

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号

特表2025-505525

(P2025-505525A)

(43)公表日 令和7年2月28日(2025.2.28)

(51)国際特許分類	F I	テーマコード (参考)
H 1 0 K 50/12 (2023.01)	H 1 0 K 50/12	3 K 1 0 7
H 1 0 K 85/30 (2023.01)	H 1 0 K 85/30	
H 1 0 K 85/60 (2023.01)	H 1 0 K 85/60	
H 1 0 K 71/00 (2023.01)	H 1 0 K 71/00	
H 1 0 K 50/30 (2023.01)	H 1 0 K 50/30	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全84頁) 最終頁に続く		

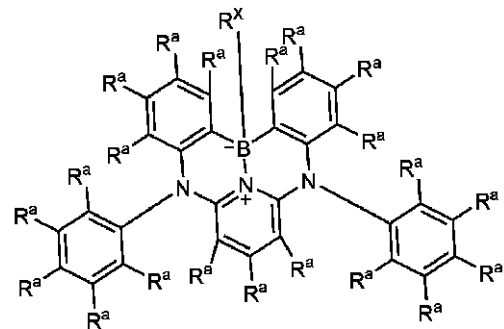
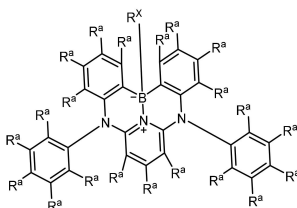
(21)出願番号	特願2024-543346(P2024-543346)	(71)出願人	512187343
(86)(22)出願日	令和4年12月26日(2022.12.26)		三星ディスプレイ株式会社
(85)翻訳文提出日	令和6年7月22日(2024.7.22)		Samsung Display Co.
(86)国際出願番号	PCT/KR2022/021329		, Ltd.
(87)国際公開番号	WO2023/149661		大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1
(87)国際公開日	令和5年8月10日(2023.8.10)		1, Samsung-ro, Gihe
(31)優先権主張番号	22154985.0		ung-gu, Yongin-si,
(32)優先日	令和4年2月3日(2022.2.3)		Gyeonggi-do, Repub
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)	(74)代理人	100121382
			弁理士 山下 託嗣
(81)指定国・地域	AP(BW,CV,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ	(72)発明者	デュック, セバスチアン
	,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),		ドイツ連邦共和国, ハイデルベルク 6
	EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(		9 1 1 5, テラッセ 1, ブファッフェ
	AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,		ングルンダー
	FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV		
	最終頁に続く		最終頁に続く

(54)【発明の名称】 光電子素子

(57)【要約】

本発明は、(i) ホスト材料及び (i i) 化学式 I の構造を含む有機分子を含む発光層を含む光電子素子に関する。ここで、 R^X は、ハロゲン基、シアノ基、置換もしくは非置換のアルキル基、置換もしくは非置換のアルキニル基、置換もしくは非置換のアルコキシ基、置換もしくは非置換のアルケニル基、置換もしくは非置換のシリル基、置換もしくは非置換のアリールオキシ基、置換もしくは非置換のアリール基、置換もしくは非置換のヘテロ環基、または置換もしくは非置換の炭化水素環基からなる群から選択され、化学式 I 中の R^a に係わる詳細な説明は、発明の詳細な説明に述べられた通りである。

【化学式 I】



10

20

【特許請求の範囲】

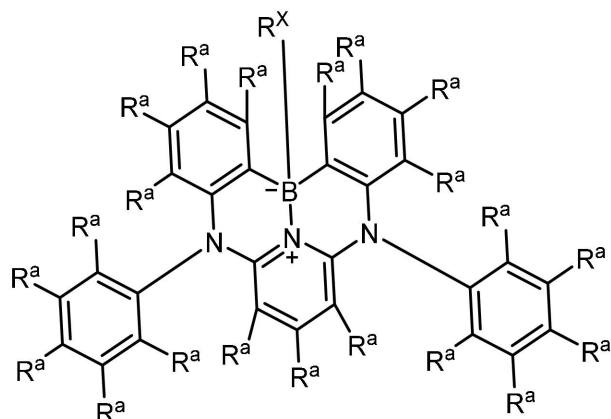
【請求項 1】

下記を含む発光層を含む、光電子素子：

(i) ホスト材料、及び

(ii) 下記化学式 I の構造を含む有機分子、

[化学式 I]



10

ここで、

20

R^X は、ハロゲン基、シアノ基、置換もしくは非置換のアルキル基、置換もしくは非置換のアルキニル基、置換もしくは非置換のアルコキシ基、置換もしくは非置換のアルケニル基、置換もしくは非置換のシリル基、置換もしくは非置換のアリールオキシ基、置換もしくは非置換のアリール基、置換もしくは非置換のヘテロ環基、及び、置換もしくは非置換の炭化水素環基からなる群から選択され、

R^a は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、 $N(R^5)_2$ 、 OR^5 、 $Si(R^5)_3$ 、 $B(OR^5)_2$ 、 $B(R^5)_2$ 、 OSO_2R^5 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Br 、 I 、

$C_1 - C_{40}$ アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^5 で置換され、

30

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

$C_1 - C_{40}$ アルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^5 で置換され、

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

$C_1 - C_{40}$ チオアルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^5 で置換され、

40

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

$C_2 - C_{40}$ アルケニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^5 で置換され、

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

$C_2 - C_{40}$ アルキニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R^5 で置換され、

50

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^5$ 、 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^5)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^5 、 O 、 S または CONR^5 で置換され、
 選択的に1以上の置換基 R^5 で置換された C_6-C_{60} アリール、及び
 選択的に1以上の置換基 R^5 で置換された C_2-C_{57} ヘテロアリール、
 R^5 は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、
 水素、重水素、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 OR^6 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}^6)_2$ 、 $\text{B}(\text{R}^6)_2$ 、 OSO_2R^6 、 CF_3 、 CN 、 F 、 Br 、 I 、
 C_1-C_{40} アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^6 で置換され、

10

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または CONR^6 で置換され、
 C_1-C_{40} アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または CONR^6 で置換され、
 C_1-C_{40} チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R^6 で置換され、

20

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または CONR^6 で置換され、
 C_2-C_{40} アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^6 で置換され、

ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{=O})(\text{R}^6)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^6 、 O 、 S または CONR^6 で置換され、
 C_2-C_{40} アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R^6 で置換され、

30

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

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

選択的に1以上の置換基 R^6 で置換された C_2-C_{57} ヘテロアリール、

R^6 は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、 OPh 、 CF_3 、 CN 、 F 、

C_1-C_5 アルキル、

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

40

C_1-C_5 アルコキシ、

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

C_1-C_5 チオアルコキシ、

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

C_2-C_5 アルケニル、

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

C_2-C_5 アルキニル、

50

ここで、選択的に1以上の水素原子は、独立して、重水素、CN、CF₃またはFで置換され、

選択的に1以上のC₁ - C₅アルキル置換基で置換されたC₆ - C₁₈アリール、

選択的に1以上のC₁ - C₅アルキル置換基で置換されたC₂ - C₁₇ヘテロアリール、
N(C₆ - C₁₈アリール)₂、

N(C₂ - C₁₇ヘテロアリール)₂、及び

N(C₂ - C₁₇ヘテロアリール)(C₆ - C₁₈アリール)、

ここで、任意の置換基R^a、R⁵及びR⁶は、独立して、1以上の置換基R^a、R⁵及び／またはR⁶と共に、単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系を選択的に形成する。

10

【請求項2】

R^xは、下記からなる群から選択される、請求項1に記載の光電子素子：

Me、iPr、tBu、CN、CF₃、

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

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

【請求項3】

R^aは、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択される、請求項1または2に記載の光電子素子：

20

水素、

重水素、

Me、

iPr、

tBu、

CN、

CF₃、

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

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

30

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

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

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

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

ここで、2つ以上の隣接した置換基R^aは、下記からなる群から選択された環系に対する付着点を選択的に形成し、

40

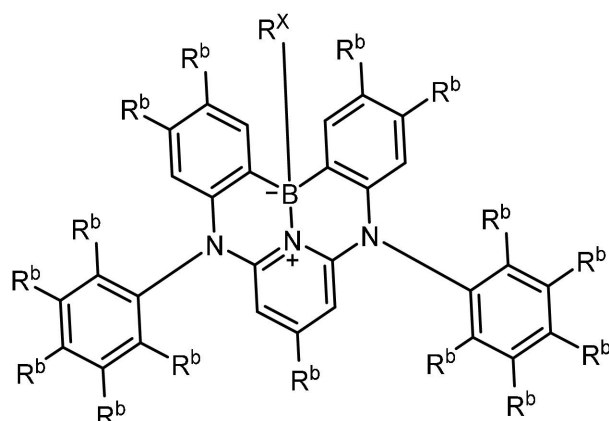


30

40

$$N(P h)_2.$$

50



10

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

C₁ - C₄₀ アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

20

C₁ - C₄₀ アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₁ - C₄₀ チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

30

C₂ - C₄₀ アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₂ - C₄₀ アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

40

選択的に1以上の置換基R⁵で置換されたC₆-C₆₀アリール、及び
選択的に1以上の置換基R⁵で置換されたC₂-C₅₇ヘテロアリール。

【請求項 6】

R^bは、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択される、請求項5に記載の光電子素子：

水素、重水素、

Me, ⁱPr, ^tBu, CN, CF₃,

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

50

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

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

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

N(Ph)₂。

【請求項7】

0.1～30重量%、または0.8～15重量%、特に1.5～5重量%の前記有機分子を含む、請求項1ないし6のうちいずれか1項に記載の光電子素子。

10

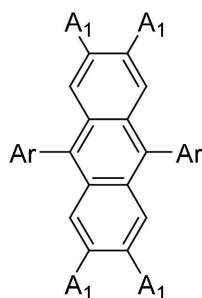
【請求項8】

前記有機分子は、440nmないし470nmの最大発光を有する、請求項1ないし7のうちいずれか1項に記載の光電子素子。

【請求項9】

前記ホスト材料は、下記化学式4の構造を含む、請求項1ないし8のうちいずれか1項に記載の光電子素子：

【化学式4】



20

ここで、

それぞれのArは、独立して、下記からなる群から選択され、

C₆–C₆₀アリール、C₃–C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₆–C₆₀アリール、及び

30

C₆–C₆₀アリール、C₃–C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₃–C₅₇ヘテロアリール、

それぞれのA₁は、独立して、下記からなる群から選択される：

水素、

重水素、

C₆–C₆₀アリール、C₃–C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₆–C₆₀アリール、

40

C₆–C₆₀アリール、C₃–C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₃–C₅₇ヘテロアリール、及び

C₆–C₆₀アリール、C₃–C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₁–C₄₀（ヘテロ）アルキル。

【請求項10】

前記発光層は、TADF材料及び燐光材料からなる群から選択された材料を含む、請求項1ないし9のうちいずれか1項に記載の光電子素子。

50

【請求項 1 1】

前記ホスト材料は p-ホスト材料である、請求項 1 0 に記載の光電子素子。

【請求項 1 2】

前記光電子素子は、下記からなる群から選択される、請求項 1 ないし 1 1 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子：

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

10

【請求項 1 3】

- －基板、
- －アノード、
- －カソード、及び
- －発光層を含み、

前記アノードまたは前記カソードは、前記基板上に配置され、

前記発光層は、前記アノードと前記カソードとの間に配置される、請求項 1 ないし 1 2 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子。

20

【請求項 1 4】

（i）請求項 1 ないし 1 3 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子を提供する段階と、

（i i）前記光電子素子に電流を印加する段階と、を含む、4 4 0 n m ないし 4 7 0 n m の波長を有する光を発生させる方法。

【請求項 1 5】

（i）ホスト材料と、

（i i）化学式の構造を含む有機分子と、を含む発光層を提供する段階を含む、請求項 1 ないし 1 3 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子を製造する方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

30

【0 0 0 1】

本発明は、有機発光ダイオード（O L E D）のような光電子素子に関する。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 2】

本発明が解決しようとする課題は、光電子素子に電流が印加されるとき、可視スペクトル領域において光を放出する光電子素子を提供することである。

【0 0 0 3】

現在の光電子素子は、色点、寿命または効率のような重要なパラメータのうち 1 つが依然として不足である。

40

【課題を解決するための手段】

【0 0 0 4】

そのような目的は、光電子素子の発光層のための新規の材料の組み合わせ、すなわち、ホスト材料 H^B と光を放出する有機分子 S^B との組み合わせを提供する本発明によって達成される。前記有機分子 S^B は、4 配位ホウ素原子を含むことを特徴とする。

【発明の効果】

【0 0 0 5】

本発明によれば、前記光電子素子は、青色または空色のスペクトル範囲において最大発光を示す。前記光電子素子は、特に 4 2 0 n m ないし 5 2 0 n m、好ましくは、4 4 0 n m ないし 4 9 5 n m、より好ましくは、4 5 0 n m ないし 4 7 0 n m において最大発光を

50

示す。本発明による光電子素子、例えば、有機発光ダイオード（OLED）の発光層内のエミッタ材料として前記有機分子の使用は、前記素子のより高い効率、または発光の半値幅（FWHM）で表されるより高い色純度をもたらす。相応するOLEDは、公知のエミッタ材料及び類似の色相を有するOLEDよりさらに高い安定性を有する。ホスト材料、特に、三重項・三重項消滅（triplet-triplet annihilation）ホスト材料と共に本発明の有機分子を含む発光層を有するOLEDは、高い安定性を有する。

【発明を実施するための形態】

【0006】

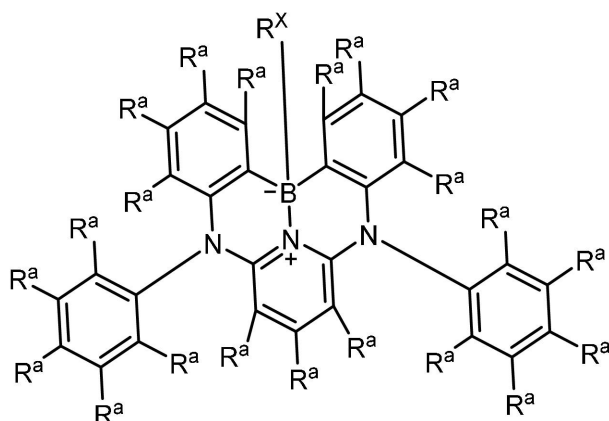
前記光電子素子は、下記を含む発光層Bを含む：

（i）ホスト材料H^B、及び

（ii）下記化学式Iの構造を含む発光有機分子S^B、

【0007】

〔化学式I〕



ここで、

R^Xは、ハロゲン基、シアノ基、置換もしくは非置換のアルキル基、置換もしくは非置換のアルキニル基、置換もしくは非置換のアルコキシ基、置換もしくは非置換のアルケニル基、置換もしくは非置換のシリル基、置換もしくは非置換のアリールオキシ基、置換もしくは非置換のアリール基、置換もしくは非置換のヘテロ環基、または置換もしくは非置換の炭化水素環基からなる群から選択され、

R^aは、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、N(R⁵)₂、OR⁵、Si(R⁵)₃、B(OR⁵)₂、B(R⁵)₂、OSO₂R⁵、CF₃、CN、F、Br、I、

C₁ - C₄₀アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₁ - C₄₀アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₁ - C₄₀チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₂ - C₄₀ アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換され、

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

C₂ - C₄₀ アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換され、

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

選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換されたC₆ - C₆₀ アリール、及び

選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換されたC₂ - C₅₇ ヘテロアリール、

R⁵ は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、N (R⁶)₂、OR⁶、Si (R⁶)₃、B (OR⁶)₂、B (R⁶)₂、OSO₂R⁶、CF₃、CN、F、Br、I、

C₁ - C₄₀ アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、選択的にR⁶C = CR⁶、C≡C、Si (R⁶)₂、Ge (R⁶)₂、Sn (R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁶、P (=O) (R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SまたはCONR⁶で置換され、

C₁ - C₄₀ アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、選択的にR⁶C = CR⁶、C≡C、Si (R⁶)₂、Ge (R⁶)₂、Sn (R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁶、P (=O) (R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SまたはCONR⁶で置換され、

C₁ - C₄₀ チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、選択的にR⁶C = CR⁶、C≡C、Si (R⁶)₂、Ge (R⁶)₂、Sn (R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁶、P (=O) (R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SまたはCONR⁶で置換され、

C₂ - C₄₀ アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、選択的にR⁶C = CR⁶、C≡C、Si (R⁶)₂、Ge (R⁶)₂、Sn (R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁶、P (=O) (R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SまたはCONR⁶で置換され、

C₂ - C₄₀ アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、選択的にR⁶C = CR⁶、C≡C、Si (R⁶)₂、Ge (R⁶)₂、Sn (R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁶、P (=O) (R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SまたはCONR⁶で置換され、

選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換されたC₆ - C₆₀ アリール、及び

選択的に1以上の置換基 R⁶ で置換されたC₂ - C₅₇ ヘテロアリール、

R⁶ は、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択され、

水素、重水素、OPh (Ph = フェニル)、CF₃、CN、F、

C₁ - C₅ アルキル、

ここで、選択的に1以上の水素原子は、独立して、重水素、CN、CF₃またはFで置換され、

C₁ - C₅ 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、CF₃またはFで置換され、

10

20

30

40

50

C₁ - C₅ 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、CF₃またはFで置換され、

C₂ - C₅ 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、CF₃またはFで置換され、

C₂ - C₅ 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、CF₃またはFで置換され、

選択的に1以上のC₁ - C₅ アルキル置換基で置換されたC₆ - C₁₈ アリール、

選択的に1以上のC₁ - C₅ アルキル置換基で置換されたC₂ - C₁₇ ヘテロアリール、

N(C₆ - C₁₈ アリール)₂、

N(C₂ - C₁₇ ヘテロアリール)₂、及び

N(C₂ - C₁₇ ヘテロアリール)(C₆ - C₁₈ アリール)、

ここで、任意の置換基R^a、R⁵及びR⁶は、独立して、1以上の置換基R^a、R⁵及び／またはR⁶と共に、単環式または多環式、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び／またはベンゾ縮合環系を選択的に形成する。

10

【0008】

一実施形態において、R^xは、下記からなる群から選択される：

Me、ⁱPr、^tBu、CN、CF₃、

20

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

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

【0009】

一実施形態において、R^xはフェニル(Ph)である。

【0010】

本発明の一実施形態において、R^aは、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

水素、

30

重水素、

Me、

ⁱPr、

^tBu、

CN、

CF₃、

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

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

40

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

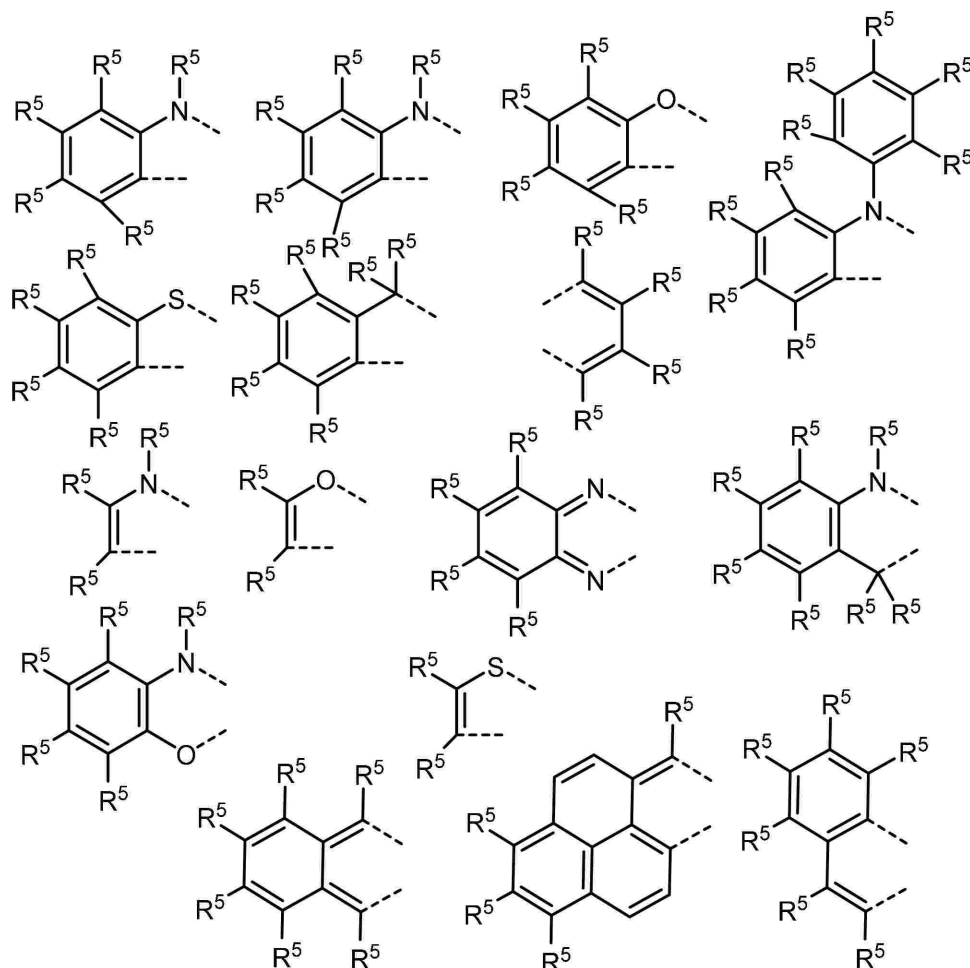
Me、ⁱPr、^tBu、CN、CF₃及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、

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

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

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

50



10

20

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

30

【0011】

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

【0012】

一実施形態において、 R^6 は、それぞれの場合に、互いに独立して、水素 (H)、メチル (Me)、*i*-プロピル ($\text{CH}(\text{CH}_3)_2$) (*i*Pr)、*t*-ブチル (*t*Bu)、フェニル (Ph)、CN、 CF_3 及びジフェニルアミン (NPh_2) からなる群から選択される。

【0013】

一実施形態において、 R^5 は、それぞれの場合に、互いに独立して、水素 (H)、メチル (Me)、*i*-プロピル ($\text{CH}(\text{CH}_3)_2$) (*i*Pr)、*t*-ブチル (*t*Bu)、フェニル (Ph)、CN、 CF_3 及びジフェニルアミン (NPh_2) からなる群から選択される。

40

【0014】

本発明の一実施形態において、 R^a は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

水素、重水素、Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、 CF_3 、

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

50

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

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

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

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

N(Ph)₂。

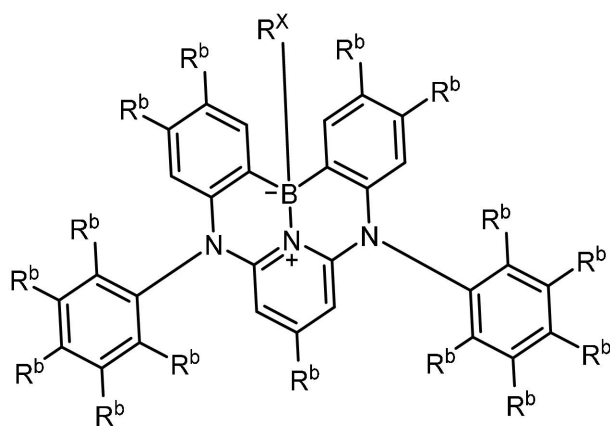
【0015】

10

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

【0016】

[化学式II]



20

ここで、R^bは、それぞれの場合に、独立して、下記からなる群から選択される：

水素、重水素、N(R⁵)₂、OR⁵、Si(R⁵)₃、B(OR⁵)₂、OSO₂R⁵、CF₃、CN、F、Br、I、

30

C₁–C₄₀アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₁–C₄₀アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

40

C₁–C₄₀チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

C₂–C₄₀アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基R⁵で置換され、

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

50

C₂ - C₄₀ アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換され、

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

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

選択的に1以上の置換基 R⁵ で置換された C₂ - C₅₇ ヘテロアリール。

【0017】

一実施形態において、R^b は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

水素、重水素、

Me、ⁱPr、^tBu、CN、CF₃、

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

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

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

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

N (Ph)₂。

【0018】

一実施形態において、R^b は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

重水素、

Me、ⁱPr、^tBu、CN、CF₃、

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

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

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

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

N (Ph)₂。

【0019】

定義

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

【0020】

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

【0021】

本発明の文脈において、「エミッタ材料」(「エミッタ」ともいう) は、光電子素子の発光層 (EML) に含まれるとき、電圧及び電流が前記素子に加えられる場合に光を放出する材料である (下記参照)。エミッタ材料が一般的に「発光性ドーパント」材料であるということを、当業者であれば、知っており、ドーパント材料 (発光性如何にかかわらず

10

20

30

40

50

）が、通常（本明細書において）ホスト材料というマトリックス材料に組み込まれた材料であるということは、当業者であれば、理解することができる。本明細書において、ホスト材料は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子、好ましくは、OLEDに含まれるとき、一般的にH^Bと称される。

【0022】

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

【0023】

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

10

【0024】

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

【0025】

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

【0026】

本発明の文脈において、用語「炭素環」は、最も広い意味において、環状コア構造が水素というまでもなく、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、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。

20

【0027】

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

30

【0028】

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

【0029】

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

40

【0030】

熟練した技術者によって理解されるように、用語「アリール」及び「芳香族」は、最も

50

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

10

20

30

40

50

【0031】

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

【0032】

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

【0033】

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

【0034】

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

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

【0035】

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

10

【0036】

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

20

【0037】

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

30

【0038】

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

40

【0039】

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

【0040】

50

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

10

20

30

40

50

【0041】

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

【0042】

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

【0043】

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

【0044】

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

【0045】

本明細書において使用されているように、用語「チオアルコキシ」は、直鎖状、分枝状及び環状のチオアルコキシ置換基を含み、ここで、例示的なアルコキシ基のOは、Sに代替される。

