

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 7 部門第 2 区分

【発行日】令和 3 年 1 月 28 日 (2021.1.28)

【公開番号】特開 2020-167390 (P2020-167390A)

【公開日】令和 2 年 10 月 8 日 (2020.10.8)

【年通号数】公開・登録公報 2020-041

【出願番号】特願 2020-31734 (P2020-31734)

【国際特許分類】

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

H 0 5 B 33/10 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【F I】

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/10

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 9 K 11/06 6 4 5

C 0 9 K 11/06 6 4 0

C 0 9 K 11/06 6 5 5

C 0 9 K 11/06 6 5 0

【手続補正書】

【提出日】令和 2 年 12 月 8 日 (2020.12.8)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値 $E_{s,t}(A)$ が 0.50 eV 以下である、熱活性化遅延蛍光性化合物 (A) を準備する準備工程と、

ハウ素原子と、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 sp^3 炭素原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも 1 種とを環内に含む縮合複素環骨格 (b) を有する化合物であって、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値 $E_{s,t}(B)$ が 0.50 eV 以下であり、且つ、25 nm における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (EB) が、前記化合物 (A) の 25 nm における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (AA) との差の絶対値 ($|EB - AA|$) が 0.60 eV 以下となる値を示す、化合物 (B) を選別する選別工程と、

前記準備工程で準備した化合物 (A) 及び前記選別工程で選別した前記化合物 (B) を混合して発光素子用組成物を得る製造工程と、
を備え、

前記熱活性化遅延蛍光性化合物 (A) が、前記縮合複素環骨格 (b) を有さない化合物である、発光素子用組成物の製造方法。

【請求項 2】

前記選別工程が、前記化合物 (B) の 25 nm における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (EB) と前記化合物 (A) の 25 nm における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (AA) とを求めて、その差の絶対値 ($|EB - AA|$)

を算出する工程を含む、請求項 1 に記載の製造方法。

【請求項 3】

前記選別工程において、前記 $E_{st}(B)$ が前記 $E_{st}(A)$ より大きくなるように、前記化合物 (B) を選別する、請求項 1 又は 2 に記載の製造方法。

【請求項 4】

前記製造工程が、前記準備工程で準備した前記化合物 (A) と、前記選別工程で選別した前記化合物 (B) と、ホスト材料と、を混合する工程である、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の製造方法。

【請求項 5】

前記選別工程において、前記ホスト材料の 25 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (EH) と、前記化合物 (B) の 25 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (AB) との差の絶対値 ($|EH - AB|$) が 0.60 eV 以下となるように、前記化合物 (B) を選別する、請求項 4 に記載の製造方法。

【請求項 6】

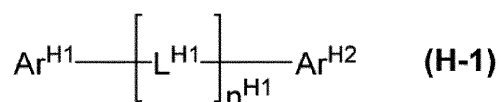
ホスト材料の 25 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (EH) と、前記選別工程で選別した前記化合物 (B) の 25 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (AB) との差の絶対値 ($|EH - AB|$) が 0.60 eV 以下となるように、ホスト材料を選別するホスト材料選別工程を更に備え、

前記製造工程が、前記準備工程で準備した前記化合物 (A) と、前記選別工程で選別した前記化合物 (B) と、前記ホスト材料選別工程で選別した前記ホスト材料と、を混合する工程である、請求項 4 又は 5 に記載の製造方法。

【請求項 7】

前記ホスト材料が、式 (H-1) で表される化合物を含む、請求項 4 ~ 6 のいずれか一項に記載の製造方法。

【化 1】



[式中、

$\text{Ar}^{\text{H}1}$ 及び $\text{Ar}^{\text{H}2}$ は、それぞれ独立に、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

$\text{n}^{\text{H}1}$ は、0 以上の整数を表す。

$\text{L}^{\text{H}1}$ は、アリーレン基、2 価の複素環基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 $\text{L}^{\text{H}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【請求項 8】

最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値 $E_{st}(B)$ が 0.50 eV 以下であり、ホウ素原子と、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 sp^3 炭素原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも 1 種とを環内に含む縮合複素環骨格 (b) を有する化合物 (B) を準備する準備工程と、

最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値 $E_{st}(A)$ が 0.50 eV 以下であり、且つ、25 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (AA) が、前記化合物 (B) の 25 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (EB) との差の絶対値 ($|EB - AA|$) が 0.60 eV 以下となる値を示す、熱活性化遅延蛍光性化合物 (A) を選別する選別工程と、

前記準備工程で準備した化合物 (B) 及び前記選別工程で選別した前記化合物 (A) を混合して発光素子用組成物を得る製造工程と、
を備え、

前記熱活性化遅延蛍光性化合物 (A) が、前記縮合複素環骨格 (b) を有さない化合物である、発光素子用組成物の製造方法。

【請求項 9】

前記選別工程が、前記化合物 (B) の 2.5 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (E_B) と前記化合物 (A) の 2.5 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (A_A) とを求めて、その差の絶対値 (| E_B - A_A |) を算出する工程を含む、請求項 8 に記載の製造方法。

【請求項 10】

前記選別工程において、前記 E_g (A) が前記 E_g (B) より小さくなるように、前記化合物 (A) を選別する、請求項 8 又は 9 に記載の製造方法。

