

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号

特表2024-528864

(P2024-528864A)

(43)公表日 令和6年8月1日(2024.8.1)

(51)国際特許分類	F I	テーマコード(参考)
C 0 7 F 5/02 (2006.01)	C 0 7 F 5/02	D C S P 3 K 1 0 7
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 9 K 11/06	6 6 0 4 H 0 4 8
H 1 0 K 85/30 (2023.01)	H 1 0 K 85/30	5 F 2 5 1
H 1 0 K 50/12 (2023.01)	H 1 0 K 50/12	
H 1 0 K 50/135 (2023.01)	H 1 0 K 50/135	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全98頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2024-504016(P2024-504016)  
 (86)(22)出願日 令和4年7月25日(2022.7.25)  
 (85)翻訳文提出日 令和6年1月22日(2024.1.22)  
 (86)国際出願番号 PCT/KR2022/010916  
 (87)国際公開番号 WO2023/008865  
 (87)国際公開日 令和5年2月2日(2023.2.2)  
 (31)優先権主張番号 21188400.2  
 (32)優先日 令和3年7月29日(2021.7.29)  
 (33)優先権主張国・地域又は機関  
 欧州特許庁(EP)  
 (81)指定国・地域 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA  
 ,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(  
 AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,A  
 T,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR  
 ,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,  
 最終頁に続く

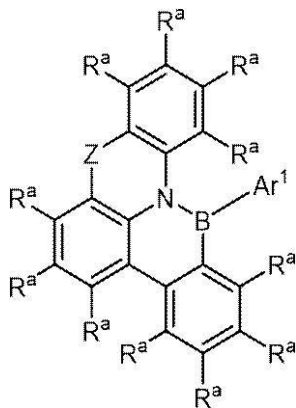
(71)出願人 512187343  
 三星ディスプレイ株式会社  
 Samsung Display Co.  
 , Ltd.  
 大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1  
 1, Samsung-ro, Gihe  
 ung-gu, Yongin-si,  
 Gyeonggi-do, Repub  
 lic of Korea  
 (74)代理人 110002619  
 弁理士法人PORT  
 (72)発明者 ザイファーマン, ステファン  
 ドイツ連邦共和国 7 7 8 1 5 ビュール  
 , ハルトコプフヴェーク 3  
 (72)発明者 ツィンク, ダニエル  
 最終頁に続く

(54)【発明の名称】 光電子素子用有機分子

(57)【要約】

本発明は、特に光電子素子に適用するための有機分子に関する。本発明によれば、前記有機分子は、化学式 I で表される構造を有する：

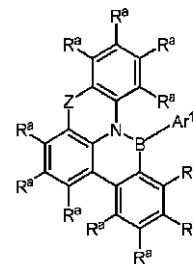
【化 1】



(化学式 I)

ここで、

Ar<sup>1</sup>は、水素、及び選択的に 1 以上の C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル置換基で置換された C<sub>6</sub> - C<sub>12</sub> アリールからな

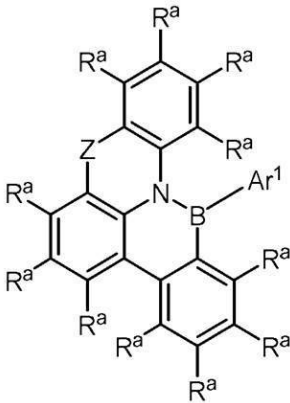


## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

化学式 I で表される構造を含む、有機分子：

## 【化 1】



10

(化学式 I)

ここで、

Ar<sup>1</sup> は、水素、及び選択的に 1 以上の C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル置換基で置換された C<sub>6</sub> - C<sub>12</sub> アリールからなる群から選択され、

20

Z は、それぞれの場合に、独立して、単結合、C R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、C = C R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、C = O、C = N R<sup>3</sup>、N R<sup>3</sup>、O、S i R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、S、S (O) 及び S (O)<sub>2</sub> からなる群から選択され、

R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup> 及び R<sup>4</sup> 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<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、O R<sup>5</sup>、S i (R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>、B (O R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、B (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、O S O<sub>2</sub> R<sup>5</sup>、C F<sub>3</sub>、C N、F、B r、I、

C<sub>1</sub> - C<sub>40</sub> アルキル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R<sup>5</sup> で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H<sub>2</sub> 基は、選択的に R<sup>5</sup> C = C R<sup>5</sup>、C C、S i (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、G e (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、S n (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = S e、C = N R<sup>5</sup>、P ( = O ) ( R<sup>5</sup> )、S O、S O<sub>2</sub>、N R<sup>5</sup>、O、S または C O N R<sup>5</sup> で置換され、

30

C<sub>1</sub> - C<sub>40</sub> アルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R<sup>5</sup> で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H<sub>2</sub> 基は、選択的に R<sup>5</sup> C = C R<sup>5</sup>、C C、S i (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、G e (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、S n (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = S e、C = N R<sup>5</sup>、P ( = O ) ( R<sup>5</sup> )、S O、S O<sub>2</sub>、N R<sup>5</sup>、O、S または C O N R<sup>5</sup> で置換され、

C<sub>1</sub> - C<sub>40</sub> チオアルコキシ、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R<sup>5</sup> で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H<sub>2</sub> 基は、選択的に R<sup>5</sup> C = C R<sup>5</sup>、C C、S i (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、G e (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、S n (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = S e、C = N R<sup>5</sup>、P ( = O ) ( R<sup>5</sup> )、S O、S O<sub>2</sub>、N R<sup>5</sup>、O、S または C O N R<sup>5</sup> で置換され、

40

C<sub>2</sub> - C<sub>40</sub> アルケニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R<sup>5</sup> で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H<sub>2</sub> 基は、選択的に R<sup>5</sup> C = C R<sup>5</sup>、C C、S i (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、G e (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、S n (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = S e、C = N R<sup>5</sup>、P ( = O ) ( R<sup>5</sup> )、S O、S O<sub>2</sub>、N R<sup>5</sup>、O、S または C O N R<sup>5</sup> で置換され、

C<sub>2</sub> - C<sub>40</sub> アルキニル、

これは、選択的に 1 以上の置換基 R<sup>5</sup> で置換され、

ここで、1 以上の隣接しない C H<sub>2</sub> 基は、選択的に R<sup>5</sup> C = C R<sup>5</sup>、C C、S i (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、G e (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、S n (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = S e、C = N R<sup>5</sup>、P

50

(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、  
 選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリアル、及び  
 選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、  
 R<sup>5</sup>は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、  
 水素、重水素、N(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、OR<sup>6</sup>、Si(R<sup>6</sup>)<sub>3</sub>、B(OR<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、B(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、  
 O、SO<sub>2</sub>R<sup>6</sup>、CF<sub>3</sub>、CN、F、Br、I、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルキル、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>、C-C、Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>6</sup>、P  
 (=O)(R<sup>6</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>6</sup>、O、SまたはCONR<sup>6</sup>で置換され、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルコキシ、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>、C-C、Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>6</sup>、P  
 (=O)(R<sup>6</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>6</sup>、O、SまたはCONR<sup>6</sup>で置換され、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>チオアルコキシ、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>、C-C、Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>6</sup>、P  
 (=O)(R<sup>6</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>6</sup>、O、SまたはCONR<sup>6</sup>で置換され、  
 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>アルケニル、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>、C-C、Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>6</sup>、P  
 (=O)(R<sup>6</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>6</sup>、O、SまたはCONR<sup>6</sup>で置換され、  
 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>アルキニル、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>6</sup>C=CR<sup>6</sup>、C-C、Si(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>6</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>6</sup>、P  
 (=O)(R<sup>6</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>6</sup>、O、SまたはCONR<sup>6</sup>で置換され、  
 選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリアル、及び  
 選択的に1以上の置換基R<sup>6</sup>で置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、  
 R<sup>6</sup>は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、  
 水素、重水素、OPh、CF<sub>3</sub>、CN、F、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>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<sub>3</sub>またはFで置  
 換され、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>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<sub>3</sub>またはFで置  
 換され、  
 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>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<sub>3</sub>またはFで置  
 換され、  
 C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>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<sub>3</sub>またはFで置  
 換され、  
 C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>アルキニル、  
 ここで、選択的に1以上の水素原子は、独立して、重水素、CN、CF<sub>3</sub>またはFで置  
 換され、

選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリール、  
 選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリール、  
 N(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリール)<sub>2</sub>、  
 N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリール)<sub>2</sub>、及び  
 N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリール)(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリール)、  
 ここで、置換基R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>及びR<sup>6</sup>のうちいずれか1つは、互いに独立し  
 て、1以上の置換基R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>及び/またはR<sup>6</sup>と共に、単環または多環、  
 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形成することができる。

【請求項2】

Ar<sup>1</sup>は、選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたフェニル、及び選  
 択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたビフェニルから選択される、請求  
 項1に記載の有機分子。

10

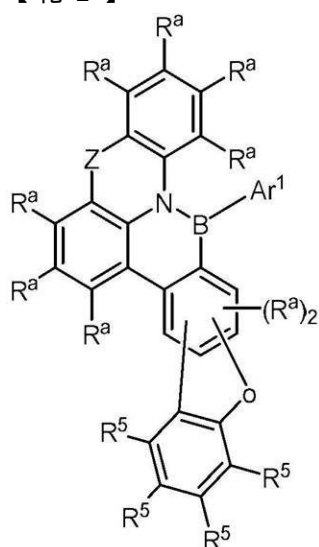
【請求項3】

Zは単結合である、請求項1または2に記載の有機分子。

【請求項4】

下記化学式IV a、化学式IV b、化学式IV c、化学式IV d、または化学式IV e  
 で表される構造を含む、請求項1乃至3のうちいずれか1項に記載の有機分子：

【化2】

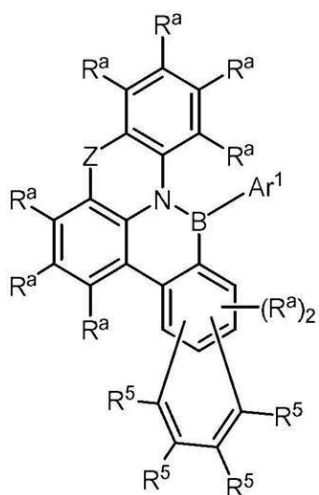


20

30

(化学式IV a)

【化3】

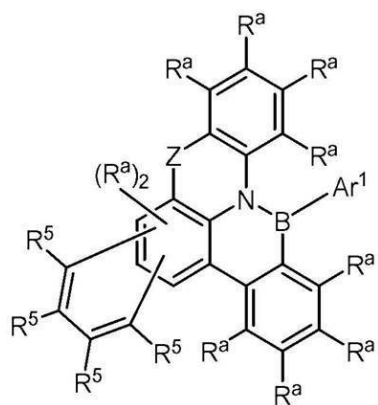


40

(化学式IV b)

50

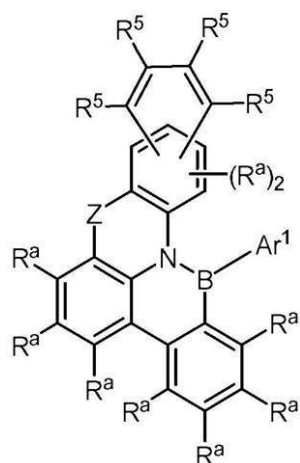
## 【化 4】



10

(化学式 I V c)

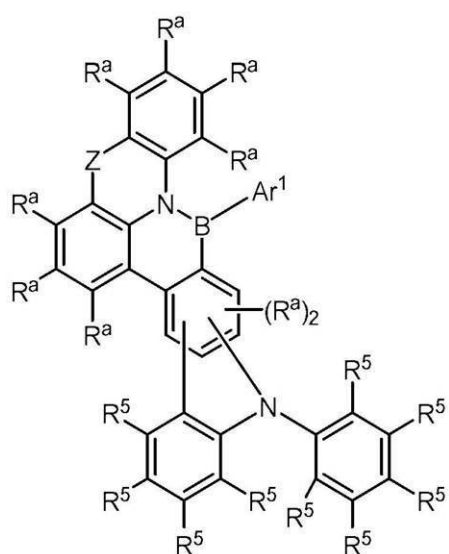
## 【化 5】



20

(化学式 I V d)

## 【化 6】



30

40

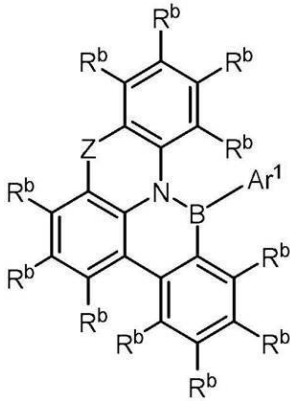
(化学式 I V e)

## 【請求項 5】

下記化学式 V - 1 または化学式 V - 2 で表される構造を含む、請求項 1 乃至 4 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子：

50

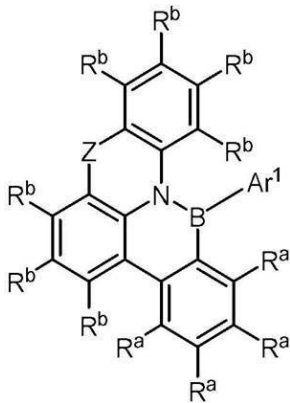
## 【化 7】



10

(化学式 V - 1)

## 【化 8】



20

(化学式 V - 2)

ここで、 $R^b$  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、 $N(R^5)_2$ 、 $OR^5$ 、 $Si(R^5)_3$ 、 $B(OR^5)_2$ 、 $B(R^5)_2$ 、 $OSO_2R^5$ 、 $CF_3$ 、 $CN$ 、 $F$ 、 $Br$ 、 $I$ 、

30

$C_1 - C_{40}$ アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^5$ で置換され、

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

$C_1 - C_{40}$ アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^5$ で置換され、

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

40

$C_1 - C_{40}$ チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^5$ で置換され、

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

$C_2 - C_{40}$ アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基 $R^5$ で置換され、

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

50

C<sub>2</sub> - C<sub>40</sub>アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C = CR<sup>5</sup>、C - C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = Se、C = NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、

選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリアル、及び

選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>2</sub> - C<sub>57</sub>ヘテロアリアル。

【請求項6】

R<sup>b</sup>は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される、請求項1乃至5のうちいずれか1項に記載の有機分子：

水素、重水素、

Me、<sup>i</sup>Pr、<sup>t</sup>Bu、CN、CF<sub>3</sub>、

Me、<sup>i</sup>Pr、<sup>t</sup>Bu、CN、CF<sub>3</sub>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、<sup>i</sup>Pr、<sup>t</sup>Bu、CN、CF<sub>3</sub>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、<sup>i</sup>Pr、<sup>t</sup>Bu、CN、CF<sub>3</sub>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、<sup>i</sup>Pr、<sup>t</sup>Bu、CN、CF<sub>3</sub>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)<sub>2</sub>。

【請求項7】

以下を含む、組成物：

(a) 特にエミッタ形態の、請求項1乃至6のうちいずれか1項に記載の有機分子、

(b) 前記有機分子と異なるホスト材料、及び

(c) 選択的に、染料及び/または溶媒。

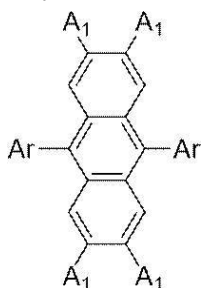
【請求項8】

0.1乃至30重量%、好ましくは、0.8乃至15重量%、特に1.5乃至5重量%の有機分子を含む、請求項7に記載の組成物。

【請求項9】

前記ホスト材料は、化学式4で表される構造を含む、請求項7または8に記載の組成物：

【化9】



(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<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリアル、C<sub>3</sub> - C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、ハロゲン及びC<sub>1</sub> - C<sub>40</sub>(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<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリアル、及び

C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリアル、C<sub>3</sub> - C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、ハロゲン及びC<sub>1</sub> - C<sub>40</sub>(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<sub>3</sub> - C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、

10

20

30

40

50

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。

【請求項 10】

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 7 乃至 9 のうちいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 11】

特に発光エミッタの、請求項 1 乃至 6 のうちいずれか 1 項に記載の有機分子、または請求項 7 乃至 10 のうちいずれか 1 項に記載の組成物を含む、光電子素子。

【請求項 12】

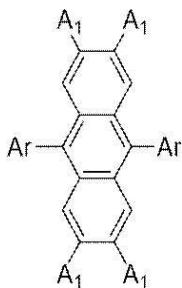
前記光電子素子は、下記からなる群から選択される、請求項 11 に記載の光電子素子：

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

【請求項 13】

化学式 4 で表される構造を含むホスト材料を含む、請求項 11 または 12 に記載の光電子素子：

【化 10】



(化学式 4)

ここで、

それぞれの  $A_r$  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、

10

20

30

40

50

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。

10

【請求項 14】

- 基板、
- アノード、
- カソード、及び
- 発光層を含み、

前記アノードまたは前記カソードは、前記基板上に配置され、

前記発光層は、前記アノードと前記カソードとの間に配置され、前記有機分子または前記組成物を含む、請求項 11 乃至 13 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子。

20

【請求項 15】

(i) 請求項 11 乃至 14 のうちいずれか 1 項に記載の光電子素子を提供する段階と、

(ii) 前記光電子素子に電流を印加する段階と、を含む、440 nm 乃至 470 nm の波長を有する光を発生させる方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光有機分子及び有機発光ダイオード (OLED)、並びにその他光電子素子におけるその用途に関する。

【発明の概要】

30

【発明が解決しようとする課題】

【0002】

本発明が解決しようとする課題は、光電子素子における使用に適した分子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0003】

そのような目的は、新規の有機分子を提供する本発明によって達成される。

【0004】

本発明によれば、前記有機分子は、純粋な有機分子であり、すなわち、光電子素子に使用されると知られている金属錯体とは異なり、いかなる金属イオンも含まない。

40

【発明の効果】

【0005】

本発明によれば、前記有機分子は、青色または空色のスペクトル範囲において最大発光を示す。前記有機分子は、特に 420 ~ 520 nm、好ましくは、440 ~ 495 nm、より好ましくは、450 ~ 470 nm において最大発光を示す。本発明による有機分子のフォトルミネセンス量子収率は、特に 50% 以上である。光電子素子、例えば、有機発光ダイオード (OLED) における本発明による分子の使用は、素子のより高い効率、または発光の半値幅 (FWHM) で表されるより高い色純度をもたらす。対応する OLED は、公知のエミッタ物質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) 材料の形態

50

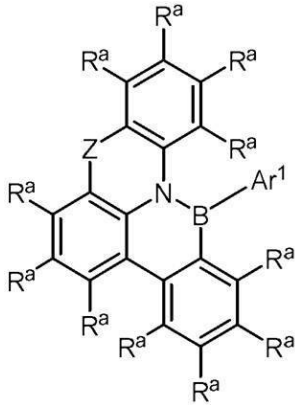
のホスト材料と共に本発明の有機分子を含む発光層を有するOLEDは、より高い安定性を有する。

【発明を実施するための形態】

【0006】

本発明の有機発光分子は、化学式Iの構造を含むか、あるいはそれからなる：

【化1】



10

(化学式I)

ここで、

20

Ar<sup>1</sup>は、水素、及び選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>12</sub>アリールからなる群から選択され、

Zは、それぞれの場合に、独立して、単結合、CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>、C=CR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>、C=O、C=NR<sup>3</sup>、NR<sup>3</sup>、O、SiR<sup>3</sup>R<sup>4</sup>、S、S(O)及びS(O)<sub>2</sub>からなる群から選択され、

R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>及びR<sup>4</sup>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<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、OR<sup>5</sup>、Si(R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>、B(OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、B(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>、CF<sub>3</sub>、CN、F、Br、I、

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

30

ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>、C-C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>、C-C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、

C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

40

ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>、C-C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C=CR<sup>5</sup>、C-C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C=O、C=S、C=Se、C=NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、

C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>アルキニル、

これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、

50

ここで、1以上の隣接しない $\text{CH}_2$ 基は、選択的に $\text{R}^5\text{C}=\text{CR}^5$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^5)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^5$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{R}^5)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{NR}^5$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ または $\text{CONR}^5$ で置換され、  
 選択的に1以上の置換基 $\text{R}^5$ で置換された $\text{C}_6-\text{C}_{60}$ アリアル、及び  
 選択的に1以上の置換基 $\text{R}^5$ で置換された $\text{C}_2-\text{C}_{57}$ ヘテロアリアル、  
 $\text{R}^5$ は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、  
 水素、重水素、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{OR}^6$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}^6)_2$ 、 $\text{B}(\text{R}^6)_2$ 、  
 $\text{OSO}_2\text{R}^6$ 、 $\text{CF}_3$ 、 $\text{CN}$ 、 $\text{F}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ 、  
 $\text{C}_1-\text{C}_{40}$ アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換され、

10

ここで、1以上の隣接しない $\text{CH}_2$ 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{NR}^6$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ または $\text{CONR}^6$ で置換され、  
 $\text{C}_1-\text{C}_{40}$ アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換され、

ここで、1以上の隣接しない $\text{CH}_2$ 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{NR}^6$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ または $\text{CONR}^6$ で置換され、  
 $\text{C}_1-\text{C}_{40}$ チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換され、

20

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

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換され、

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

これは、選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換され、

30

ここで、1以上の隣接しない $\text{CH}_2$ 基は、選択的に $\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $\text{SO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{NR}^6$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{S}$ または $\text{CONR}^6$ で置換され、  
 選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換された $\text{C}_6-\text{C}_{60}$ アリアル、及び  
 選択的に1以上の置換基 $\text{R}^6$ で置換された $\text{C}_2-\text{C}_{57}$ ヘテロアリアル、

$\text{R}^6$ は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択され、  
 水素、重水素、 $\text{OPh}$ 、 $\text{CF}_3$ 、 $\text{CN}$ 、 $\text{F}$ 、

$\text{C}_1-\text{C}_5$ 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、 $\text{CN}$ 、 $\text{CF}_3$ または $\text{F}$ で置換され、

40

$\text{C}_1-\text{C}_5$ 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、 $\text{CN}$ 、 $\text{CF}_3$ または $\text{F}$ で置換され、

$\text{C}_1-\text{C}_5$ 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、 $\text{CN}$ 、 $\text{CF}_3$ または $\text{F}$ で置換され、

$\text{C}_2-\text{C}_5$ 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、 $\text{CN}$ 、 $\text{CF}_3$ または $\text{F}$ で置換され、

$\text{C}_2-\text{C}_5$ 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、CF<sub>3</sub>またはFで置換され、

選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリアル、

選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリアル、  
N(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリアル)<sub>2</sub>、

N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリアル)<sub>2</sub>、及び

N(C<sub>2</sub>-C<sub>17</sub>ヘテロアリアル)(C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>アリアル)、

ここで、置換基R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>及びR<sup>6</sup>のうちいずれか1つは、互いに独立して、1以上の置換基R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>及び/またはR<sup>6</sup>と共に、単環または多環、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形成することができる。

10

【0007】

一実施形態において、Ar<sup>1</sup>は、選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたフェニル、及び

選択的に1以上のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたビフェニルから選択される。

【0008】

一実施形態において、Ar<sup>1</sup>は、選択的に1以上のメチル、イソプロピル、またはtert-ブチル置換基で置換されたフェニル、及び

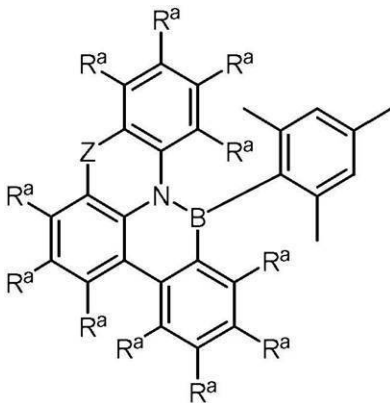
選択的に1以上のメチル、イソプロピル、またはtert-ブチル置換基で置換されたビフェニルから選択される。

【0009】

20

好ましい実施形態において、前記有機分子は、化学式IIaまたはIIbによる構造を含むか、あるいはそれからなる：

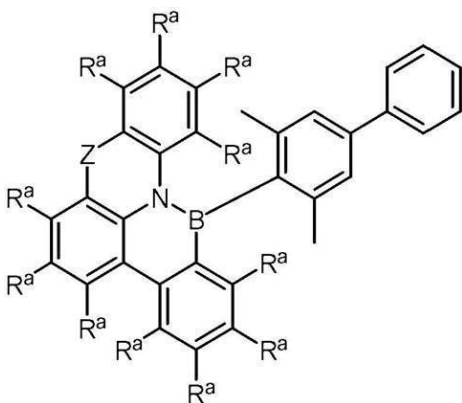
【化2】



30

(化学式IIa)

【化3】



40

(化学式IIb)。

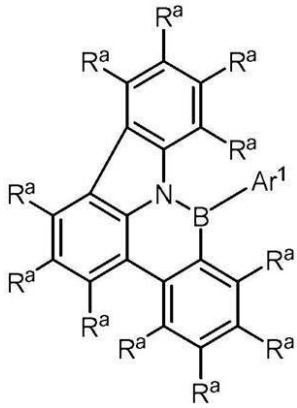
【0010】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式IIIa、化学式IIIb、化学式III