【0046】

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

【0047】

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

10

【0048】

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

【0049】

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

20

30

【0050】

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

【0051】

本明細書に言及された任意の構造に含まれた全ての水素原子（H）は、それぞれの場合に互いに独立して、具体的に述べられない限り、重水素（D）にも置換される。水素を重水素に置換することは、一般慣行であり、当業者には明白である。したがって、これを達成することができる多くの周知の方法と一部レビュー論文がある。

40

【0052】

実験または計算データを比較する場合、同一の方法論によって値を決定しなければならない。例えば、特定方法により、実験的な ΔE_{ST} が 0.4 eV 未満と決定されれば、同一条件を含む同一特定方法を使用する場合にのみ比較が有効である。具体的な例を挙げれば、異なる化合物のフォトルミネッセンス量子収率（PLQY）の比較は、PLQY 値の決定が同一反応条件（室温、10% PMMA フィルムにおける測定）で行われた場合にのみ有効である。同様に、計算されたエネルギー値は、同一計算方法（同一関数及び同一基本セットを用いて）によって決定される必要がある。

50

【0053】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子

本発明の更なる側面は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子に係わるものである。

【0054】

一実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、下記からなる群から選択される：

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

10

【0055】

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

【0056】

20

好ましい実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、有機発光ダイオード（OLED）、発光電気化学電池（LEC）、有機レーザ及び発光トランジスタからなる群から選択される。

【0057】

より好ましい実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、有機発光ダイオード（OLED）である。

【0058】

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

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

30

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

40

【0059】

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

【0060】

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

1. 基板

50

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

ここで、該 O L E D (逆積み層構造を有する) は、アノード層 A、カソード層 C 及び E M L を除いたそれぞれの層を選択的に含み、異なる層が併合され、該 O L E D は、前述のところで定義された各層類型のうち 1 層以上の層を含むものであってもよい。 10

【0061】

本発明による有機分子 (前述の実施形態による) は、特定の構造及び置換によって多様な層に使用可能である。使用される場合、光電子素子、特に O L E D のそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0.1 重量% ないし 99 重量%、より特に、1 重量% ないし 80 重量% である。代案的な実施形態において、それぞれの層において、有機分子の割合は 100 重量% である。

【0062】

一実施形態において、少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、積層構造を有することができる O L E D である。前記構造においては、O L E D が並んで配される一般配置とは異なり、個別ユニットが互いの上に積層される。混合光は、積層構造を示す O L E D によって生成され、特に、白色光は、青色 O L E D、緑色 O L E D 及び赤色 O L E D を積層して生成される。また、積層構造を示す O L E D は、選択的に電荷生成層 (CGL) を含んでもよく、それは、一般的に、2 つの O L E D サブユニット間に位置し、一般的に、n-ドーピングされた層及び p-ドーピングされた層として構成される。一般的に、1 つの CGL の n-ドーピングされた層がアノード層にさらに近く位置する。 20

【0063】

一実施形態において、少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、アノードとカソードとの間に、2 層以上の発光層を含む O L E D である。特に、いわゆるタンデム O L E D は、3 層の発光層を含み、ここで、1 層の発光層は、赤色光を放出し、1 層の発光層は、緑色光を放出し、1 層の発光層は、青色光を放出し、選択的に、個々の発光層間に、電荷生成層、電荷阻止層または電荷輸送層のような追加層を含んでもよい。更なる実施形態において、該発光層は、隣接するように積層される。更なる実施形態において、該タンデム O L E D は、それぞれの 2 層の発光層間に電荷生成層を含む。また、隣接した発光層、または電荷生成層によって分離した発光層が併合されうる。 30

【0064】

一実施形態において、少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、本質的に白色光電子素子であってもよく、これは、素子が白色光を放出するということの意味する。例えば、そのような白色光電子素子は、少なくとも 1 つの (深) 青色エミッタ分子、及び緑色光及び／または赤色光を放出する 1 以上のエミッタ分子を含むものであってもよい。また、本文の後項で説明されたように、2 以上の分子間に選択的にエネルギー伝達がありうる (下記参照)。 40

【0065】

少なくとも 1 つの本発明による有機分子を含む光電子素子の場合、少なくとも 1 つの本発明による有機分子は、光電子素子の発光層 (EML)、より好ましくは、O L E D の E M L に含まれる。しかし、本発明による有機分子は、例えば、電子輸送層 (ETL) 及び／または電子阻止層 (EBL) または励起子阻止層及び／または正孔輸送層 (HTL) 及び／または正孔阻止層 (HBL) でも使用される。使用される場合、光電子素子、特に O L E D のそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0.1 重量% ないし 9 50

9重量%、より特に、0.5重量%ないし80重量%、特に0.5重量%ないし10重量%である。代案的な実施形態において、それぞれの層において、前記有機分子の割合は100重量%である。

【0066】

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

10

【0067】

前記基板は、任意の材料、または該材料の組成物によっても形成される。ほとんど、ガラスライドが基板として使用される。代案としては、薄い金属層(例えば、銅、金、銀またはアルミニウムフィルム)、またはプラスチックフィルムやプラスチックライドが使用されうる。それは、さらに高レベルの柔軟性を許容することができる。アノード層Aは、ほとんど(本質的に)透明なフィルムを得ることができる材料によって構成される。OLEDからの発光を許容するために、二電極のうち少なくとも一つは(本質的に)透明ではなければならないので、アノード層Aまたはカソード層Cのうち一層は透明である。好ましくは、アノード層Aは、透明伝導性酸化物(TCOs)を多量含むか、あるいはそれからなる。そのようなアノード層Aは、例えば、インジウムスズ酸化物、アルミニウム亜鉛酸化物、フッ素ドーピングされたスズ酸化物、インジウム亜鉛酸化物、PbO、SnO、ジルコニウム酸化物、モリブデン酸化物、バナジウム酸化物、タングステン酸化物、黒鉛、ドーピングされたSi、ドーピングされたGe、ドーピングされたGaAs、ドーピングされたポリアニリン、ドーピングされたポリピロール及び／またはドーピングされたポリチオフェンを含むものであってもよい。

20

30

【0068】

好ましくは、アノード層Aは、(本質的に)インジウムスズ酸化物(ITO)(例えば、 $(\text{InO}_3)_{0.9}(\text{SnO}_2)_{0.1}$)で構成される。透明伝導性酸化物(TCO)によるアノード層Aの粗さは、正孔注入層(HIL)を使用することによっても緩和される。また、該HILは、TCOから正孔輸送層(HTL)への類似電荷キャリア(すなわち、正孔)の輸送が促進されるという点において、類似電荷キャリアの注入を容易にする。正孔注入層(HIL)は、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン(PEDOT)、ポリスチレンスルホン酸(PSS)、 MoO_2 、 V_2O_5 、CuPCまたはCuI、特に、PEDOT及びPSSの混合物を含むものであってもよい。正孔注入層(HIL)は、また、アノード層Aから正孔輸送層(HTL)に金属が拡散することを防止することができる。例えば、該HILは、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン：ポリスチレンスルホン酸(PEDOT:PSS)、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン(PEDOT)、4,4',4''-トリス[フェニル(m-トリル)アミノ]トリフェニルアミン(mMTDATA)、2,2',7,7'-テトラキス(n,n'-ジフェニルアミノ)-9,9'-スピロピフルオレン(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'-ニスー(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

40

50

—N, N'—ジ—[4—(N, N—ジフェニルアミノ)フェニル]ベンジジン(NPNPB)、N, N, N', N'—テトラキス(4—メトキシフェニル)ベンジジン(MeO—TPD)、1, 4, 5, 8, 9, 11—ヘキサアザトリフェニレン—ヘキサカルボニトリル(HAT—CN)及び／またはN, N'—ジフェニル—N, N'—ビス—(1—ナフチル)—9, 9'—スピロビフルオレン—2, 7—ジアミン(Spiro—NPD)によっても構成される。

【0069】

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

【0070】

EBLは、例えば、1, 3—ビス(カルバゾール—9—イル)ベンゼン(mCP)、トリス(4—カルバゾイル—9—イルフェニル)アミン(TCTA)、4, 4', 4''—トリス[2—ナフチル(フェニル)アミノ]トリフェニルアミン(2—TNATA)、3, 3'—ジ(9H—カルバゾール—9—イル)ビフェニル(mCBP)、9—フェニル—3, 6—ビス(9—フェニル—9H—カルバゾール—3—イル)—9H—カルバゾール(tris—Pcz)、9—(4—tert—ブチルフェニル)—3, 6—ビス(トリフェニルシリル)—9H—カルバゾール(CzSi)及び／またはN, N'—ジカルバゾリル—1, 4—ジメチルベンゼン(DCB)を含むものであってもよい。

【0071】

正孔輸送層(HTL)または(存在する場合)電子阻止層(EBL)に隣接し、一般的に発光層(EML)が位置する。発光層(EML)は、少なくとも1つの発光分子(すなわち、エミッタ材料)を含む。一般的に、EMLは、1以上のホスト材料(マトリックス材料ともいう)をさらに含む。例えば、ホスト材料は、4, 4'—ビス—(N—カルバゾリル)—ビフェニル(CBP)、1, 3—ビス(カルバゾール—9—イル)ベンゼン(m

C P)、3,3-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)ビフェニル(mCBP)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イルトリフェニルシラン(Sif87)、9-(4-tert-ブチルフェニル)-3,6-ビス(トリフェニルシリル)-9H-カルバゾール(CzSi)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イル)ジフェニルシラン(Sif88)、ビス[2-(ジフェニルホスフィノ)フェニル]エーテルオキサイド(DPEPO)、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾチオフェン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾチオフェニル)フェニル]-9H-カルバゾール、2,4,6-トリス(ビフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T2T)、2,4,6-トリス(トリフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T3T)及び/または2,4,6-トリス(9,9'-スビロピフルオレン-2-イル)-1,3,5-トリアジン(TST)から選択される。当業者に知られているように、ホスト材料は、一般的に、第1(すなわち、最低)励起三重項状態(T1)及び第1(すなわち、最低)励起一重項状態(S1)エネルギー準位を示すように選択されなければならない、これは、それぞれのホスト材料に組み込まれた少なくとも1つの発光分子の第1(すなわち、最低)励起三重項状態(T1)及び第1(すなわち、最低)励起一重項状態(S1)エネルギー準位よりもエネルギーが高い。

【0072】

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

【0073】

発光層(EML)に隣接し、電子輸送層(ETL)が位置する。ここで、任意の電子輸送物質が使用される。例示的には、ベンズイミダゾール、ピリジン、トリアゾール、トリアジン、オキサジアゾール(例えば、1,3,4-オキサジアゾール)、ホスフィンオキシド及びスルホンのような電子不足化合物が使用される。該電子輸送物質は、また、1,3,5-トリ(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル)フェニル(TPBi)のような星状のヘテロ環化合物であってもよい。該ETLは、例えば、2,9-ビス(ナフタレン-2-イル)-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(NBphen)、アルミニウム-トリス(8-ヒドロキシキノリン)(Alq3)、ジフェニル-4-トリフェニルシリルフェニル-ホスフィンオキシド(TSPO1)、2,7-ジ(2,2'-ビピリジン-5-イル)トリフェニル(BPyTP2)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イルトリフェニルシラン(Sif87)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イル)ジフェニルシラン(Sif88)、1,3-ビス[3,5-ジ(ピリジン-3-イル)フェニル]ベンゼン(BmPyPhB)及び/または4,4'-ビス[2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジニル)]-1,1'-ビフェニル(BTB)を含むものであってもよい。選択的に、該ETLは、8-ヒドロキシキノリノラトリウム(Liq)のような物質によってもドーピングされる。該電子輸送層(ETL)は、また、正孔を阻止することができる。または、一般的にEMLとETLとの間に正孔阻止層(HBL)が導入される。

【0074】

正孔阻止層(HBL)は、例えば、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン=バソクプロイン(BCP)、4,6-ジフェニル-2-(3-(トリフェニルシリル)フェニル)-1,3,5-トリアジン、9,9'-(5-(6-(1,1'-ビフェニル)-3-イル)-2-フェニルピリミジン-4-イル)-1,3-フェニレン)ビス(9H-カルバゾール)、ビス(8-ヒドロキシ-2-メチルキノリン)-(4-フェニルフェノキシ)アルミニウム(BAlq)、2,9-ビス(ナフタレン-2-イル)-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(NBphen)、ア

10

20

30

40

50

ルミニウムートリス（８－ヒドロキシキノリン）（ Alq_3 ）、ジフェニル－４－トリフェニルシリルフェニル－ホスフィンオキシド（ $TSP-O-1$ ）、２，４，６－トリス（ビフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（ $T2T$ ）、２，４，６－トリス（トリフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（ $T3T$ ）、２，４，６－トリス（９，９’－スビロピフルオレン－２－イル）－１，３，５－トリアジン（ TST ）及び／または１，３，５－トリス（ N －カルバゾリル）ベンゾール／１，３，５－トリス（カルバゾール）－９－イル）ベンゼン（ TCB/TCP ）を含むものであってもよい。

【００７５】

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

【００７６】

少なくとも１つの本発明による有機分子を含む $OLED$ は、選択的に、電子輸送層（ $E-TL$ ）とカソード層 C との間に、保護層（電子注入層（ EIL ）とも称される）をさらに含んでもよい。該層は、フッ化リチウム、フッ化セシウム、銀、８－ヒドロキシキノリノラトリチウム（ $Li-q$ ）、 Li_2O 、 BaF_2 、 MgO 及び／または NaF を含むものであってもよい。

【００７７】

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

【００７８】

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

紫色：＜３８０～４２０ nmの波長範囲

深青色：＜４２０～４８０ nmの波長範囲

空色：＜４８０～５００ 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。

【００７９】

エミッタ分子（すなわち、エミッタ材料）と係わり、そのような色相は、主発光ピークの最大発光を示す。したがって、例えば、深青色エミッタは、＜４２０～４８０ nm範囲で最大発光を有し、空色エミッタは、＜４８０～５００ nm範囲で最大発光を有し、緑色エミッタは、＜５００～５６０ nm範囲で最大発光を有し、赤色エミッタは、＜６２０～８００ nm範囲で最大発光を有する。

【００８０】

深青色エミッタは、好ましくは、４７５ nm未満、より好ましくは、４７０ nm未満、より一層好ましくは、４６５ nm未満、またははなはだしくは、４６０ nm未満の最大発光を有することができる。これは、一般的に、４２０ nm超過、好ましくは、４３０ nm超過、より好ましくは、４４０ nm超過、またははなはだしくは、４５０ nm超過である。好ましい実施形態において、本発明による有機分子は、４２０ないし５００ nm、好ましくは、４３０ないし４９０ nm、より好ましくは、４４０ないし４８０ nm、最も好ましくは、４５０ないし４７０ nmにおいて最大発光を示し、一般的に、ポリ（メチルメタクリレート）（ $PMMA$ ）、 $mCBP$ 内の１～５重量％、好ましくは、２重量％の本発明

による有機分子でスピンコーティングされた膜、あるいは代案としては、有機溶媒、好ましくは、DCMまたはトルエン内の 0.001 mg/mL の本発明による有機分子から、室温（すなわち、（約） 20°C ）で測定される。

【0081】

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

10

【0082】

さらに他の実施形態は、 1000 cd/m^2 おいて、 8% 超過、好ましくは、 10% 超過、より好ましくは、 13% 超過、より一層好ましくは、 15% 超過、またははなはだしくは、 20% 超過の外部量子効率を示し、及び／または、 420 nm ないし 500 nm 、好ましくは、 430 nm ないし 490 nm 、より好ましくは、 440 nm ないし 480 nm 、最も好ましくは、 450 nm ないし 470 nm の最大発光を示し、及び／または、 500 cd/m^2 において、 100 h 超過、好ましくは、 200 h 超過、より好ましくは、 400 h 超過、最も好ましくは、 750 h 超過、またははなはだしくは、 1000 h 超過のLT80値を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

20

【0083】

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

30

【0084】

さらに他の好ましい実施形態は、少なくとも1つの本発明による有機分子を含み、明確な色点で発光するOLEDに係わるものである。好ましくは、OLEDは、狭い発光帯域（小さい半値幅（full width at half maximum: FWHM））を有する光を放出する。好ましい実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDは、 0.30 eV 未満、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、 0.1 eV 未満、または 0.17 eV 未満の、主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

【0085】

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

40

【0086】

本発明による有機分子と追加材料の組み合わせ

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

【0087】

例えば、当業者は、EMLが、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光す

50

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

【0088】

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

10

【0089】

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

【0090】

光電子素子における本発明による有機分子の使用のより好ましい実施形態において、前記光電子素子はO L E Dであり、E M Lに少なくとも1つの本発明による有機分子を含む。

【0091】

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

20

【0092】

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（O L E D）において、エミッタ材料（すなわち、発光性ドーパント）からの発光は、励起一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態S₁）からの蛍光、及び励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態T₁）からの燐光を含む。

【0093】

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

30

【0094】

本発明の文脈において、遅延蛍光材料は、逆項間交差（R I S C；すなわち、アップ項間交差または逆項間交差）により、励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態T₁）から励起一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態S₁）に達することができ、また、そのように達した励起一重項状態（一般的に、S₁）から電子基底状態に戻る時に発光することができる材料である。励起三重項状態（一般的に、T₁）から励起一重項状態（一般的に、S₁）へのR I S C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（D F）という。励起三重項状態（一般的に、T₁から）から励起一重項状態（一般的に、S₁まで）へのR I S C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（T A D F）という。したがって、T A D F材料は、前述のように熱活性化遅延蛍光（T A D F）を発光することができる材料である。蛍光エミッタFの最低励起一重項状態エネルギー準位E（S₁^E）と最低励起三重項状態エネルギー準位E（T₁^E）とのエネルギー差ΔE_{S₁T₁}が減少すれば、R I S Cによる最低励起一重項状態から最低励起三重項状態への切り替えが高効率で起こることは当業者に知られている。したがって、T A D F材料が一般的に小さいΔE_{S₁T₁}値を有するということは、当業者の

40

50

一般知識の一部を形成する（以下参照）。当業者に知られているように、TADF材料は、単純に前述のようにTADFの後続放出と共に、励起三重項状態から励起一重項状態へのそれ自体のRISCが可能な材料ではない。TADF材料は、事実上2種類の材料、好ましくは、2つのホスト材料H^B、より好ましくは、p-ホスト材料H^P及びn-ホスト材料H^Nから形成されるエキシプレックスであることが当業者に知られている（以下参照）。

【0095】

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

【0096】

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

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

（ii）2つの時間領域で発光スペクトルの形態が一致する。

【0097】

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。

【0098】

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

【0099】

【数1】

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

【0100】

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

【0101】

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

【0102】

本発明の文脈において、TADF材料E^Bは、最低励起一重項状態エネルギー準位E（S1^E）と最低励起三重項状態エネルギー準位E（T1^E）とのエネルギー差に該当するΔE_{ST}値が0.4 eV未満、好ましくは、0.3 eV未満、より好ましくは、0.2 eV未満、より一層好ましくは、0.1 eV未満、またははなはだしくは、0.05 eV未

満の値を示すことを特徴とする。TADF材料E^Bの ΔE_{ST} 値を決定する方法は、本文の後項で説明されている。

【0103】

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

【0104】

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

【0105】

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

【0106】

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

【0107】

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

（i）カルバゾリルジシアノベンゼン化合物

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

（ii）カルバゾリルシアノピリジン化合物

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

（iii）カルバゾリルシアノビフェニル化合物

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

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

【0108】

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

10

20

30

40

50

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。

【0109】

TADF材料の他の一群は、ドナーモイエティ（主に、カルバゾリル置換基）が結合されたアクセプターモイエティとして、ベンゾフェノンのようなジアリールケトン、または4-ベンゾイルピリジン、9,10-アントラキノン、9H-キサテン-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-キサテン-9-オン）をそれぞれ含む。

【0110】

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

【0111】

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

【0112】

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

【0113】

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

【0114】

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

【0115】

10

20

30

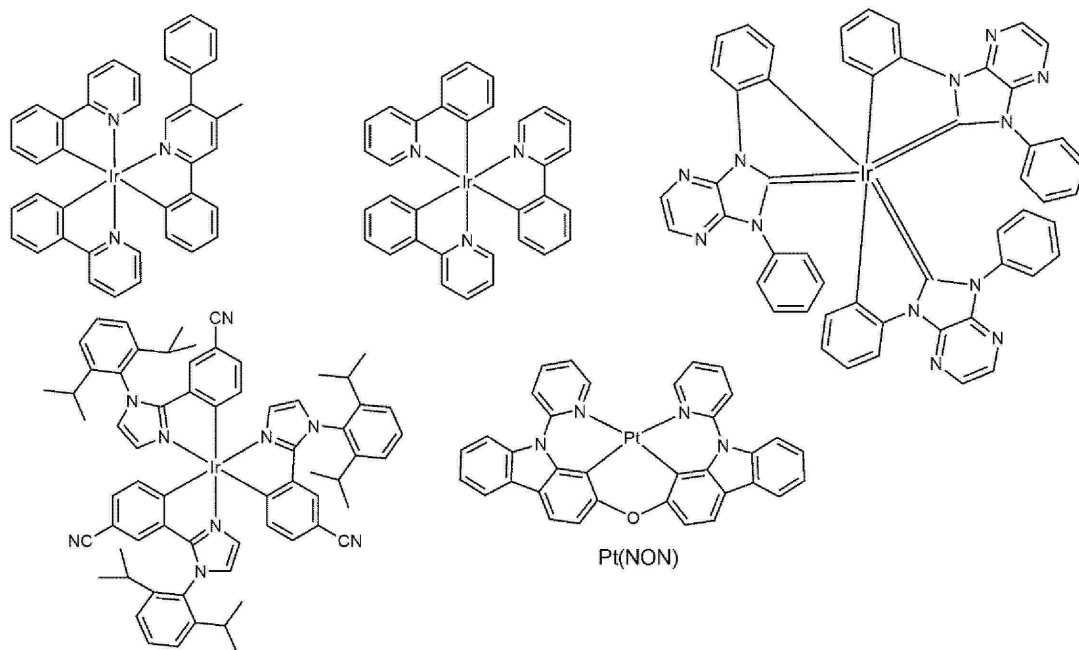
40

50

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

【0116】

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



10

20

【0117】

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

30

【0118】

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

40

【0119】

当業者に知られているように、エミッタ（例えば、小さい FWHM エミッタ S^B ）の半値幅（FWHM）は、それぞれの発光スペクトル（蛍光エミッタ用蛍光スペクトル及び燐光エミッタ用燐光スペクトル）から容易に決定される。記録された全ての FWHM 値は、一般的に、主発光ピーク（すなわち、強度が最も高いピーク）を示す。FWHM（本明細書において、好ましくは、電子ボルト eV で記録される）を決定する手段は、当業者の常識の一部である。例えば、発光スペクトルの主発光ピークが、発光スペクトルからナノメ

50

ートル (nm) で得られた 2 つの波長 λ_1 及び λ_2 において最大発光の半分 (すなわち、最大発光強度の 50%) に達する場合、電子ボルト (eV) の FWHM は、一般的に (及び、本明細書において)、以下の方程式を使用して決定される:

【0120】

【数 2】

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

【0121】

10

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

【0122】

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

【0123】

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

20

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

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

【0124】

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

30

【0125】

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

40

【0126】

EML は、少なくとも 1 つの p-ホスト H^P と 1 つの n-ホスト H^N を有するいわゆる混合ホストシステムを含む。ここで、n-ホスト H^N は、ピリジン、ピリミジン、ベンゾ

