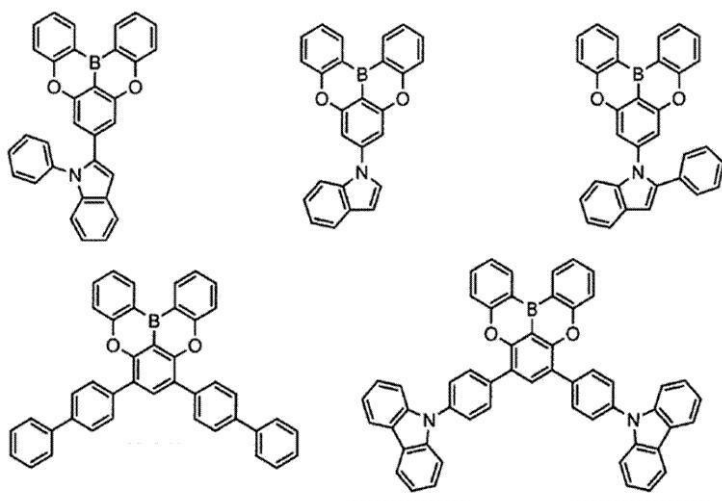
20

30

40

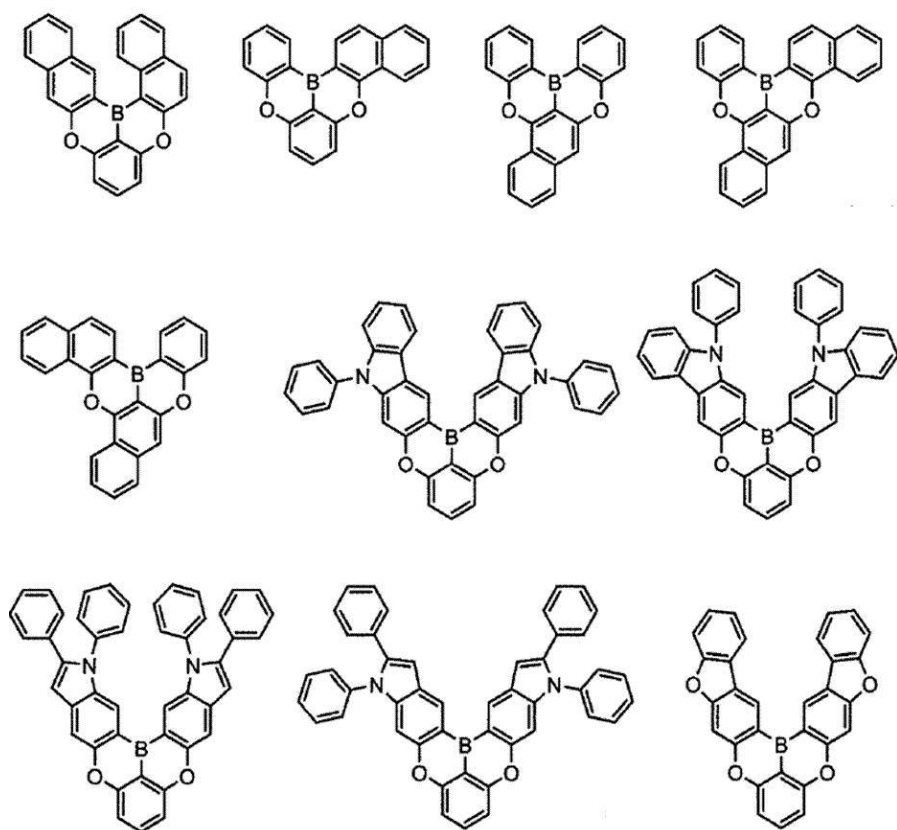
50

【化 1 7 3】



10

【化 1 7 4】



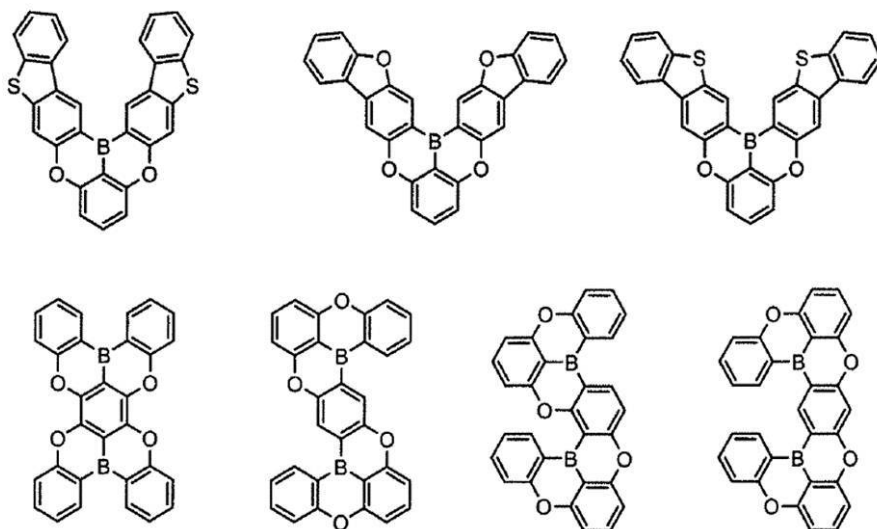
20

30

40

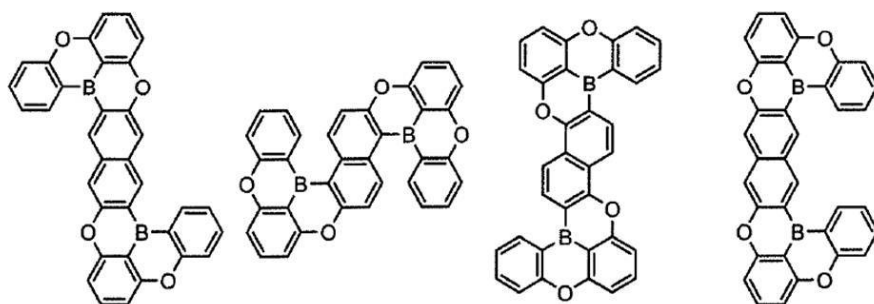
50

【化 1 7 5】



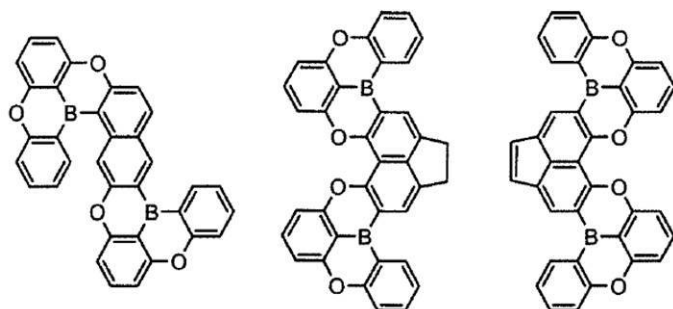
10

【化 1 7 6】



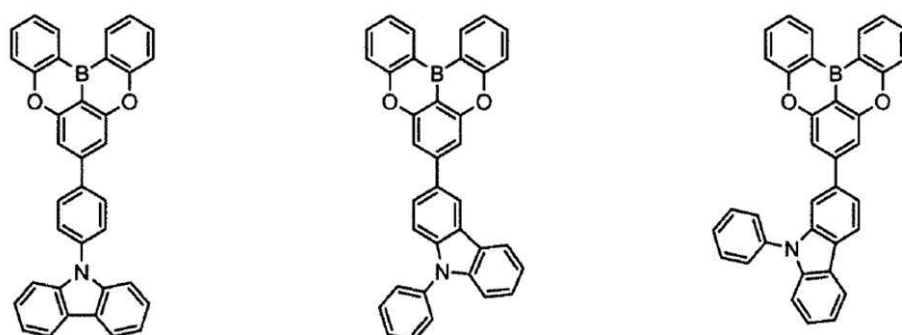
20

【化 1 7 7】



30

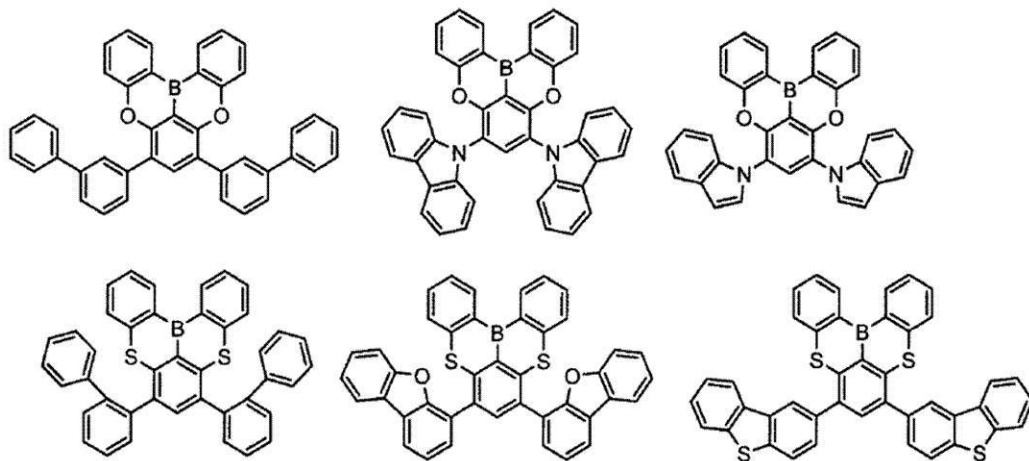
【化 1 7 8】



40

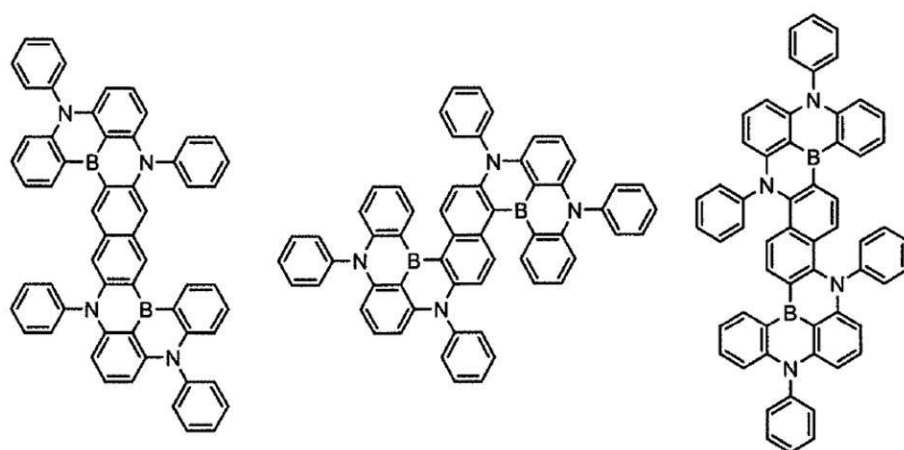
50

【化 1 7 9】



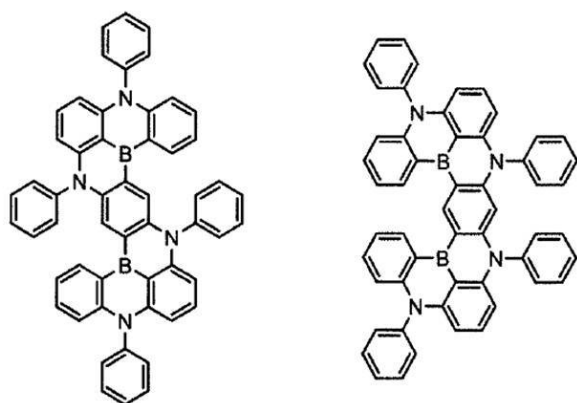
10

【化 1 8 0】



20

【化 1 8 1】

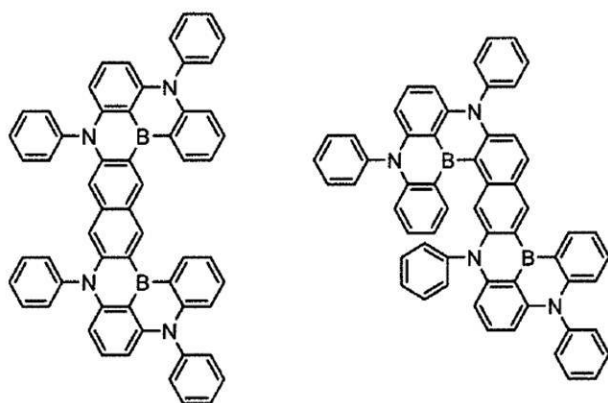


30

40

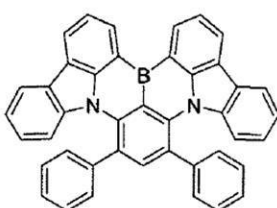
50

【化 1 8 2】



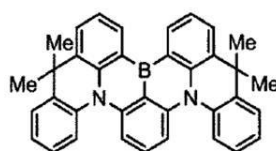
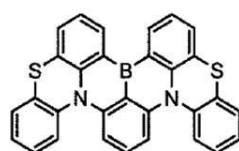
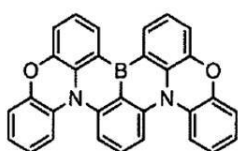
10

【化 1 8 3】

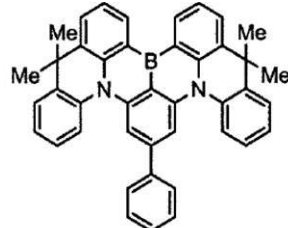
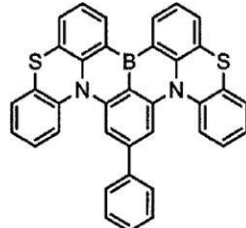
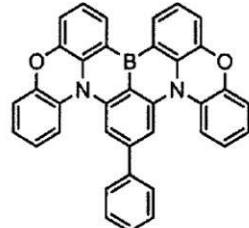


20

【化 1 8 4】

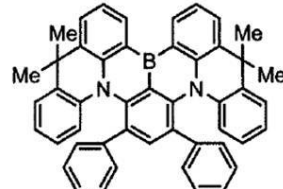
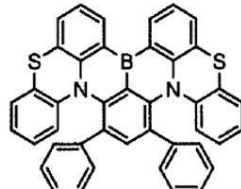
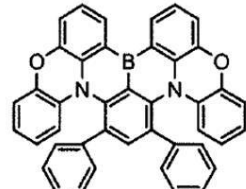


【化 1 8 5】



30

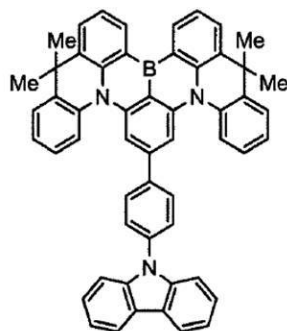
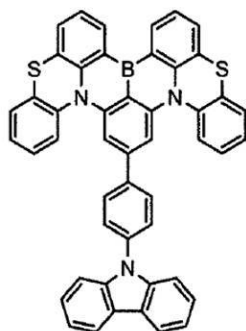
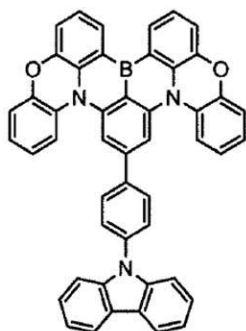
【化 1 8 6】



40

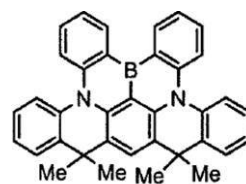
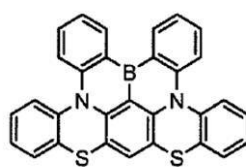
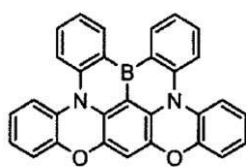
50

【化 1 8 7】

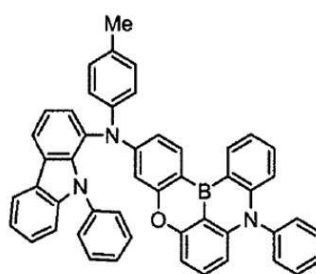
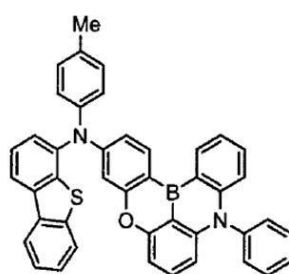
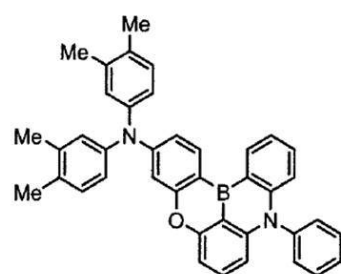


10

【化 1 8 8】

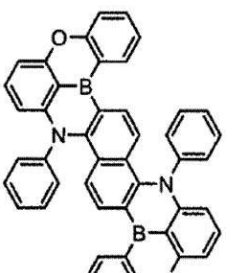
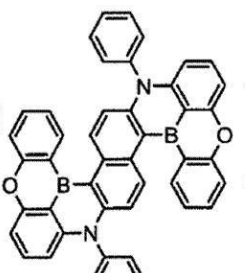
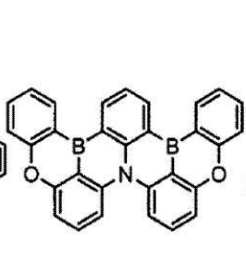
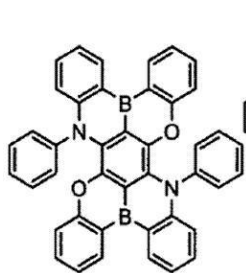


【化 1 8 9】



20

【化 1 9 0】

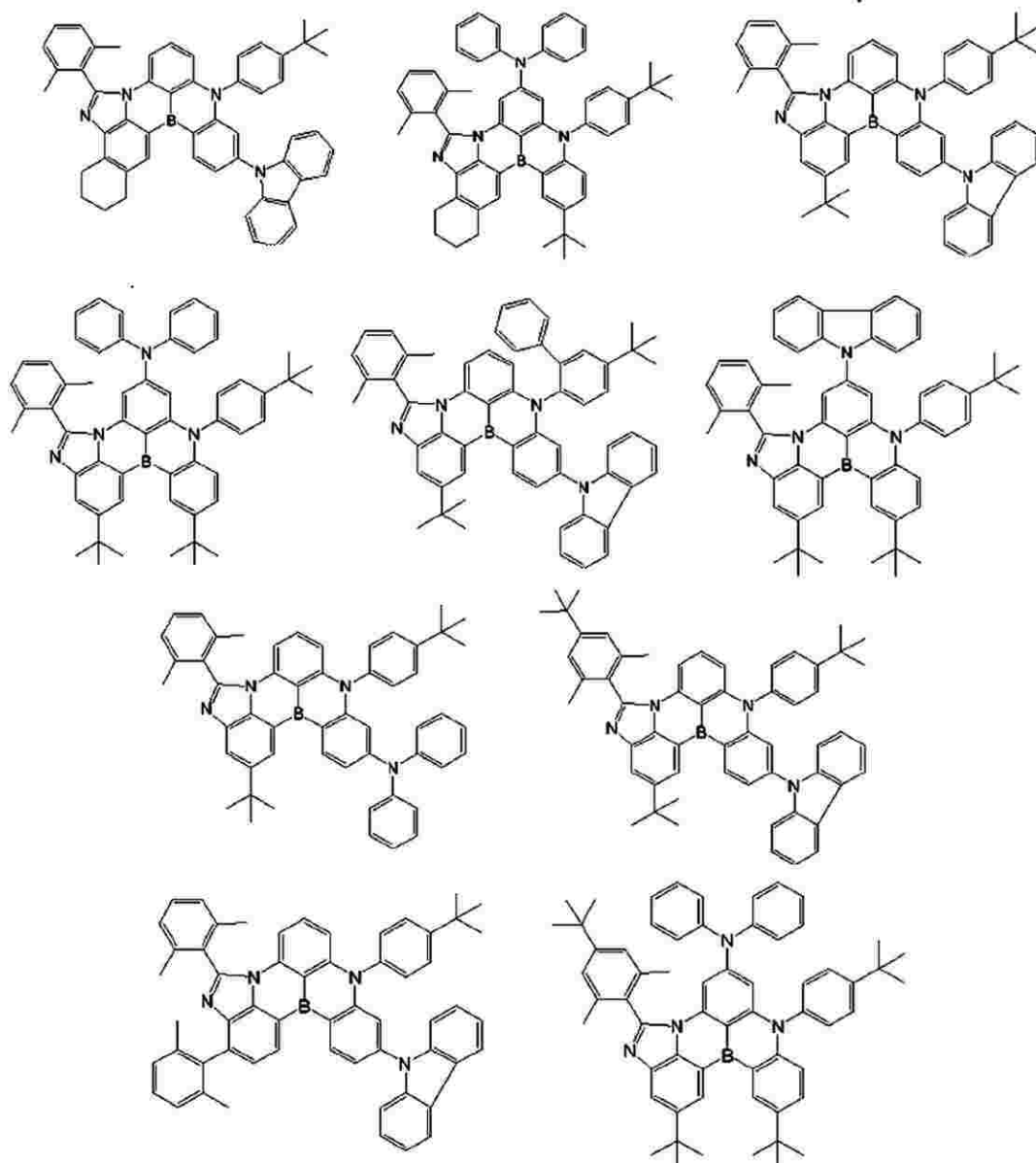


30

40

50

【化 1 9 1】



10

20

30

40

50

とも0であり、

V^1 は、窒素(N)及び CR^{BNE-V} から選択され、

V^2 は、窒素(N)及び CR^{BNE-I} から選択され、

X^3 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^{BNE-3}$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

Y^2 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^{BNE-3}$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 S 、 $S(O)$ 及び $S(O)_2$ から構成される群から選択され、

R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} は、それぞれ互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(OR^{BNE-5})_2$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-5} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-d} 、 R^{BNE-d} 及び R^{BNE-e} は、互いに独立して、下記から構成される群

10

20

30

40

50

から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(OR^{BNE-5})_2$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-5} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

R^{BNE-a} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(OR^{BNE-5})_2$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-5} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

10

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

20

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-5} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され

、
水素、重水素、 $N(R^{BNE-6})_2$ 、 OR^{BNE-6} 、 $Si(R^{BNE-6})_3$ 、 $B(OR^{BNE-6})_2$ 、 $B(R^{BNE-6})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-6} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

30

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、

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

40

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、

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

50

C_2-C_{40} アルケニル、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-6}C \equiv CR^{BNE-6}$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R^{BNE-6})_2$ 、 $Ge(R^{BNE-6})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{BNE-6}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-6} 、 O 、 S または $CONR^{BNE-6}$ で置換され、
 C_2-C_{40} アルキニル、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-6}C \equiv CR^{BNE-6}$ 、 $C \equiv C$ 、 $Si(R^{BNE-6})_2$ 、 $Ge(R^{BNE-6})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{BNE-6}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-6} 、 O 、 S または $CONR^{BNE-6}$ で置換され、
 C_6-C_{60} アリール、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、及び
 C_2-C_{57} ヘテロアリール、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 R^{BNE-6} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

10

水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、
 C_1-C_5 アルキル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、 Ph または F で置換され、
 C_1-C_5 アルコキシ、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、または F で置換され、
 C_1-C_5 チオアルコキシ、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、または F で置換され、
 C_2-C_5 アルケニル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、または F で置換され、
 C_2-C_5 アルキニル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、または F で置換され、

20

30

C_6-C_{18} アリール、
 これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、
 C_2-C_{17} ヘテロアリール、
 これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、
 $N(C_6-C_{18}アリール)_2$ 、
 $N(C_2-C_{17}ヘテロアリール)_2$ 、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、 $R^{BNE-III}$ 及び R^{BNE-e} は、選択的に結合して直接単結合を形成し、
 ここで、置換基 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-d} 、 $R^{BNE-d'}$ 、 R^{BNE-e} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 R^{BNE-4} 及び R^{BNE-5} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、
 ここで、置換基 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 R^{BNE-5} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、
 ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $BNE-1$ の構造は、互いに接合

40

50

され、好ましくは、少なくとも1つ、より好ましくは、正確に1つの結合を共有することによって互いに縮合され、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式BNE-1の構造がエミッタに存在し、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式BNE-1の2つの構造の一部であってもよい）、これは、好ましくは、化学式BNE-1の環a、b及びc'のうちいずれか1つであるが、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-5}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}及びR^{BNE-d'}から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような2以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環でもあり、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式BNE-1の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミッタ内に含まれた化学式BNE-1の2つの構造の環c'であってもよく、共有環は、例えば、選択的にエミッタ内に含まれた化学式BNE-1の1つの構造の環b及び他の構造の環c'であってもよい）、

10

ここで、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうち少なくとも1つが、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

20

【0370】

本発明の一実施形態において、発光層Bにおいて、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含む。

【0371】

本発明の一実施形態において、1つの小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1（V¹はCR^{BNE-V}であり、V²はCR^{BNE-I}である）による構造を含むか、あるいはそれから構成される。

30

【0372】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、V¹及びV²は、両方とも窒素（N）である。

【0373】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、V¹は窒素（N）であり、V²はCR^{BNE-I}である。

40

【0374】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、V¹はCR^{BNE-V}であり、V²は窒素（N）である。

【0375】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、c及びdは、両方とも0である。

【0376】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構

50

造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、 c は 0 であり、 d は 1 である。

【0377】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、 c は 1 であり、 d は 0 である。

【0378】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、 c 及び d は、両方とも 1 である。

【0379】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

X^3 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=O$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 S 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ から構成される群から選択され、

Y^2 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 $C=O$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 S 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ から構成される群から選択される。

【0380】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

X^3 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 S 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ から構成される群から選択され、

Y^2 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 S 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ から構成される群から選択される。

【0381】

本発明の一実施形態において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、1 以上の小 FWHM エミッタ S^B の少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれは、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

X^3 は、直接結合、 $CR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ 、 NR^{BNE-3} 、 O 、 S 、 $SiR^{BNE-3}R^{BNE-4}$ から構成される群から選択され、

Y^2 は、直接結合である。

【0382】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

X^3 は、直接結合または NR^{BNE-3} であり、

Y^2 は、直接結合である。

【0383】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

X^3 は、 NR^{BNE-3} であり、

Y^2 は、直接結合である。

【0384】

本発明の一実施形態において、小 FWHM エミッタ S^B は、化学式 BNE-1 による構造を含むか、あるいはそれからなり、

R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} は、それぞれ互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(OR^{BNE-5})_2$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-5} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_{1-40} アルキル、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-5}C=CR^{BNE-5}$ 、 $C\equiv C$ 、 Si

10

20

30

40

50

(R^{BNE-5})₂、 $Ge(R^{BNE-5})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-5})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^{BNE-5}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-5})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-5} 、 O 、 S または $CONR^{BNE-5}$ で選択的に置換され、

C_{1-C40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_{1-C40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_{2-C40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_{2-C40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_{6-C60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_{2-C57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-d} 、 R^{BNE-d} 及び R^{BNE-e} は、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_{1-C40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_{6-C60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、及び

C_{2-C57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

R^{BNE-a} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(OR^{BNE-5})_2$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-5} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_{1-C40} アルキル、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルケニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_2-C_{40} アルキニル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{60} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{57} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-5} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-6})_2$ 、 OR^{BNE-6} 、 $Si(R^{BNE-6})_3$ 、 $B(OR^{BNE-6})_2$ 、 $B(R^{BNE-6})_2$ 、 OSO_2R^{BNE-6} 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{40} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、

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

C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、

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

$C_1 - C_{40}$ チオアルコキシ、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-6}C=CR^{BNE-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 Si
 $(R^{BNE-6})_2$ 、 $Ge(R^{BNE-6})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 C
 $=Se$ 、 $C=NR^{BNE-6}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-6}
 、 O 、 S または $CONR^{BNE-6}$ で選択的に置換され、

$C_2 - C_{40}$ アルケニル、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-6}C=CR^{BNE-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 Si
 $(R^{BNE-6})_2$ 、 $Ge(R^{BNE-6})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 C
 $=Se$ 、 $C=NR^{BNE-6}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-6}
 、 O 、 S または $CONR^{BNE-6}$ で選択的に置換され、

10

$C_2 - C_{40}$ アルキニル、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^{BNE-6}C\equiv CR^{BNE-6}$ 、 $C\equiv C$ 、 Si
 $(R^{BNE-6})_2$ 、 $Ge(R^{BNE-6})_2$ 、 $Sn(R^{BNE-6})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 C
 $=Se$ 、 $C=NR^{BNE-6}$ 、 $P(=O)(R^{BNE-6})$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^{BNE-6}
 、 O 、 S または $CONR^{BNE-6}$ で選択的に置換され、

$C_6 - C_{60}$ アリール、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、及び
 $C_2 - C_{57}$ ヘテロアリール、
 これは、1以上の置換基 R^{BNE-6} で選択的に置換され、
 R^{BNE-6} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され

20

、
 水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、
 $C_1 - C_5$ アルキル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、 Ph
 または F で置換され、

$C_1 - C_5$ アルコキシ、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、また
 は F で置換され、

30

$C_1 - C_5$ チオアルコキシ、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、また
 は F で置換され、

$C_2 - C_5$ アルケニル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、また
 は F で置換され、

$C_2 - C_5$ アルキニル、
 ここで、1以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、 CN 、 CF_3 、また
 は F で置換され、

40

$C_6 - C_{18}$ アリール、
 これは、1以上の $C_1 - C_5$ アルキル置換基で選択的に置換され、
 $C_2 - C_{17}$ ヘテロアリール、
 これは、1以上の $C_1 - C_5$ アルキル置換基で選択的に置換され、
 $N(C_6 - C_{18}$ 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、 $R^{BNE-III}$ 及び R^{BNE-e} は、選択的に結合して直接単結合を形成し、
 ここで、置換基 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-d} 、 $R^{BNE-d'}$ 、 R^{BNE-e} 、 $R^{BNE-3'}$ 、
 R^{BNE-4} 及び R^{BNE-5} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族ま

50

たは芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、置換基 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 R^{BNE-5} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $BNE-1$ の構造は、互いに接合され、好ましくは、少なくとも1つ、より好ましくは、正確に1つの結合を共有することによって互いに縮合され、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $BNE-1$ の構造がエミッタ内に存在し、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式 $BNE-1$ の2つの構造の一部であってもよい）、これは、好ましくは、化学式 $BNE-1$ の環 a 、 b 及び c' のうちいずれか1つであるが、 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-5} 、 R^{BNE-6} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 、 R^{BNE-V} 、 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-e} 、 R^{BNE-d} 及び $R^{BNE-d'}$ から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような2以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環でもあり、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式 $BNE-1$ の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式 $BNE-1$ の2つの構造の環 c' であってもよく、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式 $BNE-1$ の1つの構造の環 b 及び他の構造の環 c' であってもよい）、

ここで、選択的に、 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 R^{BNE-5} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-6} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 、 R^{BNE-V} 、 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-e} 、 R^{BNE-d} または $R^{BNE-d'}$ のうち少なくとも1つが、化学式 $BNE-1$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に、 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 R^{BNE-5} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-6} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 、 R^{BNE-V} 、 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-e} 、 R^{BNE-d} または $R^{BNE-d'}$ のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式 $BNE-1$ の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

【0385】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、化学式 $BNE-1$ による構造を含むか、あるいはそれからなり、

R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 $R^{BNE-4'}$ 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} は、それぞれ互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_{1-C18} アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{30} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{29} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-d} 、 R^{BNE-d} 及び R^{BNE-e} は、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{18} アルキル、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{30} アリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{29} ヘテロアリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

R^{BNE-a} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、

C_1-C_{18} アルキル、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

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

C_6-C_{30} アリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{29} ヘテロアリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-5} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

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

C_1-C_5 アルコキシ、

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

C_1-C_5 チオアルコキシ、

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

C_2-C_5 アルケニル、

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

C_2-C_5 アルキニル、

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

C_6-C_{18} アリール、

これは、1 以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

C_2-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1 以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

$N(C_6-C_{18}$ アリール) $_2$ 、

10

20

30

40

50

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、置換基 R^{BNE-I}及びR^{BNE-e}は、選択的に結合して直接単結合を形成し、
 ここで、置換基 R^{BNE-a}、R^{BNE-d}、R^{BNE-d'}、R^{BNE-e}、R^{BNE-3'}、
 R^{BNE-4}及びR^{BNE-5}のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族ま
 たは芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、置換基 R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、
 R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}
 及びR^{BNE-V}のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族ま
 たはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式BNE-1の構造は、互いに接合
 され、好ましくは、少なくとも1つ、より好ましくは、正確に1つの結合を共有すること
 によって互いに縮合され、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式BNE-1の構造がエミッタに存
 在し、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有
 し（すなわち、当該環は、化学式BNE-1の2つの構造の一部であってもよい）、これ
 は、好ましくは、化学式BNE-1の環a、b及びc'のうちいずれか1つであるが、R^{BNE-1}、
 R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-5}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、
 R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}及びR^{BNE-d'}から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のよ
 うな2以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環であっても
 よく、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式BNE-1の2以上の構造の同一のま
 たは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミ
 ッタに含まれた化学式BNE-1の2つの構造の環c'であってもよく、共有環は、例えば
 、選択的にエミッタに含まれた化学式BNE-1の1つの構造の環b及び他の構造の環c'
 であってもよい）、

ここで、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、
 R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、
 R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}
 、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうち少なくとも1つが、化学式BNE-1の更なる化
 学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、
 R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、
 R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうちい
 ずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対す
 る結合によって代替される。

【0386】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構
 造を含むか、あるいはそれからなり、

R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}
 及びR^{BNE-V}は、それぞれ互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N (R^{BNE-5})₂、OR^{BNE-5}、Si (R^{BNE-5})₃、B (R^{BNE-5})₂、CF₃、CN、F、

C₁ - C₅アルキル、

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、

C₆ - C₁₈アリール、

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、及び

C₂ - C₁₇ヘテロアリール、

10

20

30

40

50

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、
 R^{BNE-d} 、 R^{BNE-d} 及び R^{BNE-e} は、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、 CF_3 、 CN 、 F 、
 C_1-C_5 アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-a} で選択的に置換され、

R^{BNE-a} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され

10

、
 水素、重水素、 $N(R^{BNE-5})_2$ 、 OR^{BNE-5} 、 $Si(R^{BNE-5})_3$ 、 $B(R^{BNE-5})_2$ 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C_2-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-5} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され

20

、
 水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

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

C_1-C_5 アルコキシ、

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

C_6-C_{18} アリール、

これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

C_2-C_{17} ヘテロアリール、

これは、1以上の C_1-C_5 アルキル置換基で選択的に置換され、

$N(C_6-C_{18} \text{アリール})_2$ 、

$N(C_2-C_{17} \text{ヘテロアリール})_2$ 、及び

$N(C_2-C_{17} \text{ヘテロアリール})(C_6-C_{18} \text{アリール})$ 、

ここで、 $R^{BNE-III}$ 及び R^{BNE-e} は、選択的に結合して直接単結合を形成し、

ここで、置換基 R^{BNE-a} 、 R^{BNE-d} 、 $R^{BNE-d'}$ 、 R^{BNE-e} 、 $R^{BNE-3'}$ 、 R^{BNE-4} 及び R^{BNE-5} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

30

40

ここで、置換基 R^{BNE-1} 、 R^{BNE-2} 、 $R^{BNE-1'}$ 、 $R^{BNE-2'}$ 、 R^{BNE-3} 、 R^{BNE-4} 、 R^{BNE-5} 、 R^{BNE-I} 、 R^{BNE-II} 、 $R^{BNE-III}$ 、 R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} のうち2以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $BNE-1$ の構造は、互いに接合され、好ましくは、少なくとも1つ、より好ましくは、正確に1つの結合を共有することによって互いに縮合され、

ここで、選択的に2以上、好ましくは、2つの化学式 $BNE-1$ の構造がエミッタに存在し、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式 $BNE-1$ の2つの構造の一部であってもよい）、これ

50

は、好ましくは、化学式BNE-1の環a、b及びc'のうちいずれか1つであるが、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-5}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}及びR^{BNE-d}から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような2以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環であってもよく、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式BNE-1の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式BNE-1の2つの構造の環c'であってもよく、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式BNE-1の1つの構造の環b及び他の構造の環c'であってもよい）、

10

ここで、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d}のうち少なくとも1つが、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d}のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

20

【0387】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、

R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}及びR^{BNE-V}は、それぞれ互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(R^{BNE-5})₂、OR^{BNE-5}、Si(R^{BNE-5})₃、B(R^{BNE-5})₂、CF₃、CN、F、

C₁-C₅アルキル、

30

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、

C₆-C₁₈アリール、

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、及び

C₂-C₁₇ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、

R^{BNE-d}、R^{BNE-d}及びR^{BNE-e}は、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、

C₁-C₅アルキル、

これは、1以上の置換基R^{BNE-a}で選択的に置換され、

40

C₆-C₁₈アリール、

これは、1以上の置換基R^{BNE-a}で選択的に置換され、及び

C₂-C₁₇ヘテロアリール、

これは、1以上の置換基R^{BNE-a}で選択的に置換され、

R^{BNE-a}は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

水素、重水素、N(R^{BNE-5})₂、OR^{BNE-5}、Si(R^{BNE-5})₃、B(R^{BNE-5})₂、CF₃、CN、F、

C₁-C₅アルキル、

これは、1以上の置換基R^{BNE-5}で選択的に置換され、

50

C₆ - C₁₈ アリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、及び

C₂ - C₁₇ ヘテロアリール、

これは、1 以上の置換基 R^{BNE-5} で選択的に置換され、

R^{BNE-5} は、それぞれの場合に互いに独立して、下記から構成される群から選択され

、
水素、重水素、OPh、CF₃、CN、F、

C₁ - C₅ アルキル、

ここで、1 以上の水素原子は、選択的に互いに独立して、重水素、CN、CF₃、または F で置換され、

C₆ - C₁₈ アリール、

これは、1 以上の C₁ - C₅ アルキル置換基で選択的に置換され、

C₂ - C₁₇ ヘテロアリール、

これは、1 以上の C₁ - C₅ アルキル置換基で選択的に置換され、

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、R^{BNE-III} 及び R^{BNE-e} は、選択的に結合して直接単結合を形成し、

ここで、置換基 R^{BNE-a}、R^{BNE-d}、R^{BNE-d'}、R^{BNE-e}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4} 及び R^{BNE-5} のうち 2 以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、置換基 R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV} 及び R^{BNE-V} のうち 2 以上は、選択的に互いに単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ環系を形成し、

ここで、選択的に 2 以上、好ましくは、2 つの化学式 BNE-1 の構造は、互いに接合され、好ましくは、少なくとも 1 つ、より好ましくは、正確に 1 つの結合を共有することによって互いに縮合され、

ここで、選択的に 2 以上、好ましくは、2 つの化学式 BNE-1 の構造がエミッタに存在し、少なくとも 1 つ、好ましくは、正確に 1 つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有し（すなわち、当該環は、化学式 BNE-1 の 2 つの構造の一部であってもよい）、これは、好ましくは、化学式 BNE-1 の環 a、b 及び c' のうちいずれか 1 つであるが、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-5}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d} 及び R^{BNE-d'} から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような 2 以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環でもあり、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式 BNE-1 の 2 以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができ（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式 BNE-1 の 2 つの構造の環 c' であってもよく、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式 BNE-1 の 1 つの構造の環 b 及び他の構造の環 c' であってもよい）、

ここで、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d} または R^{BNE-d'} のうち少なくとも 1 つが、化学式 BNE-1 の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d} または R^{BNE-d'} のうちの

10

20

30

40

50

いずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

【0388】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、R^{BNE-III}及びR^{BNE-e}は結合して直接単結合を形成する。

【0389】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれからなり、R^{BNE-III}及びR^{BNE-e}は結合して直接単結合を形成しない。

【0390】

一実施形態において、本発明の文脈において小FWHMエミッタS^Bとして適している蛍光エミッタは、選択的に、前述の化学式BNE-1の多量体（例えば、二量体）であってよく、これは、それらの構造が1以上のサブユニットを含み、それらそれぞれは化学式BNE-1による構造を有するということを意味する。この場合、当業者は、化学式BNE-1による2以上のサブユニットが、例えば、互いに共役し、好ましくは、互いに縮合していてもよいことを理解するであろう（すなわち、少なくとも1つの結合を共有し、ここで、その結合を形成する原子に結合されたそれぞれの置換基がそれ以上存在しない）。また、2以上のサブユニットは、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有することができる。これは、例えば、小FWHMエミッタS^Bがそれぞれ化学式BNE-1の構造を有する2以上のサブユニットを含むということの意味し、ここで、それら2つのサブユニットは、1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環を共有する（すなわち、それぞれの環は、2つのサブユニットの一部である）。その結果、それぞれの多量体（例えば、二量体）エミッタS^Bは、共有環が一個のみ存在し、化学式BNE-1による2つの全体サブユニットを含まない。それにもかかわらず、当業者は、本願において当該エミッタが依然として化学式BNE-1の多量体（例えば、化学式BNE-1の構造を有する2つのサブユニットが含まれる場合、二量体）と見なされることを理解するであろう。1以上の環を共有する多量体に対しても同様である。多量体は、それぞれ化学式BNE-1の構造を有する2つのサブユニットを含む二量体であることが好ましい。

【0391】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、前述のように、化学式BNE-1の二量体であり、これは、エミッタがそれぞれ化学式BNE-1による構造を有する2つのサブユニットを含むということの意味する。

【0392】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、前述のように、化学式BNE-1の二量体であり、これは、エミッタがそれぞれ化学式BNE-1による構造（すなわち、サブユニット）を有する2つのサブユニットを含むということの意味し、

ここで、それら2つのサブユニットは、接合され、好ましくは、少なくとも1つ、より好ましくは、正確に1つの結合を共有することによって互いに縮合される。

【0393】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、前述のように、化学式BNE-1の二量体であり、これは、エミッタがそれぞれ化学式BNE-1による構造（すなわち、サブユニット）を有する2つのサブユニットを含むということの意味し、

ここで、それら2つのサブユニットは、少なくとも1つ、好ましくは、正確に1つの芳香族環またはヘテロ芳香族環（すなわち、当該環は、化学式BNE-1の2つの構造の一部である）を共有し、好ましくは、化学式BNE-1の環a、b及びc'のうちいずれか1つであるが、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-5}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BN}

10

20

30

40

50

E-d 及び R^{BNE-d} から選択される任意の芳香族置換基またはヘテロ芳香族置換基、あるいは前述のような2以上の置換基によって形成された任意の芳香族環またはヘテロ芳香族環であってもよく、ここで、共有環は、前記環を共有する化学式BNE-1の2以上の構造の同一のまたは異なる部分構造を構成することができる（すなわち、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式BNE-1の2つの構造の環c'であってもよく、共有環は、例えば、選択的にエミッタに含まれた化学式BNE-1の1つの構造の環b及び他の構造の環c'であってもよい）。

【0394】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタS^Bは、前述のように、化学式BNE-1の二量体であり、これは、エミッタがそれぞれ化学式BNE-1による構造（すなわち、サブユニット）を有する2つのサブユニットを含むということを意味し、

10

ここで、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうち少なくとも1つが、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替され、及び／または、選択的に、R^{BNE-1}、R^{BNE-2}、R^{BNE-1'}、R^{BNE-2'}、R^{BNE-3}、R^{BNE-4}、R^{BNE-5}、R^{BNE-3'}、R^{BNE-4'}、R^{BNE-6}、R^{BNE-I}、R^{BNE-II}、R^{BNE-III}、R^{BNE-IV}、R^{BNE-V}、R^{BNE-a}、R^{BNE-e}、R^{BNE-d}またはR^{BNE-d'}のうちいずれか1つの少なくとも1つの水素原子が、化学式BNE-1の更なる化学的実体に対する結合によって代替される。

20

【0395】

本発明の文脈において小FWHMエミッタとして使用可能な、前述の化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成される蛍光エミッタの非限定的な例が下記に示されている：

【0396】

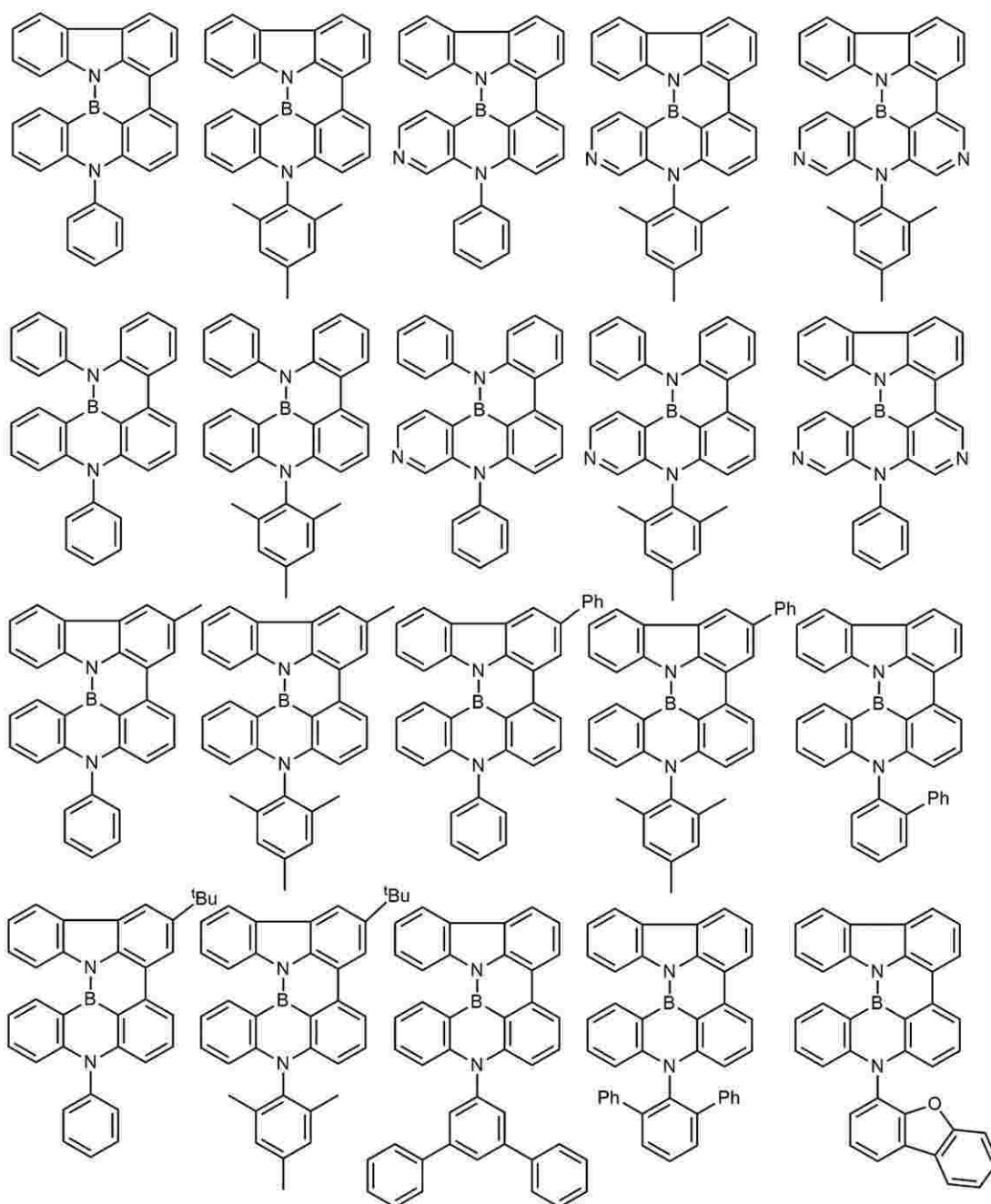
発明は、下記に示されている：

30

40

50

【化 1 9 4】



10

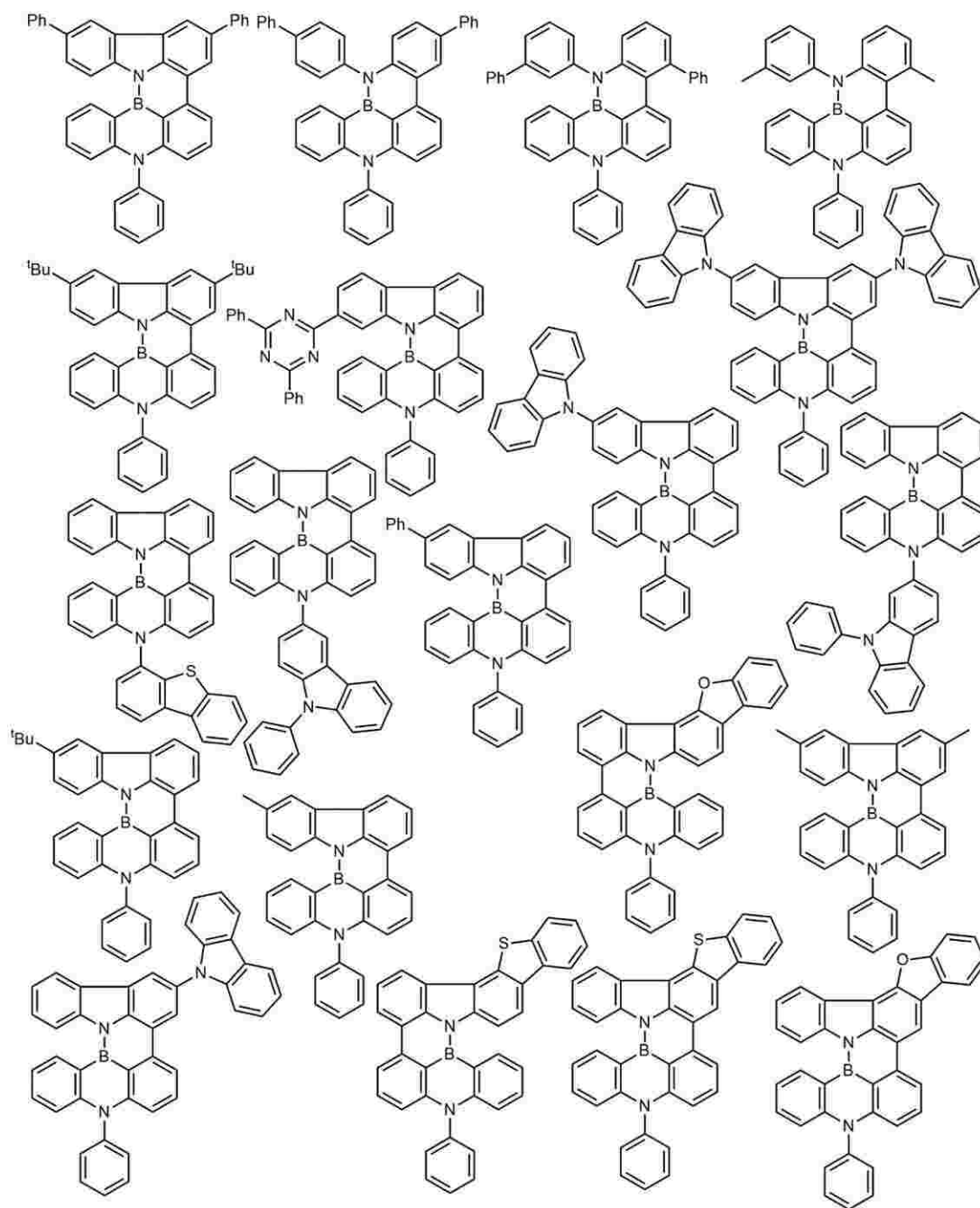
20

30

40

50

【化 195】



10

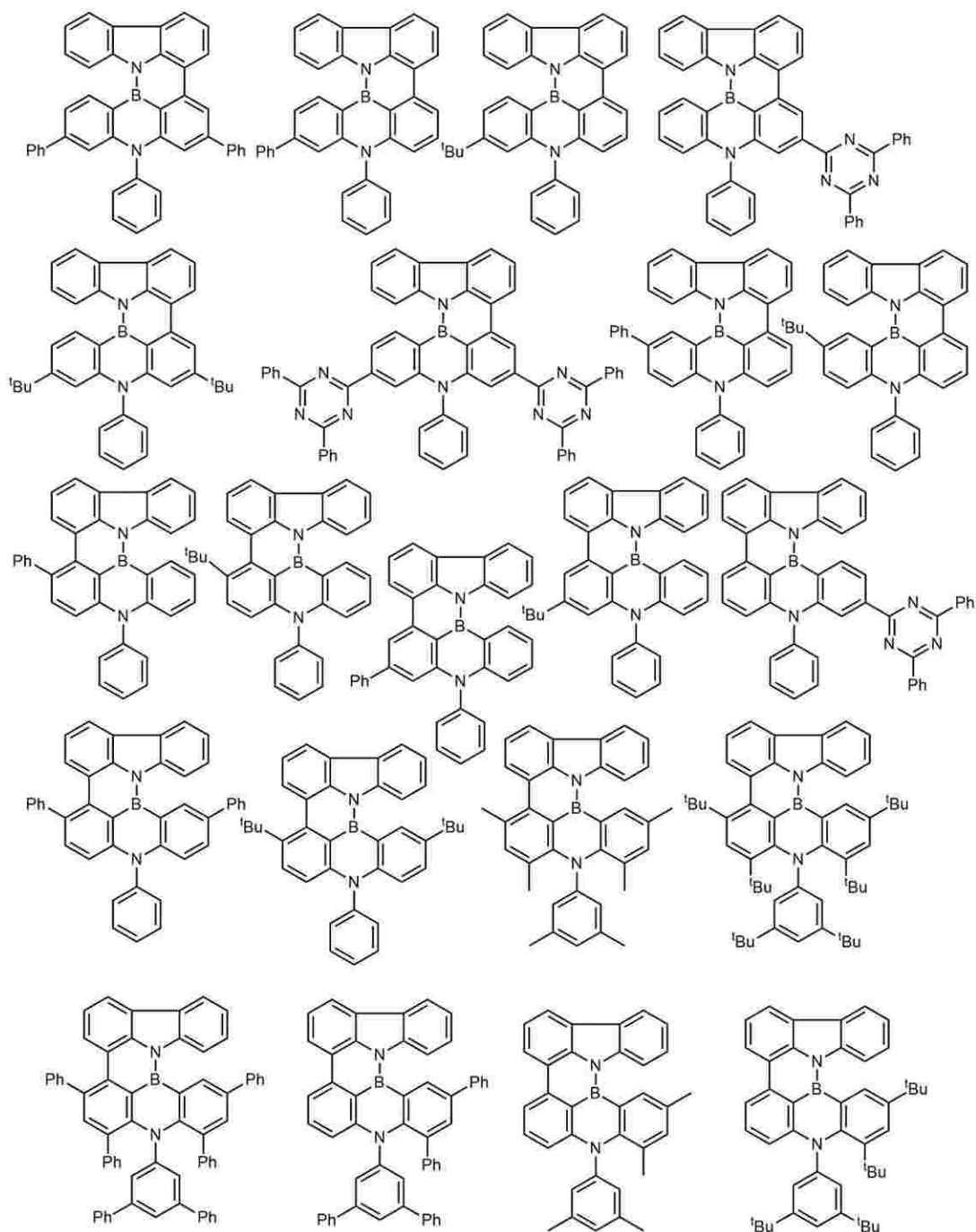
20

30

40

50

【化 1 9 6】



10

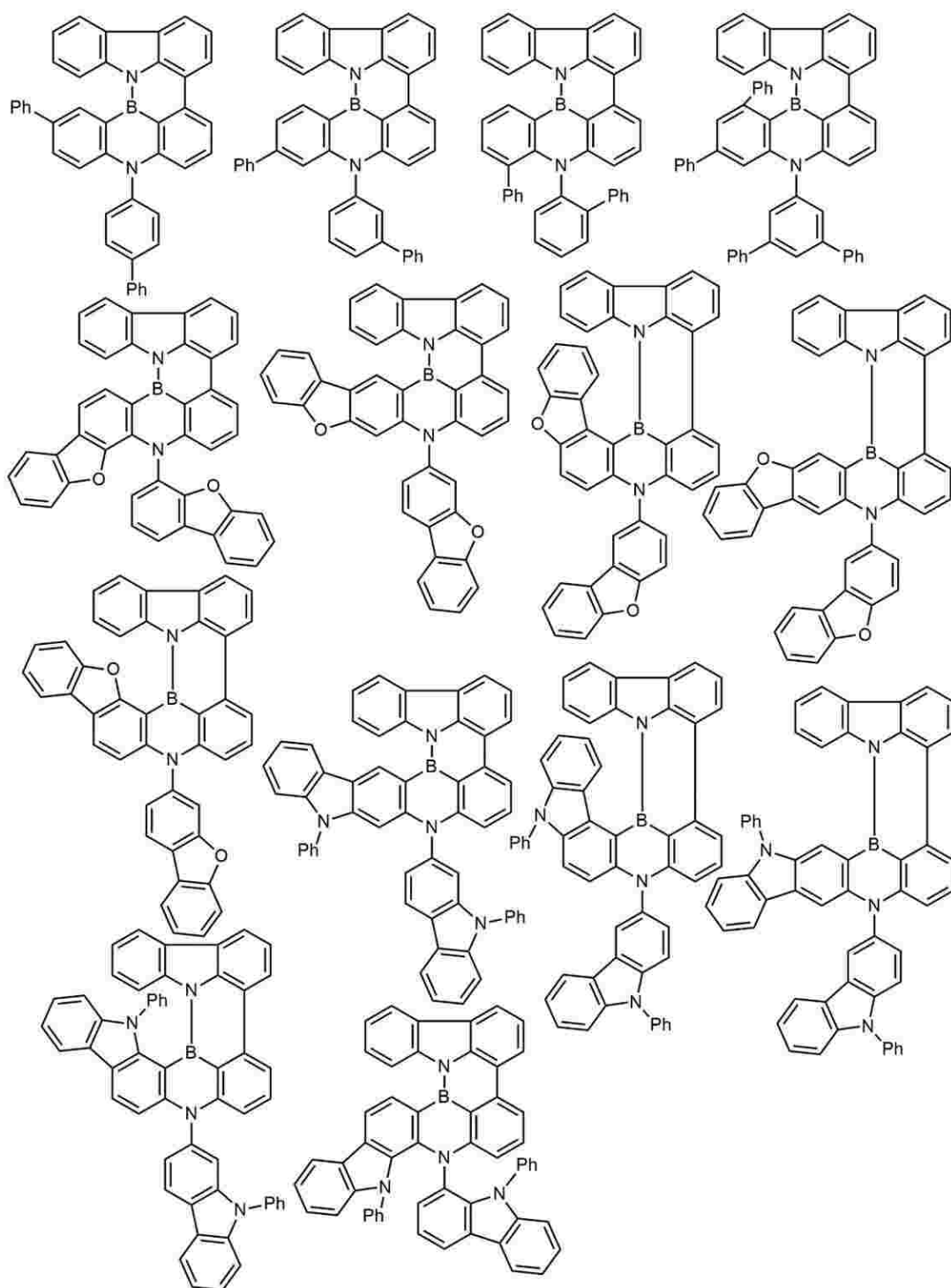
20

30

40

50

【化 1 9 7】



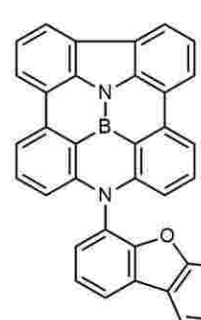
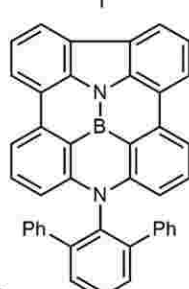
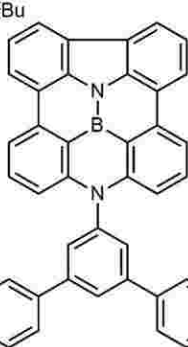
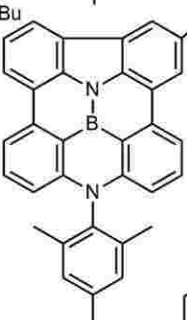
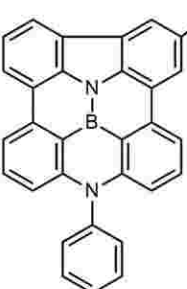
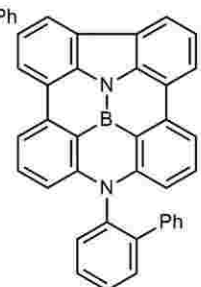
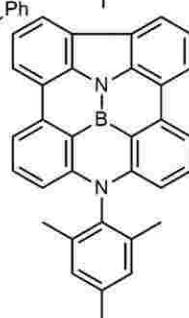
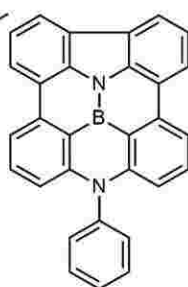
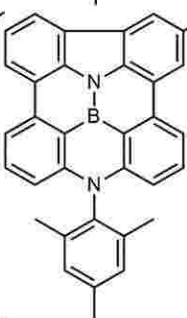
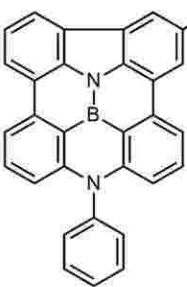
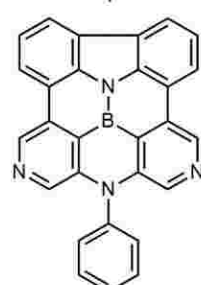
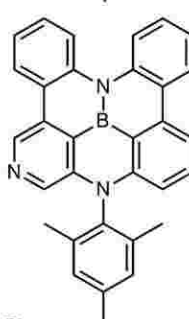
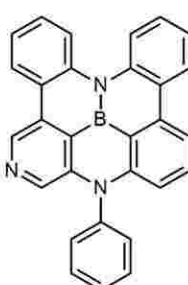
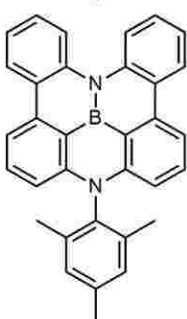
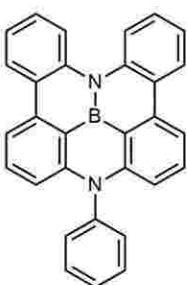
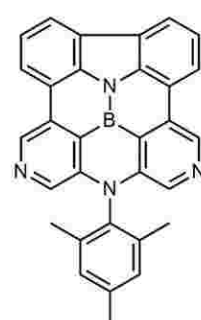
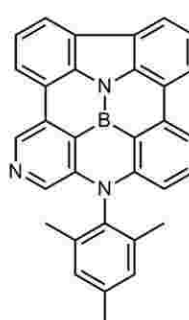
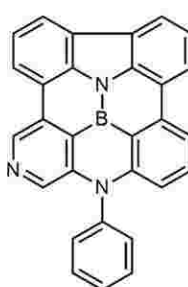
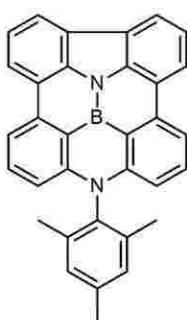
10

20

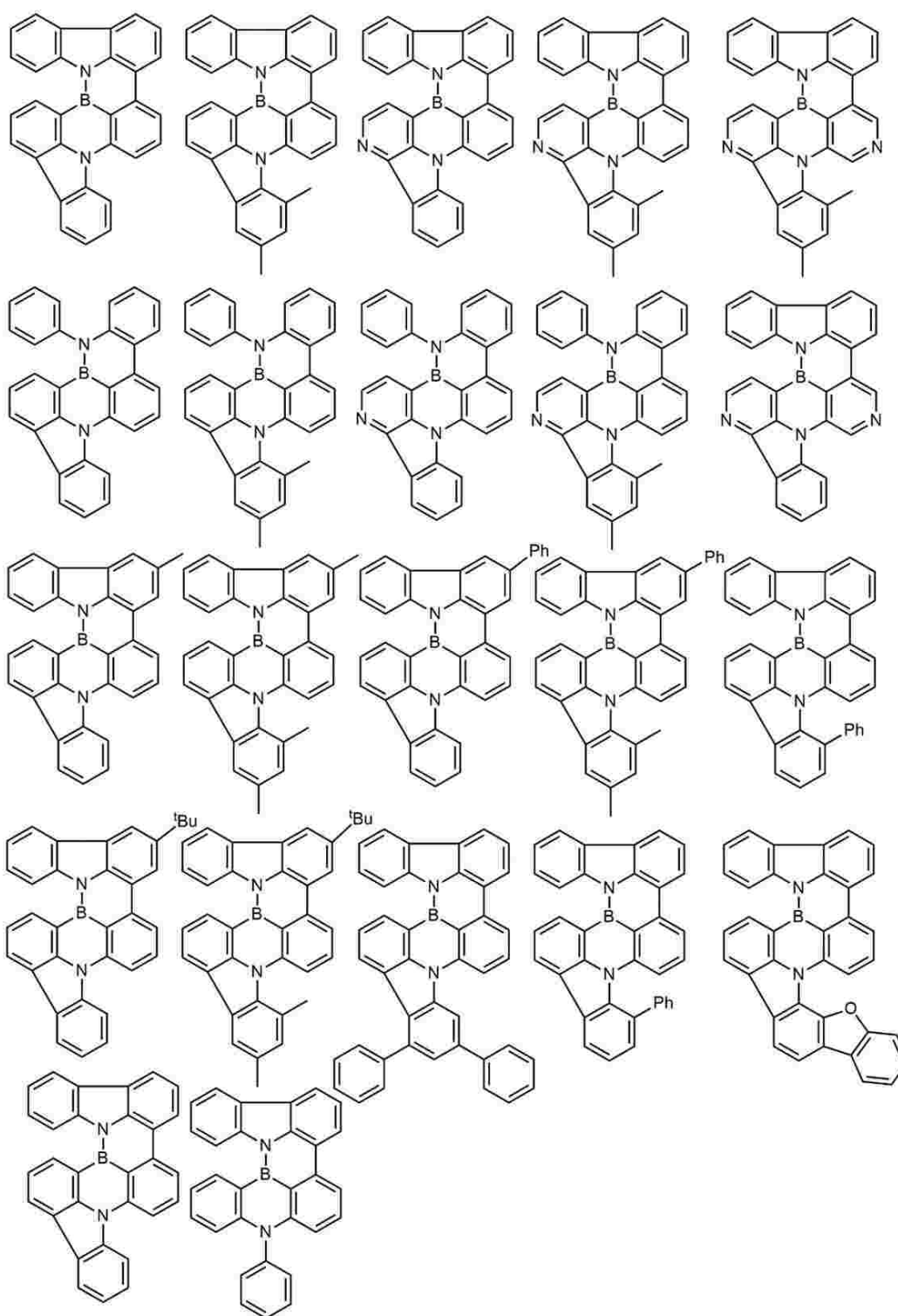
30

40

50



【化 1 9 9】



10

20

30

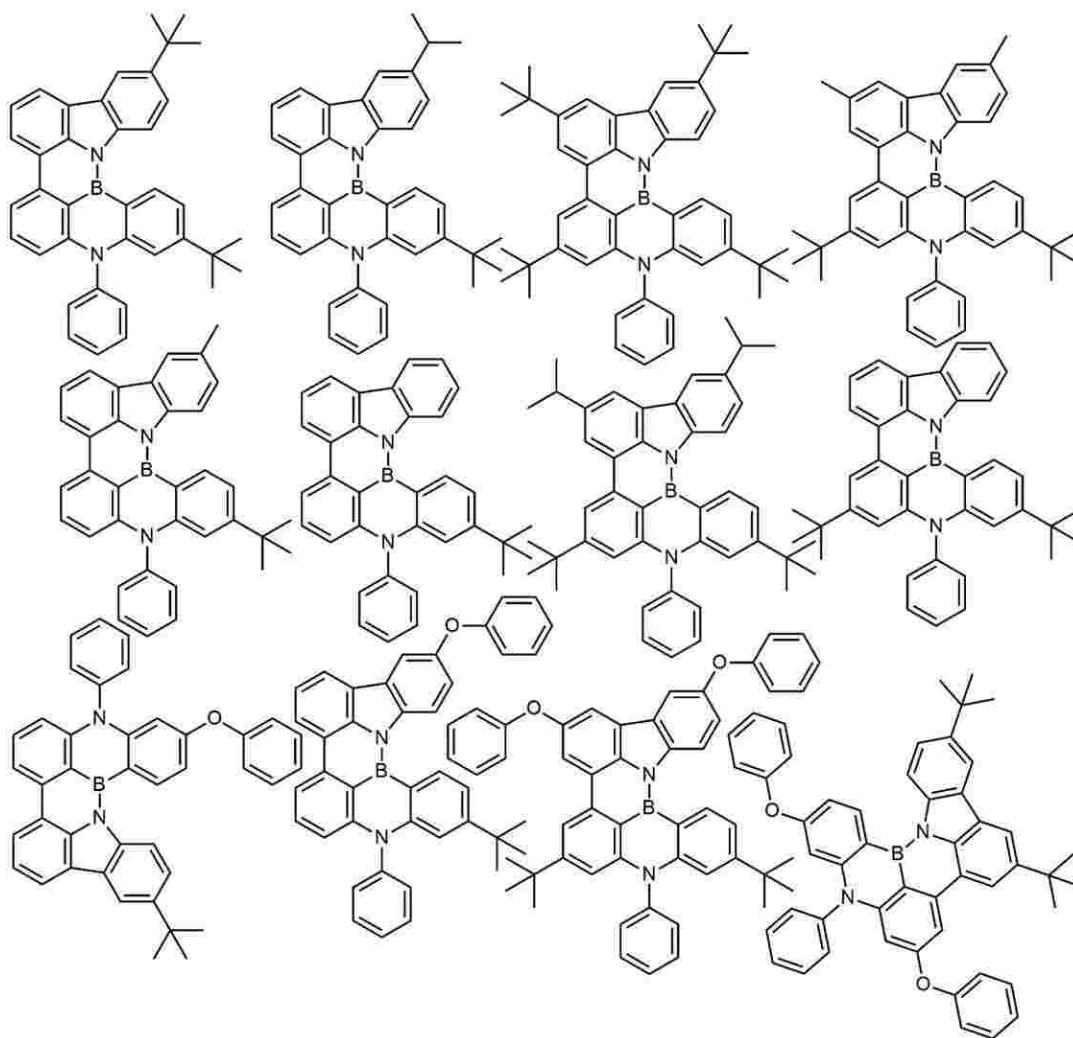
40

50

This figure displays a collection of chemical structures for various boron-coordinated porphyrin derivatives. The structures are arranged in a grid-like fashion, showing different substituents and functional groups attached to the boron atom and the porphyrin core. The substituents include phenyl (Ph), tert-butyl (tBu), and various heterocyclic groups like indole, furan, and thiophene. Some structures also feature a central boron atom coordinated by two nitrogen atoms, forming a macrocyclic complex.