50

I c、化学式 I I I d、化学式 I I I e、化学式 I I I f、化学式 I I I g、化学式 I I I h、化学式 I I I i、化学式 I I I j、または化学式 I I I k による構造を含むか、あるいはそれからなる：

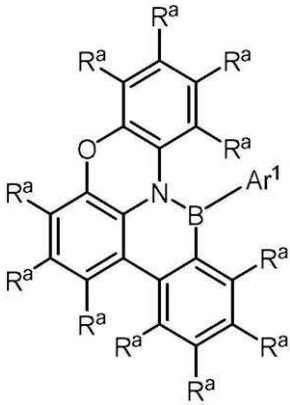
【化 4】



10

(化学式 I I I a)

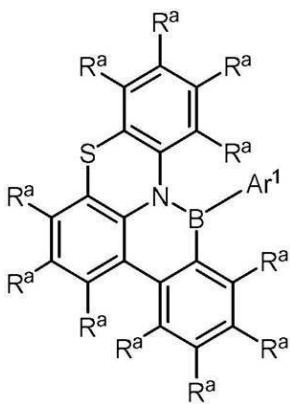
【化 5】



20

(化学式 I I I b)

【化 6】

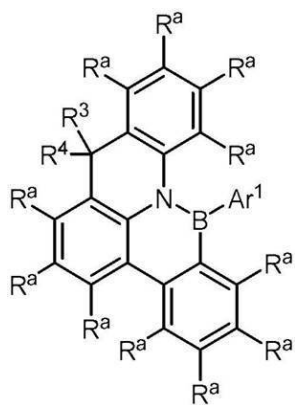


40

(化学式 I I I c)

50

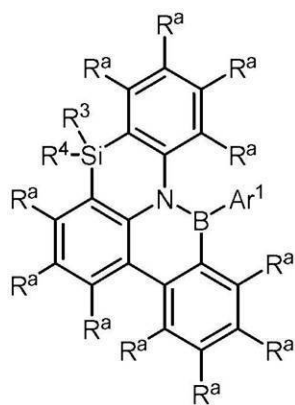
## 【化 7】



10

(化学式 I I I d)

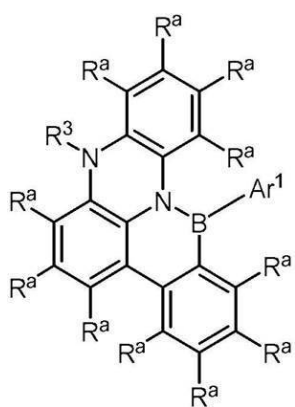
## 【化 8】



20

(化学式 I I I e)

## 【化 9】



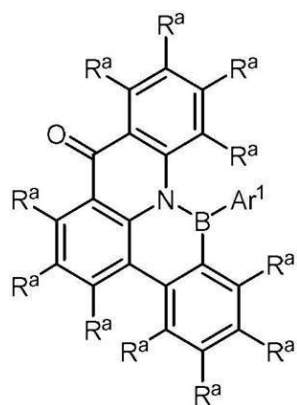
30

(化学式 I I I f)

40

50

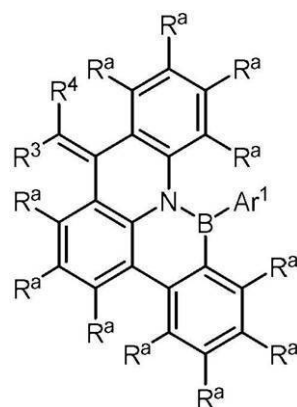
【化 1 0】



10

(化学式 I I I g)

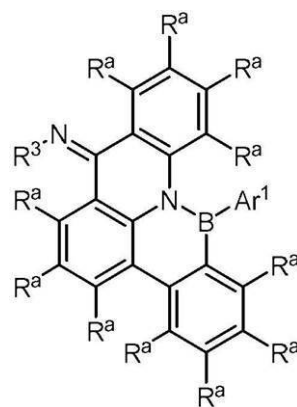
【化 1 1】



20

(化学式 I I I h)

【化 1 2】



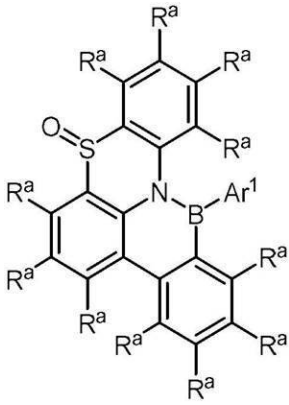
30

(化学式 I I I i)

40

50

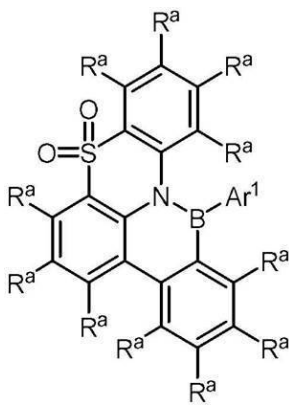
## 【化 1 3】



10

(化学式 I I I j)

## 【化 1 4】



20

(化学式 I I I k)。

## 【0 0 1 1】

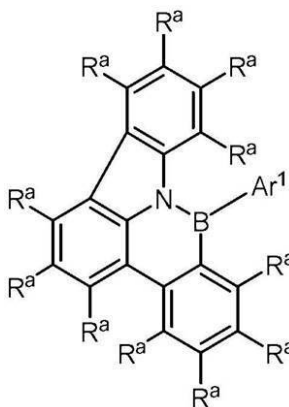
好ましい実施形態において、Zは、単結合またはOである。

## 【0 0 1 2】

本発明の一実施形態において、Zは単結合であり、前記有機分子は、化学式 I I I a の構造を含むか、あるいはそれからなる：

30

## 【化 1 5】



40

(化学式 I I I a)。

## 【0 0 1 3】

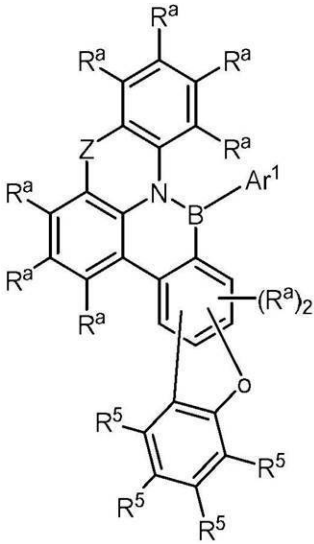
本発明の一実施形態において、少なくとも1つの単環または多環、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び/またはベンゾ縮合環系は、1以上の更なる置換基  $R^a$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$  及び/または  $R^6$  と共に、置換基  $R^a$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$  及び  $R^6$  によって形成される。

## 【0 0 1 4】

50

一実施形態において、前記有機分子は、下記化学式 I V a、化学式 I V b、化学式 I V c、化学式 I V d 及び化学式 I V e の構造を含むか、あるいはそれからなる：

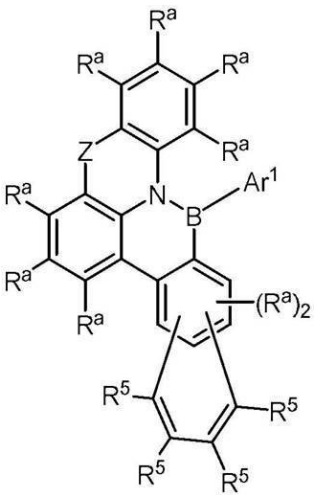
【化 1 6】



10

(化学式 I V a)

【化 1 7】

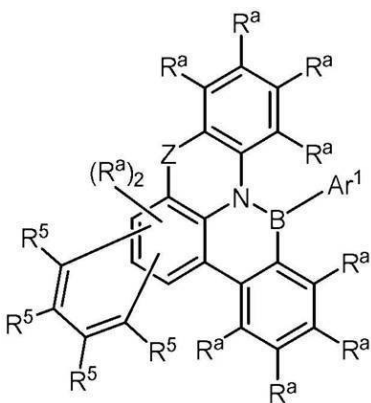


20

30

(化学式 I V b)

【化 1 8】

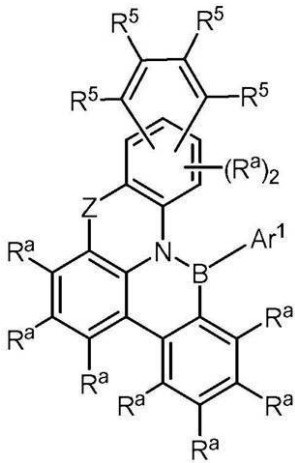


40

(化学式 I V c)

50

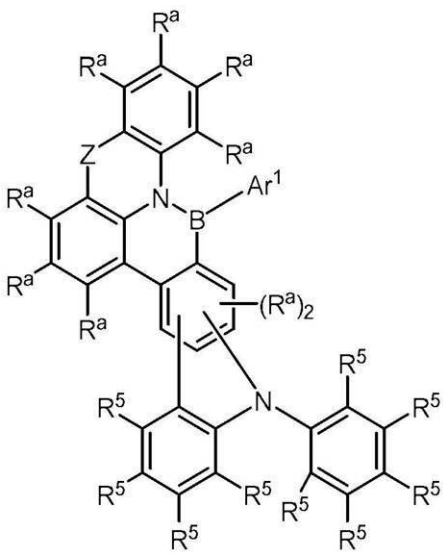
## 【化 1 9】



10

(化学式 I V d)

## 【化 2 0】



20

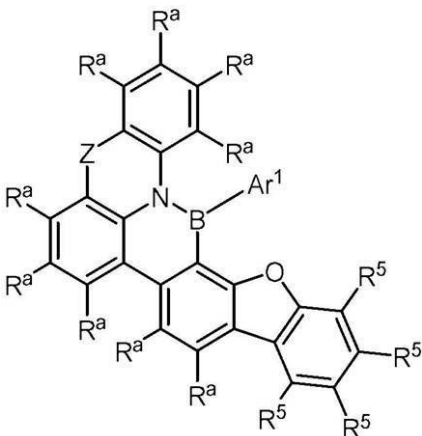
30

(化学式 I V e)。

## 【0 0 1 5】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式 I V a - 1、化学式 I V a - 2、化学式 I V a - 3、化学式 I V a - 4、化学式 I V a - 5、または化学式 I V a - 6 の構造を含むか、あるいはそれからなる：

## 【化 2 1】

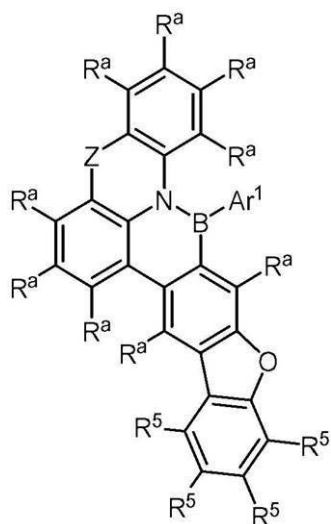


40

(化学式 I V a - 1)

50

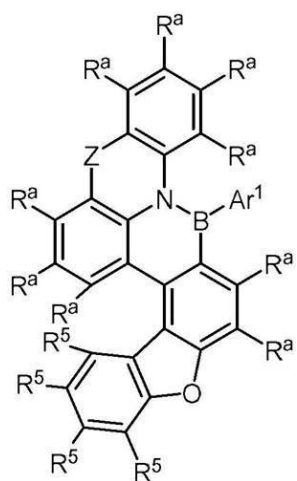
## 【化 2 2】



10

(化学式 I V a - 2)

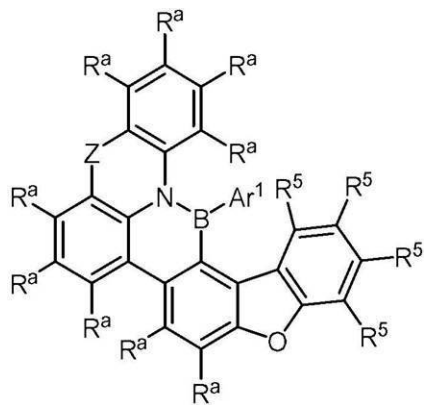
## 【化 2 3】



20

(化学式 I V a - 3)

## 【化 2 4】

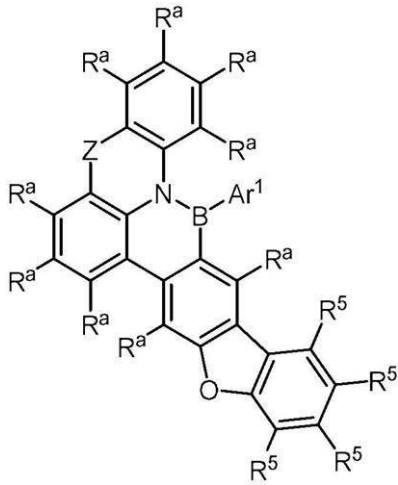


40

(化学式 I V a - 4)

50

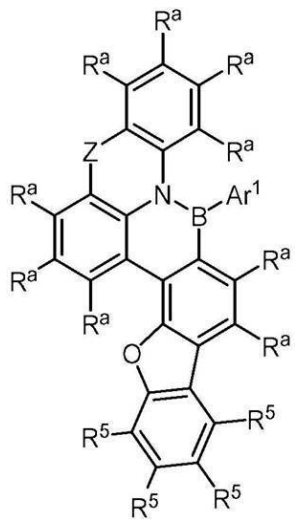
## 【化 2 5】



10

(化学式 I V a - 5)

## 【化 2 6】



20

30

(化学式 I V a - 6)。

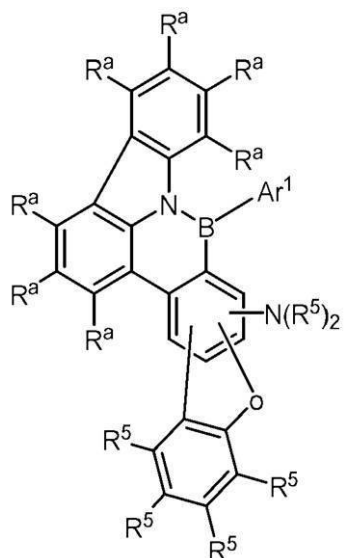
## 【0016】

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

40

50

## 【化 2 7】



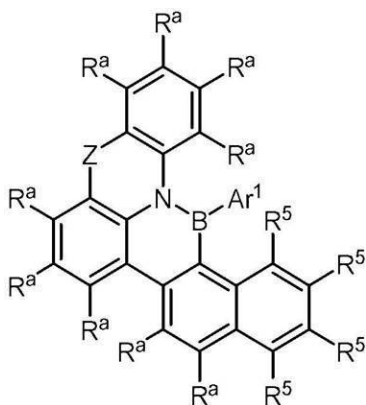
10

(化学式 I V a - 1)。

## 【0 0 1 7】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式 I V b - 1、化学式 I V b - 2、または 20  
化学式 I V b - 3の構造を含むか、あるいはそれからなる：

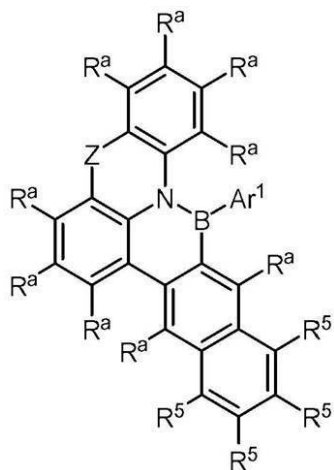
## 【化 2 8】



30

(化学式 I V b - 1)

## 【化 2 9】

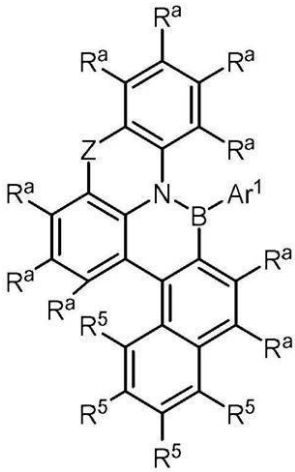


40

(化学式 I V b - 2)

50

## 【化 3 0】



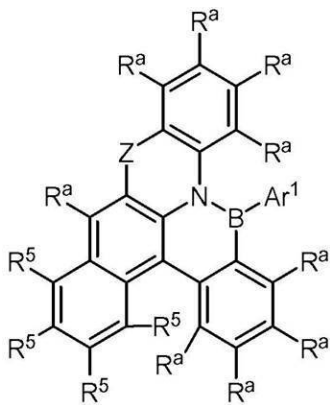
10

(化学式 I V b - 3)。

## 【 0 0 1 8】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式 I V c - 1 または化学式 I V c - 2 の構造を含むか、あるいはそれからなる：

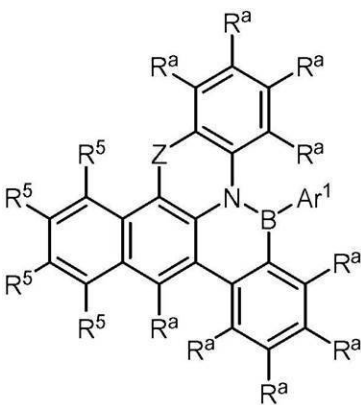
## 【化 3 1】



20

(化学式 I V c - 1)

## 【化 3 2】



30

(化学式 I V c - 2)。

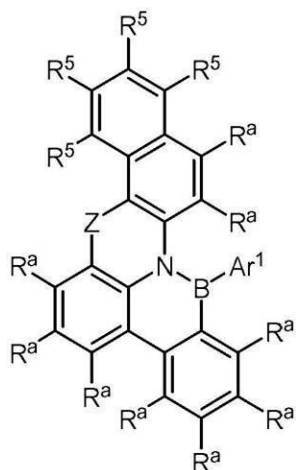
## 【 0 0 1 9】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式 I V d - 1、化学式 I V d - 2、または化学式 I V d - 3 の構造を含むか、あるいはそれからなる：

40

50

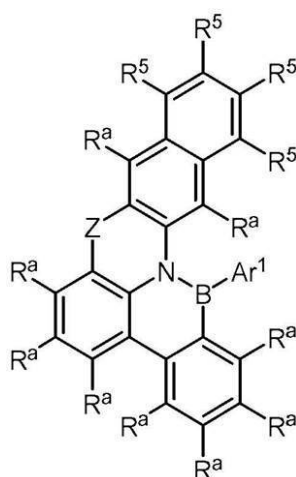
## 【化 3 3】



10

(化学式 I V d - 1)

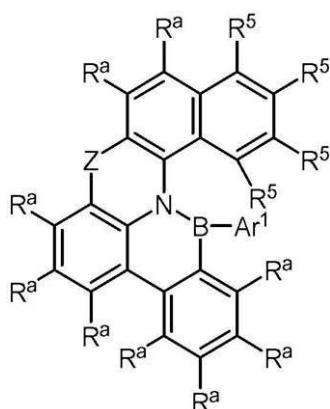
## 【化 3 4】



20

(化学式 I V d - 2)

## 【化 3 5】



40

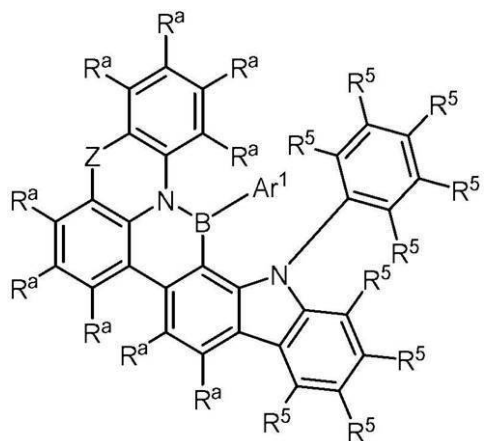
(化学式 I V d - 3)。

## 【0 0 2 0】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式 I V e - 1、化学式 I V e - 2、化学式 I V e - 3、化学式 I V e - 4、化学式 I V e - 5、または化学式 I V e - 6 の構造を含むか、あるいはそれからなる：

50

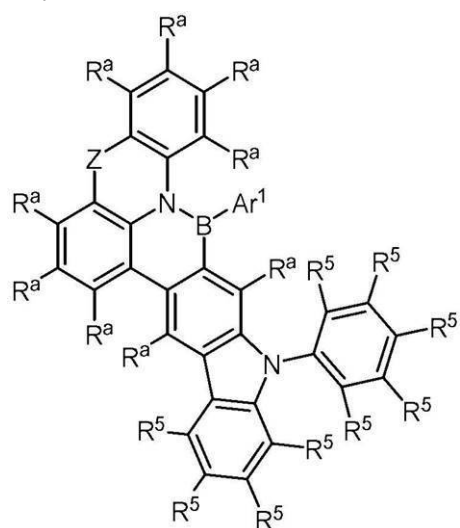
## 【化 3 6】



10

(化学式 I V e - 1)

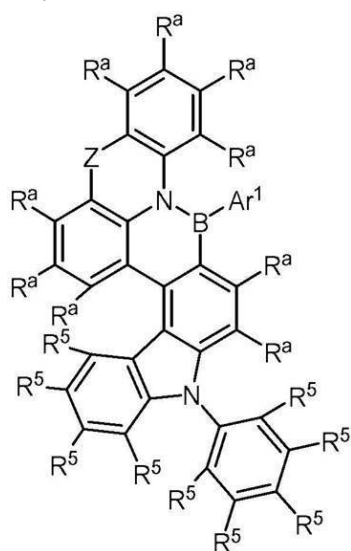
## 【化 3 7】



20

(化学式 I V e - 2)

## 【化 3 8】

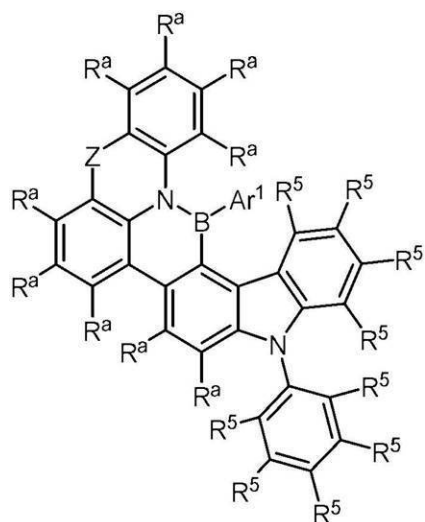


40

(化学式 I V e - 3)

50

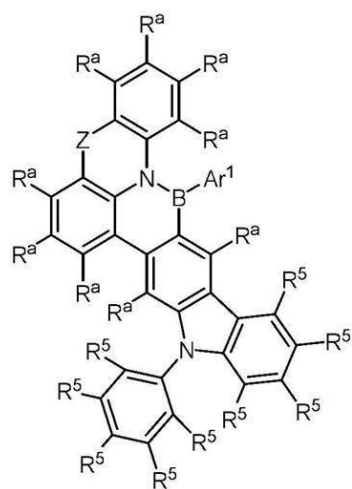
## 【化 3 9】



10

(化学式 I V e - 4)

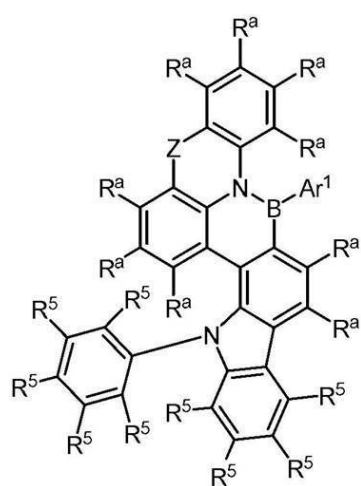
## 【化 4 0】



20

(化学式 I V e - 5)

## 【化 4 1】



40

(化学式 I V e - 6)。

## 【0 0 2 1】

50

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

10

【0022】

20

本発明の一実施形態において、少なくとも1つの単環または多環、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、1以上の更なる置換基 $R^a$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 及び/または $R^6$ と共に、少なくとも1つの置換基 $R^a$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 及び $R^6$ によって形成される。単環または多環、脂肪族、芳香族、ヘテロ芳香族及び/またはベンゾ縮合環系の一部ではない、任意の置換基 $R^a$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 及び $R^6$ は、それぞれの場合に、互いに独立して、下記からなる群から選択される：

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

30

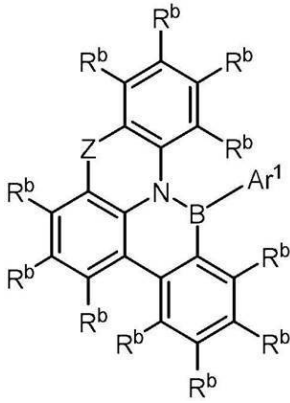
40

【0023】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式V-1または化学式V-2の構造を含むか、あるいはそれからなる：

50

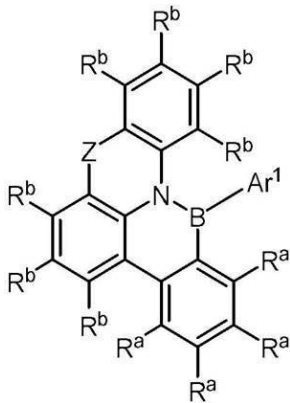
## 【化 4 2】



10

(化学式 V - 1)

## 【化 4 3】



20

(化学式 V - 2)。

## 【0024】

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

30

$C_1 - C_{40}$ アルキル、

これは、選択的に1以上の置換基  $R^5$  で置換され、

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

$C_1 - C_{40}$ アルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基  $R^5$  で置換され、