【請求項 11】

前記製造工程が、前記準備工程で準備した前記化合物 (B) と、前記選別工程で選別した前記化合物 (A) と、ホスト材料と、を混合する工程である、請求項 8 ~ 10 のいずれか一項に記載の製造方法。

【請求項 12】

ホスト材料を準備するホスト材料準備工程を更に備え、

前記準備工程が、前記ホスト材料の 2.5 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (E_H) と、前記化合物 (B) の 2.5 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (A_B) との差の絶対値 (| E_H - A_B |) が 0.60 eV 以下となる化合物 (B) を準備する工程である、請求項 11 に記載の製造方法。

【請求項 13】

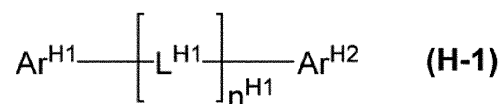
ホスト材料の 2.5 における発光スペクトルの最大ピークのエネルギー値 (E_H) と、前記準備工程で準備した前記化合物 (B) の 2.5 における吸収スペクトルの最も低エネルギー側のピークのエネルギー値 (A_B) との差の絶対値 (| E_H - A_B |) が 0.60 eV 以下となるように、ホスト材料を選別するホスト材料選別工程を更に備え、

前記製造工程が、前記準備工程で準備した前記化合物 (B) と、前記選別工程で選別した前記化合物 (A) と、前記ホスト材料選別工程で選別した前記ホスト材料と、を混合する工程である、請求項 11 又は 12 に記載の製造方法。

【請求項 14】

前記ホスト材料が、式 (H - 1) で表される化合物を含む、請求項 11 ~ 13 のいずれか一項に記載の製造方法。

【化 2】



[式中、

A r^{H 1} 及び A r^{H 2} は、それぞれ独立に、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

n^{H 1} は、0 以上の整数を表す。

L^{H 1} は、アリーレン基、2 価の複素環基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。L^{H 1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

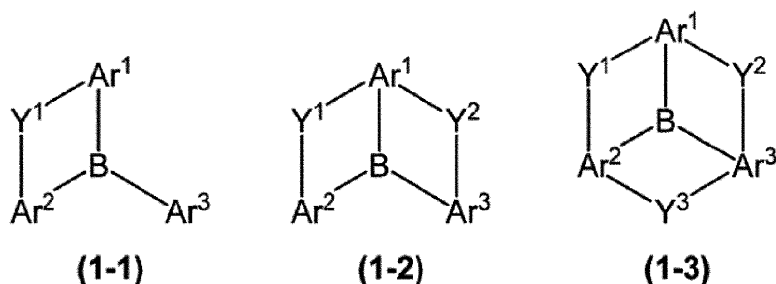
【請求項 15】

前記縮合複素環骨格 (b) が、ホウ素原子と、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも１種とを環内に含む、請求項 1 ～ 14 のいずれか一項に記載の製造方法。

【請求項 16】

前記化合物 (B) が、式 (1-1) で表される化合物、式 (1-2) で表される化合物又は式 (1-3) で表される化合物である、請求項 1 ～ 15 のいずれか一項に記載の製造方法。

【化 3】



[式中、

Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y^1 は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 Ry は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 Ry が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 Ry は、直接結合して又は連結基を介して、 Ar^1 、 Ar^2 又は Ar^3 と結合していてもよい。]

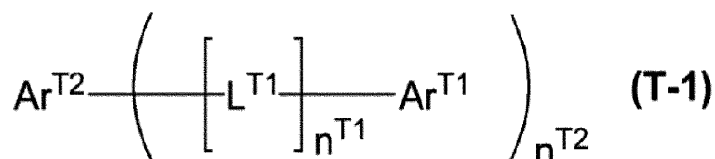
【請求項 17】

前記 Y^1 、前記 Y^2 及び前記 Y^3 が、酸素原子、硫黄原子又は $-N(Ry)-$ で表される基である、請求項 16 に記載の製造方法。

【請求項 18】

前記化合物 (A) が、式 (T-1) で表される化合物である、請求項 1 ～ 17 のいずれか一項に記載の製造方法。

【化 4】



[式中、

n^{T1} は、0 以上の整数を表す。 n^{T1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なっ

ていてもよい。

n^{T2} は、1 以上の整数を表す。但し、 Ar^{T2} が $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、又は、 $-S(=O)_2-$ で表される基である場合、 n^{T2} は 2 である。

Ar^{T1} は、置換アミノ基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 Ar^{T1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

但し、 Ar^{T1} における 1 価の複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない 1 価の複素環基である。

L^{T1} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、酸素原子又は硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 L^{T1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Ar^{T2} は、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)_2-$ で表される基、電子求引性基を有する芳香族炭化水素基、環内に $-C(=O)-$ で表される基を含む芳香族炭化水素基、又は、環内に $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基及び $-S(=O)_2-$ で表される基からなる群より選ばれる少なくとも 1 つの基を含む複素環基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

【請求項 19】

前記製造工程において、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも 1 種を更に混合する、請求項 1 ~ 18 のいずれか一項に記載の製造方法。

【請求項 20】

陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に設けられた有機層と、を有する発光素子の製造方法であって、

請求項 1 ~ 19 のいずれか一項に記載の製造方法により発光素子用組成物を製造する工程と、該工程で製造された前記発光素子用組成物を用いて、前記有機層を形成する工程と、を備える、発光素子の製造方法。