50

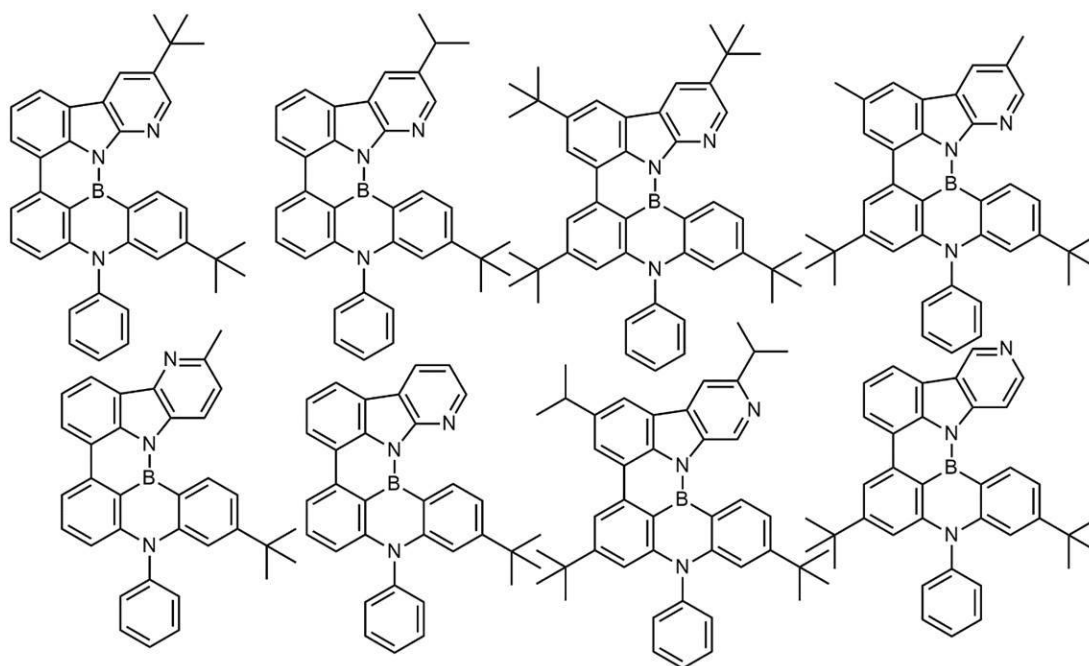
【化 2 0 1】



10

20

【化 2 0 2】

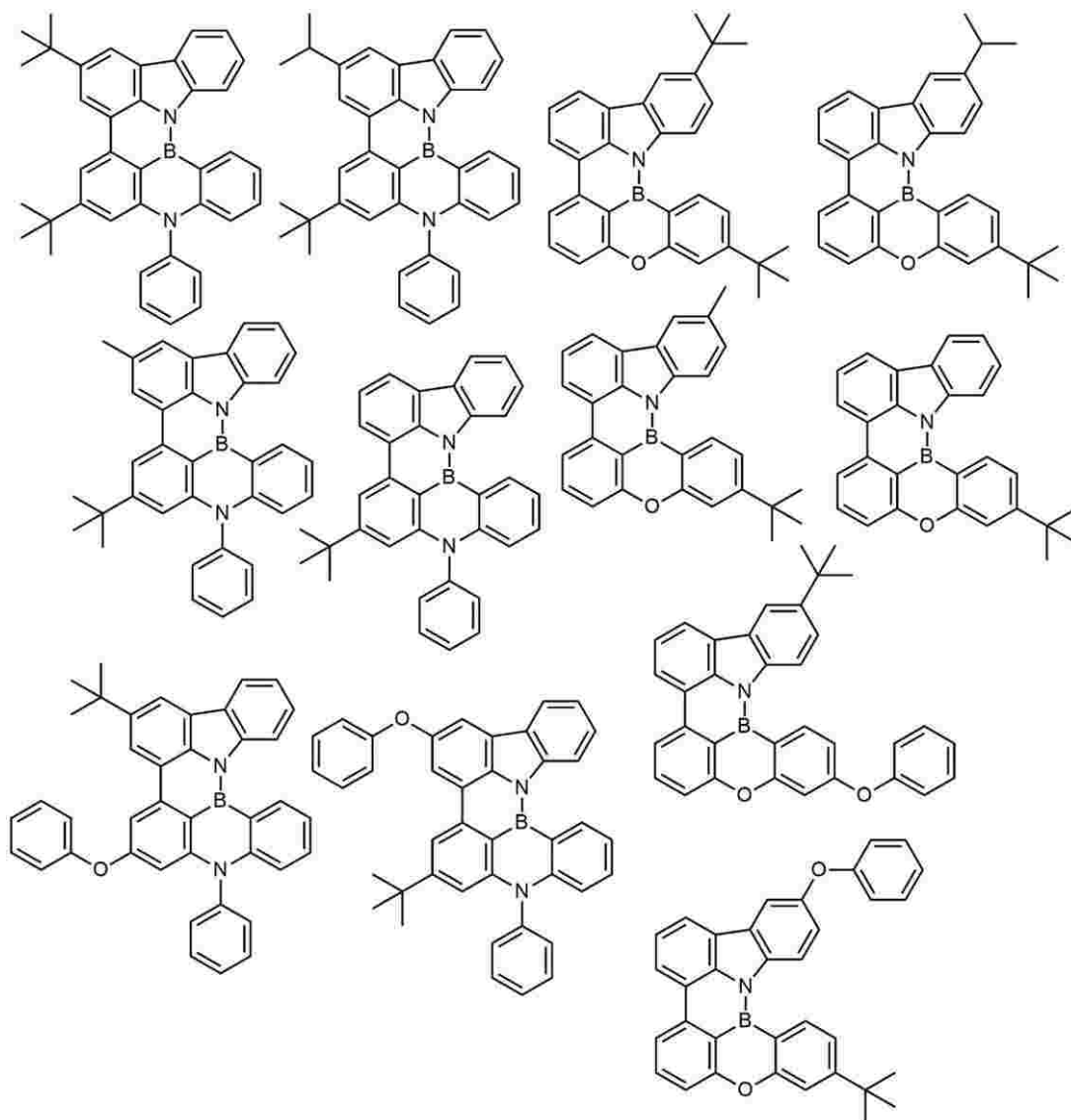


30

40

50

【化 2 0 3】

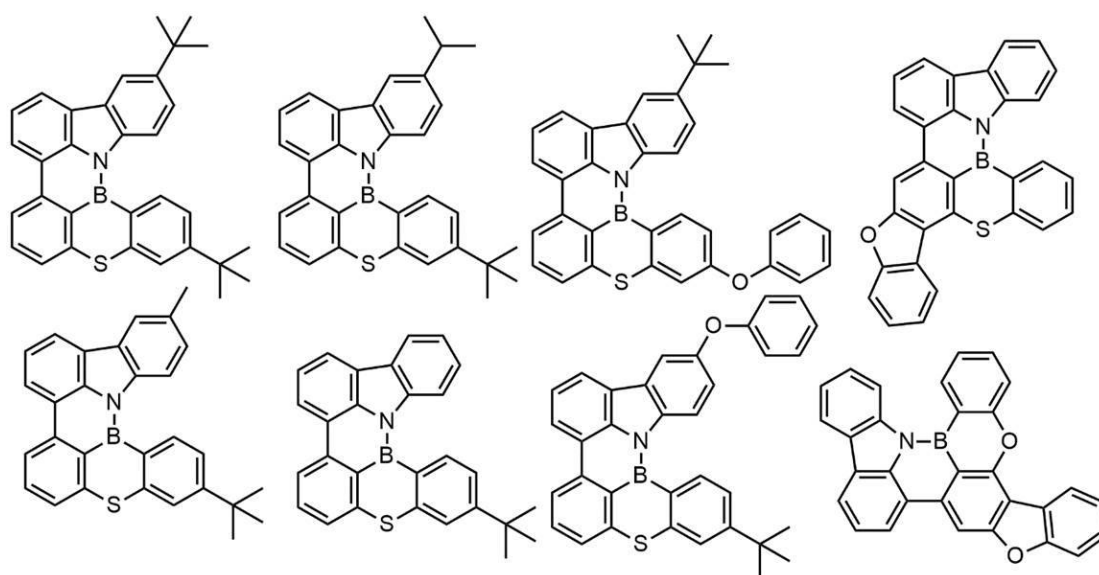


10

20

30

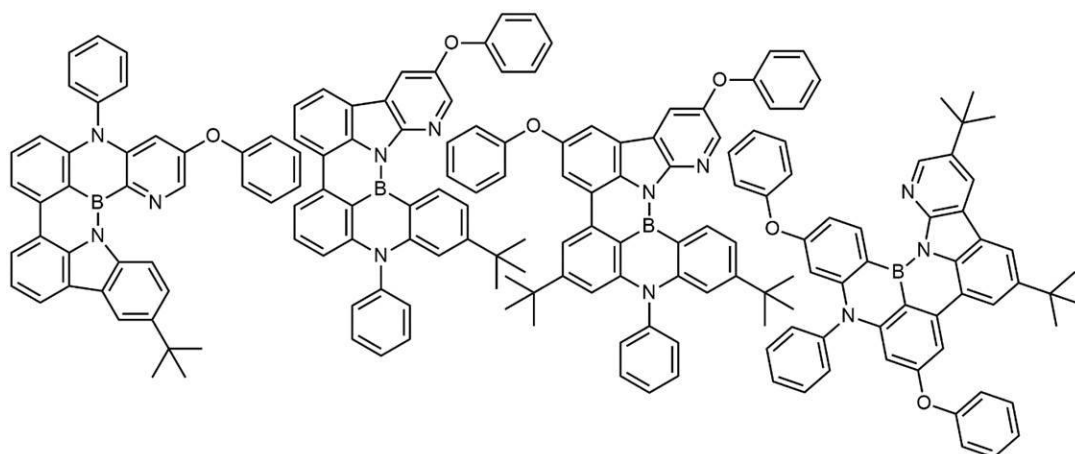
【化 2 0 4】



40

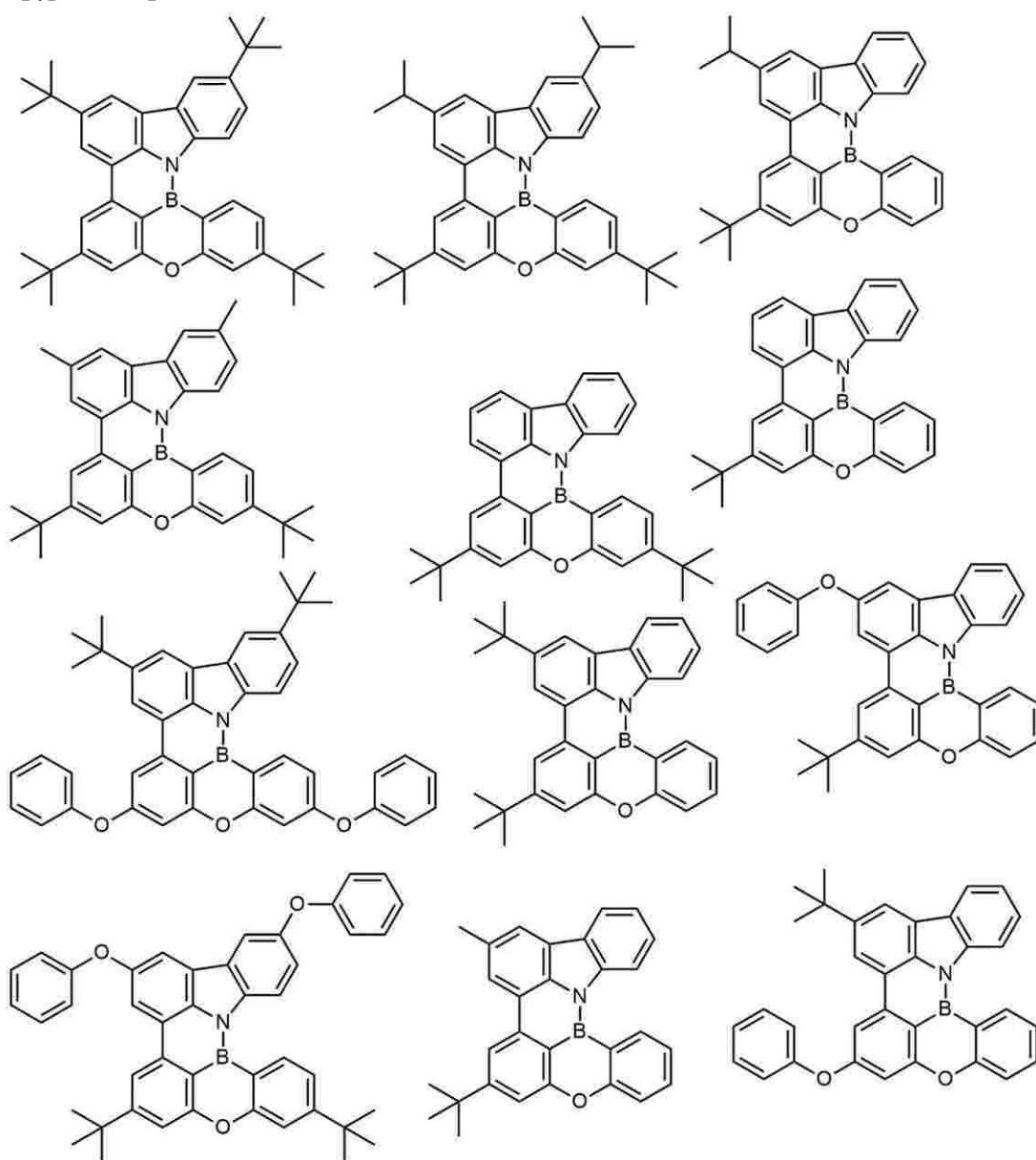
50

【化 2 0 5】



10

【化 2 0 6】



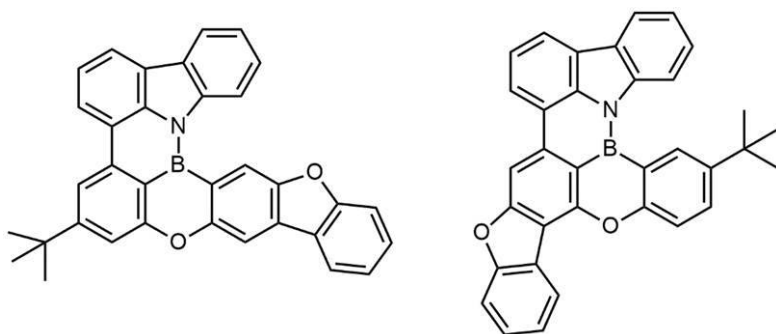
20

30

40

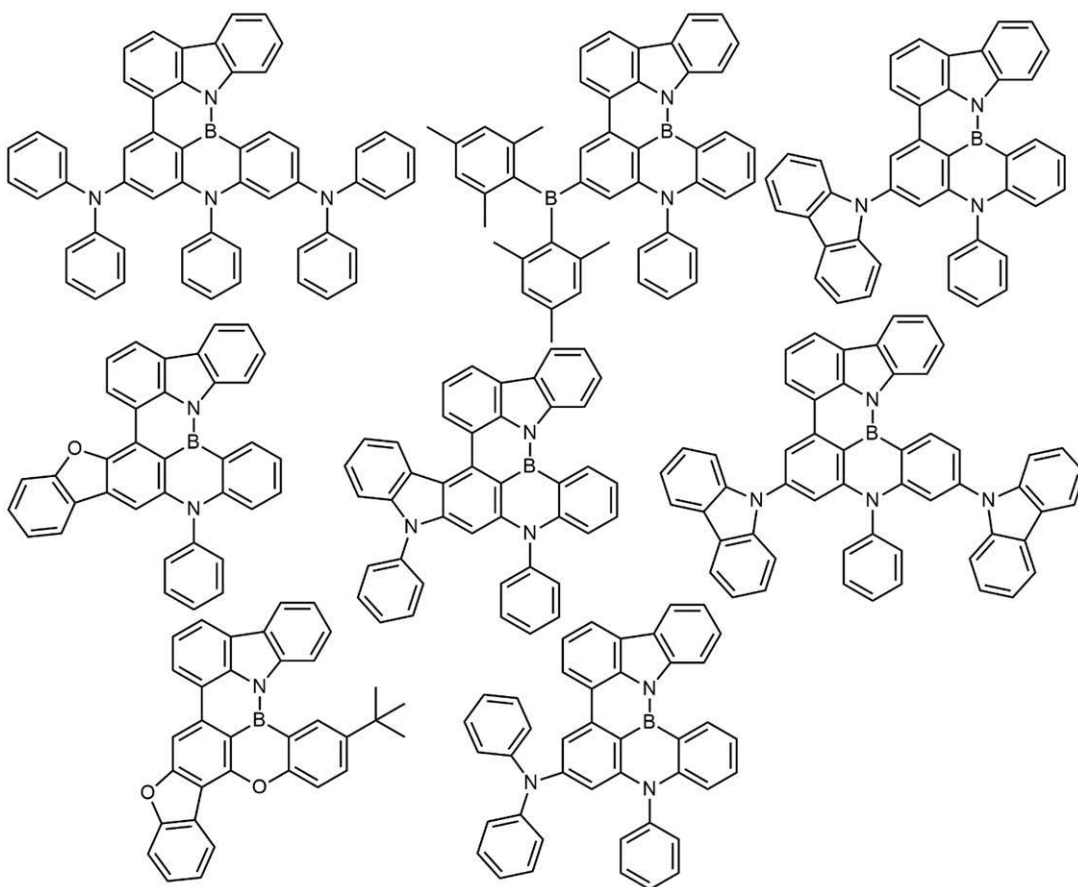
50

【化 2 0 7】



10

【化 2 0 8】



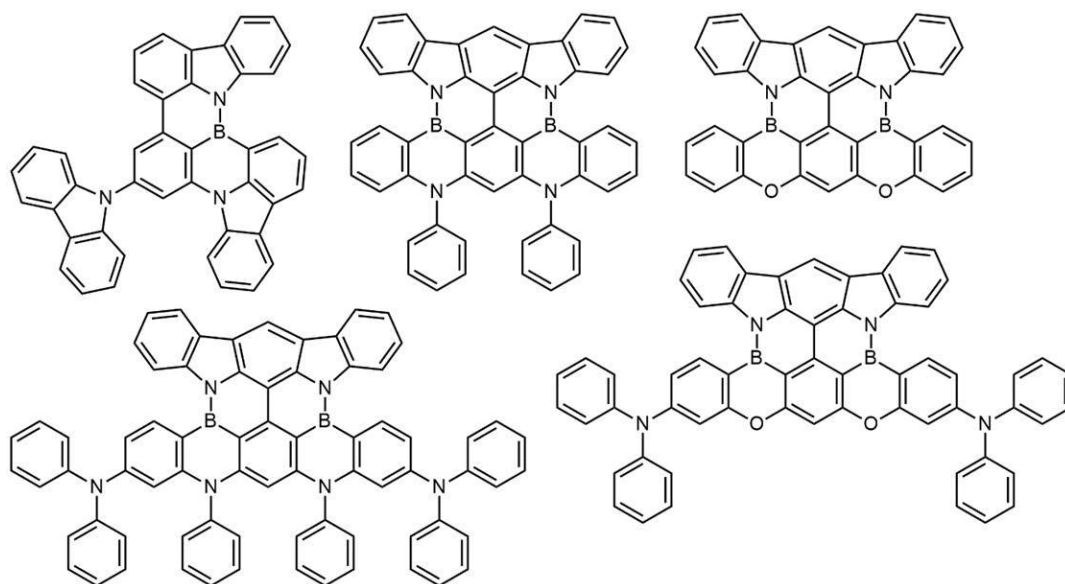
20

30

40

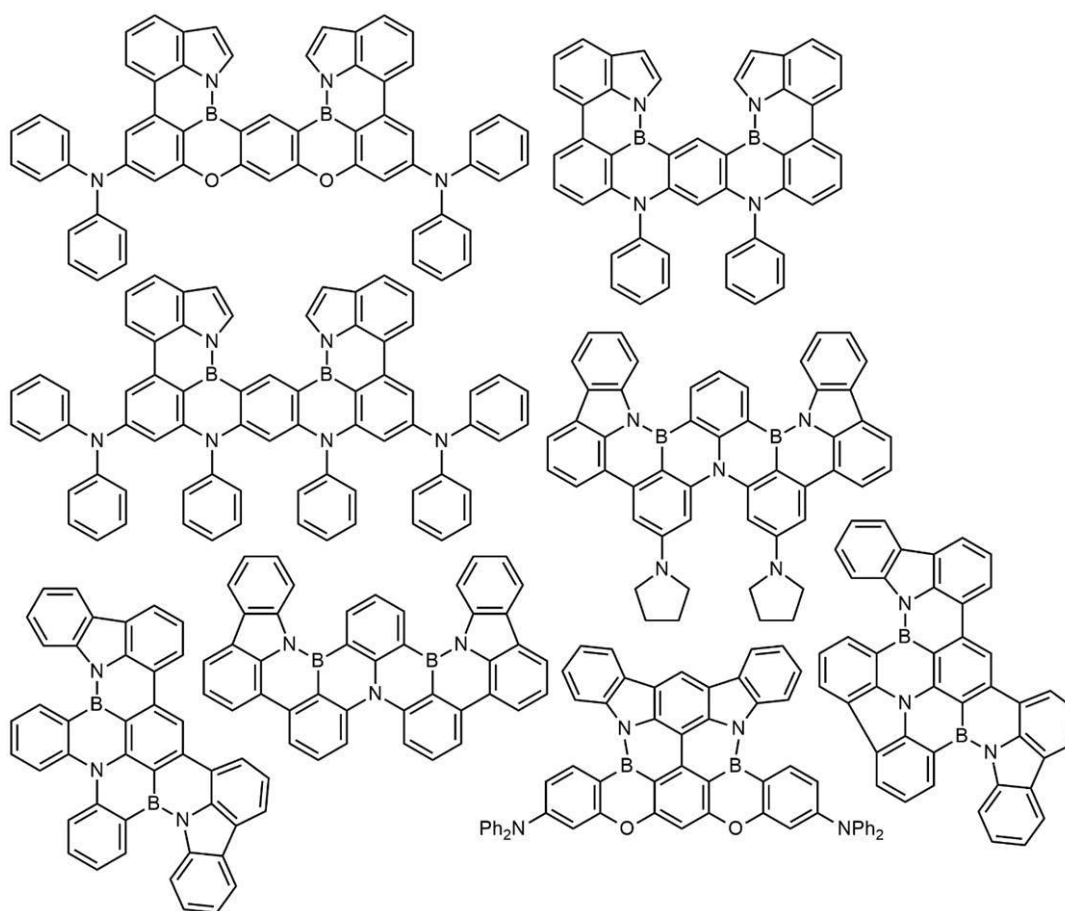
50

【化 2 0 9】



10

【化 2 1 0】



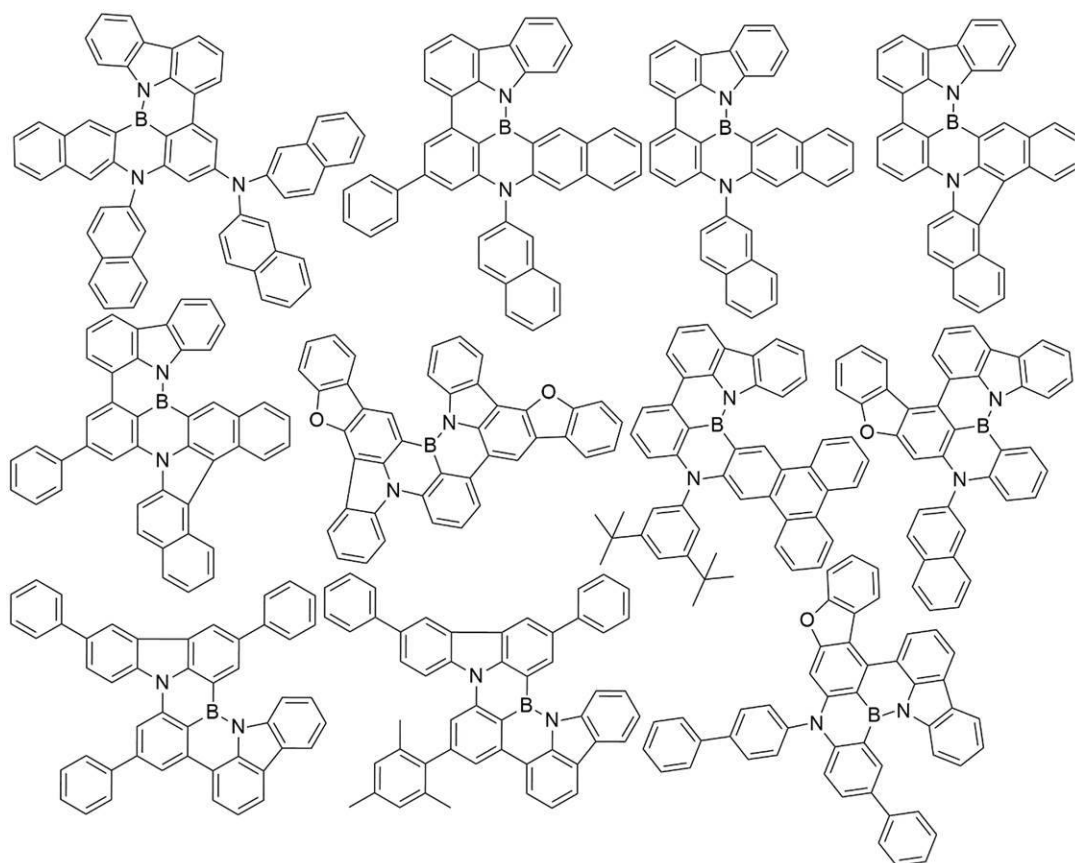
20

30

40

50

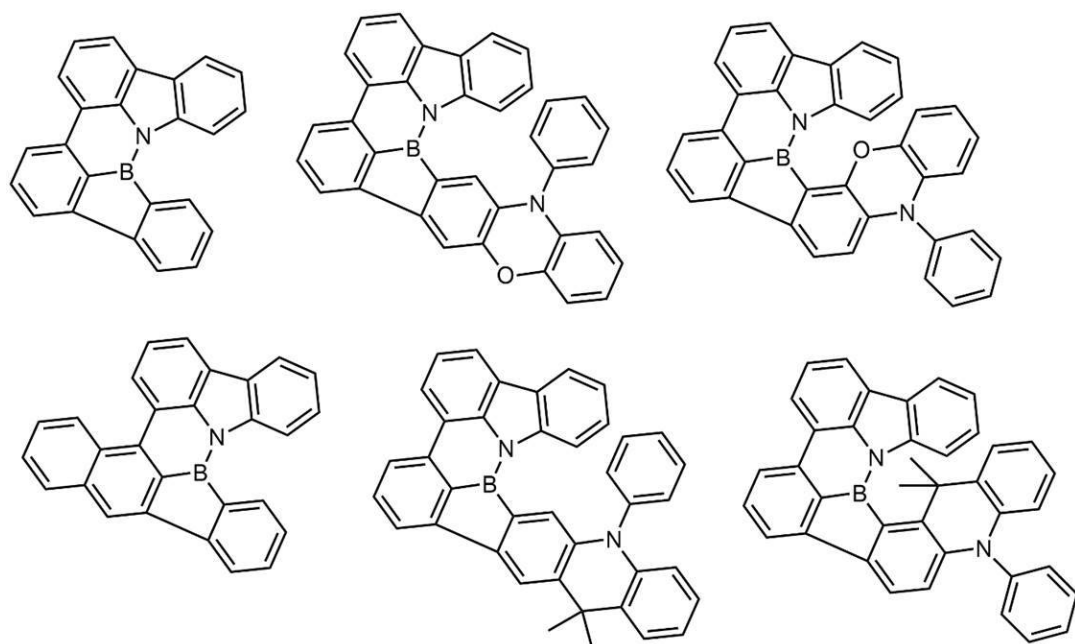
【化 2 1 1】



10

20

【化 2 1 2】

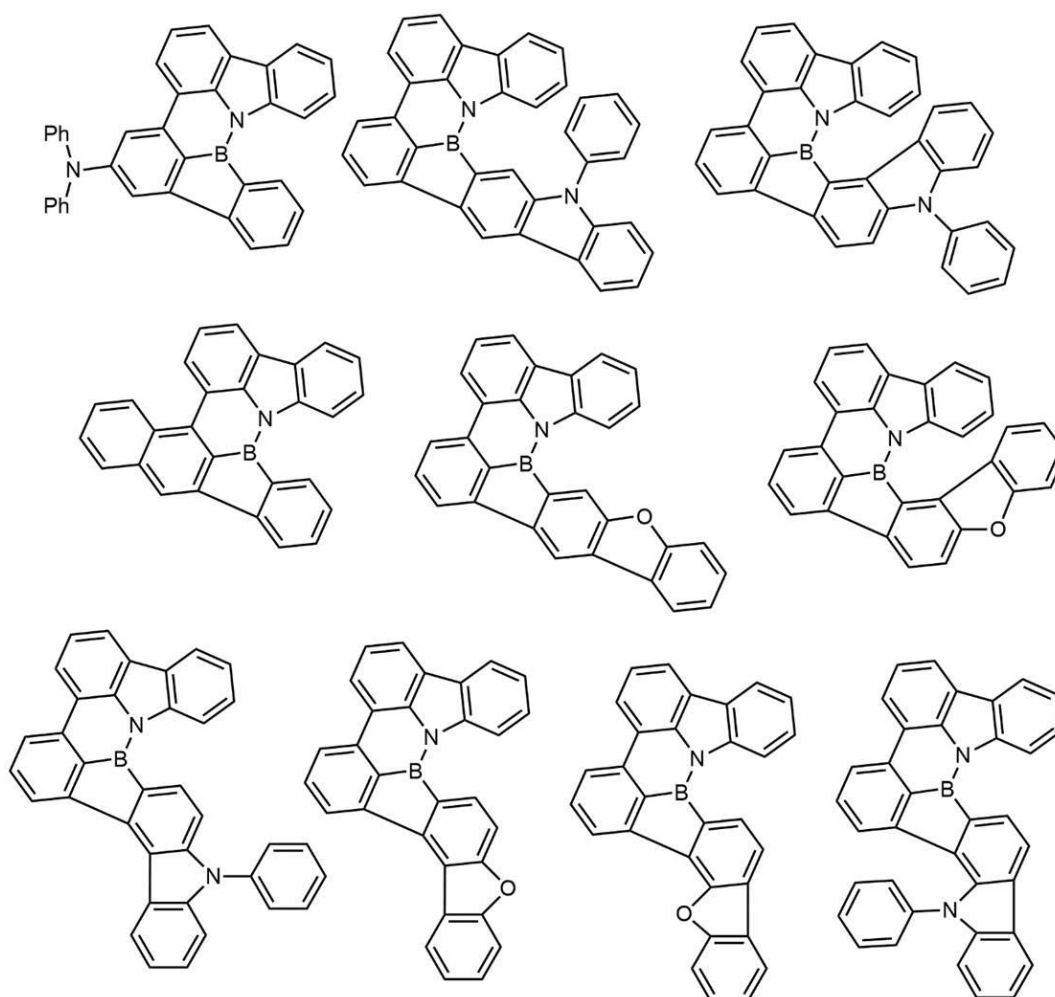


30

40

50

【化 2 1 3】



10

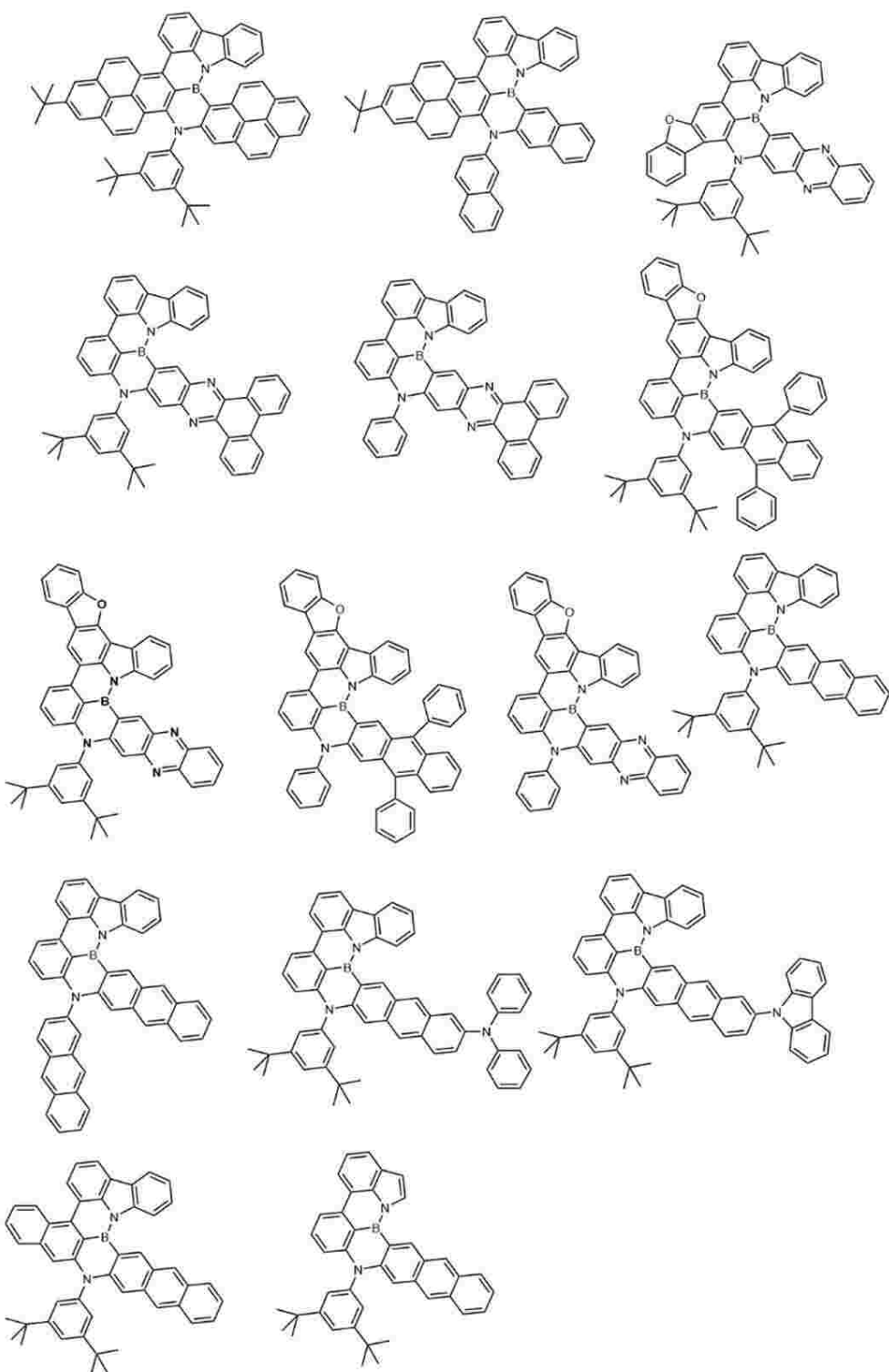
20

30

40

50

【化 2 1 4】



10

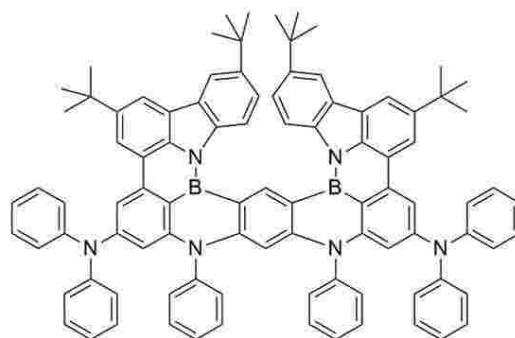
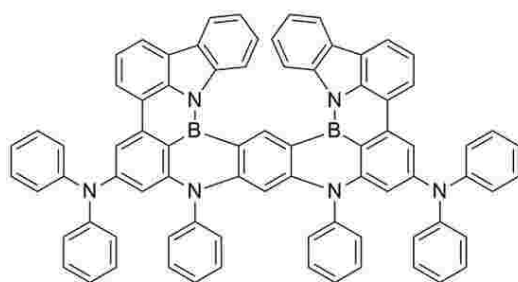
20

30

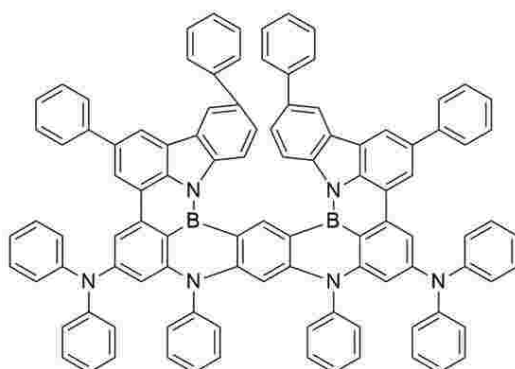
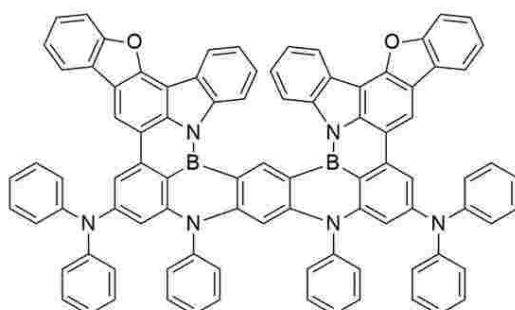
40

50

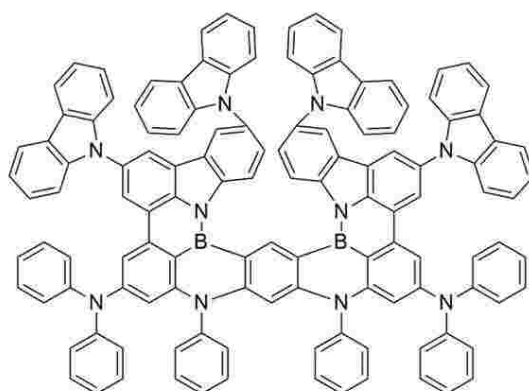
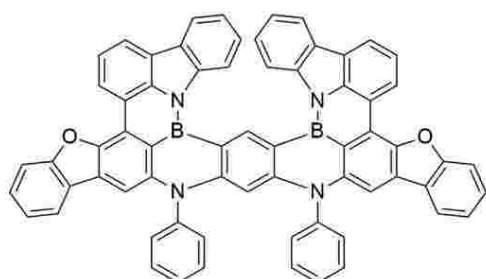
【化 2 1 5】



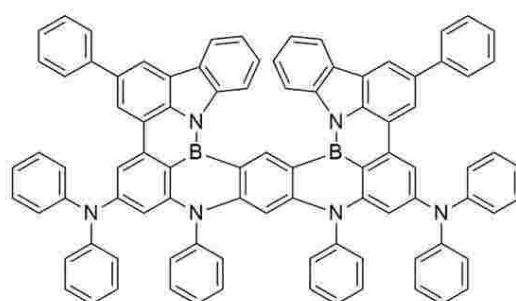
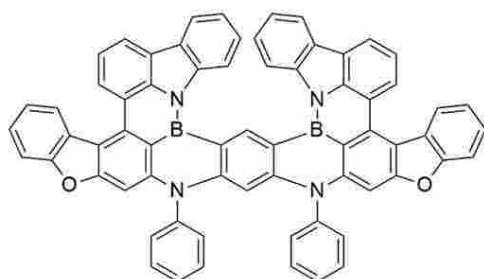
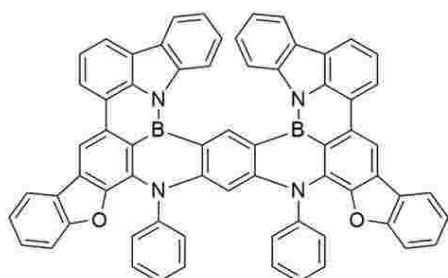
10



20



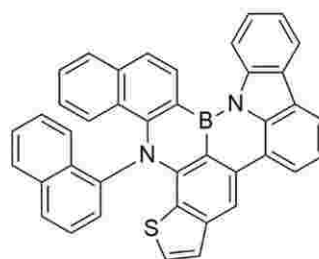
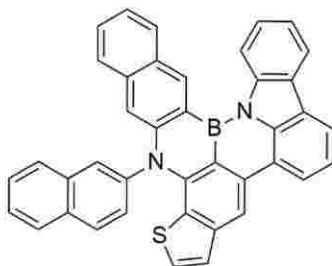
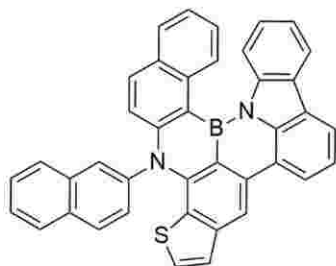
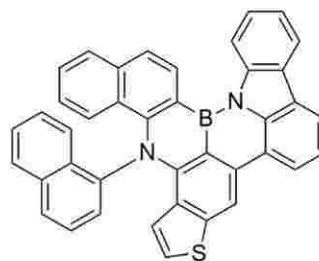
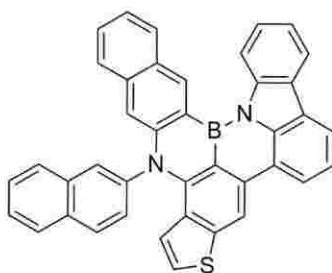
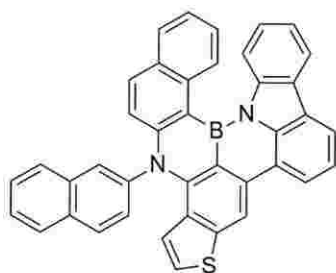
30



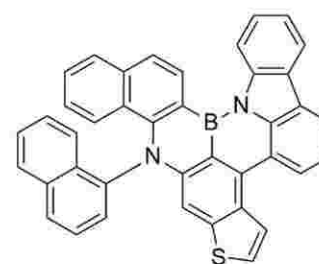
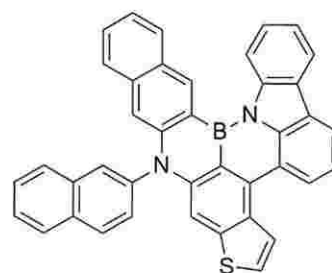
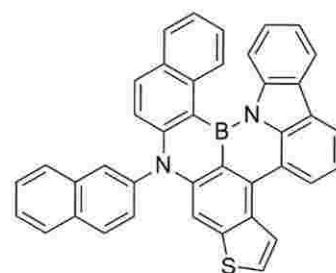
40

50

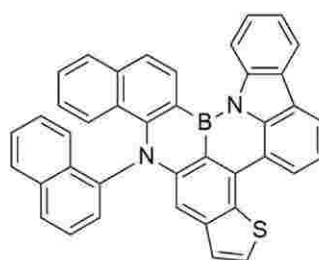
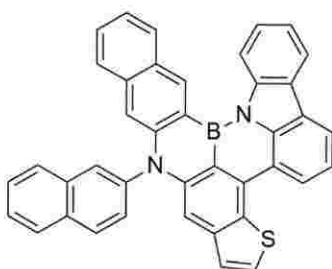
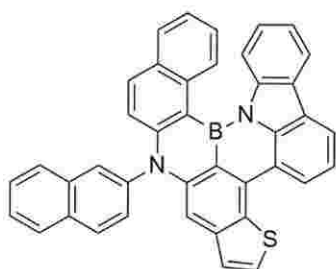
【化 2 1 6】



10



20

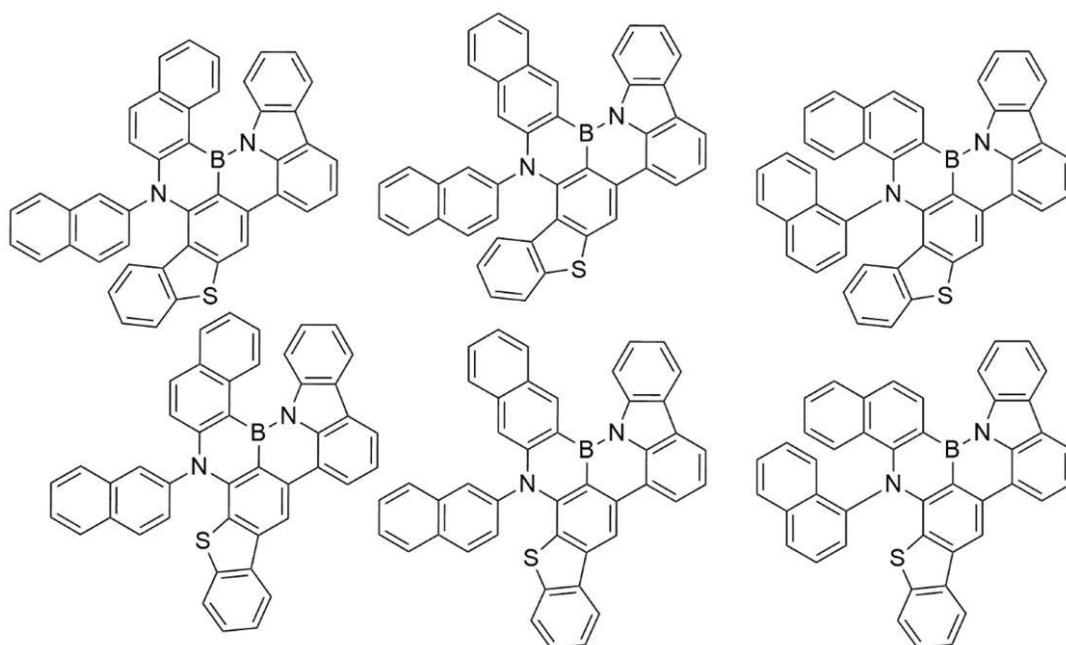


30

40

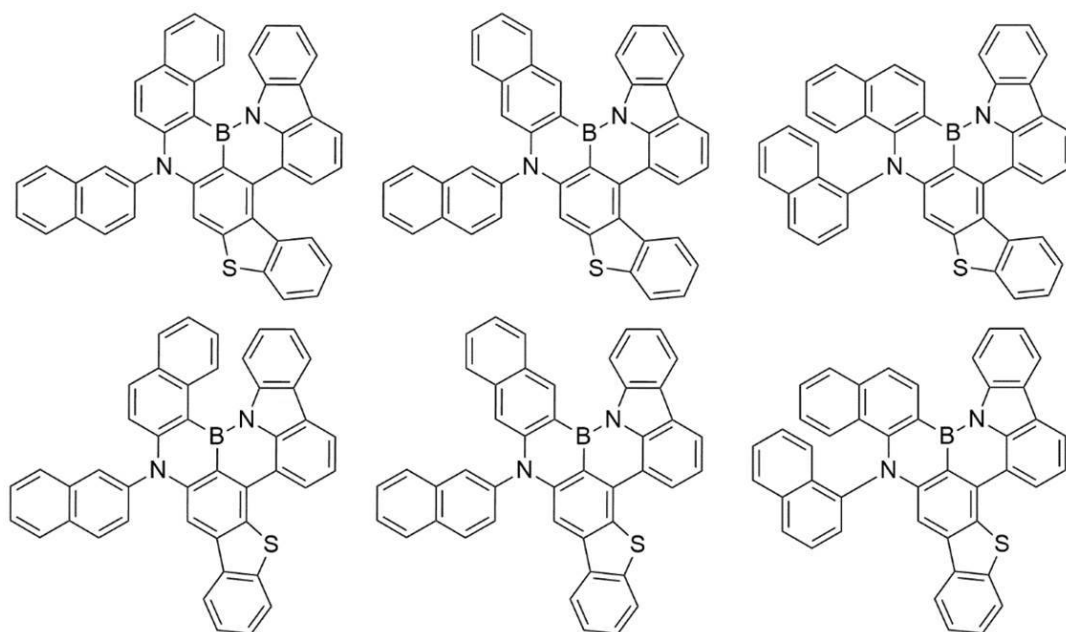
50

【化 2 1 7】



10

【化 2 1 8】



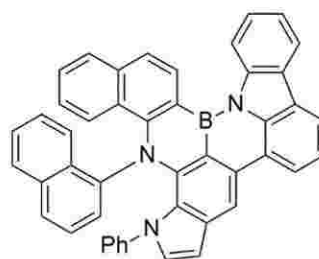
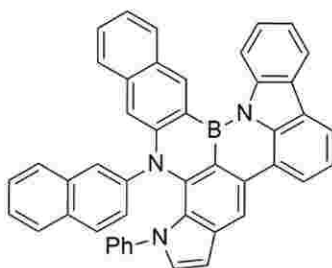
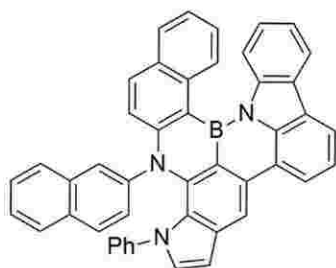
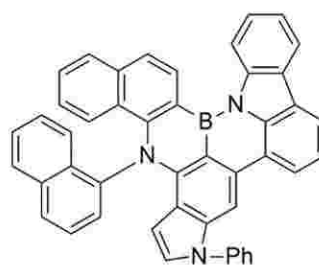
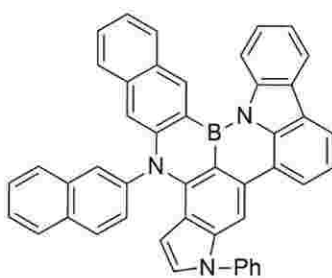
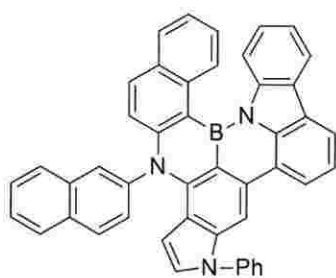
20

30

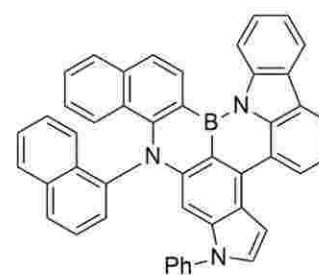
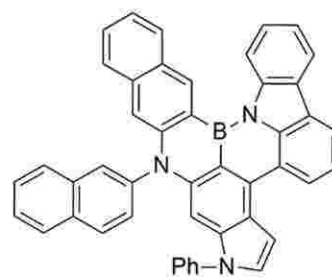
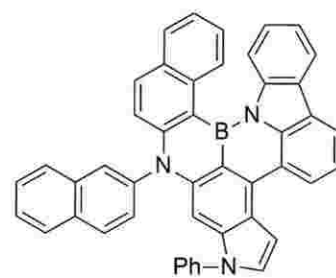
40

50

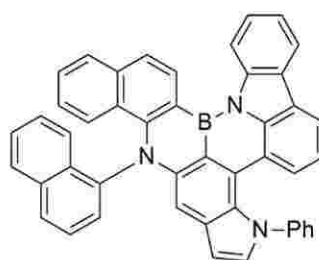
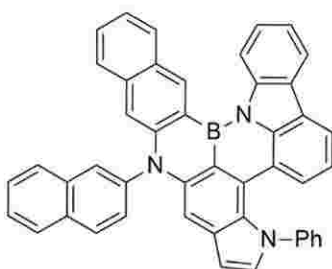
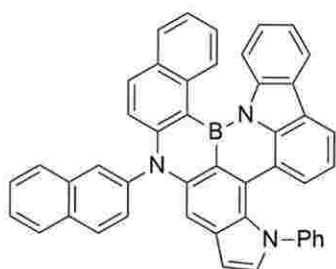
【化 2 1 9】