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

40

$C_1 - C_{40}$ チオアルコキシ、

これは、選択的に1以上の置換基  $R^5$  で置換され、

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

$C_2 - C_{40}$ アルケニル、

これは、選択的に1以上の置換基  $R^5$  で置換され、

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

50

C<sub>2</sub> - C<sub>40</sub>アルキニル、  
 これは、選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換され、  
 ここで、1以上の隣接しないCH<sub>2</sub>基は、選択的にR<sup>5</sup>C = CR<sup>5</sup>、C - C、Si(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Ge(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、Sn(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、C = O、C = S、C = Se、C = NR<sup>5</sup>、P(=O)(R<sup>5</sup>)、SO、SO<sub>2</sub>、NR<sup>5</sup>、O、SまたはCONR<sup>5</sup>で置換され、  
 選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリアル、及び  
 選択的に1以上の置換基R<sup>5</sup>で置換されたC<sub>2</sub> - C<sub>57</sub>ヘテロアリアル、  
 それ以外には前述の定義が適用される。

## 【0025】

本発明の更なる実施形態において、R<sup>b</sup>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： 10

水素、重水素、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF<sub>3</sub>、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF<sub>3</sub>及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたPh、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF<sub>3</sub>及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたピリジニル、

Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF<sub>3</sub>及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたカルバゾリル、

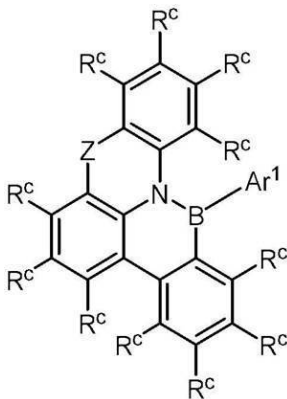
Me、*i*Pr、*t*Bu、CN、CF<sub>3</sub>及びPhからなる群から互いに独立して選択される1以上の置換基で選択的に置換されたトリアジニル、及び 20

N(Ph)<sub>2</sub>。

## 【0026】

一実施形態において、前記有機分子は、化学式V - 3または化学式V - 4の構造を含むか、あるいはそれからなる：

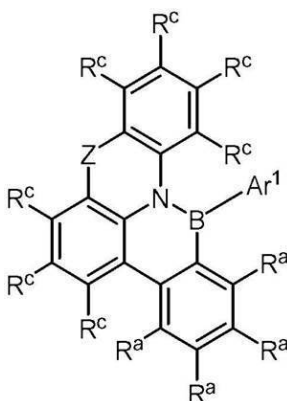
## 【化44】



30

(化学式V - 3)

## 【化45】



40

50

(化学式 V - 4)。

【0027】

ここで、 $R^c$  は、それぞれの場合に、水素及び  $R^d$  からなる群から選択され、  
ここで、 $R^d$  は、それぞれの場合に、下記からなる群から選択される：

Me、  
*i*Pr、  
*t*Bu、

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

【0028】

好ましい実施形態において、本発明の前記有機発光分子は、化学式 VI a または化学式 VI b の構造を含むか、あるいはそれからなり、ここで、正確に 3、4、5 または 6 個の置換基  $R^c$  は、それぞれの場合に、互いに独立して、 $R^d$  から選択される。

【0029】

好ましい実施形態において、 $R^d$  は、下記からなる群から選択される：

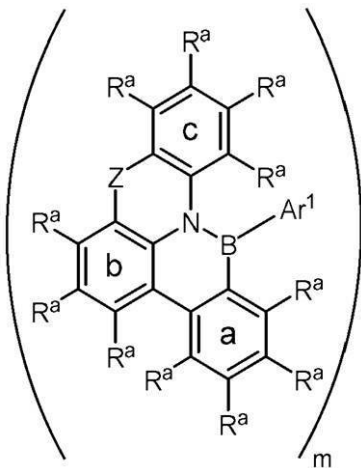
Me、  
*i*Pr、  
*t*Bu、

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

【0030】

本発明は、また、光電子素子においてエミッタとして使用されるオリゴマーを提供する。前記オリゴマーは、化学式 V で表される複数 (すなわち、2、3、4、5 または 6) の単位を含むか、あるいはそれからなる：

【化 46】



(化学式 V)。

【0031】

前記オリゴマーは、二量体乃至六量体 ( $m = 2$  乃至  $6$ )、特に二量体 ( $m = 2$ ) 乃至三量体 ( $m = 3$ )、好ましくは、二量体 ( $m = 2$ ) である。前記オリゴマーは、

- 複数の化学式 V で表される単位を有する形態であるか、
- 複数の化学式 V で表される単位が、単結合、炭素数 1 乃至 3 のアルキレン基、フェニレン基、ナフタレン基、アントラセン基、ピレン基、あるいはピリジン基、ピリミジン基またはトリアジン基からなる群から選択された連結基を介して連結された形態であるか、
- 複数の単位が連結され、化学式 I - AB による単位に含まれた環 a 及び / または環 b が、

10

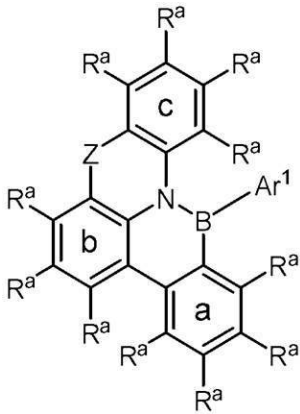
20

30

40

50

## 【化 4 7】



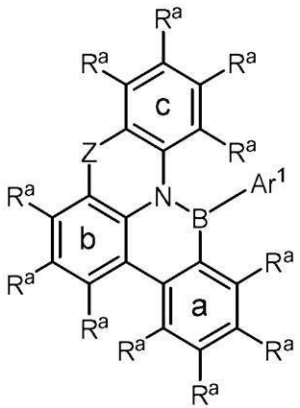
10

## (化学式 I - A B)

- 少なくとも1つの他の隣接したオリゴマーの単位によって共有された形態であるか、
- オリゴマーの単位が連結され、1つの単位の環 a 及び / または環 b が、オリゴマーの隣接した単位の環 a 及び / または環 b と縮合された形態であるか、
  - 複数の単位が連結され、化学式 I - A B C による単位に含まれた環 a 及び / または環 b 及び / または環 c が、

20

## 【化 4 8】



30

## (化学式 I - A B C)

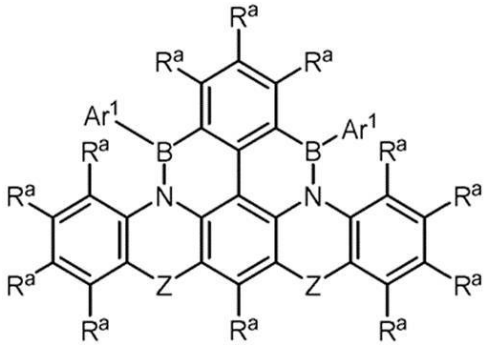
- 少なくとも1つの他の隣接したオリゴマーの単位によって共有された形態であるか、
- オリゴマーの単位が連結され、1つの単位の環 a 及び / または環 b 及び / または環 c が、オリゴマーの隣接した単位の環 a 及び / または環 b 及び / または環 c と縮合された形態であり、

ここで、前記オリゴマーの1つの単位の環 a 及び環 b が、隣接したオリゴマーの環 a 及び環 b と共有される場合、環 a と環 b との直接結合も、下記例示の構造で表されるように共有される：

40

50

## 【化 4 9】



10

## 【 0 0 3 2】

また、ここで、化学式 V で表される単位の任意の置換基  $Ar^1$ 、 $R^a$ 、 $R^3$  または  $R^4$  は、隣接した単位の任意の置換基  $Ar^1$ 、 $R^a$ 、 $R^3$  または  $R^4$  に連結されて縮合されることにより、直接結合またはアリール環またはヘテロアリール環を形成することができ、これは、選択的に 1 以上の  $C_1 - C_5$  アルキル置換基、Ph、重水素、ハロゲン、CN または  $CF_3$  で置換され、

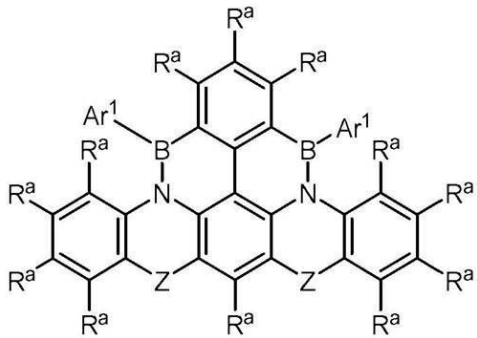
ここで、2 つの隣接した環は、また、結合を共有することができる。

## 【 0 0 3 3】

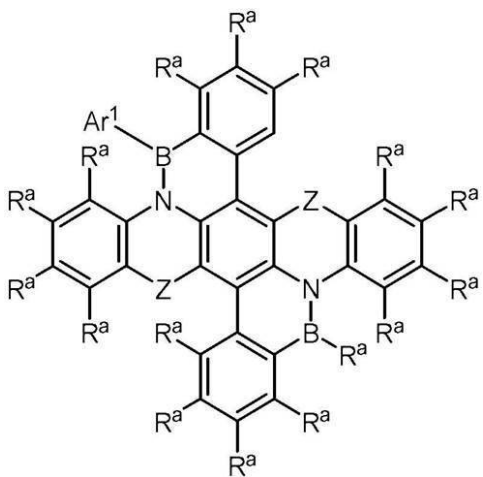
20

例は次の通りである：

## 【化 5 0】



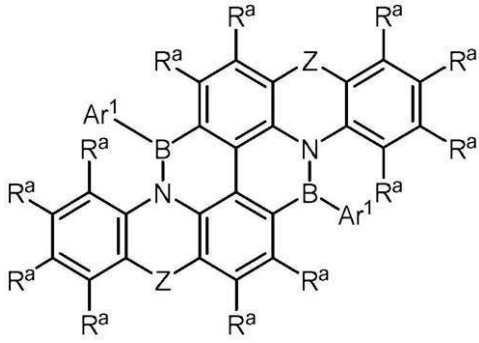
30



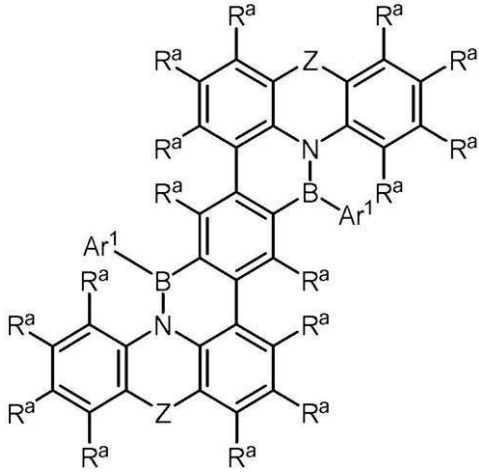
40

50

## 【化 5 1】

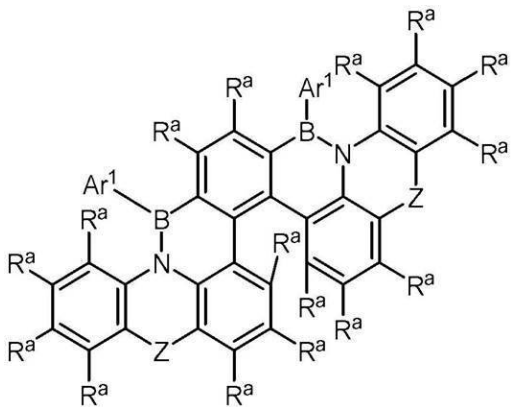


10



20

## 【化 5 2】



30

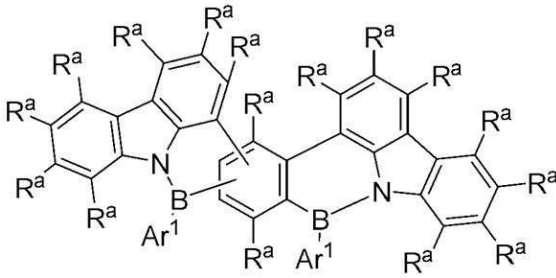
## 【 0 0 3 4】

好ましい実施形態において、前記有機分子は、化学式 V I で表される二量体を含むか、あるいはそれからなる：

40

50

## 【化 5 3】



(化学式 VI)。

## 【0035】

## 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。

## 【0036】

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。熟練された技術者は、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。

## 【0037】

本発明の文脈において、「エミッタ材料」(「エミッタ」ともいう)は、光電子素子の発光層 (EML) に含まれるとき、電圧及び電流が前記素子に加えられる場合に光を放出する材料である(下記参照)。エミッタ材料が一般的に「発光性ドーパント」材料であるということを、当業者であれば、知っており、ドーパント材料(発光性如何にかかわらず)が、通常(本明細書において)ホスト材料というマトリックス材料に組み込まれた材料であるということは、当業者であれば、理解することができる。ここで、ホスト材料は、本発明による少なくとも1つの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<sup>B</sup>と称される。

## 【0038】

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。

## 【0039】

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。

## 【0040】

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(部分)、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。

## 【0041】

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結合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。

## 【0042】

本発明の文脈において、用語「炭素環」は、最も広い意味において、環状コア構造が水素はいうまでもなく、本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む任意の環状基としても理解される。用語「炭素環の」は、形容詞であり、環状コア構造が水素はいうまでもなく、本発明の特定実施形態において定義された任意の他の置換基で置換可能な炭素原子のみを含む環状基を称するものとも理解される。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 4 3 】

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、同一でもあり、あるいは異なってもあり、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。

10

## 【 0 0 4 4 】

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。

## 【 0 0 4 5 】

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（選択的に結合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。ここで、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。

20

## 【 0 0 4 6 】

熟練された技術者によって理解されるように、用語「アリール」及び「芳香族」は、最も広い意味において、任意の単環式芳香族モイエティ、二環式芳香族モイエティまたは多環式芳香族モイエティ、すなわち、全ての環原子が芳香族環系の一部である環基、好ましくは、同一芳香族環系の一部としても理解される。しかし、本出願の全体にわたって、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、本願において、用語「ヘテロアリール」及び「ヘテロ芳香族」は、1以上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、同一でもあり、あるいは異なってもあり、N、O、S及びSe、より好ましくは、N、O及びSからなる群から個別的に選択されうる。当業者は、形容詞「芳香族」及び「ヘテロ芳香族」が任意の環状基（すなわち、任意の環系）を記述するのにも使用されることを理解する。すなわち、芳香族環状基（すなわち、芳香族環系）はアリール基であり、ヘテロ芳香族環状基（すなわち、ヘテロ芳香族環系）はヘテロアリール基である。

30

40

## 【 0 0 4 7 】

本発明の特定実施形態において特に言及されない限り、本願において、アリール基は、好ましくは、6乃至60個の芳香族環原子、より好ましくは、6~40個の芳香族環原子、より一層好ましくは、6~18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、本願において、ヘテロアリール基は、好ましくは、5~60個の芳香族環原子、より好ましくは、5~40個の芳香族環原子、より一層好ましくは、5~20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

50

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。

【0048】

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

10

【0049】

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。

【0050】

ヘテロアリール基の好ましい例は、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン；ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリドイミダゾール、ピラジノイミダゾール、キノキサリノイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、キノキサリン、ピラジン、フェナジン、ナフチリジン、カルボリン、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,2,3,4-テトラジン、1,2,4,5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジン及びベンゾチアジアゾールから誘導された基、またはそれら基の組み合わせを含む。

20

30

【0051】

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

【0052】

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

40

50

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。

【0053】

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。

【0054】

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、更なる単環または多環、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して計算される。例えば、ベンゼン環は、ナフタレンコアが形成されるように、さらに他のベンゼン環を形成する2つの隣接した置換基を有することができる。当該ナフタレンコアは、2つの炭素原子が2つのベンゼン環によって共有され、二回ではなく、一回のみ計算されるので、10個の環原子を含むことになる。

【0055】

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。

【0056】

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。特に、用語「アルキル」は、置換基である、メチル（Me）、エチル（Et）、n-プロピル（<sup>n</sup>Pr）、i-プロピル（<sup>i</sup>Pr）、シクロプロピル、n-ブチル（<sup>n</sup>Bu）、i-ブチル（<sup>i</sup>Bu）、s-ブチル（<sup>s</sup>Bu）、t-ブチル（<sup>t</sup>Bu）、シクロブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、t-ペンチル、2-ペンチル、ネオ-ペンチル、シクロペンチル、n-ヘキシル、s-ヘキシル、t-ヘキシル、2-ヘキシル、3-ヘキシル、ネオ-ヘキシル、シクロヘキシル、1-メチルシクロペンチル、2-メチルペンチル、n-ヘプチル、2-ヘプチル、3-ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、n-オクチル、2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビスシクロ[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、2,2,2-トリフルオロエチル、1,1-ジメチル-n-ヘキス-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘプト-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクト-1-イル、1,1-ジメチル-n-デス-1-イル、1,1-ジメチル-n-ドデス-1-イル、1,1-ジメチル-n-テトラデス-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘキサデス-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクタデス-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキス-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘプト-1-イル、1,1-ジエチル-n-オクト-1-イル、1,1-ジエチル-n-デス-1-イル、1,1-ジエチル-n-ドデス-1-イル、1,1-ジエチル-n-テトラデス-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキサデス-1-イル、1,1-ジエチル-n-オクタデス-1-イル、1-(n-プロピル)-シクロヘキス-1-イル、1-(n-ブチル)-シクロヘキス-1-イル、1-(n-ヘキシル)-シクロヘキス-1-イル、1-(n-オクチル)-シクロヘキス-1-イル及び1-(n-デシル)-シクロヘキス-1-イルを含む。

【0057】

10

20

30

40

50

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。

**【0058】**

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルケニル」は、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。

10

**【0059】**

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルキニル」は、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。

**【0060】**

本明細書の全体にわたって使用されているように、用語「アルコキシ」は、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。

20

**【0061】**

本明細書の全体にわたって使用されている用語「チオアルコキシ」は、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。

**【0062】**

本明細書の全体にわたって使用されている用語「ハロゲン」(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。

30

**【0063】**

分子フラグメントが、置換基や、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。

**【0064】**

また、本願において「C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール」または「C<sub>1</sub> - C<sub>40</sub>アルキル」のような置換基がその置換基内の結合部位を示す名称なしに言及される度に、これは、それぞれの置換基が任意の原子を介して結合されることを意味する。例えば、「C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール」置換基は、任意の 6 乃至 60 個の芳香族炭素原子を介して結合され、「C<sub>1</sub> - C<sub>40</sub>アルキル」置換基は、任意の 1 乃至 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。

40

**【0065】**

本発明の文脈において、「ブチル」、「ビフェニル」または「ターフェニル」のような置換基が追加詳細なしに言及される度に、これは、それぞれの置換基の任意の異性質体が特定置換基として許容されることを意味する。これと係わり、例えば、置換基としての用語「ブチル」は、置換基として、n - ブチル、s - ブチル、t - ブチル及びイソ - ブチルを含む。同様に、置換基として、用語「ビフェニル」は、オルト - ビフェニル、メタ - ビ

50

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、熟練され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位置を示す。

#### 【0066】

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、本願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。

#### 【0067】

本願に言及された任意の構造に含まれた全ての水素原子(H)は、それぞれの場合に互いに独立して、具体的に述べられない限り、重水素(D)にも置換される。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。

#### 【0068】

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EST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センス量子収率(PLQY)の比較は、PLQYの決定が同一反応条件(例えば、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と共に)によって決定される必要がある。

#### 【0069】

#### 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。

#### 【0070】

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
- ・有機レーザー
- ・ダウンコンバージョン素子。

#### 【0071】

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。

#### 【0072】

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(L EC)、有機レーザー及び発光トランジスタからなる群から選択される。

#### 【0073】

10

20

30

40

50

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。

【0074】

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（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。

10

【0075】

ここで、該OLEDは、アノード層A、カソード層C及び発光層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もある。

【0076】

また、本発明による少なくとも1つの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。

20

【0077】

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

- 1．基板
- 2．カソード層C
- 3．電子注入層（EIL）
- 4．電子輸送層（ETL）
- 5．正孔阻止層（HBL）
- 6．発光層（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。

30

【0078】

ここで、該OLED（逆積み層構造を有する）は、アノード層A、カソード層C及び発光層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もある。

40

【0079】

本発明による有機分子（前述の実施形態による）は、特定の構造及び置換によって多様な層に使用可能である。使用される場合、光電子素子、特にOLEDのそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0.1重量%～99重量%、より好ましくは、1重量%～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。

【0080】

一実施形態において、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子は、積層構造を有することができるOLEDである。前記構造においては、OLEDが並んで配される一般配置とは異なり、個別ユニットが互いの上に積層される。混合光は、積層構造

50

を示す OLED によって生成され、特に、白色光は、青色 OLED、緑色 OLED 及び赤色 OLED を積層して生成される。また、積層構造を示す OLED は、選択的に電荷生成層 (CGL) を含んでもよく、それは、一般的に、2つの OLED サブユニット間に位置し、一般的に、n - ドーピングされた層及び p - ドーピングされた層として構成される。一般的に、1つの CGL の n - ドーピングされた層がアノード層にさらに近く位置する。

【0081】

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

10

【0082】

一実施形態において、少なくとも1つの本発明に係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もあり、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もある。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)。

20

【0083】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子の場合、少なくとも1つの本発明による有機分子は、光電子素子の発光層 (EML)、最も好ましくは、OLED の EML に含まれる。しかし、本発明による有機分子は、例えば、電子輸送層 (ETL) 及び/または電子阻止層 (EBL) または励起子阻止層及び/または正孔輸送層 (HTL) 及び/または正孔阻止層 (HBL) でも使用される。使用される場合、光電子素子、特に OLED のそれぞれの層において、本発明による有機分子の分率は、0.1重量% ~ 99重量%、より好ましくは、0.5重量% ~ 80重量%、特に0.5重量% ~ 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。

30

【0084】

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。最新技術は、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。最新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、本発明による少なくとも1つの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、本発明による少なくとも1つの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、本発明による少なくとも1つの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。

40

【0085】

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

50

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もある。

10

## 【0086】

好ましくは、アノード層Aは、（本質的に）インジウムスズ酸化物（ITO）（例えば、 $(InO_3)_{0.9}(SnO_2)_{0.1}$ ）で構成される。透明伝導性酸化物（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もある。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'-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) 30、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'-スピロピフルオレン-2,7-ジアミン(Spiro-NPD)によって構成されてもよい。

20

30

## 【0087】

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てもよい。例えば、トリアリールアミン及び/またはカルバゾールのような、電子が豊富なヘテロ芳香族化合物が、正孔輸送化合物として使用されてもよい。該HTLは、アノード層Aと発光層（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)(-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'-ビス-(1 40

40

50

- 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 ( N P B )、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 ( N P N P B )、N, N, N', N' - テトラキス ( 4 - メトキシフェニル) ベンジジン ( M e O - T P D )、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 ( H A T - C N ) 及び / または 9, 9' - ジフェニル - 6 - ( 9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 9 H, 9' H - 3, 3' - ビカルバゾール ( T r i s P c z ) のような星状のヘテロ環を含むものでもある。また、該 H T L 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てもよい。該有機ドーパントとしては、例えば、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン ( F<sub>4</sub> - T C N Q )、銅 - ペンタフルオロ安息香酸 ( C u ( I ) p F B z ) または遷移金属錯体を使用されてもよい。

10

#### 【 0 0 8 8 】

E B L は、例えば、1, 3 - ビス ( カルバゾール - 9 - イル) ベンゼン ( m C P )、トリス ( 4 - カルバゾイル - 9 - イルフェニル) アミン ( T C T A )、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 - T N A T A )、3, 3 - ジ ( 9 H - カルバゾール - 9 - イル) ビフェニル ( m C B P )、9 - フェニル - 3, 6 - ビス ( 9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 9 H - カルバゾール ( t r i s - P c z )、9 - ( 4 - t e r t - ブチルフェニル) - 3, 6 - ビス ( トリフェニルシリル) - 9 H - カルバゾール ( C z S i ) 及び / または N, N' - ジカルバゾリル - 1, 4 - ジメチルベンゼン ( D C B ) を含むものであってもよい。

20

#### 【 0 0 8 9 】

正孔輸送層 ( H T L ) または ( 存在する場合) 電子阻止層 ( E B L ) に隣接し、一般的に発光層 ( E M L ) が位置する。発光層 ( E M L ) 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、E M L 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 ( C B P )、1, 3 - ビス ( カルバゾール - 9 - イル) ベンゼン ( m C P )、3, 3 - ジ ( 9 H - カルバゾール - 9 - イル) ビフェニル ( m C B P )、ジベンゾ [ b, d ] チオフェン - 2 - イルトリフェニルシラン ( S i f 8 7 )、9 - ( 4 - t e r t - ブチルフェニル) - 3, 6 - ビス ( トリフェニルシリル) - 9 H - カルバゾール ( C z S i )、ジベンゾ [ b, d ] チオフェン - 2 - イル) ジフェニルシラン ( S i f 8 8 )、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 ( D P E P O )、9 - [ 3 - ( ジベンゾフラン - 2 - イル) フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [ 3 - ( ジベンゾフラン - 2 - イル) フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [ 3, 5 - ビス ( 2 - ジベンゾフラニル) フェニル] - 9 H - 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] - 9 H - 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 ( T 2 T )、2, 4, 6 - トリス ( トリフェニル - 3 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン ( T 3 T ) 及び / または 2, 4, 6 - トリス ( 9, 9' - スピロピフルオレン - 2 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン ( T S T ) のうち選択される。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 ( T 1 ) 及び第 1 ( すなわち、最低) 励起一重項状態 ( S 1 ) 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 ( T 1 ) 及び第 1 ( すなわち、最低) 励起一重項状態 ( S 1 ) エネルギー準位よりもエネルギーが高い。