50

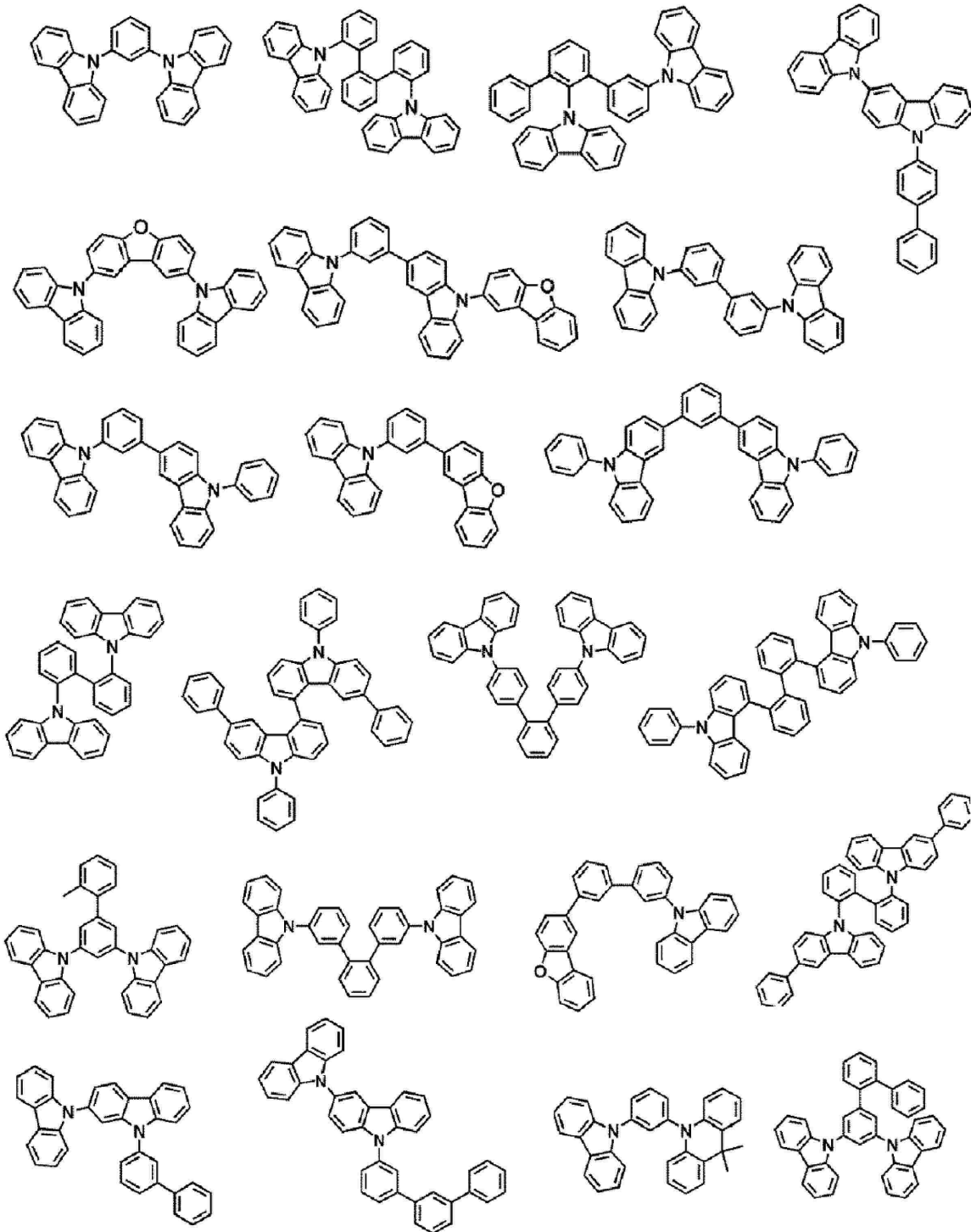
ピリミジン、1, 3, 5-トリアジン、1, 2, 4-トリアジン及び1, 2, 3-トリアジンから誘導された基を含み、p-ホストH^Pは、インドール、イソインドール、好ましくは、カルバゾールから誘導された基を含む。

【0127】

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

【0128】

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



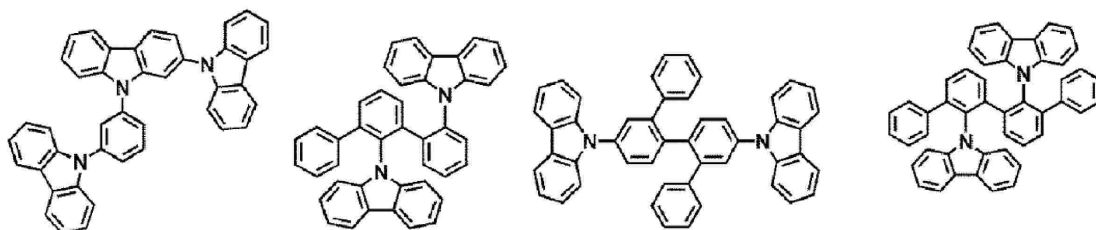
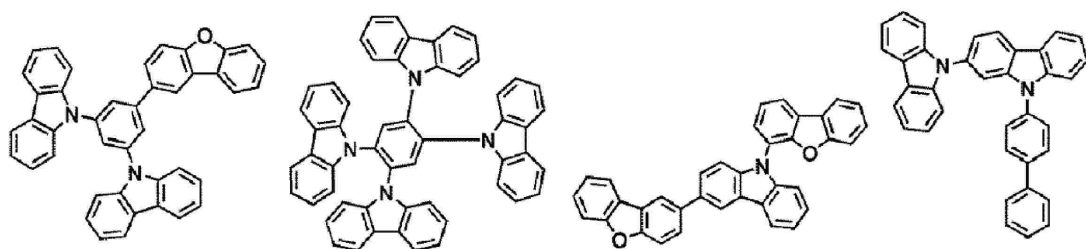
10

20

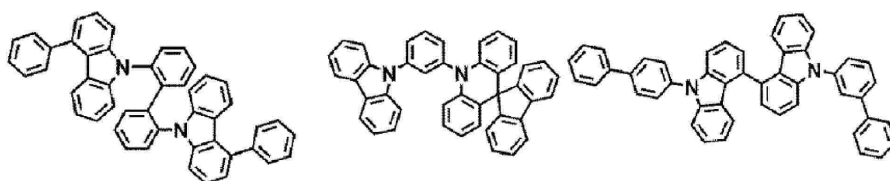
30

40

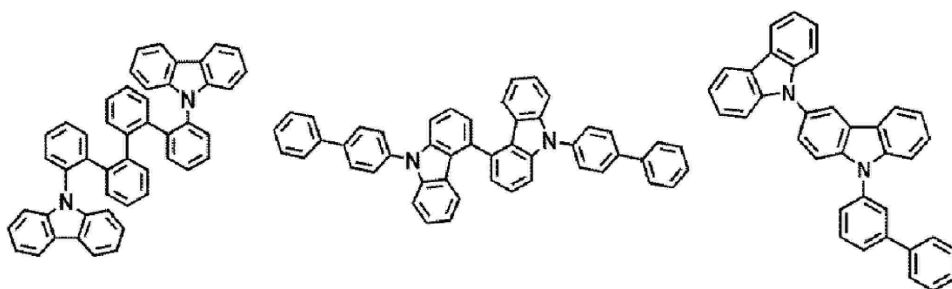
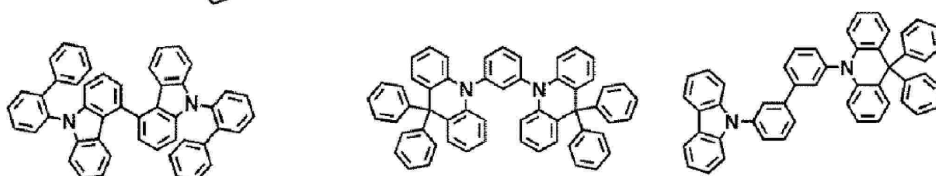
50



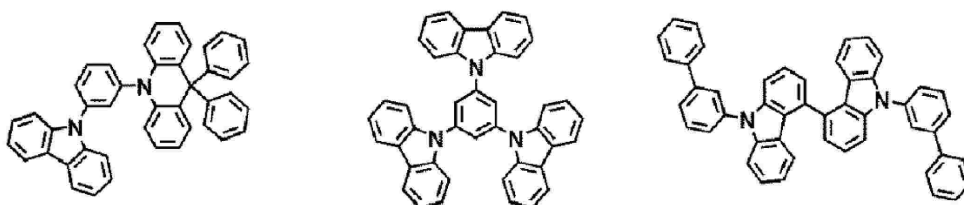
10



20

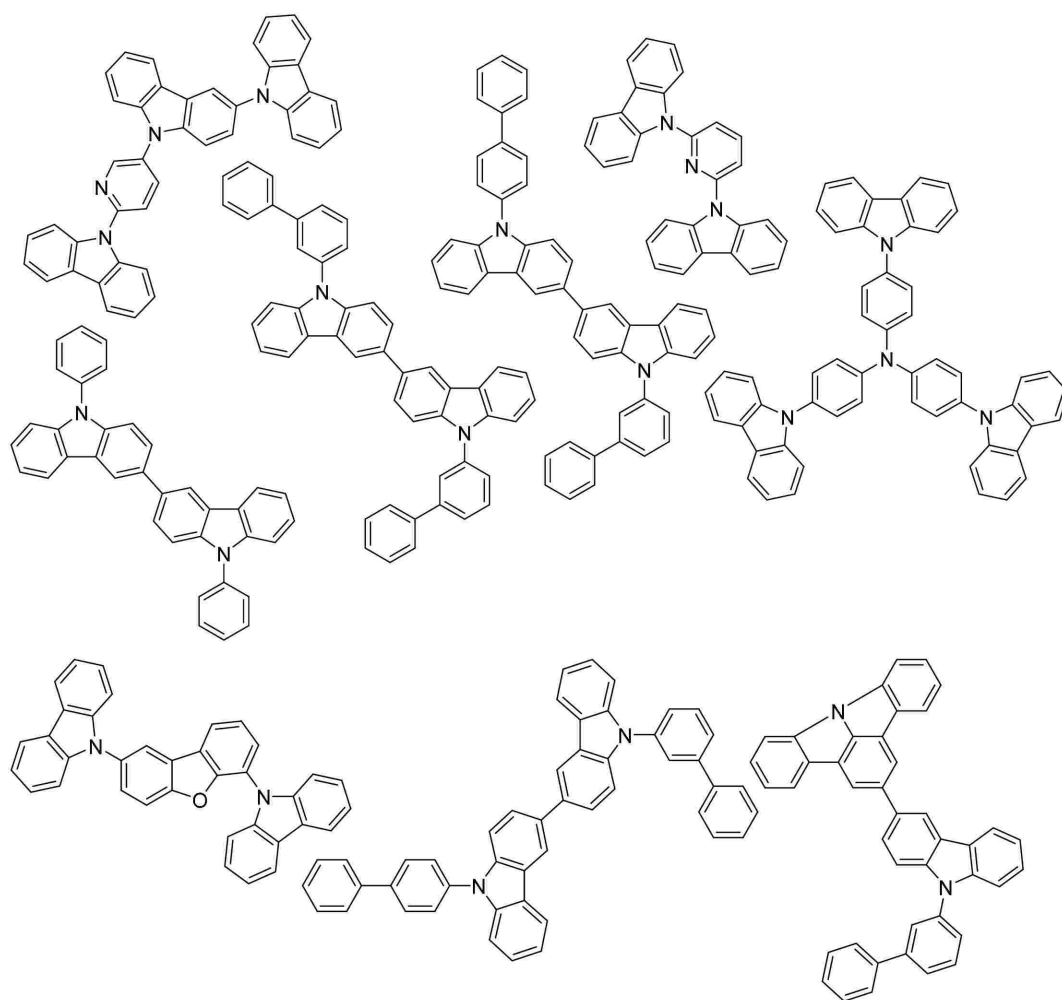


30



40

50



10

20

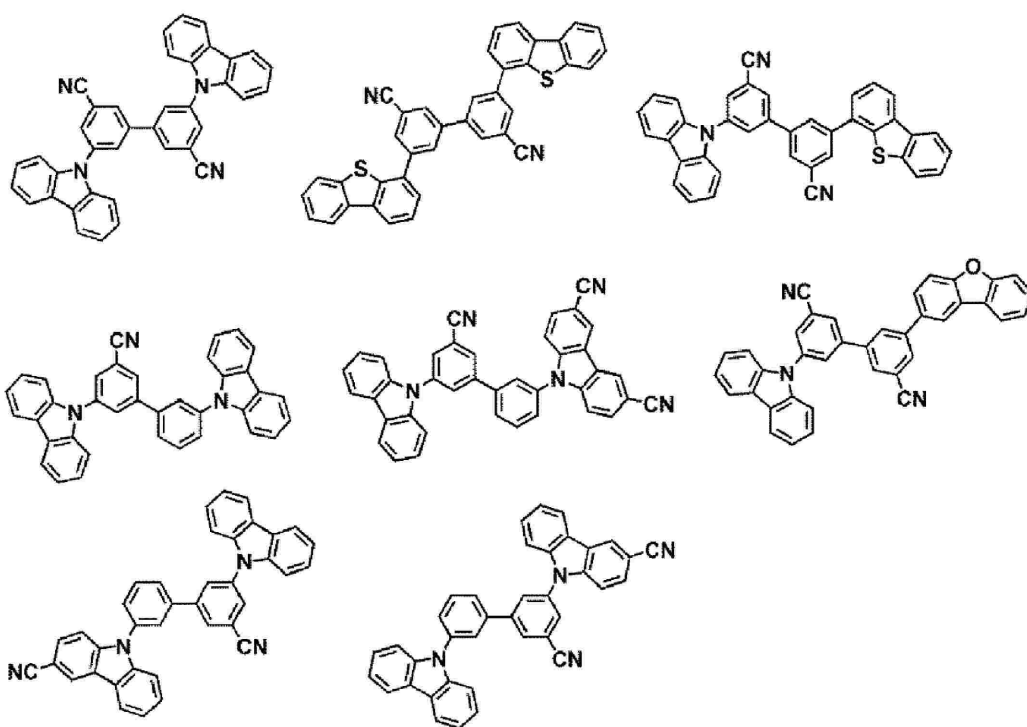
【 0 1 2 9 】

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

30

40

50



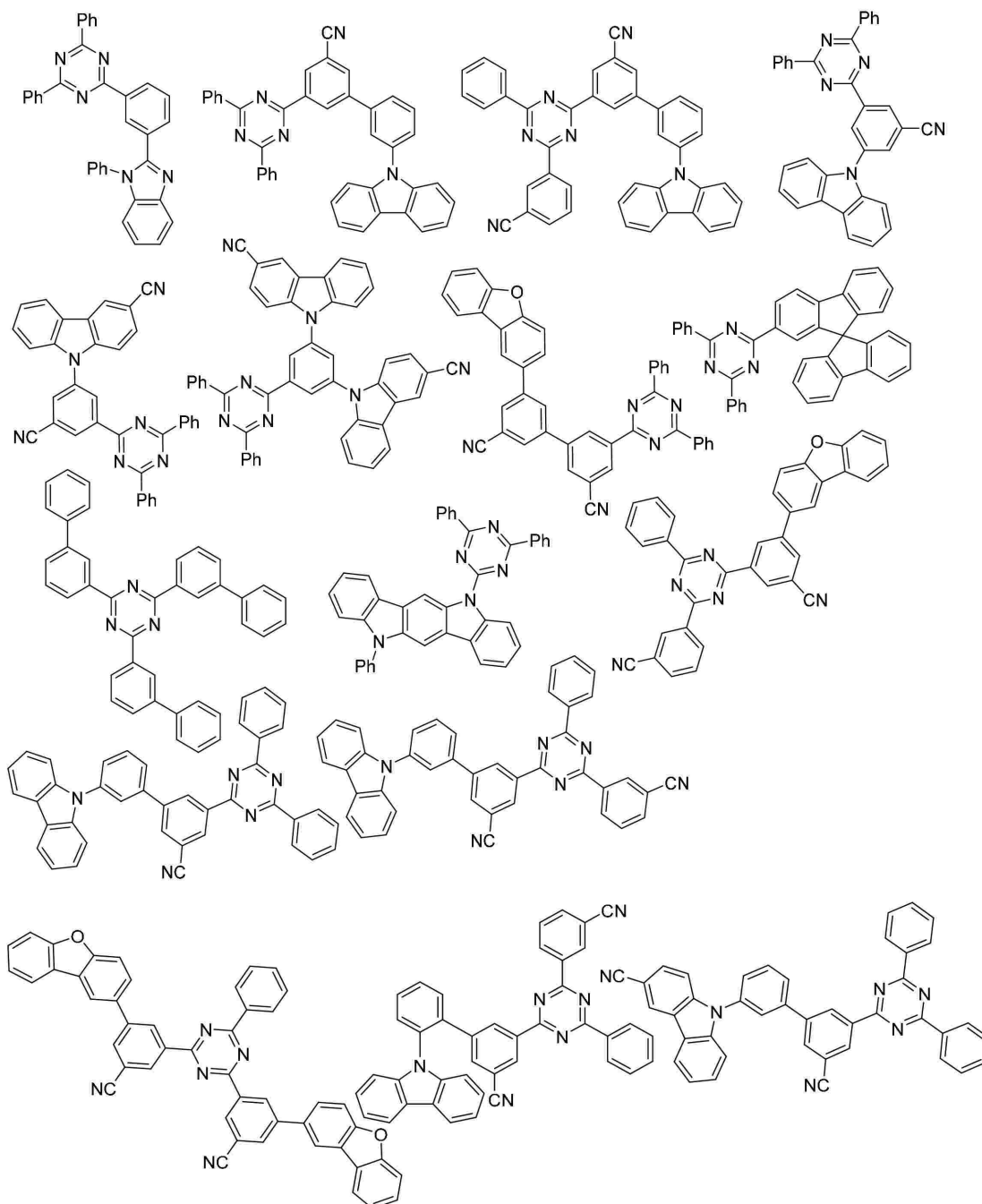
10

20

30

40

50



10

20

30

【0130】

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

40

50

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

【0131】

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

10

【0132】

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

20

【0133】

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

【0134】

本発明によれば、TTA 材料は、最低励起三重項状態（T₁^N）から三重項・三重項消滅を示して、三重項・三重項消滅した第 1 励起一重項状態 S₁^N を生成し、T₁^N のエネルギーの最大 2 倍のエネルギーを有することを特徴とする。

30

【0135】

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 を生成し、T₁^N エネルギーの 1.01 ないし 2 倍、1.1 ないし 1.9 倍、1.2 ないし 1.5 倍、1.4 ないし 1.6 倍、または 1.5 ないし 2 倍のエネルギーを有することを特徴とする。

【0136】

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

【0137】

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

40

【0138】

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

【0139】

50

好ましい実施形態において、TTA材料は、より大きい一重項・三重項エネルギー分割、すなわち、少なくとも1.1倍、少なくとも1.2倍、少なくとも1.3倍、少なくとも1.5倍、好ましくは、2倍以下の、第1励起一重項状態 S_1^N と最低励起三重項状態 T_1^N とのエネルギー差を有する。

【0140】

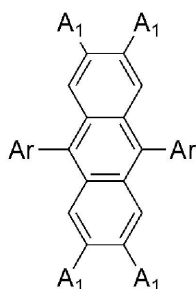
本発明の好ましい実施形態において、TTA材料 H^{TTA} は、アントラセン誘導体である。

【0141】

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

【0142】

[化学式4]



ここで、

それぞれの Ar は、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

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

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

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

【0143】

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

ここで、

それぞれの Ar は、互いに独立して、下記からなる群から選択され、

C_6-C_{20} アリール、 C_3-C_{20} ヘテロアリール、ハロゲン及び C_1-C_{10} （ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換された C_6-C_{20} アリール、及び

C₆－C₂₀アリール、C₃－C₂₀ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₁₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₃－C₂₀ヘテロアリール、

それぞれのA₁は、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

水素、

重水素、

C₆－C₂₀アリール、C₃－C₂₀ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₁₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₆－C₂₀アリール、

C₆－C₂₀アリール、C₃－C₂₀ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₁₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₃－C₂₀ヘテロアリール、及び

C₆－C₆₀アリール、C₃－C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されたC₁－C₁₀（ヘテロ）アルキル。

【0144】

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

【0145】

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

これは、C₆－C₆₀アリール、C₃－C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されうる。

【0146】

一実施形態において、H^TT Aは、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、2つのA_rは、それぞれ、互いに独立して、フェニル、ナフチル、フェナントリル、ピレニル、トリフェニレニル、ジベンゾアントラセニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、アントラセニル、フェナントレニル、ベンゾナフトフラニル、ベンゾナフトチオフェニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニルからなる群から選択された残基であり、