10



20

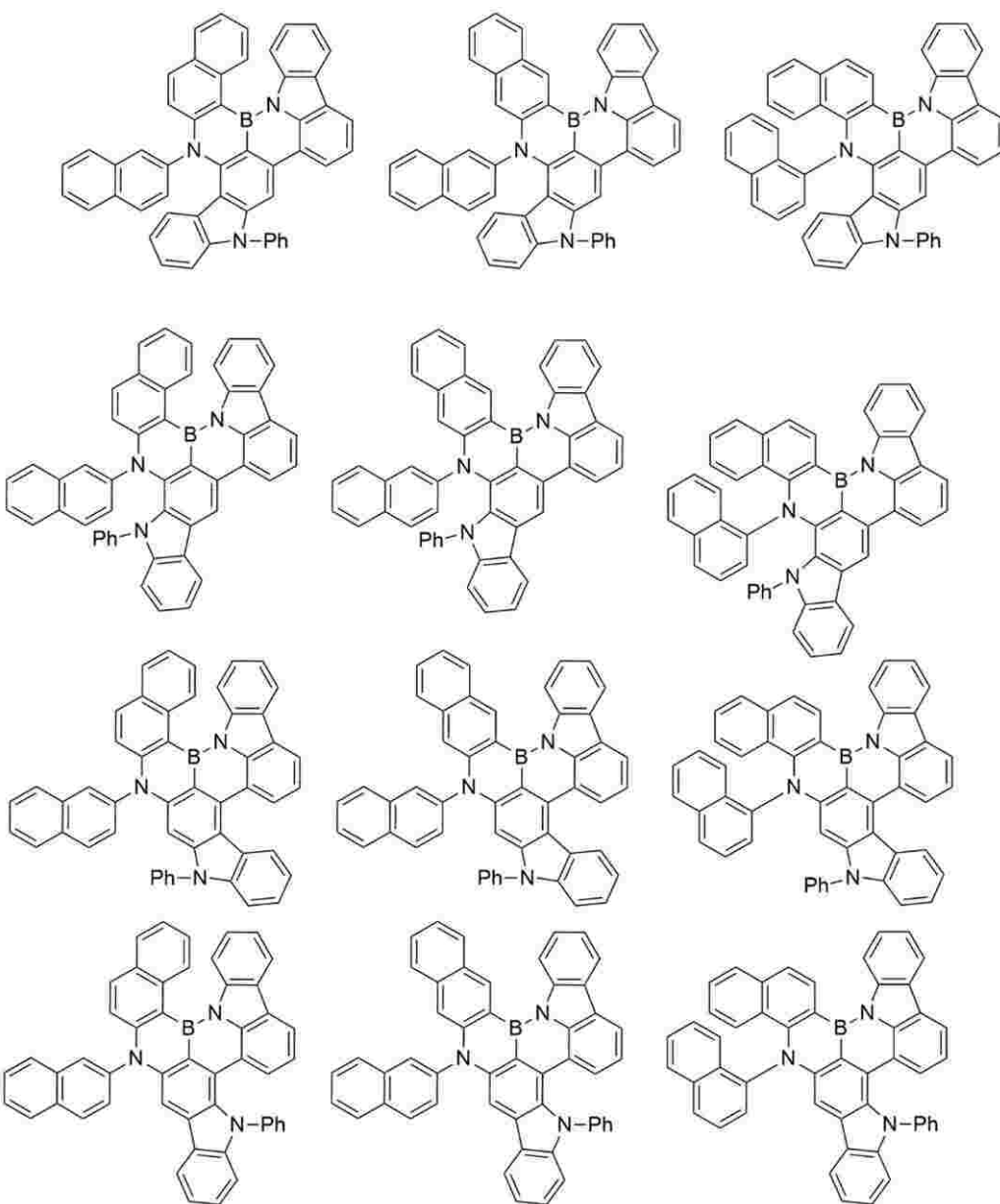


30

40

50

【化 2 2 0】

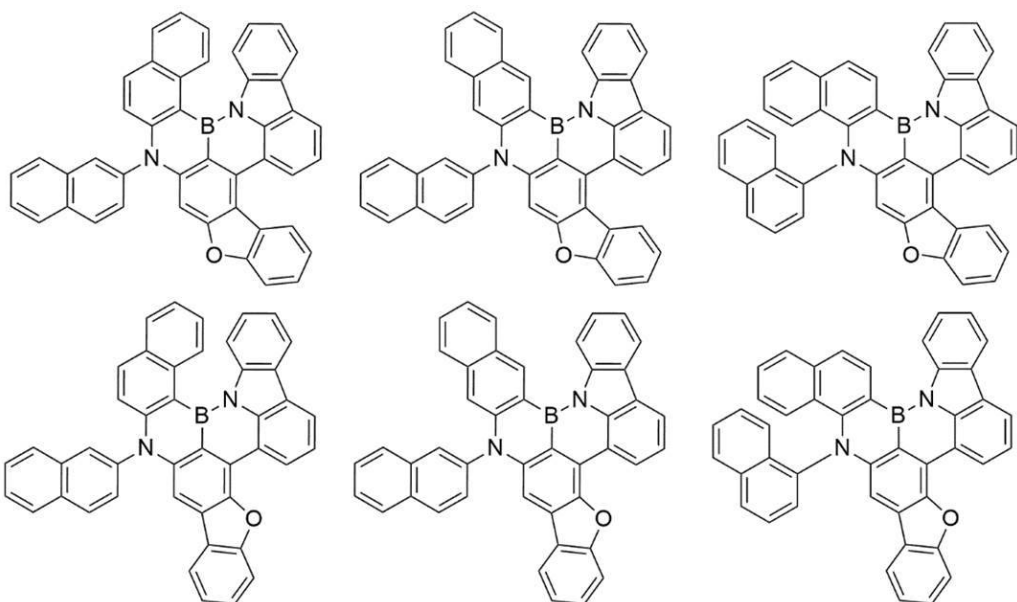


10

20

30

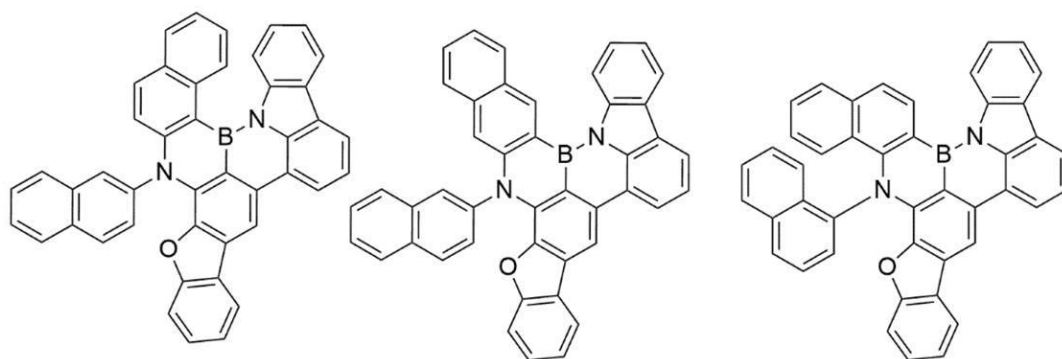
【化 2 2 1】



40

50

【化 2 2 2】



10

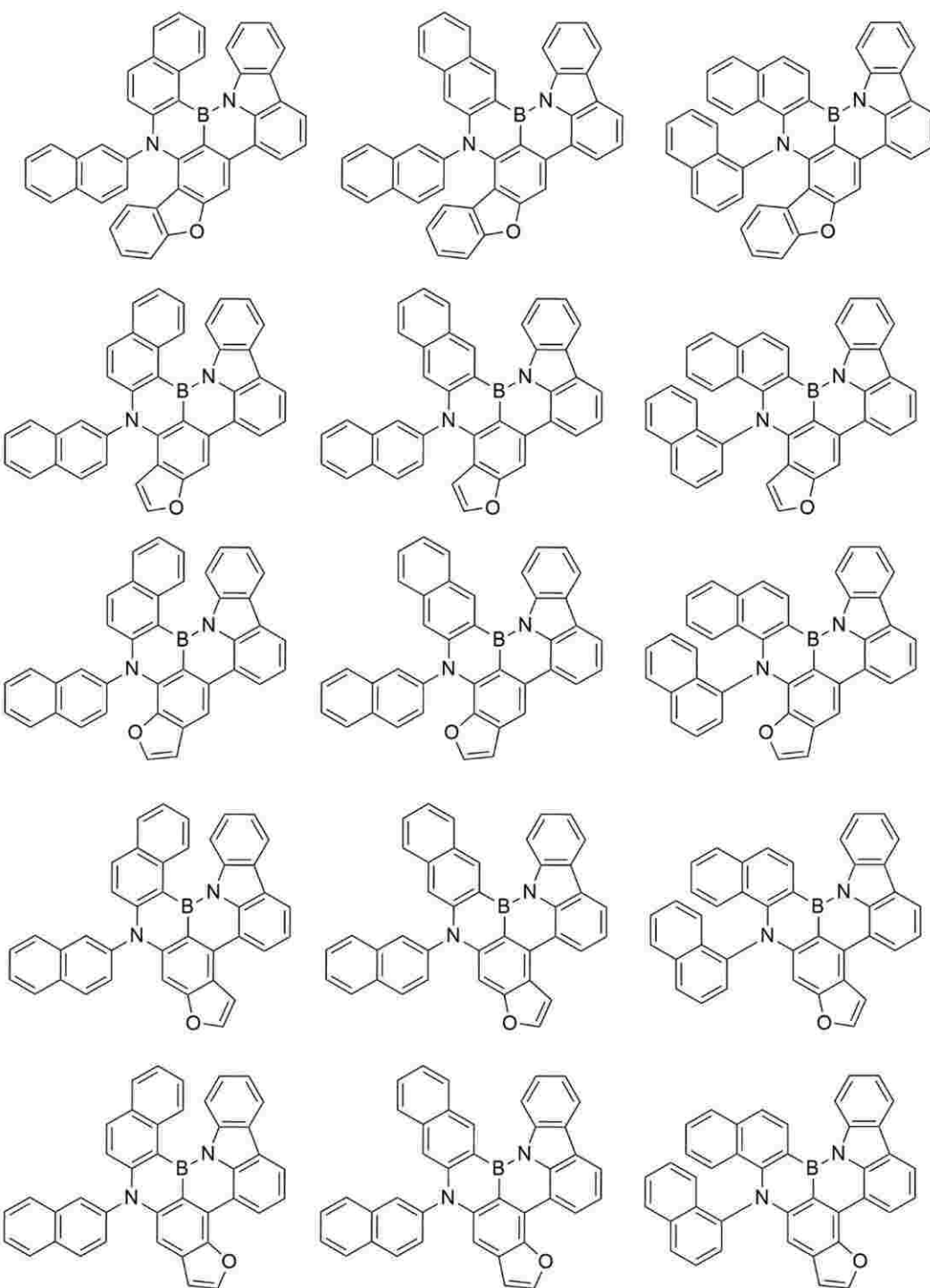
20

30

40

50

【化 2 2 3】



10

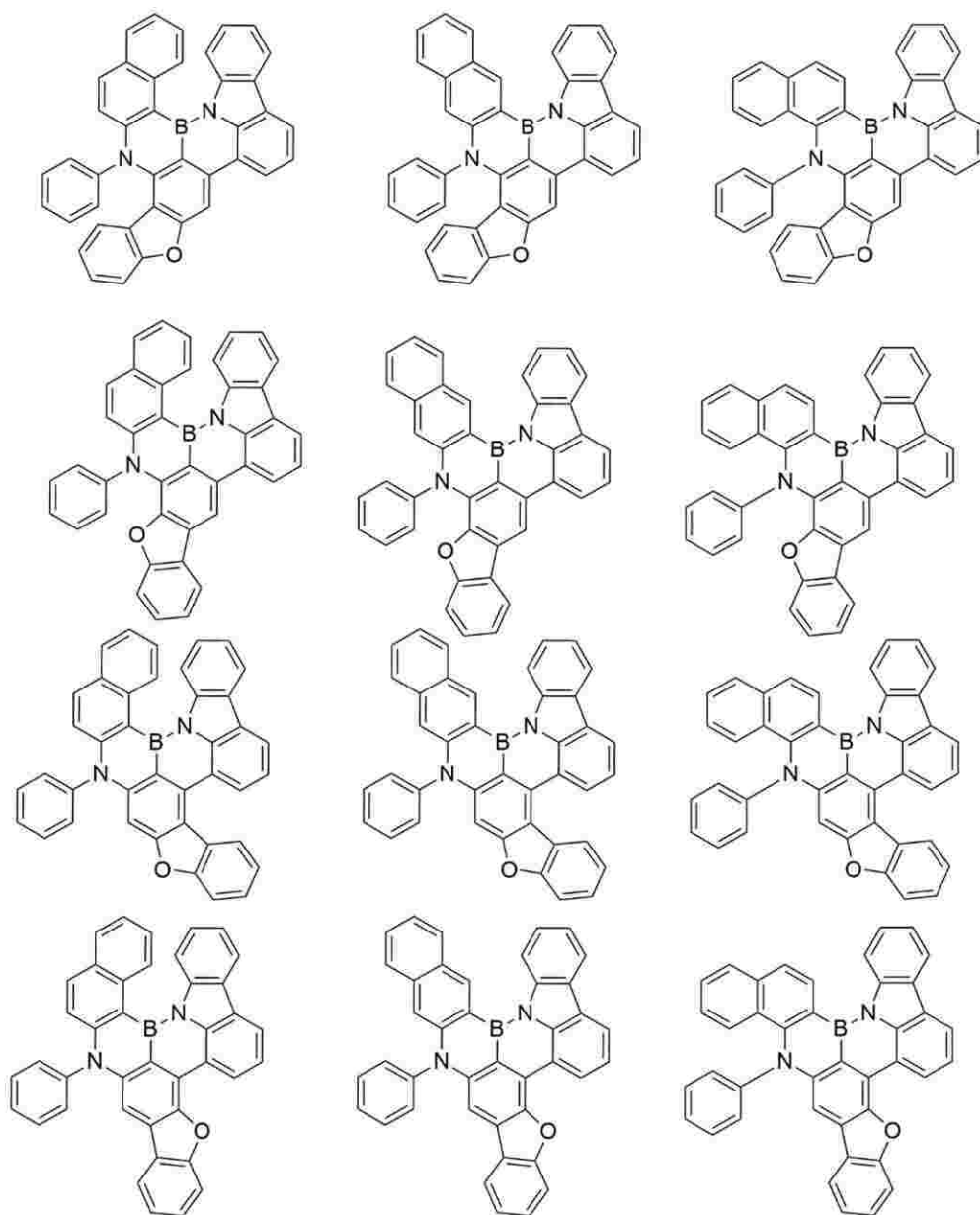
20

30

40

50

【化 2 2 4】

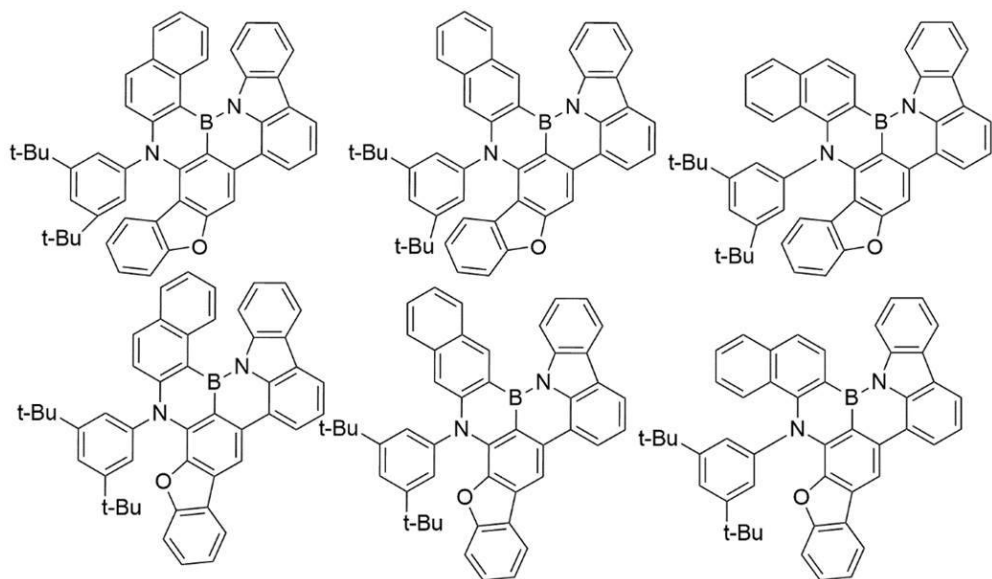


10

20

30

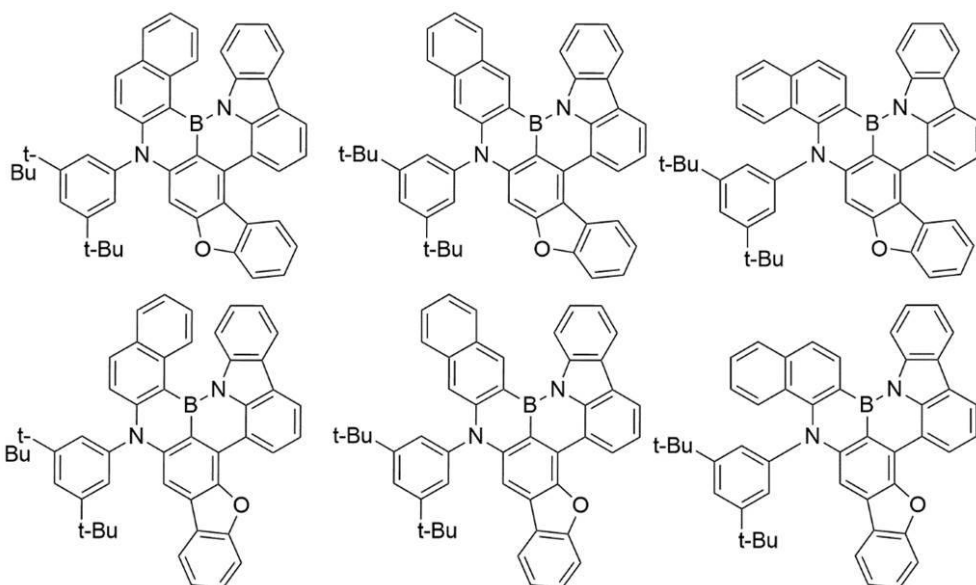
【化 2 2 5】



40

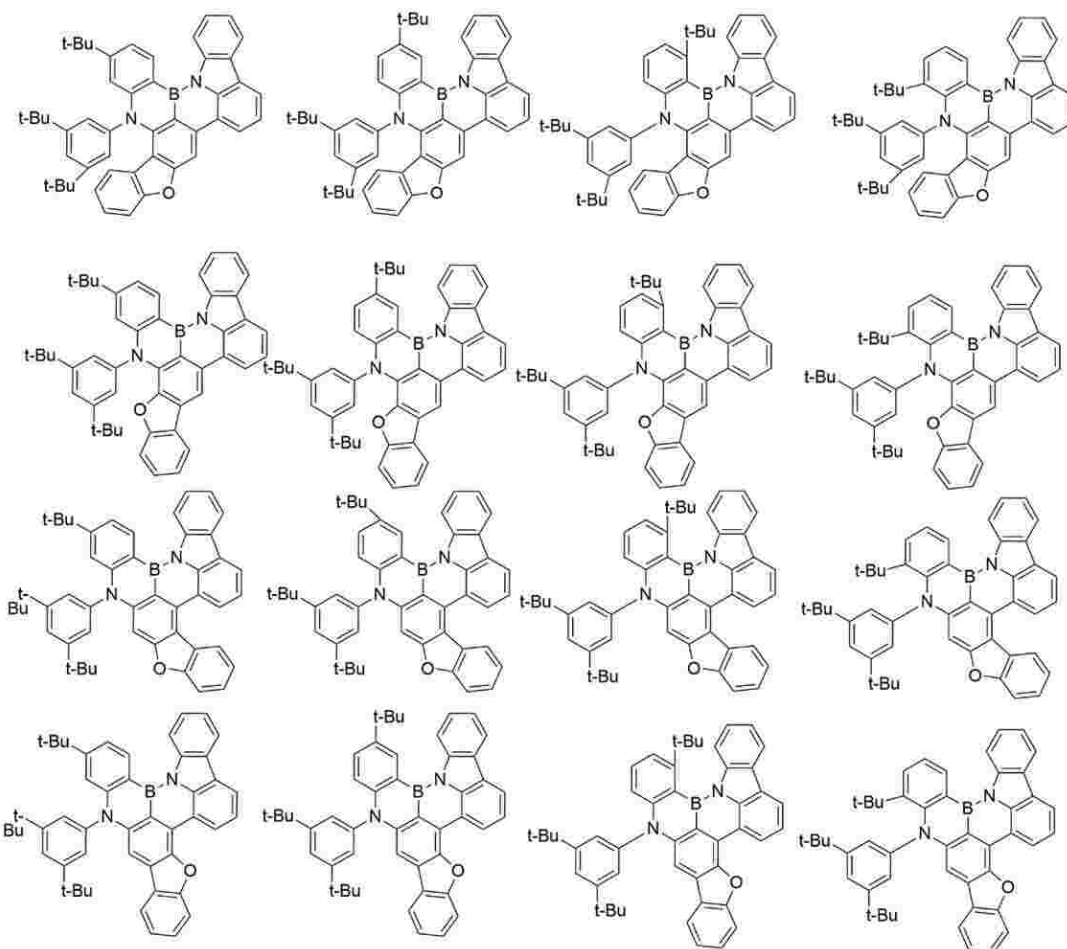
50

【化 2 2 6】



10

【化 2 2 7】



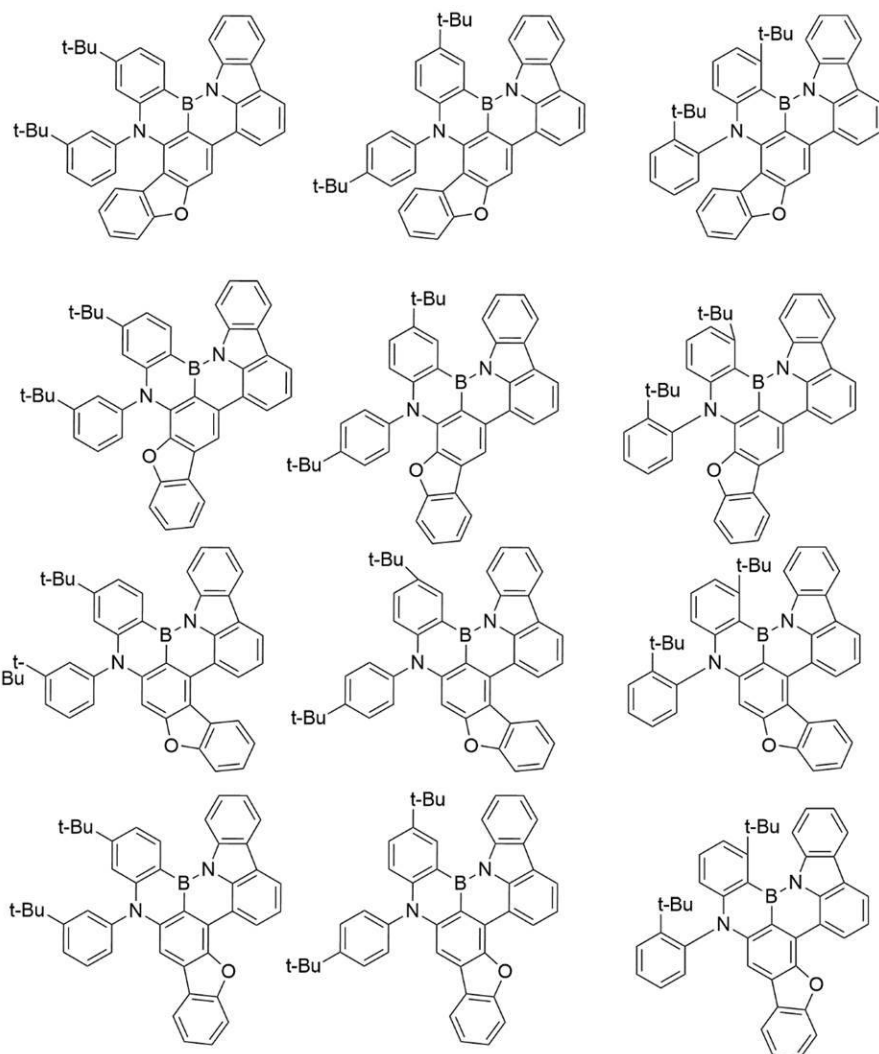
20

30

40

50

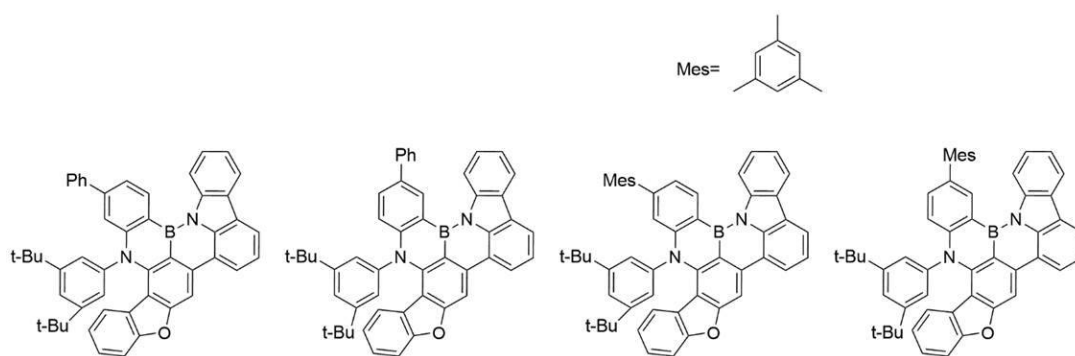
【化 2 2 8】



10

20

【化 2 2 9】

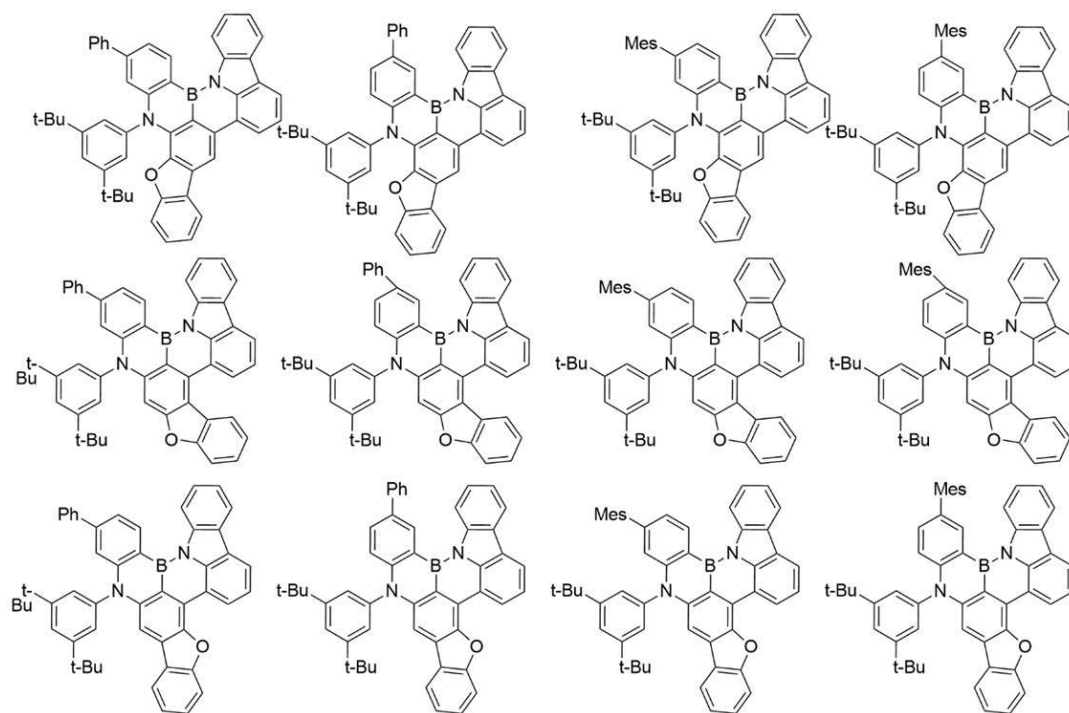


30

40

50

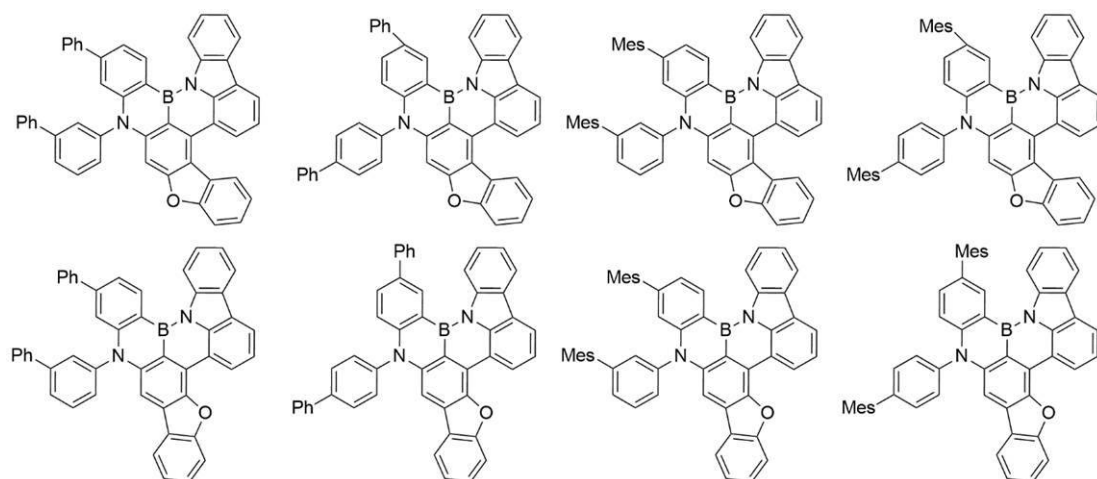
【化 2 3 0】



10

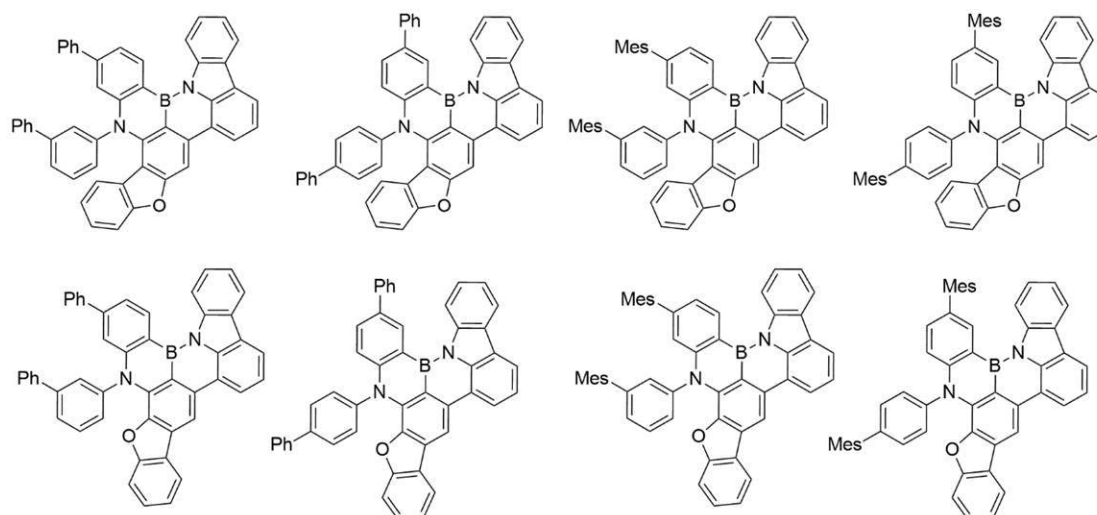
20

【化 2 3 1】



30

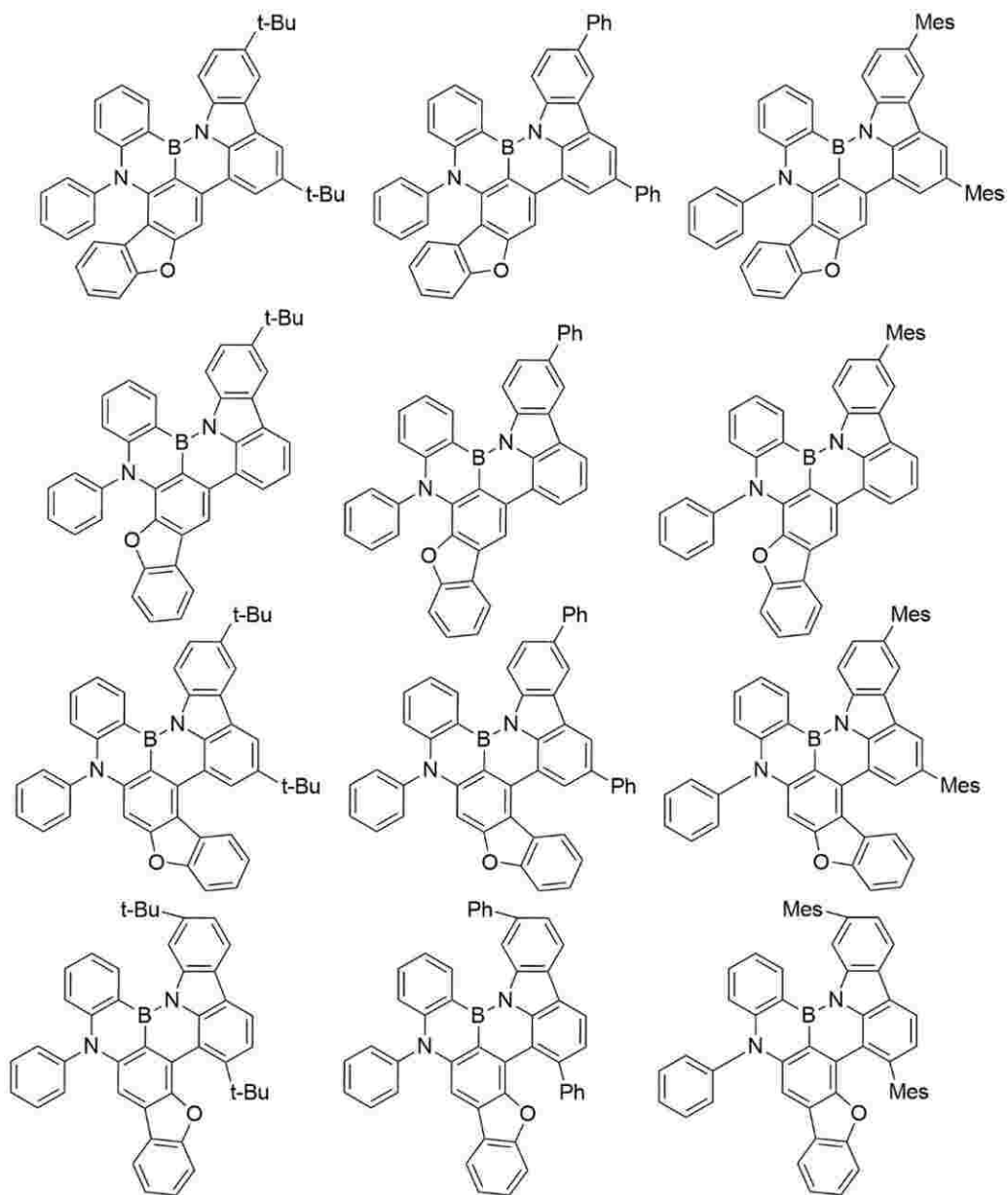
【化 2 3 2】



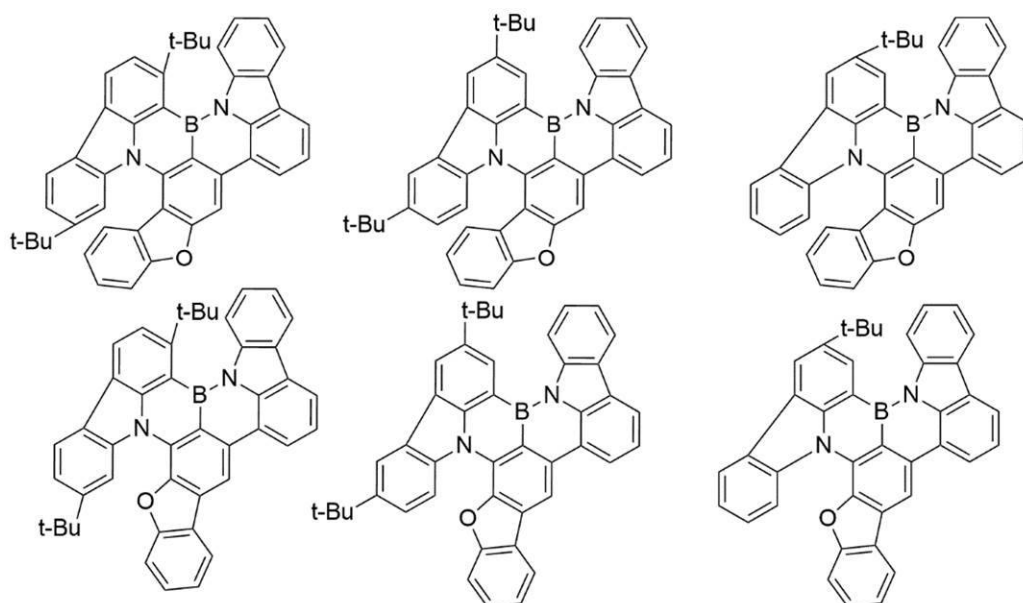
40

50

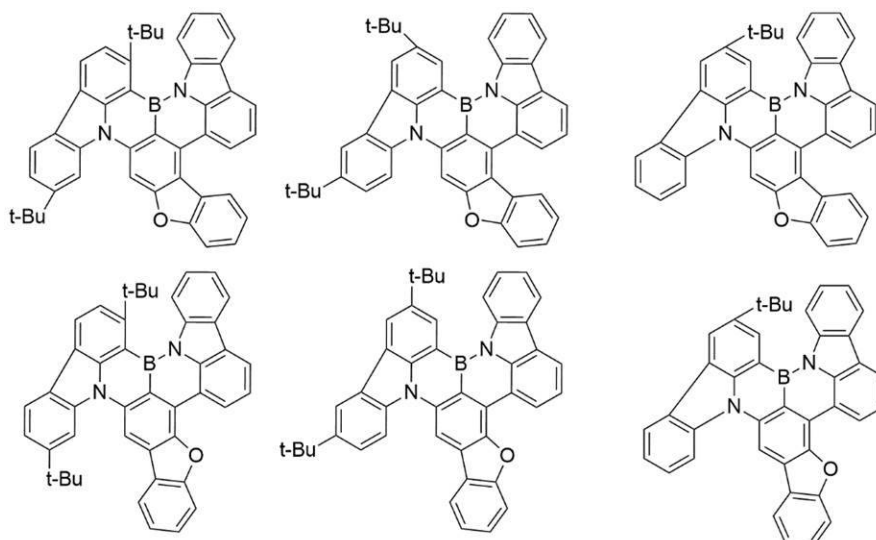
【化 2 3 3】



【化 2 3 4】

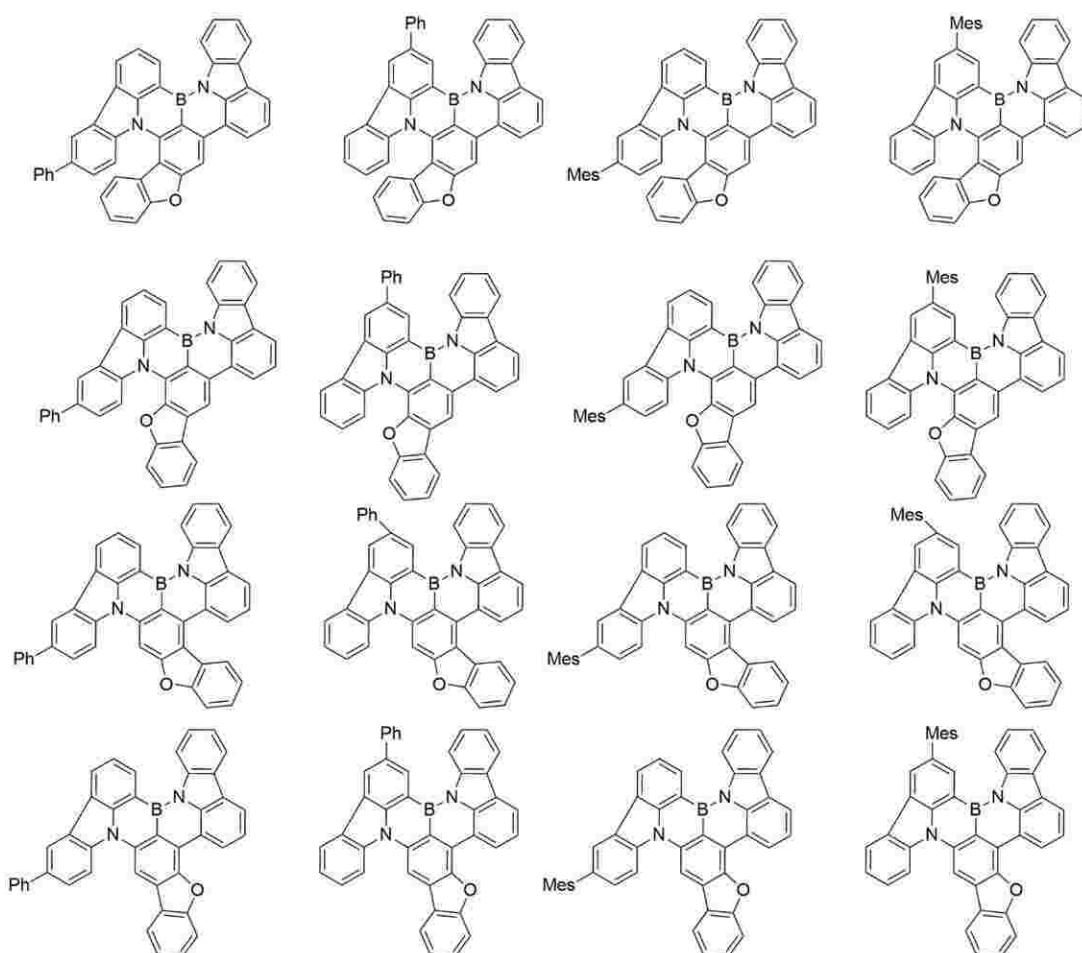


【化 2 3 5】



10

【化 2 3 6】



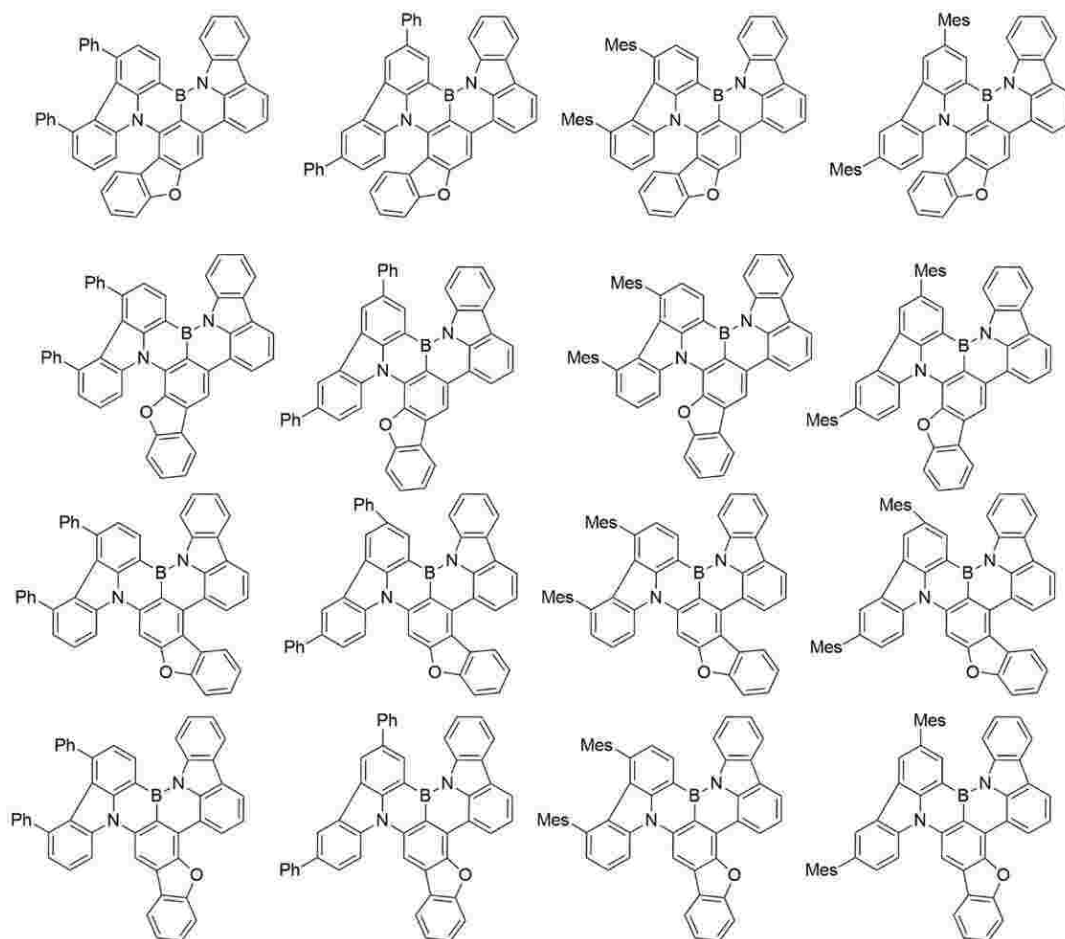
20

30

40

50

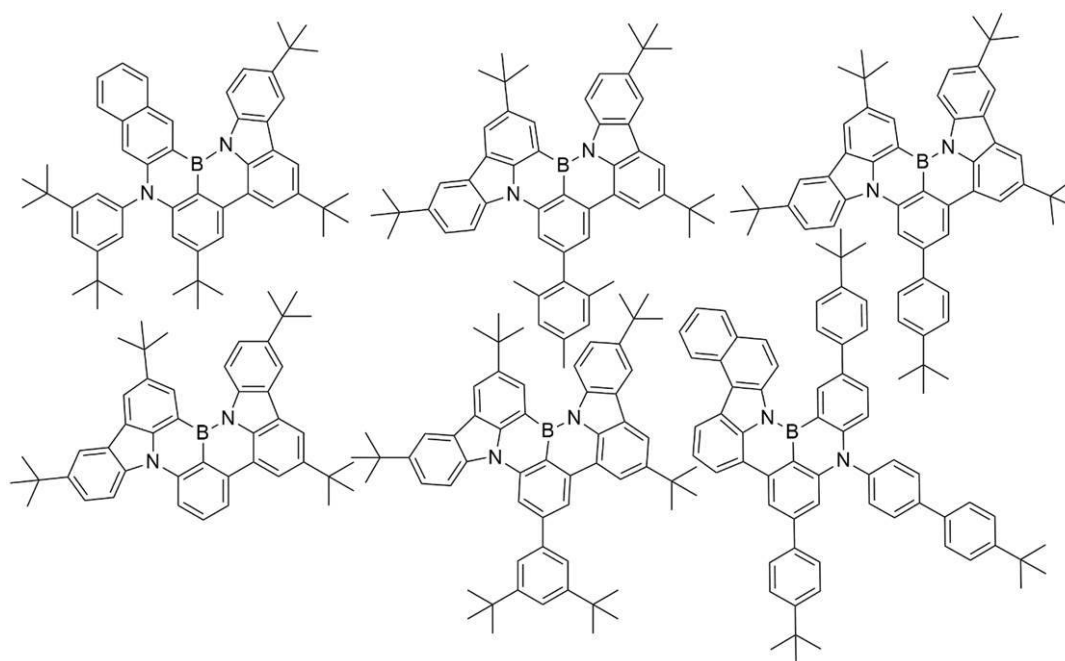
【化 2 3 7】



10

20

【化 2 3 8】

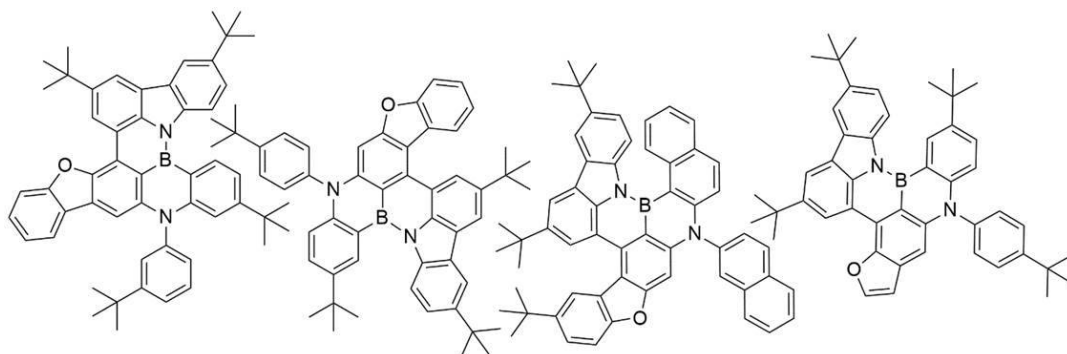


30

40

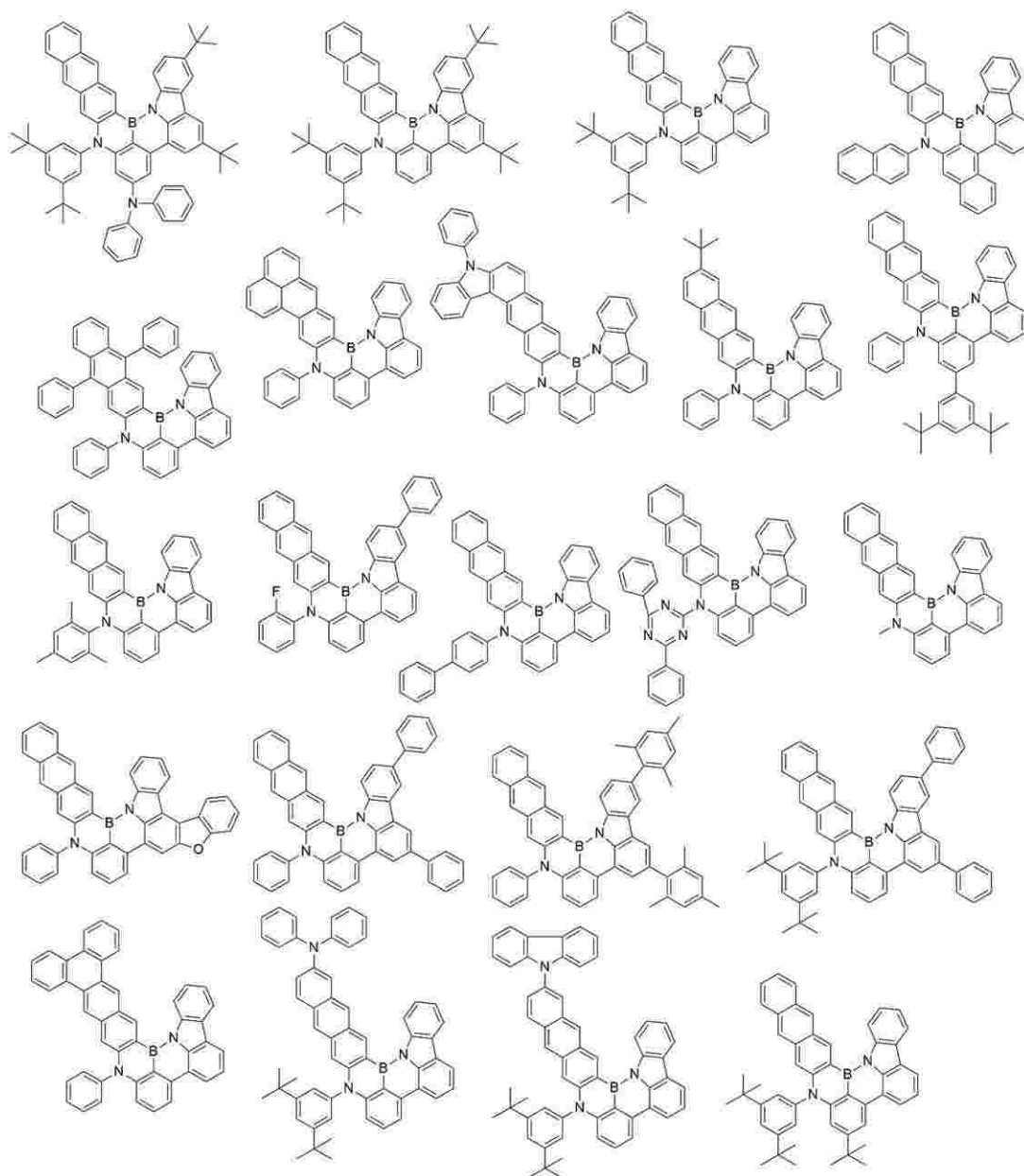
50

【化 2 3 9】



10

【化 2 4 0】



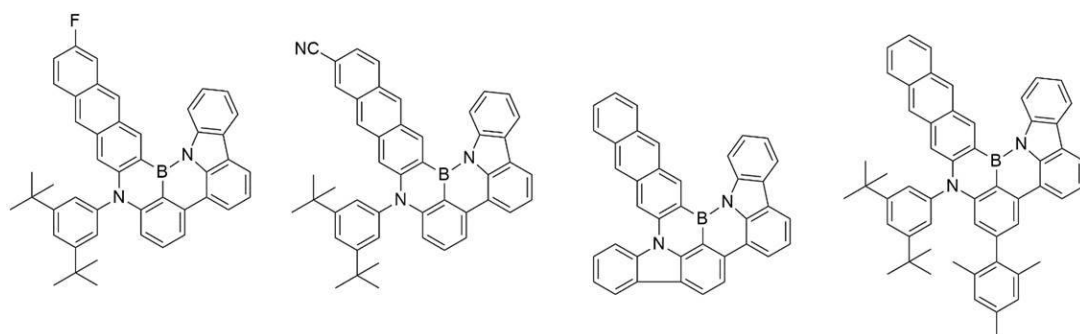
20

30

40

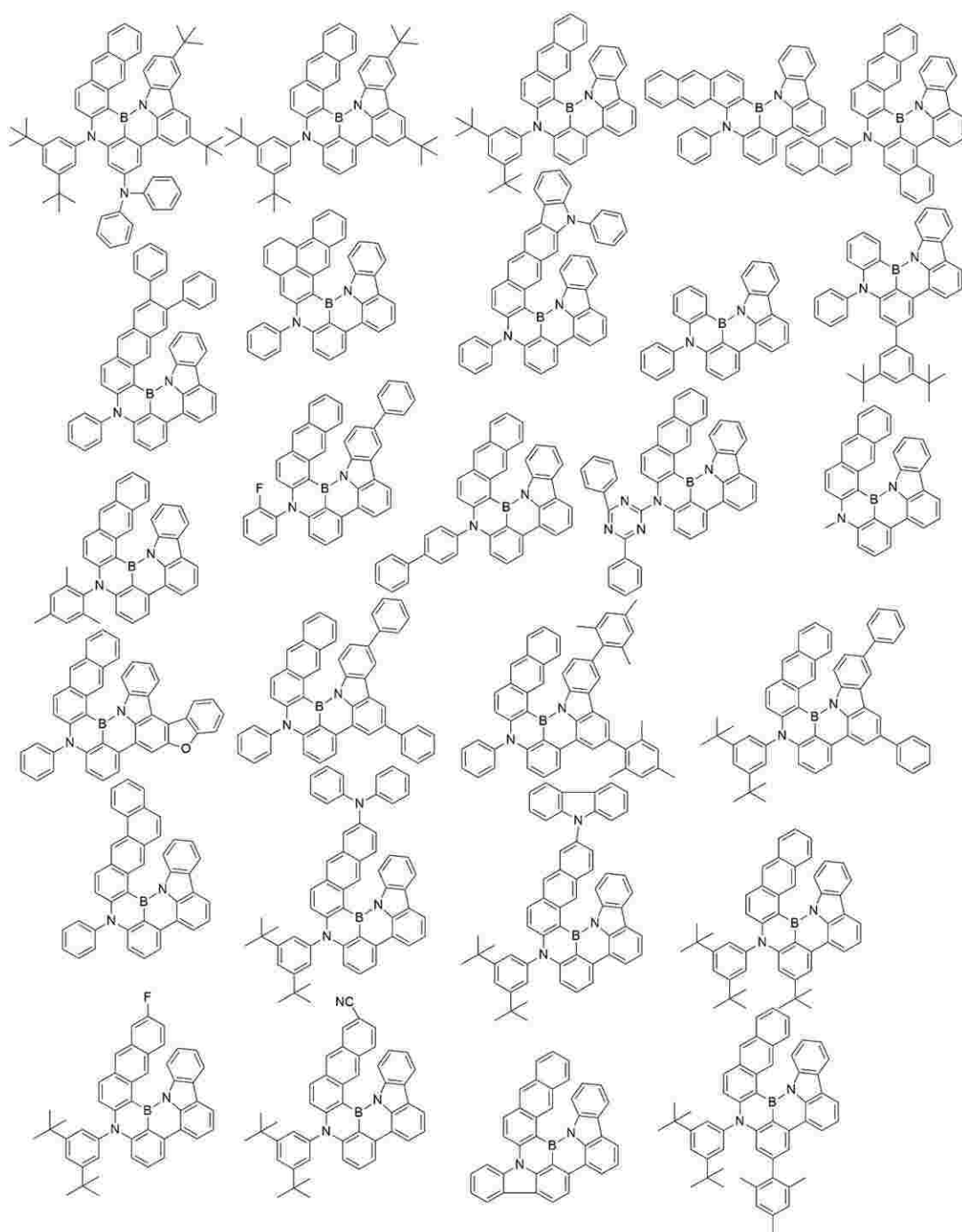
50

【化 2 4 1】



10

【化 2 4 2】



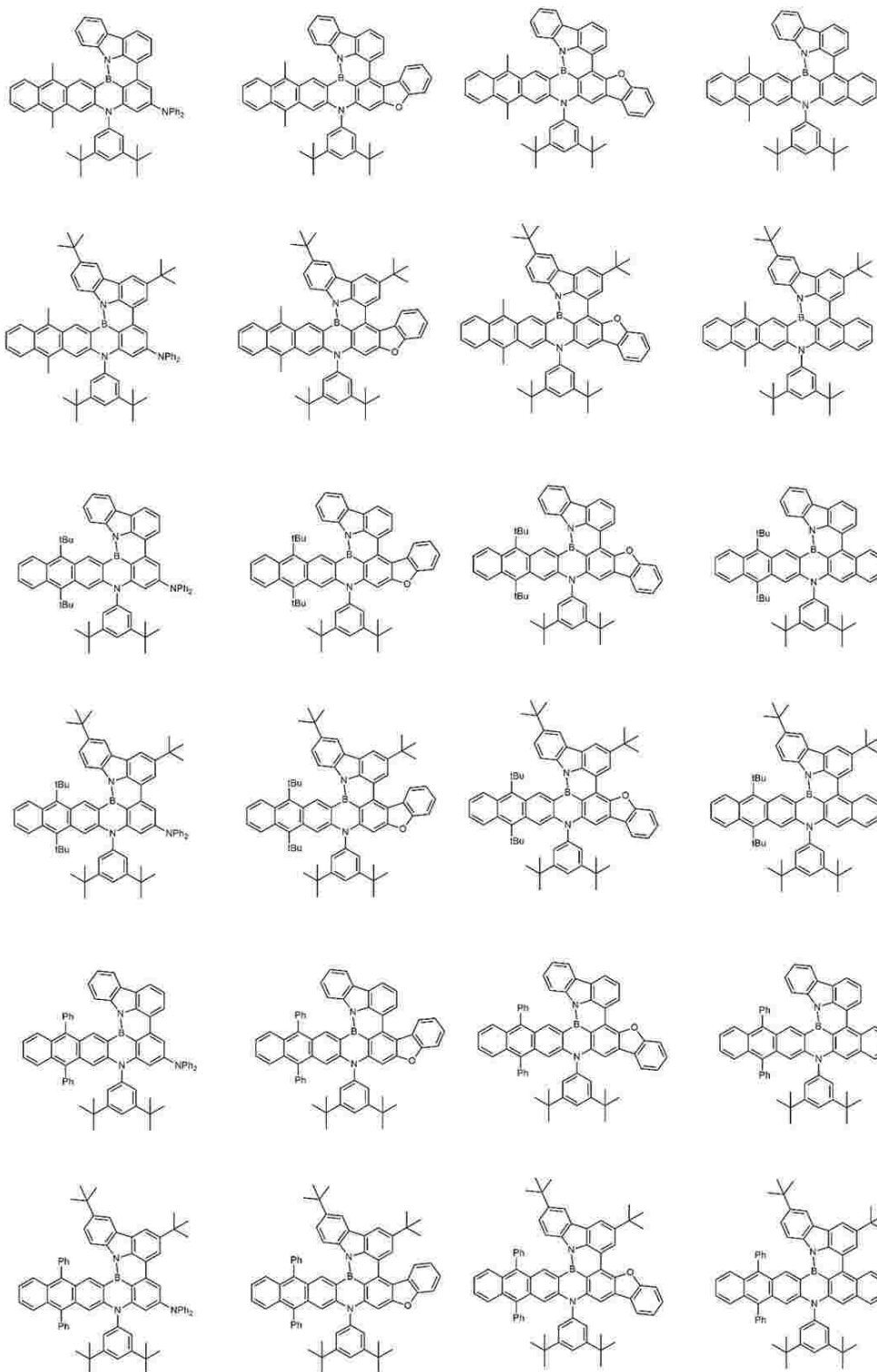
20

30

40

50

【化 2 4 3】



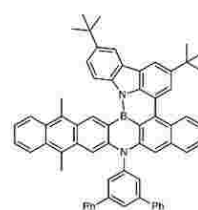
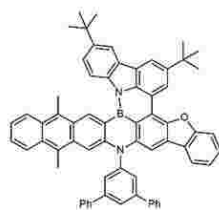
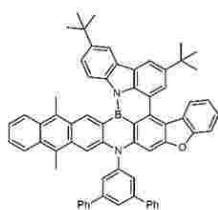
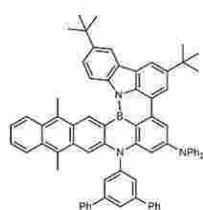
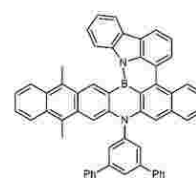
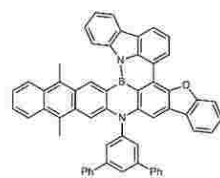
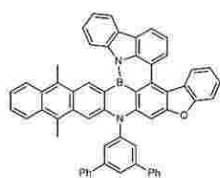
10

20

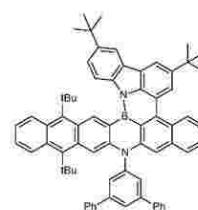
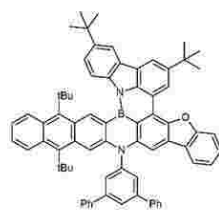
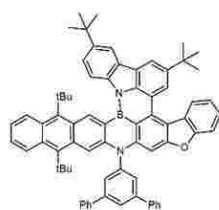
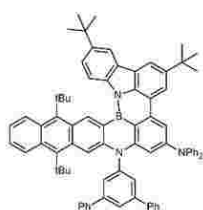
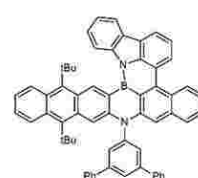
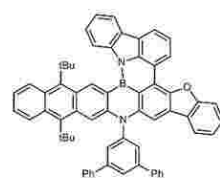
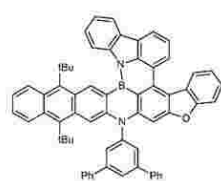
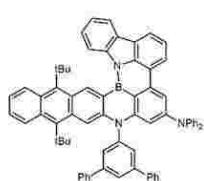
30

40

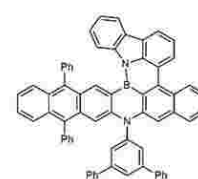
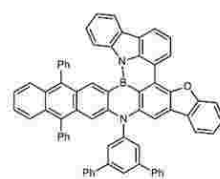
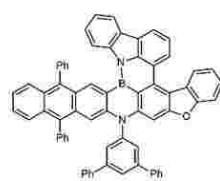
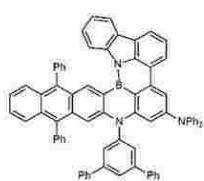
50



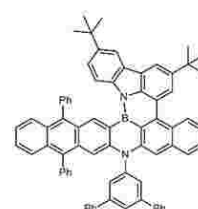
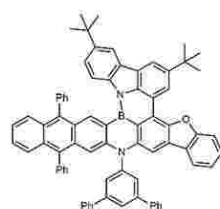
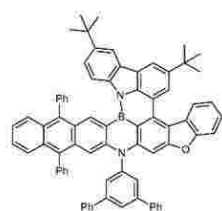
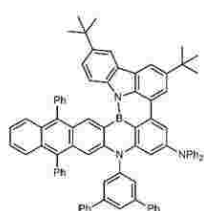
20



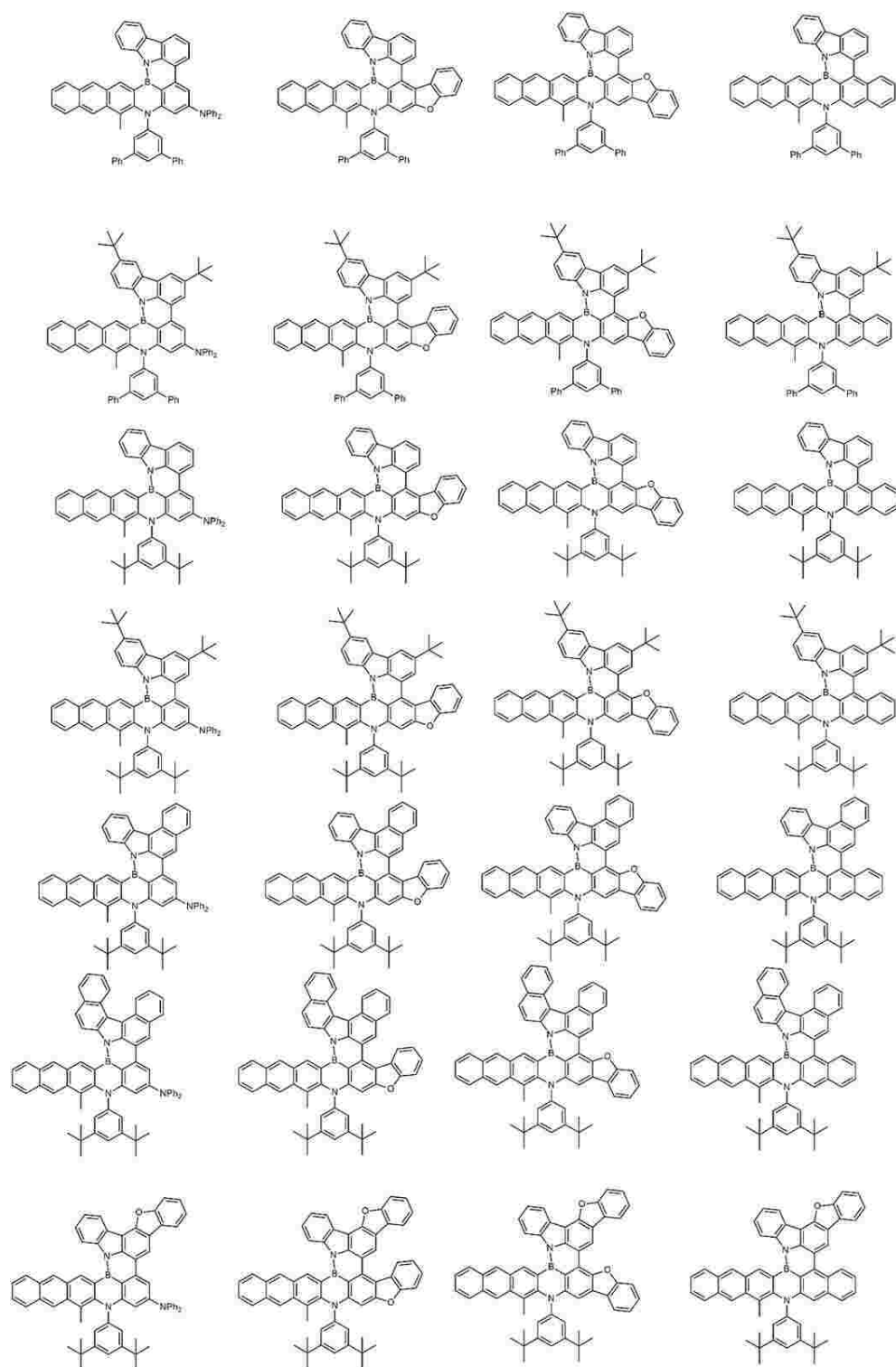
30



40



【化 2 4 5】



10

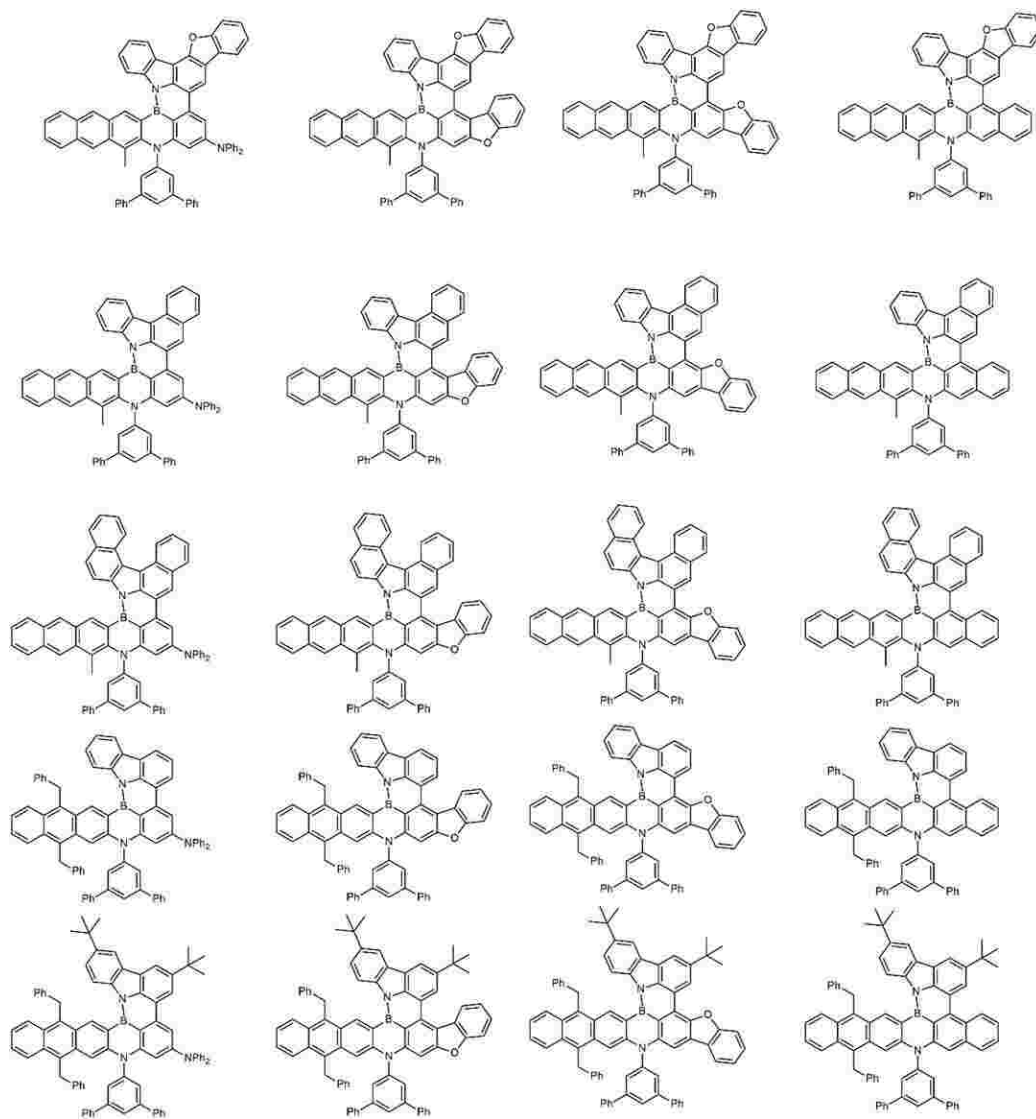
20

30

40

50

【化 2 4 6】

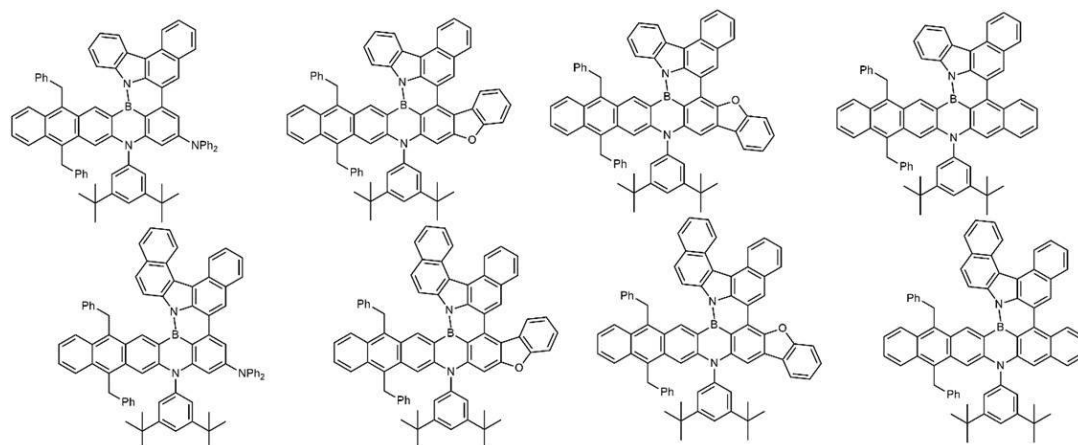


10

20

30

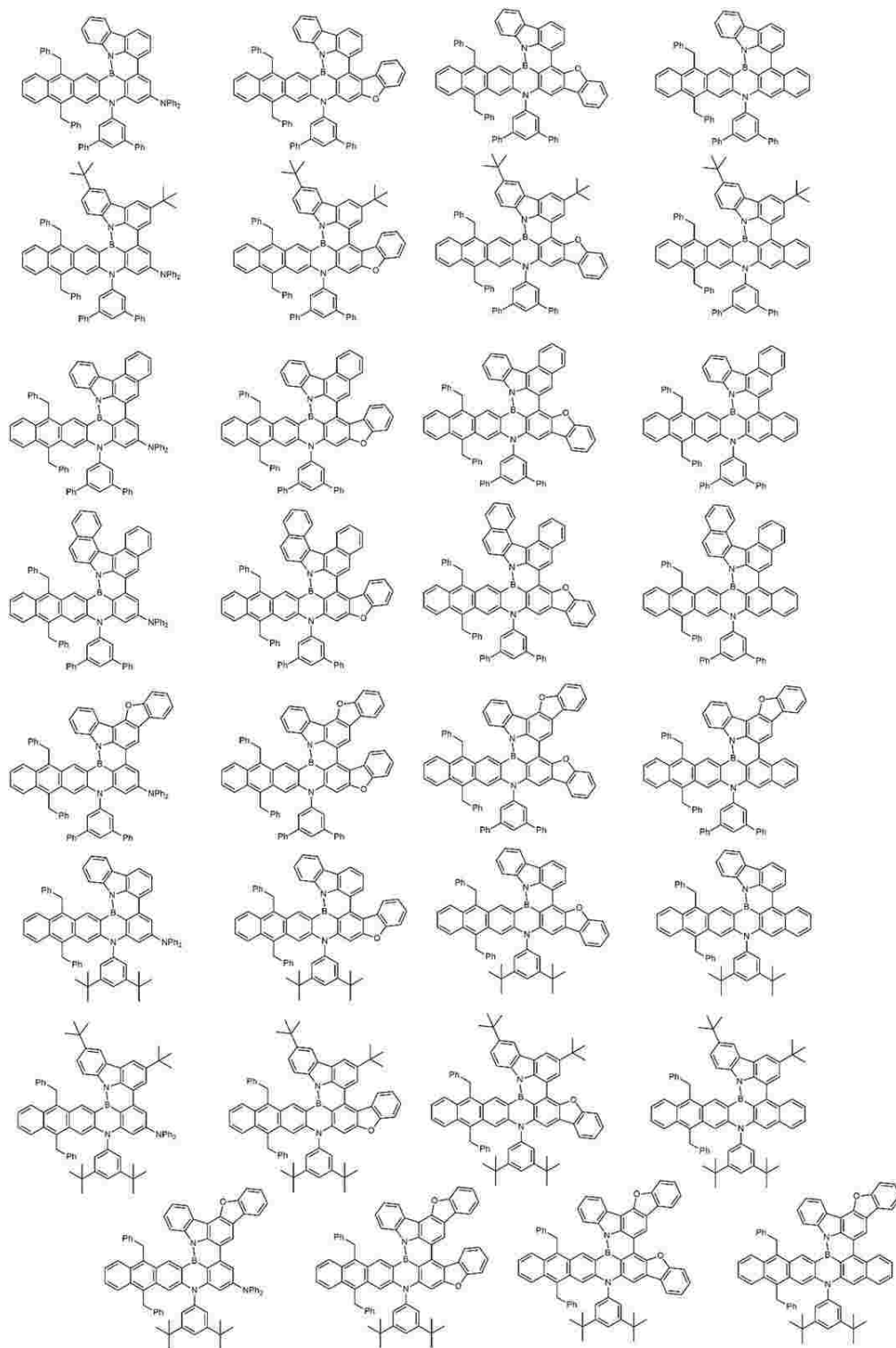
【化 2 4 7】



40

50

【化 2 4 8】



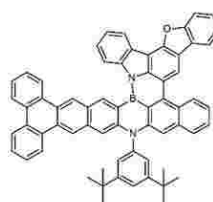
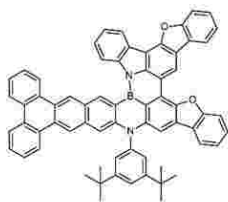
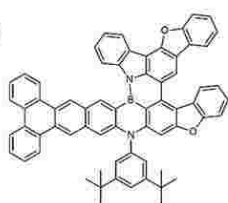
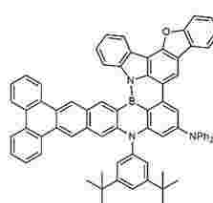
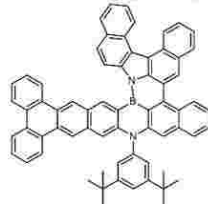
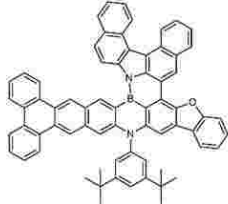
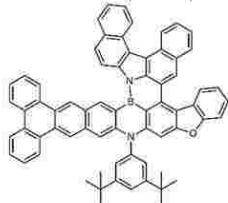
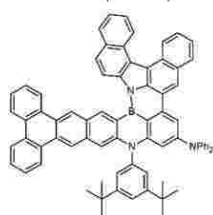
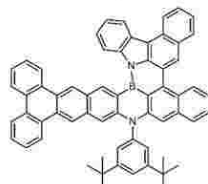
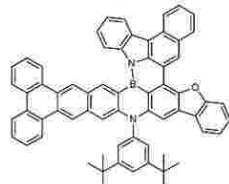
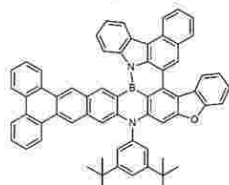
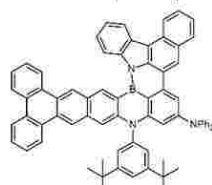
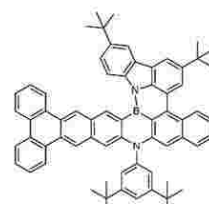
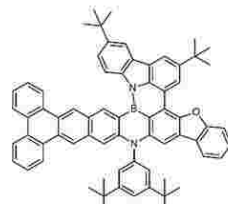
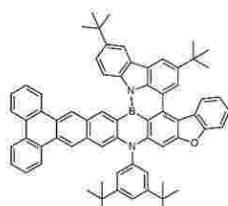
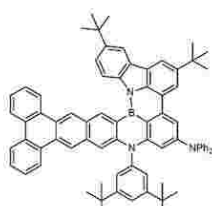
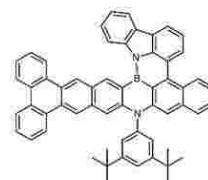
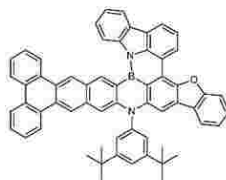
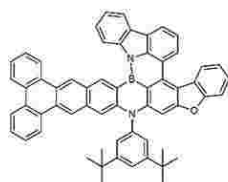
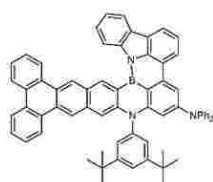
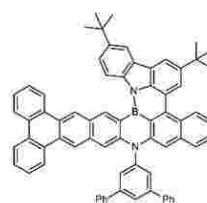
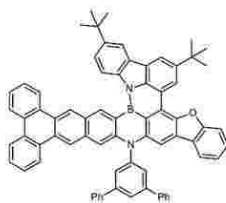
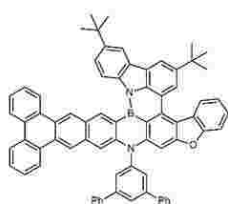
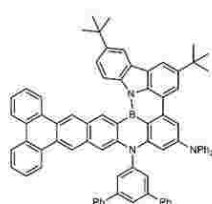
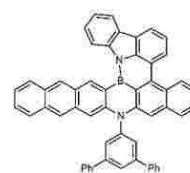
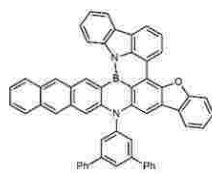
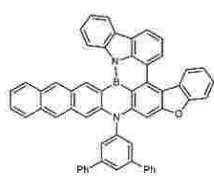
10