30

40

#### 【 0 0 9 0 】

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 E M L は、本発明による少なくとも 1 つの分子を含むことが好ましい。本発明による少なくとも 1 つの有機分子を含む光電子素子の E M L の好ましい組成は、本文の後項 ( 以下参照) でさらに詳

50

細に説明する。

【0091】

発光層（EML）に隣接し、電子輸送層（ETL）が位置しうる。ここで、任意の電子輸送体を使用されてもよい。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てもよい。該電子輸送体は、また、1, 3, 5-トリ（1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル）フェニル（TPBi）のような星状のヘテロ環であってもよい。該ETLは、例えば、2, 9-ピス（ナフタレン-2-イル）-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン（NBphen）、アルミニウム-トリス（8-ヒドロキシキノリン）（Alq<sub>3</sub>）、ジフェニル-4-トリフェニルシリルフェニル-ホスフィンオキサイド（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-ピス[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'-ピス-[2-(4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジニル)]-1, 1'-ビフェニル（BTB）を含むものであってもよい。選択的に、該ETLは、8-ヒドロキシキノリノラトリチウム（Li<sub>q</sub>）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。

10

20

【0092】

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)ピス（9H-カルバゾール）、ピス（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-ピス（ナフタレン-2-イル）-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン（NBphen）、アルミニウム-トリス（8-ヒドロキシキノリン）（Alq<sub>3</sub>）、ジフェニル-4-トリフェニルシリルフェニル-ホスフィンオキサイド（TSPO1）、2, 4, 6-トリス（ビフェニル-3-イル）-1, 3, 5-トリアジン（T2T）、2, 4, 6-トリス（トリフェニル-3-イル）-1, 3, 5-トリアジン（T3T）、2, 4, 6-トリス（9, 9'-スピロピフルオレン-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。

30

【0093】

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。

40

【0094】

OLEDは、選択的に、電子輸送層（ETL）とカソード層Cとの間に、保護層（電子注入層（EIL）とも称される）をさらに含んでもよい。該層は、フッ化リチウム、フッ化セシウム、銀、8-ヒドロキシキノリノラトリチウム（Li<sub>q</sub>）、Li<sub>2</sub>O、BaF<sub>2</sub>、MgO及び/またはNaFを含むものであってもよい。

【0095】

50

選択的に、電子輸送層 ( E T L ) 及び / または正孔阻止層 ( H B L ) は、また、1 以上のホスト化合物を含むものであってもよい。

【 0 0 9 6 】

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： > 3 8 0 ~ 4 2 0 n m の波長範囲

深青色： > 4 2 0 ~ 4 8 0 n m の波長範囲

空色： > 4 8 0 ~ 5 0 0 n m の波長範囲

緑色： > 5 0 0 ~ 5 6 0 n m の波長範囲

黄色： > 5 6 0 ~ 5 8 0 n m の波長範囲

オレンジ色： > 5 8 0 ~ 6 2 0 n m の波長範囲

赤色： > 6 2 0 ~ 8 0 0 n m の波長範囲。

10

【 0 0 9 7 】

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、 > 4 2 0 ~ 4 8 0 n m 範囲で最大発光を有し、空色エミッタは、 > 4 8 0 ~ 5 0 0 n m 範囲で最大発光を有し、緑色エミッタは、 > 5 0 0 ~ 5 6 0 n m 範囲で最大発光を有し、赤色エミッタは、 > 6 2 0 ~ 8 0 0 n m 範囲で最大発光を有する。

【 0 0 9 8 】

深青色エミッタは、好ましくは、4 7 5 n m 未満、より好ましくは、4 7 0 n m 未満、より一層好ましくは、4 6 5 n m 未満、またははなはだしくは、4 6 0 n m 未満の最大発光を有することができる。それは、一般的に、4 2 0 n m 超過、好ましくは、4 3 0 n m 超過、より好ましくは、4 4 0 n m 超過、またははなはだしくは、4 5 0 n m 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、4 2 0 ~ 5 0 0 n m、好ましくは、4 3 0 ~ 4 9 0 n m、より好ましくは、4 4 0 ~ 4 8 0 n m、最も好ましくは、4 5 0 ~ 4 7 0 n m 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 ) ( P M M A )、m C B P 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、D C M またはトルエン内の 0 . 0 0 1 m g / m L の本発明による有機分子から、室温 ( すなわち、( 約 ) 2 0 ) で測定される。

20

30

【 0 0 9 9 】

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、I T U - R R e c o m m e n d a t i o n B T . 2 0 2 0 ( R e c . 2 0 2 0 ) によって定義されているような原色青色 ( C I E x = 0 . 1 3 1 及び C I E y = 0 . 0 4 6 ) の C I E x ( = 0 . 1 3 1 ) 及び C I E y ( = 0 . 0 4 6 ) の色座標に近い C I E x 及び C I E y の色座標を有する光を放出する O L E D に係わるものであり、これは、U H D ( U l t r a H i g h D e f i n i t i o n ) ディスプレイ、例えば、U H D - T V 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 . 0 2 ~ 0 . 3 0、好ましくは、0 . 0 3 ~ 0 . 2 5、より好ましくは、0 . 0 5 ~ 0 . 2 0、より一層好ましくは、0 . 0 8 ~ 0 . 1 8、またははなはだしくは、0 . 1 0 ~ 0 . 1 5 の C I E x 色座標、及び / または、0 . 0 0 ~ 0 . 4 5、好ましくは、0 . 0 1 ~ 0 . 3 0、より好ましくは、0 . 0 2 ~ 0 . 2 0、より一層好ましくは、0 . 0 3 ~ 0 . 1 5、またははなはだしくは、0 . 0 4 ~ 0 . 1 0 の C I E 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 O L E D に係わるものである。

40

【 0 1 0 0 】

さらに他の実施形態は、1 0 0 0 c d / m <sup>2</sup> において、8 % 超過、好ましくは、1 0 % 超過、より好ましくは、1 3 % 超過、より一層好ましくは、1 5 % 超過、またははなはだしくは、2 0 % 超過の外部量子効率を示し、及び / または、4 2 0 n m ~ 5 0 0 n m、好ましくは、4 3 0 n m ~ 4 9 0 n m、より好ましくは、4 4 0 n m ~ 4 8 0 n m、より一層好ましくは、4 5 0 n m ~ 4 7 0 n m の最大発光を示し、及び / または、5 0 0 c d /

50

m<sup>2</sup>において、100h超過、好ましくは、200h超過、より好ましくは、400h超過、より一層好ましくは、750h超過、またははなはだしくは、1000h超過のLT80値を示す、少なくとも1つの本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

【0101】

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

【0102】

さらに他の好ましい実施形態は、本発明による1以上の有機分子を含み、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、本発明による少なくとも1つの有機分子を含むOLEDは、0.30eV未満、好ましくは、0.25eV未満、より好ましくは、0.20eV未満、より一層好ましくは、0.1eV未満、または0.17eV未満の、主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

10

【0103】

本発明によれば、本発明による1以上の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。

【0104】

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。

20

【0105】

例えば、当業者は、EMLが、電圧（及び電流）が前記素子に印加されるときに発光する単一材料で構成されることを理解する。しかし、当業者は、光電子素子（ここで、好ましくは、OLED）のEMLにおいて、異なる材料、特に1以上のホスト材料（すなわち、マトリックス材料；ここで、少なくとも1つの本発明による有機分子を含む光電子素子に含まれるとき、ホスト材料H<sup>B</sup>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。

30

【0106】

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

【0107】

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

40

【0108】

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

【0109】

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

【0110】

50

当業者に知られているように、例えば、有機発光ダイオード（OLED）において、エミッタ材料（すなわち、発光性ドーパント）からの発光は、励起された一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態  $S_1$ ）からの蛍光、及び励起された三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態  $T_1$ ）からの燐光を含む。

#### 【0111】

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。

#### 【0112】

本発明の文脈において、遅延蛍光材料は、逆項間交差（RISC；すなわち、アップ項間交差または逆項間交差）により、励起三重項状態（一般的に、最低励起三重項状態  $T_1$ ）から励起一重項状態（一般的に、最低励起一重項状態  $S_1$ ）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、 $S_1$ ）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、 $T_1$ ）から励起一重項状態（一般的に、 $S_1$ ）への RISC 後に観察された蛍光発光が発生する時間尺度（一般的に、マイクロ秒範囲）は、直接的な（すなわち、即時）蛍光が発生する時間尺度（一般的に、ナノ秒範囲）より遅く、したがって、遅延蛍光（DF）という。励起三重項状態（一般的に、 $T_1$  から）から励起一重項状態（一般的に、 $S_1$  まで）への RISC が熱活性化を介して発生し、そのように充填された励起一重項状態が発光する場合（遅延蛍光発光）、その過程を熱活性化遅延蛍光（TADF）という。したがって、TADF 材料は、前述のように熱活性化遅延蛍光（TADF）を発光することができる材料である。蛍光エミッタ F の最低励起一重項状態エネルギー準位  $E(S_1^E)$  と最低励起三重項状態エネルギー準位  $E(T_1^E)$  とのエネルギー差  $E_{ST}$  が減少すれば、RISC による最低励起一重項状態から最低励起三重項状態への切り替えが高効率で起こることは当業者に知られている。したがって、TADF 材料が一般的に小さい  $E_{ST}$  値を有するという事は、当業者の一般知識の一部を形成する（以下参照）。当業者に知られているように、TADF 材料は、単純に前述のように TADF の後続放出と共に、励起三重項状態から励起一重項状態へのそれ自体の RISC が可能な材料ではない。TADF 材料は、事実上 2 種類の材料、好ましくは、2 つのホスト材料  $H^B$ 、より好ましくは、p - ホスト材料  $H^P$  及び n - ホスト材料  $H^N$  から形成されるエキシプレックスであることが当業者に知られている（以下参照）。

#### 【0113】

（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）フォトミネセンス（PL）測定から得た減衰曲線に基づいて分析される。このために、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）内で、1 ~ 10 重量%、特に 10 重量%の各エミッタ（すなわち、仮定された TADF 材料）のスピンコーティング膜がサンプルとして使用される。分析は、例えば、Edinburgh Instruments の FS5 蛍光分光計を使用して行われる。サンプル PMMA フィルムをキュベットに入れて測定する間に、窒素雰囲気は維持される。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減衰力学を収集するために、4 個の時間領域（200 ns、1  $\mu$ s、20  $\mu$ s 及び > 80  $\mu$ s 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）。

#### 【0114】

TADF 材料は、好ましくは、前述の全体減衰力学と係わり、以下の 2 つの条件を満たす：

(i) 減衰力学は、2 つの時間領域を示し、1 つはナノ秒（ns）範囲にあり、他の 1 つはマイクロ秒（ $\mu$ s）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。

10

20

30

40

50

## 【 0 1 1 5 】

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取られ、二番目の減衰領域で放出された光の一部は遅延蛍光と取られる。

## 【 0 1 1 6 】

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センス減衰を経時的に積分して計算される：

## 【 数 1 】

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

10

## 【 0 1 1 7 】

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。

## 【 0 1 1 8 】

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。

20

## 【 0 1 1 9 】

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  $E(S^1 E)$  と最低励起三重項状態エネルギー準位  $E(T^1 E)$  とのエネルギー差に該当する  $E_{ST}$  値を示すことを特徴とし、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。TADF材料  $E^B$  の  $E_{ST}$  値を決定する方法は、本文の後項で説明されている。

## 【 0 1 2 0 】

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、本願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てもよい。

30

## 【 0 1 2 1 】

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てもよい。

## 【 0 1 2 2 】

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。

40

## 【 0 1 2 3 】

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。

## 【 0 1 2 4 】

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：

50

## (i) カルバゾリルジシアノベンゼン化合物

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

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

## (iii) カルバゾリルシアノビフェニル化合物

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

ここで、それら材料において、1以上のニトリル基は、アクセプターモイエティとして、フッ素 (F) またはトリフルオロメチル (CF<sub>3</sub>) にも代替される。

## 【0125】

また、トリアジン、ピリミジン、トリアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ヘプタジン、1, 4 - ジアザトリフェニレン、ベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、キノキサリン及びジアザフルオレン誘導体のような窒素ヘテロ環は、TADF分子構成に使用される周知のアクセプターモイエティである。例えば、トリアジンアクセプターを含むTADF分子の公知の例は、PIC-TRZ (7, 7' - (6 - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン - 2, 4 - ジイル) ビス (5 - フェニル - 5, 7 - ジヒドロインドロ [2, 3 - b] カルバゾール))、mBFCzTrz (5 - (3 - (4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン - 2 - イル)) フェニル) - 5H - ベンゾフロ [3, 2 - c] カルバゾール)、及びDCzTrz (9, 9' - (5 - (4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン - 2 - イル) - 1, 3 - フェニレン) ビス (9H - カルバゾール)) を含む。

## 【0126】

TADF材料の他の一群は、ドナーモイエティ (主に、カルバゾリル置換基) が結合されたアクセプターモイエティとして、ベンゾフェノンのようなジアリールケトン、または4 - ベンゾイルピリジン、9, 10 - アントラキノン、9H - キサンテン - 9 - オンのような (ヘテロアリアル) アリールケトン及びその誘導体を含む。そのようなTADF分子の例は、BPBCz (ビス (4 - (9' - フェニル - 9H, 9' H - [3, 3' - ビカルバゾール] - 9 - イル) フェニル) メタノン)、mDCBP ((3, 5 - ジ (9H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) (ピリジン - 4 - イル) メタノン)、AQ-DTBu-Cz (2, 6 - ビス (4 - (3, 6 - ジ - tert - ブチル - 9H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) アントラセン - 9, 10 - ジオン)、及びMCz-Xt (3 - (1, 3, 6, 8 - テトラメチル - 9H - カルバゾール - 9 - イル) - 9H - キサンテン - 9 - オン) をそれぞれ含む。

## 【0127】

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

## 【0128】

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、または、本明細書に定義されたようなTADF材料E<sup>B</sup>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FWMエミッタS<sup>B</sup>は、本明細書に定義されたようなTADF材料E<sup>B</sup>であってもよく、そうでなくてもよい。

## 【0129】

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T<sub>1</sub>）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<sup>B</sup>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。

10

## 【0130】

ここで、燐光材料P<sup>B</sup>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<sup>B</sup>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<sup>B</sup>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）。

## 【0131】

光電子素子に使用される燐光材料P<sup>B</sup>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<sup>B</sup>として適しているか、及びそれらを合成する方法が分かっている。また、当業者は、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慣れ、構造的変化を介して錯体の放出を調整する方法が分かっている。

20

## 【0132】

当業者は、光電子素子に使用される燐光材料P<sup>B</sup>としていかなる材料が適しているか、及びそれらを合成する方法が分かっている。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<sup>B</sup>として使用するための燐光錯体の設計原理に慣れ、構造的変化を介して錯体の放出を調整する方法が分かっている。

30

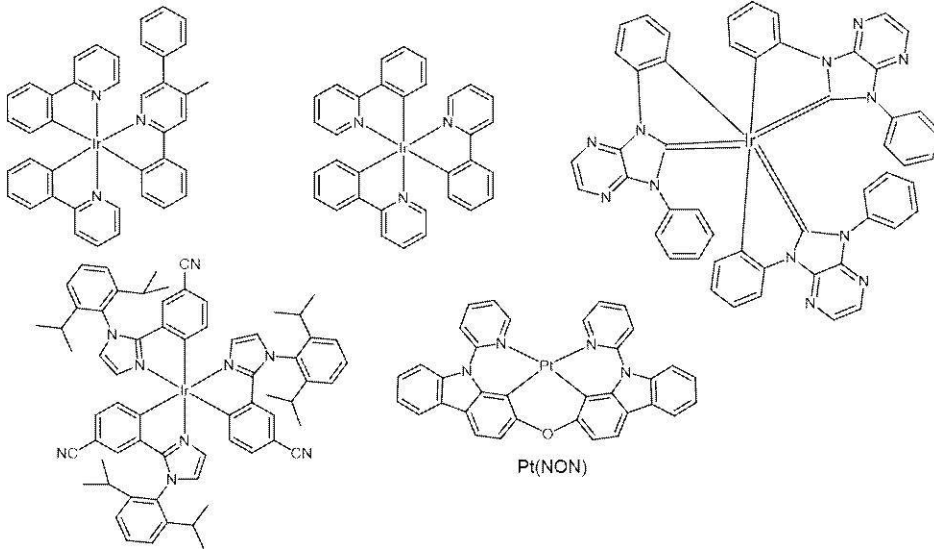
## 【0133】

本発明による有機分子と共に使用可能な燐光材料P<sup>B</sup>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、最新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<sup>B</sup>である：

40

50

## 【化 5 4】



10

## 【 0 1 3 4】

本発明の文脈において、小さい半値幅（FWHM）エミッタ  $S^B$  は、 $0.35 \text{ eV}$  以下（ $0.35 \text{ eV}$ ）、好ましくは、 $0.30 \text{ eV}$  以下（ $0.30 \text{ eV}$ ）、特に  $0.25 \text{ eV}$  以下（ $0.25 \text{ eV}$ ）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） $20^\circ\text{C}$ ）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） $20^\circ\text{C}$ ）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てもよい。

20

## 【 0 1 3 5】

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） $20^\circ\text{C}$ ）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。

30

## 【 0 1 3 6】

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（ここで、好ましくは、電子ボルト  $\text{eV}$  で記録される）を決定する手段は、当業者の常識の一部である。例えば、発光スペクトルの主発光ピークが、発光スペクトルからナノメートル（ $\text{nm}$ ）で得られた 2 つの波長  $\lambda_1$  及び  $\lambda_2$  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（ $\text{eV}$ ）の FWHM は、一般的に（及び、ここで）、以下の方程式を使用して決定される：

40

## 【数 2】

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

50

## 【0137】

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の意味する。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。

## 【0138】

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。

## 【0139】

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

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

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

## 【0140】

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両極性ホスト材料 $H^{B^P}$ であるという事実が分かっている。

## 【0141】

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-ジベンゾフラン-2-イル)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。

## 【0142】

EMLは、少なくとも1つのp-ホスト $H^P$ と1つのn-ホスト $H^N$ を有するいわゆる混合ホストシステムを含む。ここで、n-ホスト $H^N$ は、ピリジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン及び1,2,3-トリアジンから誘導された基を含み、p-ホスト $H^P$ は、インドール、イソインドール、好ましくは、カルバゾールから誘導された基を含む。

## 【0143】

当業者は、どのような材料が有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するのに適しているホスト材料であるかが分かっている。最新技術で使用される任意のホスト材料が、本発明の文脈における好適なホスト材料 $H^B$ であるものと理解される。

## 【0144】

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

10

20

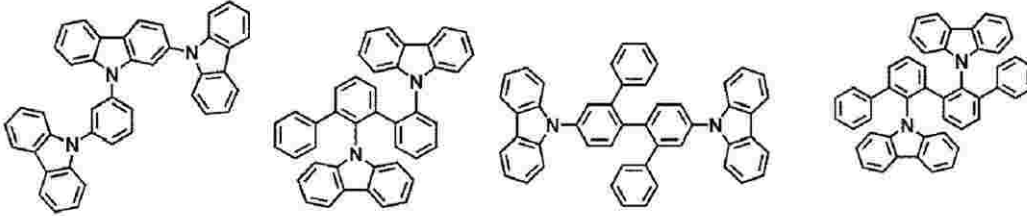
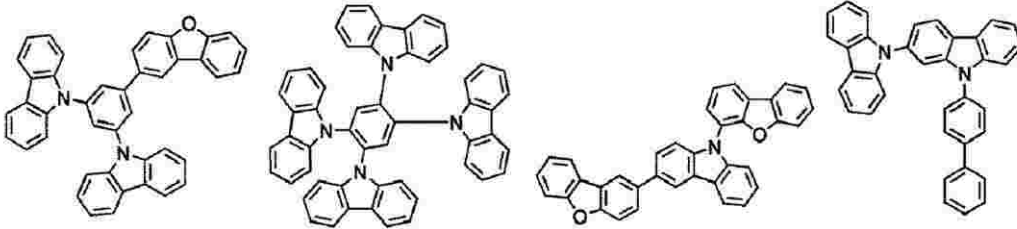
30

40

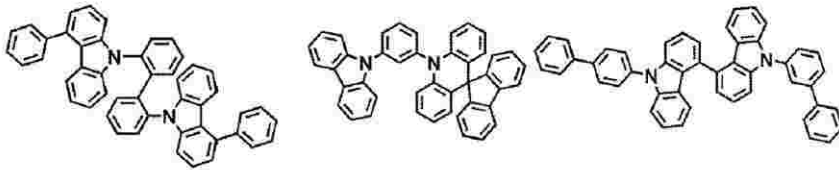
50



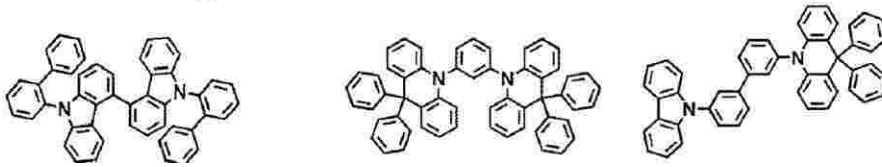
## 【化 5 7】



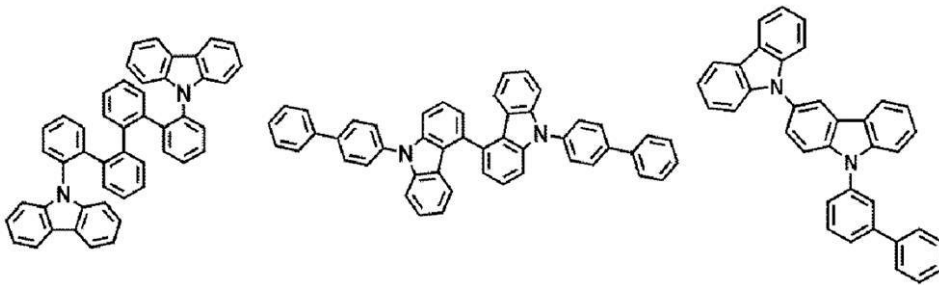
10



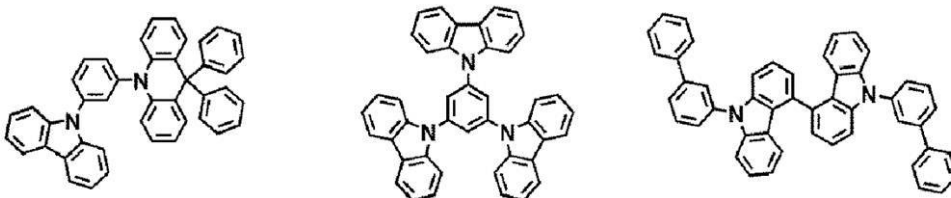
20



## 【化 5 8】



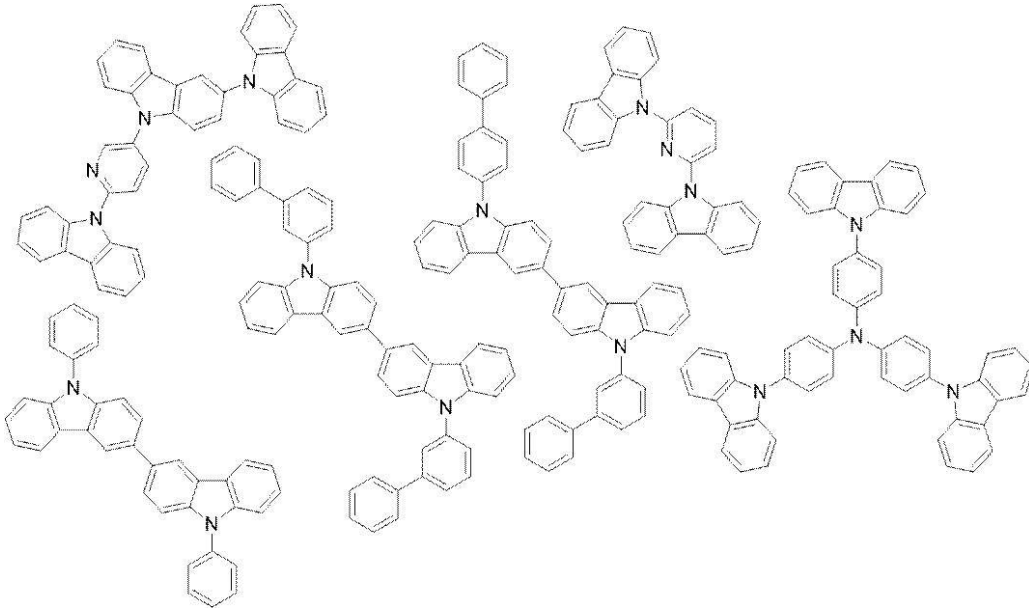
30



40

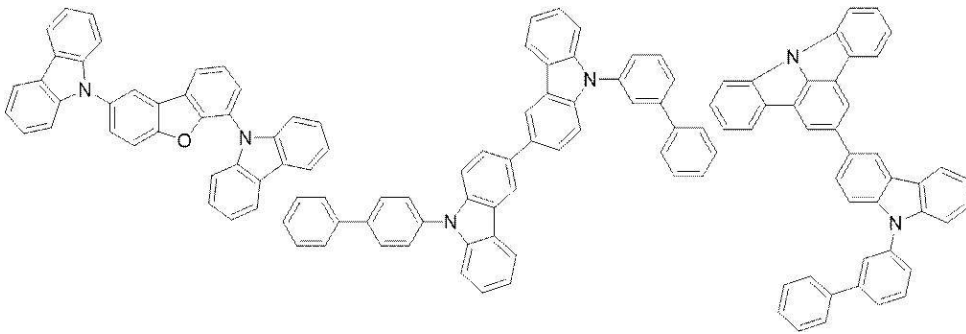
50

【化 5 9】



10

【化 6 0】



20

【 0 1 4 5】

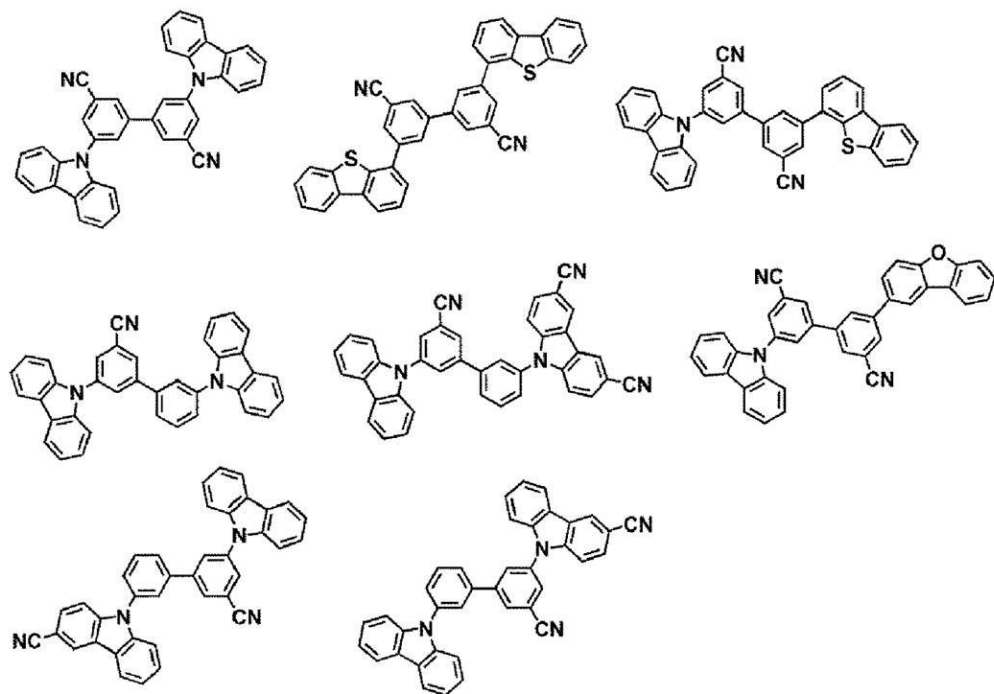
本発明の文脈における n - ホスト材料 H<sup>N</sup> である材料 H<sup>B</sup> の例は、下記に列挙されている：