これは、C₆－C₆₀アリール、C₃－C₅₇ヘテロアリール、ハロゲン及びC₁－C₄₀（ヘテロ）アルキルからなる群から選択された1以上の残基で選択的に置換されうる。

【0147】

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

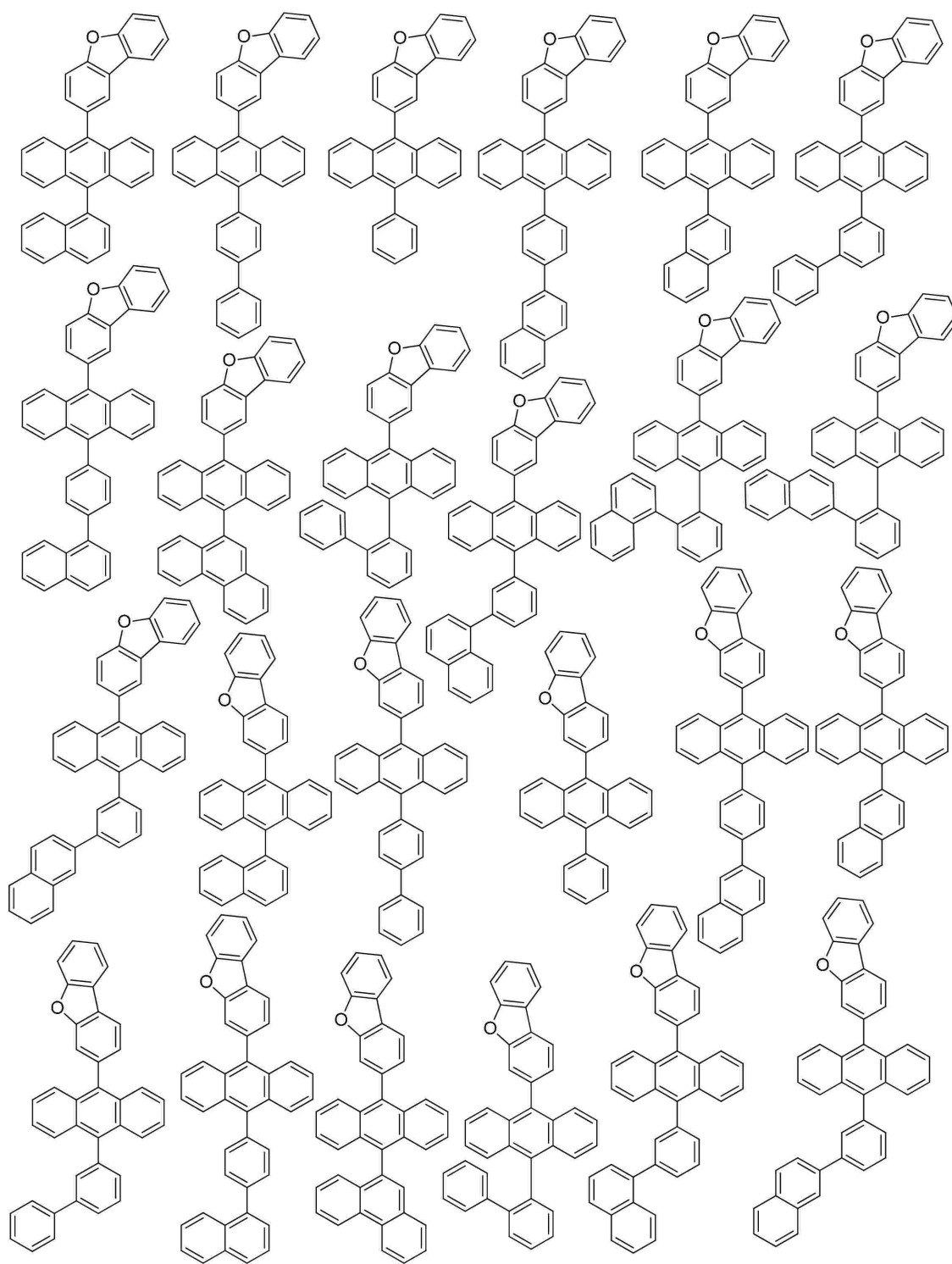
10

20

30

40

50



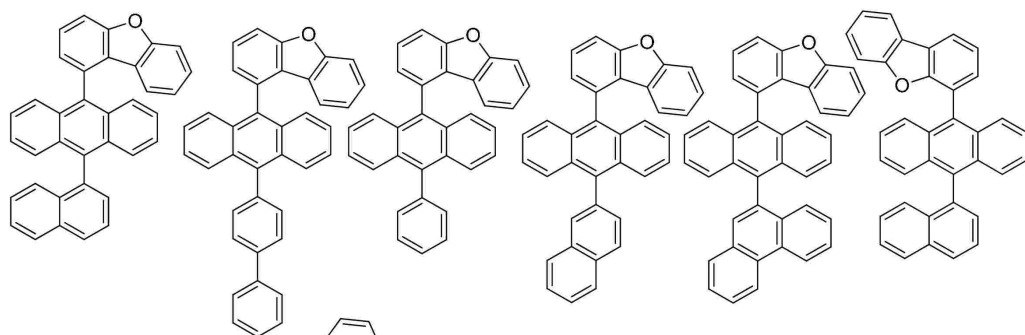
10

20

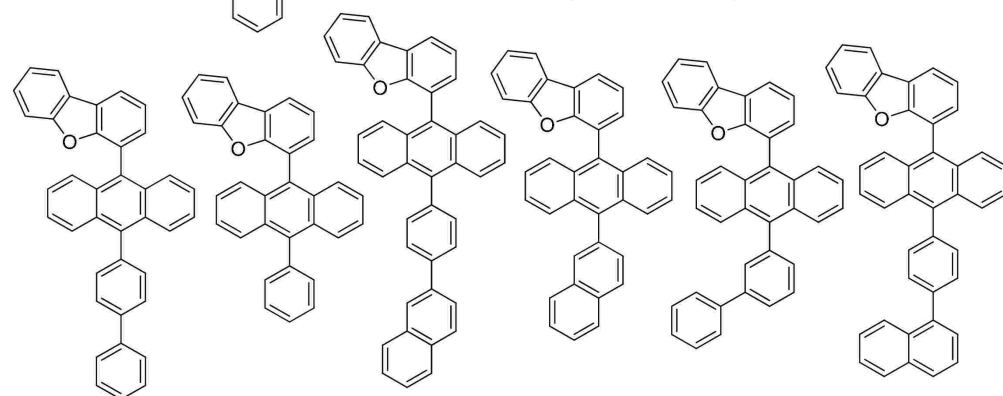
30

40

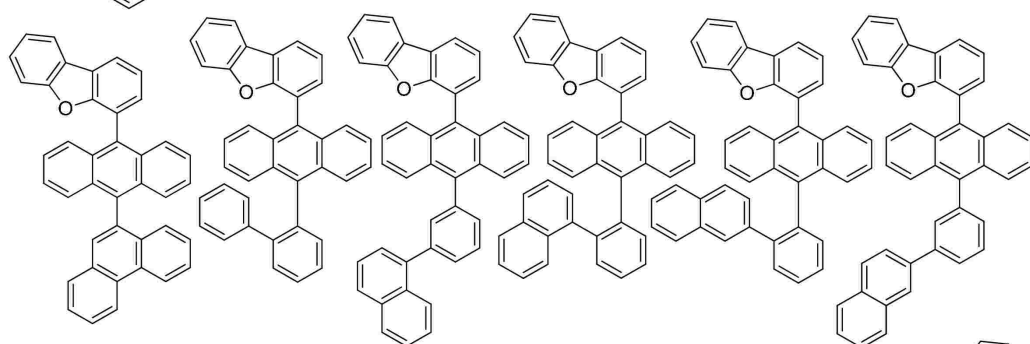
50



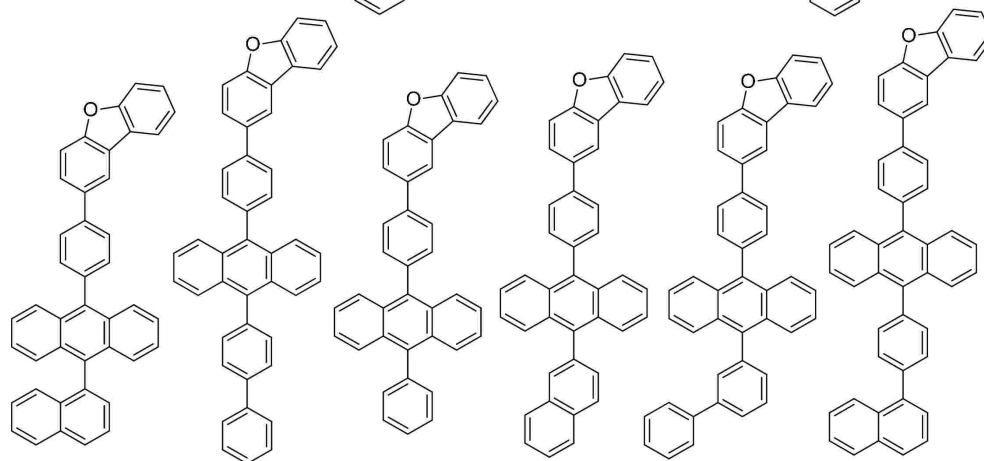
10



20

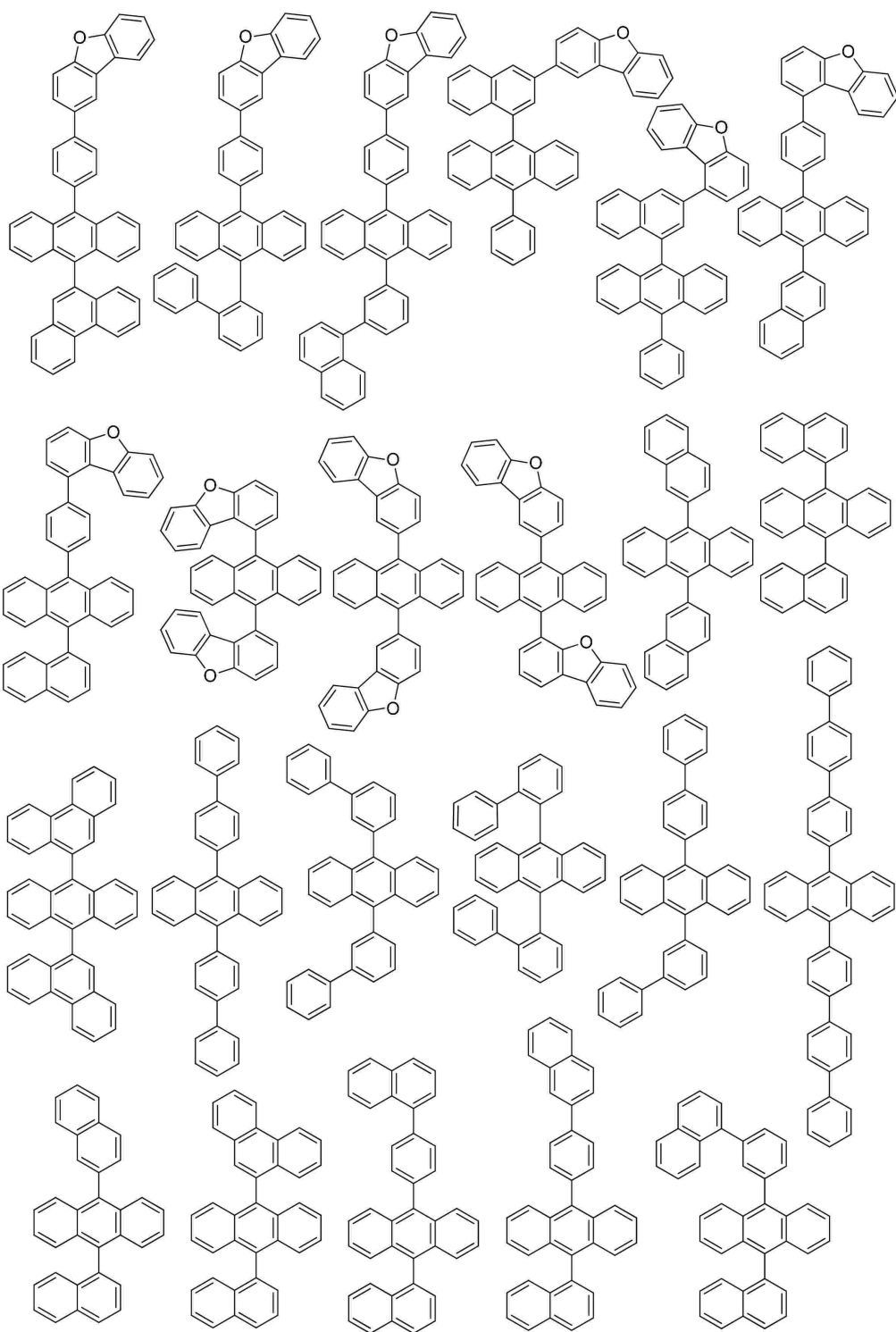


30



40

50



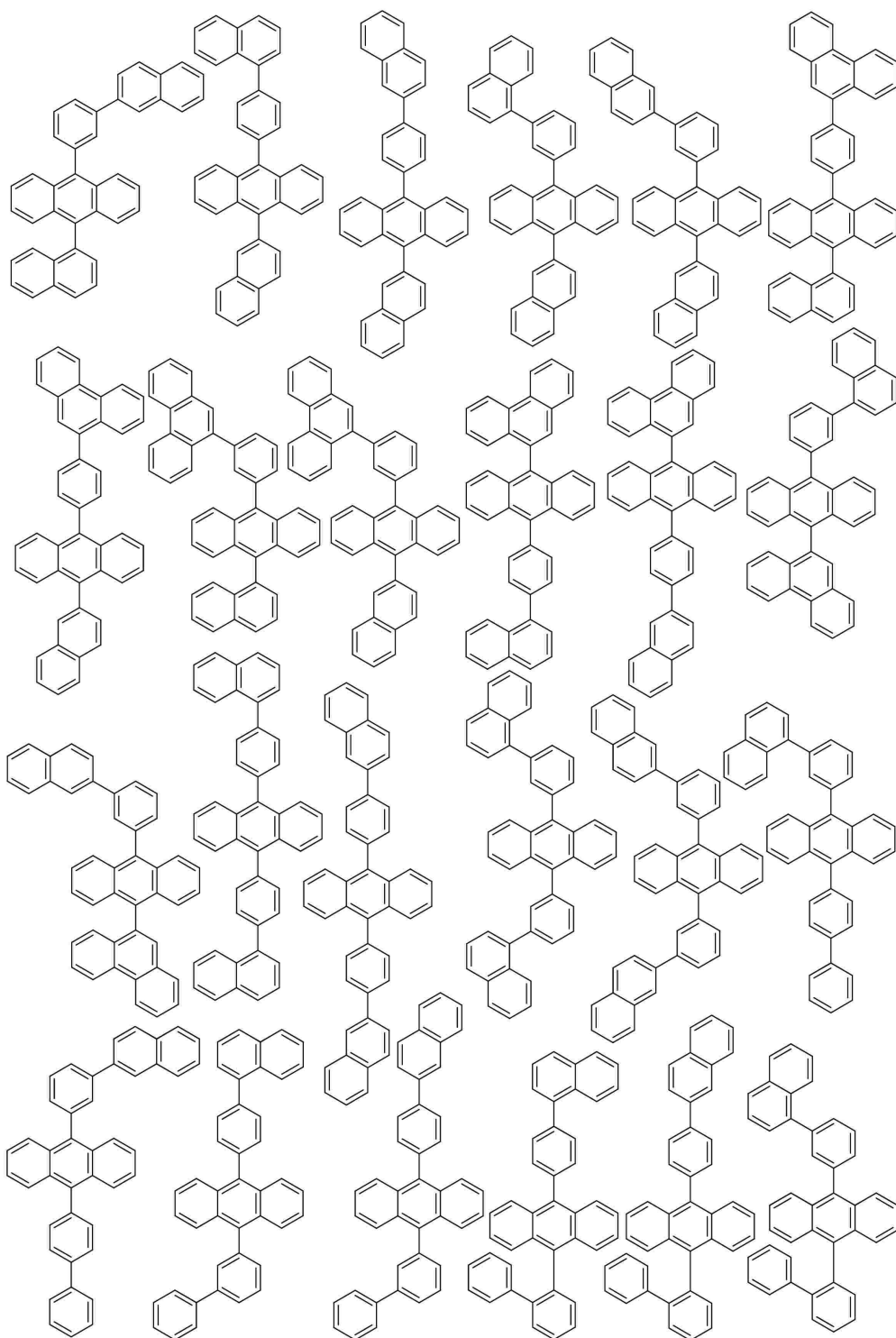
10

20

30

40

50



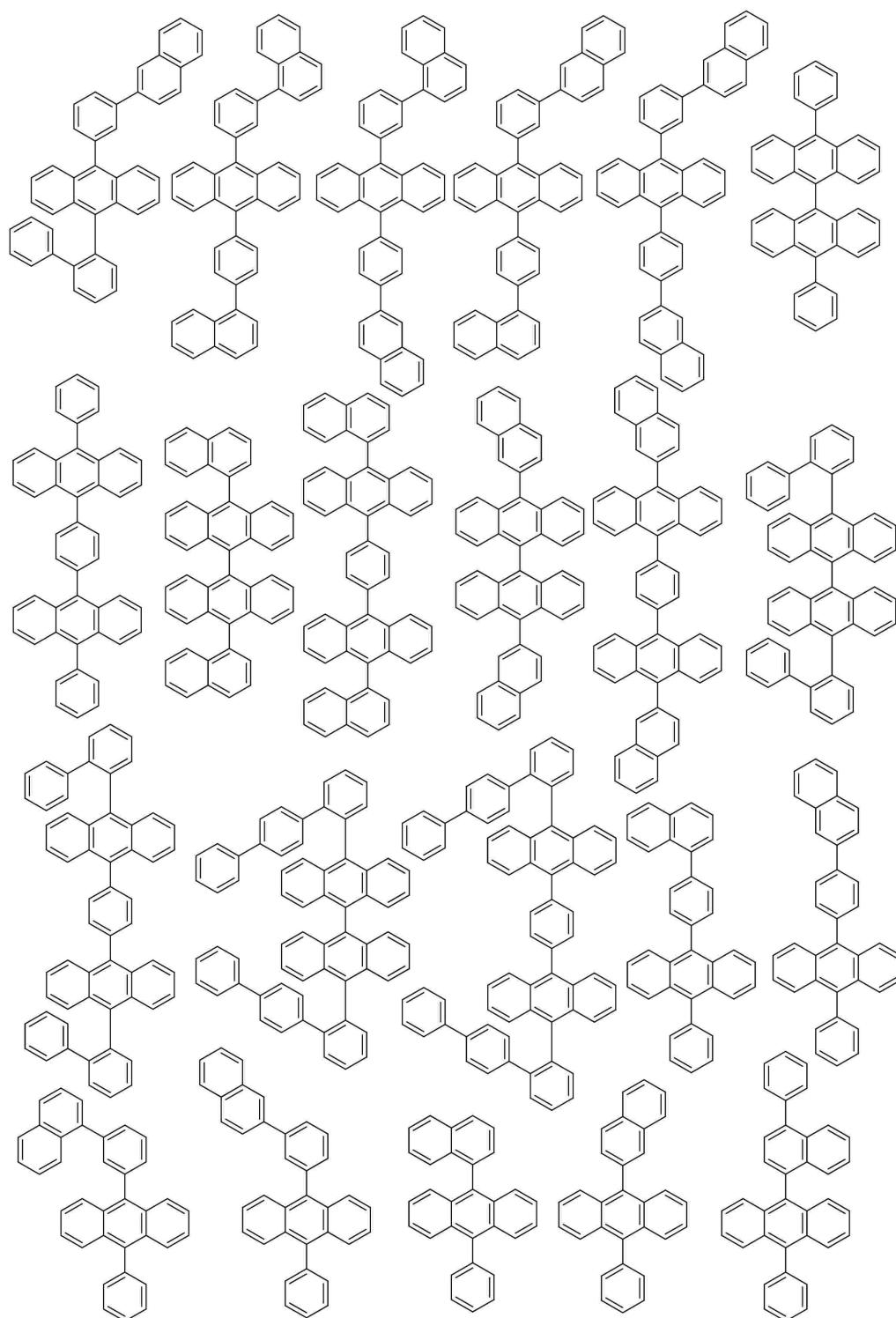
10

20

30

40

50



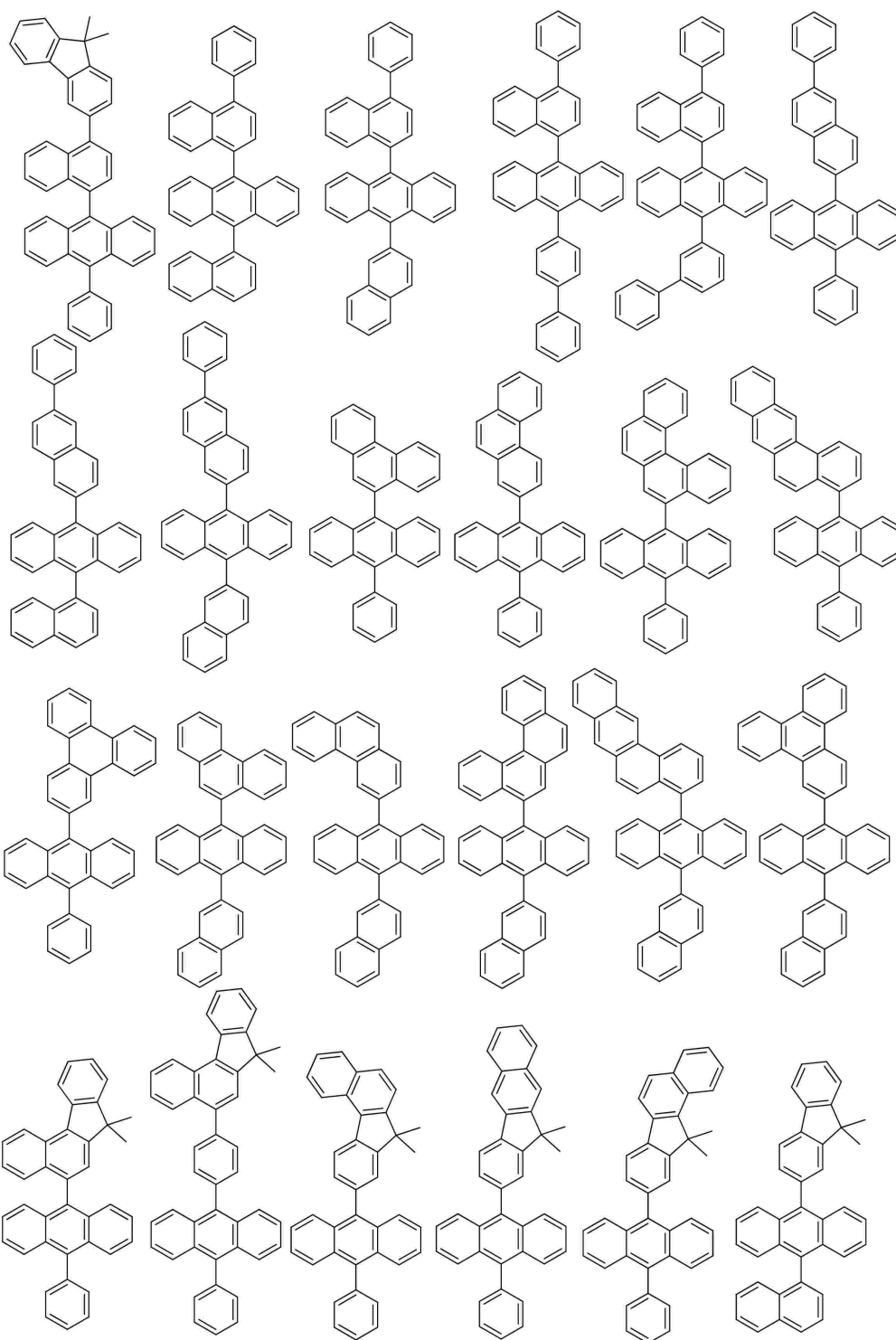
10

20

30

40

50



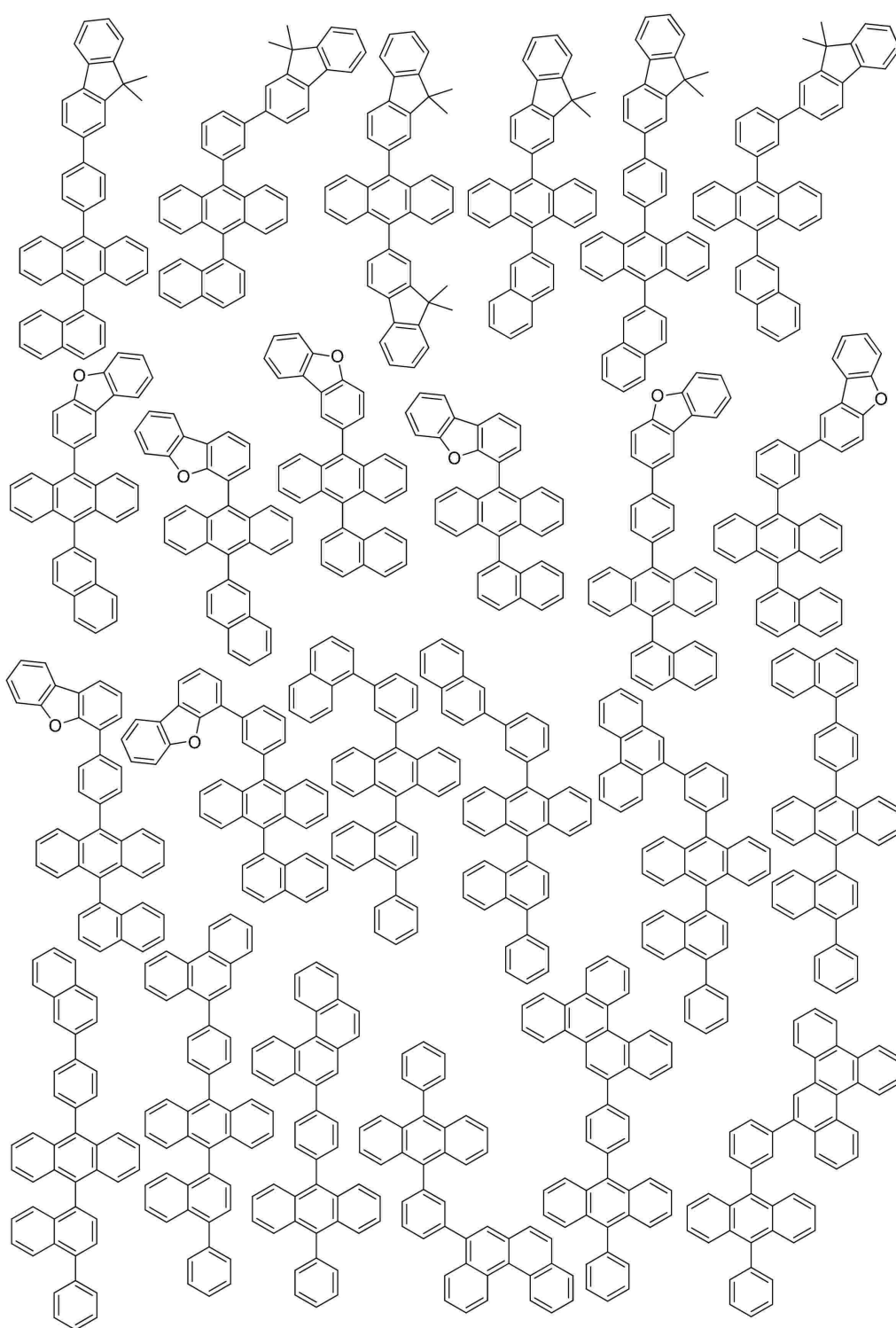
10

20

30

40

50



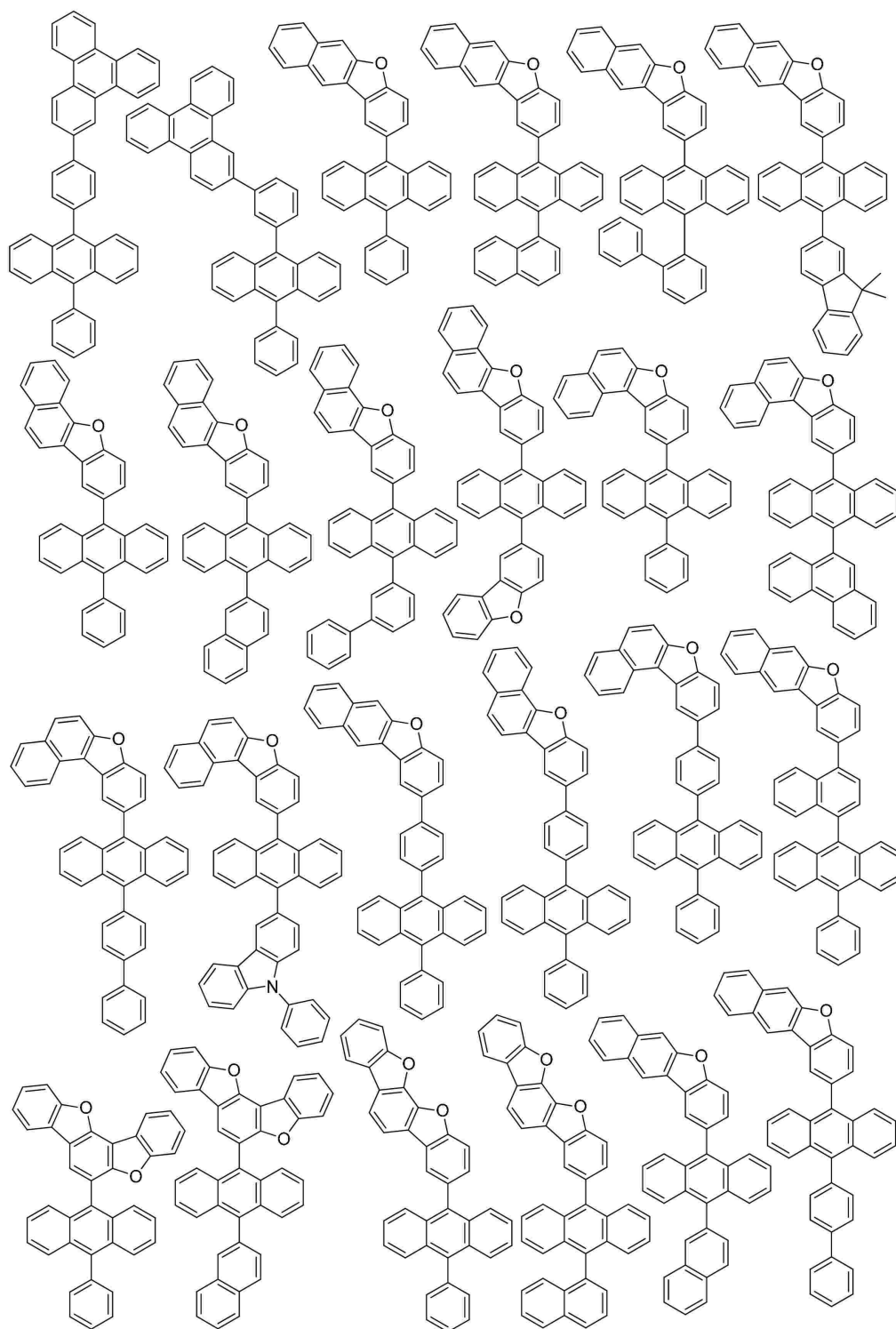
10

20

30

40

50



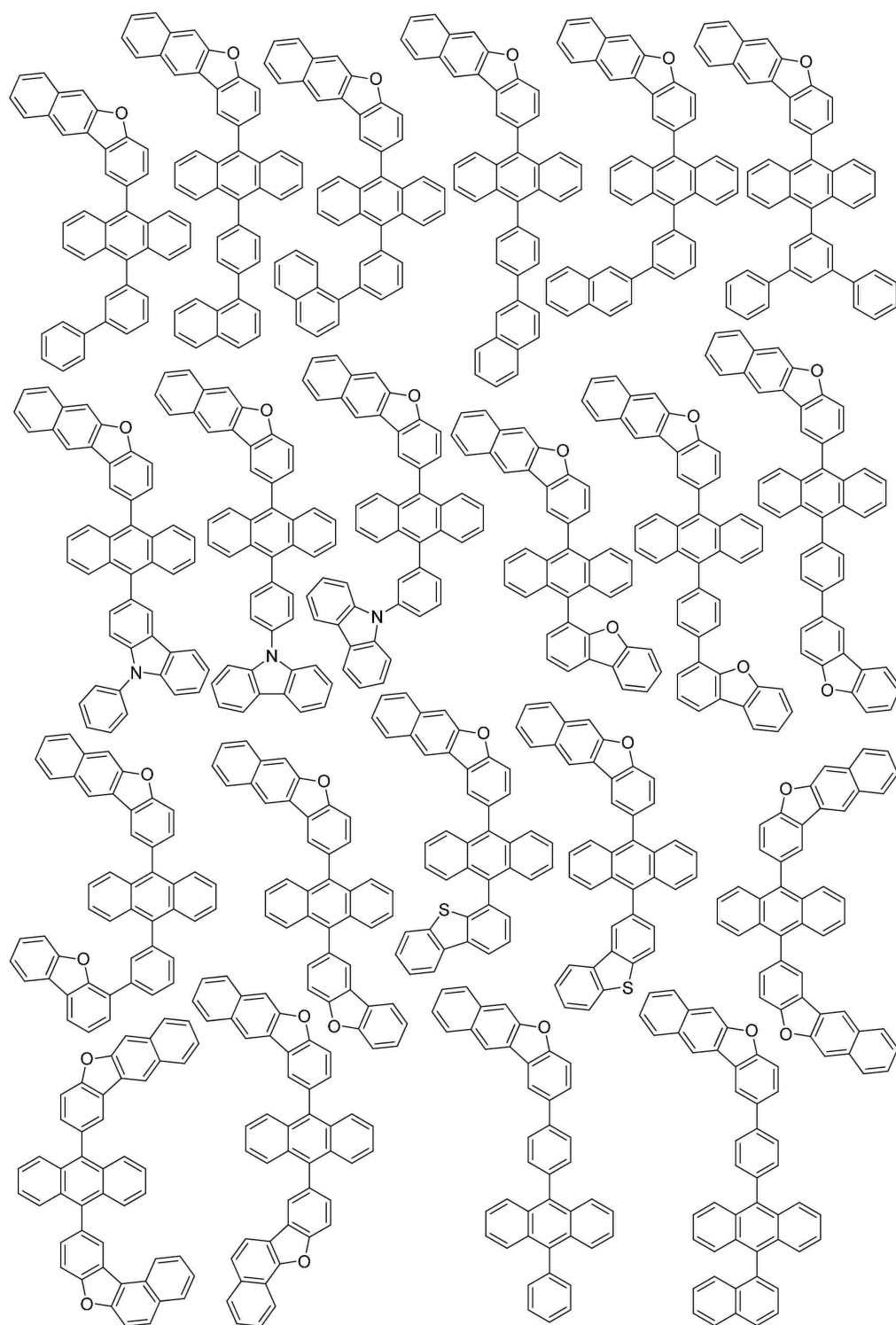
10

20

30

40

50



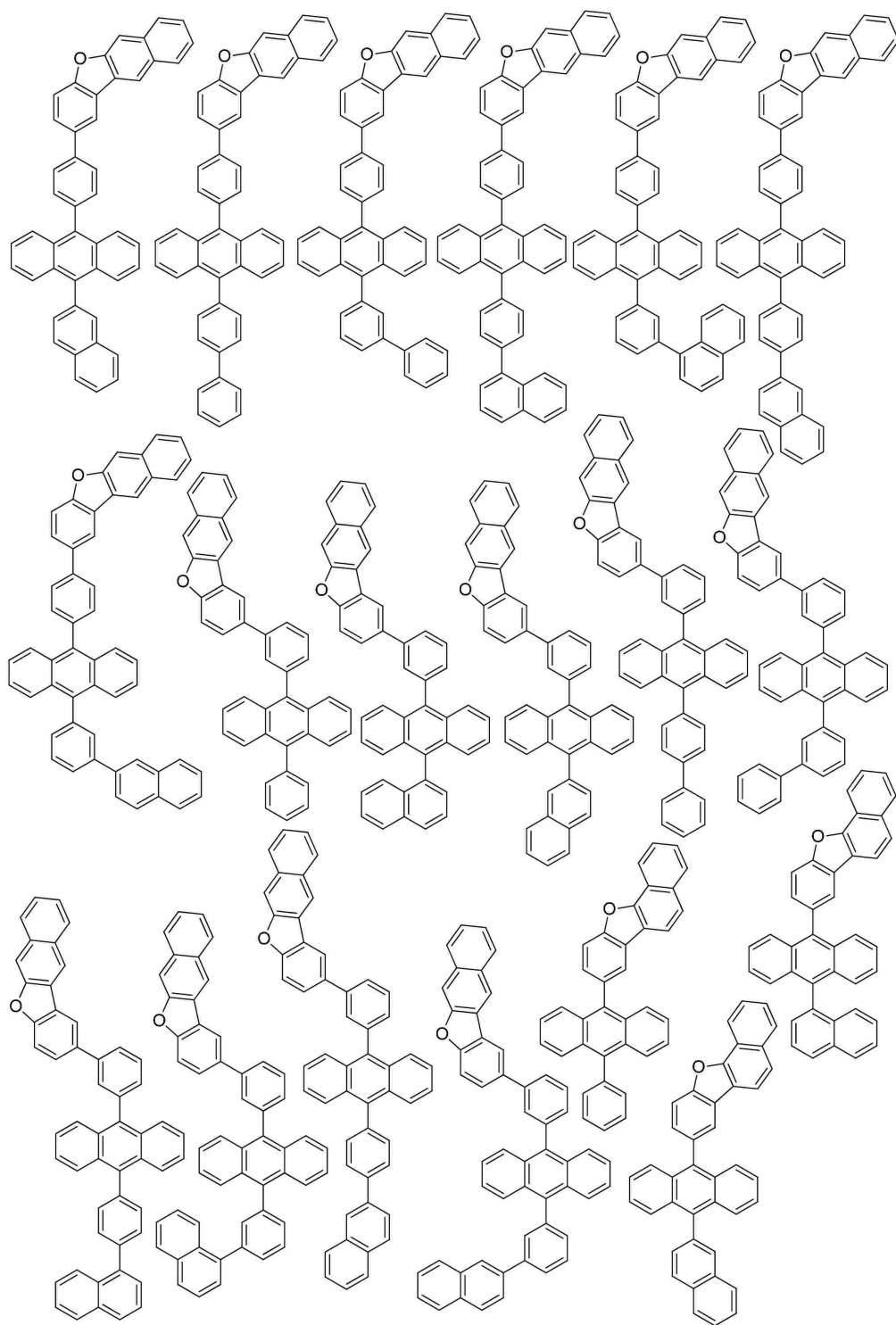
10

20

30

40

50



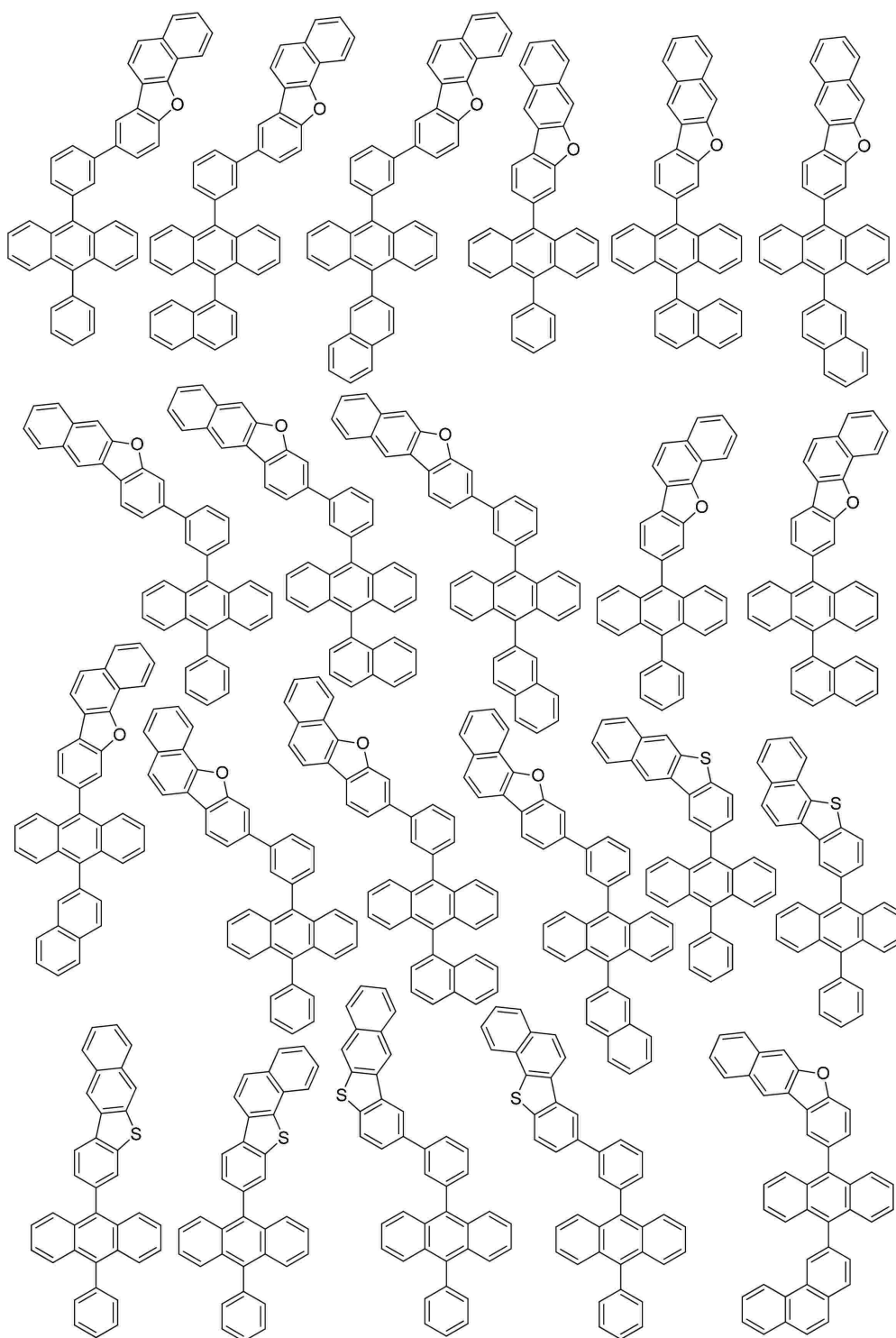
10

20

30

40

50



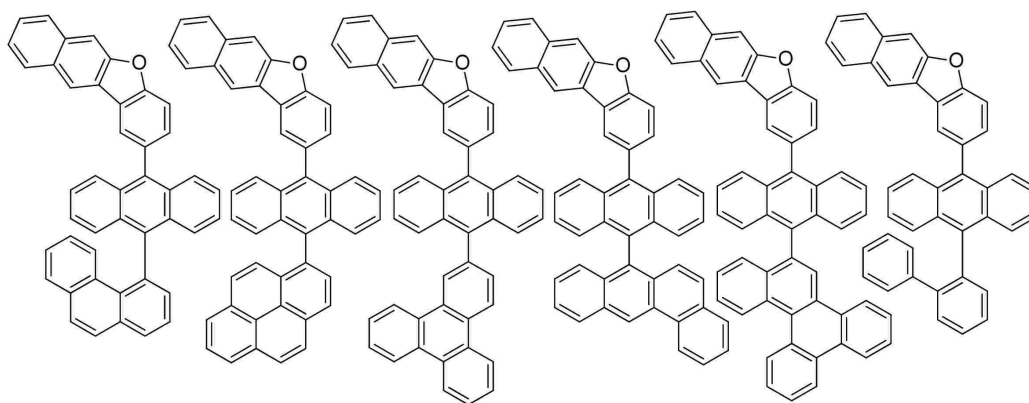
10

20

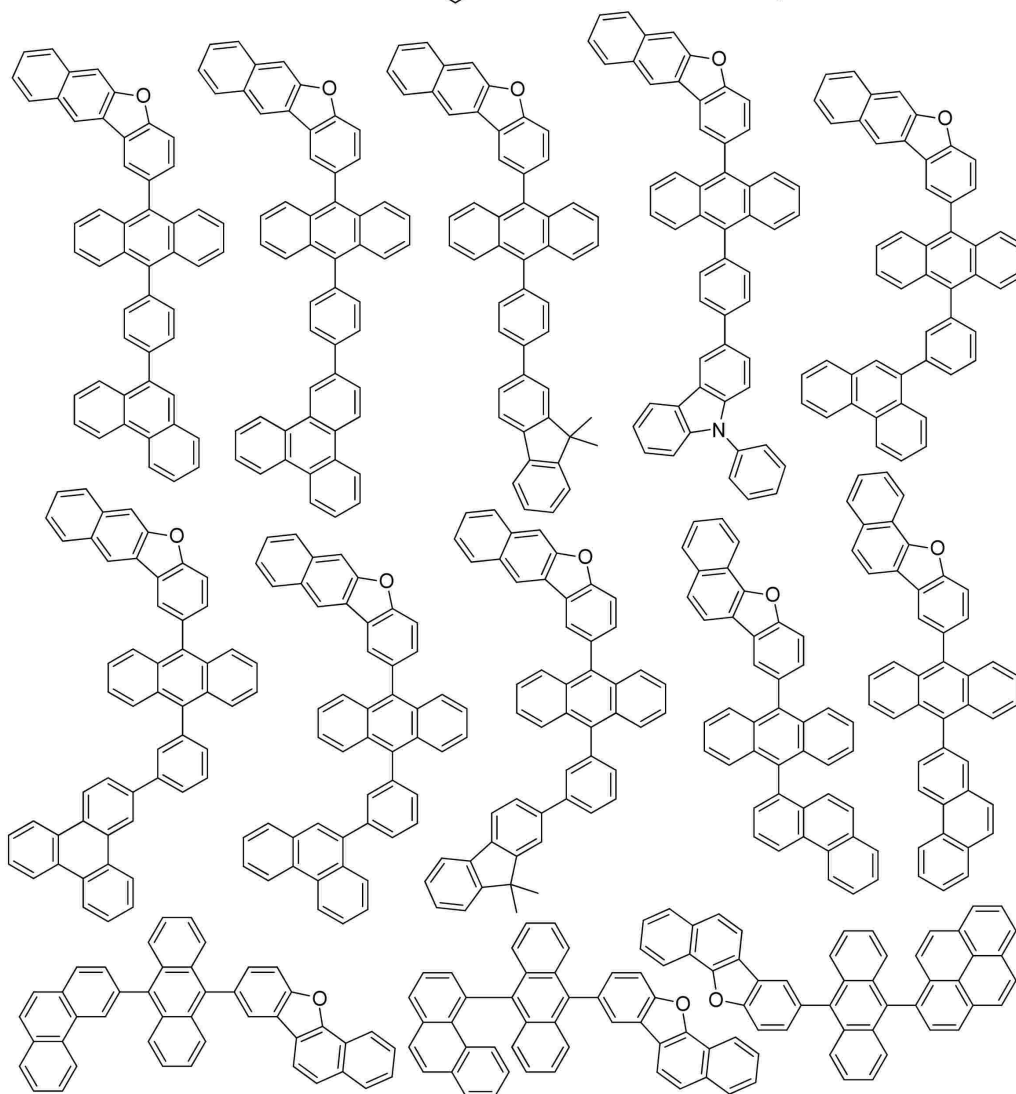
30

40

50



10

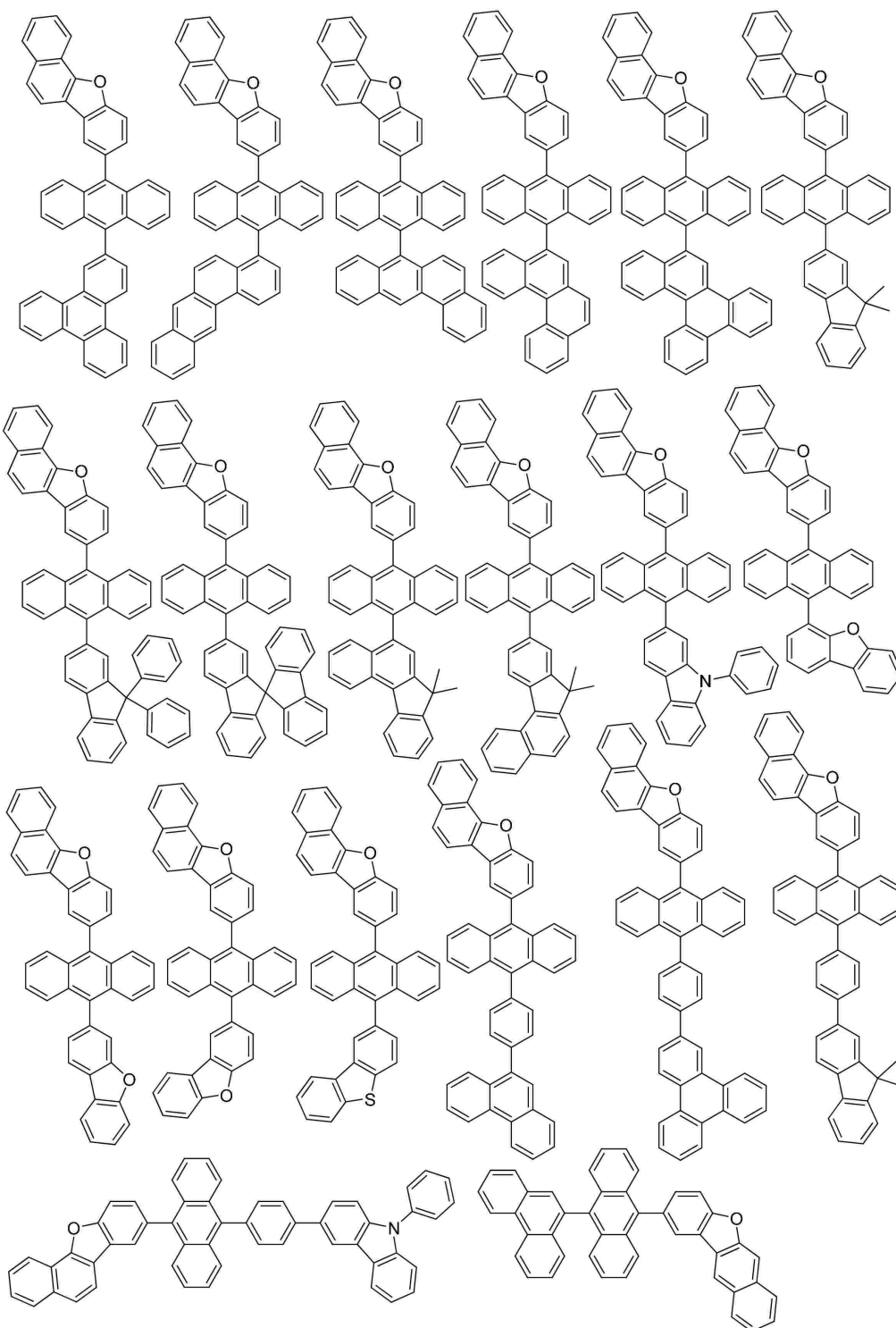


20

30

40

50



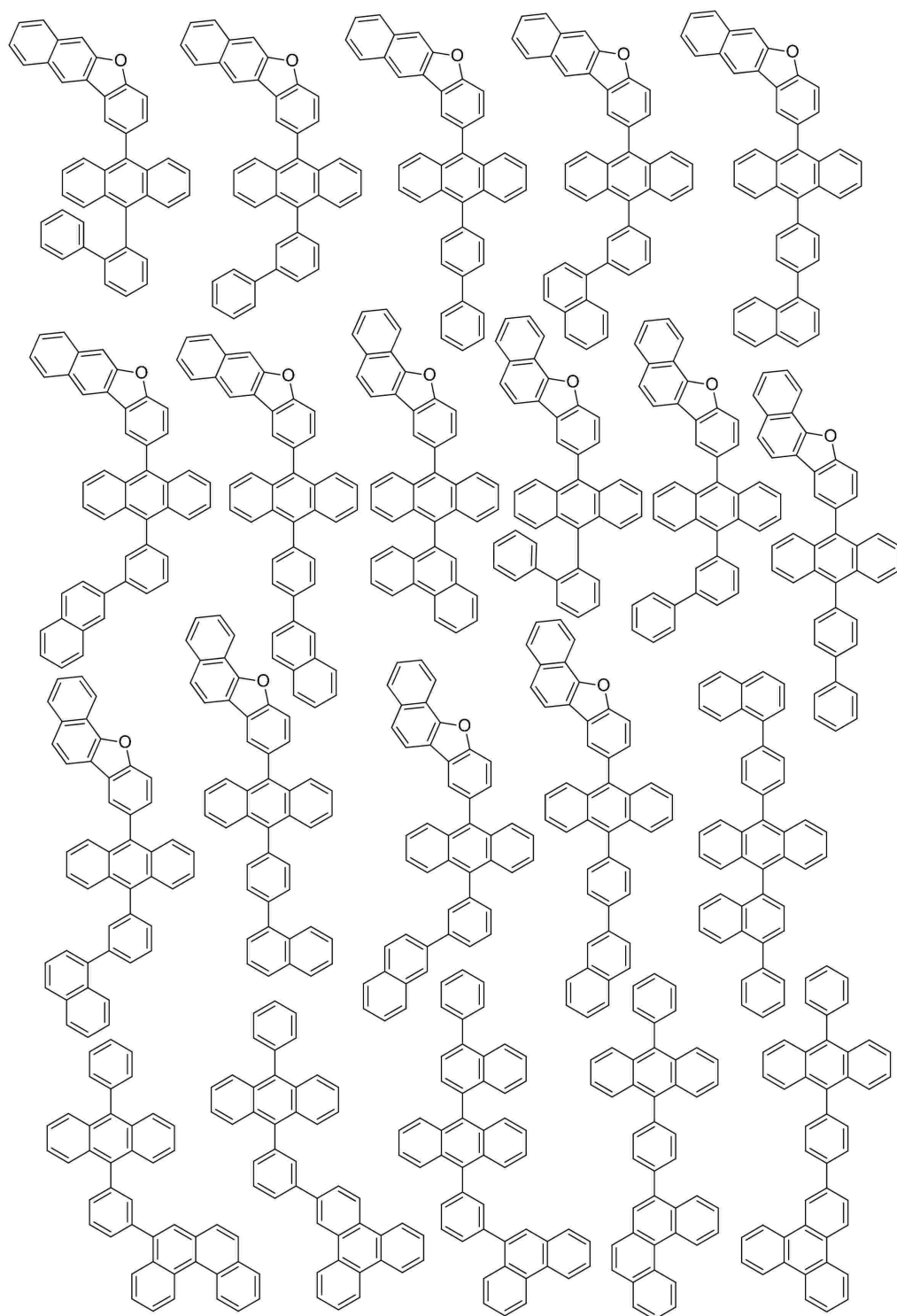
10

20

30

40

50



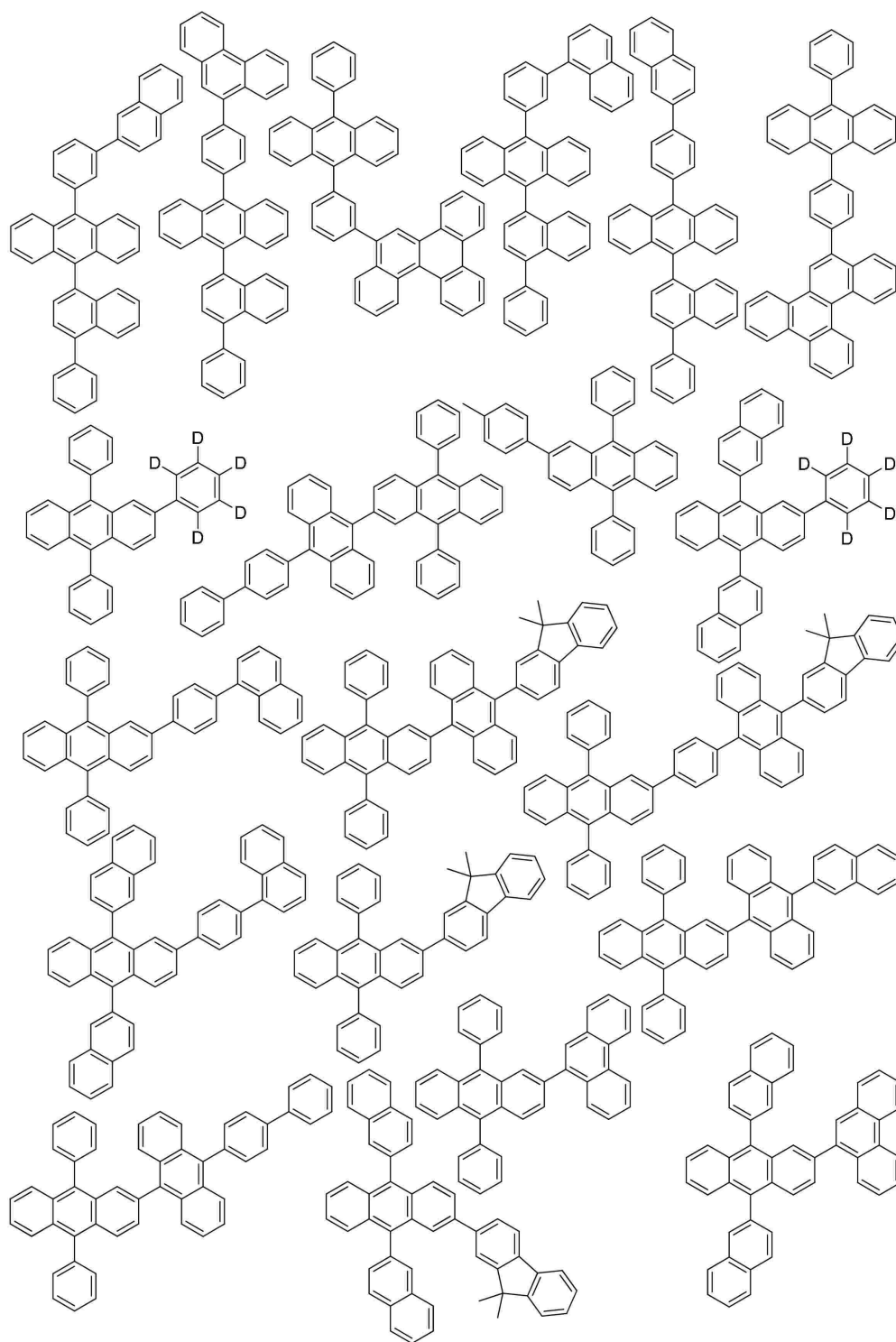
10

20

30

40

50



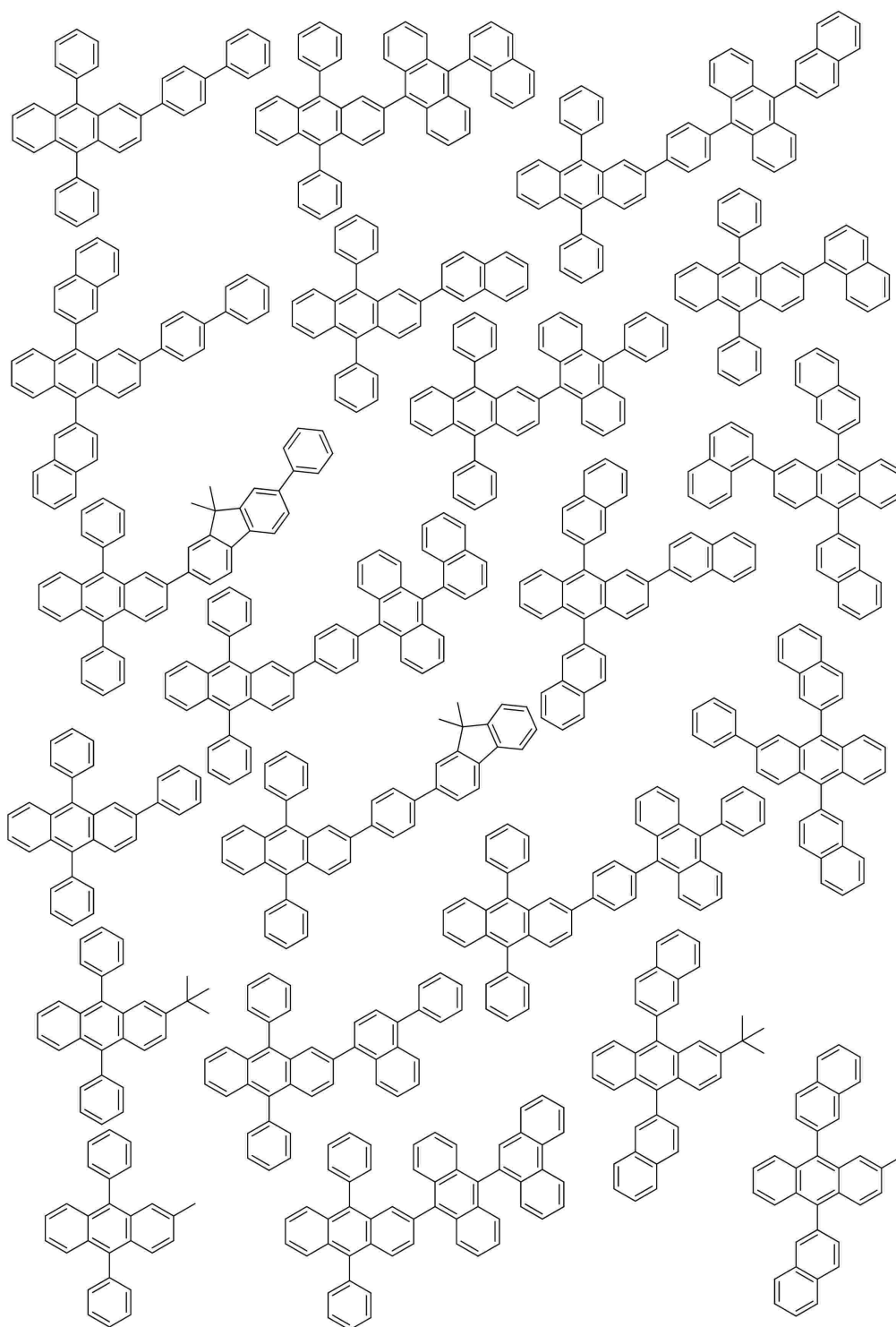
10

20

30