20

30

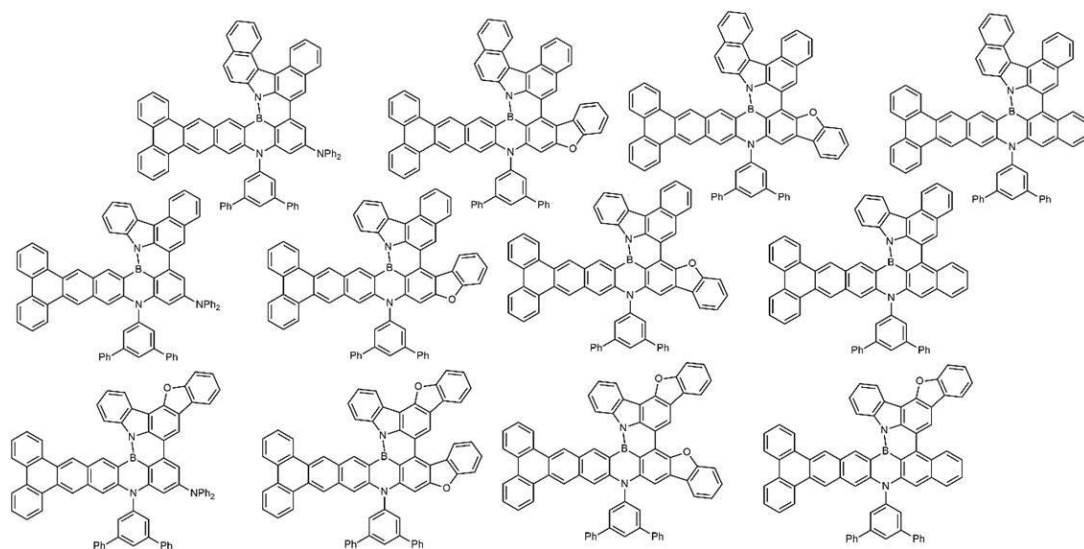
40

50



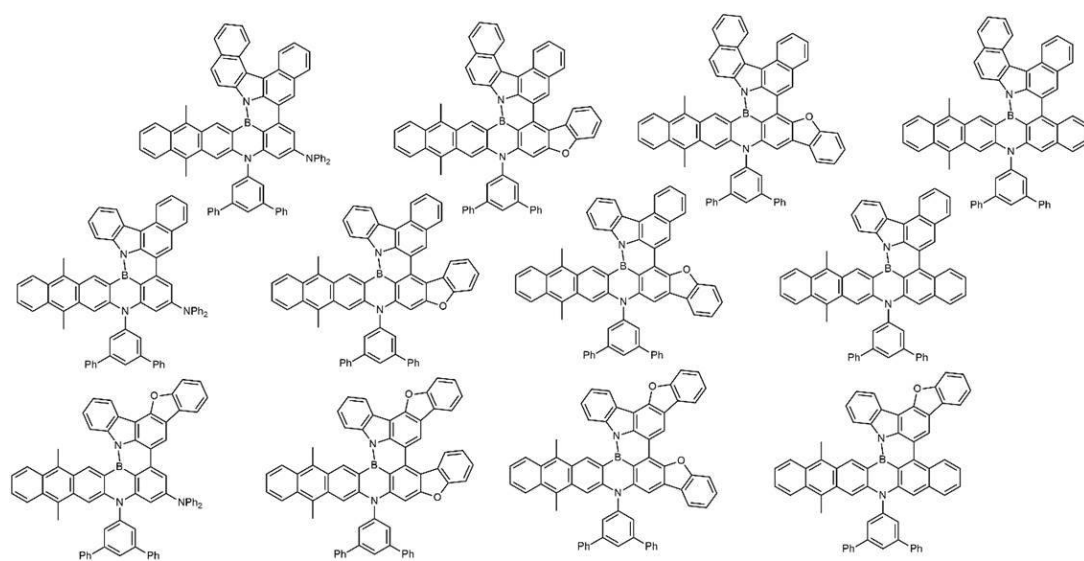
40

【化 2 5 0】



10

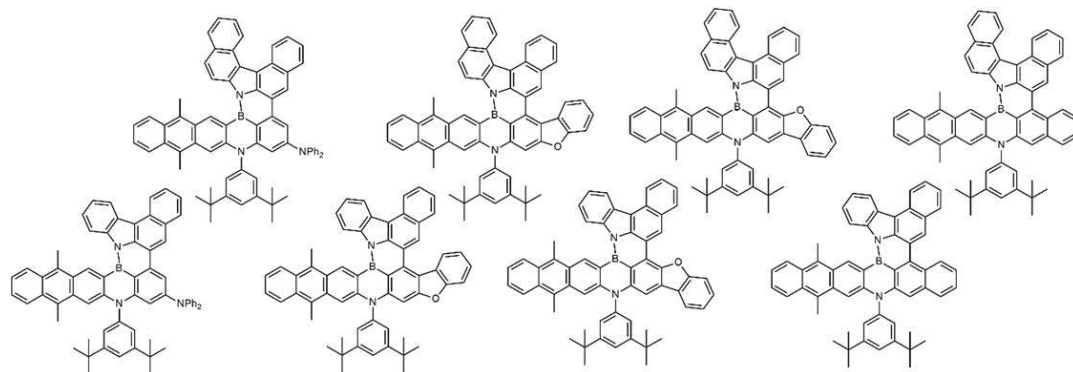
【化 2 5 1】



20

30

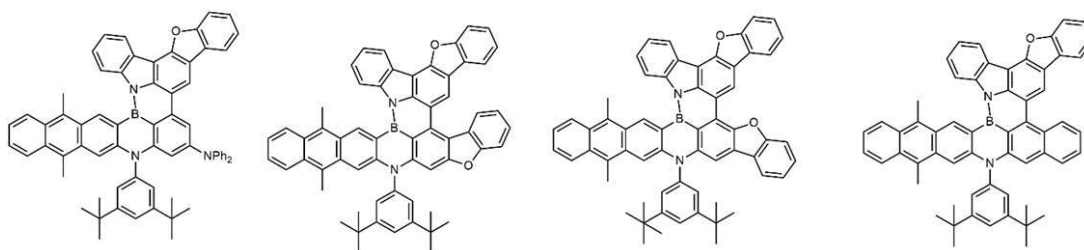
【化 2 5 2】



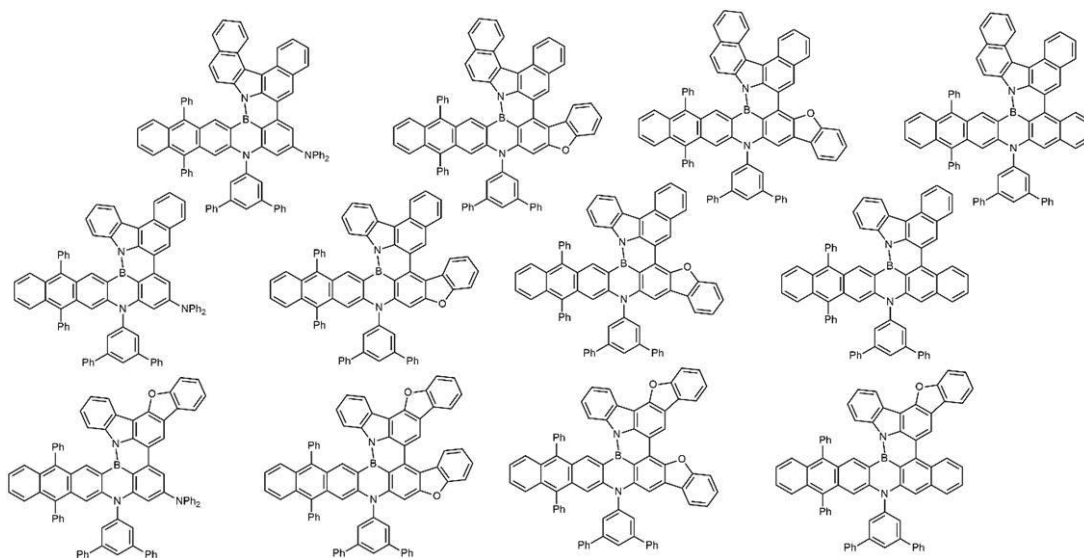
40

50

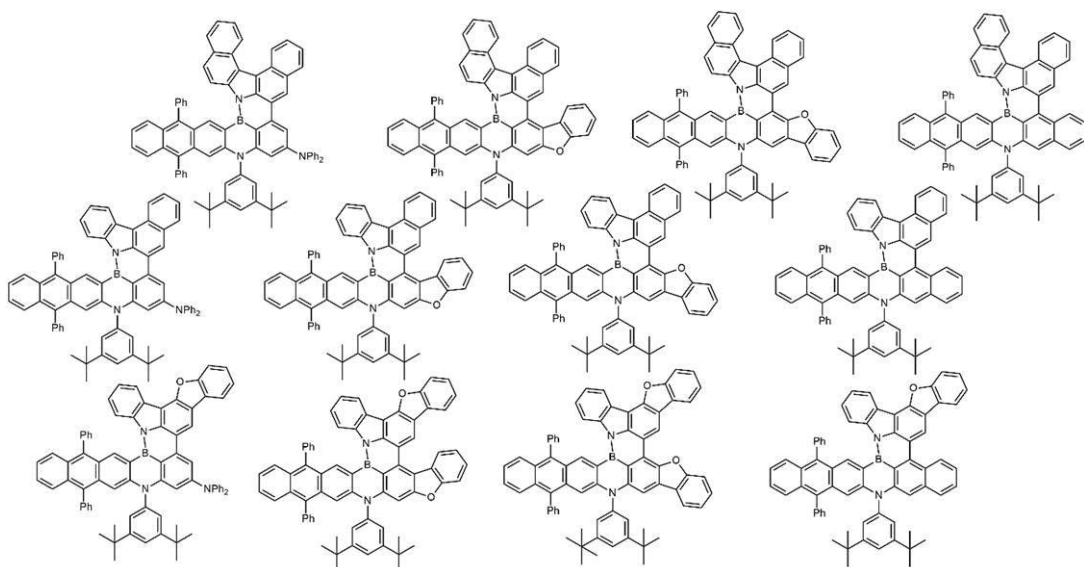
【化 2 5 3】



【化 2 5 4】



【化 2 5 5】



10

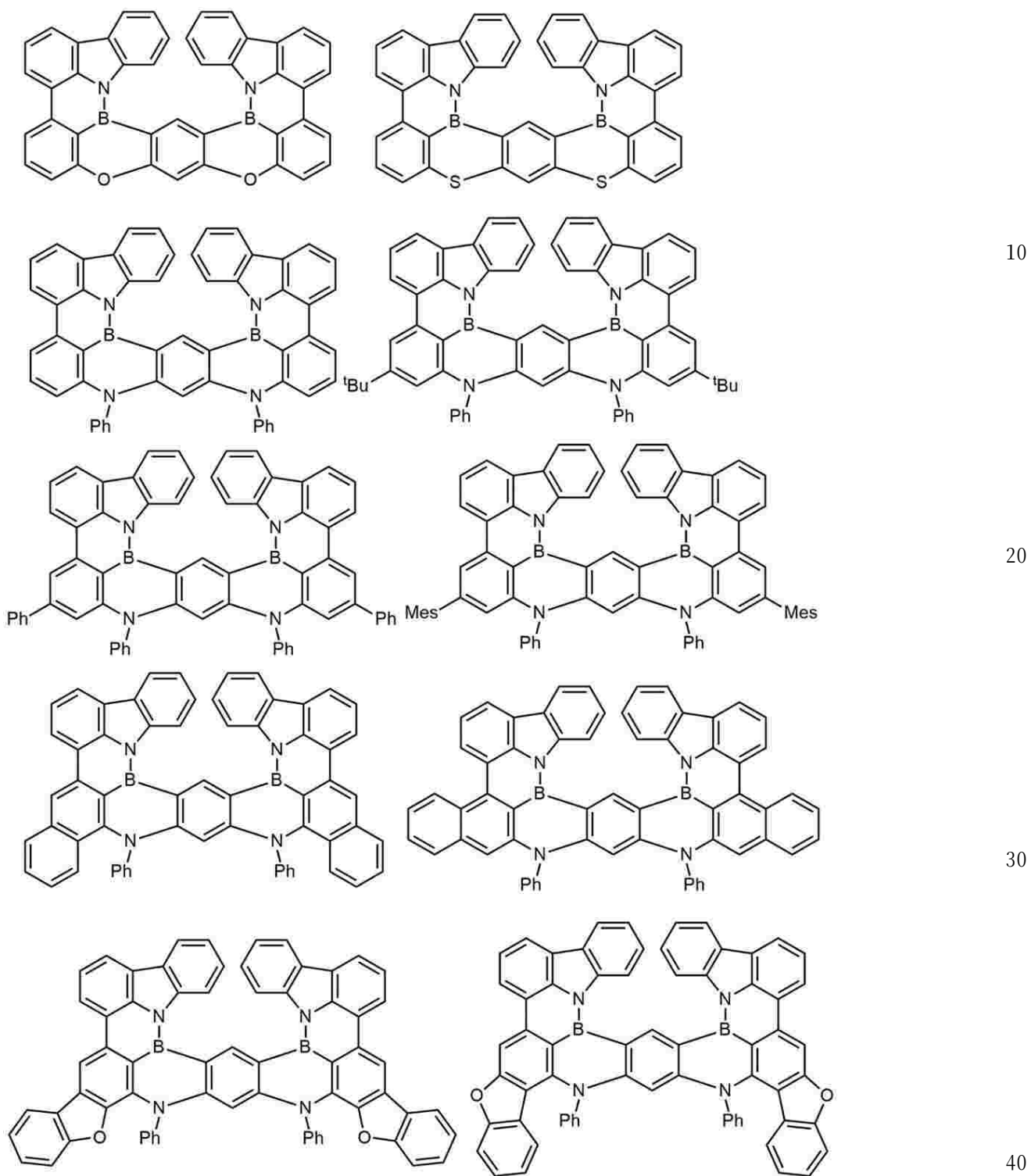
20

30

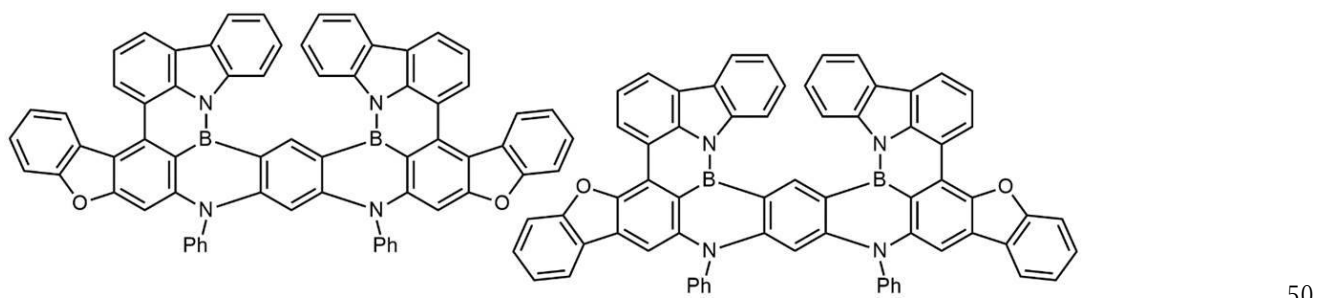
40

50

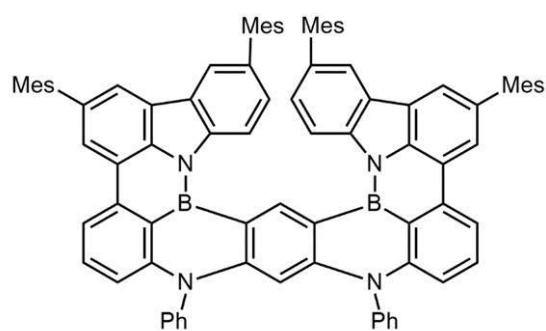
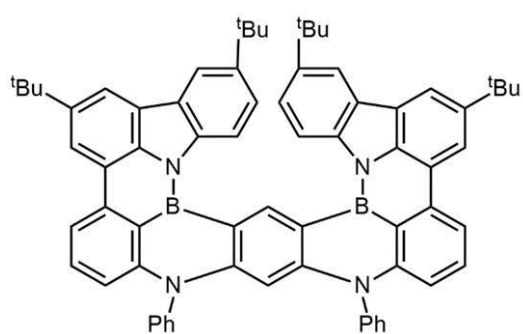
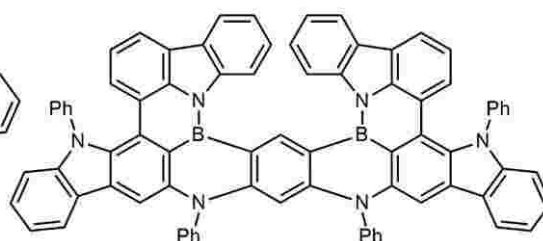
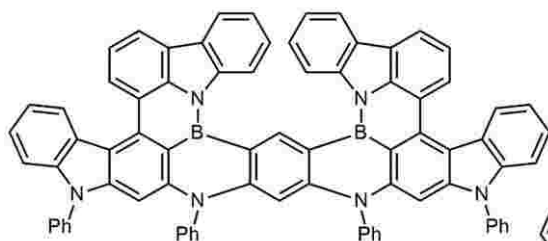
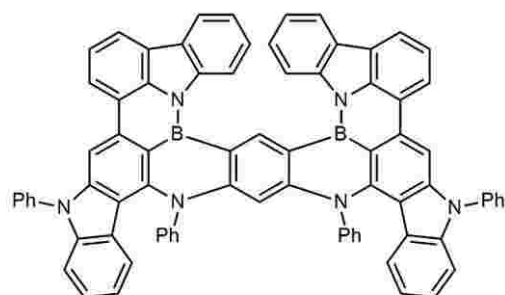
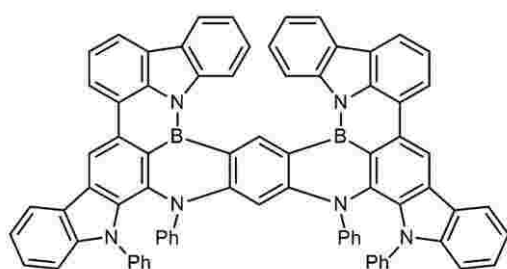
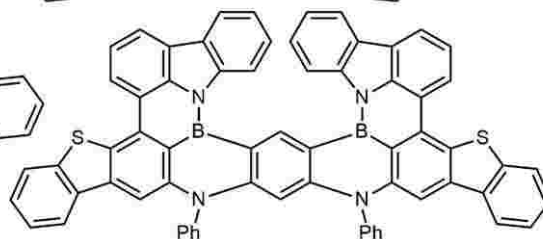
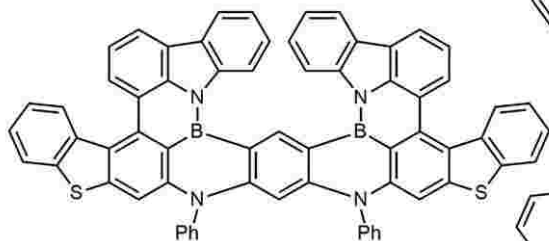
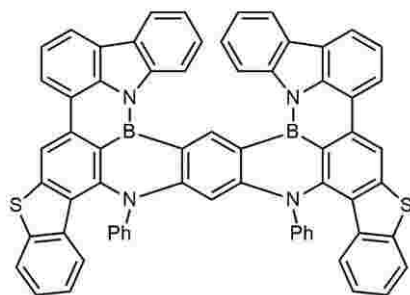
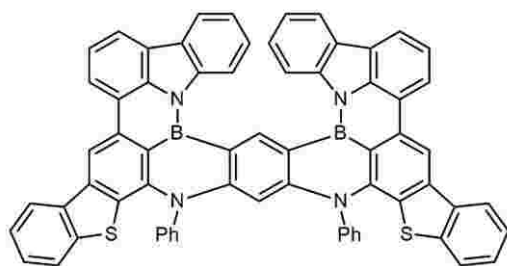
【化 2 5 6】



【化 2 5 7】



【化 2 5 8】



10

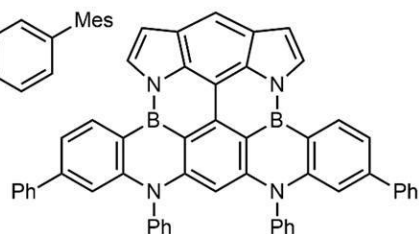
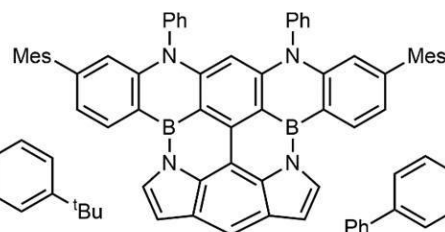
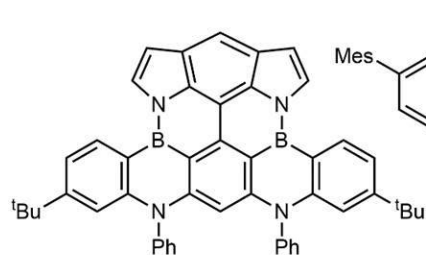
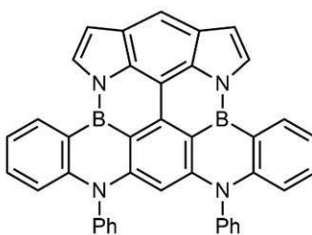
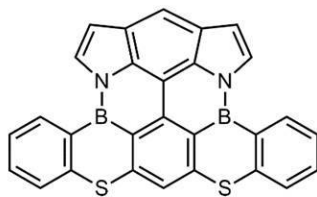
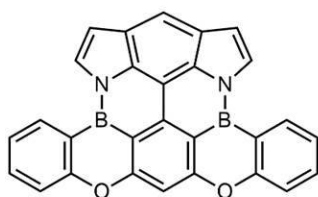
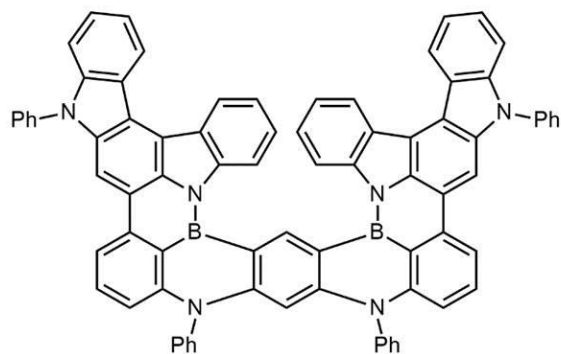
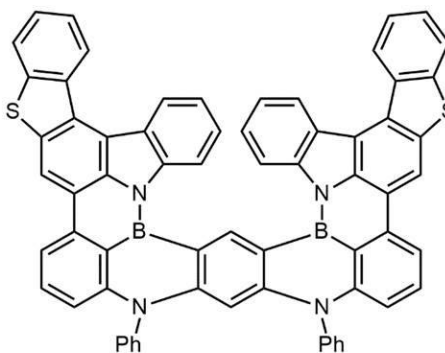
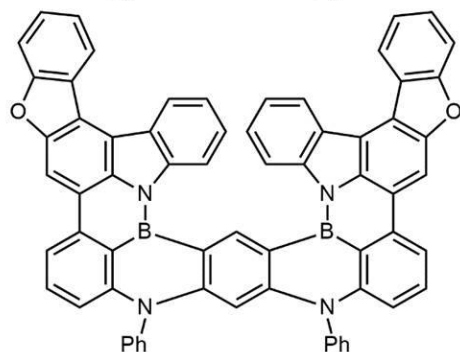
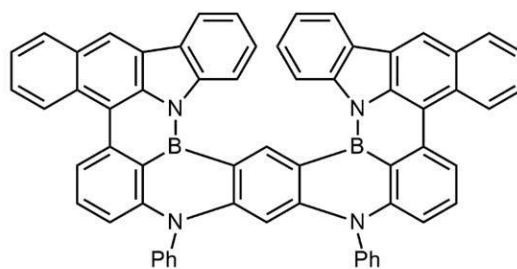
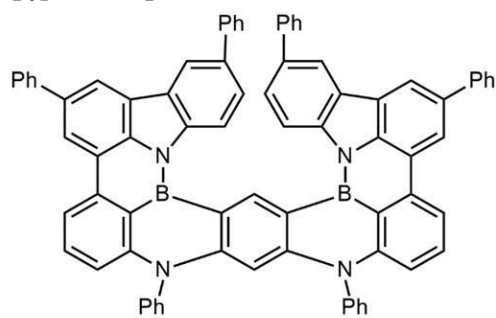
20