30

40

50

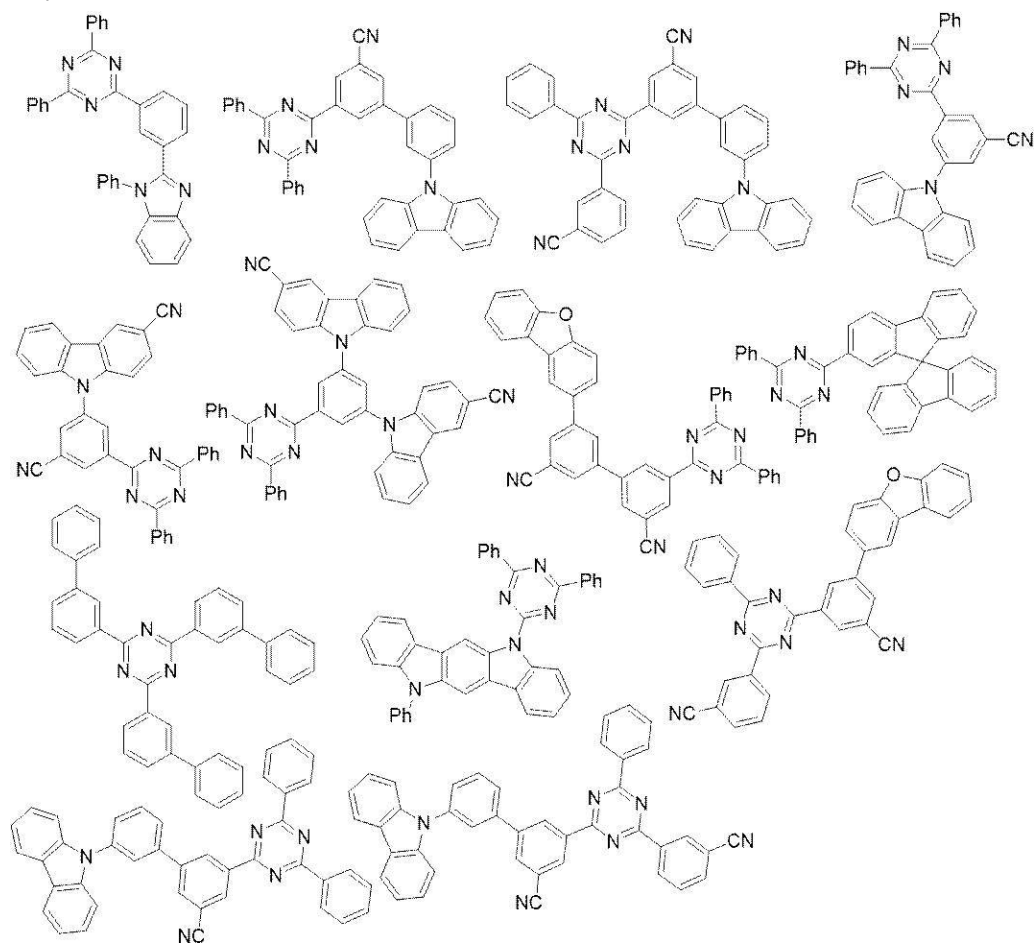
【化 6 1】



10

20

【化 6 2】

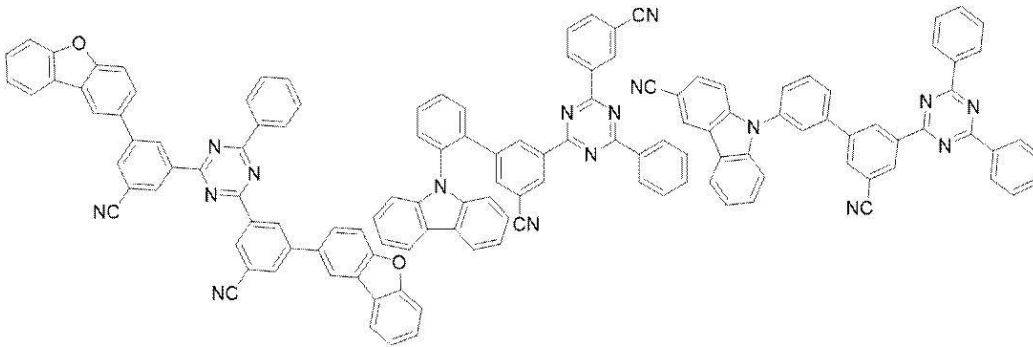


30

40

50

## 【化 6 3】



10

## 【 0 1 4 6 】

当業者は、同一層、特に同一 E M L 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<sup>P</sup> 及び n - ホスト H<sup>N</sup> の対を選択する方法、並びに H O M O 及び / または L U M O 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が分かっている。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<sup>P</sup> の H O M O は、他の成分、例えば、n - ホスト材料 H<sup>N</sup> の H O M O よりエネルギーが少なくとも 0 . 2 0 e V さらに高く、一成分、例えば、p - ホスト材料 H<sup>P</sup> の L U M O は、他の成分、例えば、n - ホスト材料 H<sup>N</sup> の L U M O よりエネルギーが少なくとも 0 . 2 0 e V さらに高い。エキシプレックスが光電子素子、特に O L E D の E M L に存在すれば、エキシプレックスがエミッタ材料の機能を有し、電圧と電流が当該素子に印加されるときに発光することができるということは、当業者の常識に属する。最新技術から、かつ一般的に知られているように、エキシプレックスは、非発光性でもあり、例えば、光電子素子の E M L 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。

20

## 【 0 1 4 7 】

当業者に知られているように、T T A (三重項・三重項消滅) 材料は、ホスト材料 H<sup>B</sup> としても使用される。T T A 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、T T A 材料 H<sup>T T A</sup> の最低励起三重項状態 ( T 1<sup>T T A</sup> ) から第 1 励起一重項状態 ( S 1<sup>T T A</sup> ) 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、T 1<sup>T T A</sup> から S 1<sup>T T A</sup> 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。

30

## 【 0 1 4 8 】

選択的に、T T A 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、ピフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレンのような多環芳香族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。

40

## 【 0 1 4 9 】

本発明によれば、三重項・三重項消滅 ( T T A ) 材料は、三重項・三重項消滅により、第 1 励起三重項状態 T 1<sup>N</sup> から第 1 励起一重項状態 S 1<sup>N</sup> にエネルギーを変換する。

50

## 【0150】

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。

## 【0151】

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1.01~2倍、1.1~1.9倍、1.2~1.5倍、1.4~1.6倍、または1.5~2倍のエネルギーを有することを特徴とする。

## 【0152】

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

## 【0153】

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と関連した最新技術で見つけることができる。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。

## 【0154】

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以上の多環芳香族構造を含んでもよい。好ましい実施形態において、TTA材料は、少なくとも1つの多環芳香族構造及び少なくとも1つの更なる芳香族残基を含む。

## 【0155】

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 $S1^N$ と最低励起三重項状態 $T1^N$ とのエネルギー差を有する。

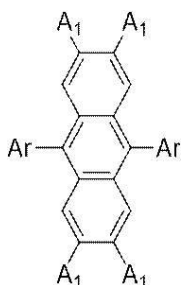
## 【0156】

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。

## 【0157】

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、

## 【化64】



## (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

10

20

30

40

50

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 $C_3 - C_5$ 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。

【0158】

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 $A_r$ 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 $C_1 - C_{210}$ (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

$C_6 - C_{20}$ 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 $C_3 - C_{20}$ 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、

$C_6 - C_{20}$ 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、

$C_6 - C_{20}$ 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 $C_3 - C_{20}$ 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 $C_1 - C_{10}$ (ヘテロ)アルキル。

【0159】

一実施形態において、 $H^{TTA}$ は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも1つの $A_1$ は水素である。一実施形態において、 $H^{TTA}$ は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも2つの $A_1$ は水素である。一実施形態において、 $H^{TTA}$ は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも3つの $A_1$ は水素である。一実施形態において、 $H^{TTA}$ は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、全ての $A_1$ はそれぞれ水素である。

【0160】

一実施形態において、 $H^{TTA}$ は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、少なくとも1つの $A_r$ 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、 $C_6 - C$

60アリール、C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>ヘテロアリール、ハロゲン及びC<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>(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てもよい。

【0161】

一実施形態において、H<sup>T</sup>T<sup>A</sup>は、前記化学式4のアントラセン誘導体であり、ここで、2つのArは、それぞれ、互いに独立して、フェニル、ナフチル、フェナントリル、ピレニル、トリフェニレニル、ジベンゾアントラセニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、アントラセニル、フェナントレニル、ベンゾナフトフラニル、ベンゾナフトチオフェニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニルからなる群から選択された残基であり、これは、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール、C<sub>3</sub>-C<sub>57</sub>ヘテロアリール、ハロゲン及びC<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>(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てもよい。