40

50



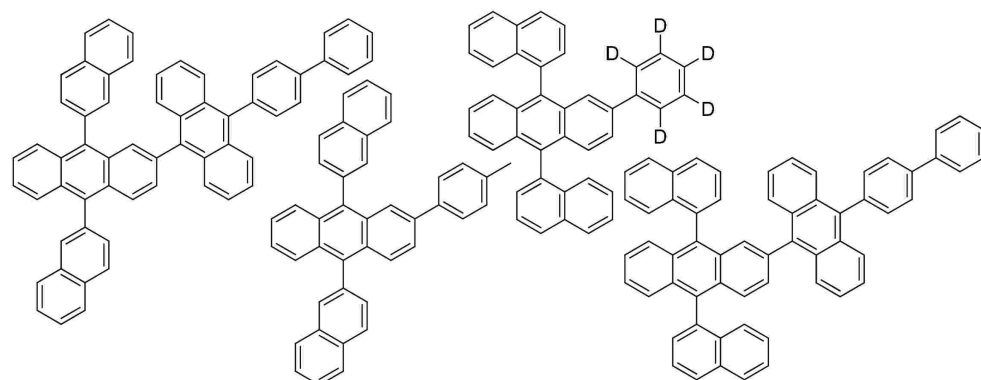
10

20

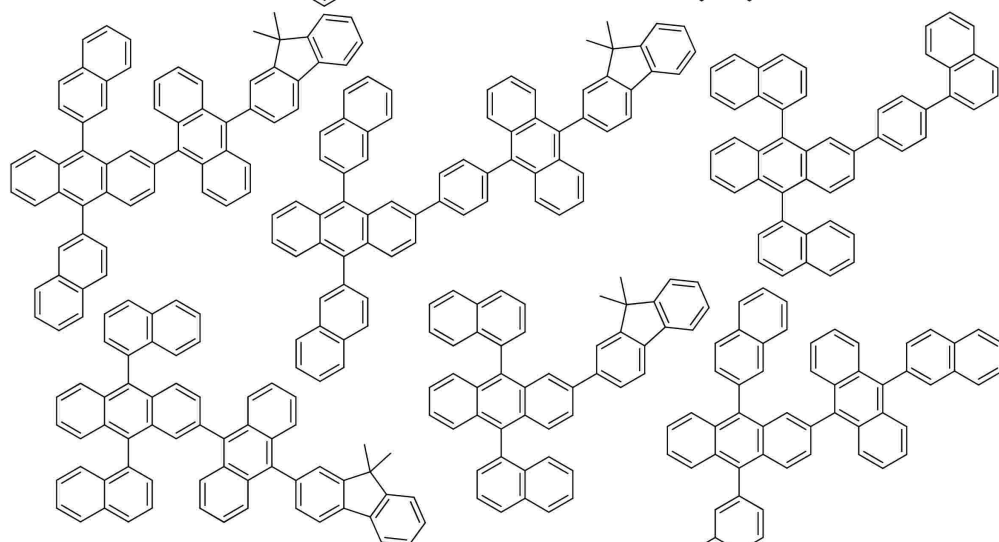
30

40

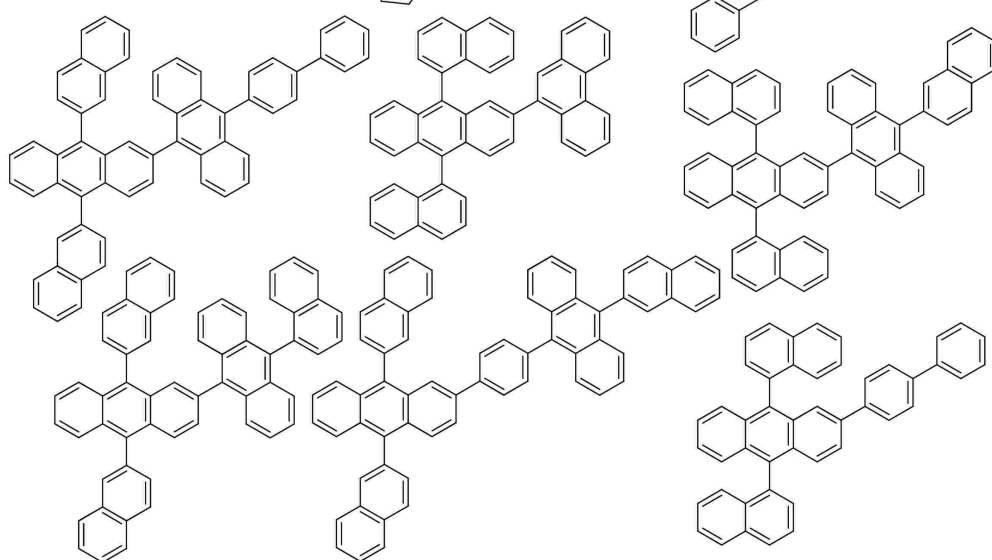
50



10



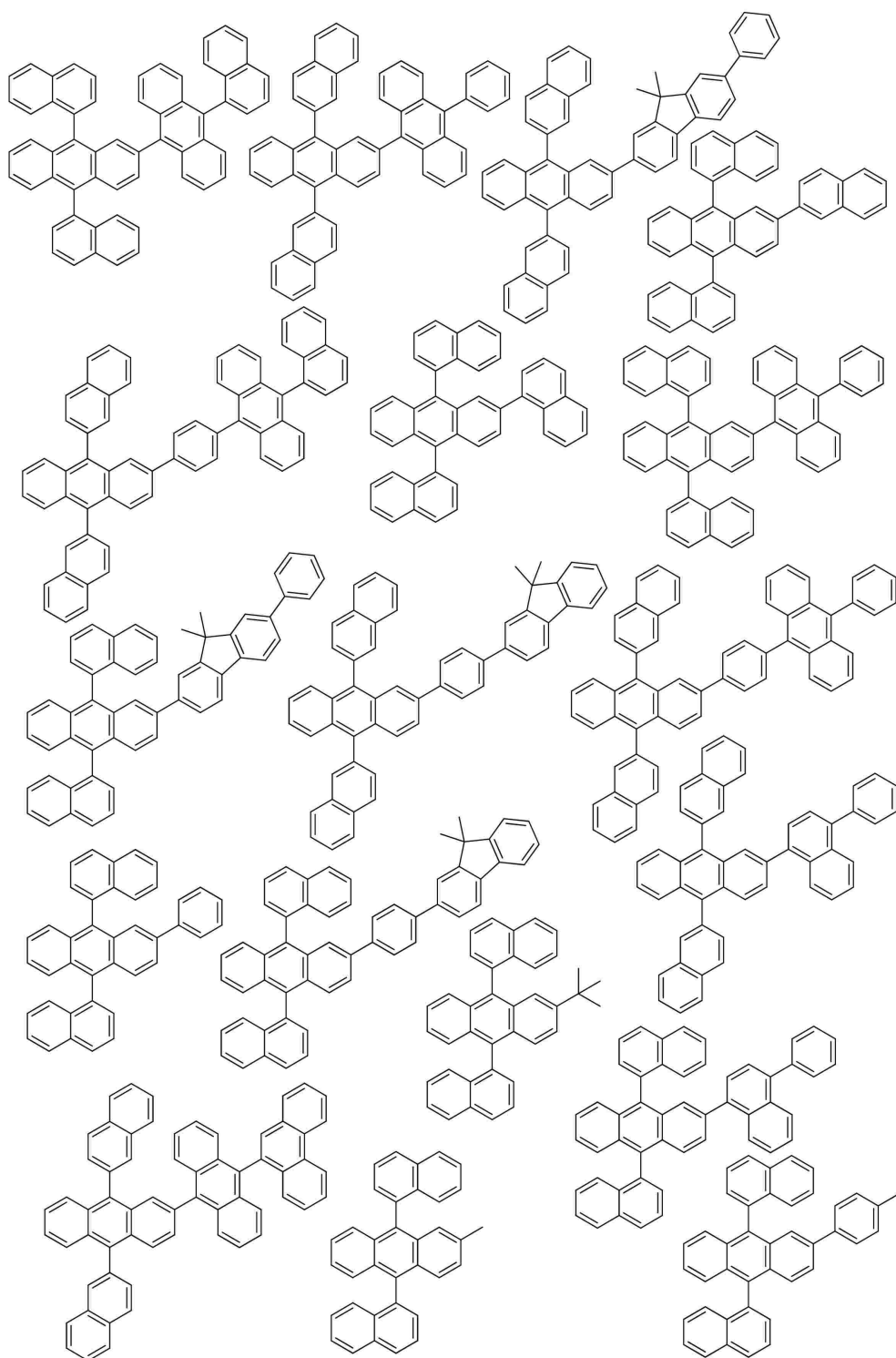
20



30

40

50



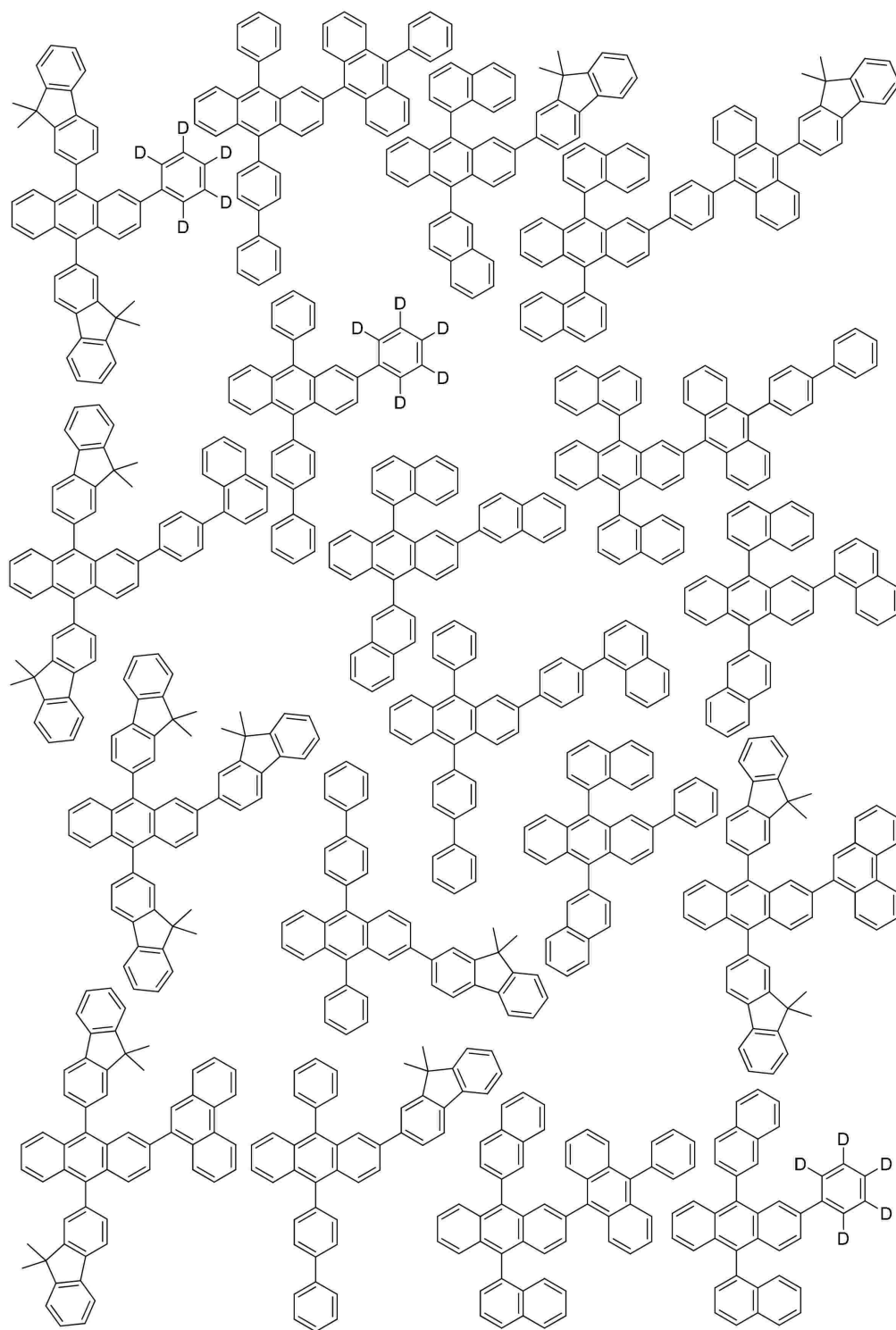
10

20

30

40

50



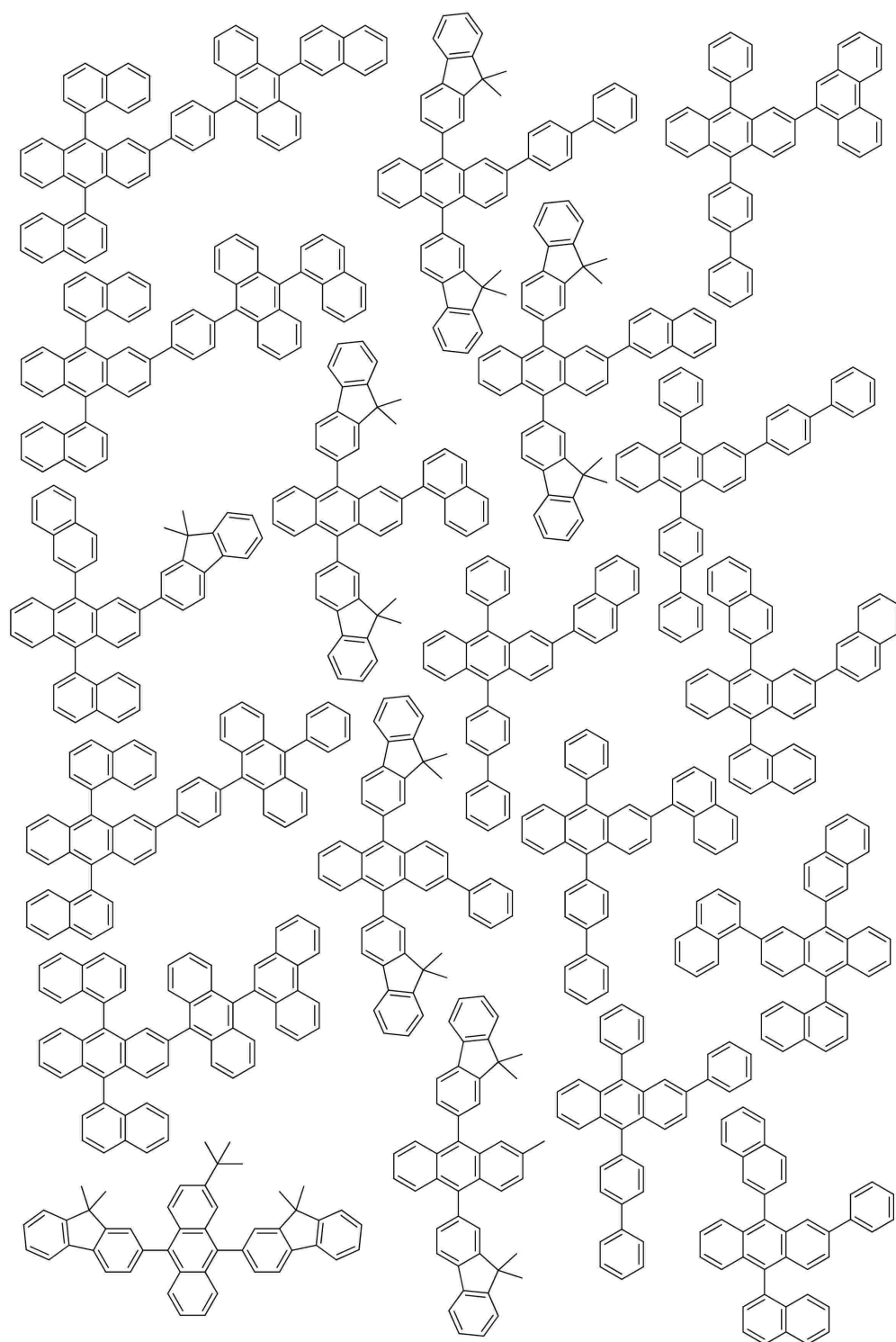
10

20

30

40

50



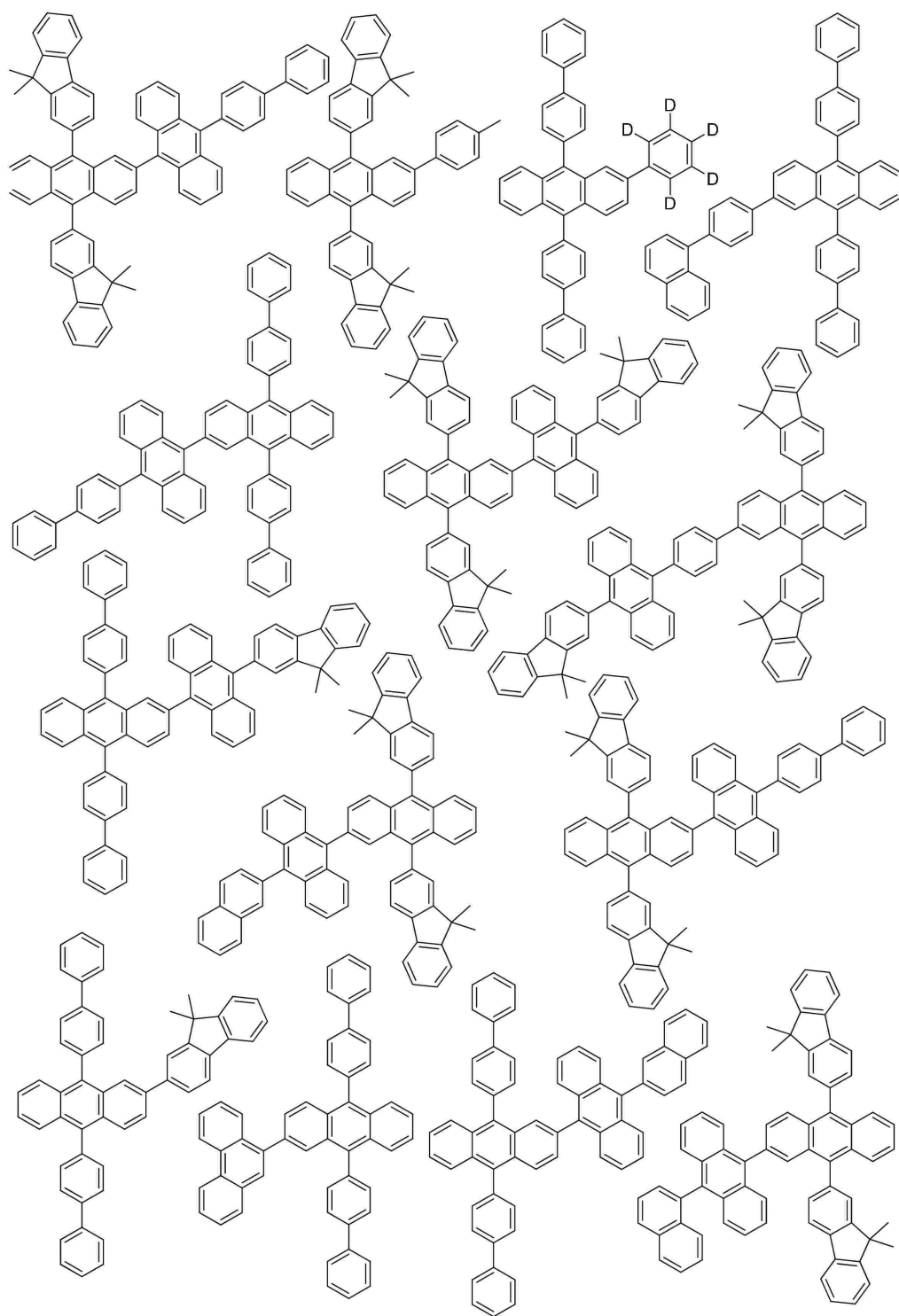
10

20

30

40

50



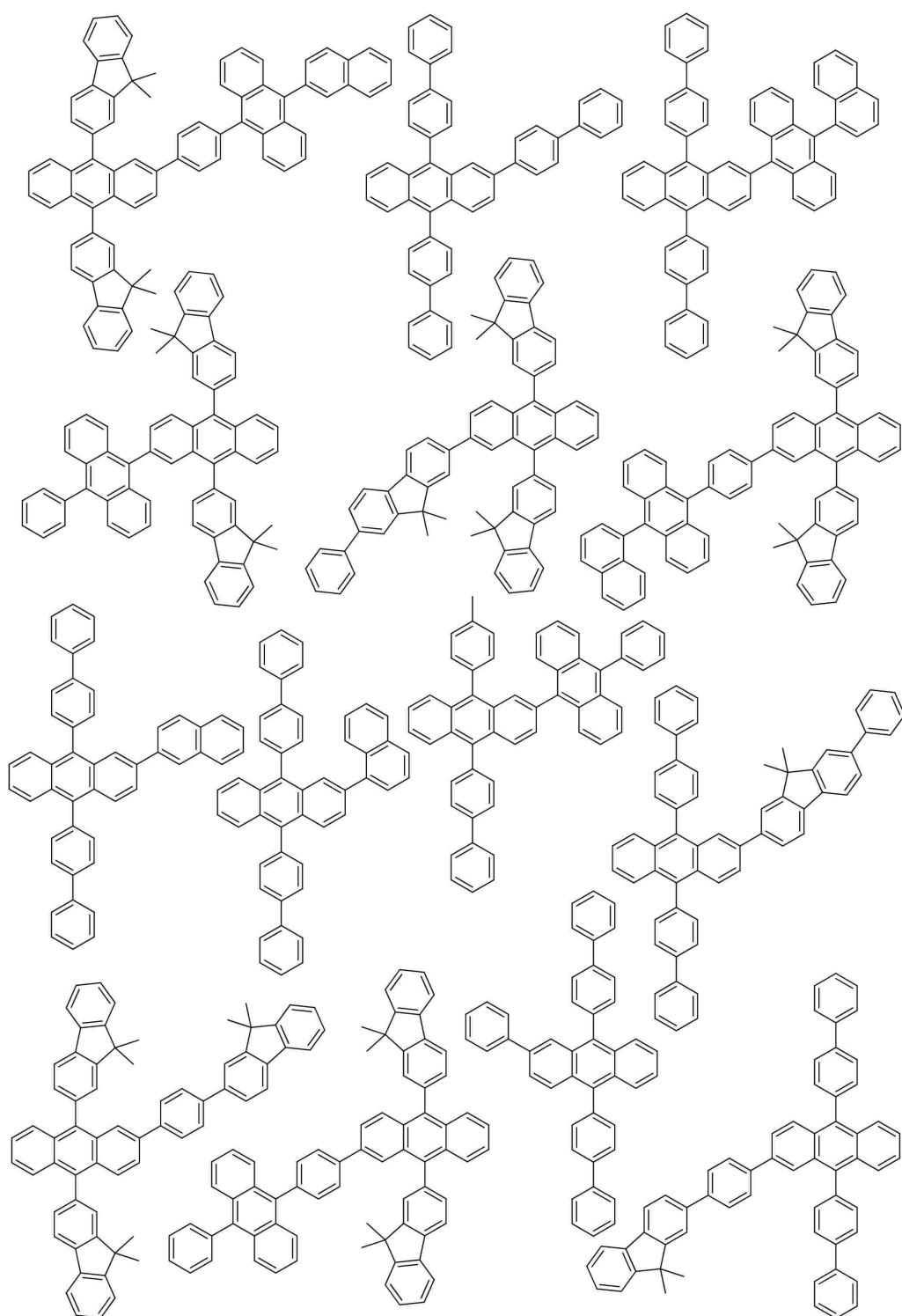
10

20

30

40

50



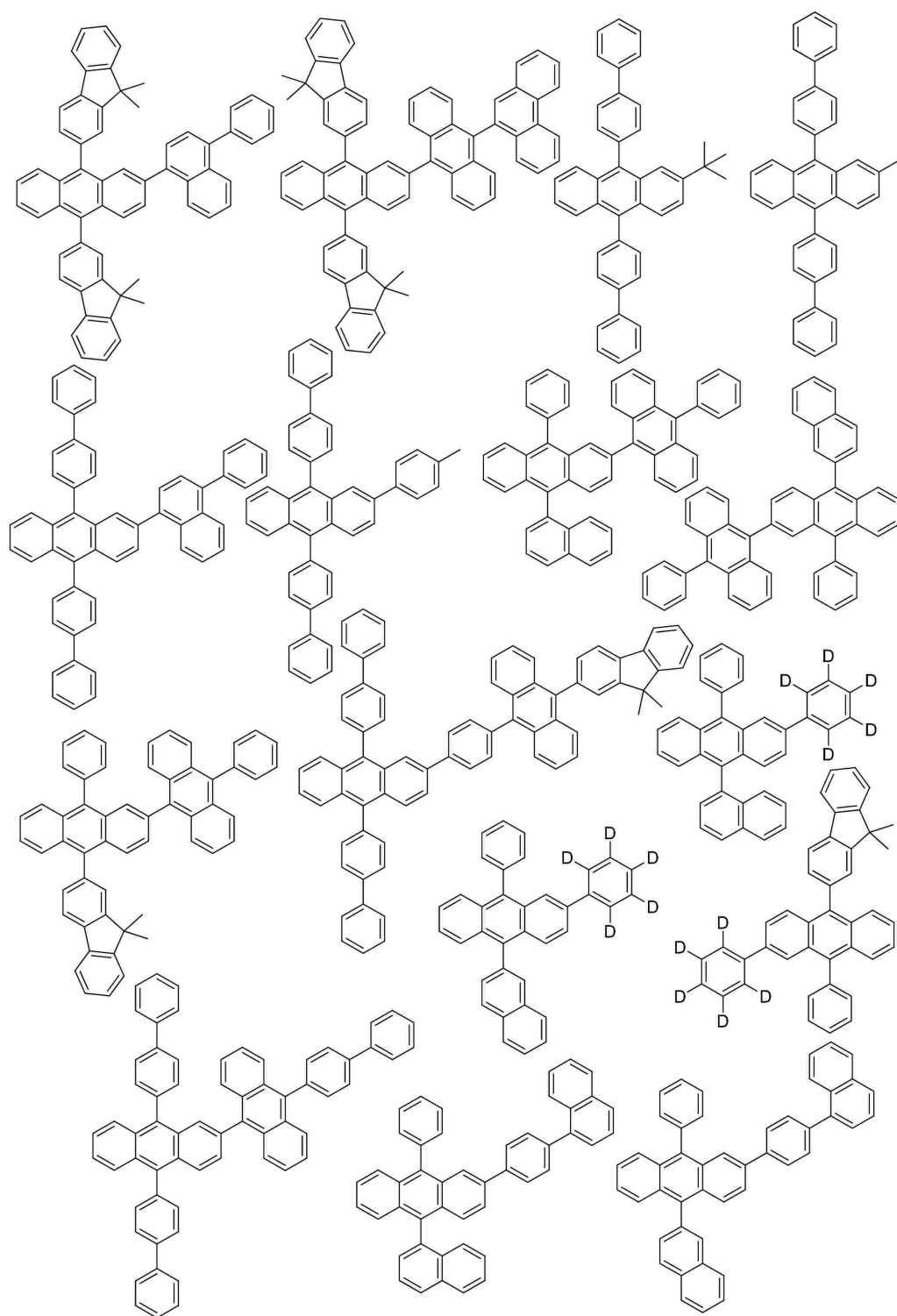
10

20

30

40

50



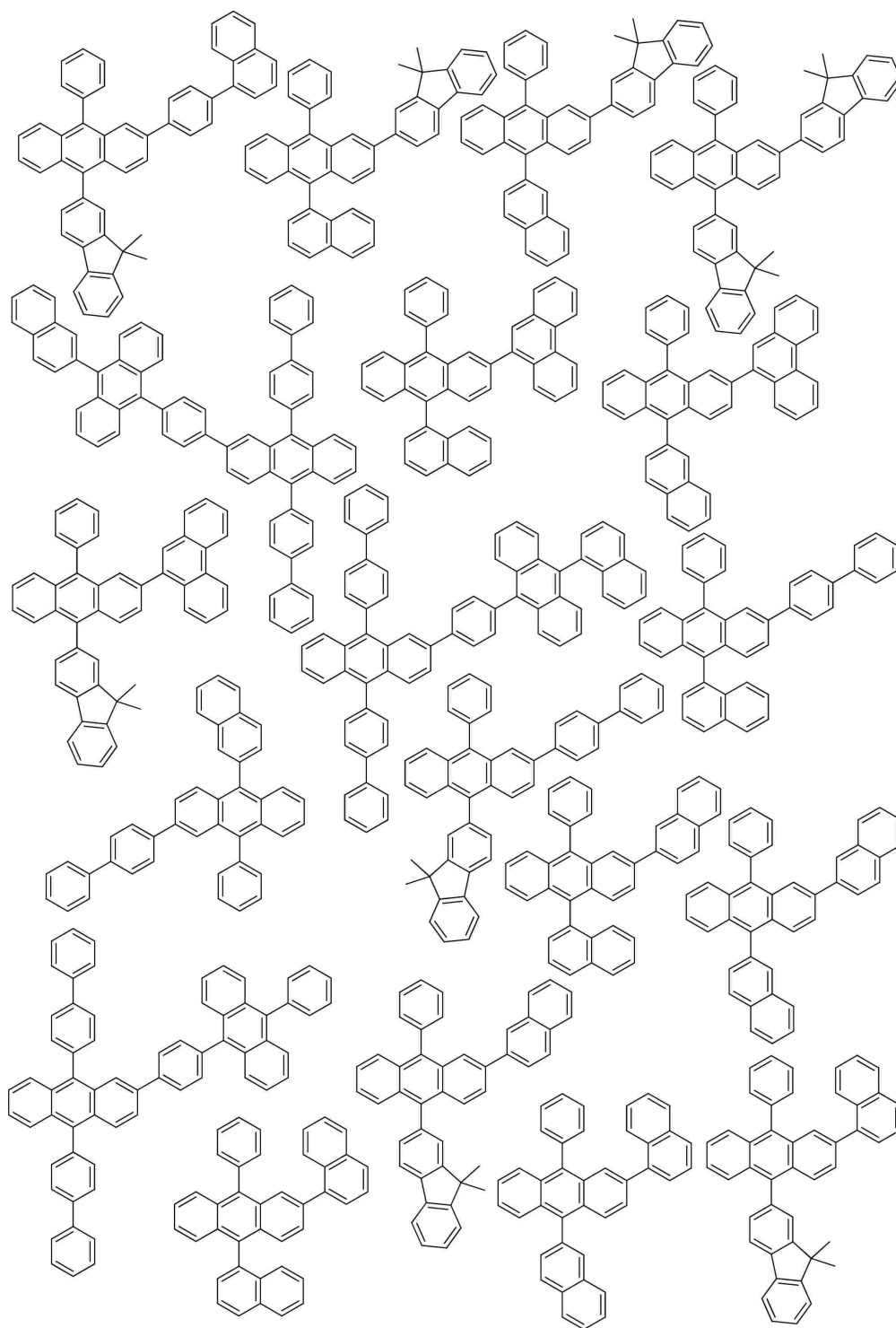
10

20

30

40

50



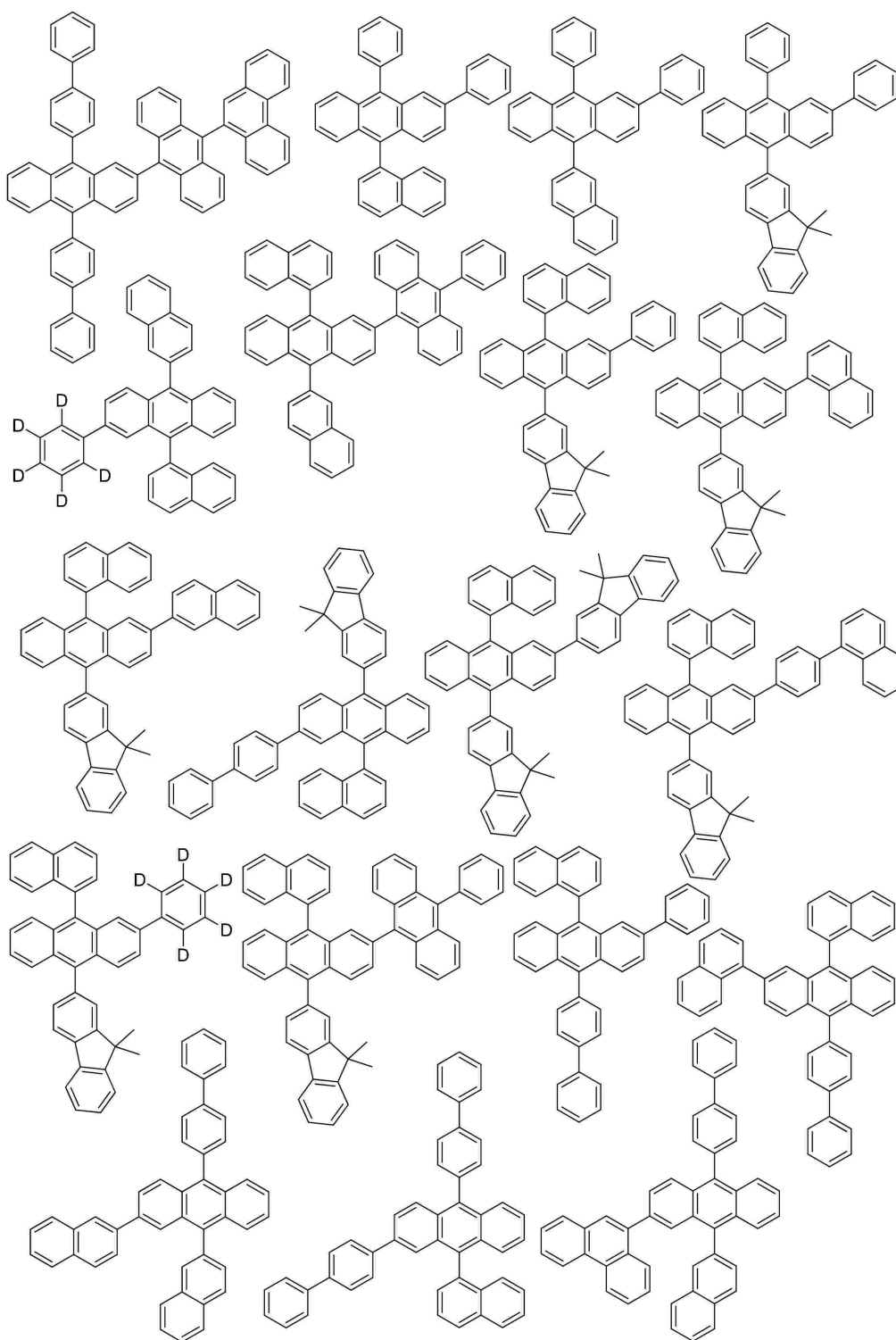
10

20

30

40

50



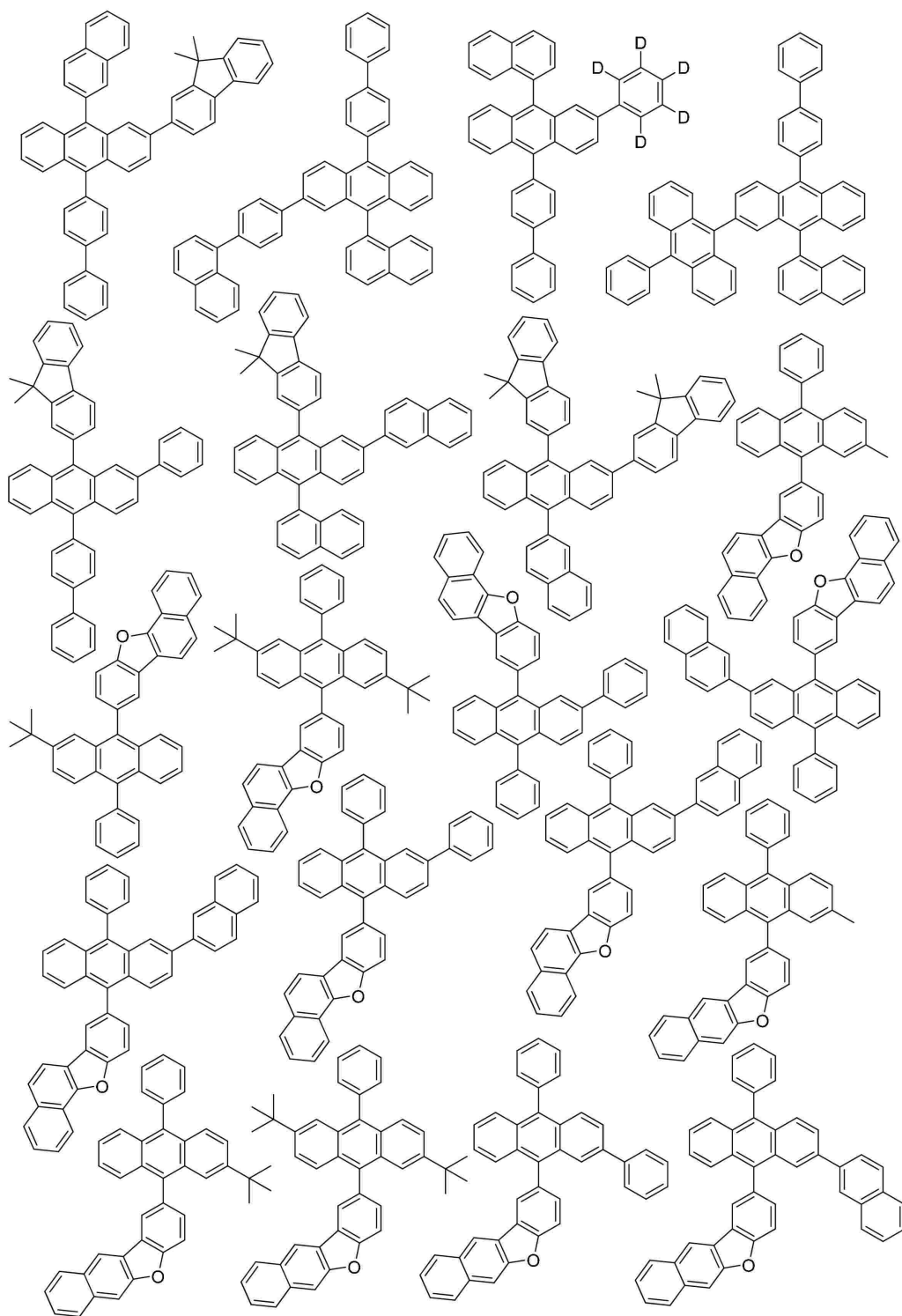
10

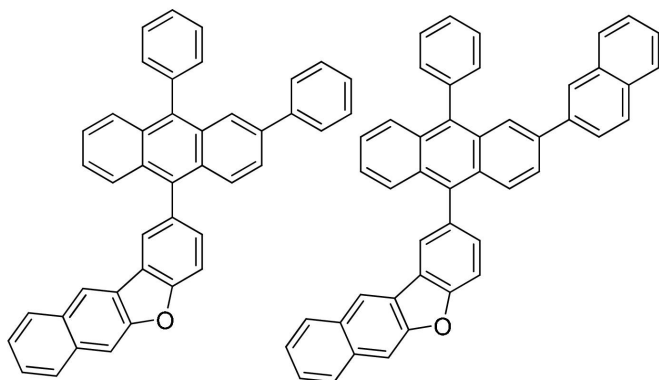
20

30

40

50





10

【0148】

本発明による有機分子を含む組成物

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

【0149】

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

20

【0150】

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

30

【0151】

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

【0152】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

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

40

【0153】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

- (a) 本発明による1以上の有機分子、及び
- (b) (a)の有機分子と異なる1以上のホスト材料H^B、