30

40

50

【化 2 5 9】



10

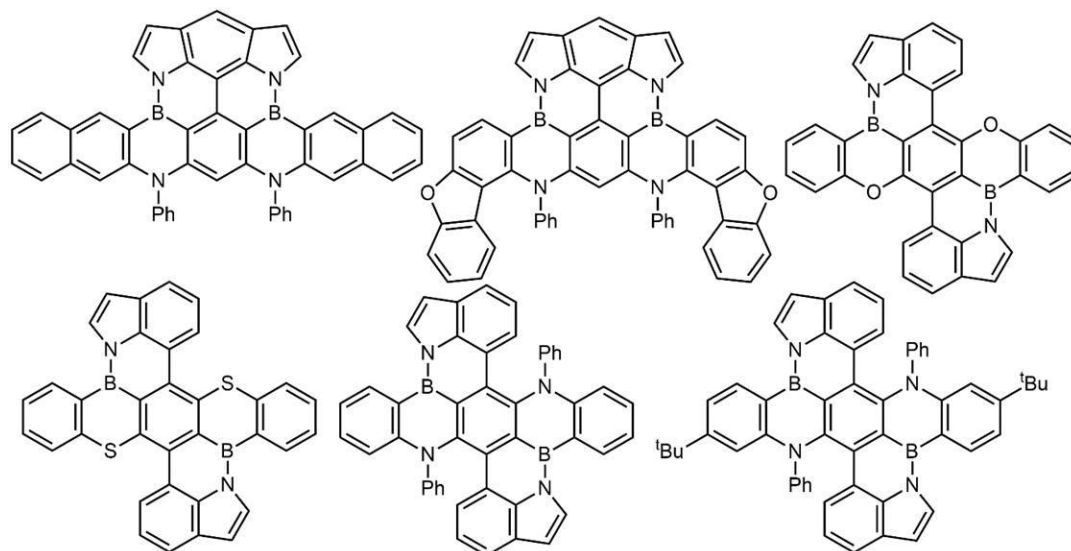
20

30

40

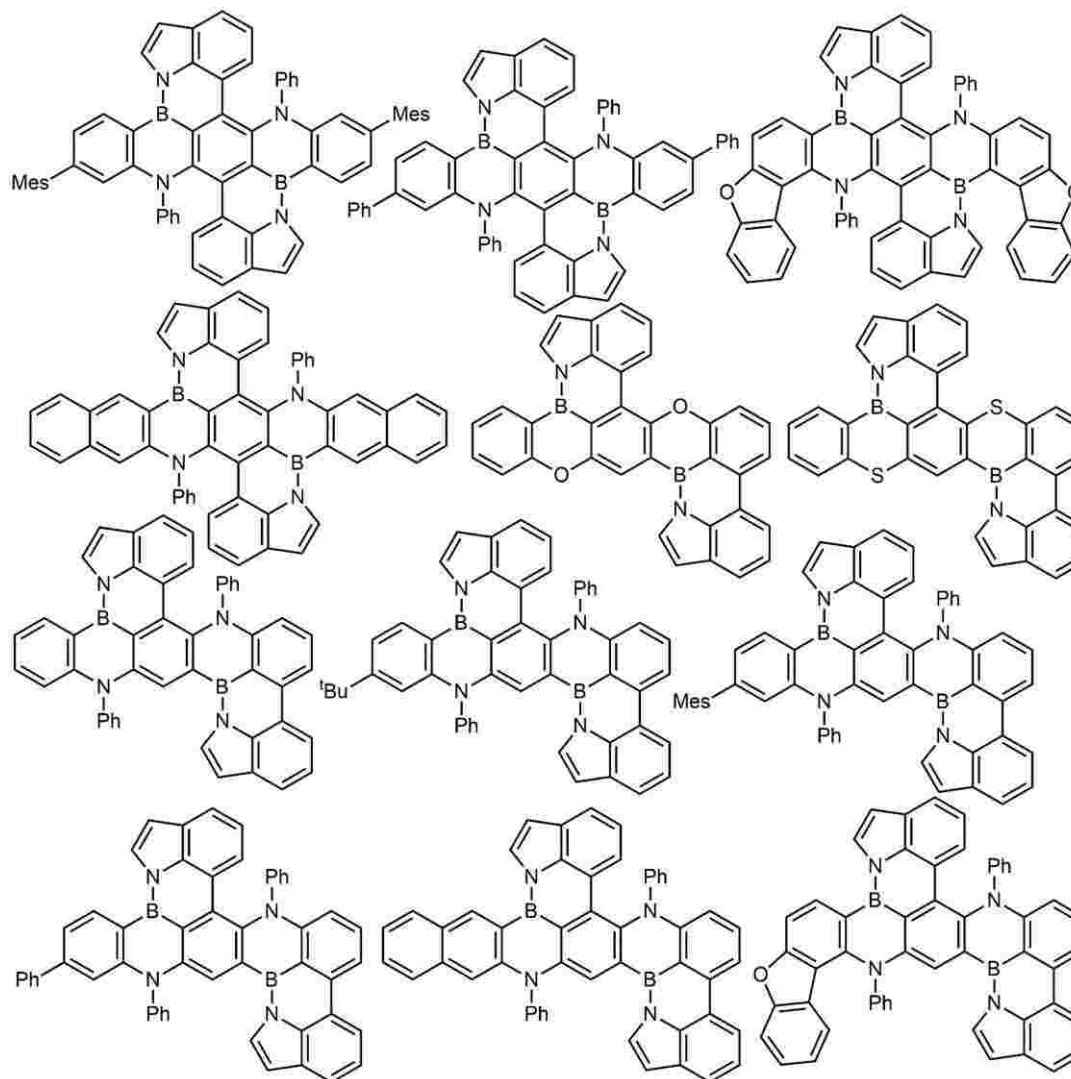
50

【化 2 6 0】



10

【化 2 6 1】



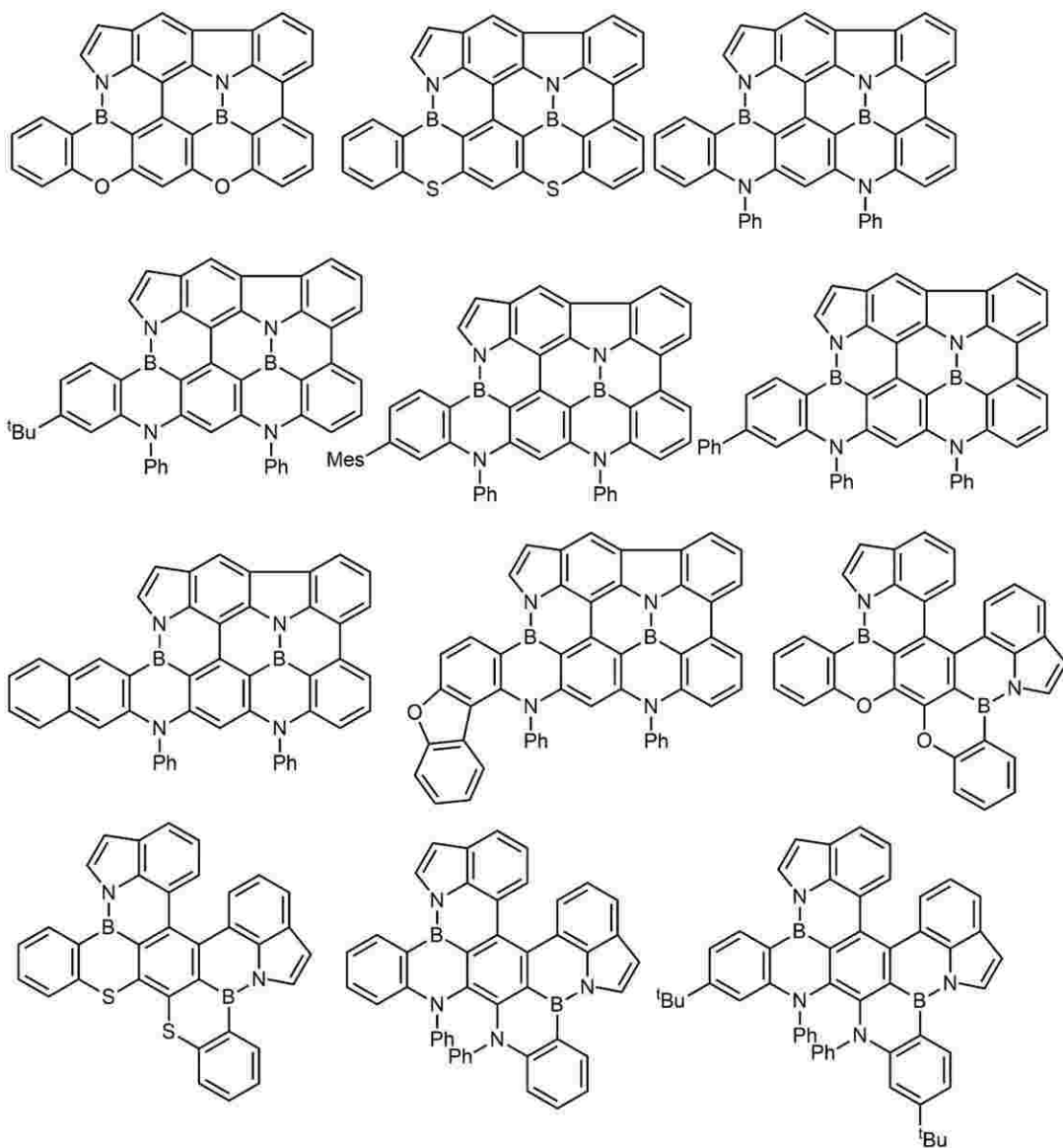
20

30

40

50

【化 2 6 2】



10

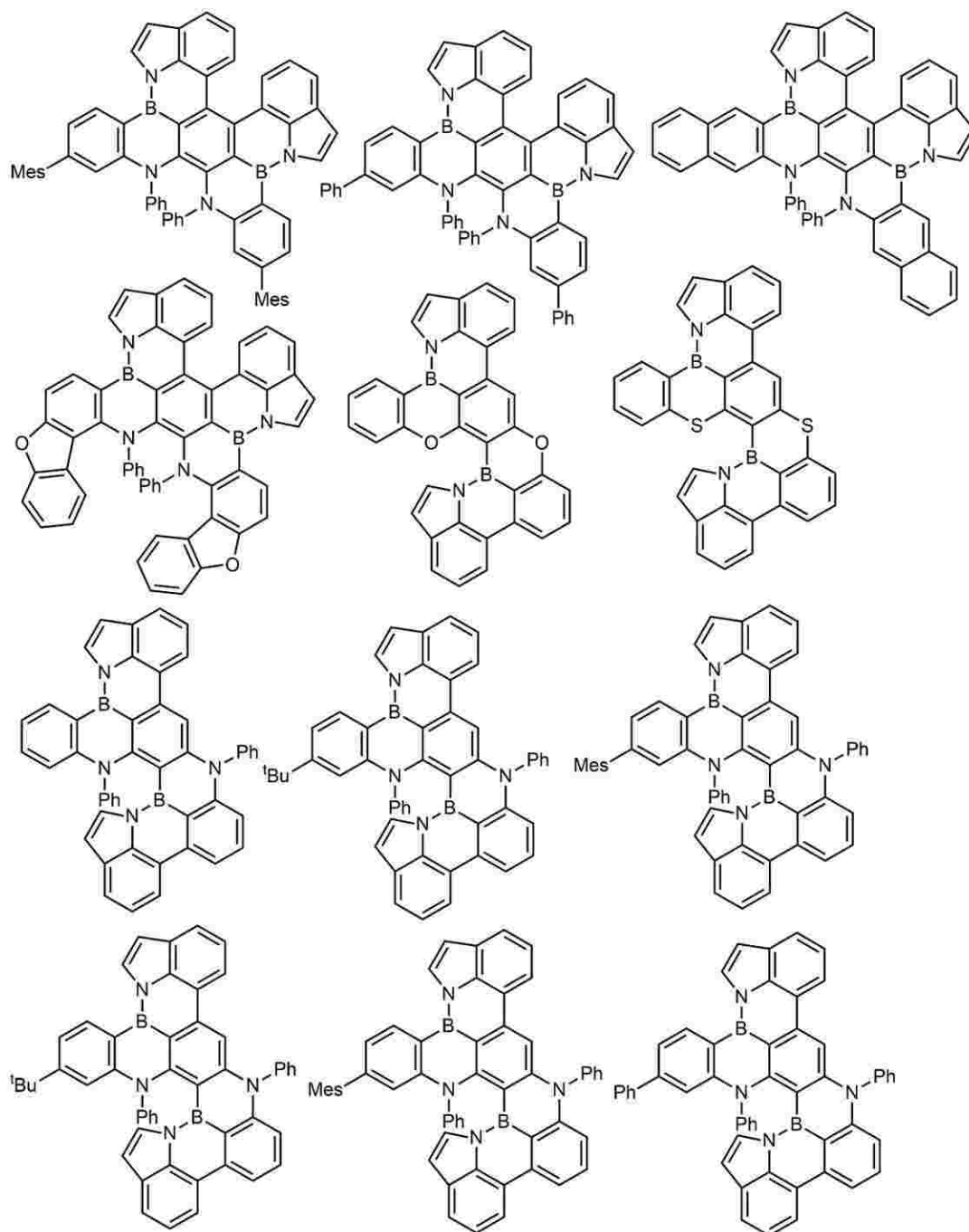
20

30

40

50

【化 2 6 3】



10

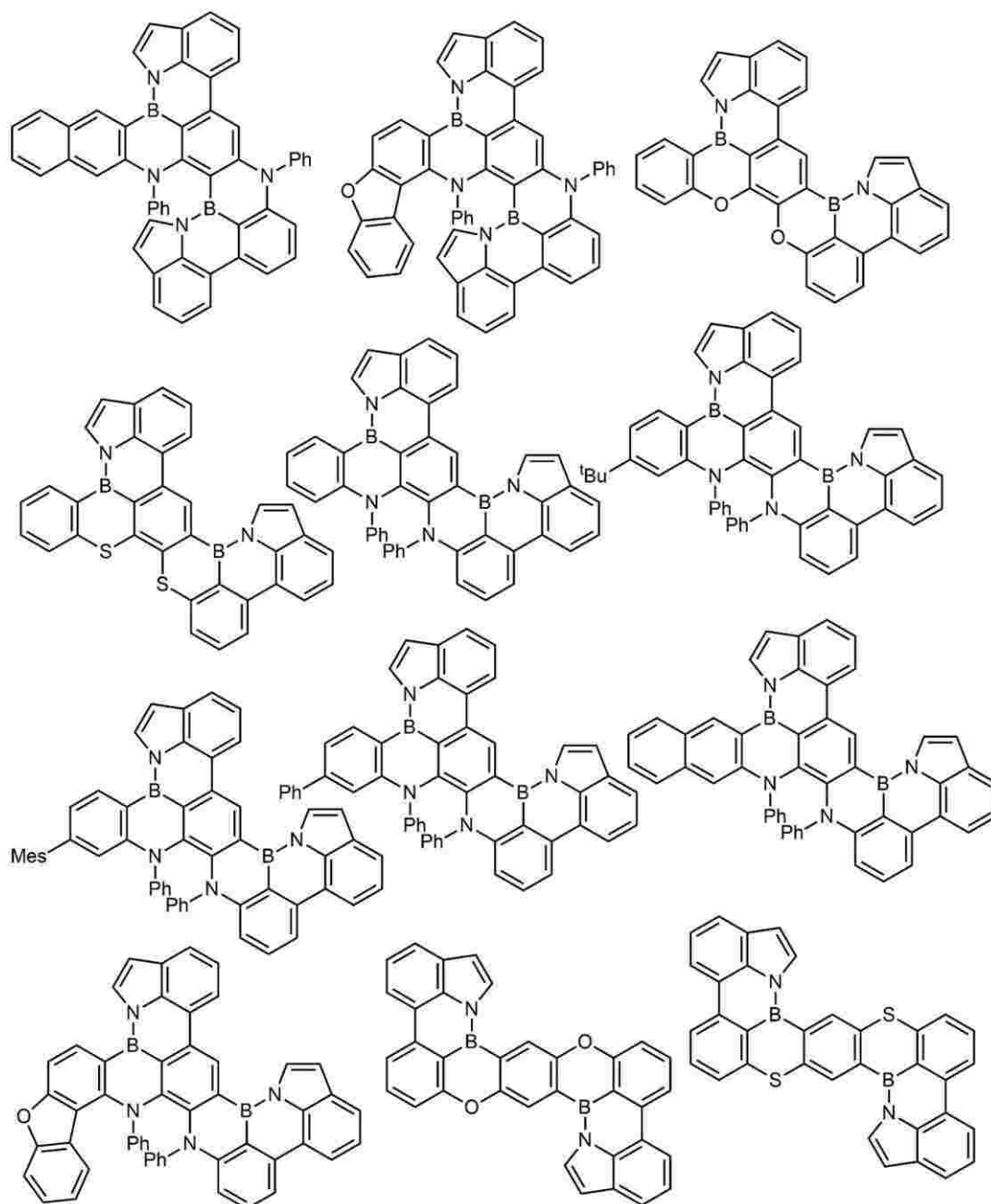
20

30

40

50

【化 2 6 4】



10

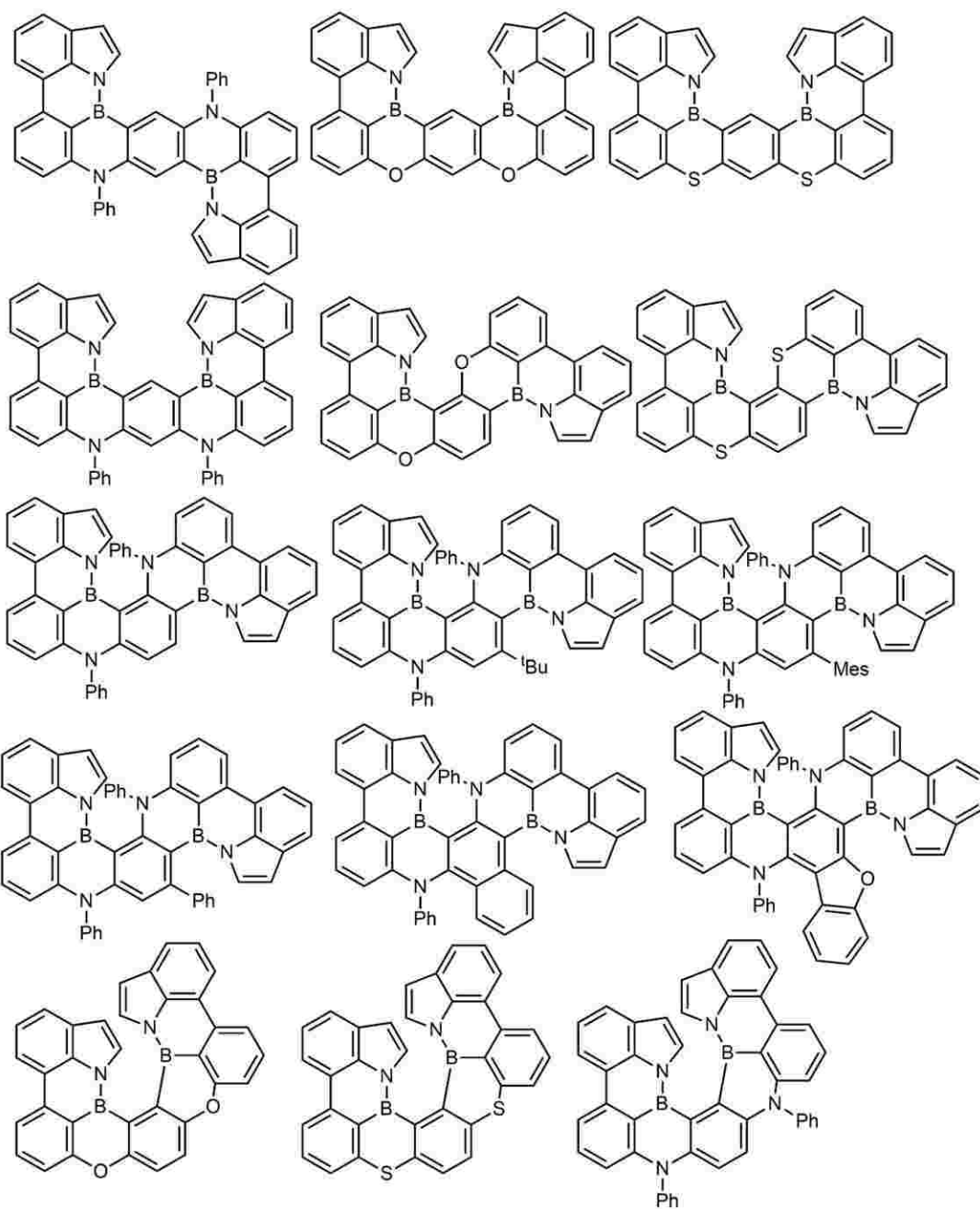
20

30

40

50

【化 2 6 5】



10

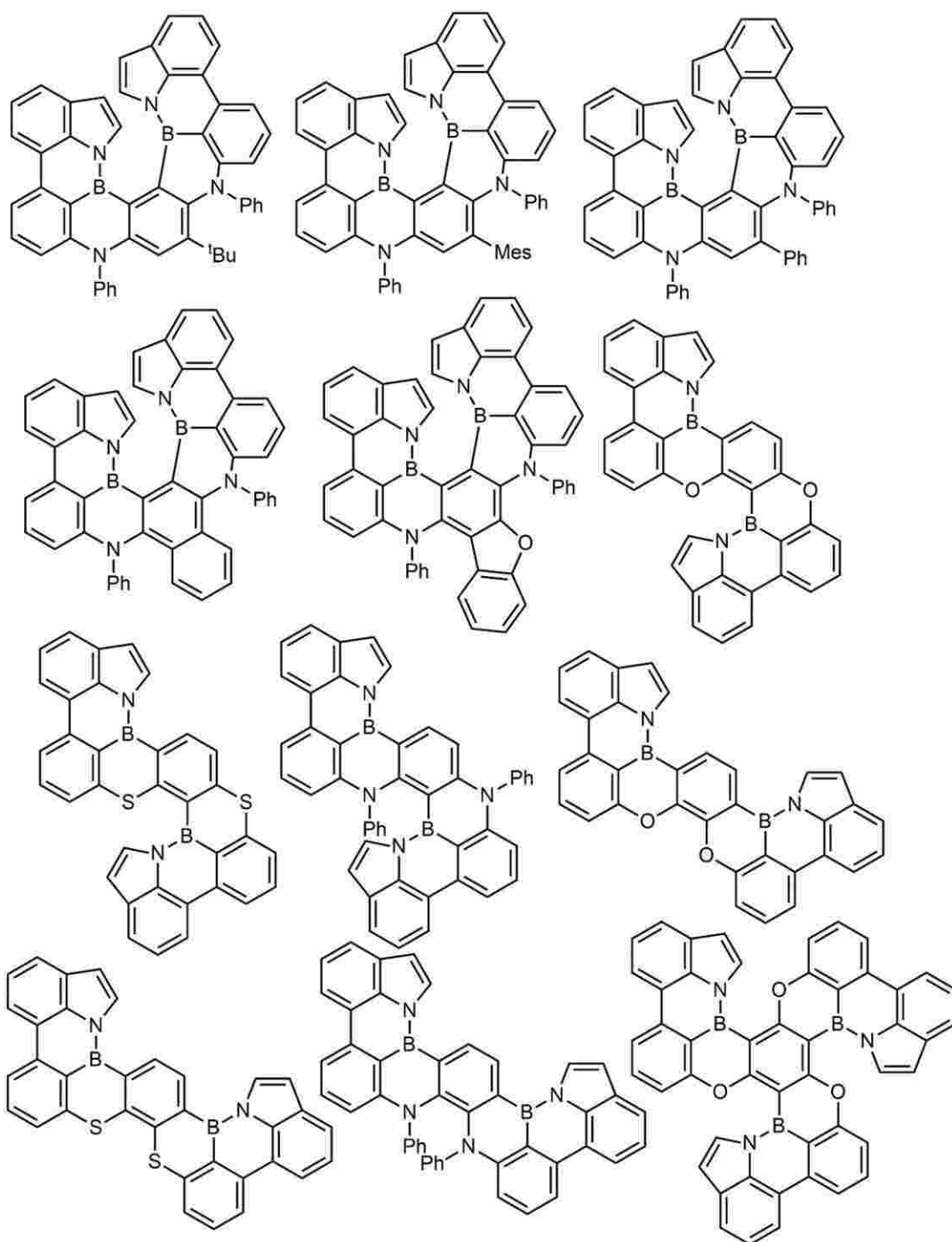
20

30

40

50

【化 2 6 6】



10

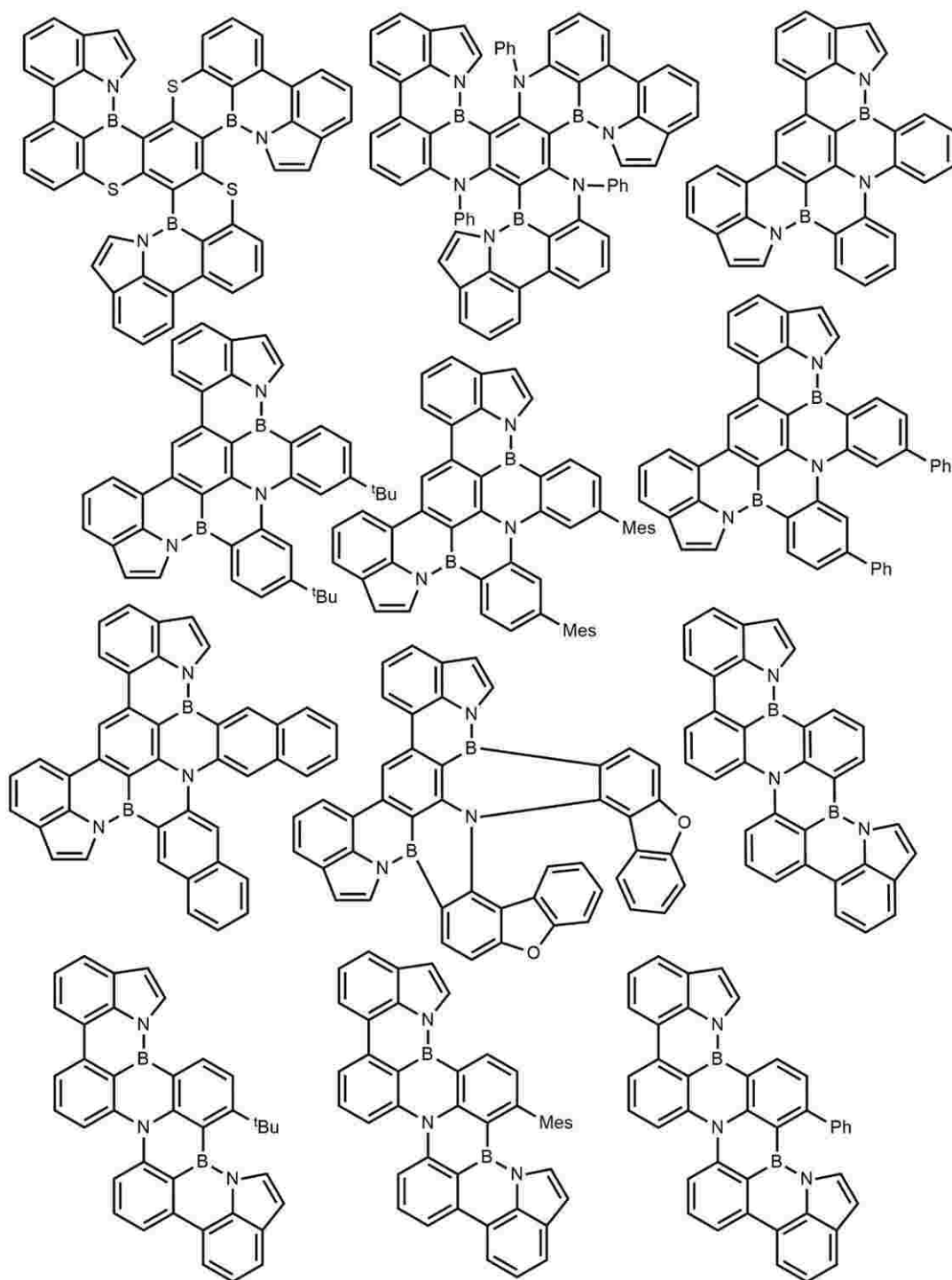
20

30

40

50

【化 2 6 7】



10

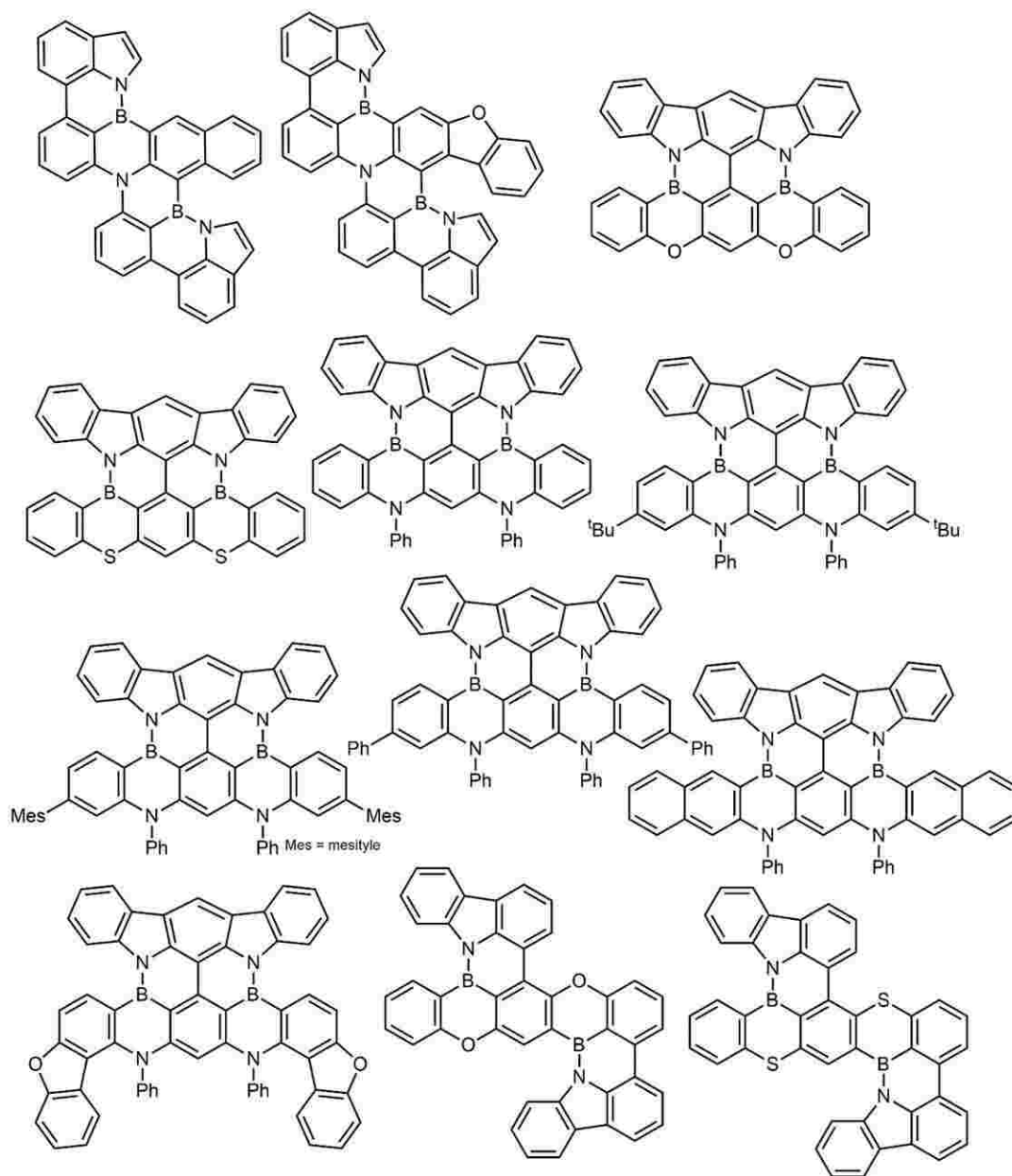
20

30

40

50

【化 2 6 8】



10

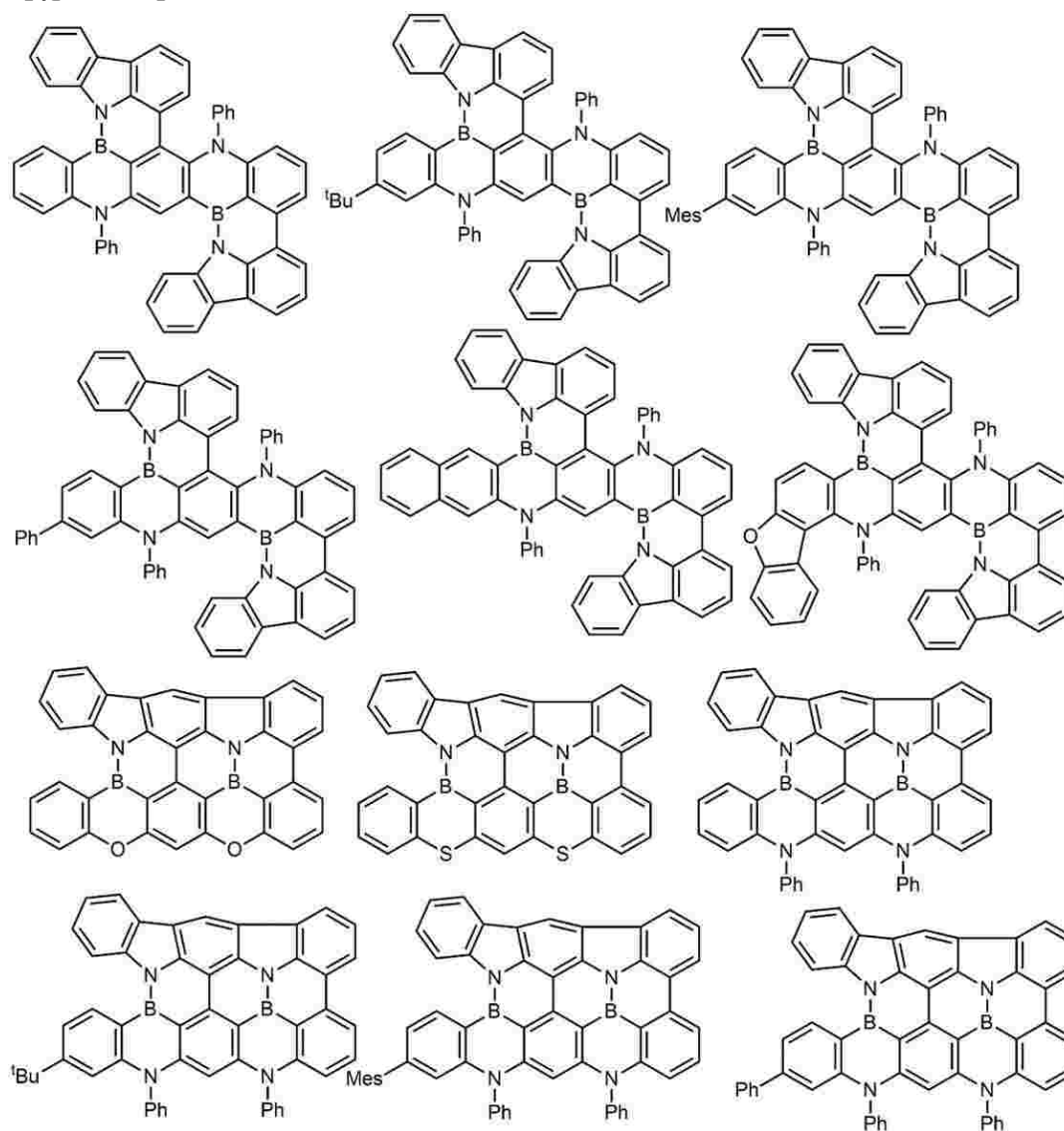
20

30

40

50

【化 2 6 9】



10

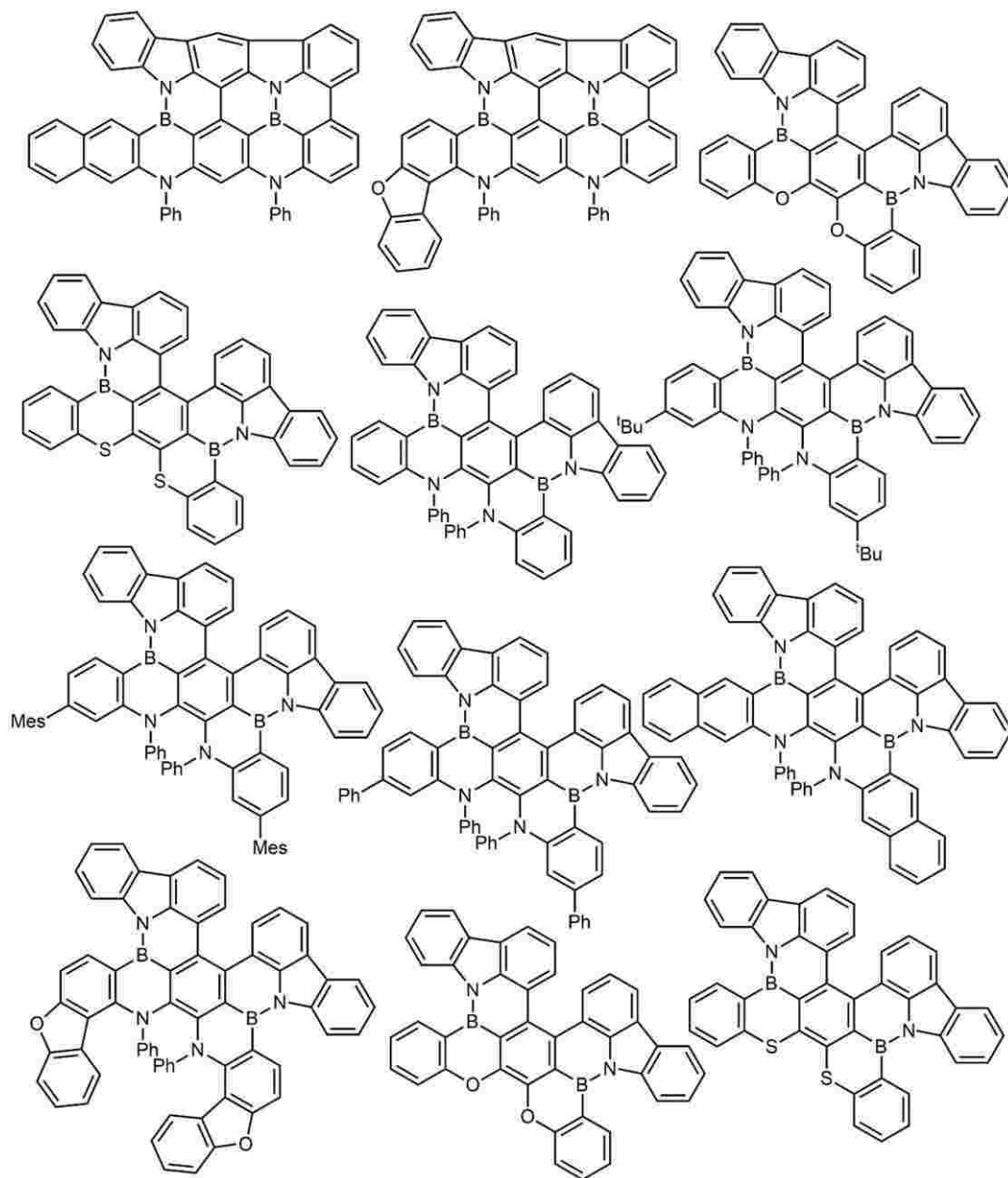
20

30

40

50

【化 2 7 0】



10

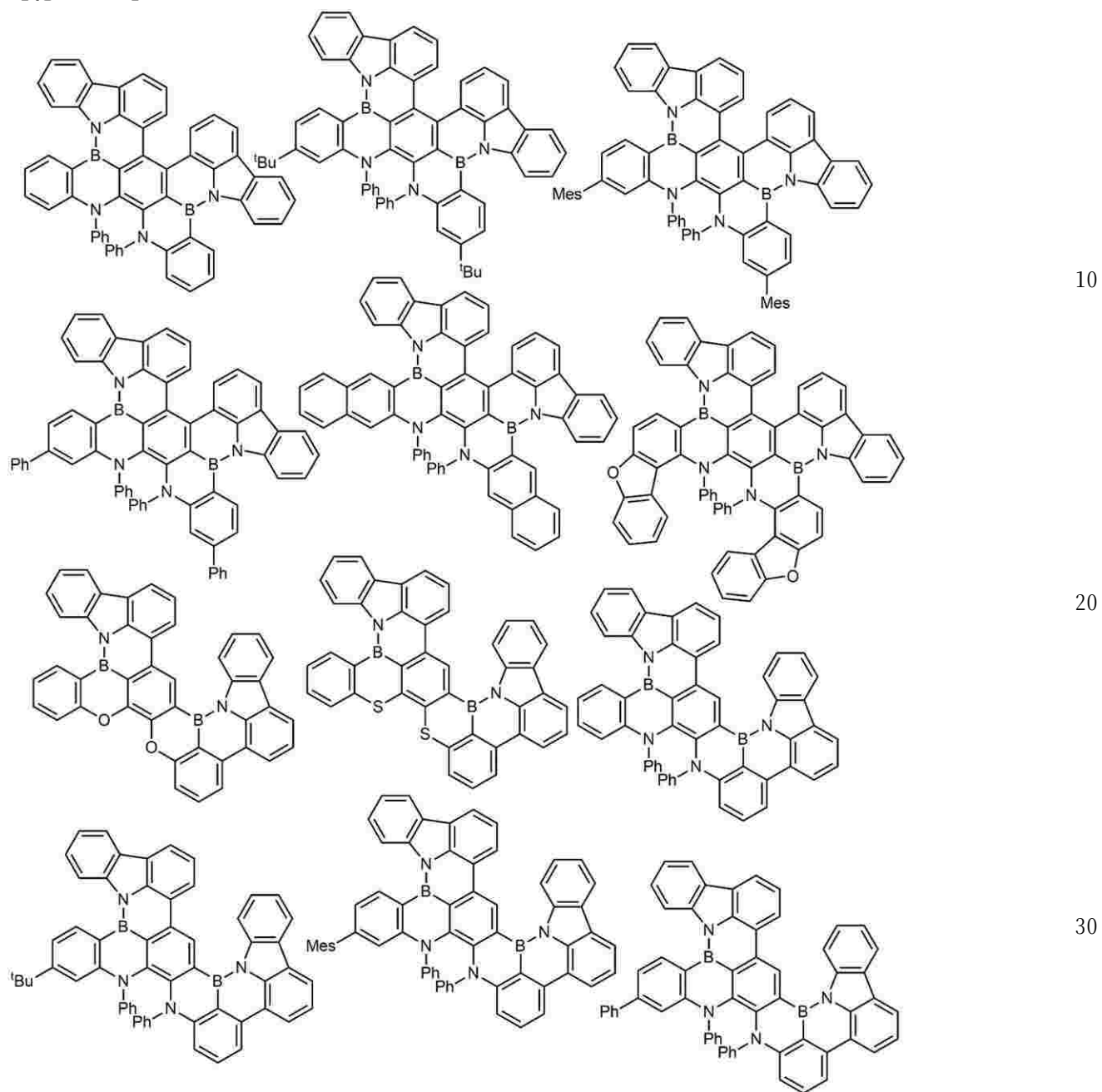
20

30

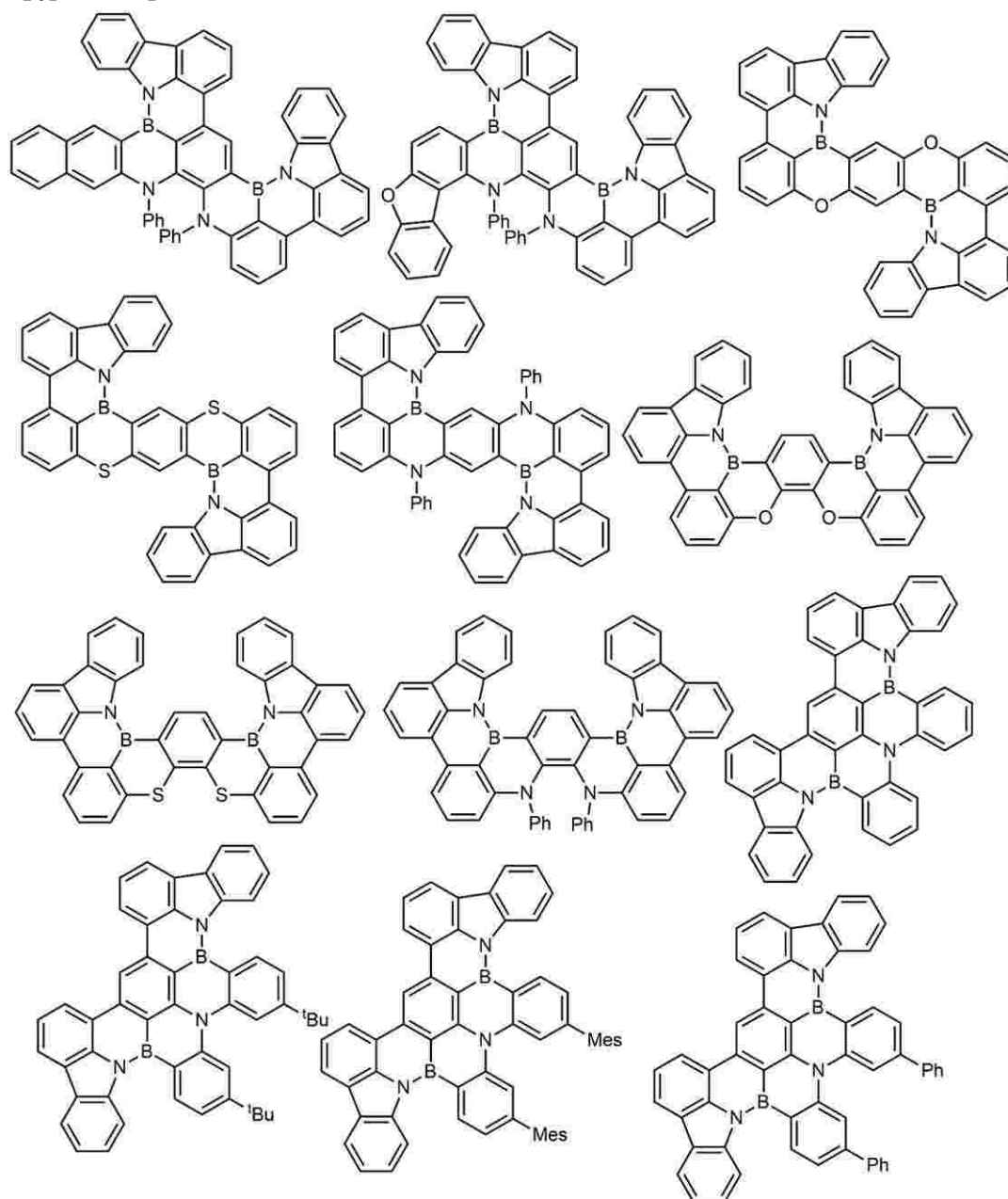
40

50

【化 2 7 1】



【化 2 7 2】



10

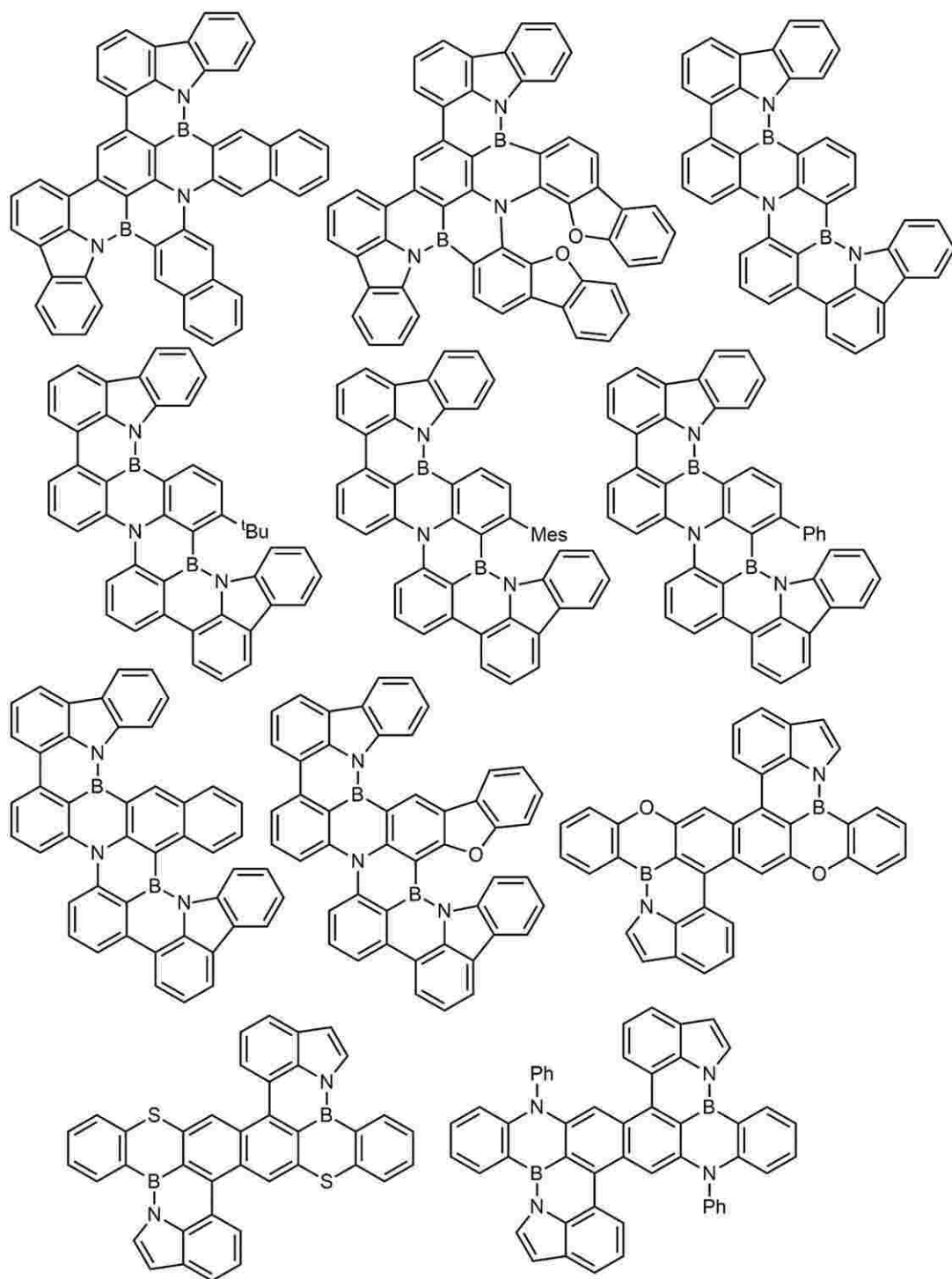
20

30

40

50

【化 2 7 3】



10

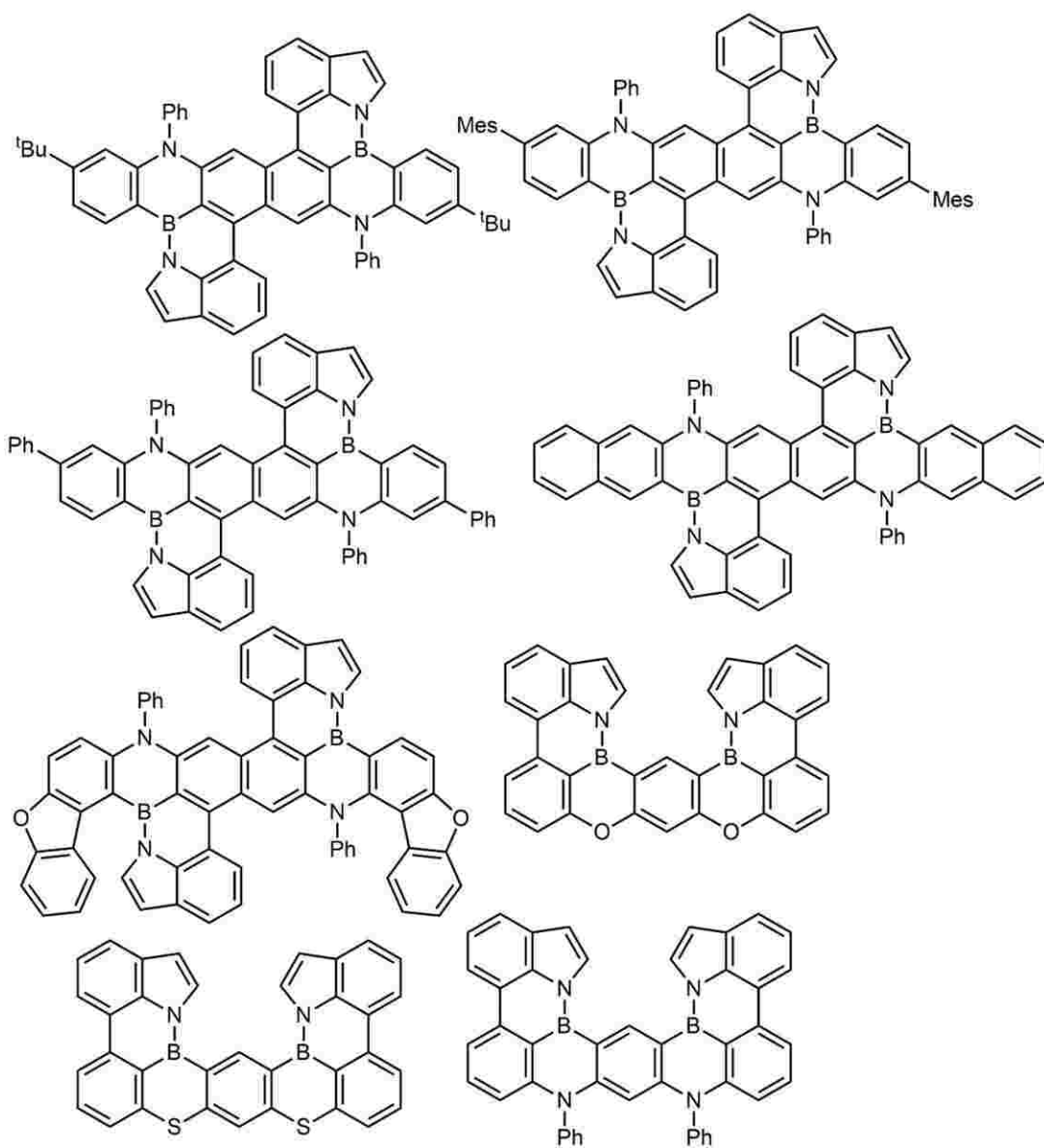
20

30

40

50

【化 2 7 4】



10

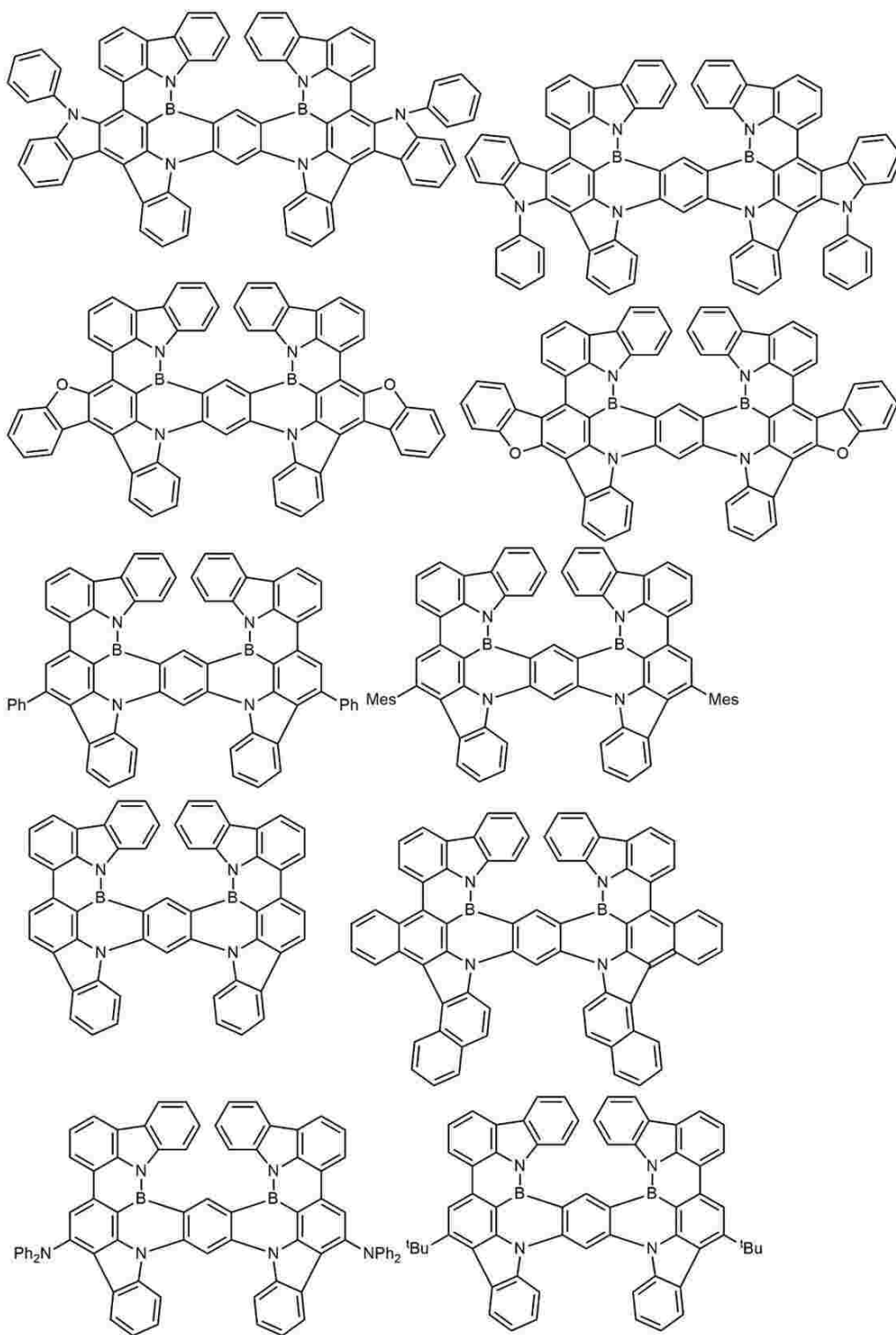
20

30

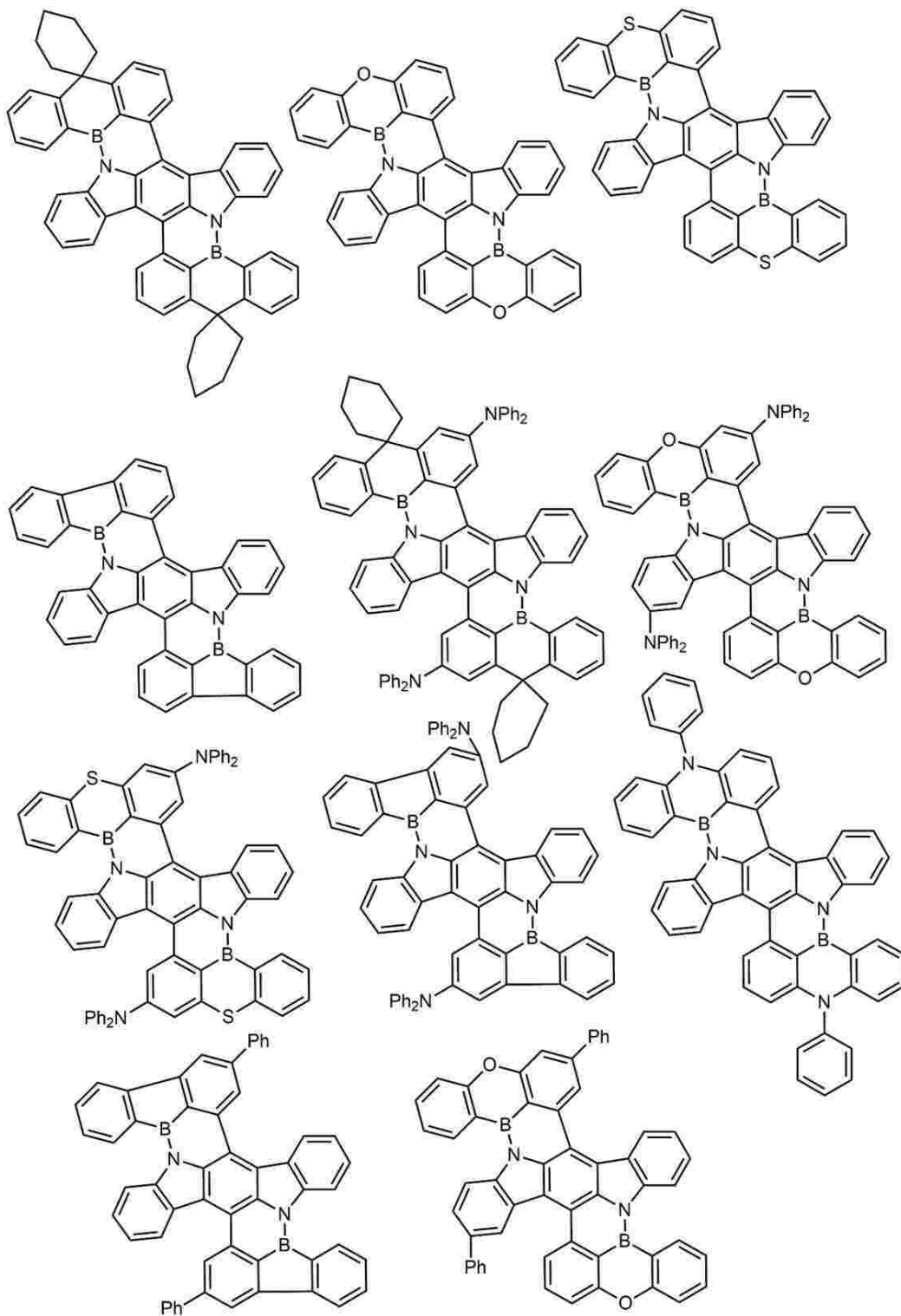
40

50

【化 2 7 5】



【化 2 7 6】



10

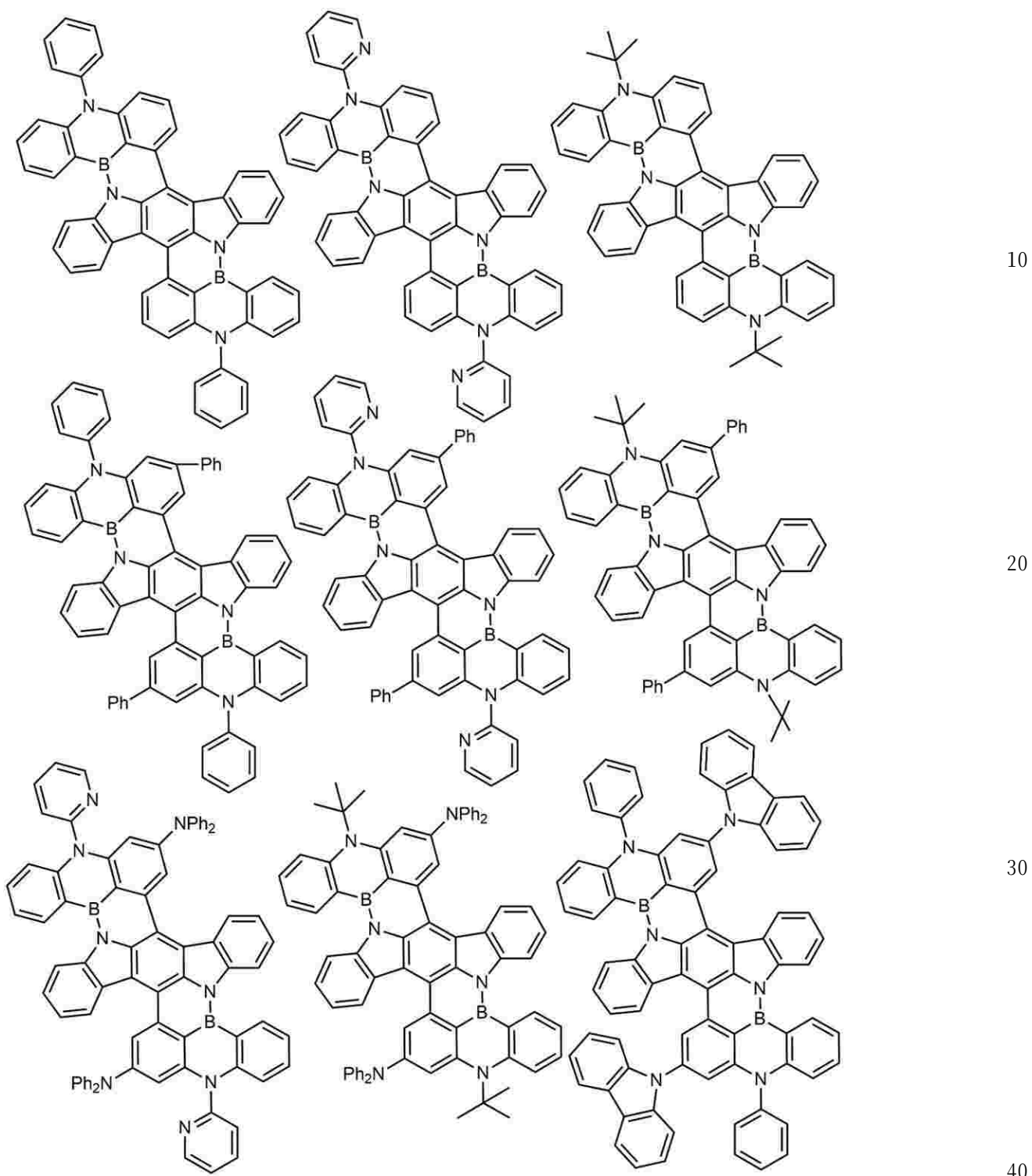
20

30

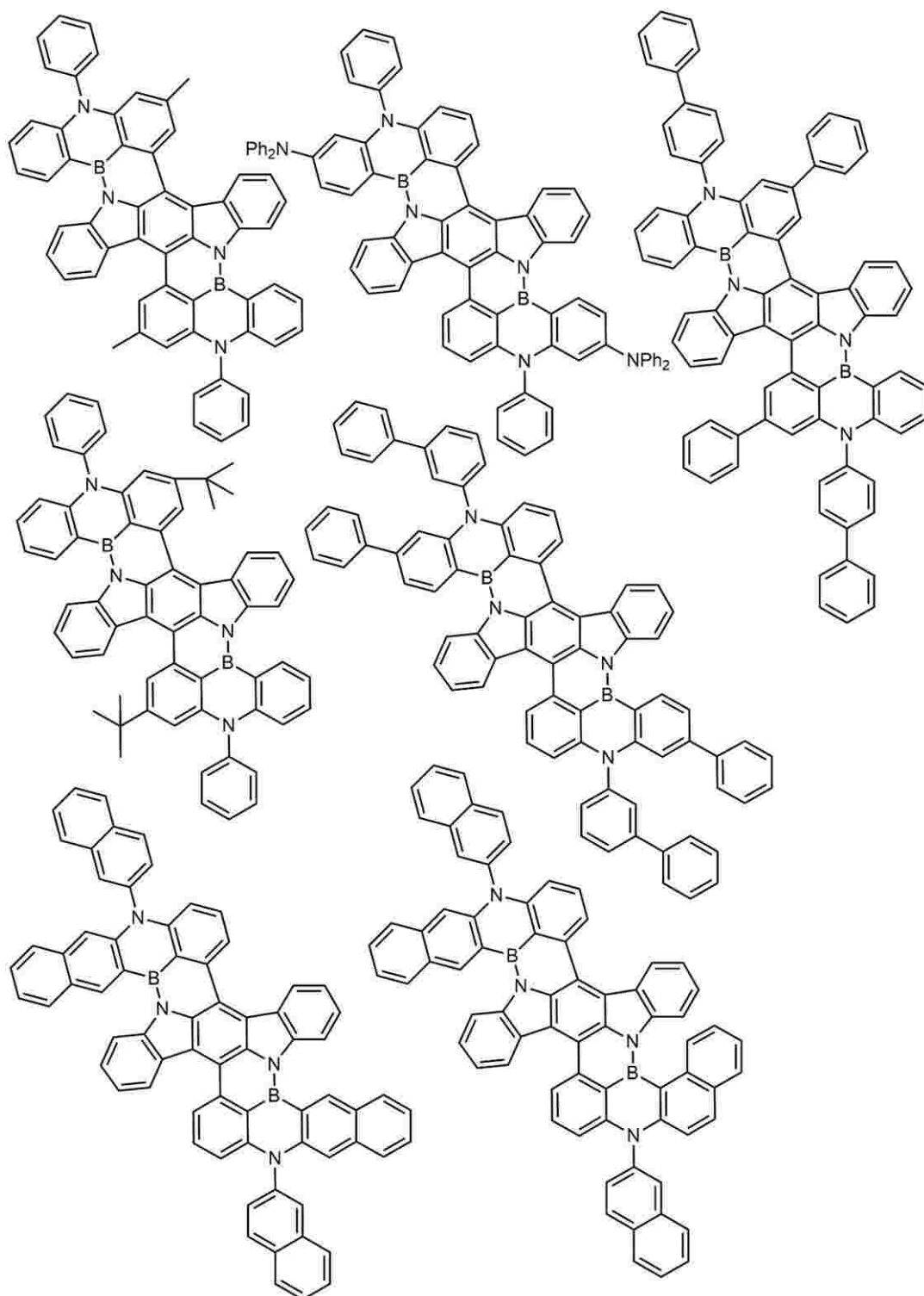
40

50

【化 2 7 7】



【化 2 7 8】



10

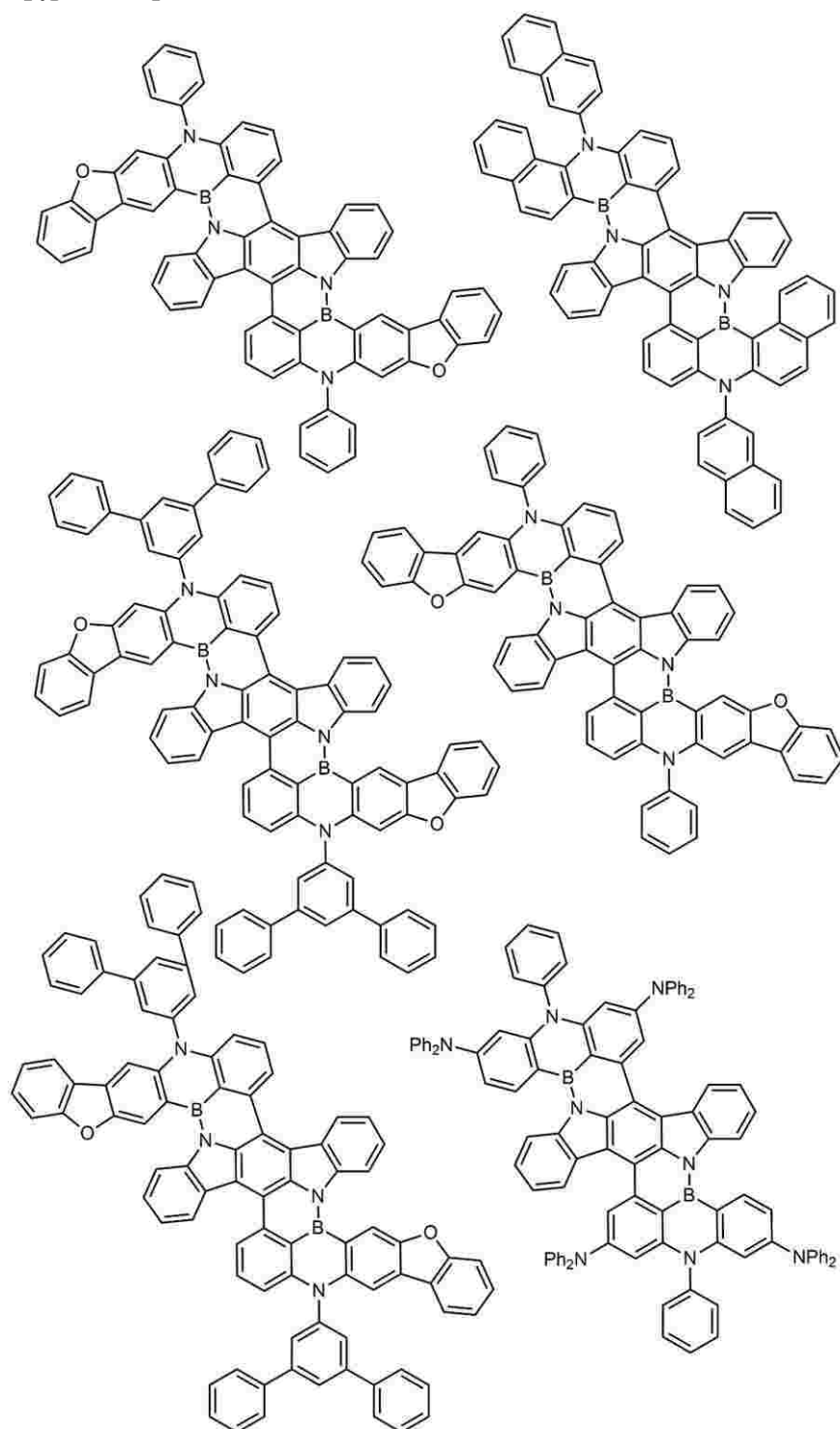
20

30

40

50

【化 2 7 9】



10

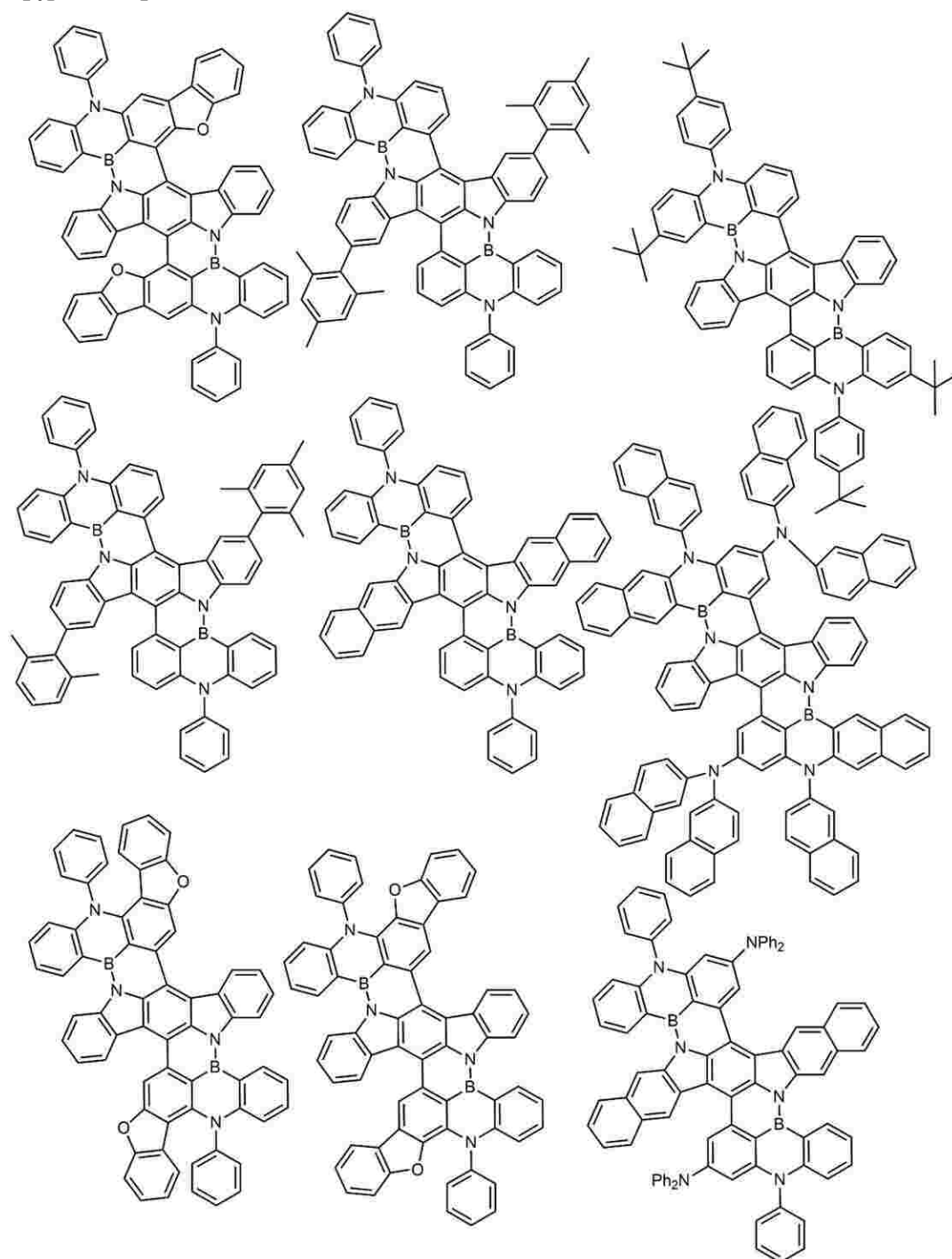
20

30

40

50

【化 2 8 0】



10

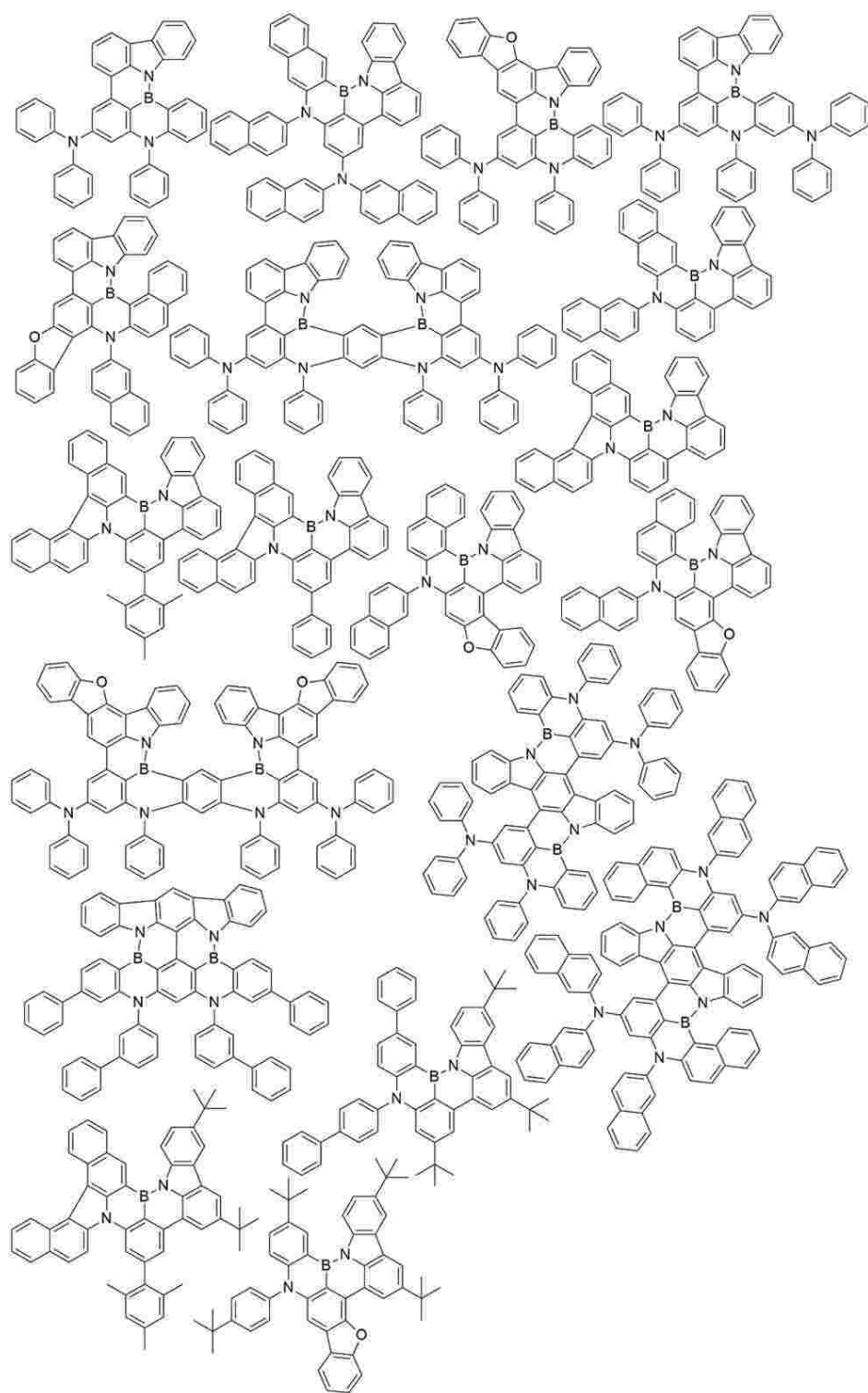
20

30

40

50

【化 2 8 1】



10

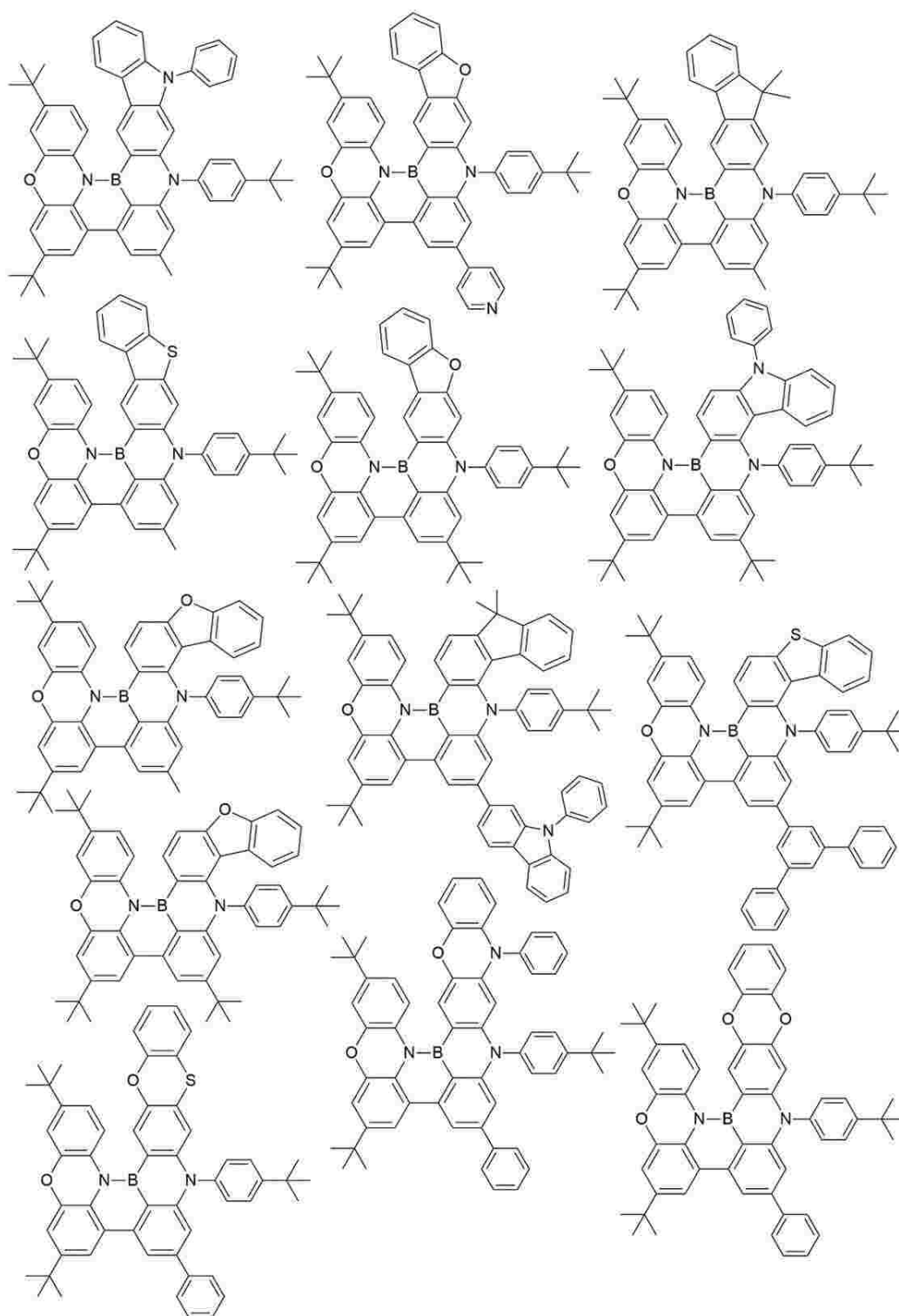
20

30

40

50

【化 2 8 2】



10

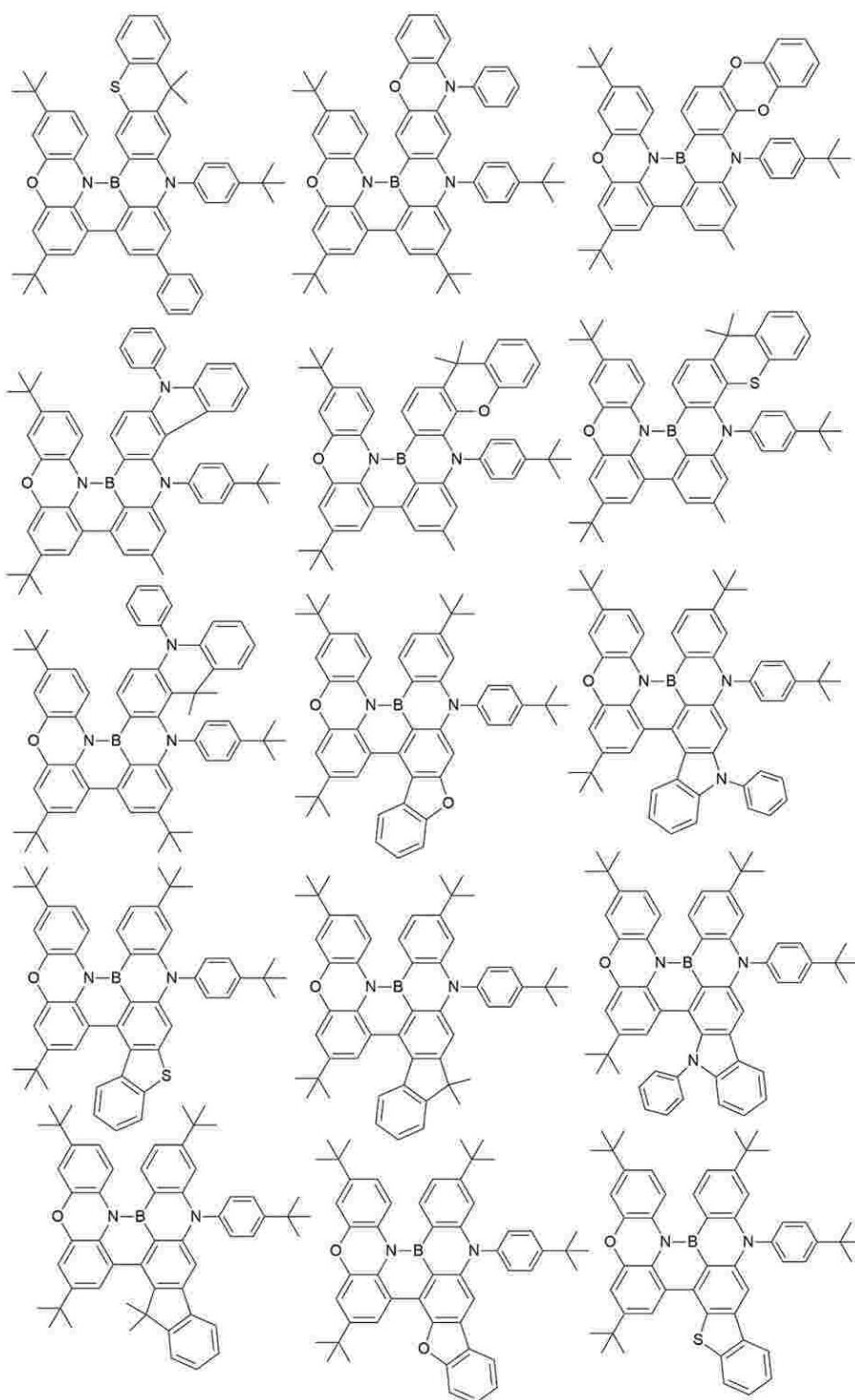
20

30

40

50

【化 2 8 3】



10

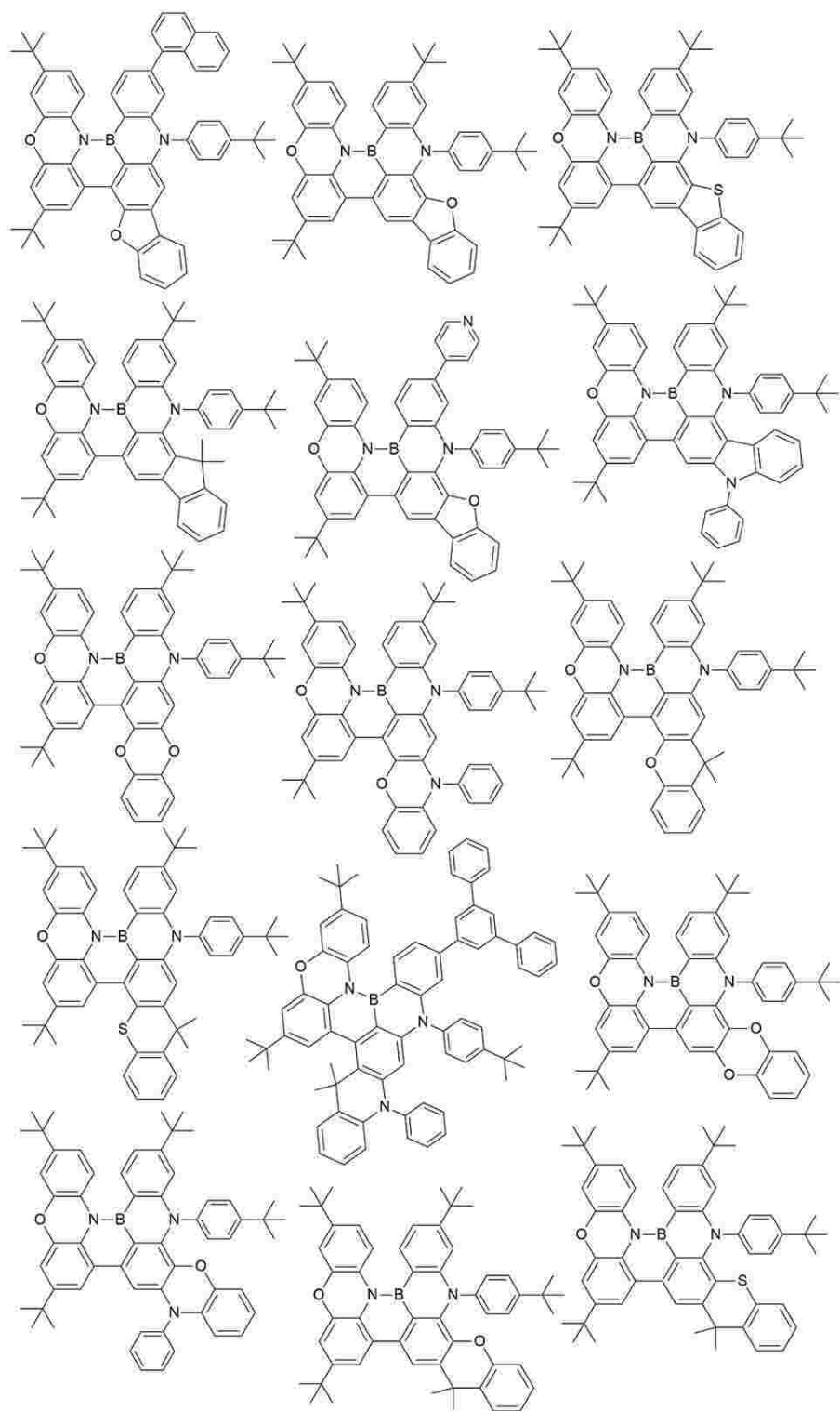
20

30

40

50

【化 2 8 4】



10

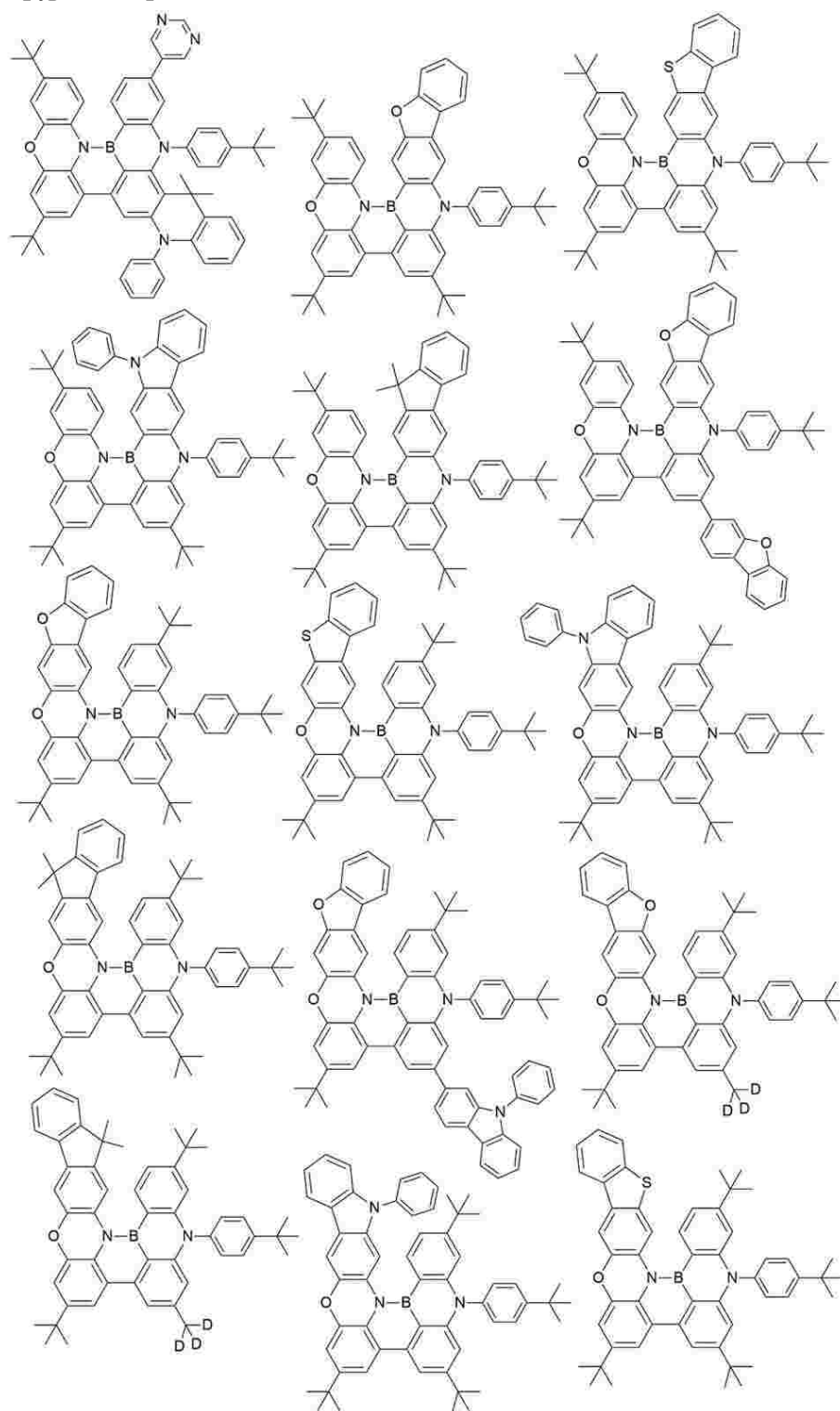
20

30

40

50

【化 2 8 5】



10

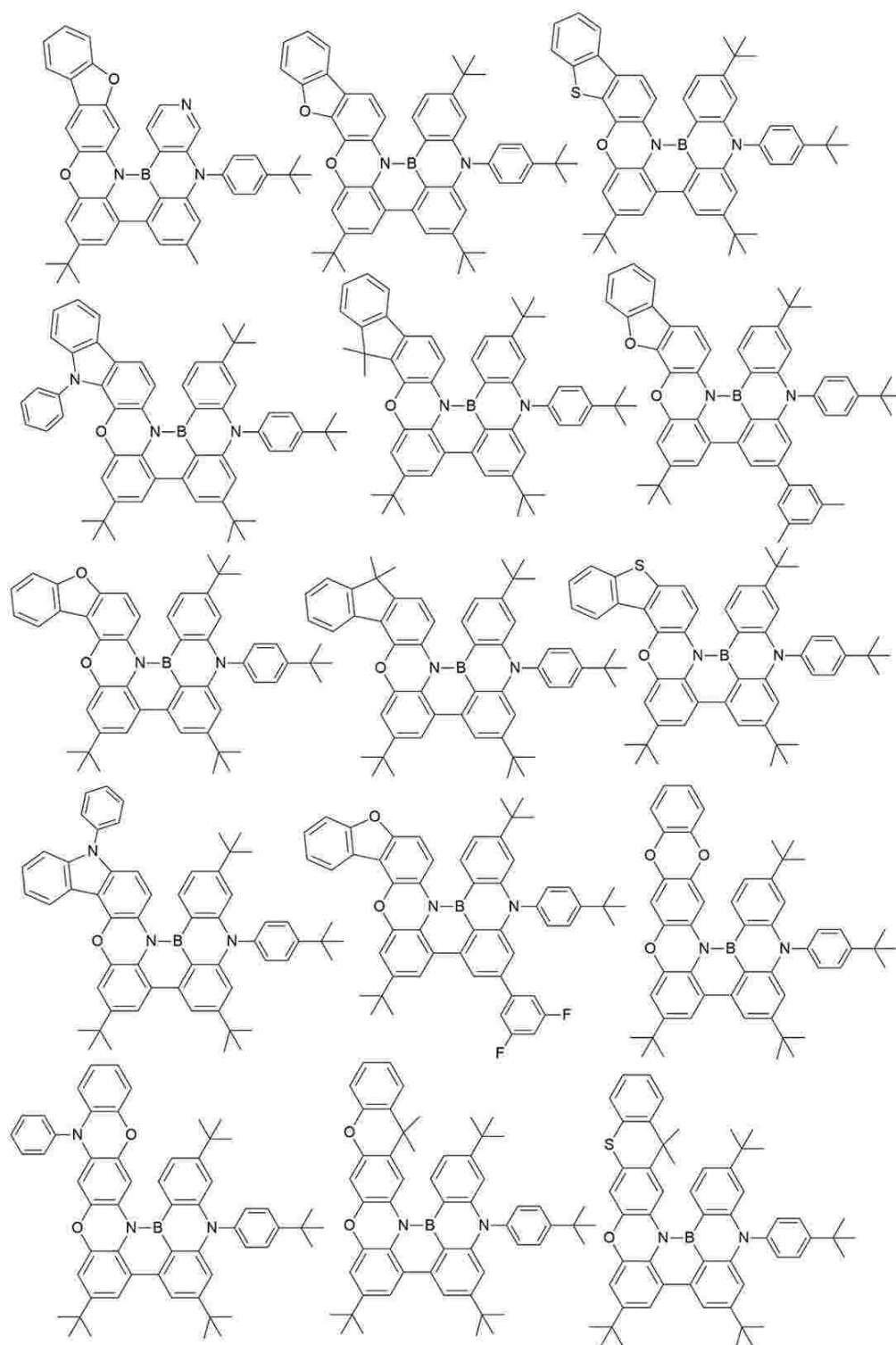
20

30

40

50

【化 2 8 6】



10

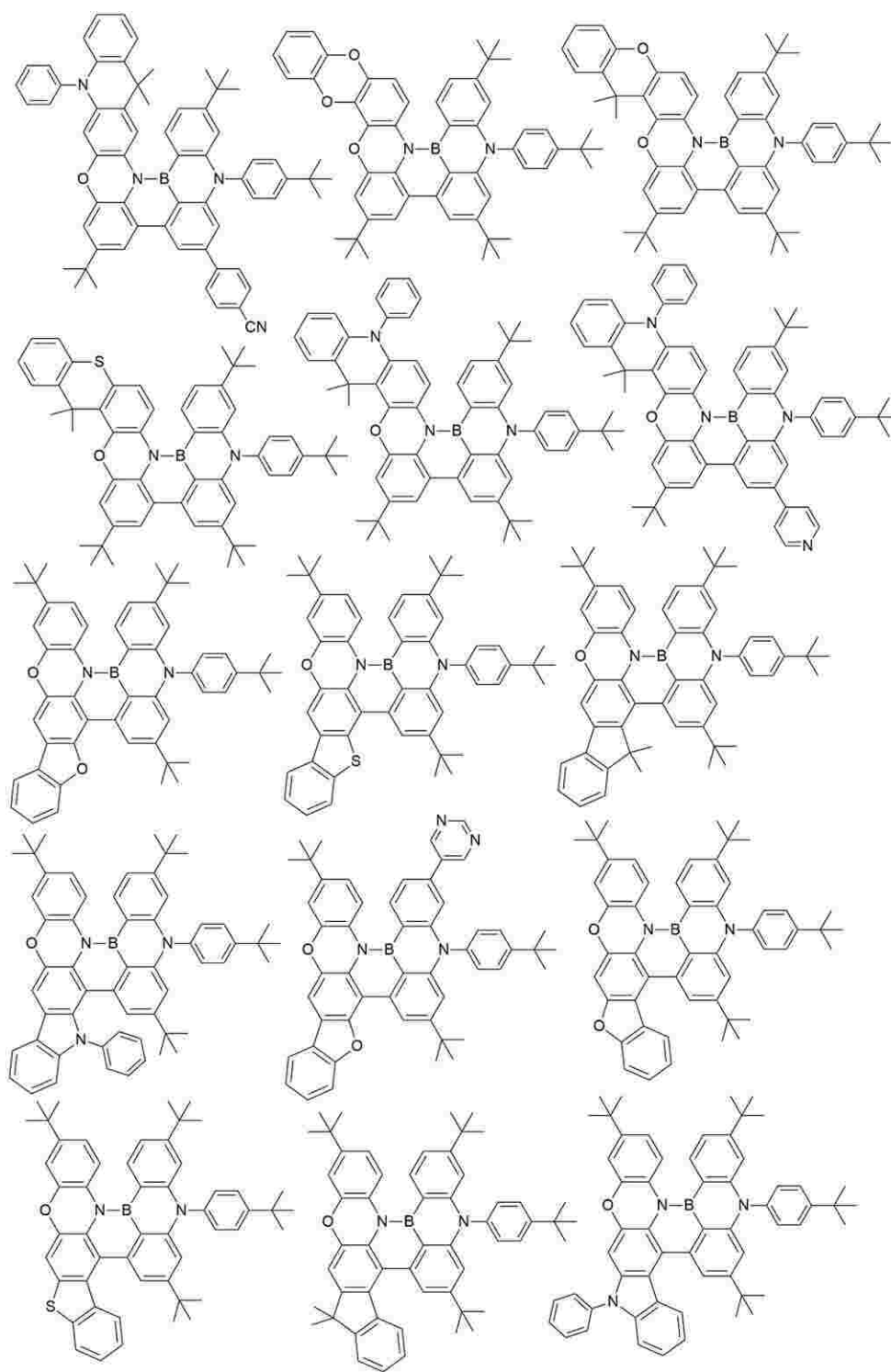
20

30

40

50

【化 2 8 7】



10

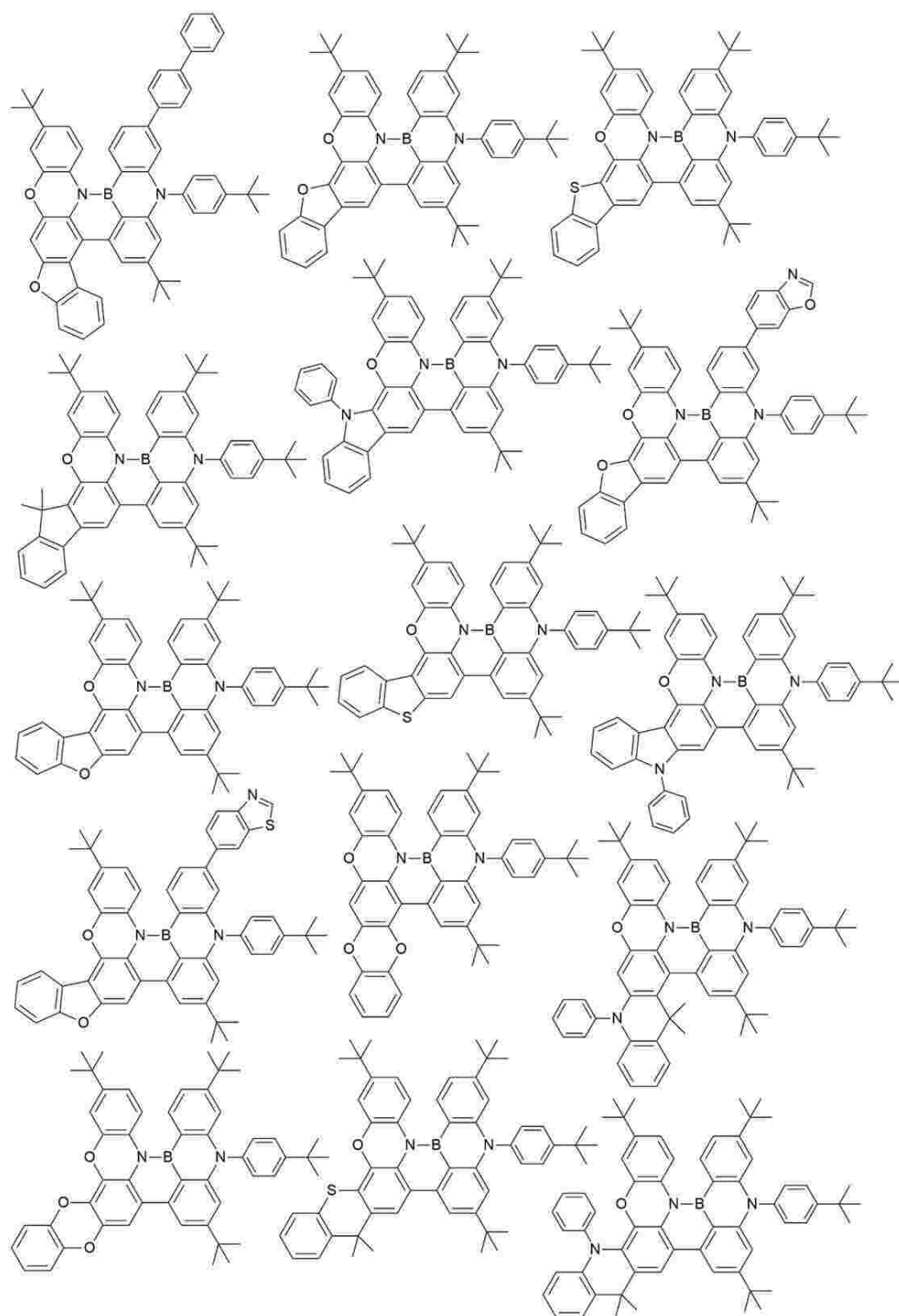
20

30

40

50

【化 2 8 8】



10

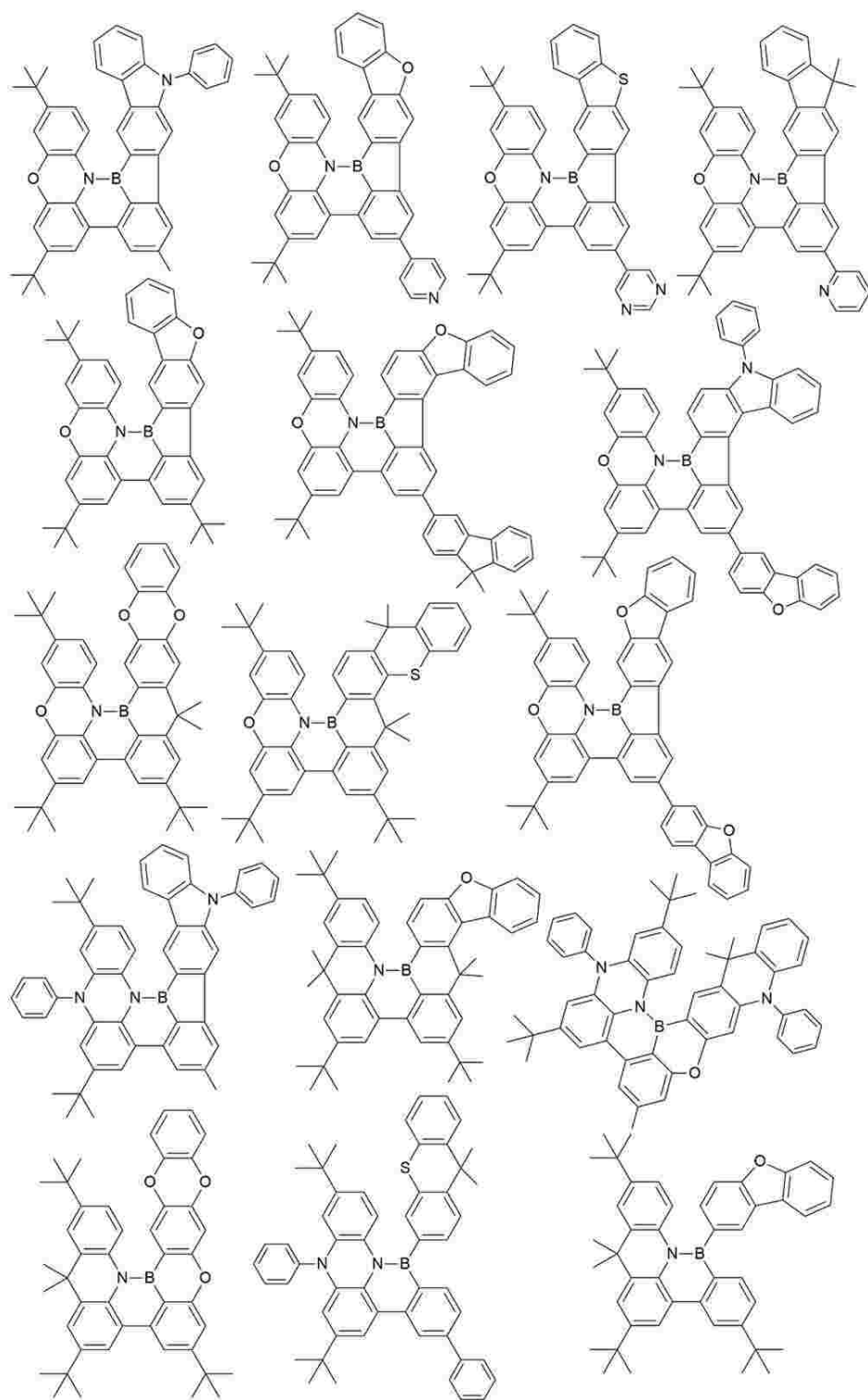
20

30

40

50

【化 2 8 9】



10

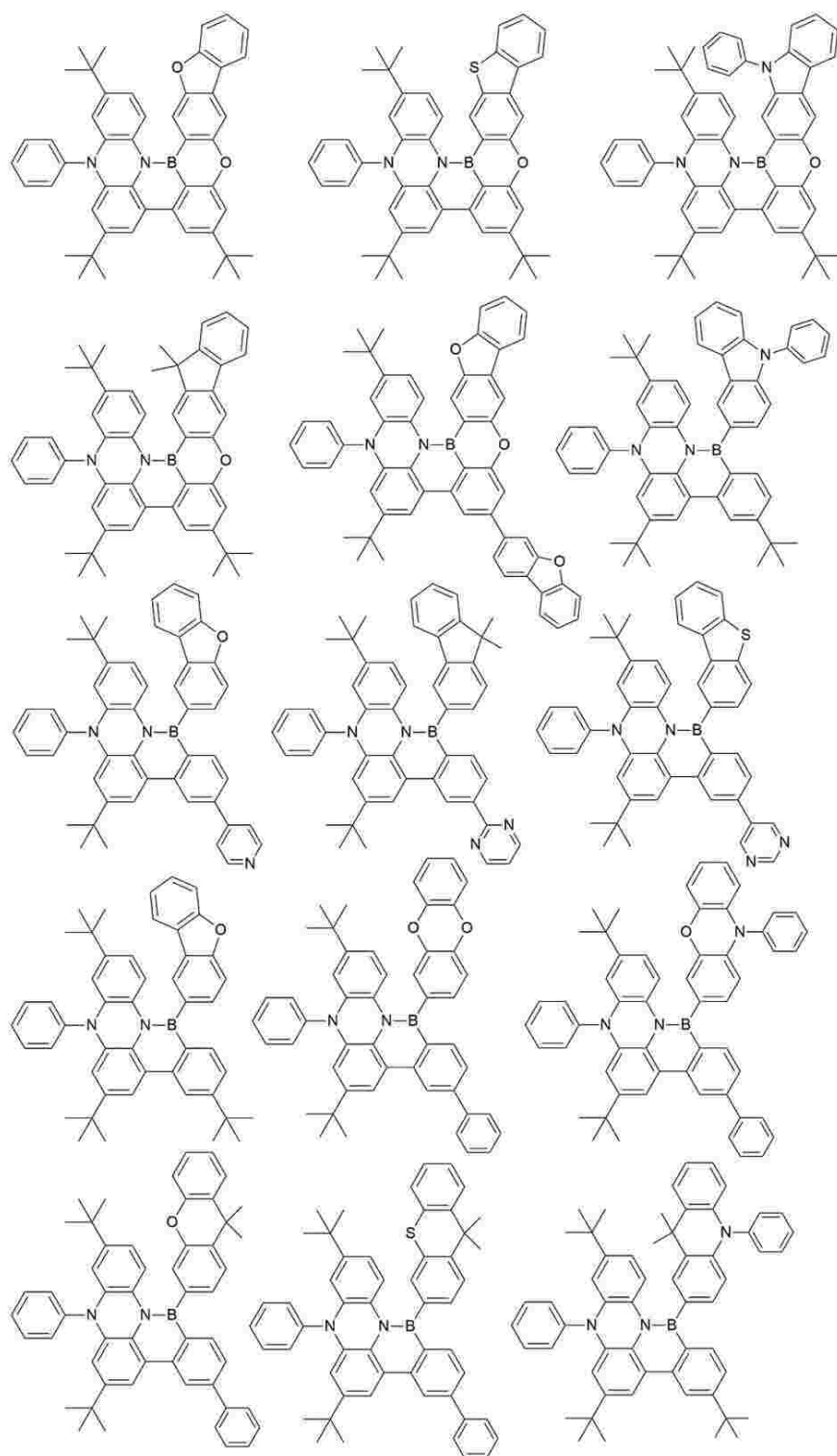
20

30

40

50

【化 2 9 0】



10

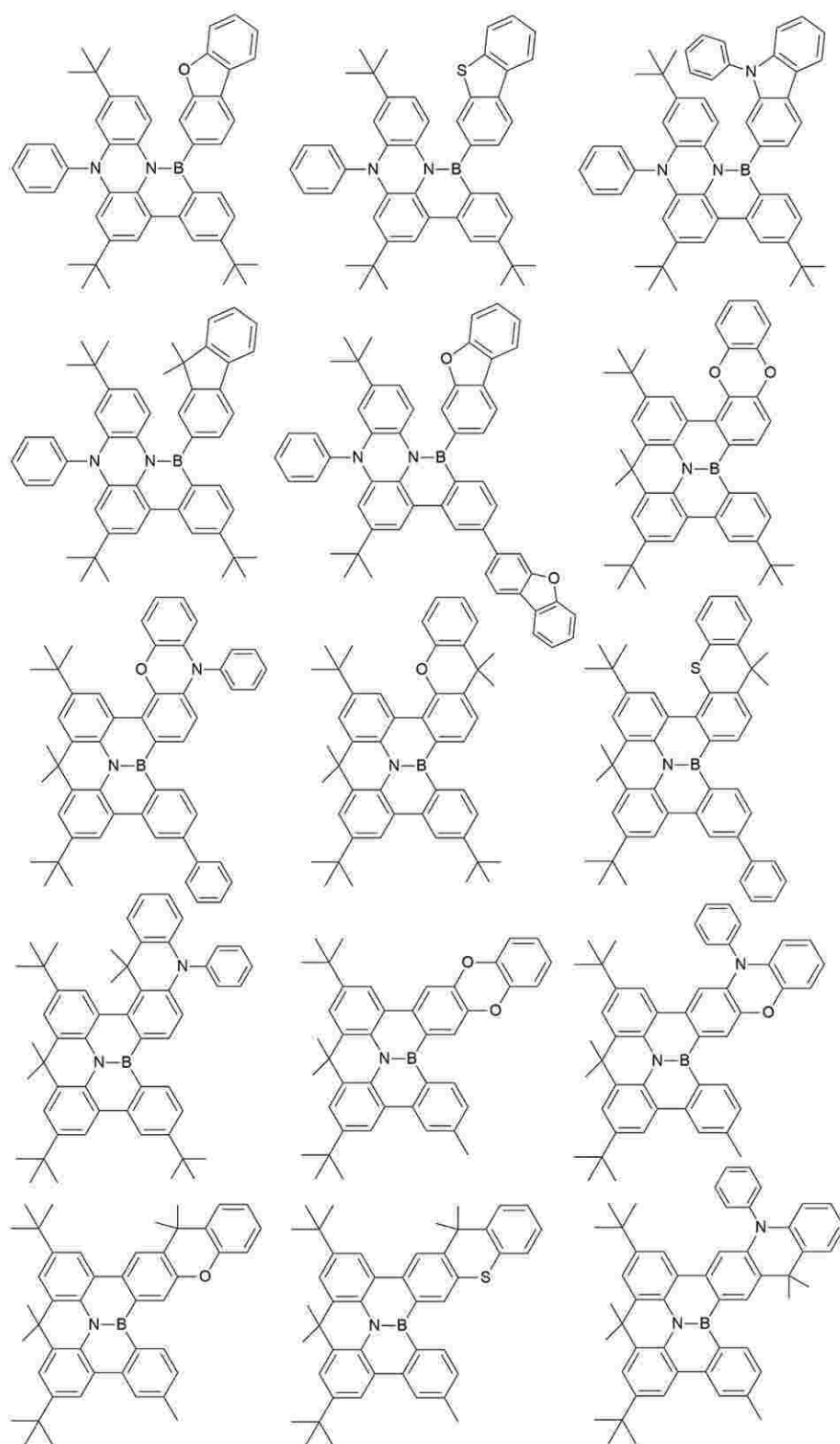
20

30

40

50

【化 2 9 1】



10

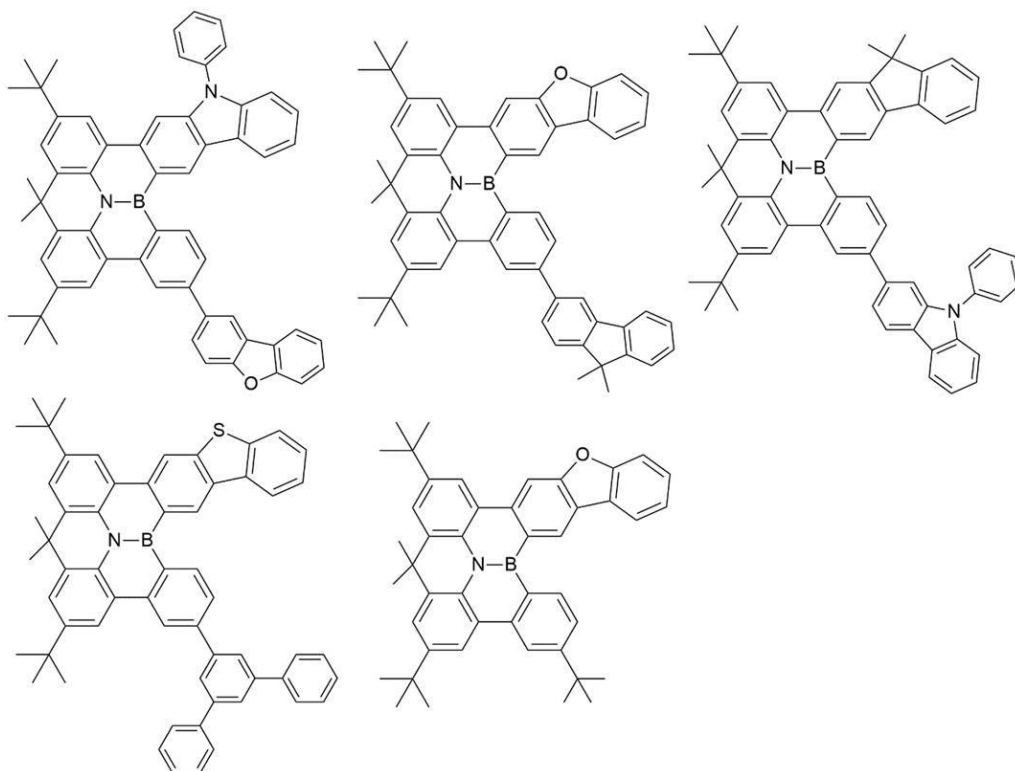
20

30

40

50

【化 2 9 2】



10

20

【0 3 9 7】

化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成される小FWHMエミッタS^Bの合成は、当業者に公知された標準反応及び反応条件を介して達成される。

【0 3 9 8】

典型的に、合成は、遷移金属触媒化された交差カップリング反応及びホウ素化反応を含み、それらは当業者に公知である。

【0 3 9 9】

例えば、WO2020135953 (A1) は、化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成される小FWHMエミッタS^Bを合成する方法を開示する。また、US2018047912 (A1) は、特に、c及びdが0である化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成される小FWHMエミッタS^Bを合成する方法を開示する。

30

【0 4 0 0】

また、US2018047912 (A1) 及びWO2020135953 (A1) に開示されたエミッタも、本発明の文脈において小FWHMエミッタS^Bとして使用可能であるということが理解される。

【0 4 0 1】

本発明の一実施形態において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層Bにおいて、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの小FWHMエミッタS^Bは、化学式DABNA-Iまたは化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成される。当業者は、それを、1以上の小FWHMエミッタS^Bが発光層Bに存在するならば、それらがいずれも化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれから構成されるか、それらがいずれも化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成されるか、一部は化学式DABNA-Iによる構造を含むか、あるいはそれから構成される一方、他のものは化学式BNE-1による構造を含むか、あるいはそれから構成されるものと理解するであろう。

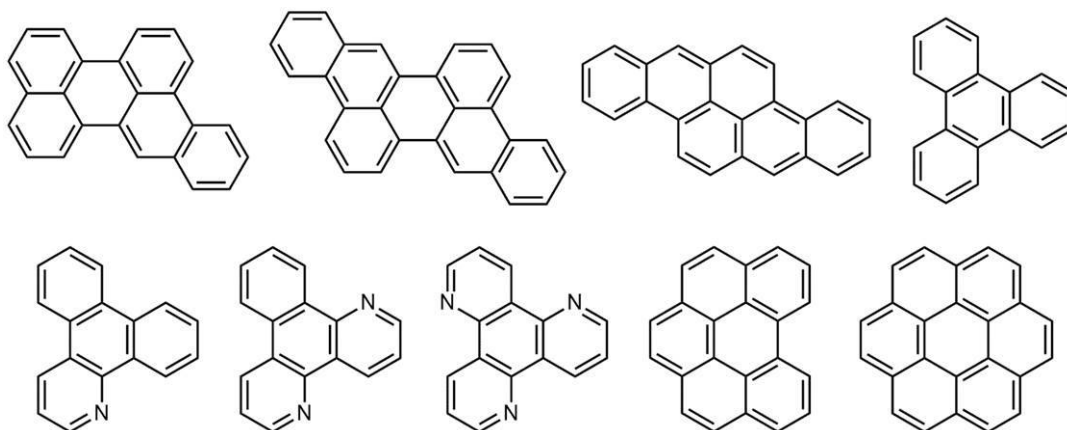
40

【0 4 0 2】

蛍光エミッタを設計する1つのアプローチは、蛍光の多環の芳香族またはヘテロ芳香族

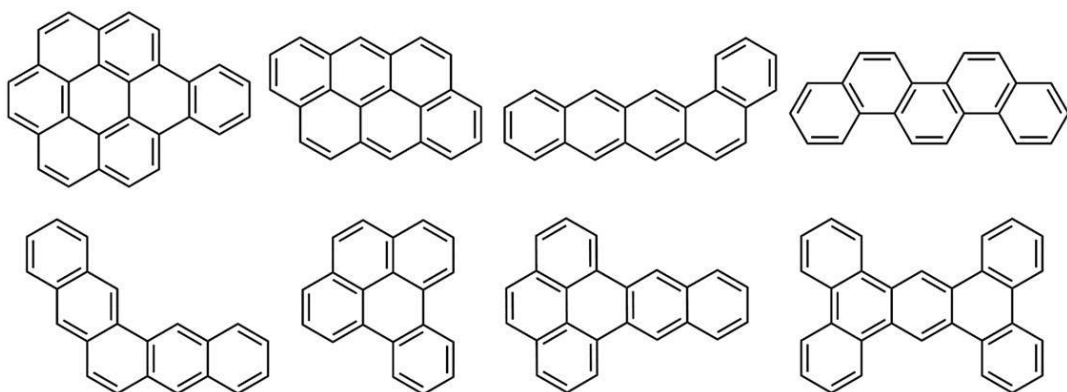
50

【化 2 9 6】



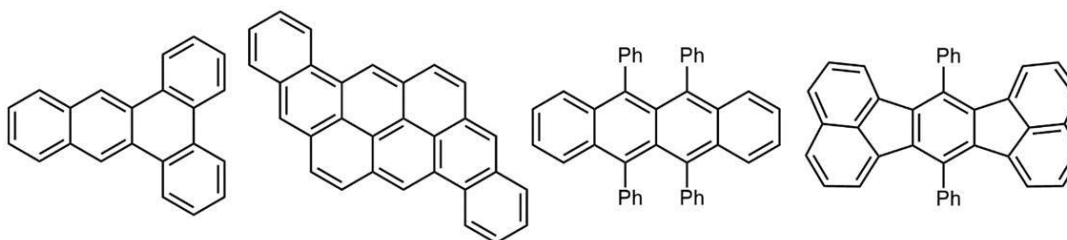
10

【化 2 9 7】



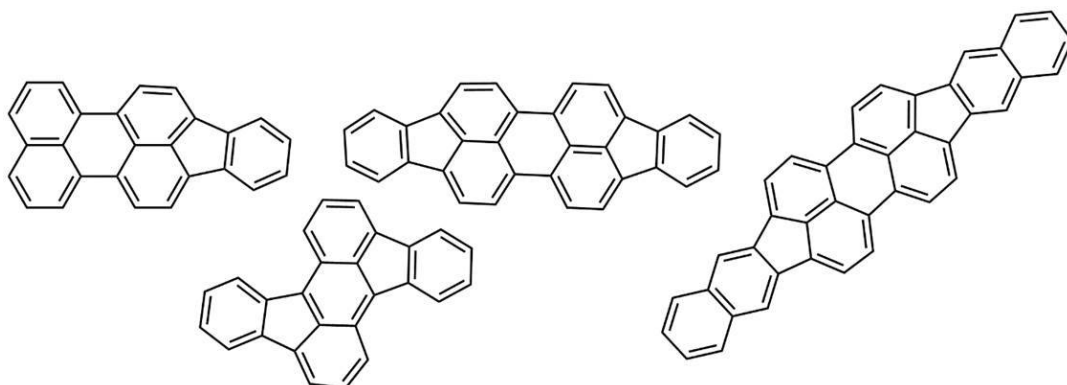
20

【化 2 9 8】



30

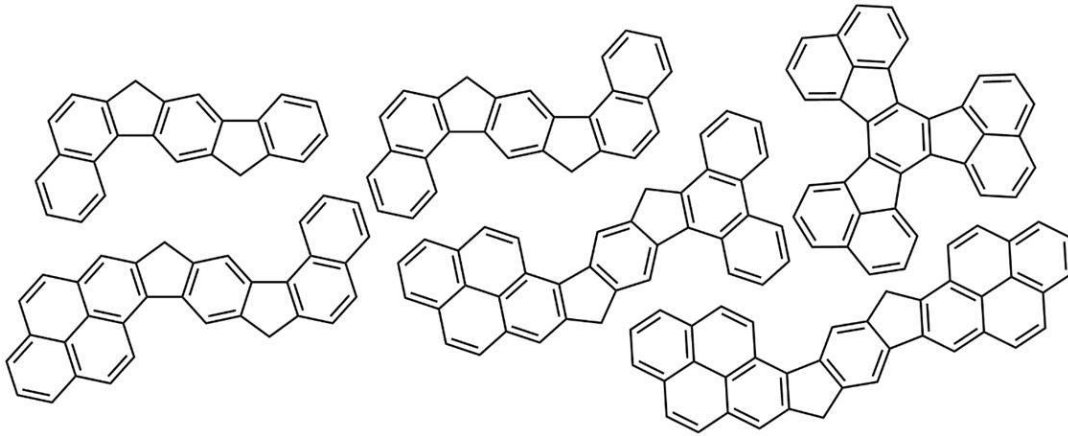
【化 2 9 9】



40

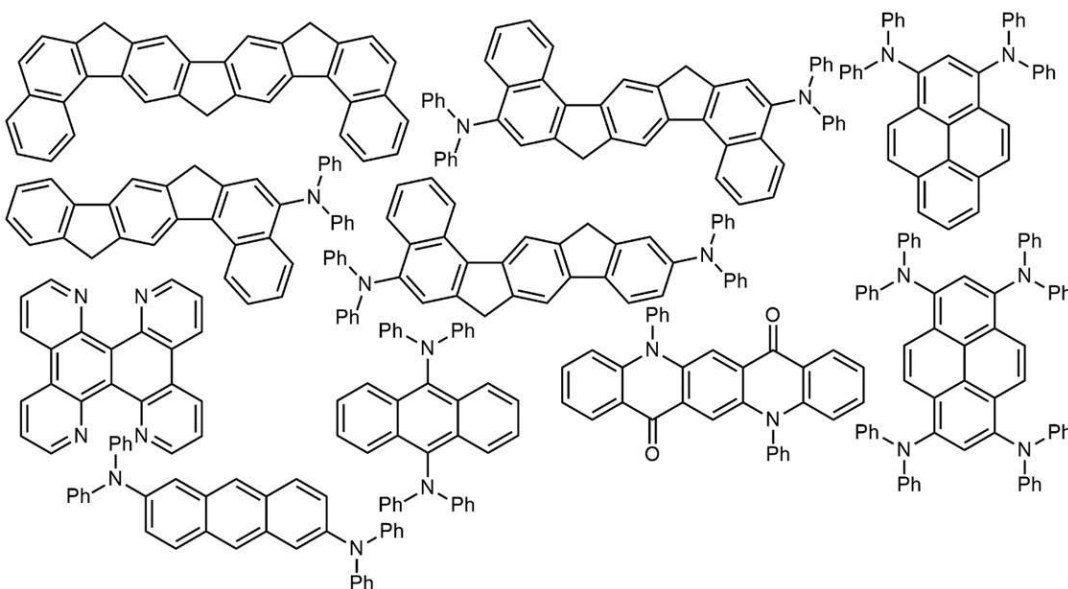
50

【化 3 0 0】



10

【化 3 0 1】



20

【0 4 0 4】

当該文脈において、蛍光コア構造という用語は、前記コアを含む全ての分子が潜在的に蛍光エミッタとして使用可能であることを示す。当業者は、そのような蛍光エミッタのコア構造が選択的に置換されていてもよく、どのような置換基がそれと係わって適しているかを、例えば、下記例示から分かる：US 2017077418 (A1), M. Zhu, C. Yang, Chemical Society Reviews 2013, 42, 4963, DOI: 10.1039/c3cs35440g; S. Kima, B. Kimb, J. Leea, H. Shina, Y.-Il Parkb, J. Park, Materials Science and Engineering R: Reports 2016, 99, 1, DOI: 10.1016/j.mser.2015.11.001; K. R. J. Thomas, N. Kapoor, M. N. K. P. Bolisetty, J.-H. Jou, Y.-L. Chen, Y.-C. Jou, The Journal of Organic Chemistry 2012, 77 (8), 3921, DOI: 10.1021/jo300285v; M. Vanga, R. A. Lalancette, F. Jakle, Chemistry - A European Journal 2019, 25 (43), 10133, DOI: 10.1002/chem.201901231。

40

【0 4 0 5】

本発明による用途のための小FWHMエミッタS^Bは、例えば、有機エレクトロルミネッセンス素子それぞれの層において蛍光コア及び隣接した分子間の接触を妨害する、立体

50

的に嵩高い置換基をコアに結合することにより、前述の蛍光コア構造から得られる。

【0406】

本発明の文脈において、化合物、例えば、蛍光エミッタは、後で定義される遮蔽パラメータ (shielding parameter) が本文後の下位節で定義される特定の限界以下であるとき、立体的に遮蔽されるものと見なされる。

【0407】

蛍光エミッタを立体的に遮蔽するのに使用される置換基は、体積が大きいだけでなく (すなわち、立体的に嵩高い)、電子的に不活性であることが好ましく、これは、本発明の文脈においてそのような置換基が本文後の下位節で定義される活性原子を含まないということの意味する。これは、電子的に不活性 (すなわち、非活性) 置換基のみが前述のような蛍光コア構造に結合されることを意味しないものと理解される。また、活性置換基がコア構造にも結合され、蛍光コア構造の光物理的特性を調整するために意図的に導入されてもよい。この場合、1以上の置換基を介して導入された活性原子が電子的に不活性 (すなわち、非活性) 置換基によって再び遮蔽されることが好ましい。

【0408】

最新技術からの前述の情報及び一般知識に基づいて、当業者は、蛍光コア構造の立体的遮蔽を誘導することができ、前述のように電子的に不活性な、蛍光コア構造に対する置換基を選択する方法を理解する。特に、US 2017077418 (A1) は、電子的に不活性 (すなわち、非活性) 遮蔽置換基として適している置換基を開示する。そのような置換基の例は、3~40個の炭素原子、好ましくは、3~20個の炭素原子、より好ましくは、4~10個の炭素原子を有する線状、分枝状または環状のアルキル基を含み、ここで、1以上の水素原子は、置換基、好ましくは、重水素またはフッ素にも代替される。他の例は、3~40個の炭素原子、好ましくは、3~20個の炭素原子、より好ましくは、4~10個の炭素原子を有するアルコキシ基を含み、ここで、1以上の水素原子は、置換基、好ましくは、重水素またはフッ素にも代替される。それらのアルキル及びアルコキシ置換基は、重水素及びフッ素以外の置換基、例えば、アリール基によって置換されてもよいものと理解される。このとき、置換基としてのアリール基は、6~30個の芳香族環原子、より好ましくは、6~8個の芳香族環原子、最も好ましくは、6個の芳香族環原子を含み、アントラセン、ピレンなどの縮合芳香族系ではないことが好ましい。他の例は、6~30個の芳香族環原子、より好ましくは、6~24個の芳香族環原子を有するアリール基を含む。それらのアリール置換基において、1以上の水素原子は置換され、好ましい置換基は、例えば、6~30個の炭素原子を有するアリール基、及び1~20個の炭素原子を有する線状、分枝状または環状のアルキル基である。全ての置換基は、さらに置換可能である。US 2017077418 (A1) に開示された、全ての立体的に要求され、好ましくは、電子的に不活性 (すなわち、非活性) な置換基は、(前述のような) 蛍光コアを立体的に遮蔽し、本発明による用途のための小 FWHM エミッタ S^B に好適な立体的に遮蔽された蛍光エミッタを提供することができることが理解される。

【0409】

本発明の文脈において (US 2017077418 (A1) に開示された)、立体的に要求され (すなわち、遮蔽し)、電子的に不活性な (すなわち、非活性な) 置換基として使用可能な置換基の非限定的な例が下記に示される：

10

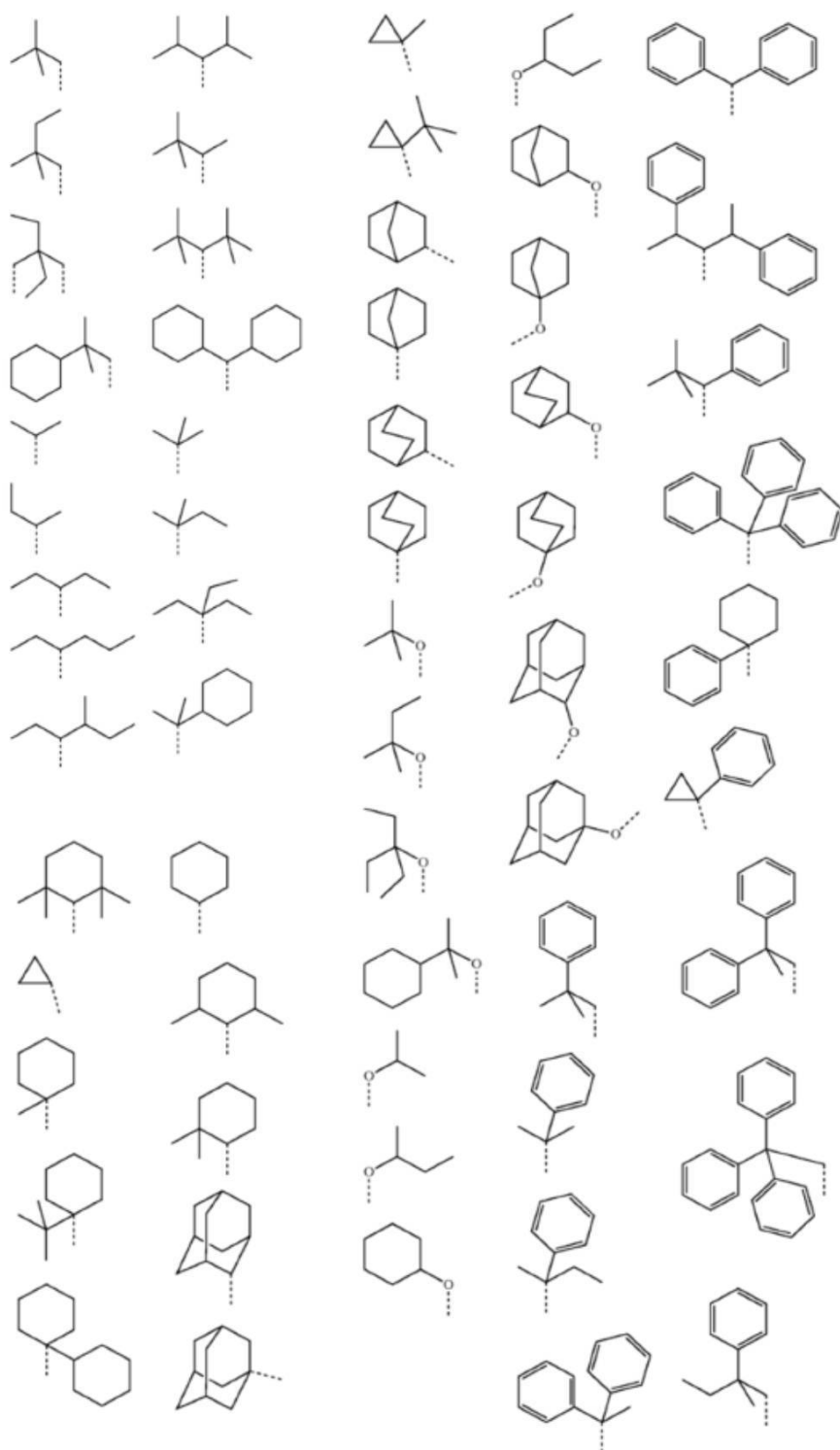
20

30

40

50

【化 3 0 2】



10

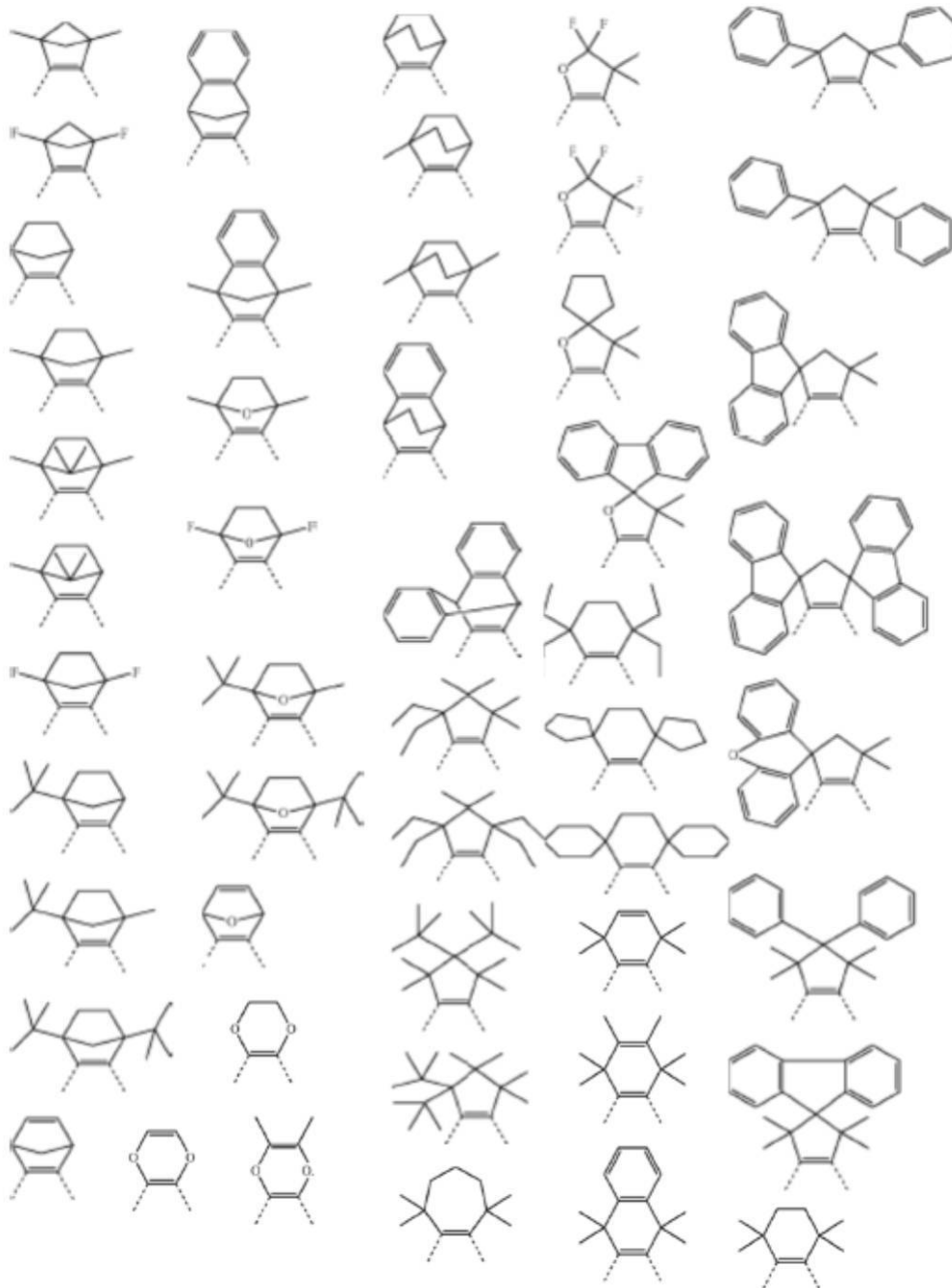
20

30

40

50

【化 3 0 3】



10

20

30

【0 4 1 0】

ここで、それぞれの点線は、それぞれの置換基をコア構造、好ましくは、蛍光コア構造に結合する単結合を示す。当業者に知られているように、トリアルキルシリル基は、立体的に嵩高く、電子的に不活性な置換基として使用するのに適している。

40

【0 4 1 1】

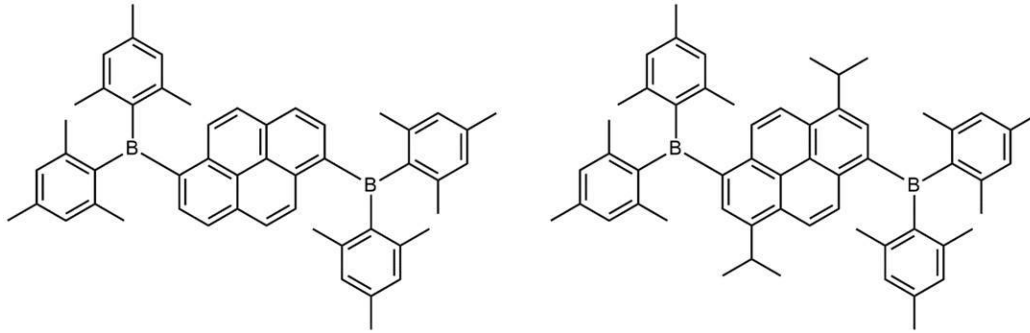
また、蛍光コアは、そのような立体的遮蔽置換基を保有するだけでなく、本発明の文脈において活性基であるか、あるいはそうでない追加の非遮蔽置換基にも置換されることを理解しなければならない（定義は、以下参照）。

【0 4 1 2】

本発明の文脈において小 FWHM エミッタ S^B として使用可能な、立体的に遮蔽された蛍光エミッタの例が下記に示されている。これは、本発明が下記に示されたエミッタを含む有機エレクトロルミネッセンス素子に制限されることを意味するものではない：

50

【化 3 0 4】



10

【0 4 1 3】

立体的に遮蔽された置換基（前述のように電子的に不活性であるか、あるいはそうでない）は、任意の蛍光分子、例えば、前述の多環の芳香族またはヘテロ芳香族蛍光コア、本願に示したBODIPY由来の構造及びNRCETエミッタ、並びに化学式BNE-1の構造を含むエミッタに結合されることが理解される。これは、本発明による小FWHMエミッタ S^B として適している、立体的に遮蔽された蛍光エミッタを生成することができる。

【0 4 1 4】

本発明の一実施形態において、発光層B内において、小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：

20

(i) ボロン(B)含有エミッタであり、これは、それぞれの小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、及び／または

(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、ピレンまたはそのアザ誘導体）。

【0 4 1 5】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、ボロン(B)含有エミッタであり、これは、それぞれの小FWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子がボロン(B)であることを意味する。

【0 4 1 6】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、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、ピレンまたはそのアザ誘導体）。

30

【0 4 1 7】

本発明の一実施形態において、発光層B内において、小FWHMエミッタ S^B は、以下の要件のうち少なくとも1つ（または、両方）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、及び／または

(ii) ピレンコア構造を含む。

【0 4 1 8】

本発明の一実施形態において、小FWHMエミッタ S^B は、ピレンコア構造を含む。

40

【0 4 1 9】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、小FWHMエミッタ S^B は、ボロン(B)及び窒素(N)含有エミッタであり、これは、それぞれの小FWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子がボロン(B)であり、それぞれの小FWHMエミッタ S^B 内の少なくとも1つの原子が窒素(N)であることを意味する。

【0 4 2 0】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、小FWHMエミッタ S^B は、少なくとも1つの窒素原子(N)に（直接）共有結合された少なくとも1つのボロン原子(B)を含む。

【0 4 2 1】

50

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、小FWHMエミッタS^Bは、3個である、すなわち、3個の単結合を介して結合されたボロン原子(B)を含む。

【0422】

立体遮蔽

遮蔽パラメータAの決定

分子の遮蔽パラメータAは、前述のような(蛍光)エミッタに対し、以下に例示的に説明されたように決定されうる。遮蔽パラメータAは、一般的に、単位オングストローム(Å²)を指称するということを理解するであろう。これは、そのような化合物が本発明の文脈において立体的に遮蔽されるか、あるいは遮蔽パラメータがそのような化合物に対して決定されることを意味するものではない。

【0423】

1. 分子軌道のエネルギーレベル決定

分子軌道のエネルギーレベルは、量子化学計算を介して決定されうる。このために、現在、TurboMoleソフトウェアパッケージ(TurboMole GmbH)バージョン7.2を使用することができる。まず、密度関数理論(DFT)を使用し、def2-SV(P)基本セット及びBP-86関数を採用し、分子の底状態の構造最適化を行うことができる。次いで、最適化された構造に基づいて、B3-LYP関数を採用し、電子基底状態に対する単一地点エネルギー計算を行うことができる。エネルギー計算から、最高被占軌道(HOMO)は、例えば、2つの電子によって占有された最高エネルギー軌道として得られ、最低空軌道(LUMO)は、最低エネルギー非占有軌道として得られる。HOMO-1, HOMO-2, ..., LUMO+1, LUMO+2のような他の分子軌道に対しても、同様の方式でエネルギーレベルが得られる。

【0424】

本願に説明された方法は、使用されたソフトウェアパッケージと関係ない。そのような目的によく使用される他のプログラムの例は、「Gaussian09」(Gaussian Inc.)及びQ-Chem 4.1(Q-Chem, Inc.)であってもよい。

【0425】

2. (蛍光)化合物の電荷交換分子軌道

(蛍光)化合物の電荷交換分子軌道は、HOMO及びLUMO、並びにHOMOまたはLUMOから75 meV以下のエネルギーで分離可能な全ての分子軌道と見なされる。

【0426】

3. 分子軌道の活性原子の決定

それぞれの電荷交換分子軌道に対し、いかなる原子が活性化されるかに係わる決定が行われる。すなわち、それぞれの分子軌道に対し、一般的に異なる活性原子セットが発見される。HOMOの活性原子が決定される方法に係わる説明が続く。他の全ての電荷交換分子軌道(例えば、HOMO-1、LUMO、LUMO+1など)に対し、活性原子が同様に決定されてもよい。

【0427】

HOMOは、前述のように計算されてもよい。活性原子を決定するために、軌道の絶対値が0.035である表面(「カットオフが0.035である等表面」)を検査する。このために、現在、Jmolソフトウェア(<http://jmol.sourceforge.net/>)バージョン14.6.4が使用される。カットオフ値以上の値を有する軌道ローブが周辺に局所化される原子が活性と見なされる。カットオフ値以上の値を有する軌道ローブが周辺に位置することができない原子は、非活性と見なされる。

【0428】

4. (蛍光)化合物の活性原子の決定

1つの原子が少なくとも1つの電荷交換分子軌道で活性である場合、(蛍光)化合物に対して活性であるものと見なされる。全ての電荷交換分子軌道で非活性(不活性)な原子のみが(蛍光)化合物と係わって非活性であってもよい。

【0429】

10

20

30

40

50

5. 遮蔽パラメータAの決定

第1ステップにおいて、B. Lee, F. M. Richards, Journal of Molecular Biology 1971, 55 (3), 379, DOI: 10.1016/0022-2836(71)90324-Xに述べられた方法により、全ての活性原子に対して溶媒接近可能表面積 (solvent accessible surface area: SASA) を決定することができる。当該目的のために、1つの分子の原子のファンデルワールス表面は浸透することができないものとも見なされる。その後、全体分子のSASAは、半径 r (いわゆる、探針半径) を有する堅い球 (探針ともいう) の中心によって追跡される表面の領域とも定義され、このとき、球の表面が分子のファンデルワールス表面と直接接触可能な空間内の全ての接近可能な地点を球が転がりうる。また、SASA値は、1つの分子の原子のサブ集合に対しても決定される。その場合、探針の表面がサブ集合の一部であってもよい原子のファンデルワールス表面と接触可能な地点において、探針の中心によって追跡される表面のみが考慮される。当該目的のために、SASAを決定するのに使用されるLee-Richardsアルゴリズムは、プログラムパッケージFree SASA (S. Mitternacht, Free SASA: An open source C library for solvent accessible surface area calculations. F1000Res. 2016; 5:189. Published 2016 Feb 18. doi: 10.12688/f1000research.7931.1) の一部であってもよい。関連要素のファンデルワールス半径 r_{VDW} は、以下の参照に示されている: M. Mantina, A. C. Chamberlin, R. Valero, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, The Journal of Physical Chemistry A 2009, 113 (19), 5806, DOI: 10.1021/jp8111556。探針半径 r は、当該目的のための全てのSASA決定に対し、 $4 \text{ \AA}$ ($r = 4 \text{ \AA}$) にも設定される。

【0430】

本発明の文脈において、遮蔽パラメータAは、活性原子の下位集合の溶媒接近可能表面積 (全体分子のSASAと区別するために、Sで表される) を活性原子の数 n で割ることによって得られる。

$$A = S / n$$

【0431】

本発明の文脈において、遮蔽パラメータAが $2 \text{ \AA}^2$ 未満の値 ($A < 2.0 \text{ \AA}^2$) を有する場合、化合物は、立体的によく遮蔽されたものとも定義される。

【0432】

本発明の文脈において、遮蔽パラメータAが $1.0 \sim 5.0 \text{ \AA}^2$ ($1.0 \text{ \AA}^2 \leq A \leq 5.0 \text{ \AA}^2$)、好ましくは、 $2.0 \text{ \AA}^2 \sim 5.0 \text{ \AA}^2$ ($2.0 \text{ \AA}^2 \leq A \leq 5.0 \text{ \AA}^2$) の値を有する場合、化合物は、立体的に遮蔽されたものとも定義される。

【0433】

例示的な (蛍光) エミッタが前述のように決定された遮蔽パラメータAと共に、下記に示されている。これは、本発明が下記に示されたエミッタのうち1つを含む有機エレクトロルミネッセンス素子に制限されるものではないということを理解するであろう。下記に示されたエミッタ化合物は、ただ本発明の選択的な実施形態を示す非限定的な例である：

10

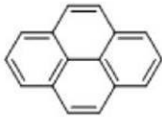
20

30

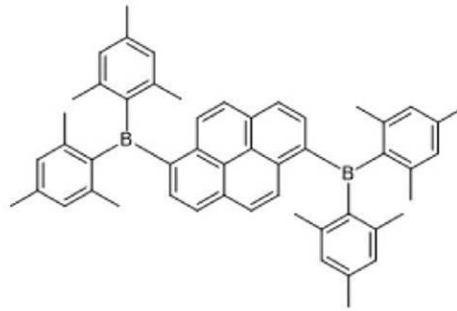
40

50

【化 3 0 5】

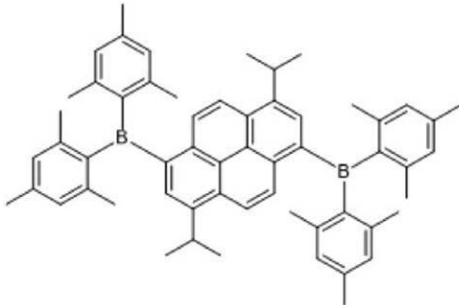


遮蔽パラメータ $A = 15.5 \text{ \AA}^2$

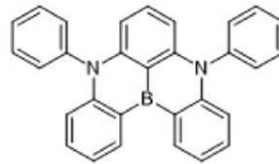


遮蔽パラメータ $A = 2.3 \text{ \AA}^2$

10

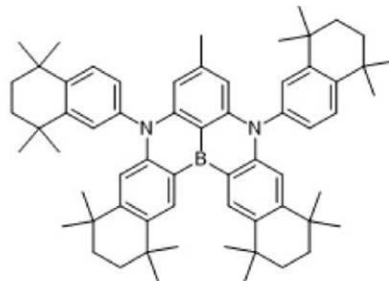


遮蔽パラメータ $A = 1.7 \text{ \AA}^2$