10

【0162】

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

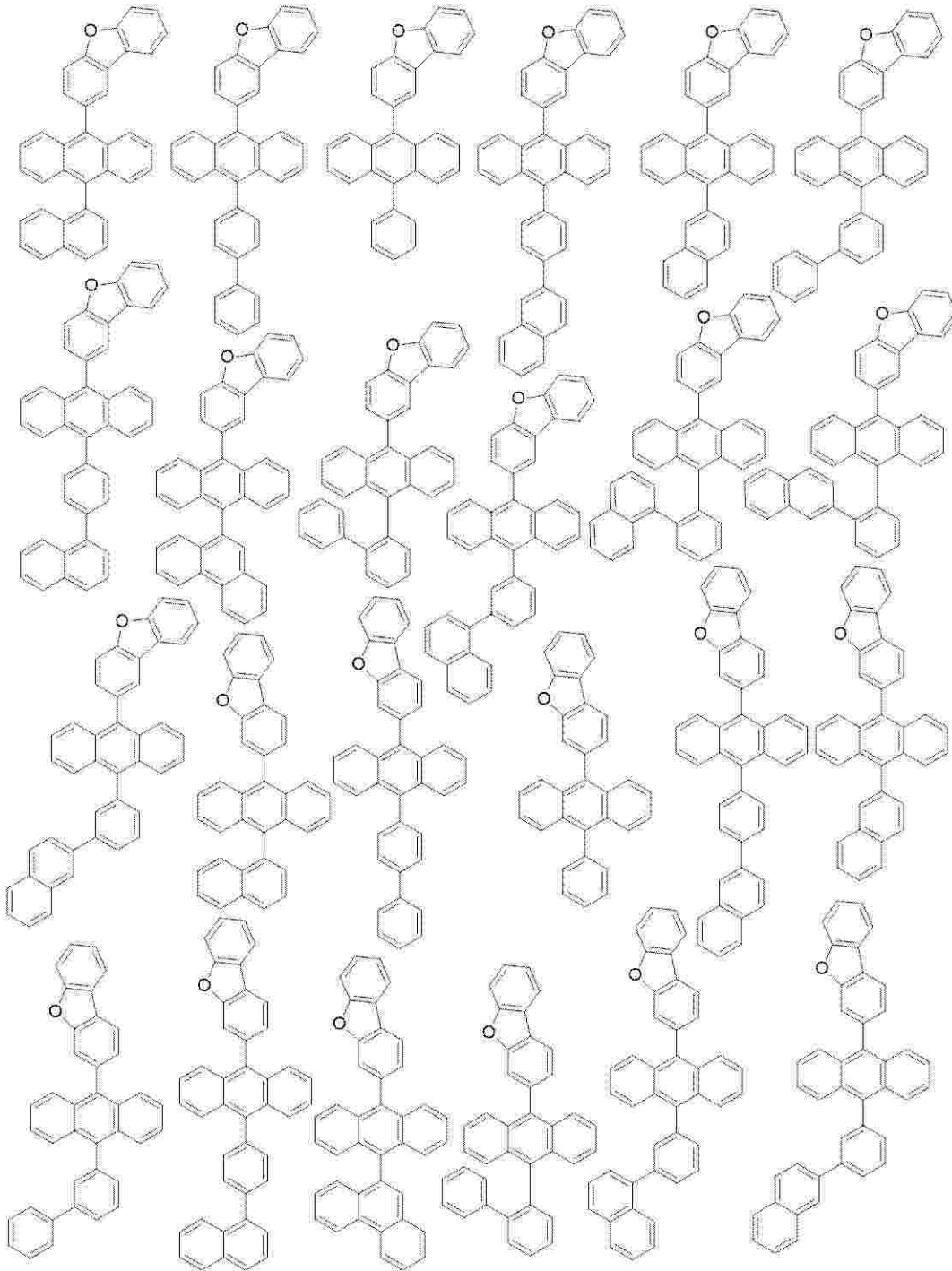
20

30

40

50

【化 6 5】



10

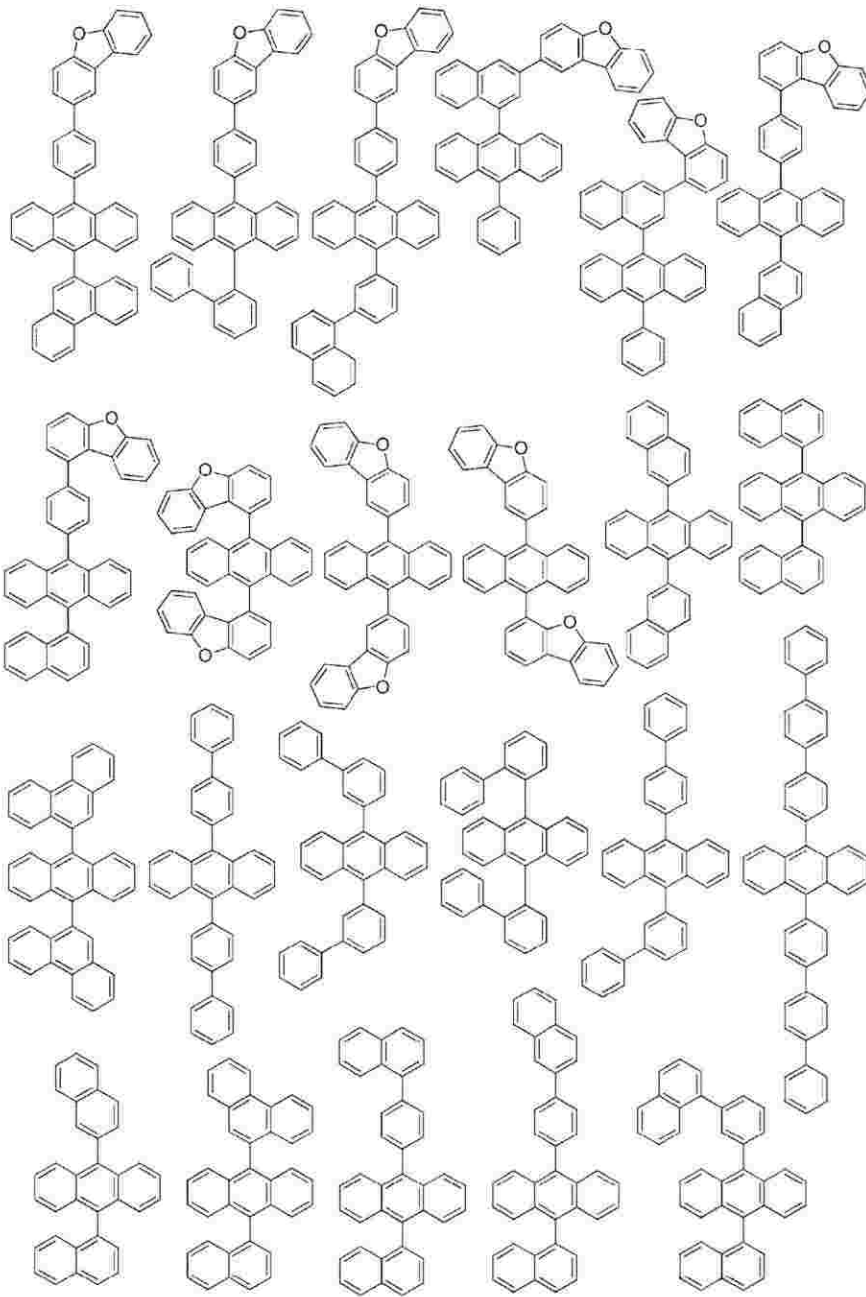
20

30

40

50

【化 6 6】



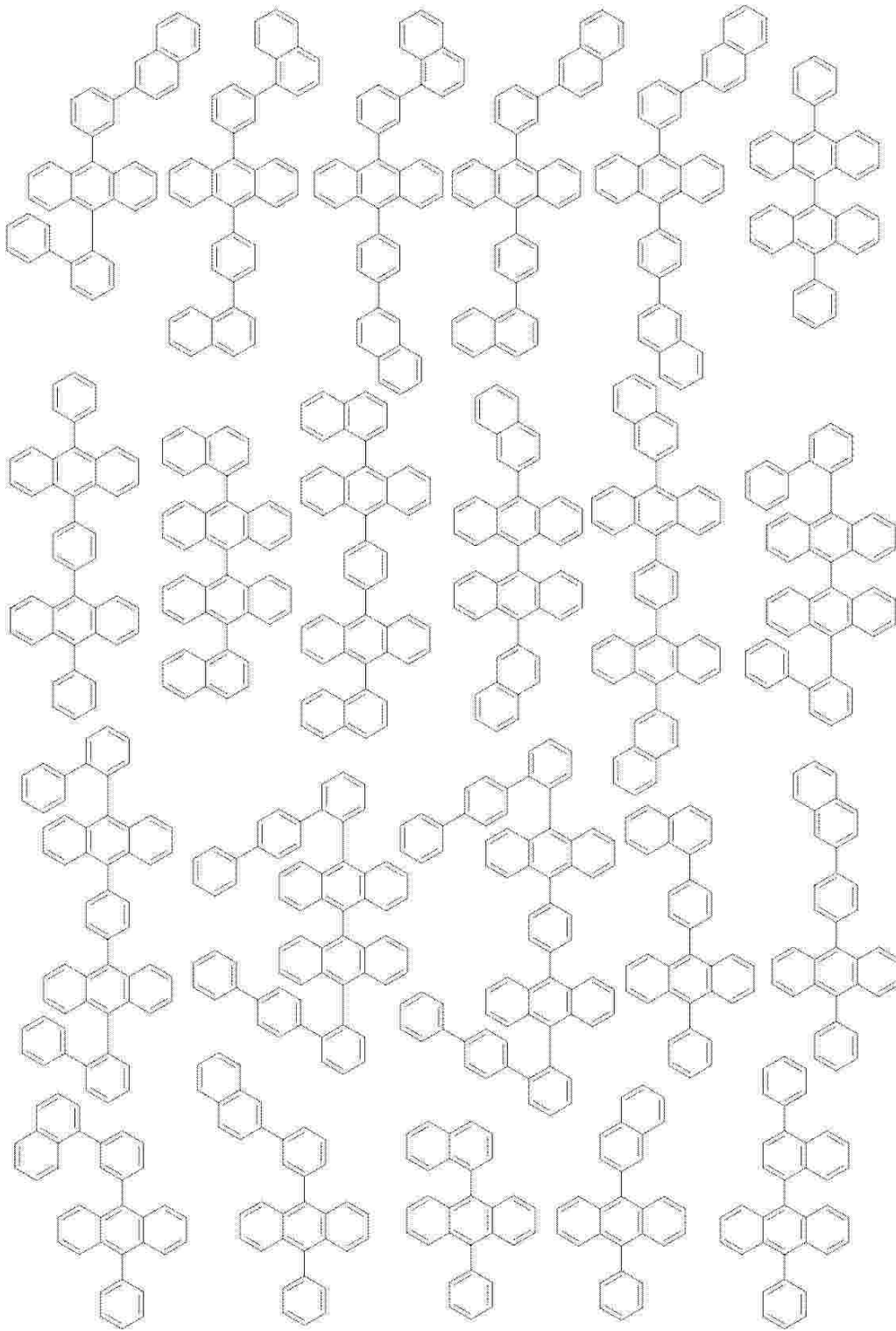
10

20

30

40

50



10

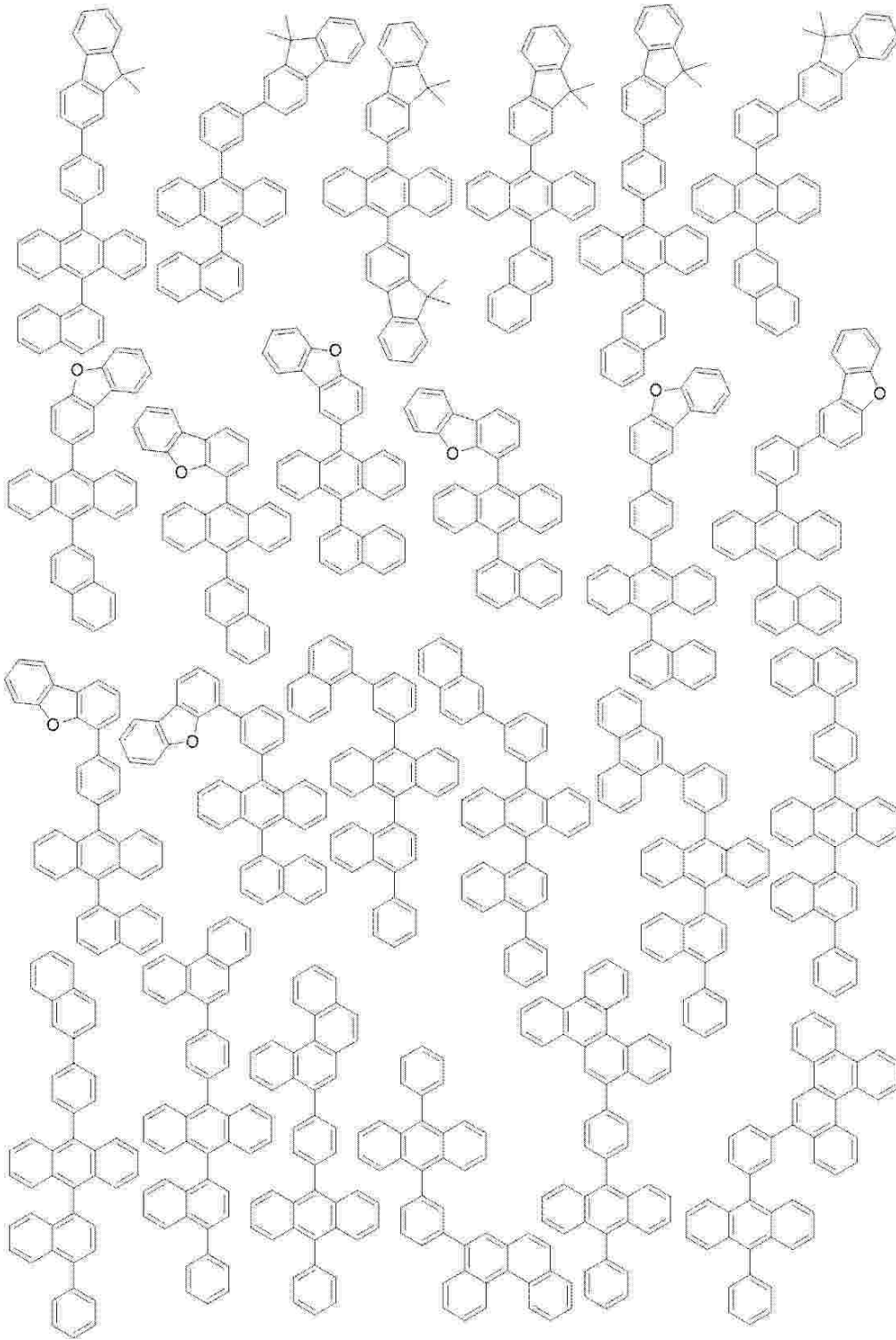
20

30

40

50

【化 6 7】



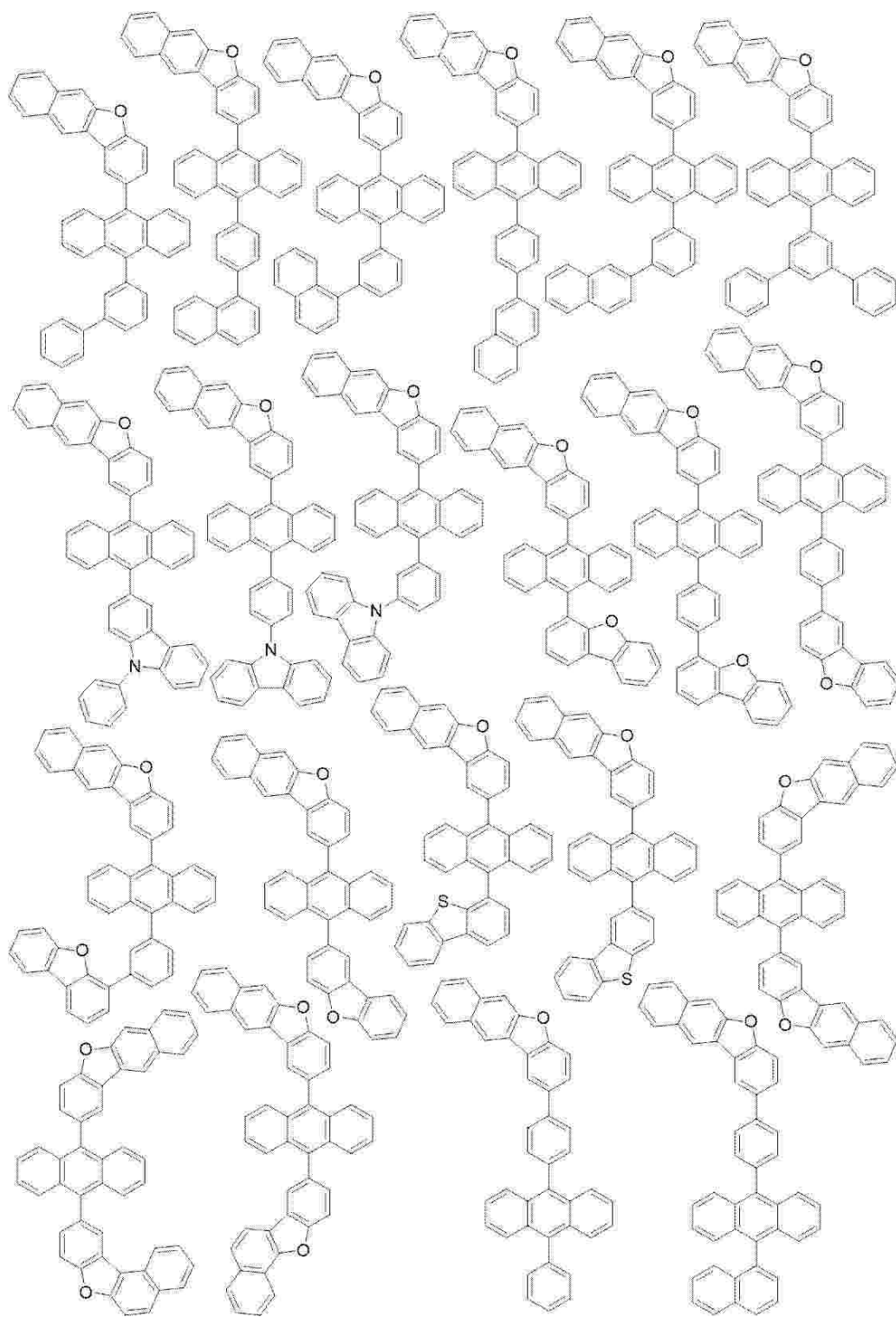
10

20

30

40

50



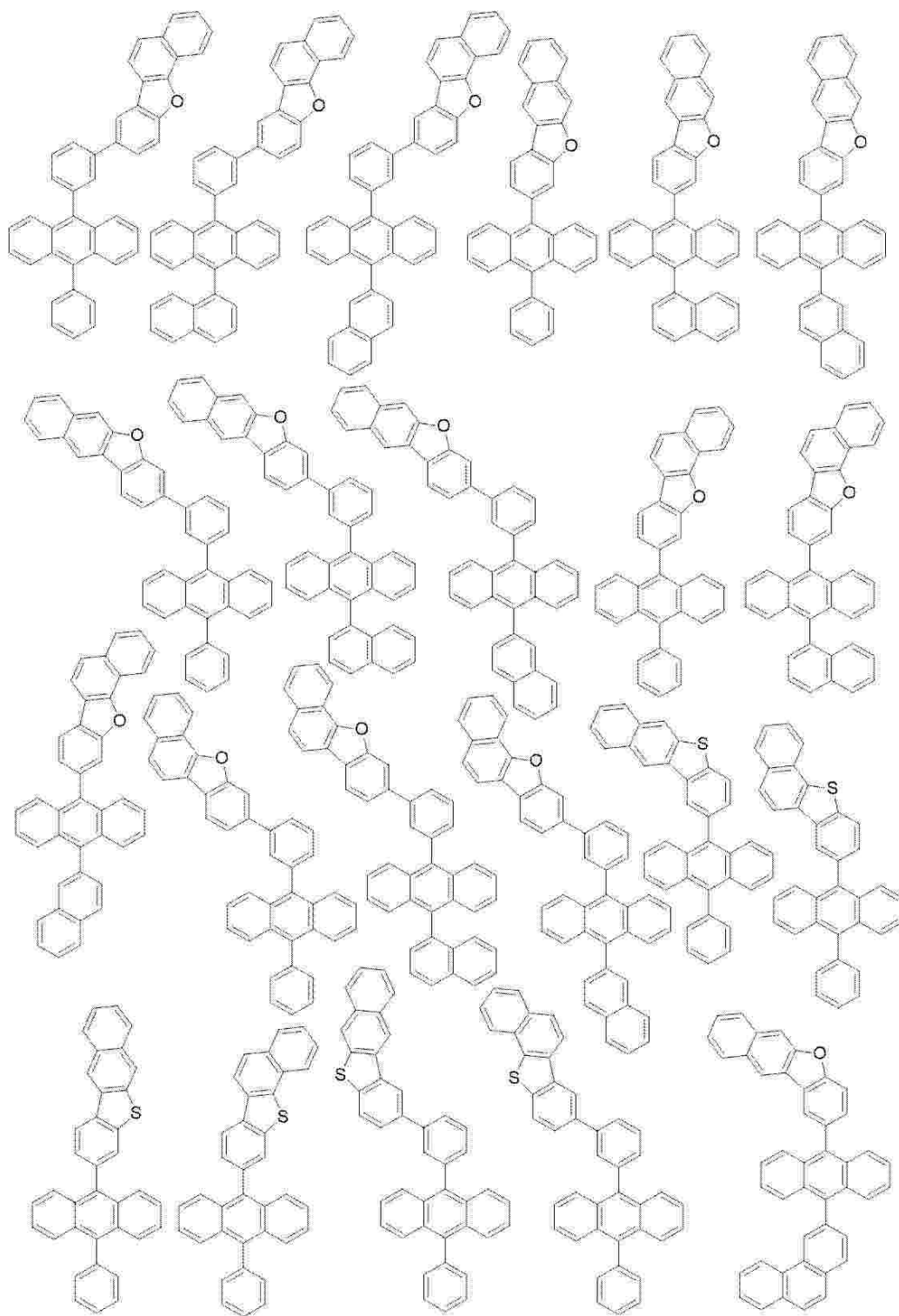
10

20

30

40

50



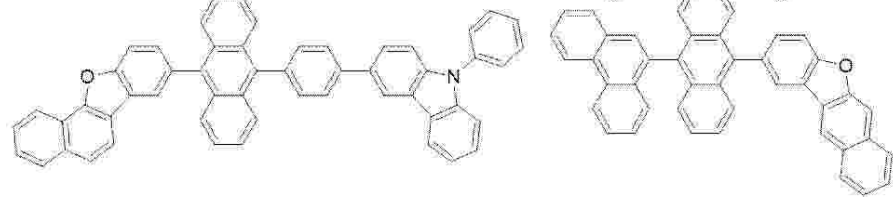
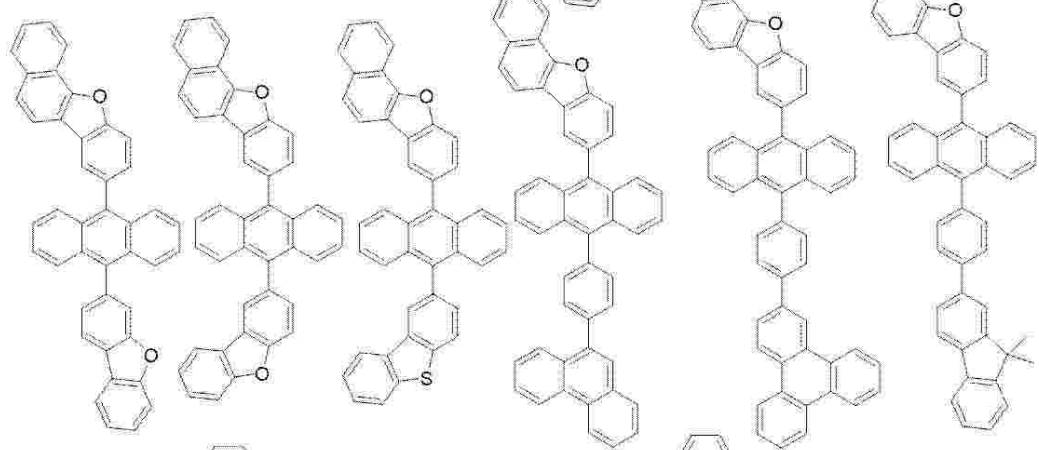
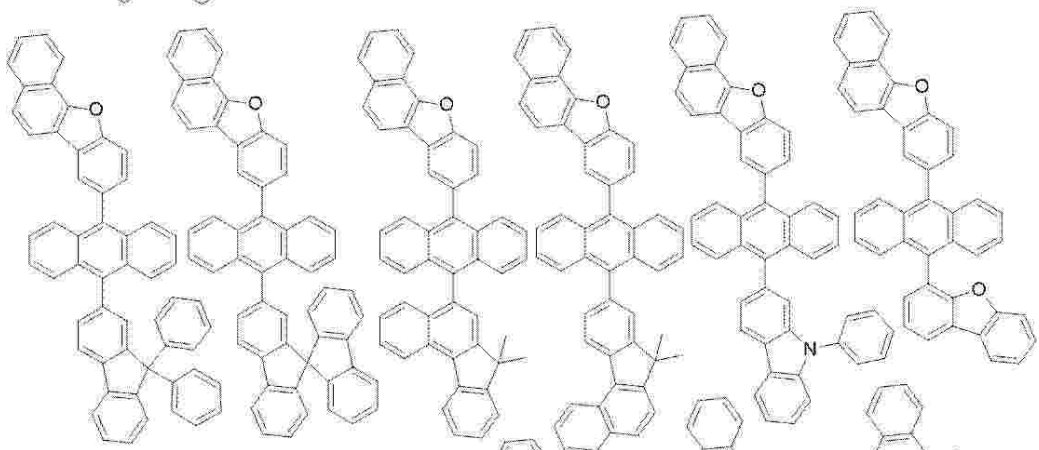
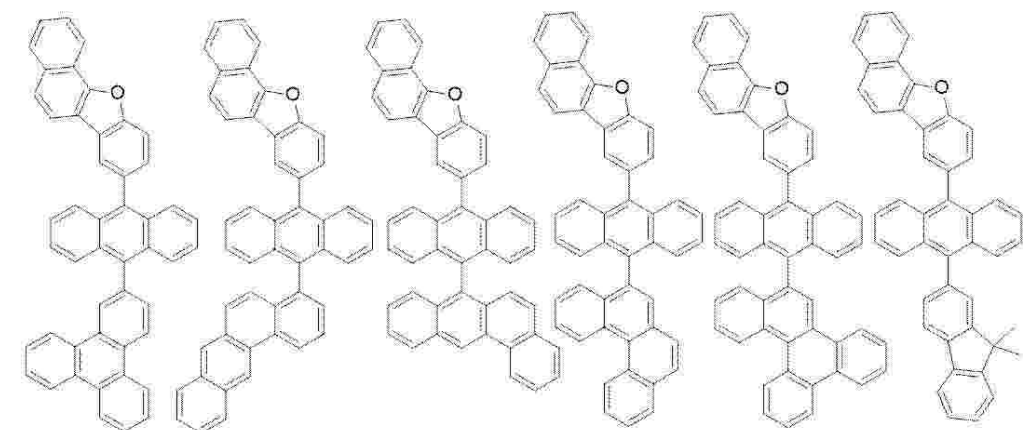
10