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

50

は、本発明による有機分子の分率（重量％）より２倍以上高い。

【０１５４】

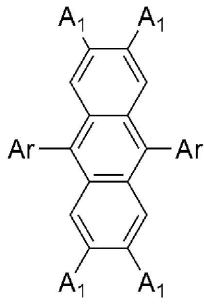
一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（ａ）０．１～３０重量％、好ましくは、０．８～１５重量％、特に１．５～５重量％の本発明による有機分子、及び

（ｂ）下記化学式４によるホスト材料 H^B としてのＴＴＡ材料：

【０１５５】

〔化学式４〕



10

【０１５６】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（ａ）本発明による有機分子、

（ｂ）（ａ）の有機分子と異なるホスト材料 H^B 、及び

（ｃ）ＴＡＤＦ材料 E^B 及び／または燐光材料 P^B 。

20

【０１５７】

一実施形態において、前記組成物は、下記を含むか、あるいはそれからなる：

（ａ）０．１～２０重量％、好ましくは、０．５～１２重量％、特に１～５重量％の本発明による有機分子、

（ｂ）０～９８．８重量％、好ましくは、３５～９４重量％、特に６０～８８重量％の、本発明による有機分子と異なる１以上のホスト材料 H^B 、

（ｃ）０．１～２０重量％、好ましくは、０．５～１０重量％、特に１～３重量％の、（ａ）の有機分子と異なる１以上の燐光材料 P^B 、

（ｄ）１～９９．８重量％、好ましくは、５～５０重量％、特に１０～３０重量％の、（ａ）の有機分子と異なる１以上のＴＡＤＦ材料 E^B 、及び

（ｅ）０～９８．８重量％、好ましくは、０～５９重量％、特に０～２８重量％の１以上の溶媒。

30

【０１５８】

更なる側面において、本発明は、本明細書に記載された種類の有機分子または組成物を含む光電子素子、特に、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電気化学電池、ＯＬＥＤセンサ、特に、外部と完全に遮断されていないガスセンサ及び蒸気センサ、有機ダイオード、有機太陽電池、有機トランジスタ、有機電界効果トランジスタ、有機レーザ及びダウンコンバージョン素子からなる群から選択された素子の形態に係わるものである。

40

【０１５９】

好ましい実施形態において、前記光電子素子は、有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）、発光電気化学電池（ＬＥＣ）及び発光トランジスタからなる群から選択された素子である。

【０１６０】

本発明の光電子素子の一実施形態において、本発明による有機分子 E は、発光層 EML においてエミッタ材料として使用される。

【０１６１】

本発明の光電子素子の一実施形態において、発光層 EML は、本明細書に記載された本発明による組成物からなる。

50

【0162】