遮蔽パラメータ $A = 9.3 \text{ \AA}^2$

20



遮蔽パラメータ $A = 0.1 \text{ \AA}^2$

30

【0 4 3 4】

本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれたそれぞれの小FWHMエミッタ S^B は、 $5.0 \text{ \AA}^2$ 以下の遮蔽パラメータ A を示す。

【0 4 3 5】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、 $5.0 \text{ \AA}^2$ 以下の遮蔽パラメータ A を示す。

【0 4 3 6】

本発明の好ましい実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれたそれぞれの小FWHMエミッタ S^B は、 $2.0 \text{ \AA}^2$ 以下の遮蔽パラメータ A を示す。

40

【0 4 3 7】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの発光層 B において、少なくとも1つ、好ましくは、それぞれの小FWHMエミッタ S^B は、 $2.0 \text{ \AA}^2$ 以下の遮蔽パラメータ A を示す。

【0 4 3 8】

当業者は、本発明による小FWHMエミッタ S^B のような蛍光エミッタのみが遮蔽置換基が結合されることにより、立体的に遮蔽されるものではないことを理解する。例えば、

50

本発明の文脈における T A D F 材料 E^B 及び本発明の文脈における 燐光材料 P^B も遮蔽されることが理解される。

【0439】

励起状態寿命

励起状態寿命を測定する方法に係わる詳細な説明が本文後の下位節で提供される。

【0440】

本発明の一実施形態において、発光層 B において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれ、本発明の文脈における T A D F 材料 E^B は、110 μs 以下、好ましくは、100 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

10

(E^B) を示す。本発明の一実施形態において、本発明の文脈におけるそれぞれの T A D F 材料 E^B は、110 μs 以下、好ましくは、100 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

(E^B) を示す。

【0441】

本発明の一実施形態において、発光層 B において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれ、本発明の文脈における T A D F 材料 E^B は、75 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

20

(E^B) を示す。本発明の一実施形態において、本発明の文脈におけるそれぞれの T A D F 材料 E^B は、75 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

(E^B) を示す。

【0442】

本発明の一実施形態において、発光層 B において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれ、本発明の文脈における T A D F 材料 E^B は、50 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

30

(E^B) を示す。本発明の一実施形態において、それぞれの T A D F 材料 E^B は、50 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

(E^B) を示す。

【0443】

本発明の好ましい実施形態において、発光層 B において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれ、本発明の文脈における T A D F 材料 E^B は、10 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

40

(E^B) を示す。本発明の一実施形態において、それぞれの T A D F 材料 E^B は、10 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

(E^B) を示す。

【0444】

本発明のより好ましい実施形態において、発光層 B において、少なくとも 1 つ、好ましくは、それぞれ、本発明の文脈における T A D F 材料 E^B は、5 μs 以下の遅延蛍光寿命

〒

50

(E^B)を示す。本発明の一実施形態において、それぞれのTADF材料E^Bは、5 μs以下の遅延蛍光寿命

〒

(E^B)を示す。

【0445】

本発明の一実施形態において、発光層Bにおいて、本発明の文脈における燐光材料P^Bは、50 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。本発明の一実施形態において、それぞれの燐光材料P^Bは、50 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。

【0446】

本発明の好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、本発明の文脈における燐光材料P^Bは、10 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。本発明の一実施形態において、それぞれの燐光材料P^Bは、10 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。

【0447】

本発明のより好ましい実施形態において、発光層Bにおいて、本発明の文脈における燐光材料P^Bは、5 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。本発明の一実施形態において、燐光材料P^Bは、5 μs以下の励起状態寿命

〒

(P^B)を示す。

【0448】

本発明の一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子において、燐光材料P^B、小FWHMエミッタS^B及びホスト材料H^Bを含む発光層Bへの1以上のTADF材料E^Bの添加は、有機エレクトロルミネッセンス素子の励起状態寿命低下をもたらす。本発明の好ましい実施形態において、前述の本発明によるTADF材料E^Bの添加は、有機エレクトロルミネッセンス素子の励起状態寿命を少なくとも50%低下させる。

【0449】

素子構造

当業者は、発光層Bが通常的に本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれることが分かるであろう。好ましくは、当該有機エレクトロルミネッセンス素子は、少なくとも下記層を含む：少なくとも1層の発光層B、少なくとも1層のアノード層A、及び少なくとも1層のカソード層C。

【0450】

好ましくは、発光層Bは、アノード層Aとカソード層Cとの間に位置する。したがって

10

20

30

40

50

、一般的な設定は、好ましくは、A-B-Cである。それはもちろん1以上の選択的な追加層の存在を排除しない。それらは、A、B及び／またはCのそれぞれの側に存在してもよい。

【0451】

好ましくは、アノード層Aは、基板の表面に位置する。基板は、任意の材料、または該材料の組成物によって形成されてもよい。ほとんど、ガラススライドが基板として使用される。または、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。二電極のうち少なくとも1つは、エレクトロルミネッセンス素子（例えば、OLED）から光を放出するように（本質的に）透明ではなければならない。通常、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。好ましくは、アノード層Aは、透明導電性酸化物（TCO）を多量含むか、あるいはそれから構成される。

【0452】

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、及びそれらのうち2以上の混合物を含んでもよい。

【0453】

特に好ましくは、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、 $(InO_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$ ）で構成される。透明導電性酸化物（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緩和されてもよい。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が容易となる。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の混合物を含んでもよい。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피ロピフルオレン（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피ロピフルオレン-2,7'-ジアミン（Spiro-NPD）によって構成されてもよい。

【0454】

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使用されてもよい。該HTLは、アノード層Aと発光層B（発光層（EML）の役割を行う）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（HT

L) は、また、電子遮断層 (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-TPAD、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んでもよい。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構成されてもよい p-ドーピングされた層を含んでもよい。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。

【0455】

電子遮断層 (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)、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、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) を含んでもよい。

【0456】

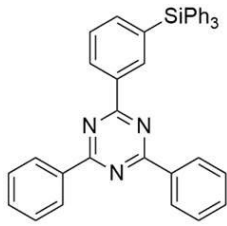
1 以上の発光層 B の組成が前述された。本発明による任意の 1 以上の発光層 B は、好ましくは、1 mm 以下、より好ましくは、0.1 mm 以下、より一層好ましくは、10 μ m 以下、さらに好ましくは、1 μ m 以下、特に好ましくは、0.1 μ m 以下の厚みを有する。

【0457】

電子輸送層 (ETL) には、任意の電子輸送体を使用することができる。例えば、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。例えば、電子輸送体 ETM (すなわち、電子輸送材料) 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。ETM 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-フェナントリン (NBphen)、アルミニウム-トリ (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) を含んでもよい。選択的に、電子輸送層は、8-ヒドロキシキノリノラトリチウム (Li q) のような材料によってドーピングされてもよい。選択的に、第 2 電子輸送層が電子輸送層とカソード層 C との間に位置しうる。電子輸送層 (ETL) も、正孔を遮断することができる。または、正孔遮断層 (HBL) が導入される。

【0458】

HBLは、例えば、HBM1：



、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)(Alq₃)、ジフェニル-4-トリフェニルシリルフェニル-ホスフィンオキシド(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)、2,4-ジフェニル-6-(3'-トリフェニルシリルフェニル)-1,3,5-トリアジン(DTST)、2,8-ビス(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジニル)ジベンゾフラン(DTDBF)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)を含んでもよい。

【0459】

電子輸送層(ETL)に隣接し、カソード層Cが位置する。該カソード層Cは、例えば、金属(例えば、Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、LiF、Ca、Ba、Mg、In、WまたはPd)または金属合金を含むか、あるいはそれから構成される。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構成されてもよい。代案として、あるいはさらには、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)を含んでもよい。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によって構成されてもよい。

【0460】

好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、少なくとも下記層を含む：

A) インジウムスズ酸化物、インジウム亜鉛酸化物、PbO、SnO、黒鉛、ドーピングされたシリコン、ドーピングされたゲルマニウム、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、ドーピングされたポリチオフェン及びそれら2以上の混合物から構成される群から選択された少なくとも1つの成分を含むアノード層A、

B) 本願に述べられたような本発明による発光層B、及び

C) Al、Au、Ag、Pt、Cu、Zn、Ni、Fe、Pb、In、W、Pd、LiF、Ca、Ba、Mg及びそれら2以上の混合物または合金から構成される群から選択された少なくとも1つの成分を含むカソード層C、

ここで、発光層Bは、アノード層Aとカソード層Cとの間に位置する。

【0461】

一実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子はOLEDであり、選択的に下記層構造を含んでもよい：

A) 例えば、インジウムスズ酸化物(ITO)を含むアノード層A、HTL)正孔輸送層HTL、

B) 本願に述べられたような本発明による発光層B、

ETL)電子輸送層ETL、及び

C) 例えば、Al、Ca及び／またはMgを含むカソード層C。

【0462】

好ましくは、ここで、層の順序は、A-HTL-B-ETL-Cである。

【0463】

一実施形態において、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は、発光層Bに隣接した励起子管理層EXLを含み、ここで、EXLは、三重項-三重項消滅(TTA)材料を含む。

【0464】

好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、下記層構造を含むOLEDである：

A) 例えば、インジウムスズ酸化物(ITO)を含むアノード層A、

HTL) 正孔輸送層HTL、

EXL) 励起子管理層EXL、

B) 本願に述べられたような本発明による発光層B、

ETL) 電子輸送層ETL、及び

C) 例えば、Al、Ca及び／またはMgを含むカソード層C。

【0465】

好ましくは、ここで、層の順序は、A-HTL-EXL-B-ETL-Cである。

【0466】

一実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、下記層構造を含むOLEDである：

A) 例えば、インジウムスズ酸化物(ITO)を含むアノード層A、

HTL) 正孔輸送層HTL、

B) 本願に述べられたような本発明による発光層B、

EXL) 励起子管理層EXL、

ETL) 電子輸送層ETL、及び

C) 例えば、Al、Ca及び／またはMgを含むカソード層C。

【0467】

好ましくは、ここで、層の順序は、A-HTL-B-EXL-ETL-Cである。

【0468】

当業者に知られているように、TTA材料をホスト材料H^Bとして使用可能である。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引き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(T^{1TTA})から第一励起一重項状態(S^{1TTA})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つの光子がT^{1TTA}からS^{1TTA}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、多数のエネルギー移動段階を介して、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可能なプロセスであってもよい。

【0469】

選択的に、TTA材料は、吸収部分構造、増感剤部分構造及び発光部分構造(または、消滅剤部分構造)を含んでもよい。これと係わり、発光部分構造は、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芳香族部分構造であってもよい。好ましい実施形態において、多環芳香族部分構造は、アントラセン部分構造またはその誘導体を含む。増感剤部分構造及び発光部分構造は、2つの相異なる化学的化合物(すなわち、分離された化学的実体)に位置するか、あるいは1つの化合物に含まれた2つの部分構造であってもよい。

【0470】

本発明によれば、TTA材料は、最低励起三重項状態(T^{1N})からの三重項-三重項

10

20

30

40

50

消滅を示し、 $T1^N$ のエネルギーの最大2倍のエネルギーを有する三重項－三重項消滅された第一励起一重項状態 $S1^N$ を形成することを特徴とする。

【0471】

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、第一励起三重項状態 $T1^N$ から第一励起一重項状態 $S1^N$ にエネルギーを変換する。

【0472】

本発明の一実施形態において、TTA材料は、 $T1^N$ から三重項－三重項消滅を示して $S1^N$ を生成することを特徴とし、ここで、 $S1^N$ は、 $T1^N$ エネルギーの1.01～2倍、1.1～1.9倍、1.2～1.5倍、1.4～1.6倍、または1.5～2倍のエネルギーを有する。

【0473】

本願において使用されているように、「TTA材料」及び「TTA化合物」という用語は、互いに交換されて使用可能である。

【0474】

典型的な「TTA材料」を、Kondakov (Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2015, 373: 20140321) に述べられたように青色蛍光OLEDと係わる最新技術において探することができる。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。

【0475】

好ましい実施形態において、TTA材料は、感応（sensitized）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つの多環芳香族構造及び少なくとも1つの追加芳香族残基を含む。

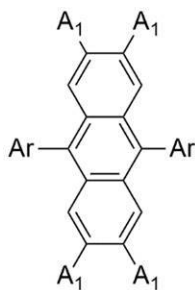
【0476】

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。

【0477】

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

【化306】



・・・化学式TTA

【0478】

ここで、

それぞれのArは、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

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）アルキルから構成される群から選択された1以上の残基で選択的に置換される 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）アルキルから構成される群から選択された1以上の残基で選択的に置換される C_3-C_{57} ヘテロアリール、

それぞれの A_1 は、互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、

重水素、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_6-C_{60} アリール、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_3-C_{57} ヘテロアリール、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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_1-C_{40} (ヘテロ) アルキル。

【0479】

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

それぞれの A_r は、互いに独立して、下記から構成される群から選択され、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される 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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_3-C_{57} ヘテロアリール、

それぞれの A_1 は、互いに独立して、下記から構成される群から選択される：

水素、

重水素、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_6-C_{60} アリール、

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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_3-C_{57} ヘテロアリール、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) アルキルから構成される群から選択された 1 以上の残基で選択的に置換される C_1-C_{40} (ヘテロ) アルキル。

【0480】

一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式 TTA のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも 1 つの A_1 は、水素である。一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式 TTA のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも 2 つの A_1 は、水素である。一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式 TTA のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも 3 つの A_1 は、水素である。一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式 TTA のアントラセン誘導体であり、ここで、全ての A_1 がそれぞれ水素である。

【0481】

一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式 TTA のアントラセン誘導体であり、ここで、1 つの A_r は、 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) アルキルから構成され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た、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構成される群から選択された残基である。

【0482】

10

20

30

40

50

一実施形態において、 H^{TTA} は、下記化学式TTA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、 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）アルキルから構成され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た、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構成される群から選択された残基である。