20

30

40

50



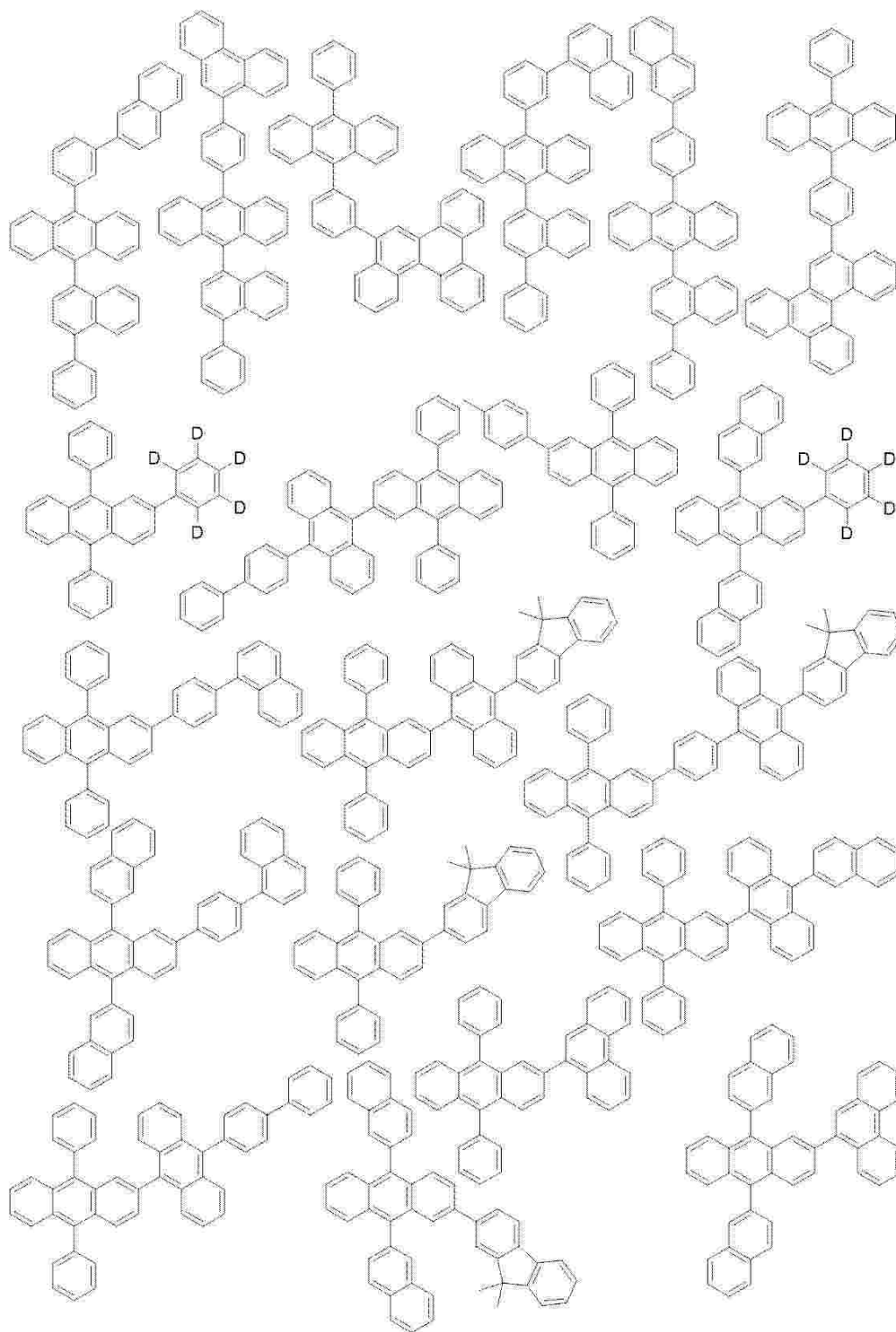
10

20

30

40

50



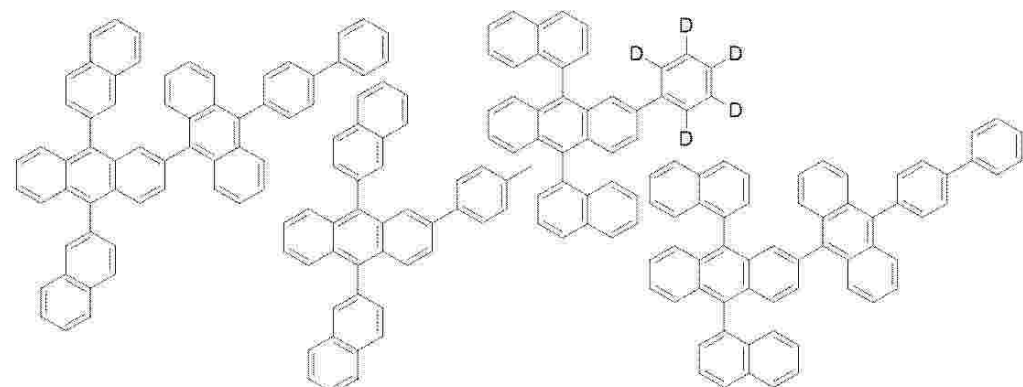
10

20

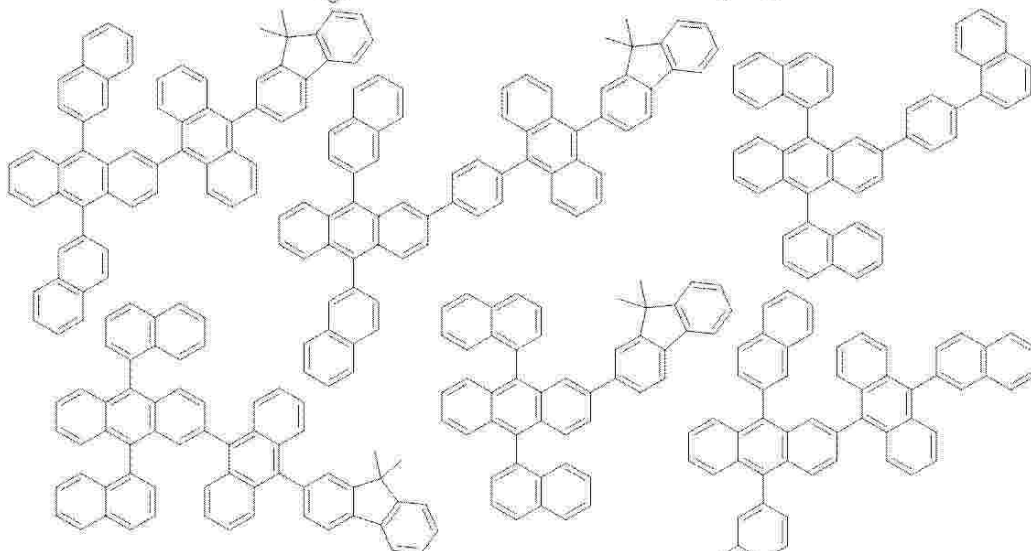
30

40

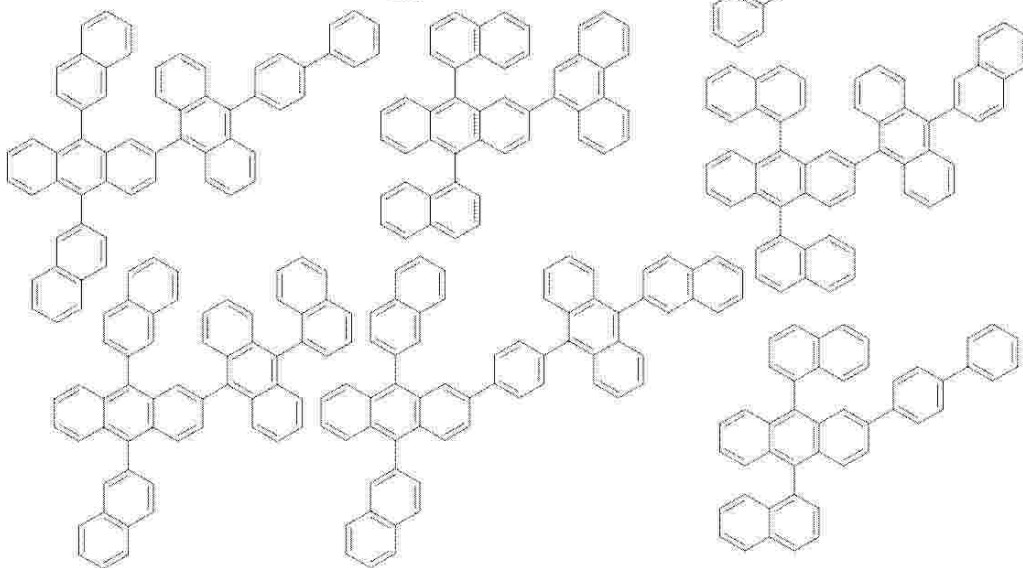
50



10



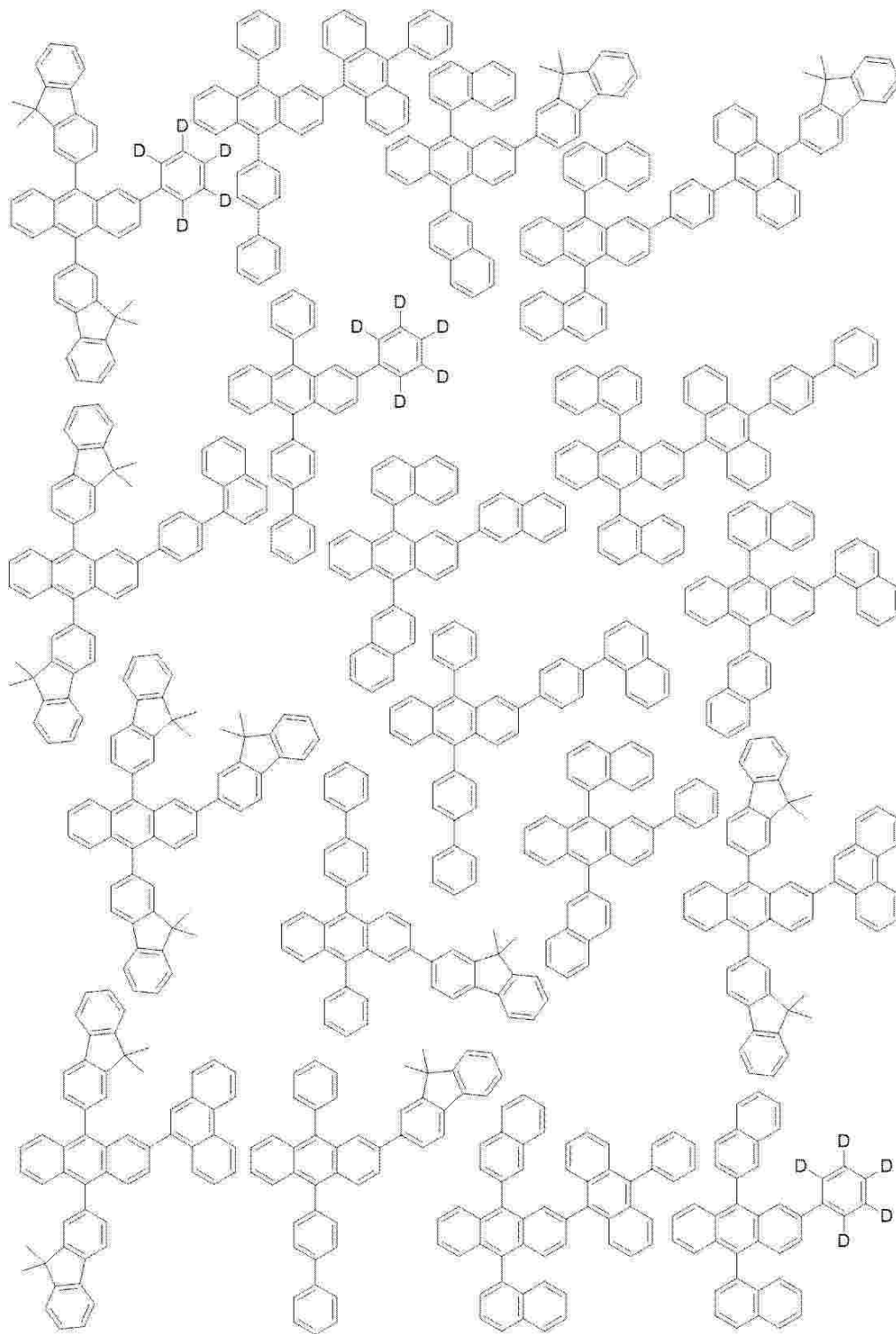
20



30

40

50



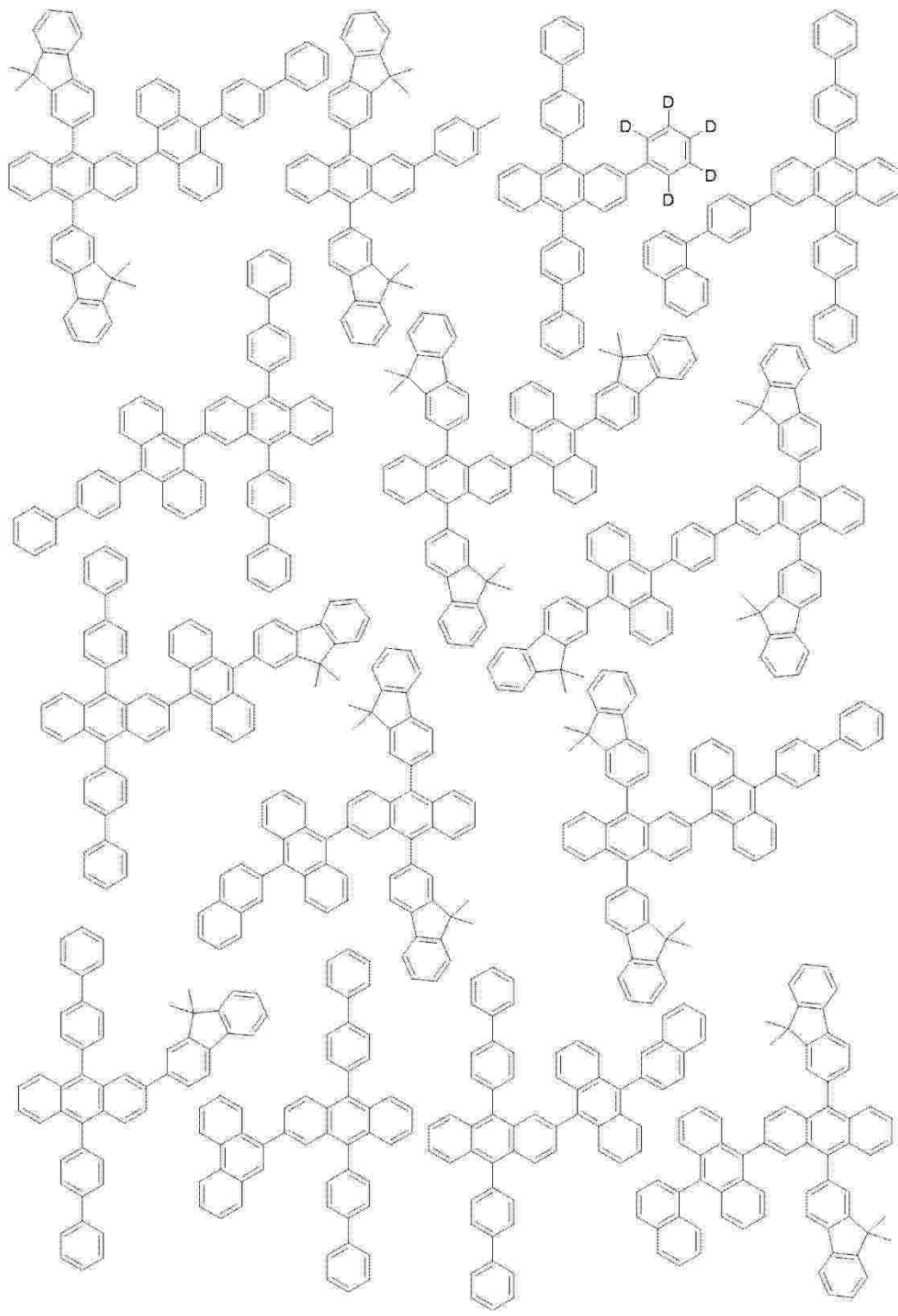
10

20

30

40

50



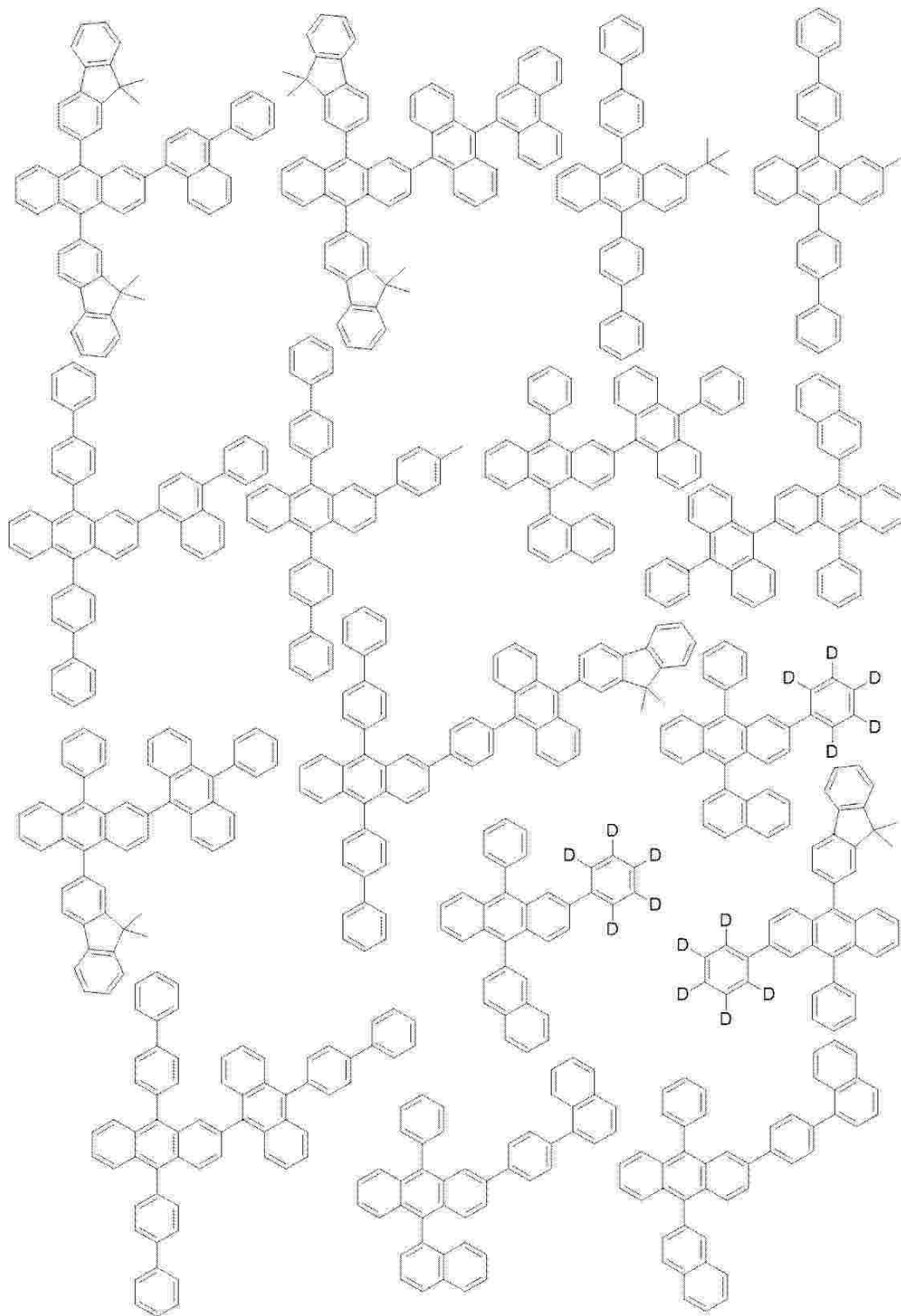
10

20

30

40

50



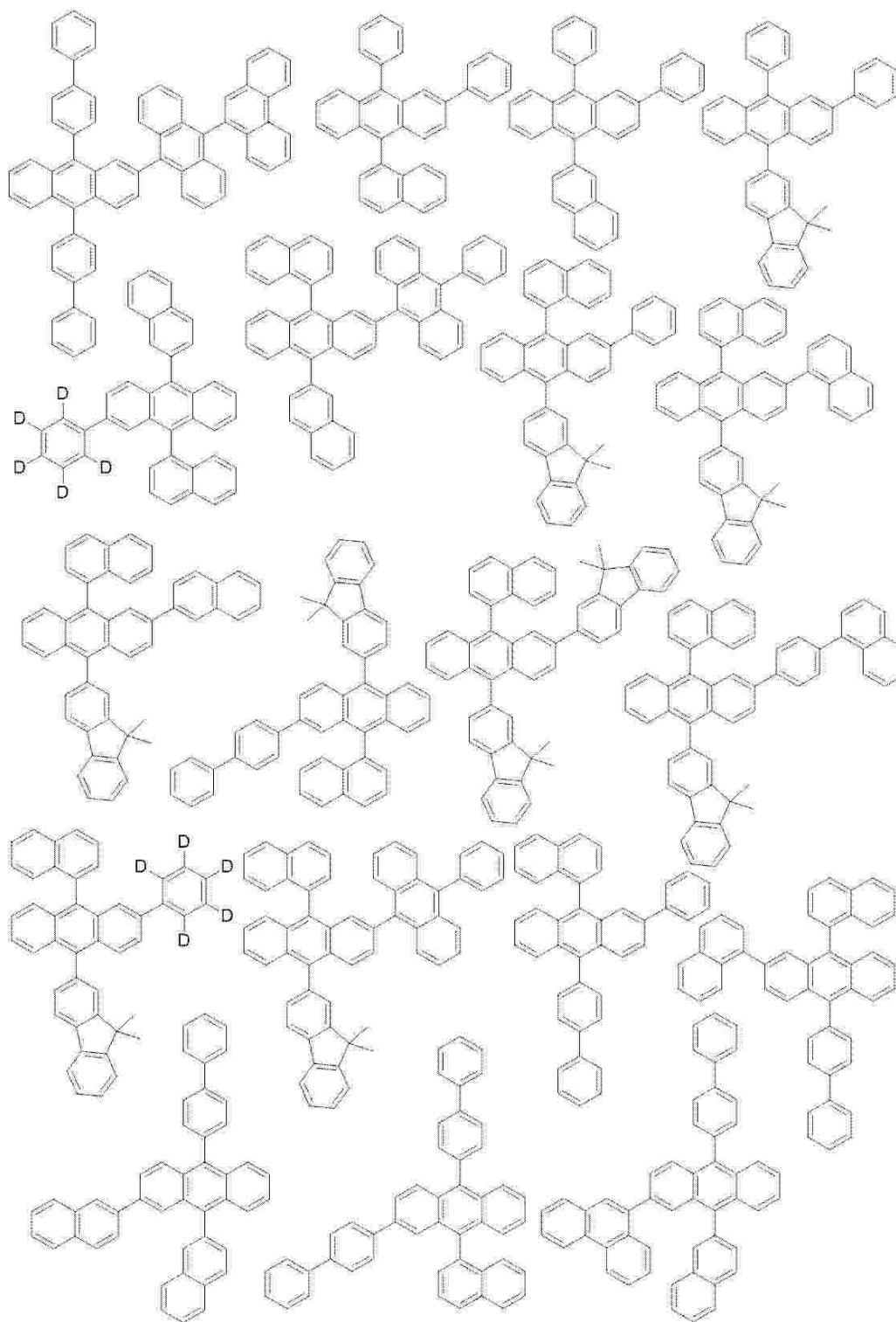
10

20

30

40

50



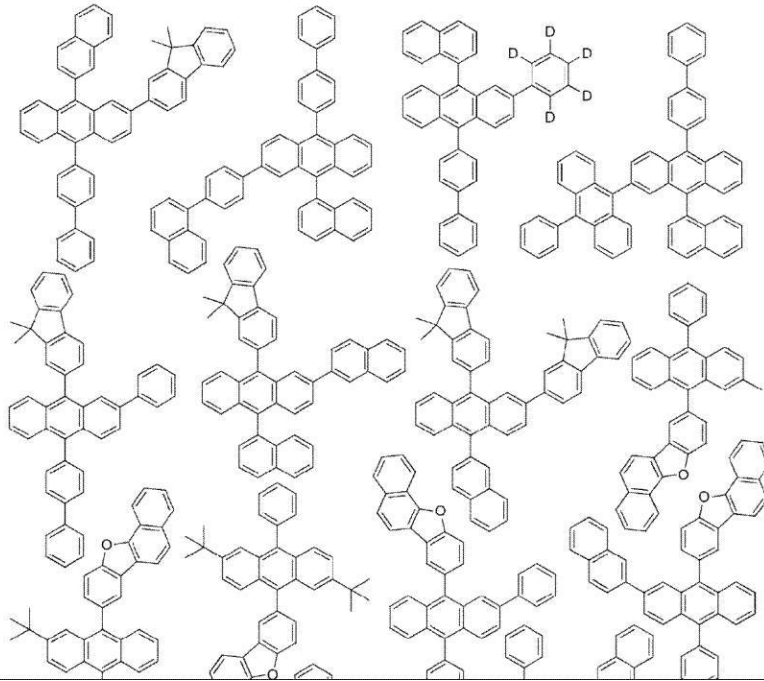
10

20

30

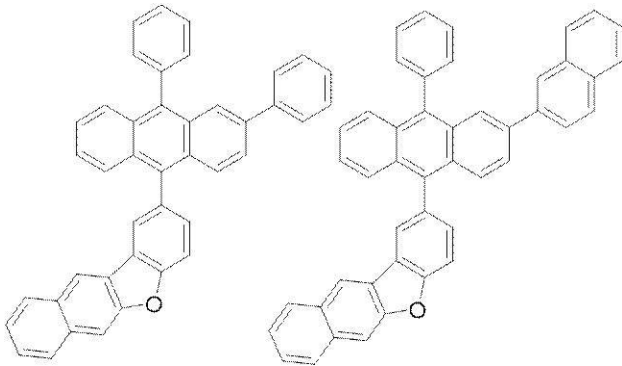
40

50



10

20



30

。 【 0 1 6 3 】

少なくとも1つの本発明による有機分子を含む組成物

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

【 0 1 6 4 】

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%）と同一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。

40

【 0 1 6 5 】

本発明による少なくとも1つの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

50

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発光効率を向上させることができるものと理解する。

## 【0166】

本発明による少なくとも 1 つの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しないということの意味する。

## 【0167】

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<sup>B</sup>、及び
- (c) 選択的に 1 以上の溶媒。

## 【0168】

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<sup>B</sup>、

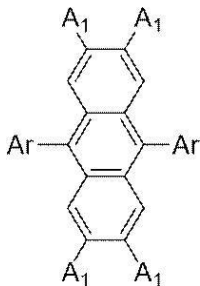
ここで、前記組成物中のホスト材料 H<sup>B</sup> の分率（重量％）は、本発明による有機分子の分率（重量％）より高く、好ましくは、前記組成物中のホスト材料 H<sup>B</sup> の分率（重量％）は、本発明による有機分子の分率（重量％）より 2 倍以上高い。

## 【0169】

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<sup>B</sup> としての TTA 材料：

## 【化 6 8】



(化学式 4)。

## 【0170】

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<sup>B</sup>、及び
- (c) TADF 材料 E<sup>B</sup> 及び / または 燐光材料 P<sup>B</sup>。

## 【0171】

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<sup>B</sup>、
- (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<sup>B</sup>、
- (d) 1 ~ 99.8 重量％、好ましくは、5 ~ 50 重量％、特に 10 ~ 30 重量％の、

10

20

30

40

50

( a ) の有機分子と異なる 1 以上の T A D F 材料 E<sup>B</sup>、及び

( e ) 0 ~ 9 8 . 8 重量%、好ましくは、0 ~ 5 9 重量%、特に 0 ~ 2 8 重量% の 1 以上の溶媒。

【 0 1 7 2 】

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 ( O L E D )、発光電気化学電池、O L E D 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、有機レーザ及び下向き変換素子からなる群から選択された素子に係わるものである。

【 0 1 7 3 】

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 ( O L E D )、発光電気化学電池 ( L E C ) 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。

【 0 1 7 4 】

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 E M L においてエミッタ材料として使用される。

【 0 1 7 5 】

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

【 0 1 7 6 】

前記光電子素子が O L E D 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 ( H I L )
- 4 . 正孔輸送層 ( H T L )
- 5 . 電子阻止層 ( E B L )
- 6 . 発光層 ( E M L )
- 7 . 正孔阻止層 ( H B L )
- 8 . 電子輸送層 ( E T L )
- 9 . 電子注入層 ( E I L )
- 1 0 . カソード層。

【 0 1 7 7 】

ここで、該 O L E D は、H I L、H T L、E B L、H B L、E T L 及び E I L 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 O L E D は、前述のところで定義された各層種類のうち 1 層以上の層を含むものであってもよい。

【 0 1 7 8 】

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

【 0 1 7 9 】

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 O L E D である：

- 1 . 基板
- 2 . カソード層
- 3 . 電子注入層 ( E I L )
- 4 . 電子輸送層 ( E T L )
- 5 . 正孔阻止層 ( H B L )
- 6 . 発光層 B
- 7 . 電子阻止層 ( E B L )
- 8 . 正孔輸送層 ( H T L )

10

20

30

40

50

9. 正孔注入層 (HIL)

10. アノード層 A。

【0180】

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

【0181】

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。

【0182】

本発明の一実施形態において、前記光電子素子は、アノードとカソードとの間に、2 層以上の発光層を含む OLED である。特に、いわゆるタンデム OLED は、3 層の発光層を含み、ここで、1 層の発光層は、赤色光を放出し、1 層の発光層は、緑色光を放出し、1 層の発光層は、青色光を放出し、選択的に、個々の発光層間に、電荷生成層、電荷阻止層または電荷輸送層のような追加層を含んでもよい。更なる実施形態において、該発光層は、隣接するように積層される。更なる実施形態において、該タンデム OLED は、それぞれの 2 層の発光層間に電荷生成層を含む。また、隣接した発光層、または電荷生成層によって分離した発光層が併合されてもよい。

【0183】

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てもよい。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 (TCO) 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。

【0184】

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

10

20

30

40

50

(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'-スピロピフルオレン-2,7-ジアミン(Spiro-NPD)によって構成されてもよい。

#### 【0185】

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てもよい。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)(-NPD)、4,4'-シクロヘキシリデン-ビス[N,N-ビス(4-メチルフェニル)ベンゼンアミン](TAPC)、4,4',4''-トリス[2-ナフチル(フェニル)-アミノ]トリフェニルアミン(2-TNATA)、Spiro-TAD、DNTPD、NPB、NPNPB、MeO-TPD、HAT-CN及び/または9,9'-ジフェニル-6-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-9H,9'H-3,3'-ビカルバゾール(TrisPcz)のような星状のヘテロ環を含むものであってもよい。また、該HTLは、有機正孔輸送マトリックス内の無機または有機ドーパントによっても構成されるp-ドーピングされた層を含むものであってもよい。該無機ドーパントとしては、例えば、バナジウム酸化物、モリブデン酸化物またはタングステン酸化物のような遷移金属酸化物が使用されてもよい。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で使用されてもよい。

#### 【0186】

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

#### 【0187】

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、本発明による少なくとも1つの発光分子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] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾフラン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾフラニル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾチオフエニル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、2, 4, 6 - トリス(ピフェニル - 3 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン(T2T)、2, 4, 6 - トリス(トリフェニル - 3 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン(T3T)及び/または2, 4, 6 - トリス(9, 9' - スピロピフルオレン - 2 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン(TST)から選択される。ホスト材料Hは、一般的に、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。

10

## 【0188】

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] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾフラン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾフラニル)フェニル] - 9 H - カルバゾール及び9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾチオフエニル)フェニル] - 9 H - カルバゾールから選択されたホストを含む混合ホストシステムを含む。更なる実施形態において、該EMLは、50 ~ 80重量%、好ましくは、60 ~ 75重量%のCBP、mCP、mCBP、9 - [3 - (ジベンゾフラン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾフラン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 2 - イル)フェニル] - 9 H - カルバゾール、9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾフラニル)フェニル] - 9 H - カルバゾール及び9 - [3, 5 - ビス(2 - ジベンゾチオフエニル)フェニル] - 9 H - 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。

20

30

## 【0189】

発光層(EML)に隣接し、電子輸送層(ETL)が位置しうる。ここで、任意の電子輸送体を使用されてもよい。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てもよい。該電子輸送体は、また、1, 3, 5 - トリ(1 - フェニル - 1 H - 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 - ホスフィンオキサイド(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]チオフエン - 2 - イルトリフェニルシラン(Sif87)、ジベンゾ[b, d]チオフエン - 2 - イルジフェニルシラン(Sif88)、1, 3 - ビス[3, 5 - ジ(ピリジン - 3 - イル)フェニル]ベンゼン(BmPyPhB)及び/または4, 4' - ビス[2 - (4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジニル)] - 1, 1' - ビフェニル(BTB)を含むものであってもよい。選択的に、該ETLは、Liqのような物質によってもドーピングされる。該電子輸送層(ETL)は、また、正孔を阻止することができる。または、正孔阻止層(HBL)が導入される。

40

## 【0190】

HBLは、例えば、2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントリン = バソクプロイン(BCP)、ビス(8 - ヒドロキシ - 2 - メチルキノリン) - (4

50

- フェニルフェノキシ)アルミニウム (BA1q)、2, 9 - ビス (ナフタレン - 2 - イル) - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン (NBphen)、アルミニウム - トリス (8 - ヒドロキシキノリン) (Alq<sub>3</sub>)、ジフェニル - 4 - トリフェニルシリルフェニル - ホスフィンオキサイド (TSPO1)、2, 4, 6 - トリス (ビフェニル - 3 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン (T2T)、2, 4, 6 - トリス (トリフェニル - 3 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン (T3T)、2, 4, 6 - トリス (9, 9' - スピロピフルオレン - 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。

【0191】

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構成されてもよい。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。

【0192】

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<sub>q</sub>)、Li<sub>2</sub>O、BaF<sub>2</sub>、MgO 及び / または NaF を含むものであってもよい。

【0193】

選択的に、電子輸送層 (ETL) 及び / または正孔阻止層 (HBL) は、また、1 以上のホスト化合物 H を含むものであってもよい。

【0194】

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、当業界に公知された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<sub>0</sub> 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。

【0195】

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。

【0196】

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

10

20

30

40

50

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。

## 【0197】

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。

10

## 【0198】

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。それは、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。

## 【0199】

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。それは、典型的に、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。

20

## 【0200】

したがって、本発明の更なる側面は、1000 cd/m<sup>2</sup>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 ~ 500 nm、好ましくは、430 nm ~ 490 nm、より好ましくは、440 nm ~ 480 nm、より一層好ましくは、450 nm ~ 470 nmの最大発光を示し、及び/または、500 cd/m<sup>2</sup>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、より一層好ましくは、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CIE y色座標を示すOLEDに係わるものである。

30

## 【0201】

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、0.25 eV未満、好ましくは、0.20 eV未満、より好ましくは、0.17 eV未満、より一層好ましくは、0.15 eV未満、またははなはだしくは、0.13 eV未満の主発光ピークのFWHMを有する光を放出する。