前記光電子素子がOLEDである場合、例えば、次のような層構造を有することができる：

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

ここで、該OLEDは、HIL、HTL、EBL、HBL、ETL及びEILの群から選択された各層を選択的に含み、異なる層が併合され、該OLEDは、前述のところで定義された各層タイプのうち1層以上の層を含むものであってもよい。

【0163】

また、一実施形態において、前記光電子素子は、例えば、水分、蒸気及び／またはガスを含む環境内の有害物質に対する損傷露出から素子を保護する1以上の保護層を含んでもよい。

【0164】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、下記の逆積み層(inverted layer)構造を有するOLEDである：

1. 基板
2. カソード層
3. 電子注入層(EIL)
4. 電子輸送層(ETL)
5. 正孔阻止層(HBL)
6. 発光層B
7. 電子阻止層(EBL)
8. 正孔輸送層(HTL)
9. 正孔注入層(HIL)
10. アノード層A

ここで、該OLEDは、HIL、HTL、EBL、HBL、ETL及びEILの群から選択された各層を選択的に含み、異なる層が併合され、該OLEDは、前述のところで定義された各層タイプのうち1層以上の層を含むものであってもよい。

【0165】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、積層構造を有することができるOLEDである。前記構造においては、OLEDが並んで配される一般配置とは異なり、個別ユニットが互いの上に積層される。混合光は、積層構造を示すOLEDによって生成される。特に、白色光は、青色OLED、緑色OLED及び赤色OLEDを積層して生成される。また、積層構造を示すOLEDは、電荷生成層(CGL)を含んでもよく、それは、一般的に、2つのOLEDサブユニット間に位置し、一般的に、nドーピングされた層及びpドーピングされた層として構成される。一般的に、1つのCGLのnドーピングされた層がアノード層にさらに近く位置する。

【0166】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、アノードとカソードとの間に、2層以上の発光層を含むOLEDである。特に、いわゆるタンデムOLEDは、3層の発光層を含み、ここで、1層の発光層は、赤色光を放出し、1層の発光層は、緑色光を放出し、1層の発光層は、青色光を放出し、選択的に、個々の発光層間に、電荷生成層、電荷阻止

10

20

30

40

50

層または電荷輸送層のような追加層を含んでもよい。更なる実施形態において、該発光層は、隣接するように積層される。更なる実施形態において、該タンデムOLEDは、それぞれの2層の発光層間に電荷生成層を含む。また、隣接した発光層、または電荷生成層によって分離した発光層が併合されうる。