【0483】

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

10

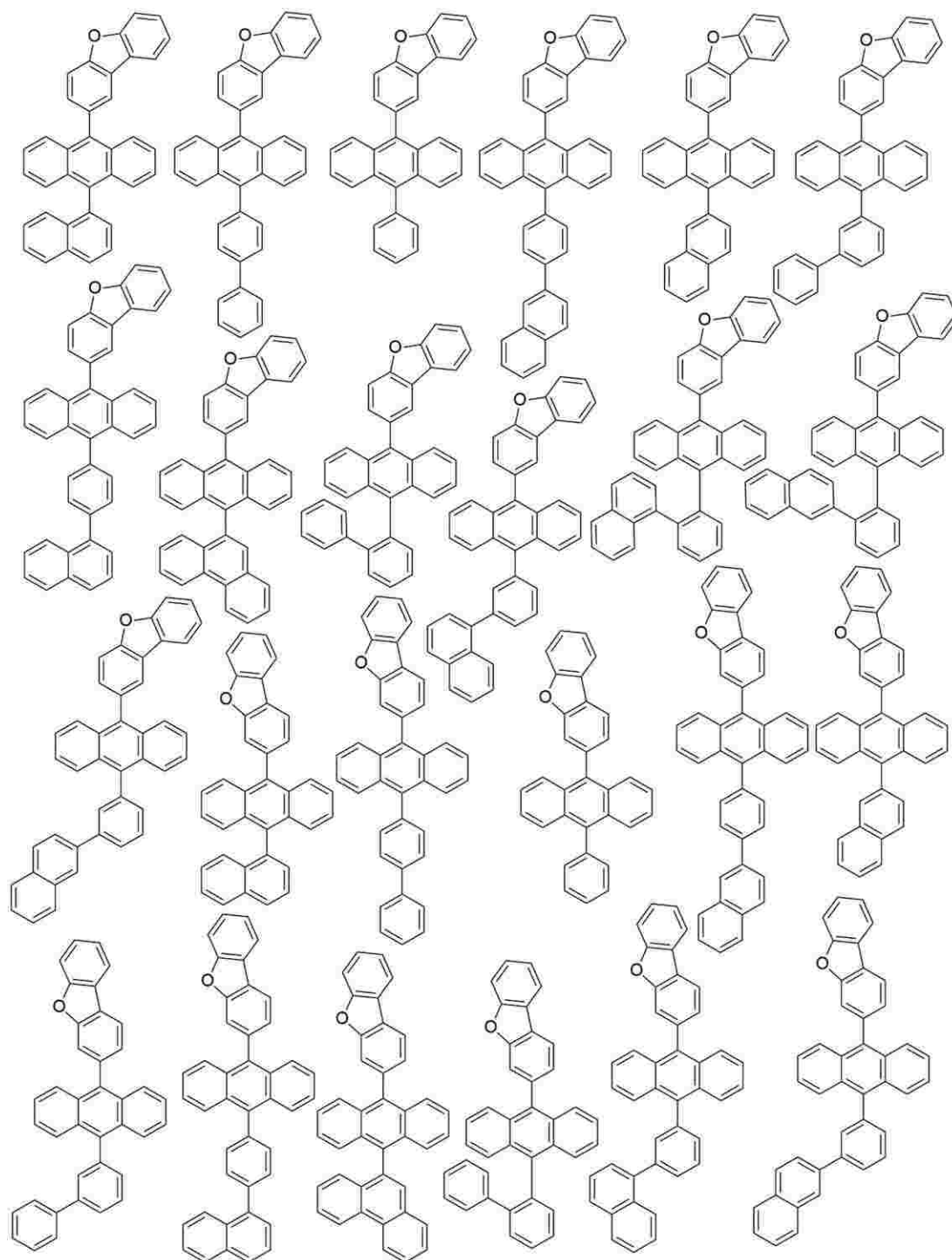
20

30

40

50

【化 3 0 7】



10

20

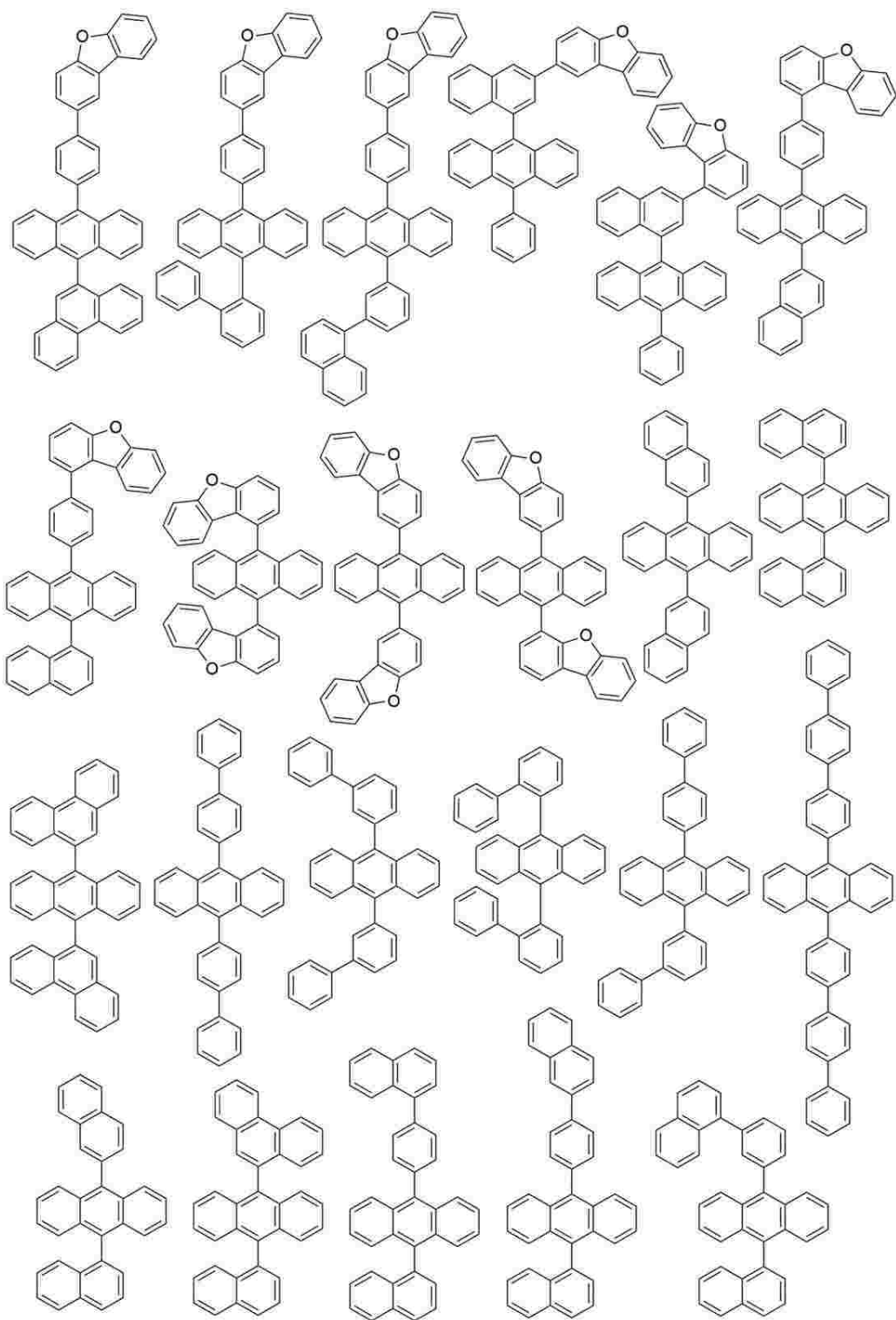
30

40

50

40

【化 3 0 9】



10

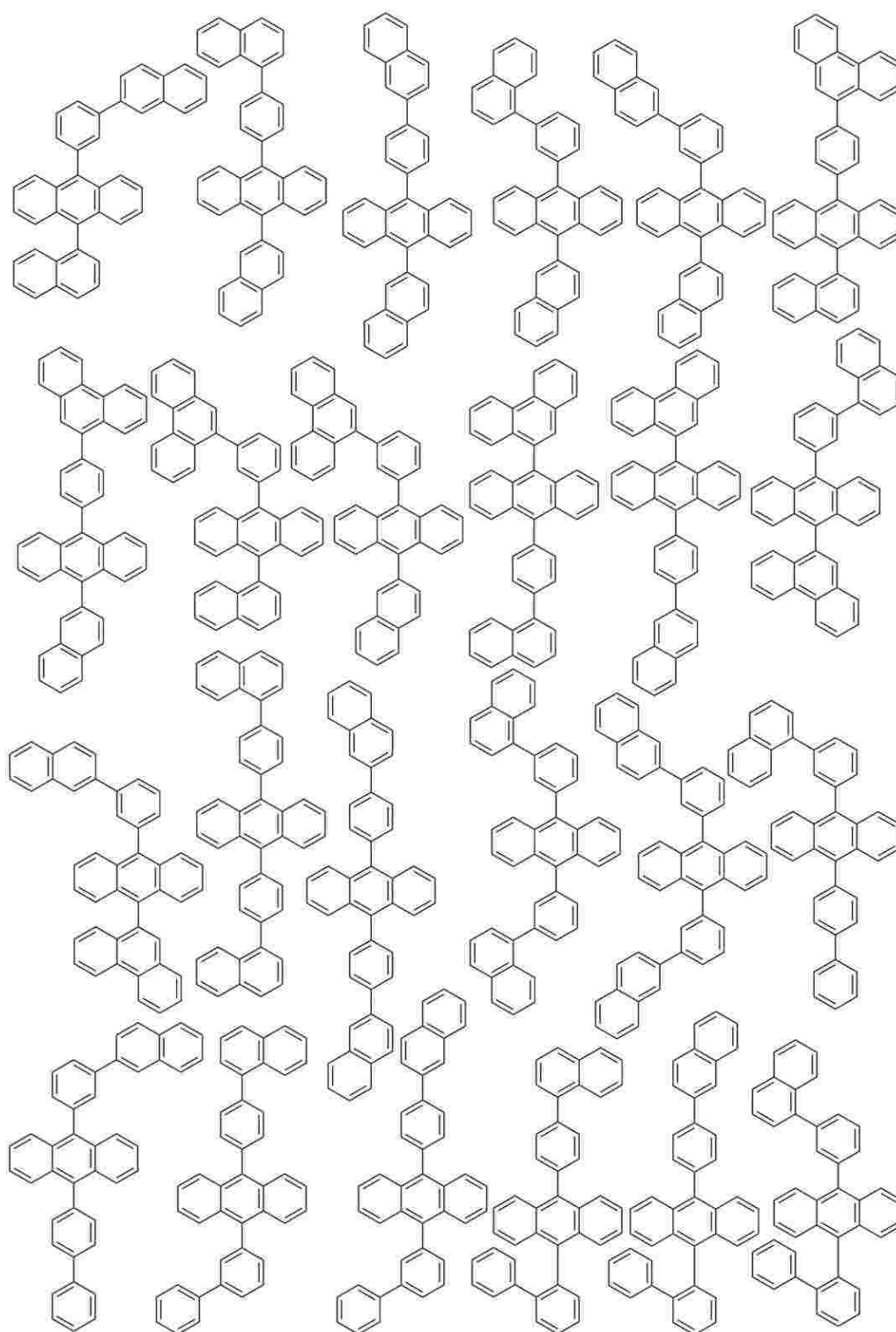
20

30

40

50

【化 3 1 0】



10

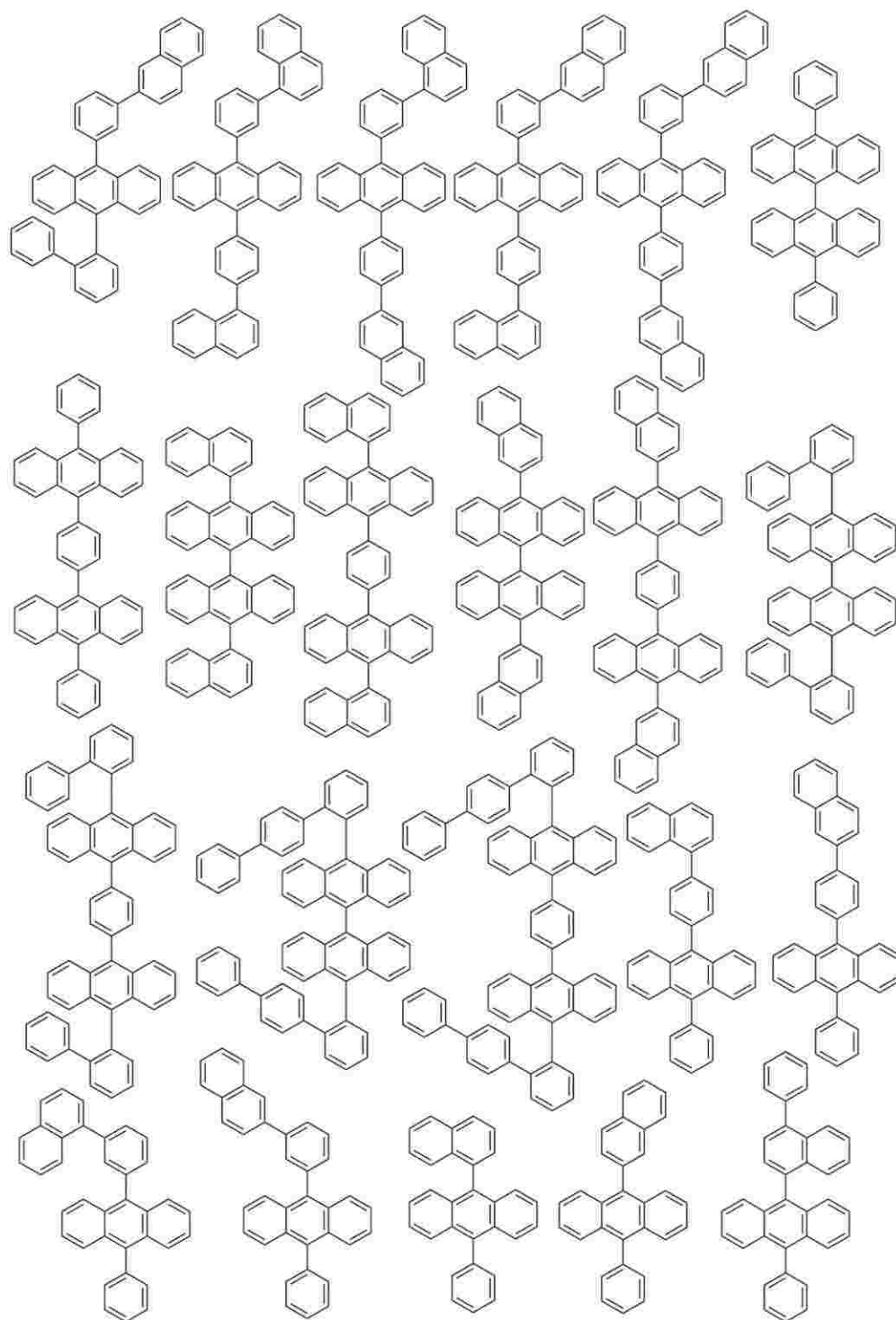
20

30

40

50

【化 3 1 1】



10

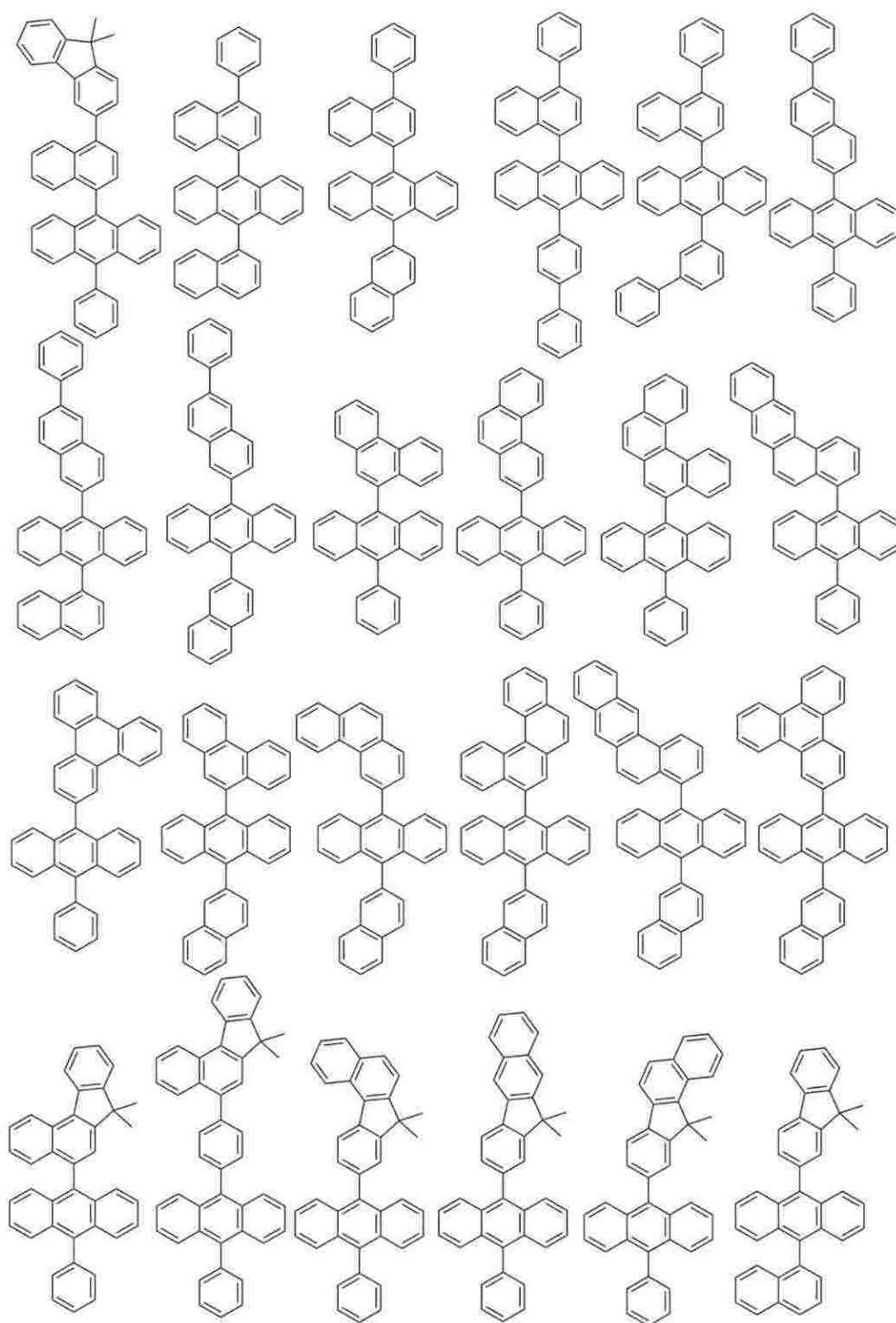
20

30

40

50

【化 3 1 2】



10

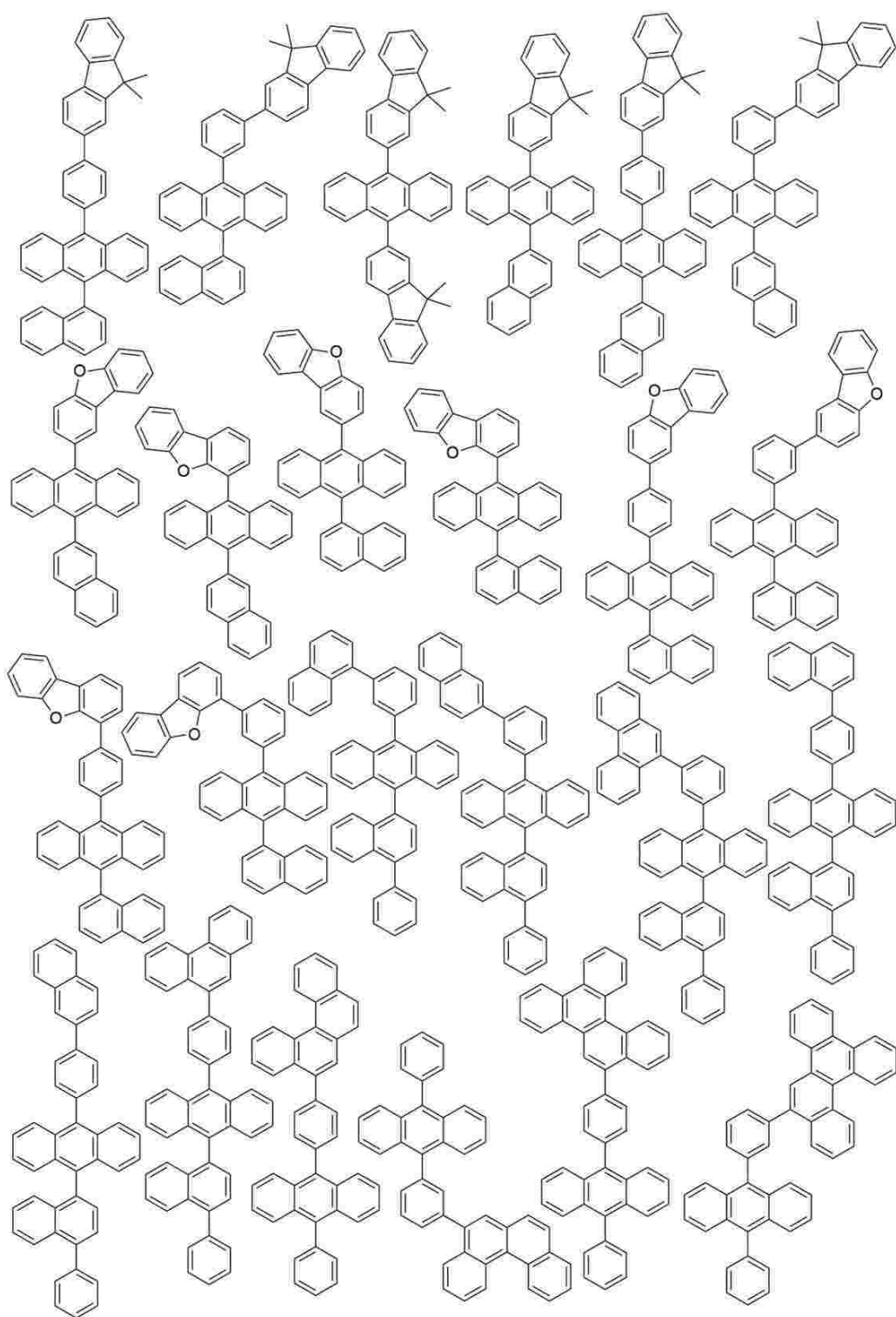
20

30

40

50

【化 3 1 3】



10

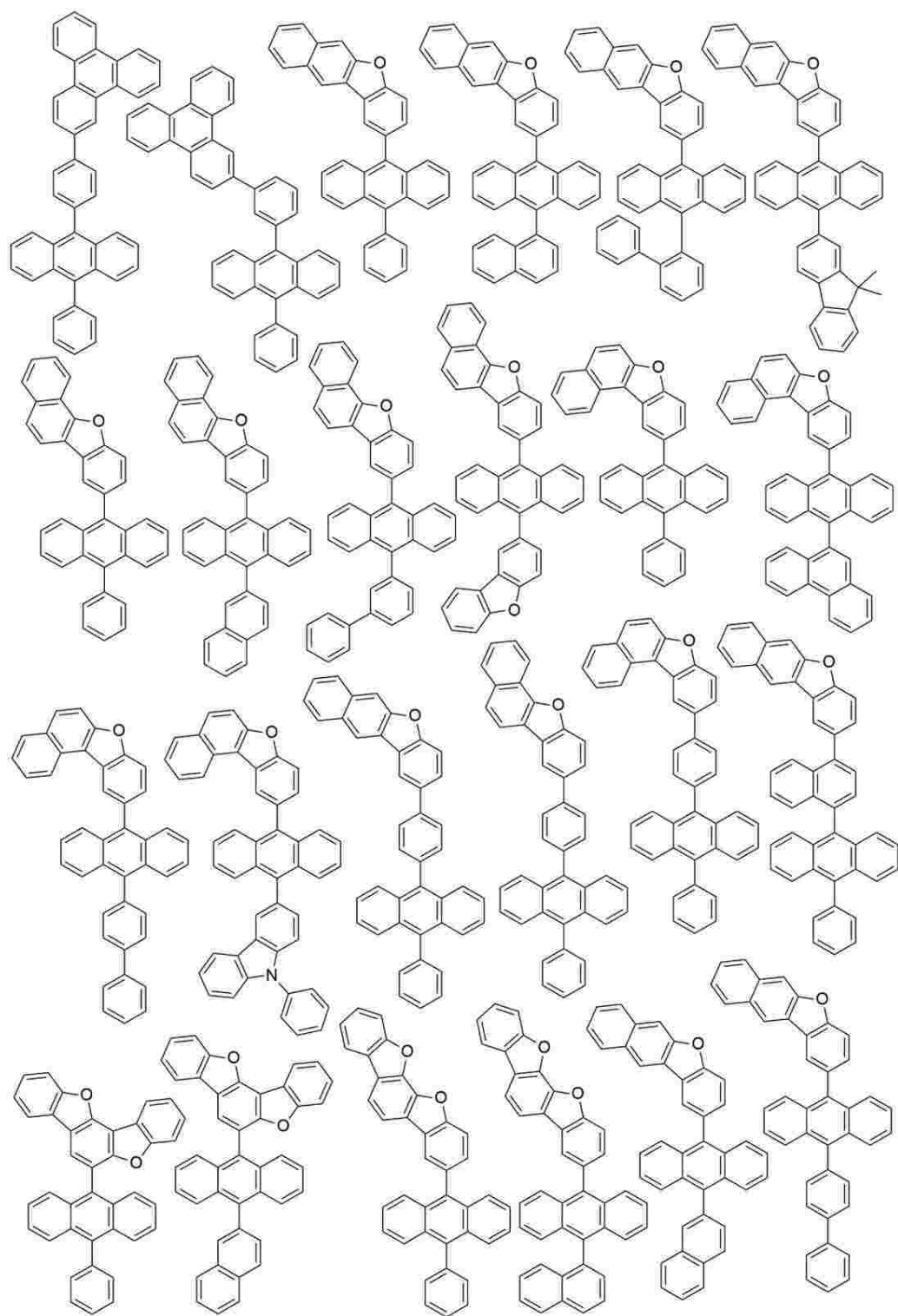
20

30

40

50

【化 3 1 4】



10

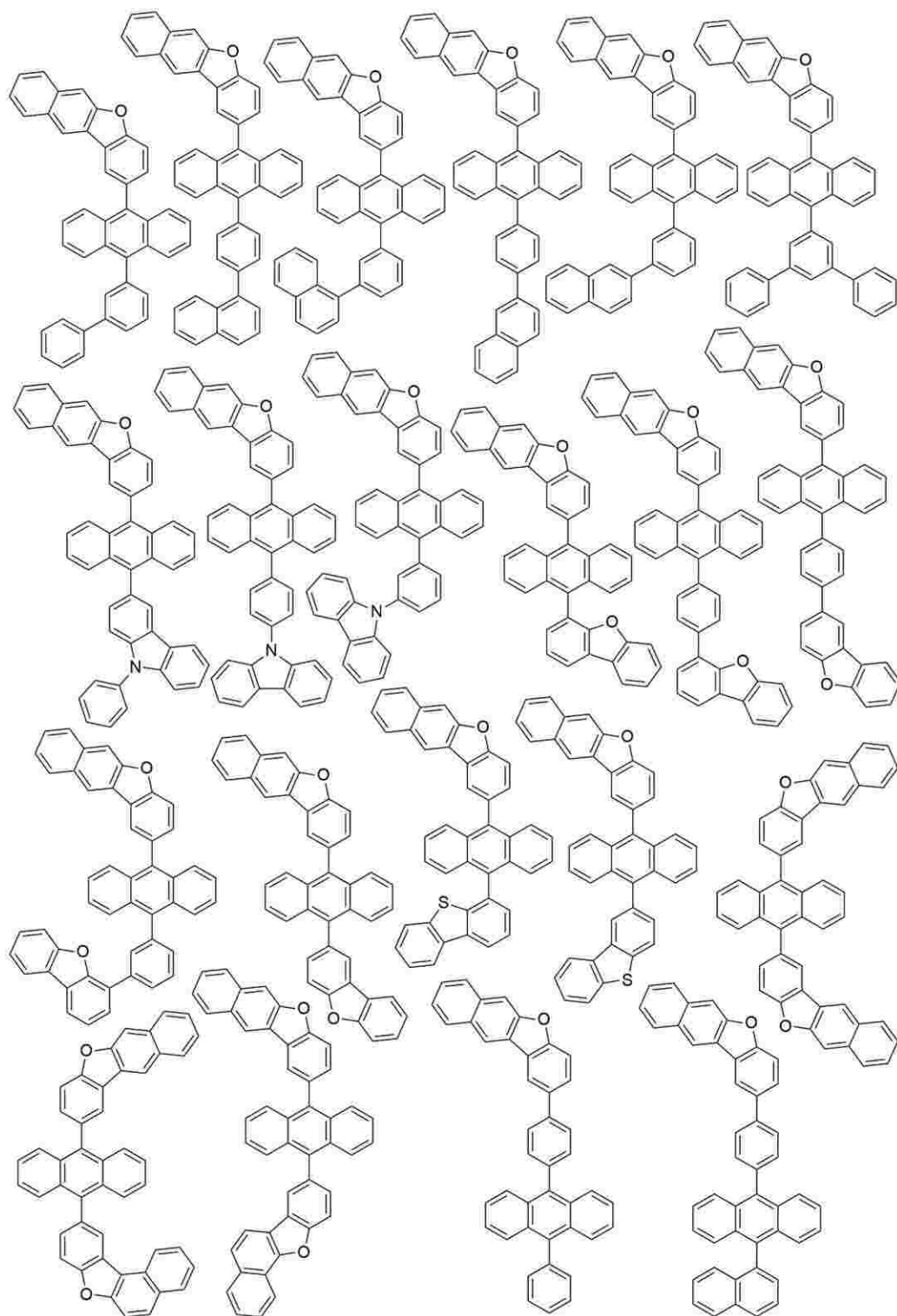
20

30

40

50

【化 3 1 5】



10

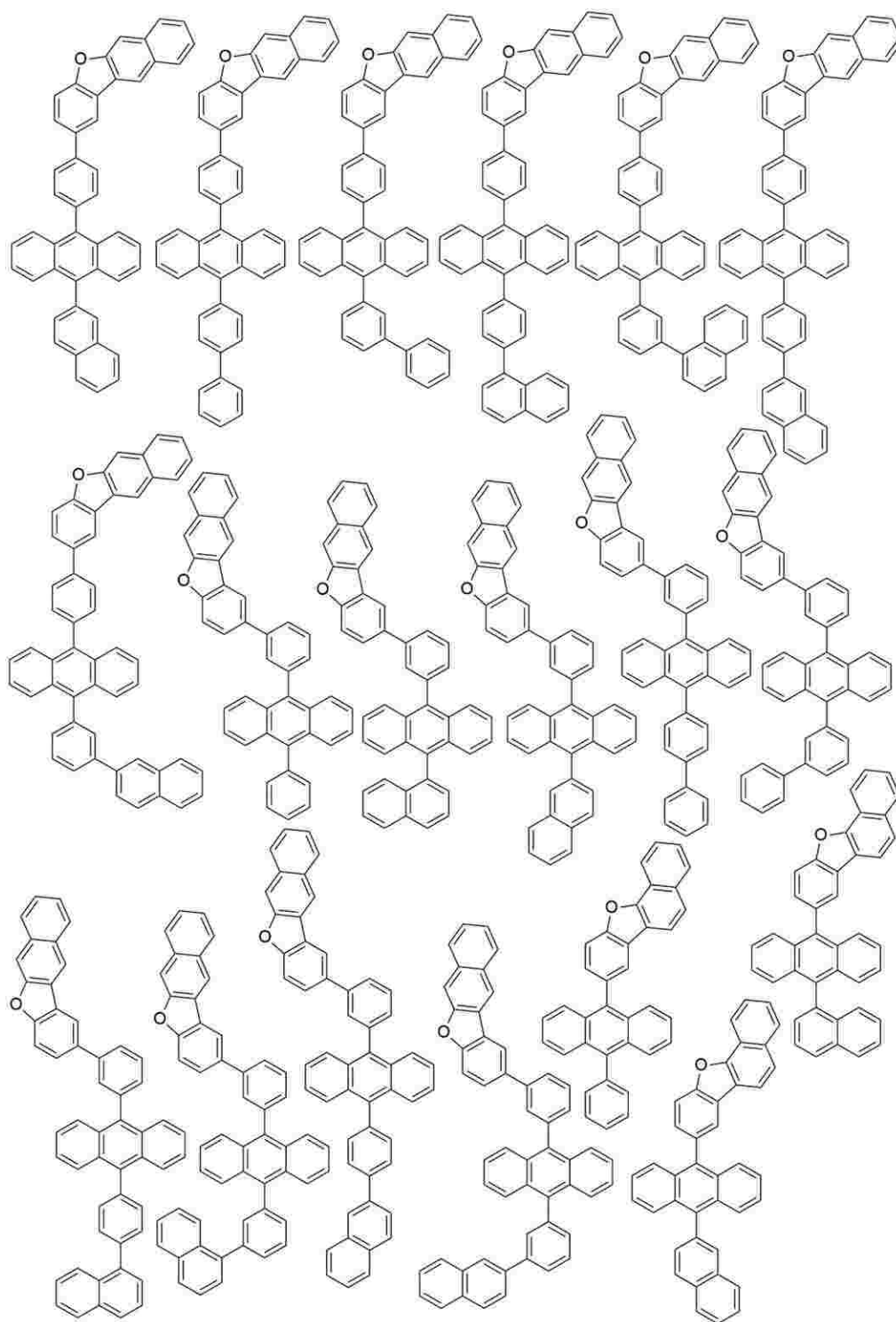
20

30

40

50

【化 3 1 6】



10

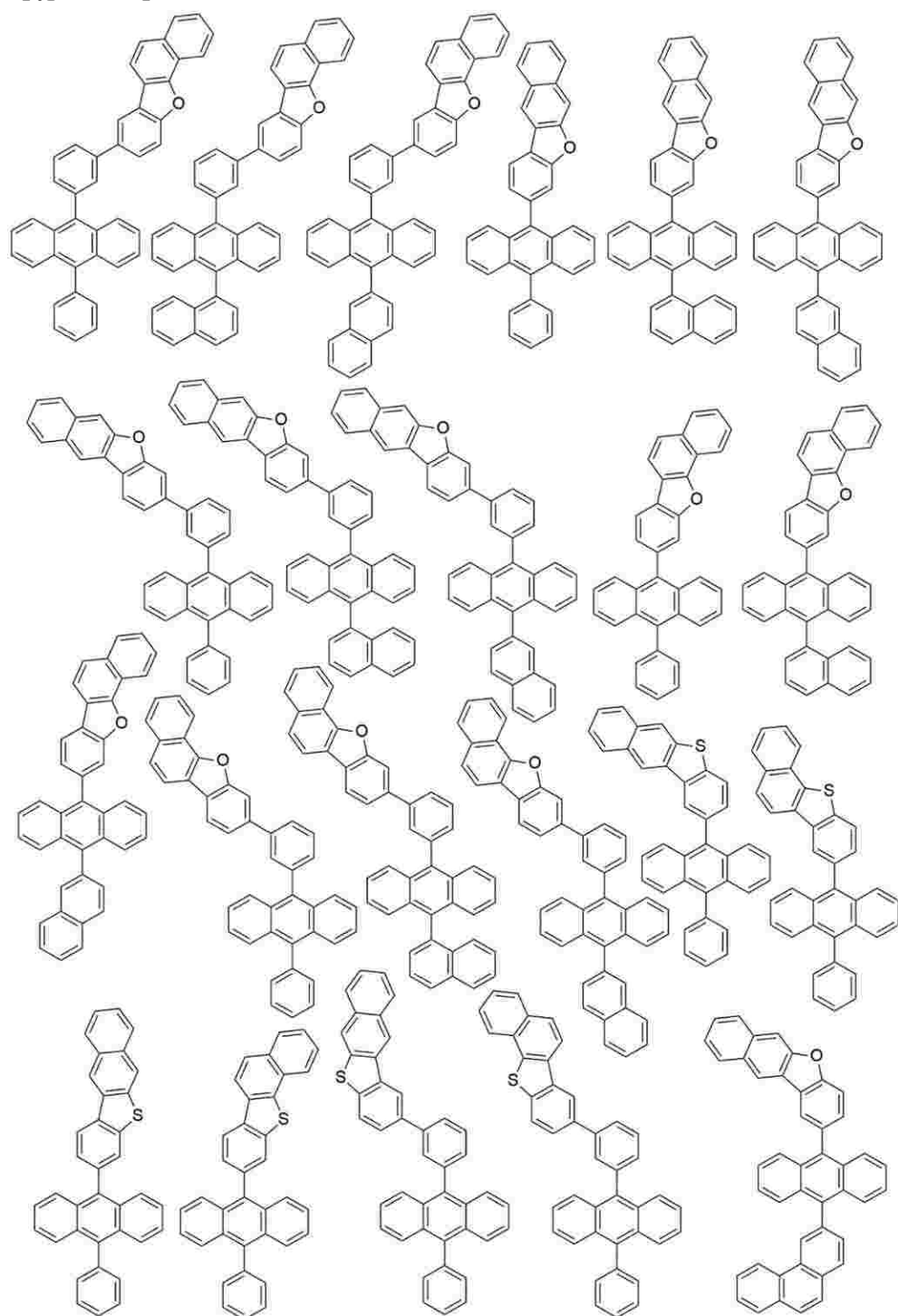
20

30

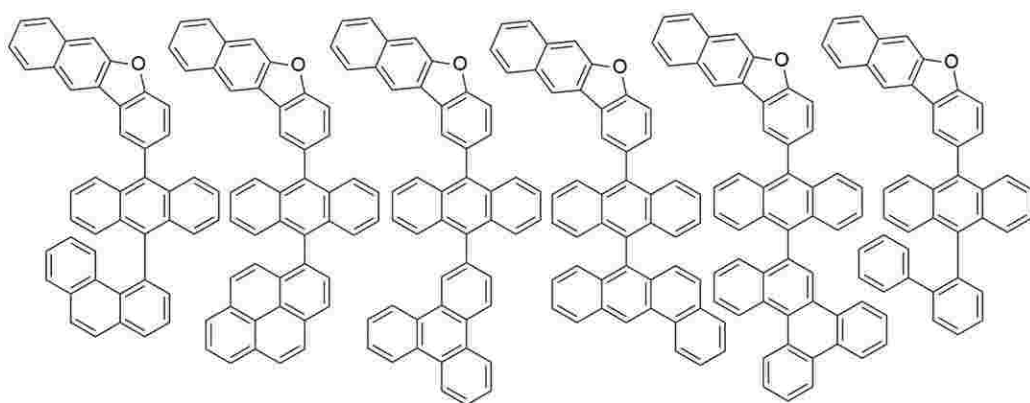
40

50

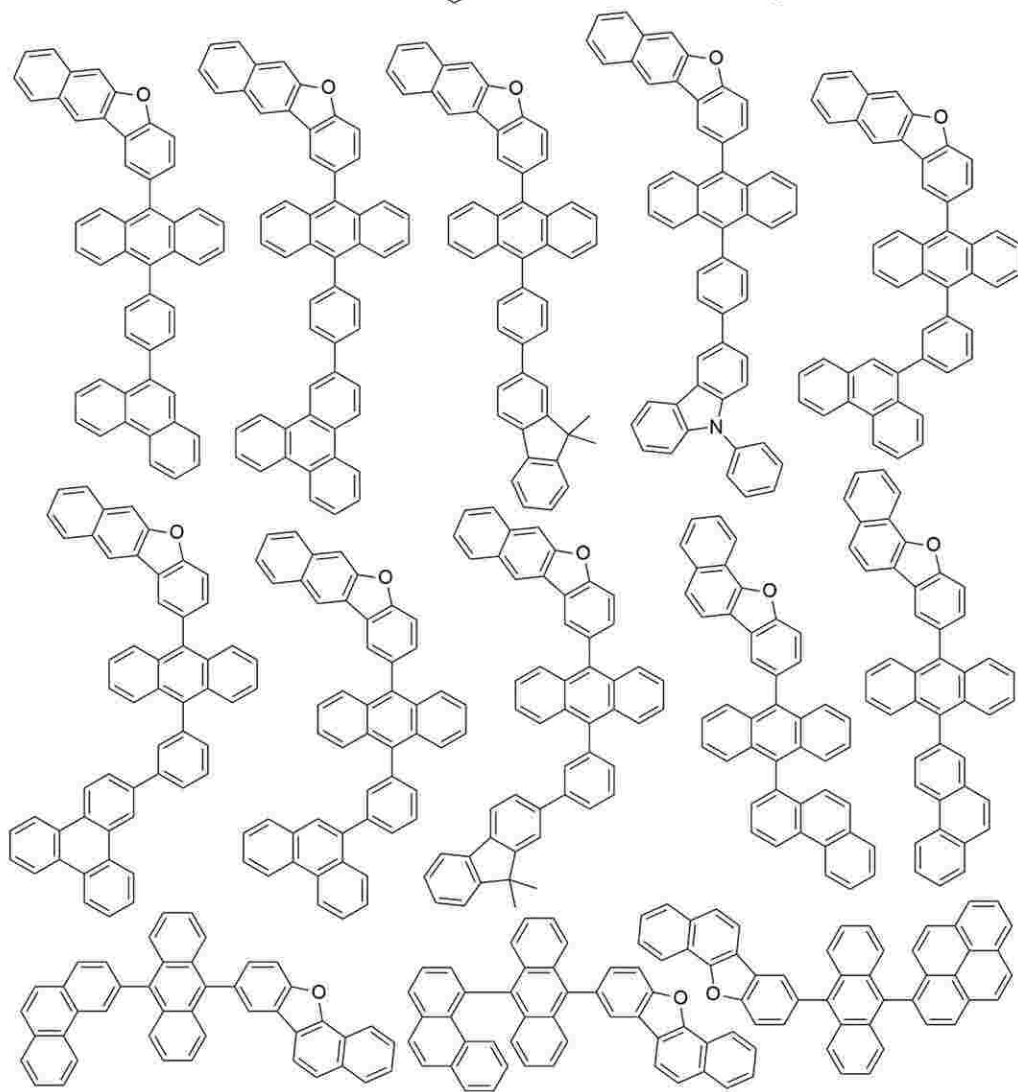
【化 3 1 7】



【化 3 1 8】



10



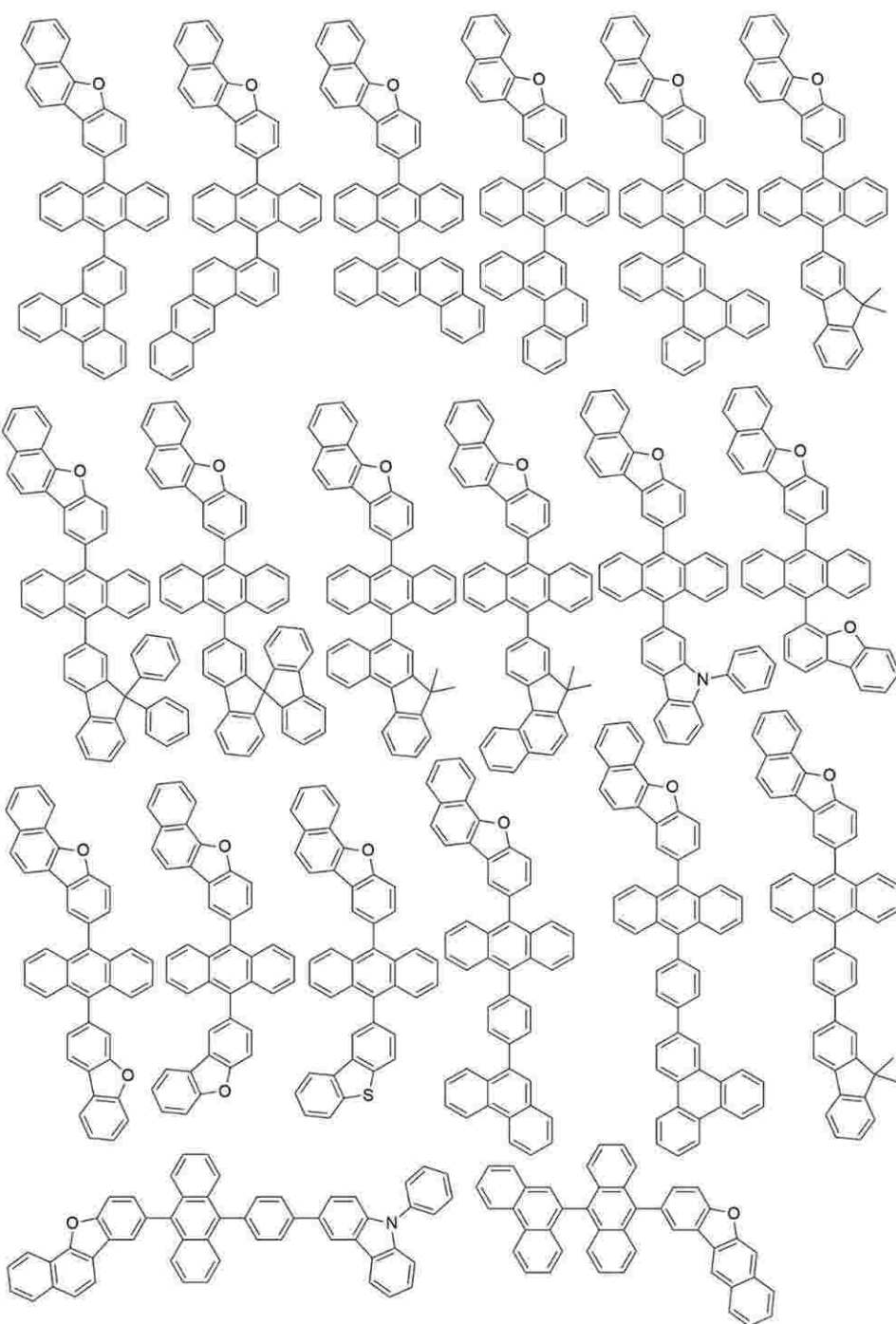
20

30

40

50

【化 3 1 9】



10

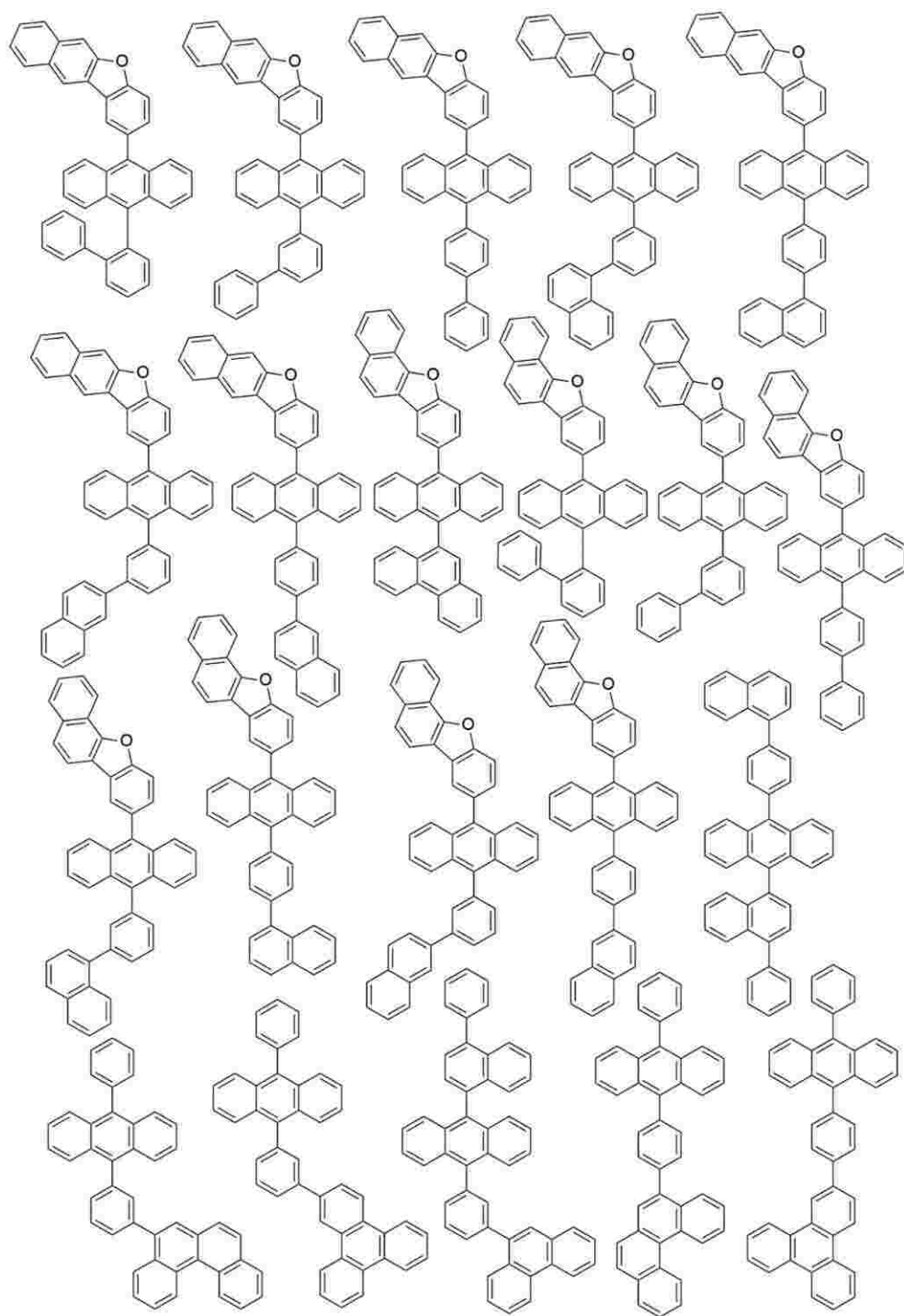
20

30

40

50

【化 3 2 0】



10

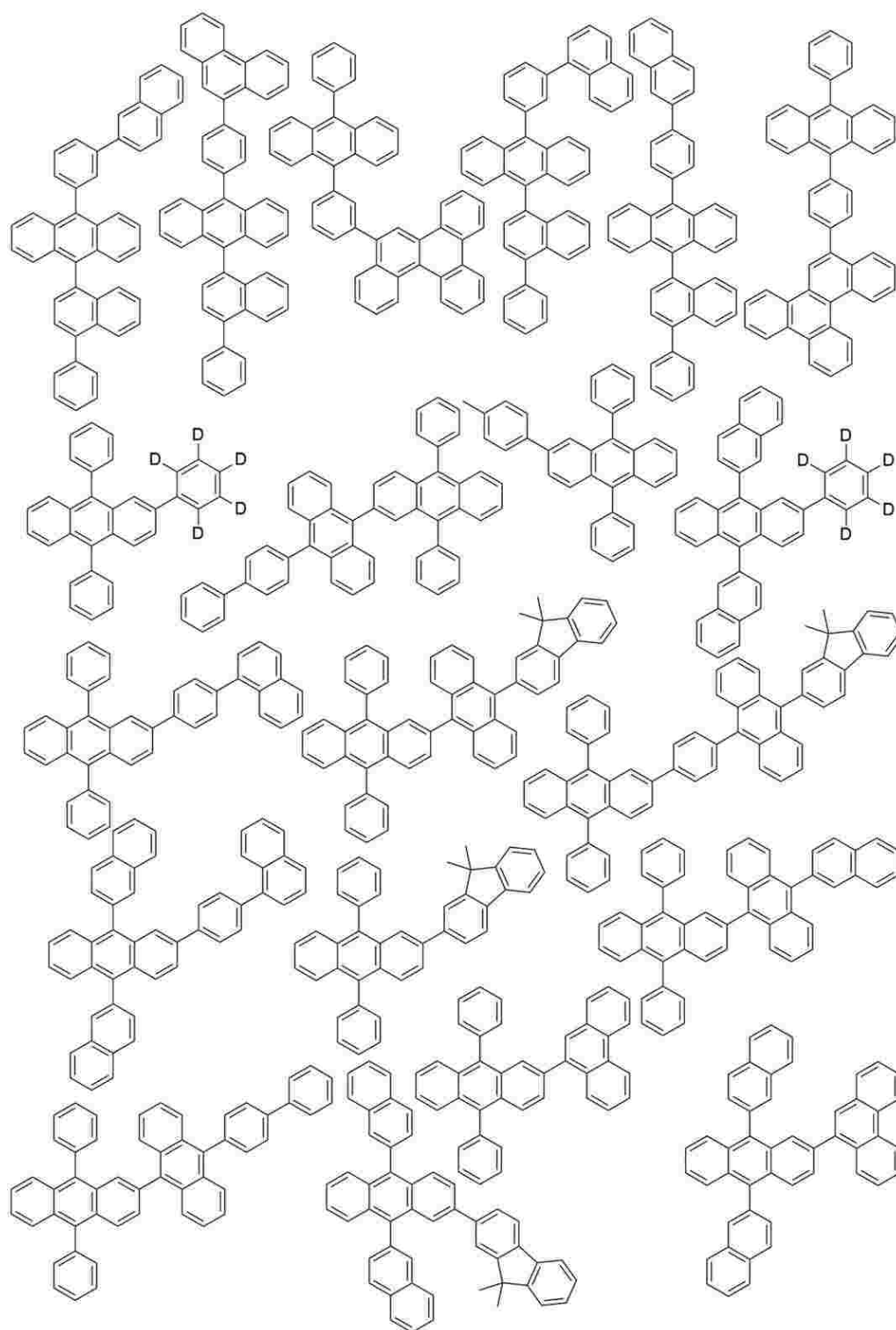
20

30

40

50

【化 3 2 1】



10

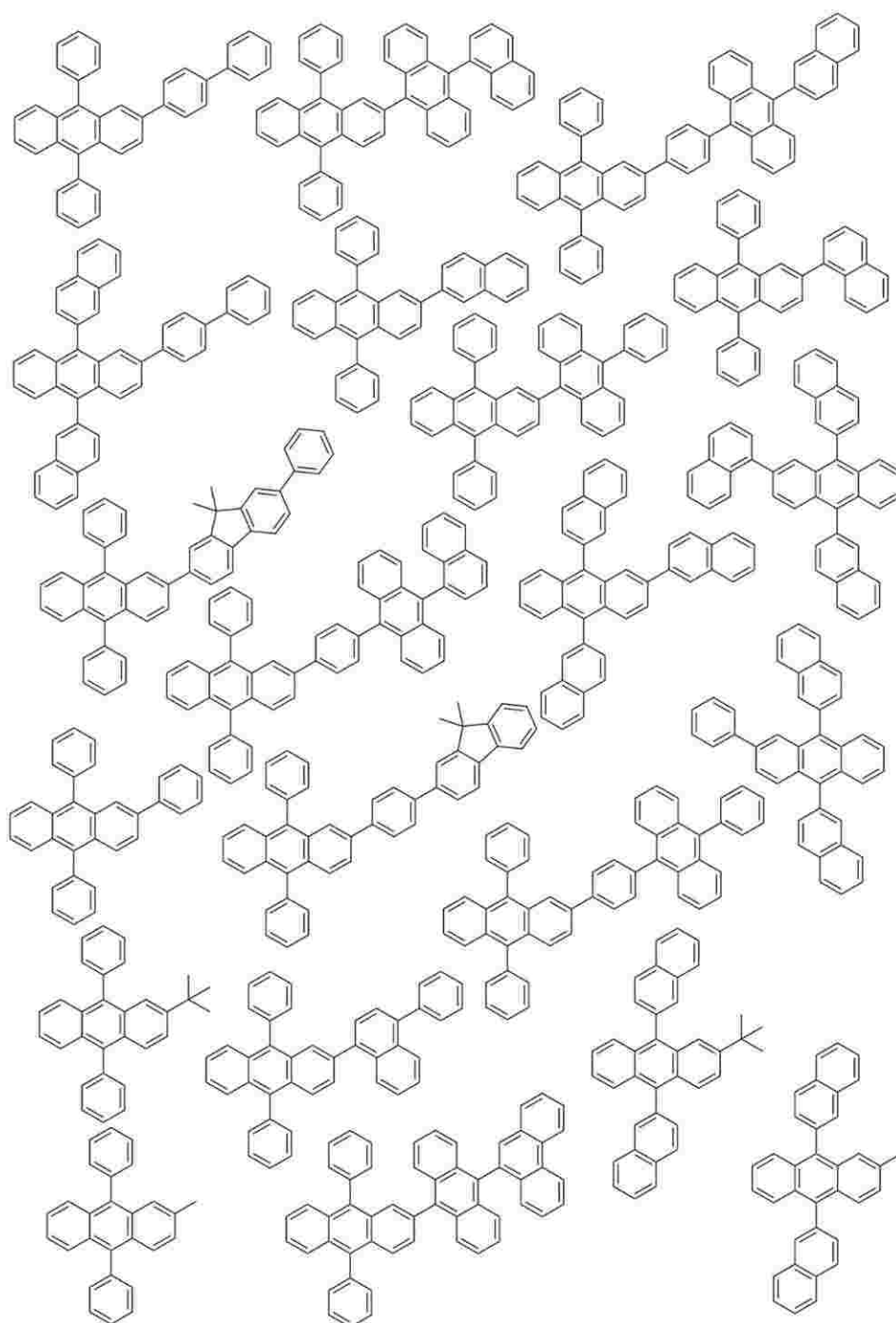
20

30

40

50

【化 3 2 2】



10

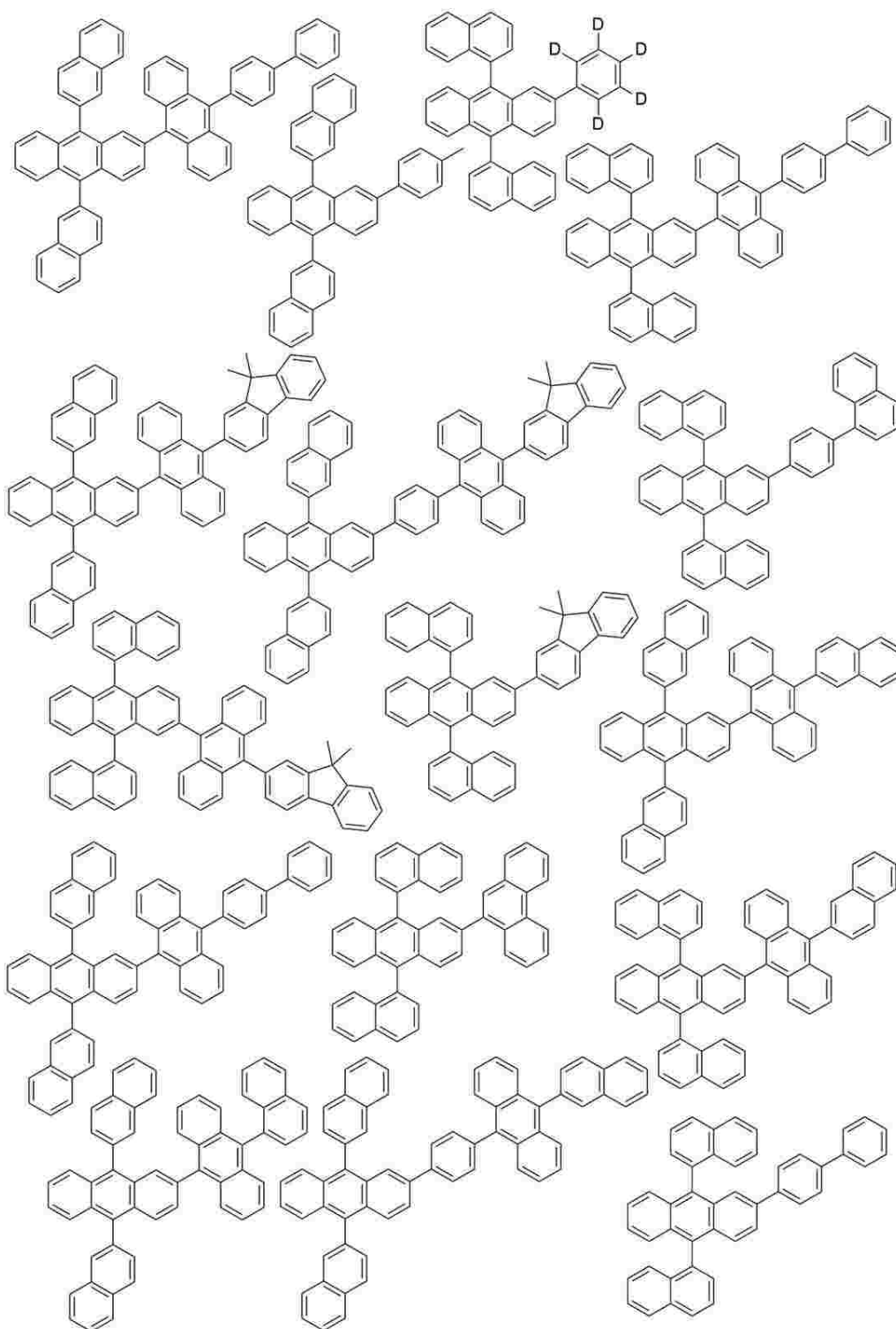
20

30

40

50

【化 3 2 3】



10

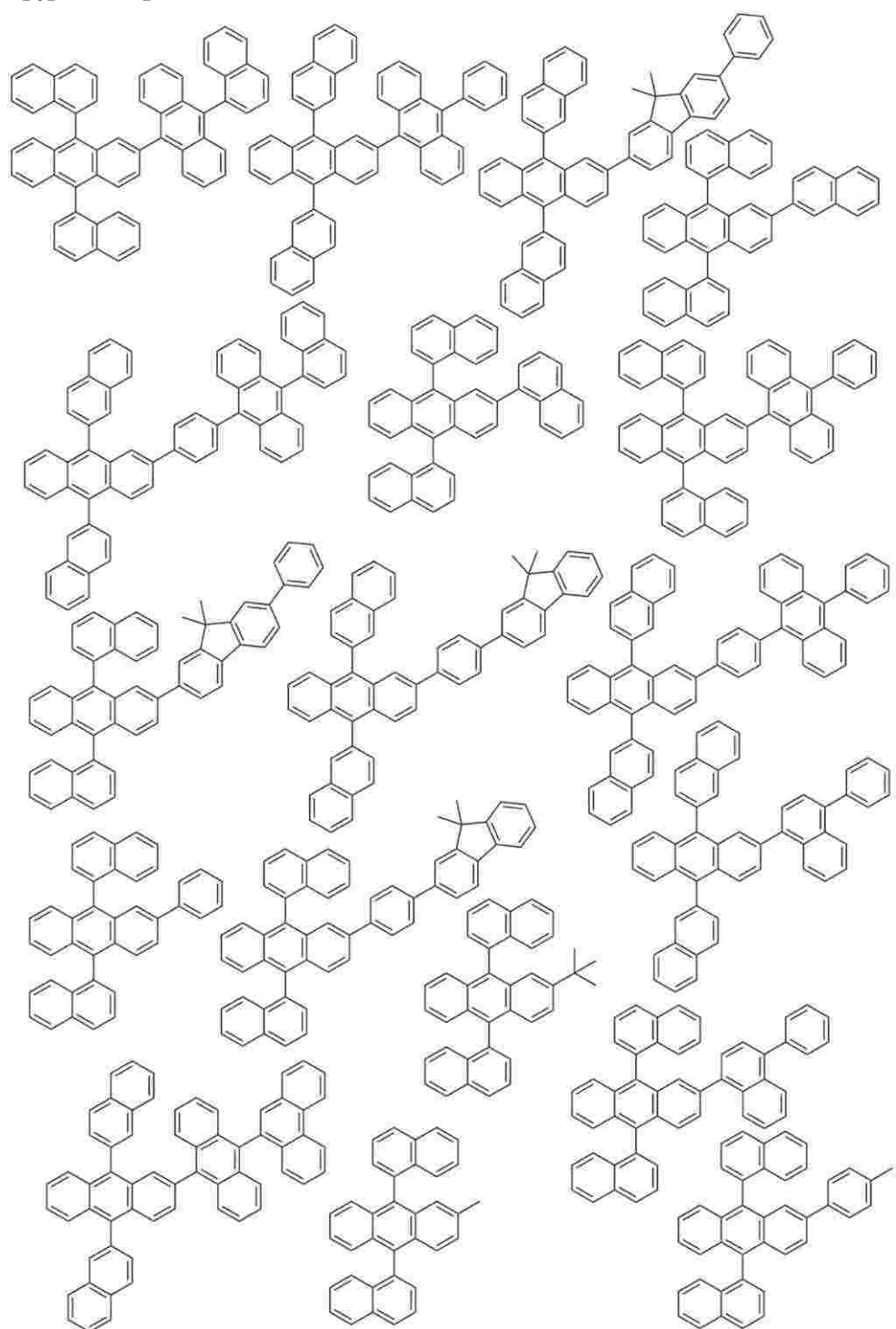
20

30

40

50

【化 3 2 4】



10

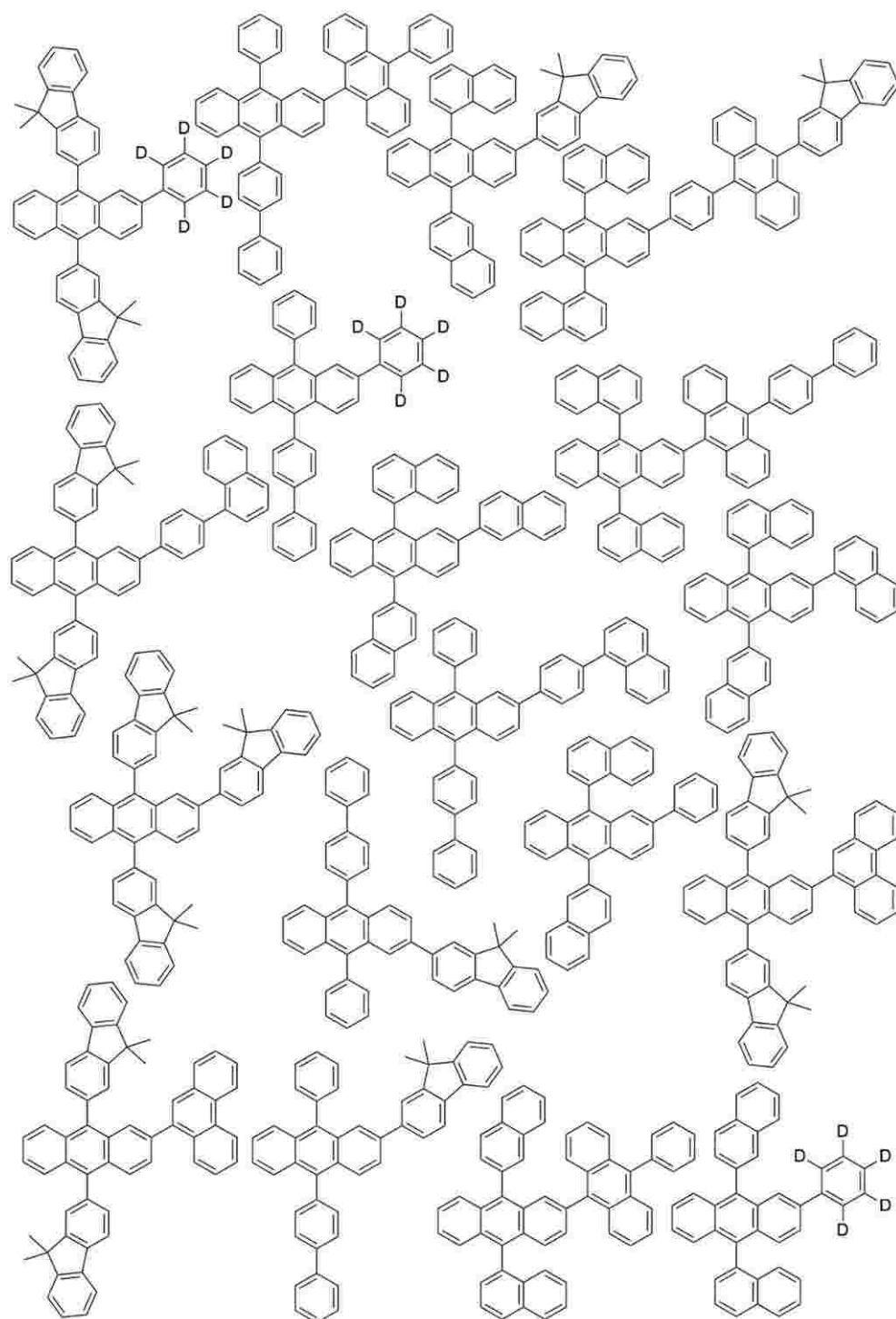
20

30

40

50

【化 3 2 5】



10

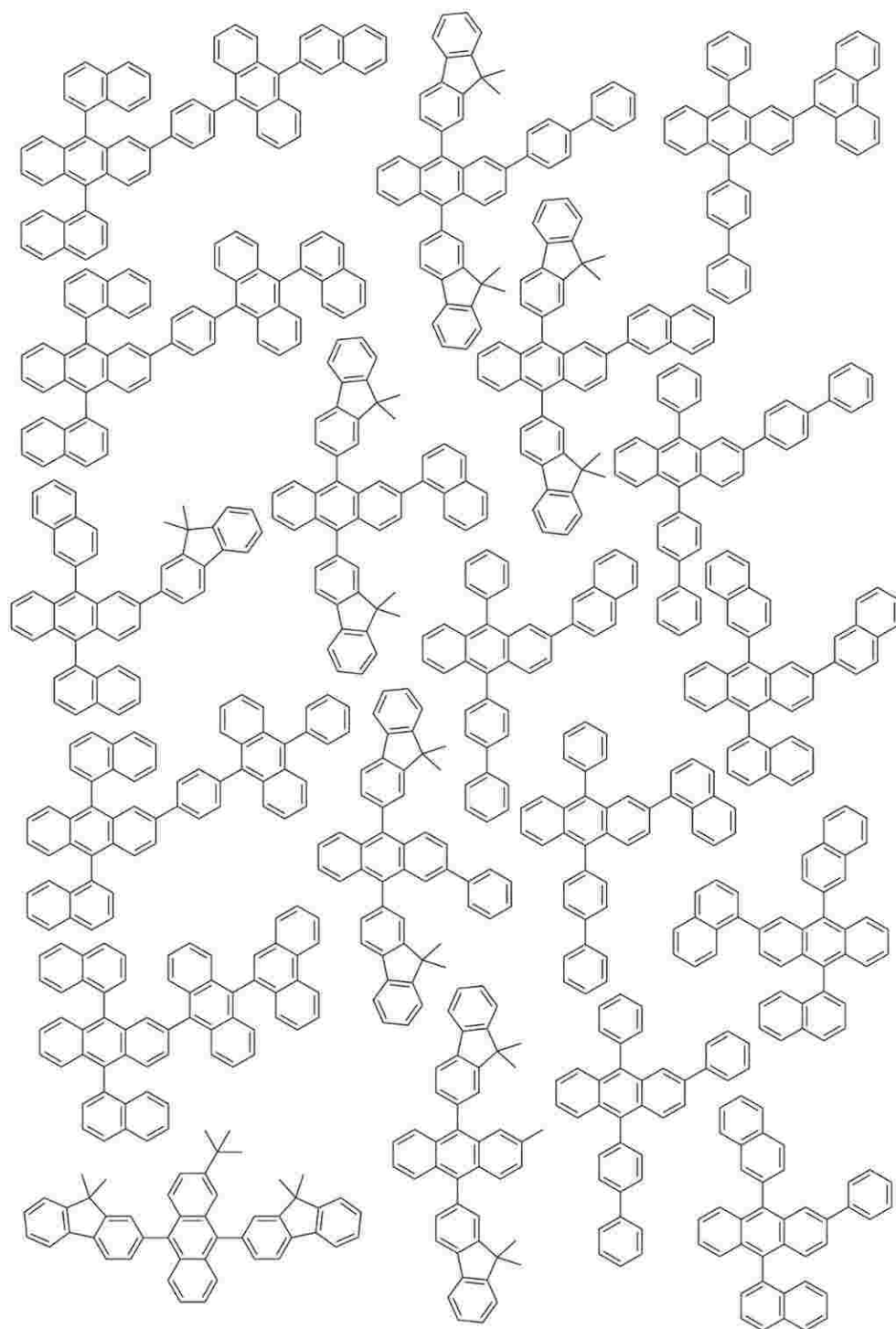
20

30

40

50

【化 3 2 6】



10

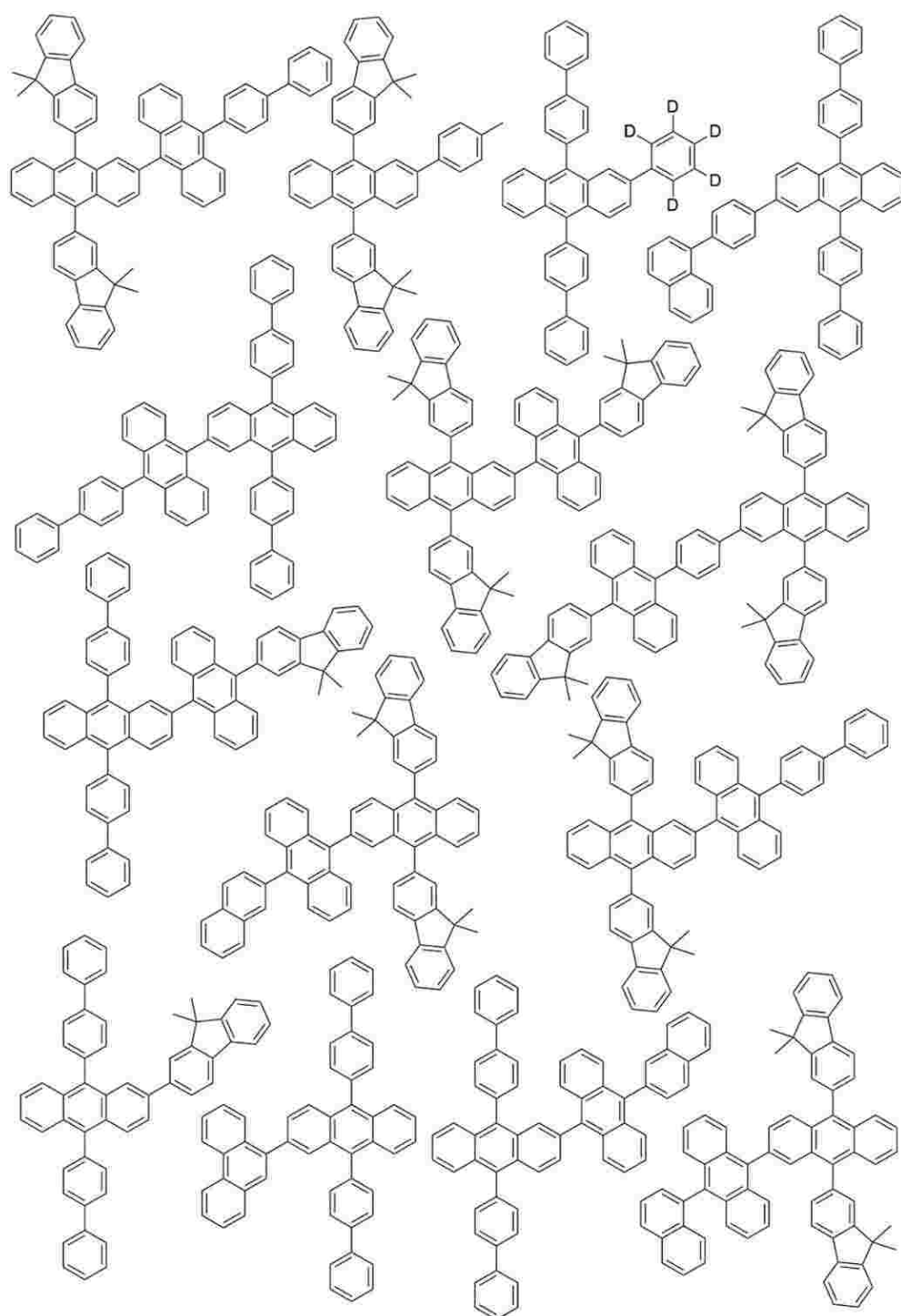
20

30

40

50

【化 3 2 7】



10

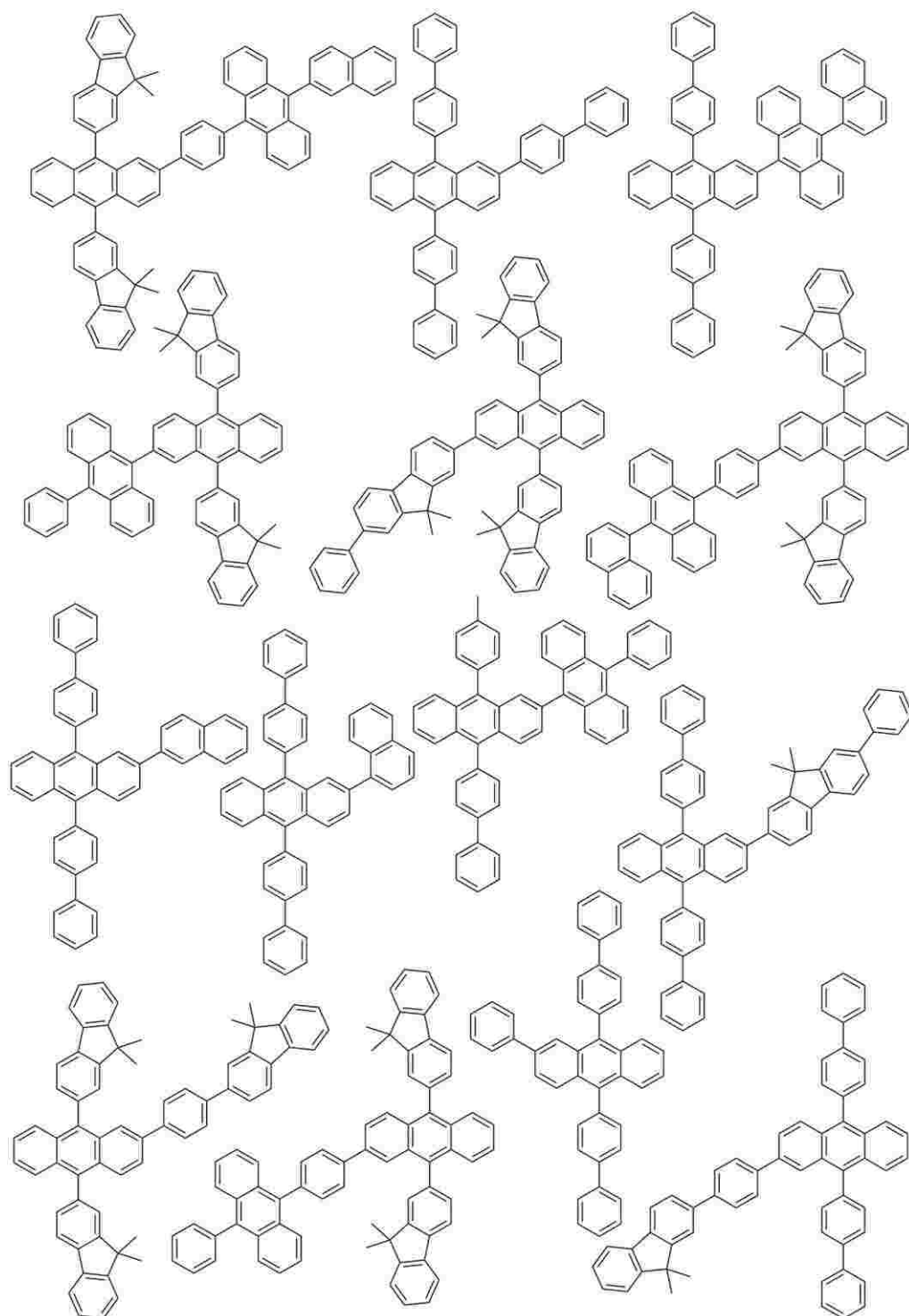
20

30

40

50

【化 3 2 8】



10

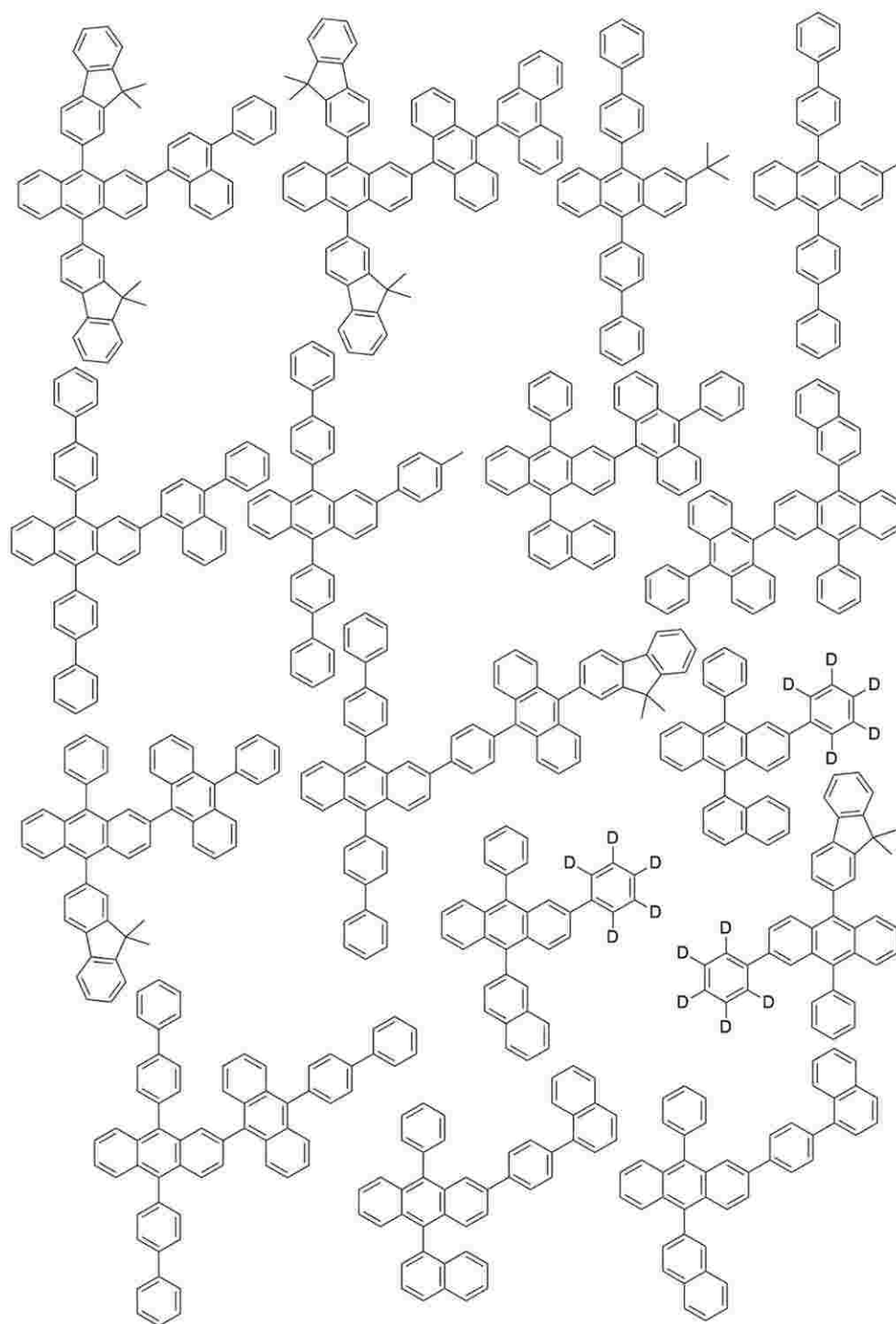
20

30

40

50

【化 3 2 9】



10

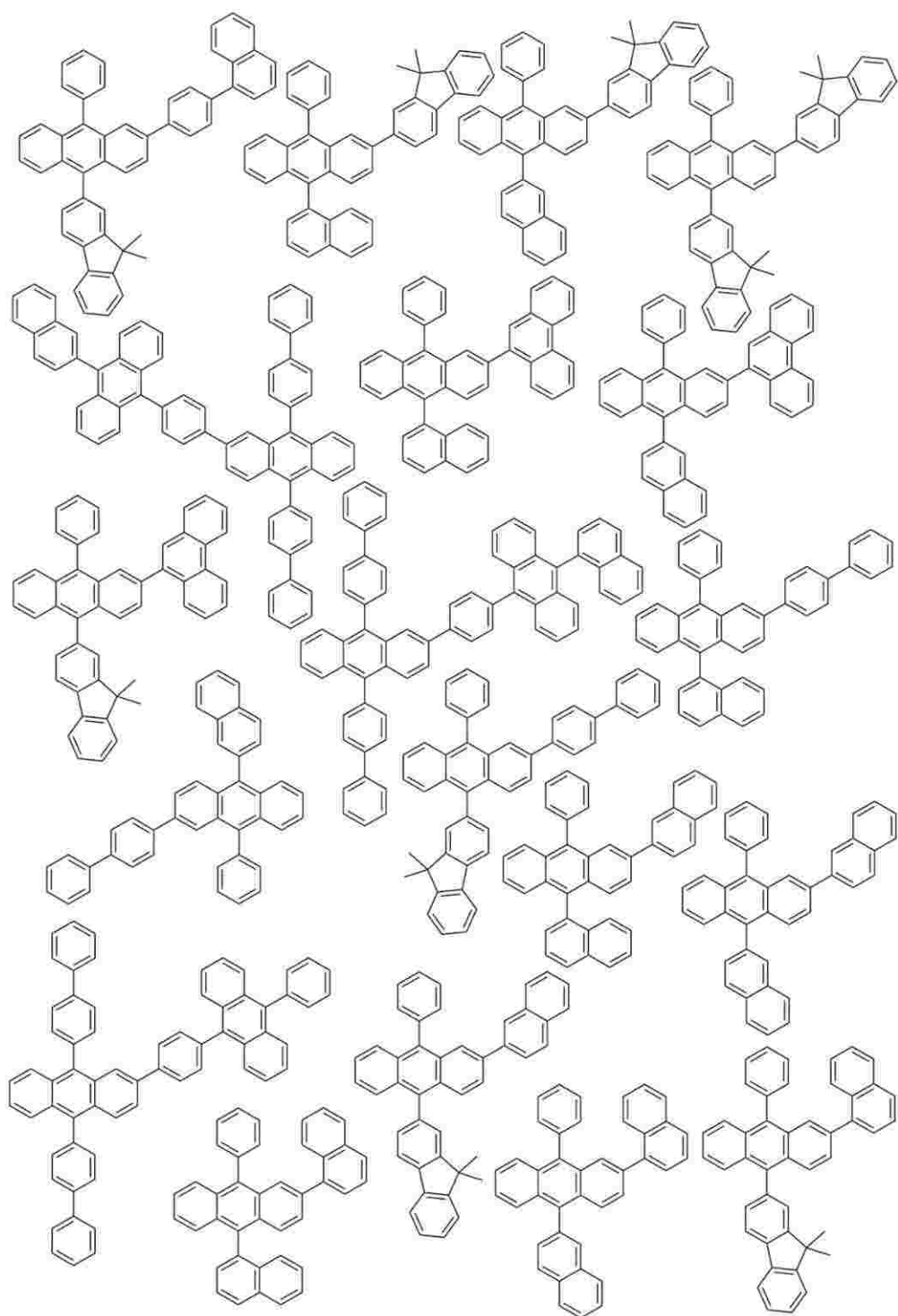
20

30

40

50

【化 3 3 0】



10

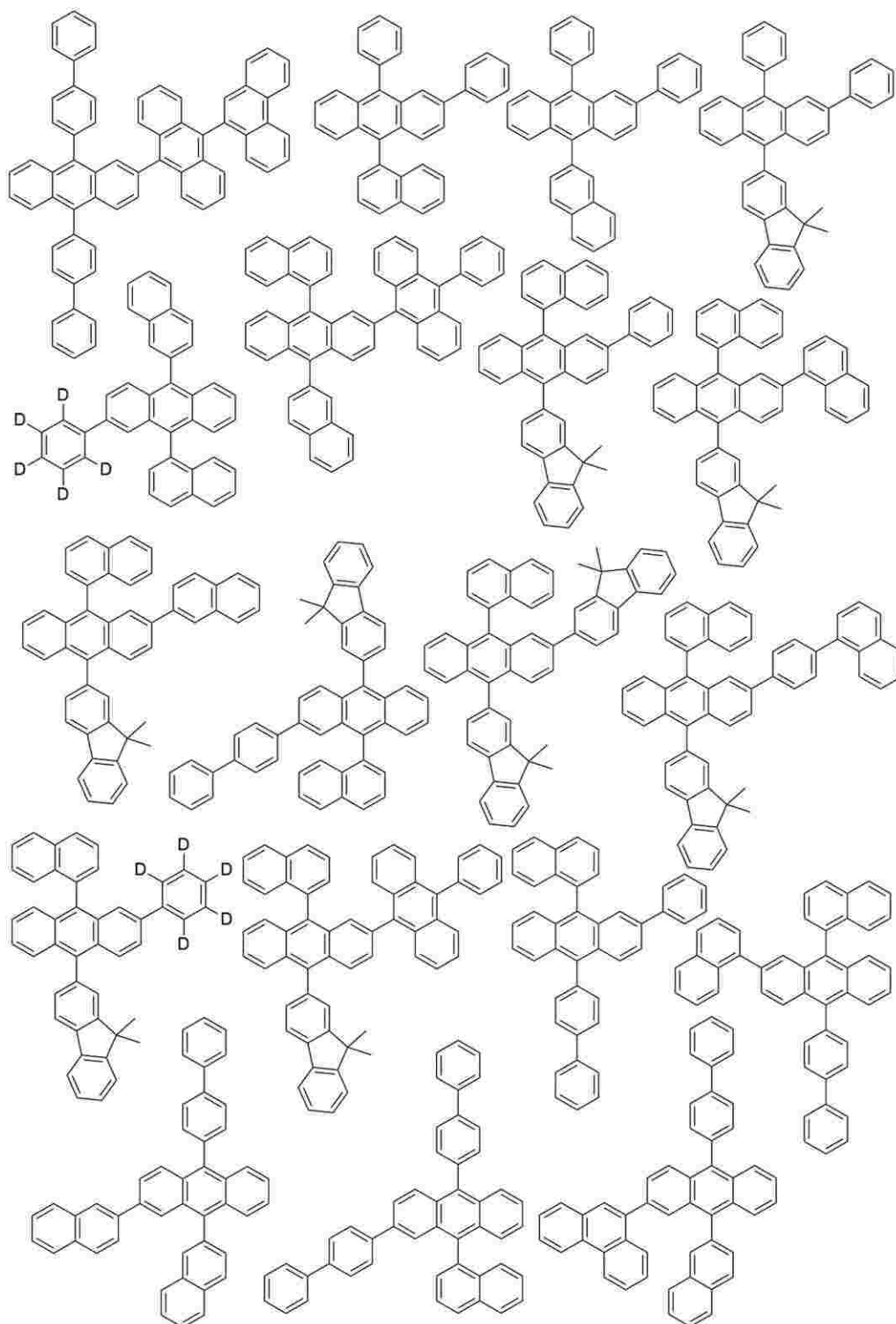
20

30

40

50

【化 3 3 1】



10

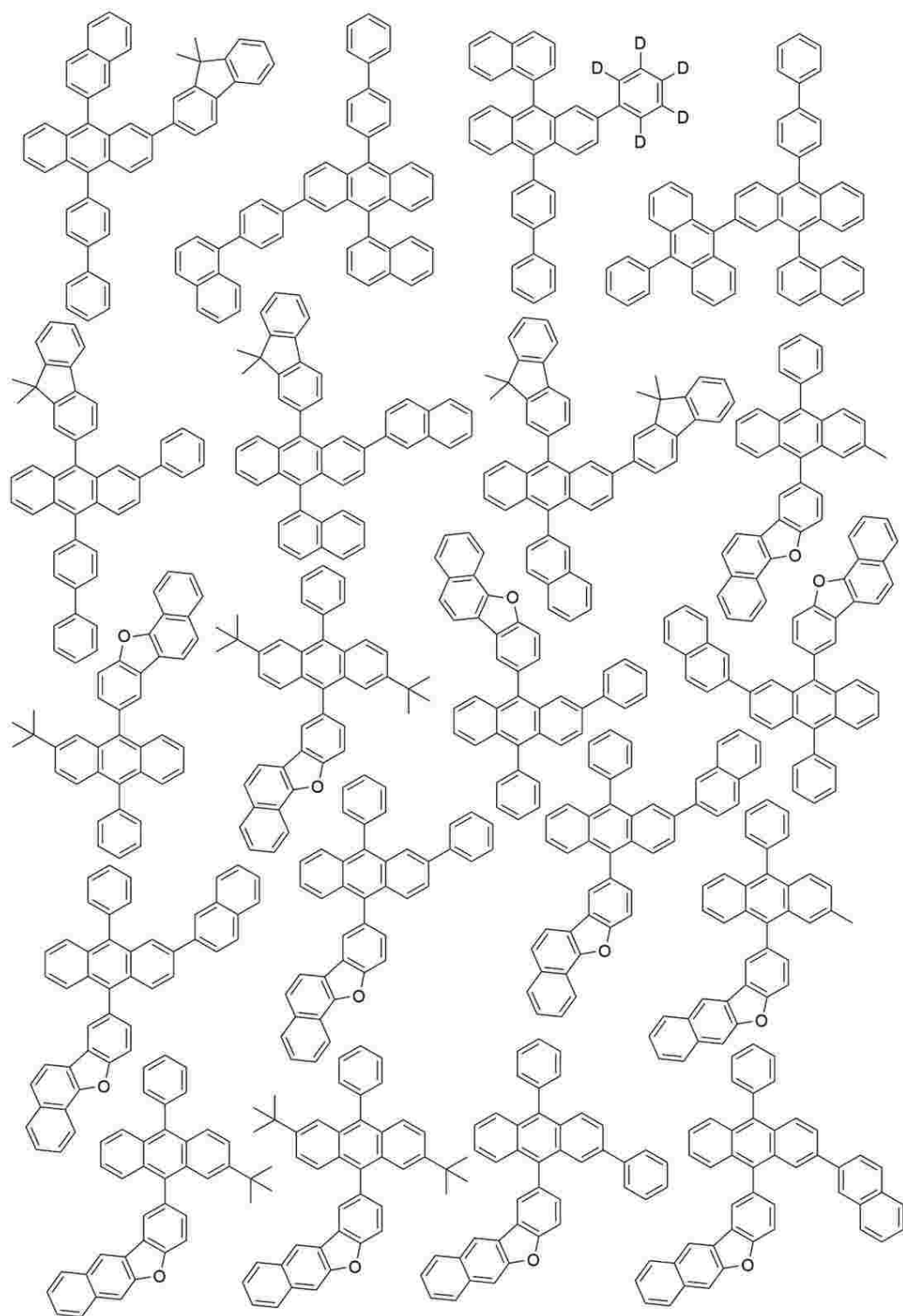
20

30

40

50

【化 3 3 2】



10

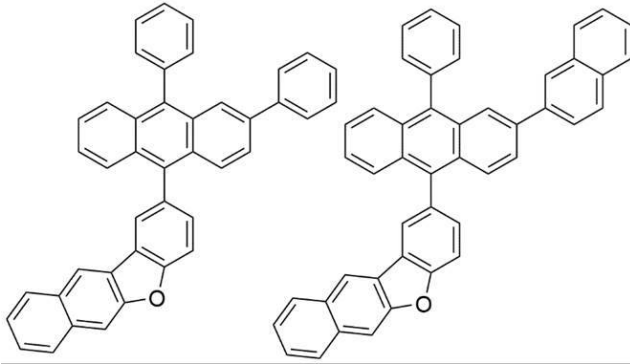
20

30

40

50

【化 3 3 3】



10

【0 4 8 4】

一実施形態において、励起子管理層 E X L は、T T A 材料及び追加エミッタを含む。

【0 4 8 5】

好ましい実施形態において、励起子管理層 E X L は、T T A 材料及び追加エミッタを含み、ここで、隣接した層 E X L の追加エミッタは、小 F W H M エミッタ S^B であり、これは、0.25 eV 以下の半値幅 (F W H M) 及び 440 ~ 480 nm の最大発光を有して発光する。

【0 4 8 6】

また、有機エレクトロルミネッセンス素子は、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。

20

【0 4 8 7】

エレクトロルミネッセンス素子 (例えば、O L E D) は、選択的に、電子輸送層 (E T L) D とカソード層 C との間に保護層 (電子注入層 (E I L) と同指称される) をさらに含む。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ウム (L i q)、L i₂O、B a F₂、M g O 及び／または N a F を含んでもよい。

【0 4 8 8】

他に明示されない限り、多様な実施形態の任意の副層を含む任意の層は、任意の適切な方法によって蒸着される。少なくとも 1 層の発光層 B (単一 (下位) 層から構成されるか、あるいは 1 以上の副層を含む) 及び／またはその 1 以上の副層を含む、本発明の文脈において層は、選択的に、液体処理 (「フィルム処理」、「流体処理」、「溶液処理」または「溶媒処理」ともいう) を介して作製される。これは、各層に含まれた成分が液体状態で素子の一部の表面に適用されることを意味する。

30

【0 4 8 9】

好ましくは、少なくとも 1 層の発光層 B 及び／またはその 1 以上の副層を含む、本発明の文脈において層は、スピンコーティングによって作製されてもよい。当業者に周知の当該方法により、薄くて (本質的に) 均一な層及び／または副層を得ることができる。

【0 4 9 0】

代案としては、少なくとも 1 層の発光層 B 及び／またはその 1 以上の副層を含む、本発明の文脈において層は、例えば、キャストリング (例えば、ドロップキャストリング)、ローリング方法及び印刷方法 (例えば、インクジェット印刷、グラビア印刷、ブレードコーティング) のような液体処理に基づいた他の方法によって作製されてもよい。これは、選択的に、不活性雰囲気 (例えば、窒素雰囲気) で実行される。

40

【0 4 9 1】

他の好ましい実施形態において、少なくとも 1 層の発光層 B 及び／またはその 1 以上の副層を含む、本発明の文脈において層は、例えば、熱 (共) 蒸着、有機気相蒸着 (O V P D) 及び有機気相ジェットプリンティング (O V J P) による蒸着のように、当業者に周知の真空処理方法を含むが、それに限定されない、当業界に周知の任意の他の方法によっ

50

て作製されてもよい。

【0492】

選択的にその1以上の副層を含む層を液体処理によって作製するとき、(副)層の成分(すなわち、本発明の発光層Bに対し、1以上の励起エネルギー移動成分EET-1、選択的に1以上の励起エネルギー移動成分EET-2、1以上の小FWHMエミッタS^B、及び選択的に1以上のホスト材料H^B)を含む溶液は、揮発性有機溶媒をさらに含んでもよい。そのような揮発性有機溶媒は、選択的に、テトラヒドロフラン、ジオキサン、クロロベンゼン、ジエチレングリコールジエチルエーテル、2-(2-エトキシエトキシ)エタノール、γ-ブチロラクトン、N-メチルピロリジノン、エトキシエタノール、キシレン、トルエン、アニソール、フェネトール、アセトニトリル、テトラヒドロチオフェン、ベンゾニトリル、ピリジン、トリヒドロフラン、トリアリールアミン、シクロヘキサノン、アセトン、プロピレンカーボネート、エチルアセテート、ベンゼン及びプロピレングリコールモノエチルエーテルアセテート(PGMEA)から構成される群から選択される1つであってもよい。また、2以上の溶媒の組み合わせが使用されうる。液体状態で塗布された後、次いで、前記層は、例えば、大気条件、増加した温度(例えば、約50℃または約60℃)、または減少した圧力において、当業界の任意の手段によって乾燥及び/または硬化される。

【0493】

有機エレクトロルミネッセンス素子は、全体として、5mm以下、2mm以下、1mm以下、0.5mm以下、0.25mm以下、100μmまたは10μm以下の薄膜を形成することができる。

【0494】

有機エレクトロルミネッセンス素子(例えば、OLED)は、小型(例えば、5mm²以下、またさらには、1mm²以下の表面を有する)、中型(例えば、0.5cm²~20cm²範囲の表面を有する)、または大型(例えば、20cm²より大きい表面を有する)であってもよい。本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子(例えば、OLED)は、選択的に、大面積照明装置であり、発光壁紙、発光ウィンドウフレームまたはガラス、発光ラベル、発光ポスター、またはフレキシブルスクリーンまたはディスプレイとしてスクリーンを生成するために使用されうる。一般的な用途の次に、有機エレクトロルミネッセンス素子(例えば、OLED)は、例えば、発光フィルム、「スマートパッケージング」ラベルまたは革新的なデザイン要素として使用されてもよい。また、細胞検出及び検査(例えば、バイオリベリング)に使用することができる。

【0495】

追加定義及び情報

全体的に使用されているように、本発明の文脈において、「層」という用語は、好ましくは、広範囲に平面である幾何学的構造を有する本体を称する。層が構成することができるあらゆる「副層」に対しても同様である。

【0496】

本願において使用されているように、有機エレクトロルミネッセンス素子、光電子素子及び有機発光素子という用語は、最も広い意味において、それぞれ全体的に1以上のTADF材料または1以上の励起エネルギー移動成分EET-2、1以上の小FWHMエミッタS^B、及び選択的に1以上のホスト材料H^Bを含む1以上の発光層Bを含む任意の素子としても理解され、それらに対して前述の定義及び好ましい実施形態が適用される。

【0497】

本発明の好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、440~480nmの青色光を発する。本発明の好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、440~480nm範囲の主発光ピークを有する。本発明の好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、440~480nm範囲において主発光ピークの最大発光を有する。

【0498】

本発明の特に好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、450～470nmの青色光を発光する。本発明の特に好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、450～470nm範囲の主発光ピークを有する。本発明の特に好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、450～470nm範囲において主発光ピークの最大発光を有する。

【0499】

本発明の好ましい実施形態において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、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構成される群から選択された素子である。

【0500】

特に好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子は、有機発光ダイオード（OLED）である。選択的に、有機エレクトロルミネッセンス素子は、全体的に不透明（非透明）、半透明または（本質的に）透明である。

【0501】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「環状基」は、最も広い意味において、任意の単環式部分構造、二環式部分構造または多環式部分構造としても理解される。

【0502】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「環」及び「環系」は、最も広い意味において、任意の単環式部分構造、二環式部分構造または多環式部分構造としても理解される。

【0503】

用語「環原子」は、環または環構造の環状コアの一部であり、それに選択的に結合された置換基の一部ではない、任意の原子を称する。

【0504】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「炭素環」は、最も広い意味において、環状コア構造が水素というまでもなく、または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む任意の環状基としても理解される。用語「炭素環の」は、形容詞であり、環状コア構造が水素というまでもなく、または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む環状基を称するものとも理解される。用語「炭素環」または「炭素環系」は、脂肪族及び芳香族の環状基または環系の両方を称するものとも理解される。

【0505】

本明細書の全体にわたって使用されているように、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、同一でもあってもよく、あるいは異なってもよく、N、O、S及びSeから構成される群から個別に選択されうる。本発明の文脈においてヘテロ環に含まれた全ての炭素原子またはヘテロ原子というまでもなく、水素または本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能である。用語「ヘテロ環」または「ヘテロ環系」は、脂肪族及びヘテロ芳香族の環状基または環系の両方を称するものとも理解される。

【0506】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「芳香族環系」は、最も広い意味において、任意の二環式芳香族部分構造または多環式芳香族部分構造としても理解される。

【0507】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「ヘテロ芳香族環系」は、最も広い意味において、任意の二環式ヘテロ芳香族部分構造または多環式ヘテロ芳香族部分構

10

20

30

40

50

造としても理解される。

【0508】

本明細書の全体にわたって使用されているように、芳香族環系またはヘテロ芳香族環系を言及するとき、「縮合された」という用語は、「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な意味を有するものとも理解されるであろう。

【0509】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アリール」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部分構造、二環式芳香族部分構造または多環式芳香族部分構造としても理解される。従って、アリール基は、6～60個の芳香族環原子を含み、ヘテロアリール基は、5～60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る。それにもかかわらず、本明細書の全体にわたり、芳香族環原子数は、特定置換基の定義において、下付き文字数字で与えられうる。特に、ヘテロ芳香族環は、1～3個のヘテロ原子を含む。さらに、用語「ヘテロアリール」及び「ヘテロ芳香族」は、最も広い意味において、少なくとも1つのヘテロ原子を含む任意の単環式ヘテロ芳香族部分構造、二環式ヘテロ芳香族部分構造または多環式ヘテロ芳香族部分構造としても理解される。該ヘテロ原子は、それぞれの場合、同一でもあり、あるいは異なってもあり、N、O、S及びSeから構成される群から個別的に選択されうる。従って、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置換基を意味する。例示的な実施形態において、基が、ここで与えられた定義と異なるように定義される場合、例えば、芳香族環原子数またはヘテロ原子数が与えられた定義と異なる場合、例示的な実施形態における定義が適用される。本発明によれば、縮合（環状）された、芳香族多環またはヘテロ芳香族多環は、縮合反応を介して多環を形成する、2つ以上の単一芳香族環またはヘテロ芳香族環から構成される。

【0510】

特に、本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アリール基」または「ヘテロアリール基」は、ベンゼン、ナフタリン、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、ベンズフェナントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンツピレン、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；セレノフェン、ベンゾセレノフェン、イソベンゾセレノフェン、ジベンゾセレノフェン；ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、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、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、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、あるいは前述の基の組み合わせから誘導された芳香族基またはヘテロ芳香族基の任意の位置を介して結合可能な基を含む。

【0511】

本発明の特定実施形態において、芳香族環またはヘテロ芳香族環に結合された隣接した置換基は、置換基が結合された芳香族環またはヘテロ芳香族環に融合された、更なる単環または多環、脂肪族または芳香族またはヘテロ芳香族、炭素環系またはヘテロ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環またはヘテロ芳香族環よりさらに大きい（さらに多い環原子を含むことを意味する）ものとも理解される。その場合、縮合環系に含まれた環原子の「総」数は、隣接した置換基が結合された芳香族環またはヘテロ芳香族環に含まれた環原子と、隣接した置換基によって形成された追加環系の環原子との和と理解され、ここで、縮合環系によって共有される炭素原子は、二個ではなく一個とすて計算される。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、二個ではなく、一個のみ計算されるので、10個の環原子を含むことになる。そのような文脈において「隣接した置換基」という用語は、（例えば、環系の）同一のまたは隣接する環原子に結合された置換基を意味する。

【0512】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「脂肪族」は、環系を言及するとき、最も広い意味としても理解され、環系を構成する環のうち何も芳香族環またはヘテロ芳香族環ではないことを意味する。そのような脂肪族環系は、1以上の芳香族環またはヘテロ芳香族環に融合され、脂肪族環系のコア構造に含まれた一部（全部ではない）の炭素原子またはヘテロ原子が結合された芳香族環またはヘテロ芳香族環の一部となるものと理解される。

【0513】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルキル基」は、最も広い意味において、任意の線状、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。特に、用語「アルキル」は、置換基である、メチル (Me)、エチル (Et)、n-プロピル (ⁿPr)、i-プロピル (ⁱPr)、シクロプロピル、n-ブチル (ⁿBu)、i-ブチル (ⁱBu)、s-ブチル (^sBu)、t-ブチル (^tBu)、シクロブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、t-ペンチル、2-ペンチル、ネオ-ペンチル、シクロペンチル、n-ヘキシル、s-ヘキシル、t-ヘキシル、2-ヘキシル、3-ヘキシル、ネオ-ヘキシル、シクロヘキシル、1-メチルシクロペンチル、2-メチルペンチル、n-ヘプチル、2-ヘプチル、3-ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、n-オクチル、2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビシクロ[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、2, 2, 2-トリフルオロエチル、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。

【0514】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルケニル」は、線状、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。

【0515】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルキニル」は、線状、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。

【0516】

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルコキシ」は、線状、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。

【0517】

本明細書の全体にわたって使用されている用語「チオアルコキシ」は、線状、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。

【0518】

本明細書の全体にわたって使用されている用語「ハロゲン」及び「ハロ」は、最も広い意味において、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。

【0519】

本願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)にも代替される。水素を重水素に代替することは、一般慣行であり、それを合成的に達成する方法も当業者には明白である。

【0520】

分子フラグメントが、置換基や、他の部分構造に結合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。本明細書に使用されているように、置換基、または結合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。

【0521】

濃度または組成を言及するとき、他に明示されない限り、百分率は、重量百分率を称し、これは、重量による百分率、または重量による%((重量/重量)、(w/w)、重量%)と同一な意味を有する。

【0522】

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

【0523】

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

で表される。代案としては、ここで好ましくは、 E^{LUMO} は、 $E^{HOMO} + E^{gap}$ によって計算され、ここで、第1励起一重項状態 S_1 （以下参照）のエネルギーが、ホスト材料 H^B 、TADF材料 E^B 及び小FWHMエミッタ S^B に対し、特に言及されない限り、 E^{gap} として使用される。すなわち、ホスト材料 H^B 、TADF材料 E^B 及び小FWHMエミッタ S^B の場合、 E^{gap} は、室温（すなわち、約20℃）で発光スペクトルの開始（onset）から決定される（定常状態スペクトル；TADF材料 E^B の場合、ポリ（メチルメタクリレート）PMMA内の10重量%の E^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、小FWHMエミッタ S^B の場合、PMMA内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の S^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、ホスト材料 H^B の場合、各ホスト材料 H^B のスピコーティングニットフィルムが一般的に使用される）。燐光材料 P^B の場合、 E^{gap} は、室温（すなわち、約20℃）で発光スペクトルの開始から決定される（一般的に、PMMA内の10重量%の P^B のスピコーティング膜から測定される）。

【0524】

吸収スペクトルは、室温（すなわち、約20℃）で記録される。TADF材料 E^B の場合、吸収スペクトルは、一般的に、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の10重量%の E^B のスピコーティング膜から測定される。小FWHMエミッタ S^B の場合、吸収スペクトルは、一般的に、PMMA内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の S^B のスピコーティング膜から測定される。ホスト材料 H^B の場合、吸収スペクトルは、一般的に、ホスト材料 H^B のスピコーティングニットフィルムから測定される。燐光材料 P^B の場合、吸収スペクトルは、一般的に、PMMA内の10重量%の P^B のスピコーティング膜から測定される。代案としては、吸収スペクトルは、また、例えば、ジクロロメタンまたはトルエン内の各分子の溶液から記録され、ここで、溶液の濃度は、一般的に、最大吸光度が好ましくは0.1～0.5範囲になるように選択される。

【0525】

吸収スペクトルの開始は、吸収スペクトルに対する接線と、x軸との交差点とを計算して決定される。該吸収スペクトルに対する接線は、吸収バンドの低エネルギー側と、吸収スペクトルの最大強度の最大半分地点とにおいて設定される。

【0526】

他に明示されない限り、第一（すなわち、最低）励起三重項状態 T_1 のエネルギーは、77Kにおいて、燐光スペクトルの開始から決定される（TADF材料 E^B の場合、PMMA内の10重量%の E^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、小FWHMエミッタ S^B の場合、PMMA内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の S^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、ホスト材料 H^B の場合、各ホスト材料 H^B のスピコーティングニットフィルムが一般的に使用され、燐光材料 P^B の場合、PMMA内の10重量%の P^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、測定は、一般的に室温（すなわち、約20℃）で行われる）。例えば、EP2690681A1に開示されたように、小さい ΔE_{ST} 値を有するTADF材料 E^B の場合、項間交差及び逆項間交差の両方が低温でも生じることが認められる。結果として、77Kでの発光スペクトルは、 S_1 及び T_1 状態の両方からの発光を含む。しかし、EP2690681A1にも述べられたように、三重項エネルギーの寄与度／価値が一般的に優勢であるものと見なされる。

【0527】

他に明示されない限り、第一（すなわち、最低）励起一重項状態 S_1 のエネルギーは、室温（すなわち、約20℃）で蛍光スペクトルの開始から決定される（定常状態スペクトル；TADF材料 E^B の場合、PMMA内の10重量%の E^B のスピコーティングされたフィルムが一般的に使用され、小FWHMエミッタ S^B の場合、PMMA内の1～5重量%、好ましくは、2重量%の S^B のスピコーティング膜が一般的に使用され、ホスト材料 H^B の場合、各ホスト材料 H^B のスピコーティングニットフィルムが一般的に使用され、燐光材料 P^B の場合、PMMA内の10重量%の P^B のスピコーティング膜が一般的に使用される）。しかし、効率的な項間交差を示す燐光材料 P^B の場合、室温発光は、蛍光ではなく、（ほとんど）燐光であってもよい。この場合、室温（すなわち、約20

10

20

30

40

50

℃)で発光スペクトルの開始は、前述のように第一励起三重項状態 T 1 のエネルギーを決定するのに使用される。

【0528】

発光スペクトルの開始は、発光スペクトルに対する接線と、x 軸との交差点とを計算して決定される。該発光スペクトルに対する接線は、発光バンドの高エネルギー側と、発光スペクトルの最大強度の最大半分地点とにおいて設定される。

【0529】

第一（すなわち、最低）励起一重項状態（S 1）と第一（すなわち、最低）励起三重項状態（T 1）とのエネルギー差に該当する ΔE_{ST} 値は、前述のように決定された、第一（すなわち、最低）励起一重項状態エネルギー及び第一（すなわち、最低）励起三重項状態エネルギーに基づいて決定される。

【0530】

当業者に知られているように、エミッタ（例えば、小 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。小 FWHM エミッタ S^B の場合、一般的に、蛍光スペクトルが使用される。報告された全ての FWHM 値は、一般的に、主発光ピーク（すなわち、強度が最も高いピーク）を示す。FWHM（ここで、好ましくは、電子ボルト eV で報告される）を決定する手段は、当業者の一般的な知識の一部である。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、（本願において）以下の方程式を使用して決定される：

【数 2】

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

【0531】

本願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、発光及び／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 ~ 420 nm の波長範囲

濃青色：> 420 ~ 475 nm の波長範囲

空色：> 475 ~ 500 nm の波長範囲

緑色：> 500 ~ 560 nm の波長範囲

黄色：> 560 ~ 580 nm の波長範囲

オレンジ色：> 580 ~ 620 nm の波長範囲

赤色：> 620 ~ 800 nm の波長範囲。

【0532】

本発明は、下記実施例及び特許請求の範囲によって説明される。

【0533】

実施例

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：0.1 mol/L のテトラブチルアンモニウムヘキサフルオロホスフェート）において、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（すなわち、（約）20℃）で行い、内部標準として、FcP₂/FcP₂⁺ を使用して補正する。HOMO データ及び LUMO 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。

【0534】

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。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。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。しかし、本願において、軌道エネルギー及び励起状態エネルギーは、前述のように実験的に決定されることが好ましい。本願に報告された全ての軌道エネルギー及び励起状態エネルギー（実験結果参照）は、実験的に決定された。

10

【0535】

光物理的測定

サンプル前処理：真空蒸着

前述のように、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層Bに含まれる個々の化合物（例えば、有機分子または遷移金属錯体）の光物理的測定（例えば、ホスト材料H^B、TADF材料E^B、燐光材料P^Bまたは小FWHMエミッタS^B）は、一般的に、スピンコーティングニットフィルム（ホスト材料H^Bの場合）、またはポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内の各材料のスピンコーティングフィルム（例えば、TADF材料E^B、燐光材料P^B及び小FWHMエミッタS^Bの場合）を使用して行われた。当該フィルムは、スピンコーティングされたフィルムであり、特定の測定に対して特に言及しない限り、PMMAフィルムの材料濃度は、TADF材料E^B及び燐光材料P^Bの場合に10重量%、または小FWHMエミッタS^Bの場合に1～5重量%、好ましくは、2重量%であった。代案としては、以前に言及したように、一部の光物理的測定は、また、例えば、ジクロロメタンまたはトルエン内の各分子の溶液から行われ、ここで、溶液の濃度は、一般的に、最大吸光度が好ましくは0.1～0.5範囲になるように選択される。

20

【0536】

装置：Spin150、SPS euro

サンプル濃度は1.0mg/mlであり、一般的に、好適な溶媒としてトルエン/DCMに溶解された。

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

30

【0537】

（本発明または比較例による）有機エレクトロルミネッセンス素子のEMLに存在する特定材料の組成をさらに研究するために、光物理的測定のためのサンプルを、素子作製に使用された同一な材料から、石英基板上の50nmのそれぞれの発光層Bを真空蒸着して作製した。該サンプルの光物理的評価は、窒素雰囲気で行われる。

【0538】

吸収測定

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

40

【0539】

フォトルミネセンススペクトル

定常状態発光スペクトルは、150Wキセノンアークランプ、励起及び発光単色計が装着されたModel FluoroMax-4 (Horiba Scientific) を使用して記録される。サンプルをキュベットに入れて測定する間に、窒素でフラッシングする。

【0540】

フォトルミネセンス量子収率測定

50

フォトルミネセンス量子収率（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。サンプルは、測定する間に窒素雰囲気中で維持される。量子収率は、ソフトウェアU6039-05を使用して決定され、%で表される。収率は、次の方程式を使用して計算される。

【数3】

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

10

【0541】

ここで、 $n_{\text{光子}}$ は、光子数を示し、 Int は、強度を示す。品質保証のために、（知られた濃度の）エタノール内のアントラセンを基準に使用する。

【0542】

時間相関単一光子計数

（TCSPC）

特定の実施例または分析の文脈において特に言及されない限り、励起状態分布力学は、発光単色計、検出器ユニットとして温度安定化された光電子増倍管、及び励起ソースとしてパルス型LED（310nm中央波長、910psパルス幅）が装着されたEdinburgh Instruments FS5分光蛍光計を使用して決定される。サンプルをキュベットに入れて測定する間に、窒素でフラッシングする。

20

【0543】

測定された過度フォトルミネセンス信号の平均減衰時間 $\bar{\tau}$ を決定するために、データが n 個の指数関数の和に合わせられる：

【数4】

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

30

【0544】

ここで、 n は、1～3の整数である。特定減衰時間定数 τ_i を、対応する振幅 A_i で加重値を付与し、励起状態寿命 $\bar{\tau}$ が決定される：

【数5】

$$\bar{\tau} = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \tau_i}{\sum_{i=1}^n A_i}$$

40

【0545】

当該方法は、励起状態寿命を決定するために、蛍光材料及び燐光材料に適用される。TADF材料の場合、後述する全体減衰力学を収集しなければならない。

【0546】

全体減衰力学

50

時間及び信号強度で複数の次数 (order) の大きさにわたった全体励起状態分布減衰力学は、4 個の時間領域 (200 ns、1 μs、20 μs 及び > 80 μs のさらに長い測定期間) で TCSPC 測定を行って達成される。測定された時間曲線は、その後、次のような方式によって処理される。

－励起及び差し引き (subtracting) 前の平均信号レベルを決定し、バックグラウンド補正が適用される。

－主信号の初期上昇を基準として取り、時間軸が整列される。

－重畳された測定時間領域を使用し、曲線が互いに対してスケージングされる。

－処理された曲線が 1 つの曲線に併合される。

【0547】

10

即時蛍光 (PF) 及び遅延蛍光 (DF) 減衰の単一指数フィットまたは二重指数フィットを個別的に使用してデータ分析が行われる。フィットからの特定減衰時間定数 τ_i を、対応する振幅 A_i で加重値を付与し、即時蛍光 (すなわち、即時蛍光寿命) 及び遅延蛍光 (すなわち、遅延蛍光寿命) に対する平均寿命 $\bar{\tau}$ がそれぞれ次のように決定される：

20

【数 6】

$$\bar{\tau} = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \tau_i}{\sum_{i=1}^n A_i}$$

ここで、n は、1 または 2 である。

【0548】

遅延蛍光と即時蛍光との割合 (n 値) が、それぞれのフォトルミネセンス減衰を経時的に積分して計算される：

30

【数 7】

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

【0549】

分光分解能を使用した過度フォトルミネセンス測定

スペクトル分解能を使用した過度フォトルミネセンス (PL) 測定において、パルス光励起後、定義された遅延時間での PL スペクトルが記録される。

40

【0550】

過度 PL スペクトルを測定するための例示的な装置は、下記を含む：

－サンプルを励起するための、355 nm の中心波長と 1 ns のパルス幅を有するパルスレーザ (eMOPA, CryLas)

－真空処理または窒素でフラッシング可能な、サンプルを収容するように構成されたサンプルチャンバー

－サンプルから放出された光を分散させるための分光器 (SpectraPro HRS)

－パルスレーザとの同期化のための統合タイミング発生器を有する、分散された放出さ

50

れた光の波長分解感知のためのＣＣＤカメラ（Princeton Instruments P I-MAX 4）

ー内蔵されたＣＣＤカメラの信号を分析するように構成されたパーソナルコンピュータ。
【０５５１】

測定過程において、サンプルは、サンプルチャンバーに配置され、パルスレーザで照射される。サンプルから放出された光をレーザパルスの照射方向に対して９０°方向に取る。それは、分光器によって分散され、検出器（例示的な装置のＣＣＤカメラ）に向かい、波長分解発光スペクトルを得る。レーザ照射と感知との間の時間遅延と感知期間（すなわち、ゲート時間）は、タイミング発生器によって制御される。

【０５５２】

過度フォトルミネセンスは、例示的な装置に述べられたところと異なる装置によって測定されてもよいという点が留意される。

【０５５３】

有機エレクトロルミネッセンス素子の作製及び特性化

本発明による有機分子を含むＯＬＥＤ素子は、真空蒸着方法によって作製されてもよい。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。

【０５５４】

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ッ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。素子のＦＷＨＭが、フォトルミネッセンススペクトル（蛍光または燐光）に対し、前述のようにエレクトロルミネッセンススペクトルから決定される。報告されたＦＷＨＭは、主発光ピーク（すなわち、最も高い発光強度を有するピーク）を示す。ＯＬＥＤ素子の寿命は、一定電流密度で動作する間、輝度の変化から抽出される。ＬＴ５０値は、測定輝度が、初期輝度の５０％に低減した時間に該当し、同様に、ＬＴ８０は、測定輝度が、初期輝度の８０％に低減した時点に該当し、ＬＴ９７は、測定輝度が、初期輝度の９７％に低減した時点に該当する。

【０５５５】

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、次の方程式を使用して決定される。

【数８】

$$L T 80 \left(500 \frac{cd}{m^2} \right) = L T 80 (L_0) \left(\frac{L_0}{500 \frac{cd}{m^2}} \right)^{1.6}$$

ここで、Ｌ０は、印加された電流密度における初期輝度を示す。値は、複数のピクセル（一般的に、２～８個）の平均に該当する。

【０５５６】

実験結果

10

20

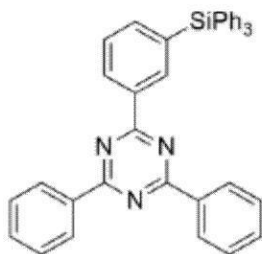
30

40

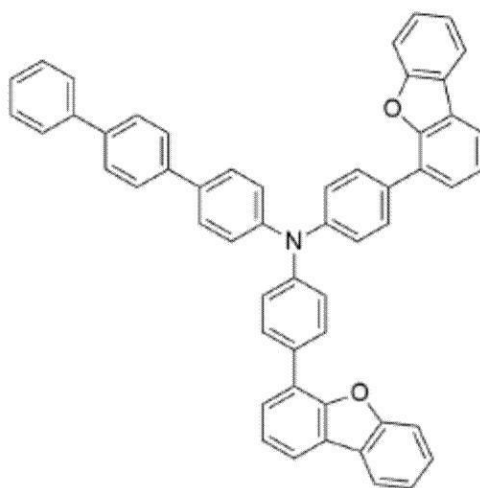
50

【化 3 3 4】

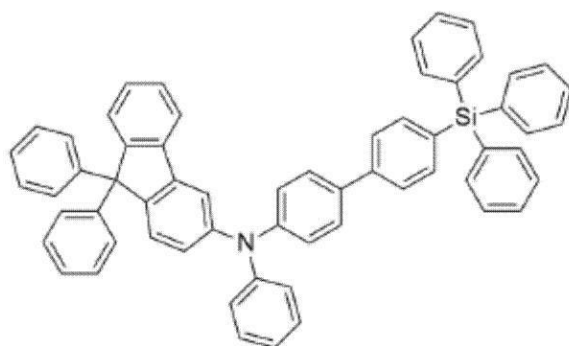
スタック材料



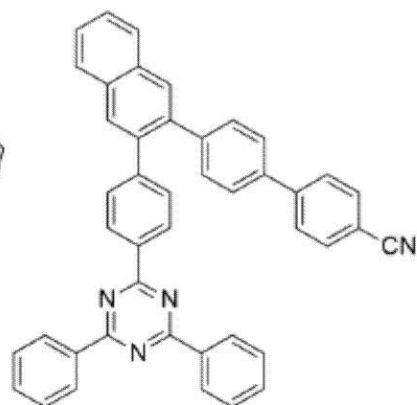
H B M 1 (正孔遮断材料)



E B M 1 (電子遮断材料)



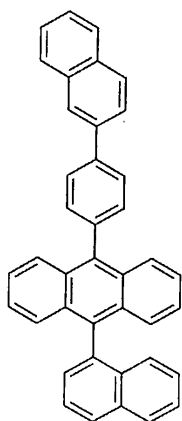
H T L 1 (正孔輸送材料)



E T L 1 (電子輸送材料)

【化 3 3 5】

T T A 材料



T T A 1

10

20

30

40

50

【0557】

【表1】

表1 TTA. TTA材料の特性

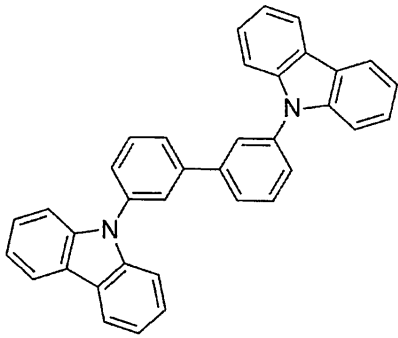
	例示 化合物	E^{HOMO} [eV]	E^{LUMO} [eV]	$E(\text{S1})$ [eV]	$E(\text{T1})$ [eV]
TTA	TTA1 ¹	-5.89	-2.63	3.16	

¹ニートフィルムで測定された。

10

【0558】

【化336】

ホスト材料H^B

20

 $mCBP = H^B - 1$

【0559】

【表2】

表1 H. ホスト材料の特性

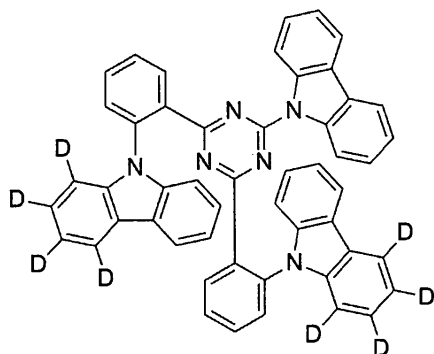
	例示 化合物	E^{HOMO} [eV]	E^{LUMO} [eV]	$E(\text{S1})$ [eV]	$E(\text{T1})$ [eV]
H ^B	HBM1		-2.91		2.94
	EBM1	-5.54	-2.46	3.08	2.36
	mCBP	-6.02	-2.42	3.6	2.82

40

【0560】

50

【化 3 3 7】

TADF 材料 E^B 及び励起エネルギー移動成分 EET-2 として選択されるTADF 材料 E^B

10

E^B-1

【0 5 6 1】

【表 3】

表 1 E. TADF 材料 E^B の特性

20

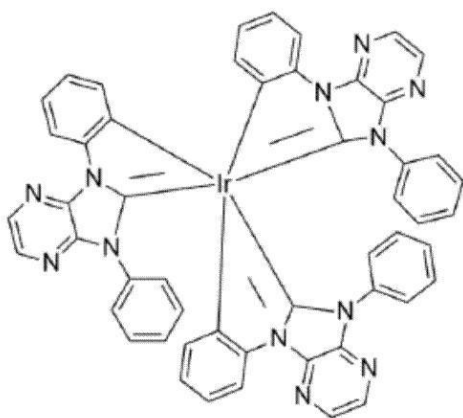
	例示 化合物	E _{HOMO} [eV]	E _{LUMO} [eV]	E(S1) [eV]	E(T1) [eV]	λ _{max} ^{PMMA} [nm]	FWHM [eV]	PLQY [%]
E ^B	E ^B -1	-5.97	-2.94	2.92	2.87	473	0.44	79

【0 5 6 2】

【化 3 3 8】

励起エネルギー移動成分 EET-2 として選択される燐光材料 P^B

30



40

P^B-3

【0 5 6 3】

50

【表 4】

表 1 P. 材料の特性

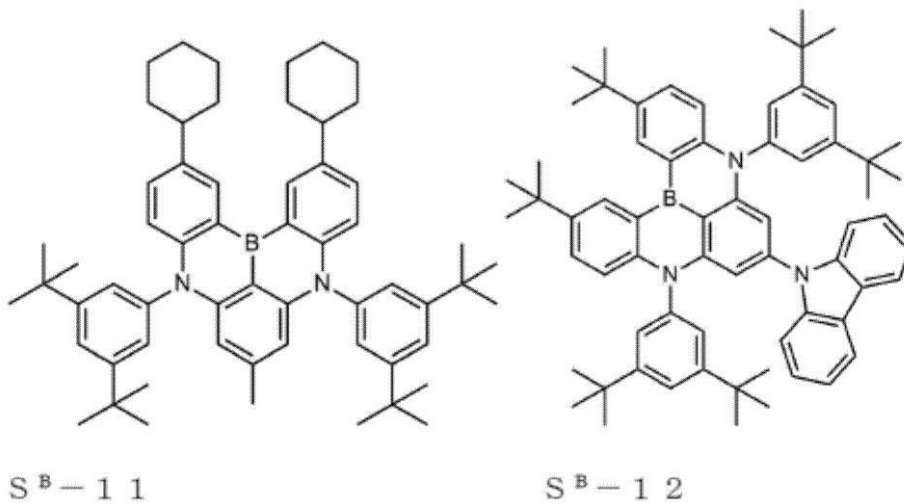
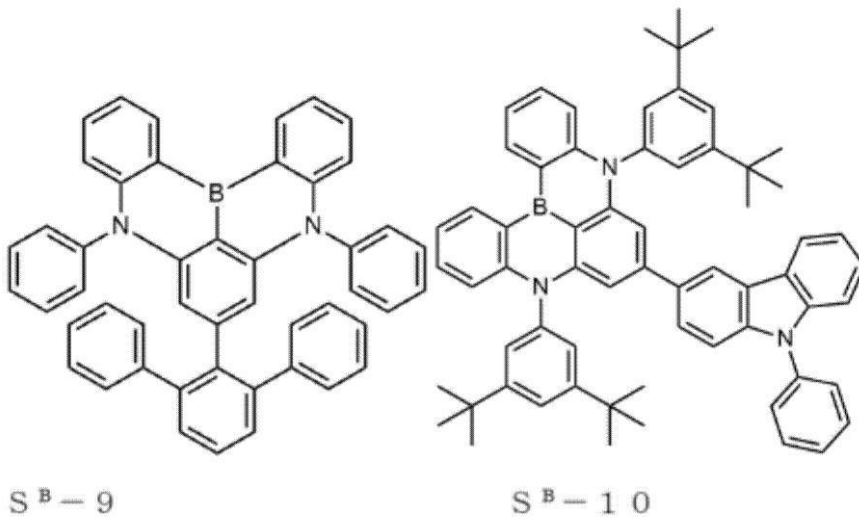
	例示 化合物	E^{HOMO} [eV]	$E_{\text{cv}}^{\text{LUMO}}$ [eV]	$E(\text{T1})$ [eV]	$\lambda_{\text{max}}^{\text{PMMA}}$ [nm]	FWHM [eV]
	P^B-3	-5.80	-2.67	2.88^c	482	0.40

ここで、 $E_{\text{cv}}^{\text{LUMO}}$ は、サイクリックボルタンメトリーによって決定される

最低空軌道のエネルギーである。^c 発光スペクトルが 0.001 mg/mL
の P^B-3 トルエン溶液で記録された。

【0564】

【化339】

小 FWHM エミッタ S^B

10

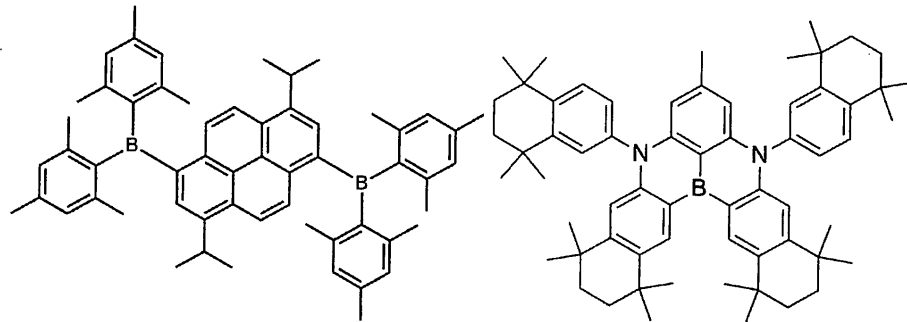
20

30

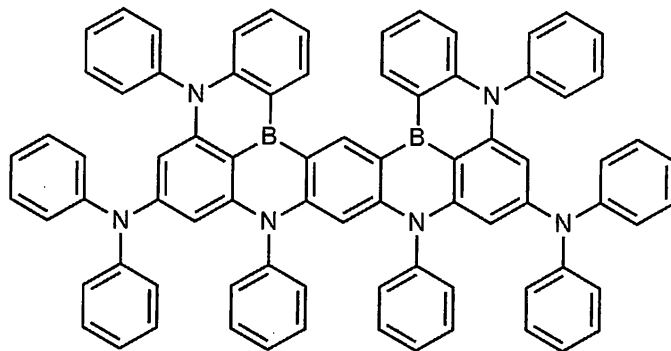
40

50

【化 3 4 0】

 S^B-13 S^B-14

10

 S^B-15

20

【 0 5 6 5】

【表 5】

表 1 S^B 小 FWHM エミッタ S^B の特性

	例示 化合物	E^{HOMO} [eV]	E^{LUMO} [eV]	$E(S1)$ [eV]	$E(T1)$ [eV]	$\lambda_{\text{max}}^{\text{PMMA}}$ [nm]	FWHM [eV]
S^B	S^B-9	-5.47	-2.66	2.81		460	0.14
	S^B-10	-5.46	-2.65	2.81		459	0.15
	S^B-11	-5.33	-2.51	2.82		458	0.16
	S^B-12	-5.49	-2.63	2.86		451	0.14
	S^B-13			2.79		464	0.24
	S^B-14	-5.31	-2.50	2.81	2.61	459	0.16
	S^B-15	-5.40	-2.58	2.74		468	0.12

30

40

50

【表 6】

表 2．例示的な有機エレクトロルミネッセンス素子（O L E D）の構成 1

層	厚み	材料
9	100nm	Al
8	2nm	Liq
7	20nm	ETL1:Liq = 50:50
6	10nm	HBM1
5 = B	50nm	H ^B : E ^B : EET-2: S ^B
4	10nm	HTL1
3	40nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

結果 I ： E E T − 2 は、発光層 B（発光層、 5）において燐光材料 P^Bである。

【 0 5 6 6 】

10

20

30

40

50

【表 7】

素子D 1 の発光層 B の組成（百分率は、重量百分率を意味する）：

層	D1
発光層(5)	H^B(64.5%): E^B(20%): EET-2(15%): S^B(0.5%)

10

表 2 の構成 1 が使用され、ここで、m C B P（H^B − 1）がホスト材料H^Bとして使用され、E^B − 1 がT A D F材料E^Bとして使用され、P^B − 3 が励起エネルギー移動成分E E T − 2（ここで、例示的に燐光材料P^B）として使用され、S^B − 1 5 が小F W H MエミッタS^Bとして使用された。

20

【 0 5 6 7】

【表 8】

素子結果 I

素子	FWHM [eV]	λ _{max} [nm]	CIE _x	CIE _y	10mA/cm ² での電圧 [V]	1000cd/m ² でのEQE [%]	1200cd/m ² での相対寿命LT95
D1	0.11	472	0.13	0.16	5.82	23.6	17.6時間

30

40

50

【表 9】
表 3. 例示的な有機エレクトロルミネッセンス素子（O L E D）の構成 2

層	厚み	材料
10	100nm	Al
9	2nm	Liq
8	20nm	ETL1:Liq = 50:50
7	10nm	HBM1
6 = B	50nm	H ^B : E ^B : EET-2: S ^B
5 = EXL	5nm	TTA1:S ^B = 99:1
4	10nm	HTL1
3	30nm	NPB
2	5nm	HAT-CN
1	50nm	ITO
基板		ガラス

結果 I I : E E T - 2 は、発光層 B（発光層、6）及び B に隣接した励起
子管理層 E X L の燐光材料 P^Bである。

【 0 5 6 8 】

【表 1 0】

素子 D 2 の発光層 B の組成（百分率は、重量百分率を示す）：

層	D2
発光層(6)	H ^B (64.5%): E ^B (20%): EET-2(15%): S ^B (0.5%)

10

表 3 の構成 2 が使用され、ここで、m C B P（H^B - 1）がホスト材料 H^B として使用され、E^B - 1 が T A D F 材料 E^B として使用され、P^B - 3 が励起エネルギー移動成分 E E T - 2（ここで、例示的に燐光材料 P^B）として使用され、S^B - 1 5 が小 F W H M エミッタ S^B として使用された。

【 0 5 6 9】

20

【表 1 1】

素子結果 I I

素子	FWHM [eV]	$\lambda_{\max}$ [nm]	CIE _x	CIE _y	10mA/cm ² での電圧 [V]	1000cd/m ² でのEQE [%]	1200cd/m ² での相対寿命LT95
D2	0.10	472	0.13	0.15	6.57	19.5	31.9時間

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

C O 9 K	11/06	(2006.01)	C O 9 K	11/06	6 6 0
H 1 0 K	101/10	(2023.01)	C O 9 K	11/06	6 9 0
H 1 0 K	101/60	(2023.01)	H 1 0 K	101:10	
H 1 0 K	101/20	(2023.01)	H 1 0 K	101:60	
H 1 0 K	101/30	(2023.01)	H 1 0 K	101:20	
H 1 0 K	101/40	(2023.01)	H 1 0 K	101:30	
			H 1 0 K	101:40	

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197074.6

(32)優先日 令和2年9月18日(2020.9.18)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197073.8

(32)優先日 令和2年9月18日(2020.9.18)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197072.0

(32)優先日 令和2年9月18日(2020.9.18)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197071.2

(32)優先日 令和2年9月18日(2020.9.18)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197589.3

(32)優先日 令和2年9月22日(2020.9.22)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20197588.5

(32)優先日 令和2年9月22日(2020.9.22)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 20217041.1

(32)優先日 令和2年12月23日(2020.12.23)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21170783.1

(32)優先日 令和3年4月27日(2021.4.27)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21170775.7

(32)優先日 令和3年4月27日(2021.4.27)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21170776.5

(32)優先日 令和3年4月27日(2021.4.27)

(33)優先権主張国・地域又は機関

欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21170779.9

(32)優先日 令和3年4月27日(2021.4.27)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21184616.7

(32)優先日 令和3年7月8日(2021.7.8)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21184619.1

(32)優先日 令和3年7月8日(2021.7.8)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21185402.1

(32)優先日 令和3年7月13日(2021.7.13)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(31)優先権主張番号 21186615.7

(32)優先日 令和3年7月20日(2021.7.20)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(72)発明者 シャリフィデサリ, ハメド

ドイツ連邦共和国 7 3 6 1 4 ショルンドルフ, ミットラレ ウーファーシュトラッセ 7 8

(72)発明者 ヨク, キョン ソ

ドイツ連邦共和国 7 6 6 4 6 ブルッフザール, ヨゼフ・クンツ-シュトラッセ 6

審査官 辻本 寛司

(56)参考文献 中国特許出願公開第109817818 (CN, A)

中国特許出願公開第110911575 (CN, A)

特開2013-157552 (JP, A)

国際公開第2021/241677 (WO, A1)

特開2018-082076 (JP, A)

米国特許出願公開第2020/0136059 (US, A1)

米国特許出願公開第2020/0251663 (US, A1)

中国特許出願公開第109378392 (CN, A)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

H10K 50/12

H10K 85/60

H10K 85/30

H10K 59/10

H10K 50/13

C09K 11/06

H10K 101/10

H10K 101/60

H10K 101/20

H10K 101/30

H10K 101/40

CAplus/REGISTRY (STN)