【0167】

前記基板は、任意の材料、または該材料の組成物によっても形成される。ほとんど、ガラスライドが基板として使用される。代案としては、薄い金属層（例えば、銅、金、銀またはアルミニウムフィルム）、またはプラスチックフィルムやプラスチックライドが使用されうる。それは、さらに高レベルの柔軟性を許容することができる。アノード層Aは、ほとんど（本質的に）透明なフィルムを得ることができる材料によって構成される。OLEDからの発光を許容するために、二電極のうち少なくとも一つは（本質的に）透明ではなければならないので、アノード層Aまたはカソード層Cのうち一層は透明である。好ましくは、アノード層Aは、透明伝導性酸化物（TCOs）を多量含むか、あるいはそれからなる。そのようなアノード層Aは、例えば、インジウムスズ酸化物、アルミニウム亜鉛酸化物、フッ素ドーピングされたスズ酸化物、インジウム亜鉛酸化物、 PbO 、 SnO 、ジルコニウム酸化物、モリブデン酸化物、バナジウム酸化物、タングステン酸化物、黒鉛、ドーピングされたSi、ドーピングされたGe、ドーピングされたGaAs、ドーピングされたポリアニリン、ドーピングされたポリピロール及び／またはドーピングされたポリチオフェンを含むものであってもよい。

【0168】

アノード層Aは、（本質的に）インジウムスズ酸化物（ITO）（例えば、 $(InO_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$ ）で構成される。透明伝導性酸化物（TCO）によるアノード層Aの粗さは、正孔注入層（HIL）を使用することによっても緩和される。また、該HILは、TCOから正孔輸送層（HTL）への類似電荷キャリア（すなわち、正孔）の輸送が促進されるという点において、類似電荷キャリアの注入を容易にする。正孔注入層（HIL）は、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン（PEDOT）、ポリスチレンスルホン酸（PSS）、 MoO_2 、 V_2O_5 、CuPCまたはCuI、特に、PEDOT及びPSSの混合物を含むものであってもよい。正孔注入層（HIL）は、また、アノード層Aから正孔輸送層（HTL）に金属が拡散することを防止することができる。例えば、該HILは、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン：ポリスチレンスルホン酸（PEDOT:PSS）、ポリ-3,4-エチレンジオキシチオフェン（PEDOT）、4,4',4''-トリス[フェニル(m-トリル)アミノ]トリフェニルアミン（mMTDA TA）、2,2',7,7'-テトラキス(n,n'-ジフェニルアミノ)-9,9'-ススピロピフルオレン（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'-ススピロピフルオレン-2,7'-ジアミン(Spiro-NPD)によっても構成される。

【0169】

アノード層Aまたは正孔注入層（HIL）に隣接し、一般的に正孔輸送層（HTL）が位置する。ここで、任意の正孔輸送化合物が使用されうる。例えば、トリアリールアミン及び／またはカルバゾールのような、電子が豊富なヘテロ芳香族化合物が、正孔輸送化合物としても使用される。該HTLは、アノード層Aと発光層（EML）との間のエネルギー障壁を低減させることができる。該正孔輸送層（HTL）は、また、電子阻止層（EBL）であってもよい。好ましくは、該正孔輸送化合物は、比較的高いエネルギー準位の三重項状態T1を有する。例えば、正孔輸送層（HTL）は、トリス(4-カルバゾリル-

9-イルフェニル)アミン(TCTA)、ポリ(4-ブチルフェニル-ジフェニルアミン)(poly-TPD)、ポリ(4-ブチルフェニル-ジフェニルアミン)(α -NPD)、4,4'-シクロヘキシリデン-ビス[N,N-ビス(4-メチルフェニル)ベンゼンアミン](TAPC)、4,4',4"-トリリス[2-ナフチル(フェニル)-アミノ]トリフェニルアミン(2-TNATA)、Spiro-TPD、DNTPD、NPB、NPNPB、MeO-TPD、HAT-CN及び/または9,9'-ジフェニル-6-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-9H,9'-H-3,3'-ビカルバゾール(TrisPcz)のような星状のヘテロ環を含むものであってもよい。また、該HTLは、有機正孔輸送マトリックス内の無機または有機ドーパントによっても構成されるpドーピングされた層を含むものであってもよい。該無機ドーパントとしては、例えば、バナジウム酸化物、モリブデン酸化物またはタングステン酸化物のような遷移金属酸化物が使用されうる。該有機ドーパントとしては、例えば、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン(F₄-TCNQ)、銅-ペンタフルオロ安息香酸(Cu(I)pFBz)または遷移金属錯体を使用されうる。

10

【0170】

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

20

【0171】

正孔輸送層(HTL)に隣接し、発光層(EML)が一般的に位置する。発光層(EML)は、少なくとも1つの発光分子を含む。特に、該EMLは、少なくとも1つの本発明による発光分子Eを含む。一実施形態において、発光層は、本発明による有機分子のみを含む。一般的に、EMLは、1以上のホスト材料Hをさらに含む。例えば、ホスト材料Hは、4,4'-ビス-(N-カルバゾリル)-ビフェニル(CBP)、mCP、mCBP、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イルトリフェニルシラン(Sif87)、CzSi、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イル)ジフェニルシラン(Sif88)、ビス[2-(ジフェニルホスフィノ)フェニル]エーテルオキサイド(DPEPO)、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾチオフェン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾフラン)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾチオフェン)フェニル]-9H-カルバゾール、2,4,6-トリリス(ビフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T2T)、2,4,6-トリリス(トリフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン(T3T)及び/または2,4,6-トリリス(9,9'-スピロビフルオレン-2-イル)-1,3,5-トリアジン(TST)から選択される。ホスト材料Hは、一般的に、前記有機分子の第1三重項(T1)及び第1一重項(S1)エネルギー準位よりエネルギー的にさらに高い、第1三重項(T1)及び第1一重項(S1)エネルギー準位を示すように選択されなければならない。

30

40

【0172】

本発明の一実施形態において、EMLは、少なくとも1つの正孔支配ホスト及び1つの電子支配ホストを有する、いわゆる、混合ホストシステムを含む。特定実施形態において、該EMLは、正確に1つの本発明による発光有機分子、電子支配ホストとしてT2T、及び正孔支配ホストとして、CBP、mCP、mCBP、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾチオフェン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾフラン)フェニル]-9H-カルバゾール及び9-[3,5-ビス(2-ジベンゾチオフェン)フェニル]-9H-カルバゾールから選択されたホストを含む混合ホストシステムを含む。更なる実施

50

形態において、該 EML は、50～80 重量%、好ましくは、60～75 重量%の CBP、mCP、mCBP、9-[3-(ジベンゾフラン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3-(ジベンゾチオフェン-2-イル)フェニル]-9H-カルバゾール、9-[3,5-ビス(2-ジベンゾフラン-1-イル)フェニル]-9H-カルバゾール及び9-[3,5-ビス(2-ジベンゾチオフェン-1-イル)フェニル]-9H-カルバゾールから選択されたホスト、10～45 重量%、好ましくは、15～30 重量%の T2T、及び5～40 重量%、好ましくは、10～30 重量%の本発明による発光分子を含む。

【0173】

発光層 (EML) に隣接し、電子輸送層 (ETL) が位置しうる。ここで、任意の電子輸送物質が使用されうる。例示的には、ベンズイミダゾール、ピリジン、トリアゾール、オキサジアゾール (例えば、1,3,4-オキサジアゾール)、ホスフィンオキシド及びスルホンのような電子不足化合物が使用されうる。該電子輸送物質は、また、1,3,5-トリ(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル)フェニル (TPBi) のような星状のヘテロ環であってもよい。該 ETL は、2,9-ビス(ナフタレン-2-イル)-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (NBphen)、アルミニウム-トリ(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 (TSP01)、2,7-ジ(2,2'-ビピリジン-5-イル)トリフェニル (BPyTP2)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イルトリフェニルシラン (Sif87)、ジベンゾ[b,d]チオフェン-2-イルジフェニルシラン (Sif88)、1,3-ビス[3,5-ジ(ピリジン-3-イル)フェニル]ベンゼン (BmPyPhB) 及び/または4,4'-ビス-[2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン)]-1,1'-ビフェニル (BTB) を含むものであってもよい。選択的に、該 ETL は、Li₂Q のような物質によってもドーピングされる。該電子輸送層 (ETL) は、また、正孔を阻止することができる。または、正孔阻止層 (HBL) が導入される。

【0174】

HBL は、例えば、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン=バソクブロイン (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(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 (TSP01)、2,4,6-トリ(2-フェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン (T2T)、2,4,6-トリ(2-トリフェニル-3-イル)-1,3,5-トリアジン (T3T)、2,4,6-トリ(9,9'-ス피ロビフルオレン-2-イル)-1,3,5-トリアジン (TST) 及び/または1,3,5-トリ(2-フェニル-3-イル)ベンゼン (TCB/TCP) を含むものであってもよい。

【0175】

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

【0176】

OLED は、選択的に、電子輸送層 (ETL) とカソード層 C との間に、保護層 (電子注入層 (EIL) とともに称される) をさらに含んでもよい。該層は、フッ化リチウム、フッ

化セシウム、銀、8-ヒドロキシキノリンラトリチウム (Li q)、 Li_2O 、 BaF_2 、 MgO 及び／または NaF を含むものであってもよい。

【0177】

選択的に、電子輸送層 (ETL) 及び／または正孔阻止層 (HBL) は、また、1 以上のホスト化合物 H を含んでもよい。

【0178】

発光層 EML の発光スペクトル及び／または吸収スペクトルを追加して修正するために、発光層 EML は、1 以上の追加エミッタ分子 F をさらに含んでもよい。そのようなエミッタ分子 F は、当業界に公知の任意のエミッタ分子であってもよい。好ましくは、そのようなエミッタ分子 F は、本発明による分子 E の構造と異なる構造を有する分子である。エミッタ分子 F は、選択的に、TADF エミッタであってもよい。代案としては、エミッタ分子 F は、選択的に、発光層 EML の発光スペクトル及び／または吸収スペクトルをシフトさせることができる蛍光性及び／またはリン光性のエミッタ分子であってもよい。例えば、三重項及び／または一重項励起子が、基底状態 S_0 に緩和される前に、本発明による有機エミッタ分子からエミッタ分子 F に伝達され、有機分子によって放出される光と比較し、典型的に、赤色偏移された光を放出することができる。選択的に、エミッタ分子 F は、また二光子効果（すなわち、最大吸収エネルギーの半分である 2 つの光子の吸収）を誘発することができる。

【0179】

選択的に、光電子素子（例えば、OLED）は、例えば、本質的に、白色光電子素子であってもよい。例えば、そのような白色光電子素子は、少なくとも 1 つの（深）青色エミッタ分子、及び緑色光及び／または赤色光を放出する 1 以上のエミッタ分子を含むものであってもよい。そして、選択的に、前述のように、2 以上の分子間にエネルギー伝達がありうる。

【0180】

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

紫色：> 380 ~ 420 nm の波長範囲

深青色：> 420 ~ 480 nm の波長範囲

空色：> 480 ~ 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。

【0181】

エミッタ分子と係わり、そのような色相は最大発光を示す。したがって、例えば、深青色エミッタは、> 420 ~ 480 nm 範囲で最大発光を有し、空色エミッタは、> 480 ~ 500 nm 範囲で最大発光を有し、緑色エミッタは、> 500 ~ 560 nm 範囲で最大発光を有し、赤色エミッタは、> 620 ~ 800 nm 範囲で最大発光を有する。

【0182】

深青色エミッタは、好ましくは、480 nm 未満、より好ましくは、470 nm 未満、より一層好ましくは、465 nm 未満、またははなはだしくは、460 nm 未満の最大発光を有することができる。これは、一般的に、420 nm 超過、好ましくは、430 nm 超過、より好ましくは、440 nm 超過、またははなはだしくは、450 nm 超過である。

【0183】

緑色エミッタは、560 nm 未満、より好ましくは、550 nm 未満、より一層好ましくは、545 nm 未満、またははなはだしくは、540 nm 未満の最大発光を有する。これは、一般的に、500 nm 超過、より好ましくは、510 nm 超過、より一層好ましくは、515 nm 超過、またははなはだしくは、520 nm 超過である。

【0184】

したがって、本発明の更なる側面は、 1000 cd/m^2 において、8%超過、好ましくは、10%超過、より好ましくは、13%超過、より一層好ましくは、15%超過、またははなはだしくは、20%超過の外部量子効率を示し、及び／または、 420 nm ないし 500 nm 、好ましくは、 430 nm ないし 490 nm 、より好ましくは、 440 nm ないし 480 nm 、より一層好ましくは、 450 nm ないし 470 nm の最大発光を示し、及び／または、 500 cd/m^2 において、100h超過、好ましくは、200h超過、より好ましくは、400h超過、より一層好ましくは、750h超過、またははなはだしくは、1000h超過のLT80値を示すOLEDに係わるものである。したがって、本発明の更なる側面は、発光が、0.45未満、好ましくは、0.30未満、より好ましくは、0.20未満、より一層好ましくは、0.15未満、またははなはだしくは、0.10未満のCIEy色座標を示すOLEDに係わるものである。

10

【0185】

本発明の更なる側面は、明確な色点で光を放出するOLEDに係わるものである。本発明によれば、OLEDは、狭い発光帯域（小さいFWHM）を有する光を放出する。一側面において、本発明によるOLEDは、0.25eV未満、好ましくは、0.20eV未満、より好ましくは、0.17eV未満、より一層好ましくは、0.15eV未満、またははなはだしくは、0.13eV未満の主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

【0186】

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

20

30

【0187】

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

【0188】

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

40

【0189】

更なる側面において、本発明は、下記段階を含む、 440 nm ないし 470 nm 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) 本明細書に定義された有機分子S^Bを含む光電子素子を提供する段階、及び
- (ii) 前記光電子素子に電流を印加する段階。

【0190】

光電子素子、特に、本発明によるOLEDは、任意の手段の気相蒸着及び／または液体処理によっても製造される。したがって、少なくとも1層は、

- －昇華工程によって製造されるか、
- －有機気相蒸着工程によって製造されるか、

50

- ーキャリアガス昇華工程によって製造されるか、
- ー溶液処理またはプリントされる。

【0191】

本発明による光電子素子、特にOLEDを製造するのに使用される方法は、当業界に公知である。異なる層は、後続蒸着工程により、適切な基板上に、個々に連続して蒸着される。個々の層は、同一であるか、あるいは異なる蒸着方法を使用して蒸着されうる。

【0192】

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

【0193】

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、室温で行い、内部標準として、 Fc^+/Fc を使用し、 Fc^+/Fc を使用して補正する。HOMOデータは、飽和カロメル電極（SCE）に係わる内部標準として、フェロセンを使用して修正された。

【0194】

密度関数理論計算

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

【0195】

光物理的測定

試料前処理：スピンコーティング

装置：Spin150、SPS euro

試料濃度は、適切な溶媒に溶解された 10 mg/mL である。

【0196】

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

【0197】

フォトルミネッセンス分光法及び時間相関単一光子計数（TCSPC）

定常状態発光分光法は、 150 W のキセノン-Arcランプ、励起及び発光単色計、Hamamatsu R928光電子増倍管及び時間相関単一光子計数オプションが装着されたModel FluoroMax-4（Horiba Scientific）を使用して測定される。標準補正フィット（standard correction fits）を使用し、発光スペクトル及び励起スペクトルを補正する。

【0198】

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

【0199】

励起光源：

NanoLED 370（波長：371nm、パルス持続時間：1.1ns）

NanoLED 290（波長：294nm、パルス持続時間：<1ns）

SpectralLED 310（波長：314nm）

SpectralLED 355（波長：355nm）

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

【0200】

10

フォトルミネッセンス量子収率測定

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

【0201】

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

【0202】

PLQYは、次のプロトコルを使用して決定される：

20

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

【0203】

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

【0204】

3）測定

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

【0205】

【数3】

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

30

ここで、 $n_{\text{光子}}$ は、光子数を示し、 Int は、強度を示す。

【0206】

光電子素子の製造及び特性化

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

40

【0207】

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及び電流を使用して計算された、強度及び電流に依存する外部量子効率（%）を測定して特性化される。OLED素子の寿命は、一定電流密度で動作する間、輝度の変化から抽出される。LT50値は、測定輝度が、初期輝度の50%に低減した時間に該当し、同様に、LT80は、測定輝度が、初期輝度の80%に低減した時点に該当し、LT95は、測定輝度が、初期輝度の95%に低減した時点に該当する。

【0208】

50

加速寿命測定が行われる（例：増大した電流密度適用）。例えば、 500 cd/m^2 において、LT80値は、次の式を使用して決定される：

【0209】

【数4】

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

ここで、 L_0 は、印加された電流密度における初期輝度を示す。

10

【0210】

値は、複数のピクセル（一般的に、2～8個）の平均に該当し、当該ピクセル間の標準偏差が提供される。

【0211】

HPLC-MS

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

【0212】

例えば、典型的なHPLC方法は、次の通りである：Agilent（ZORBAX Eclipse Plus $95\text{ \AA}$ C18、 $4.6\times 150\text{ mm}$ 、 $3.5\text{ }\mu\text{m}$ HPLCカラム）から、逆相カラム $4.6\text{ mm}\times 150\text{ mm}$ 、粒子サイズ $3.5\text{ }\mu\text{m}$ がHPLCに使用される。HPLC-MS測定は、下記表1に示された勾配により、室温（rt）で行われる：

20

【0213】

【表1】

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

30

【0214】

下記表2に示された溶媒混合物を使用した：

【0215】

【表2】

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

40

【0216】

0.5 mg/mL 濃度の分析物溶液から、注入体積 $5\text{ }\mu\text{L}$ を測定のために取る。

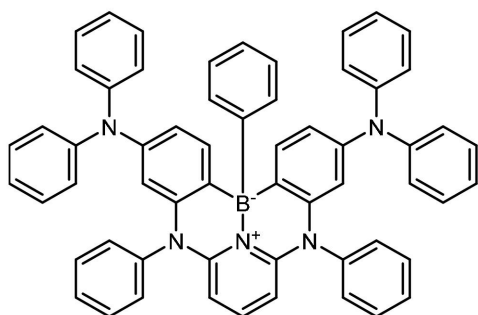
【0217】

プローブのイオン化は、陽（APCI⁺）イオン化モードまたは陰（APCI⁻）イオン化モードにおいて、APCI（大気圧化学イオン化）ソースを使用して行われる。

【0218】

実施例1-S^B

50



10

【0219】

実施例1（トルエン内の0.01mg/mL）の最大発光は495nmであり、CIE x座標は0.16であり、CIE y座標は0.56である。フォトルミネッセンス量子収率（PLQY）は47%である。

【0220】

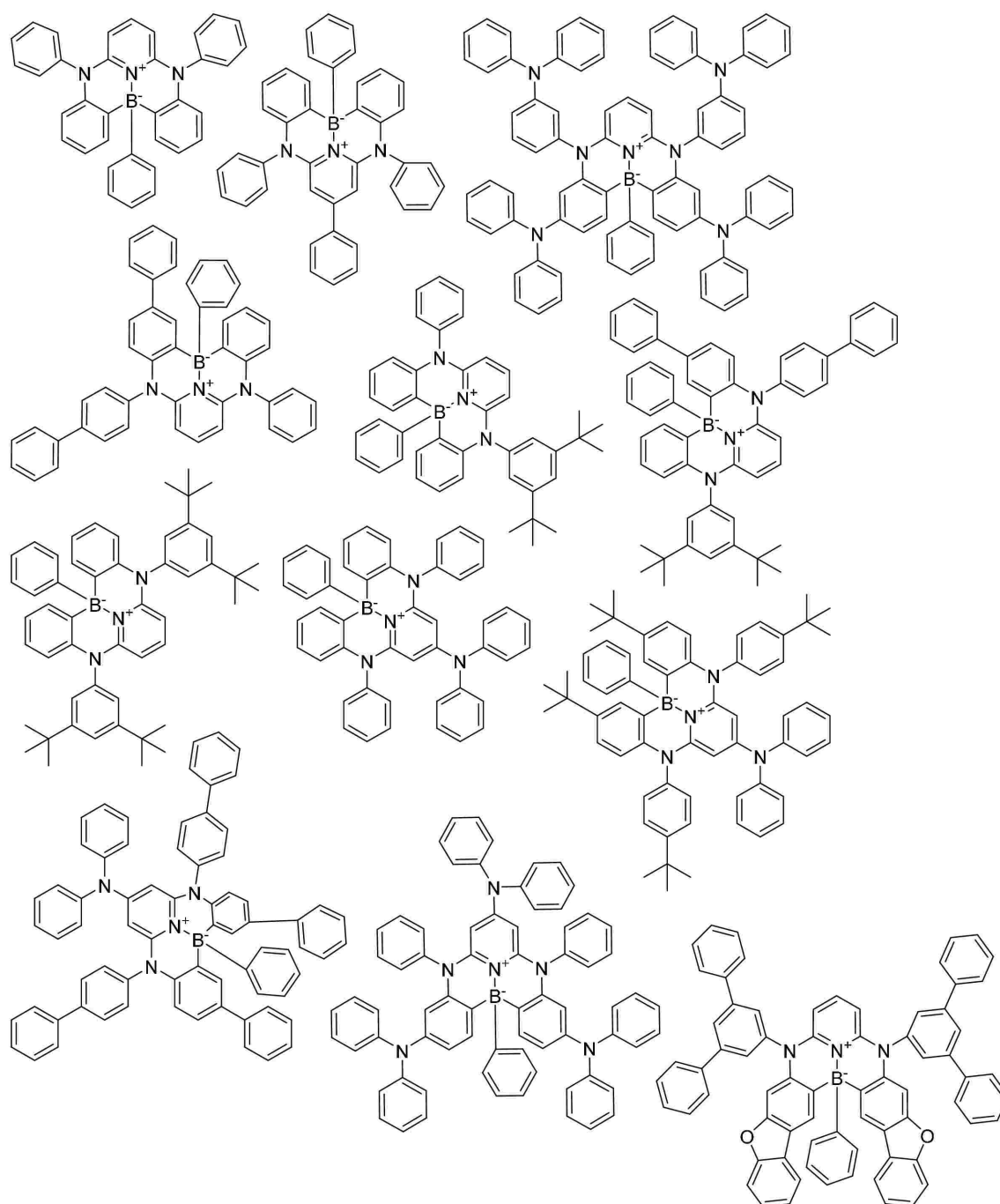
本発明の有機分子S^Bの追加例

20

30

40

50



【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2022/021329
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER H10K 99/00(2023.01)i; H10K 50/80(2023.01)i; H10K 50/00(2023.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) H10K 99/00(2023.01); C07F 15/00(2006.01); C07F 5/02(2006.01) Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models Japanese utility models and applications for utility models Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS(KIPO internal), STN(Registry, CPlus) & Keywords: OLED, organic light emitting diode, fused ring, boron, nitrogen		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	HUANG, T. et al. "Novel tetracoordinated organoboron emitters for thermally activated delayed fluorescence organic light-emitting diodes", Dyes and pigments, 2021, Vol. 188, Article no. 109192, pages 1-8 6. OLED device performances; scheme 1	1-3
A	MENG, G. et al., "Changing the nature of the chelating ligand of tetracoordinate boron-containing PAH multi-resonant thermally activated delayed fluorescence emitters tunes the emission from green to deep red", ChemRxiv, 2021, pages 1-24 the whole document	1-3
A	JP 2021-063022 A (KWANSEI GAKUIN UNIV. et al.) 22 April 2021 (2021-04-22) the whole document	1-3
A	GOTOH, H. et al., "Syntheses and physical properties of cationic BN-embedded polycyclic aromatic hydrocarbons", Angewandte chemie, 2021, Vol. 133, pages 12945-12950 the whole document	1-3
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 28 March 2023		Date of mailing of the international search report 29 March 2023
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office 189 Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon 35208, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer HEO, Joo Hyung Telephone No. +82-42-481-5373

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

International application No.

PCT/KR2022/021329

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	ZHANG, Y. et al., "Multi-resonance induced thermally activated delayed fluorophores for narrowband green OLEDs", Angewandte chemie international edition, 2019, Vol. 58, pages 16912-16917 the whole document	1-3

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2022/021329**Box No. II** Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

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

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☒ Claims Nos.: **6, 11**
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

Claims 6 and 11 are regarded to be unclear because they refer to claims which do not comply with PCT Rule 6.4(a).
3. ☒ Claims Nos.: **4, 5, 7-10, 12-15**
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

10

20

30

40

INTERNATIONAL SEARCH REPORT Information on patent family members				International application No. PCT/KR2022/021329				
Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)		Patent family member(s)		Publication date (day/month/year)	
JP 2021-063022 A			22 April 2021		JP 2022-063022 A5		18 August 2022	

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

テーマコード (参考)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 6 6 0

H 1 0 K 101/10 (2023.01)

C 0 9 K 11/06 6 9 0

H 1 0 K 101/20 (2023.01)

H 1 0 K 101:10

H 1 0 K 101:20

,MC,ME,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,
ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,C
O,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,I
R,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,MG,MK,MN,MW,MX
,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SD,SE,SG,SK,SL,ST,SV,
SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW

(72)発明者 ワン, チアン マイク

ドイツ連邦共和国, ヴァインガルテン (バーデン) 7 6 3 5 6, ミューベルゲルシュトラッセ 4

(72)発明者 フェライヤパン, アルン パンディアン

ドイツ連邦共和国, ブルッフザール 7 6 6 4 6, バートシュトラッセ 2 0

(72)発明者 ブローゼ, オイゲン

ドイツ連邦共和国, フィンツタル 7 6 3 2 7, カールスルーエ シュトラッセ 8 1

F ターム (参考) 3K107 AA01 AA02 BB01 BB02 BB05 CC07 DD53 DD59 DD66 DD67

DD68 FF13 FF14