## 【0202】

本発明の更なる側面は、本発明による少なくとも1つの有機分子を含み、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 (CIE<sub>x</sub> = 0.131及びCIE<sub>y</sub> = 0.046) のCIE<sub>x</sub> (= 0.131) 及びCIE<sub>y</sub> (= 0.046) の色座標に近いCIE<sub>x</sub>及びCIE<sub>y</sub>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 ~ 0.30、好ましくは、0.03 ~ 0.25、より好ましくは、0.05 ~ 0.20、より一層好ましくは、0.08 ~ 0.18、またははなはだしくは、0.10 ~ 0.15のCIE<sub>x</sub>色座標、及び/または、0.00 ~ 0.45、好ましくは、0.01 ~ 0.30、より好ましくは、0.02 ~ 0.2

40

50

0、より一層好ましくは、0.03～0.15、またははなはだしくは、0.04～0.10のCIEy色座標を示す、1以上の本発明による有機分子を含むOLEDに係わるものである。

【0203】

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%以上、好ましくは、30%以上、より好ましくは、35%以上、より好ましくは、40%以上、より好ましくは、45%以上、より好ましくは、50%以上、より好ましくは、55%以上、より一層好ましくは、60%以上、またははなはだしくは、70%以上のフォトルミネセンス量子収率(PLQY)を有する。

【0204】

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

【0205】

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

- (i) 本発明の有機分子を含む光電子素子を提供する段階、及び
- (ii) 前記光電子素子に電流を印加する段階。

【0206】

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

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

【0207】

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、当業界に公知されている。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てもよい。

【0208】

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、スピニング、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。

【実施例】

【0209】

一般合成方式I

10

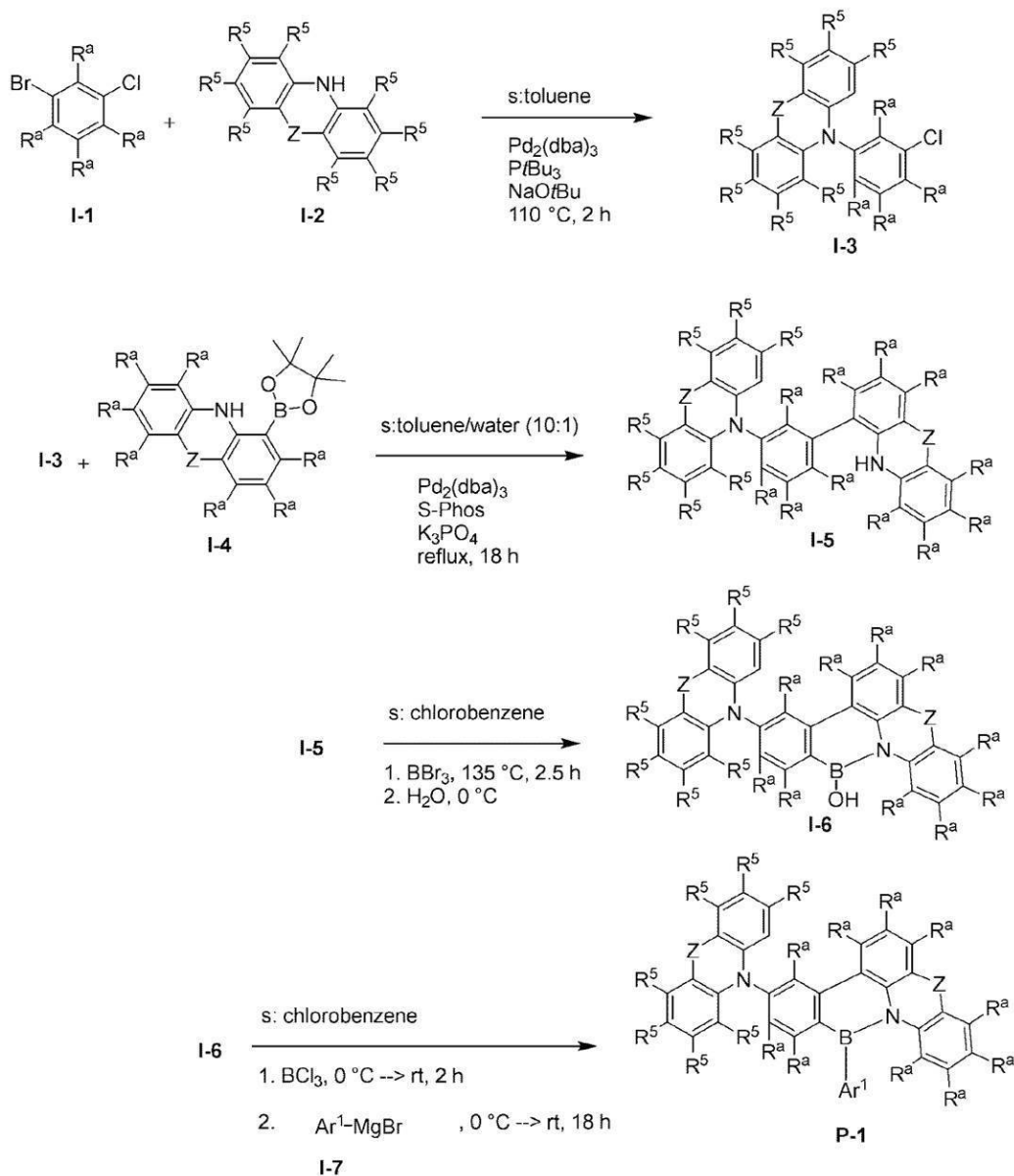
20

30

40

50

## 【化 6 9】



10

20

30

## 合成のための一般手順：

AAV1：脱気されたトルエン内の I - 1 ( 1 . 0 当量 )、I - 2 ( 1 . 0 5 当量 )、トリス ( ジベンジリデンアセトン ) - ジパラジウム ( 0 ) ( CAS - No . 5 1 3 6 4 - 5 1 - 3、0 . 0 1 当量 )、トリ - tert - ブチルホスフィン ( CAS - No . 1 3 7 1 6 - 1 2 - 6、0 . 0 4 当量 ) 及びナトリウム tert - ブトキシド ( CAS - No . 8 6 5 - 4 8 - 5、1 . 5 当量 ) の懸濁液を 1 1 0 で 2 時間 攪拌した。室温 ( rt ) に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I - 3 を固体として得た。

40

## 【 0 2 1 0 】

AAV2：トルエンと水の脱気された混合物 ( 体積基準 1 0 : 1 ) 内の I - 3 ( 1 . 0 当量 )、I - 4 ( 1 . 1 0 当量 )、トリス ( ジベンジリデンアセトン ) - ジパラジウム ( 0 ) ( CAS - No . 5 1 3 6 4 - 5 1 - 3、0 . 0 1 当量 )、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2', 6' - ジメトキシ - 1, 1' - ビフェニル ( S - Phos、CAS - No . 6 5 7 4 0 8 - 0 7 - 6、0 . 0 4 当量 ) 及び  $\text{K}_3\text{PO}_4$  ( CAS - No . 7 7 7 8 - 5 3 - 2、2 . 5 当量 ) の懸濁液を 1 8 時間 還流 攪拌した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I - 5 を固体として得た。

50

## 【0211】

AAV3：窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内のI-5（1.0当量）の溶液を室温で三臭化ホウ素（99%、CAS-No. 10294-33-4、4.0当量）に添加した。次いで、混合物を125℃で2.5時間加熱した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物I-6を固体として得た。

## 【0212】

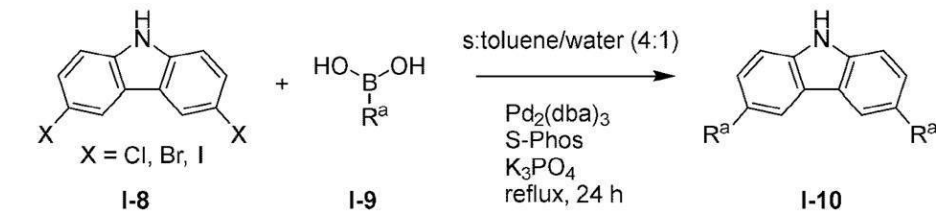
AAV4：窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内のI-6（1.0当量）の溶液を0℃で三臭化ホウ素（ヘキサン内の1M、CAS-No. 10294-34-5、1.0当量）に添加し、次いで、室温で2時間撹拌した。その後、0℃でI-7（3.5当量）を添加し、室温で18時間撹拌した。その後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物P-1を固体として得た。

10

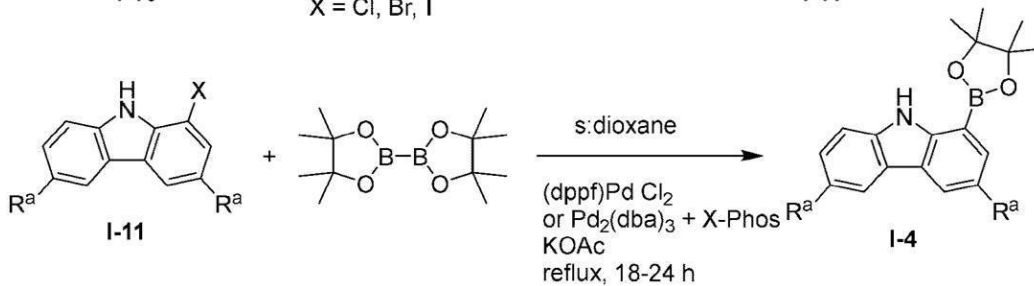
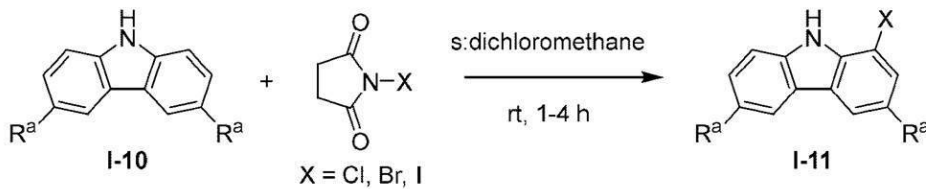
## 【0213】

一般合成方式II-カルバゾール誘導体の官能基化

## 【化70】



20



30

## 合成のための一般手順：

AAV5：トルエンと水の脱気された混合物（体積基準4：1）内のI-8（1.0当量）、I-9（2.5当量）、トリス（ジベンジリデンアセトン）-ジパラジウム（0）（CAS-No. 51364-51-3、0.01当量）、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシ-1,1'-ビフェニル（S-Phos、CAS-No. 657408-07-6、0.04当量）及びK<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>（CAS-No. 7778-53-2、3.0当量）の懸濁液を24時間還流撹拌した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物I-10を固体として得た。

40

## 【0214】

AAV6：カルバゾール誘導体I-10（1.0当量）を脱水クロロホルム（I-10 1mmol当たり6mL）に溶解させた。0℃に冷却した後、N-ブロモスクシンイミド（NBS、CAS-No. 128-08-5）を15分間少しずつ添加した。次いで、室温で1～4時間撹拌し続けた。完全な臭素化が達成された後、水性ワークアップを行った

50

。合わせた有機層を  $MgSO_4$  で乾燥し、濾過及び濃縮した。再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって精製し、所望の化合物 I - 11 を固体として得た。

【0215】

AAV7：脱気されたジオキサン内の I - 11 (1.0 当量)、ビス(ピナコラート)ジボロン(CAS - No. 73183 - 34 - 3、1.5 当量)、[1, 1' - ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド(CAS - No. 72287 - 26 - 4、0.02 当量)及び酢酸カリウム(KOAc、CAS - No. 127 - 08 - 2、3.0 当量)の懸濁液を 18 ~ 24 時間還流撹拌した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I - 4 を固体として得た。

10

【0216】

場合によって、[1, 1' - ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリドの代わりに、トリス(ジベンジリデンアセトン) - ジパラジウム(0)(CAS - No. 51364 - 51 - 3、0.01 当量)と X - Phos(CAS - No. 564483 - 18 - 7、0.04 当量)との組み合わせを触媒として使用することができる。

【0217】

一般合成方式 III

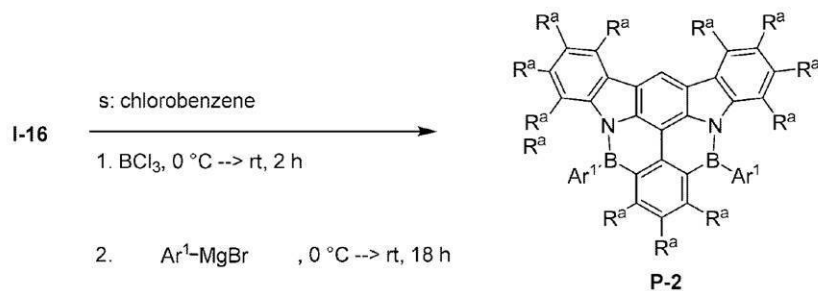
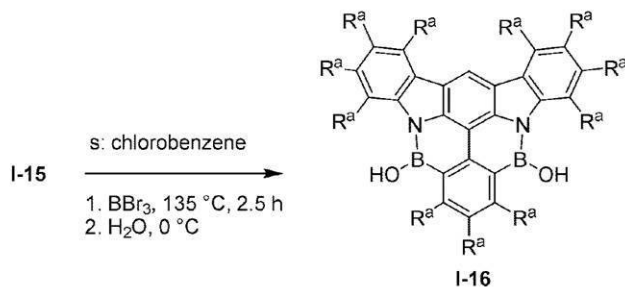
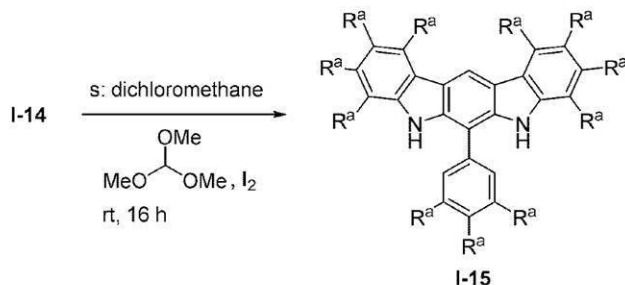
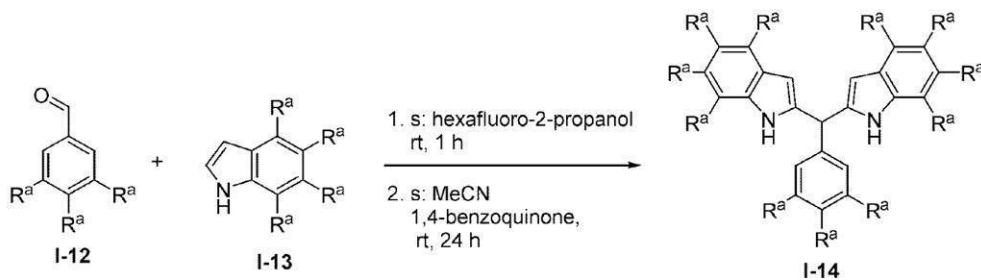
20

30

40

50

## 【化 7 1】



I-7

## 合成のための一般手順：

AAV8：大気圧雰囲気下、1, 1, 1, 3, 3, 3-ヘキサフルオロ-2-プロパノール (CAS-No. 920-66-1) 内の I-12 (1.0 当量) 及び I-13 (2.0 当量) の溶液を室温で 1 時間攪拌した。その後、溶液を減圧下で除去した。結果の残留物をアセトニトリルに溶解させ、1,4-ベンゾキノン (CAS-No. 106-51-4、2.0 当量) を添加した。結果の混合物を室温で 24 時間攪拌した。水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I-14 を固体として得た。

## 【0218】

AAV9：大気圧雰囲気下、ジクロロメタン内の I-14 (1.0 当量)、オルトギ酸トリメチル (CAS-No. 149-73-5、1.0 当量) 及びヨウ素 (CAS-No. 7553-56-2、0.03 当量) の溶液を室温で 16 時間攪拌した。水性 NaHSO<sub>3</sub> (CAS-No. 7631-90-5) を添加することにより、反応を終了させ、次いで、水性ワークアップを行った。再結晶化またはカラムクロマトグラフィ後、化合物 I-15 を固体として得た。

## 【0219】

10

20

30

50

AAV10:

AAV1: 窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内の I-15 (1.0 当量) の溶液を室温で三臭化ホウ素 (99%、CAS-No. 10294-33-4、8.0 当量) に添加した。その後、混合物を 125 で 2.5 時間加熱した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I-16 を固体として得た。

【0220】

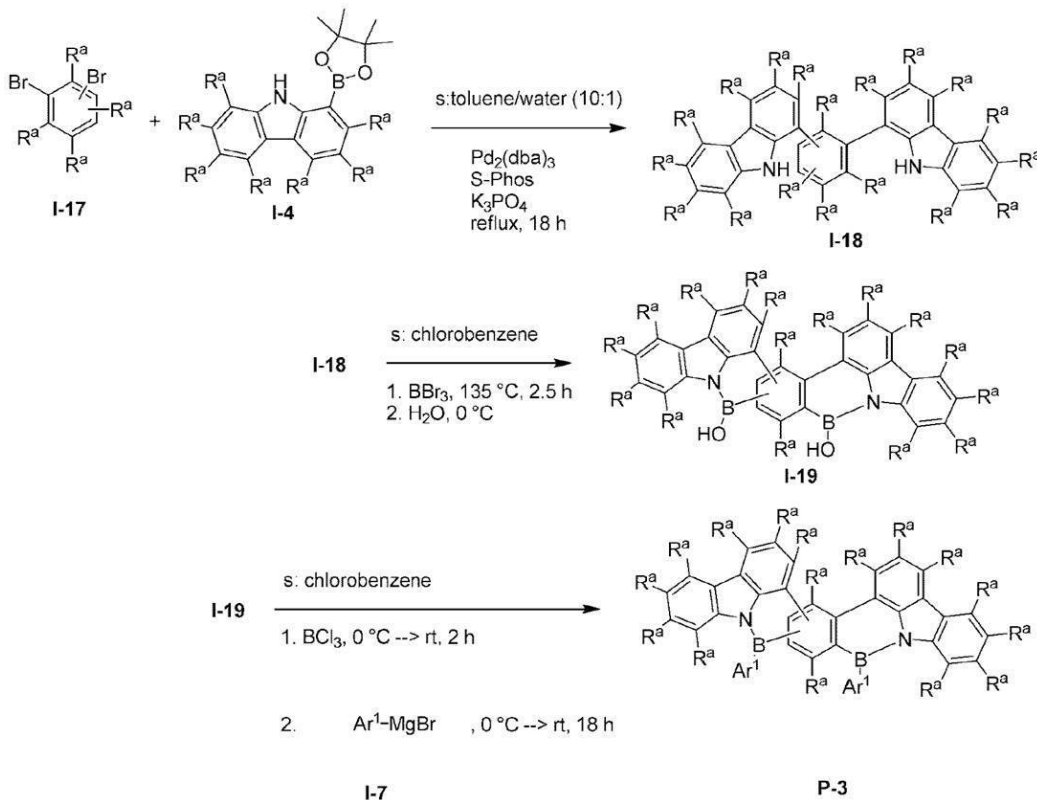
AAV11: 窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内の I-16 (1.0 当量) の溶液を 0 で三臭化ホウ素 (ヘキサン内の 1M、CAS-No. 10294-34-5、2.0 当量) に添加し、次いで、室温で 2 時間撹拌した。その後、0 で I-7 (3.5 当量) を添加し、室温で 18 時間撹拌した。その後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 P-2 を固体として得た。

10

【0221】

一般合成方式 I V

【化72】



20

30

合成のための一般手順:

AAV12: トルエンと水の脱気された混合物 (体積基準 10 : 1) 内の I-17 (1.0 当量)、I-4 (2.20 当量)、トリス (ジベンジリデンアセトン) - ジパラジウム (0) (CAS-No. 51364-51-3、0.02 当量)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシ-1,1'-ビフェニル (S-Phos、CAS-No. 657408-07-6、0.08 当量) 及び  $\text{K}_3\text{PO}_4$  (CAS-No. 7778-53-2、5.0 当量) の懸濁液を 18 時間還流撹拌した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I-18 を固体として得た。

40

【0222】

AAV13: 窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内の I-18 (1.0 当量) の溶液を室温で三臭化ホウ素 (99%、CAS-No. 10294-33-4、8.0 当量) に添

50

加した。その後、混合物を 125 で 2.5 時間加熱した。室温に冷却した後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 I - 19 を固体として得た。

#### 【0223】

AAV14：窒素雰囲気下、脱水クロロベンゼン内の I - 19 (1.0 当量) の溶液を 0 で三臭化ホウ素 (ヘキサンの 1 M、CAS - No. 10294 - 34 - 5、2.0 当量) に添加し、室温で 2 時間撹拌した。その後、0 で I - 7 (3.5 当量) を添加し、室温で 18 時間撹拌した。その後、水性ワークアップを行った後、再結晶化またはカラムクロマトグラフィによって粗生成物を精製した。所望の化合物 P - 3 を固体として得た。

10

#### 【0224】

##### サイクリックボルタンメトリー法

サイクルボルタモグラムは、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、 $FeCp_2 / FeCp_2^+$  を使用して補正する。HOMOデータは、飽和カロメル電極 (SCE) に係わる内部標準として、フェロセンを使用して修正された。

#### 【0225】

##### 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。

20

#### 【0226】

##### 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。

30

#### 【0227】

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 で 1 分間乾燥させた。

#### 【0228】

##### フォトルミネ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) を使用して記録される。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。

40

#### 【0229】

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。

#### 【0230】

励起光源:

NanoLED 370 (波長: 371 nm、パルス持続時間: 1.1 ns)

NanoLED 290 (波長: 294 nm、パルス持続時間: < 1 ns)

50

SpectraLED 310 (波長: 314 nm)

SpectraLED 355 (波長: 355 nm)

データ分析 (指数フィット) は、ソフトウェア製品群 DataStation 及び D A S 6 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。

【0231】

#### フォトルミネセンス量子収率測定

フォトルミネセンス量子収率 (PLQY) 測定のために、Absolute PL 量子収率測定 C9920 - 03G システム (浜松ホトニクス) が使用されている。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。

10

【0232】

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

【0233】

PLQY は、次のプロトコルを使用して決定される:

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

【0234】

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。

【0235】

3) 測定

20

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:

【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

【0236】

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

【0237】

#### 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、該化合物の百分率は、指定された値と、100% との差と同じである。

【0238】

完全に最適化されていない OLED は、標準方法を使用してエレクトロルミネセンススペクトルを測定し、光ダイオードによって検出された光及び電流を使用して計算された、強度及び電流に依存する外部量子効率 (%) を測定して特性化される。OLED 素子の寿命は、一定電流密度で動作する間、輝度の変化から抽出される。LT50 値は、測定輝度が、初期輝度の 50% に低減した時間に該当し、同様に、LT80 は、測定輝度が、初期輝度の 80% に低減した時点に該当し、LT95 は、測定輝度が、初期輝度の 95% に低減した時点に該当する。

40

【0239】

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<sup>2</sup> において、LT80 値は、次の式を使用して決定される:

【数4】

50

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

## 【0240】

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。

## 【0241】

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。 10

## 【0242】

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。

## 【0243】

例えば、典型的なHPLC方法は、次の通りである：Agilent（ZORBAX Eclipse Plus 95 C18、4.6×150mm、3.5μm HPLCカラム）から、逆相カラム4.6mm×150mm、及び粒子サイズ3.5μmがHPLCに使用される。HPLC - MS測定は、下記の勾配により、室温（rt）で行われる。 20

## 【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

下記の溶媒混合物を使用した：

## 【表2】

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

40

## 【0244】

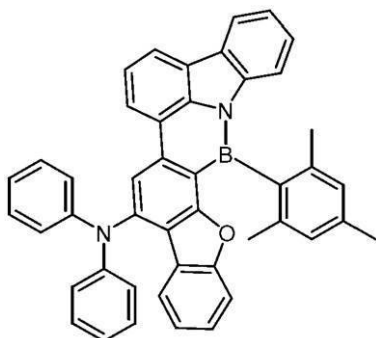
プローブのイオン化は、陽（APCI<sup>+</sup>）イオン化モードまたは陰（APCI<sup>-</sup>）イオン化モードにおいて、APCI（大気圧化学イオン化）ソースを使用して行われる。

## 【0245】

実施例1

50

## 【化 7 3】



10

実施例 1 を以下によって合成した：

AAV 1 (78% 収率)、ここで、1 - ブロモ - 3 - クロロジベンゾ [ b . d ] フラン (CAS - No . 2043962 - 13 - 4) 及びジフェニルアミン (CAS - No . 122 - 39 - 4) が化合物 I - 1 及び I - 2 としてそれぞれ使用され、

AAV 2 (87% 収率)、ここで、1 - (テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール (CAS - No . 1219637 - 88 - 3) が化合物 I - 4 として使用され、

AAV 3 (86% 収率)、及び

AAV 4 (23% 収率)、ここで、2 , 4 , 6 - トリメチルフェニルマグネシウムプロミド (CAS - No . 2633 - 66 - 1、2 - メチルテトラヒドロフラン内の 0 . 5 M) が化合物 I - 7 として使用された。

20

## 【0246】

MS (LC - MS、APPI イオンソース) : 629 . 6 m / z r t : 6 . 0 分。

## 【0247】

実施例 1 (トルエン内の 0 . 001 mg / ml) の最大発光は 431 nm であり、CIE x 座標は 0 . 16 であり、CIE y 座標は 0 . 04 である。フォトルミネセンス量子収率 (PLQY) は 65% である。

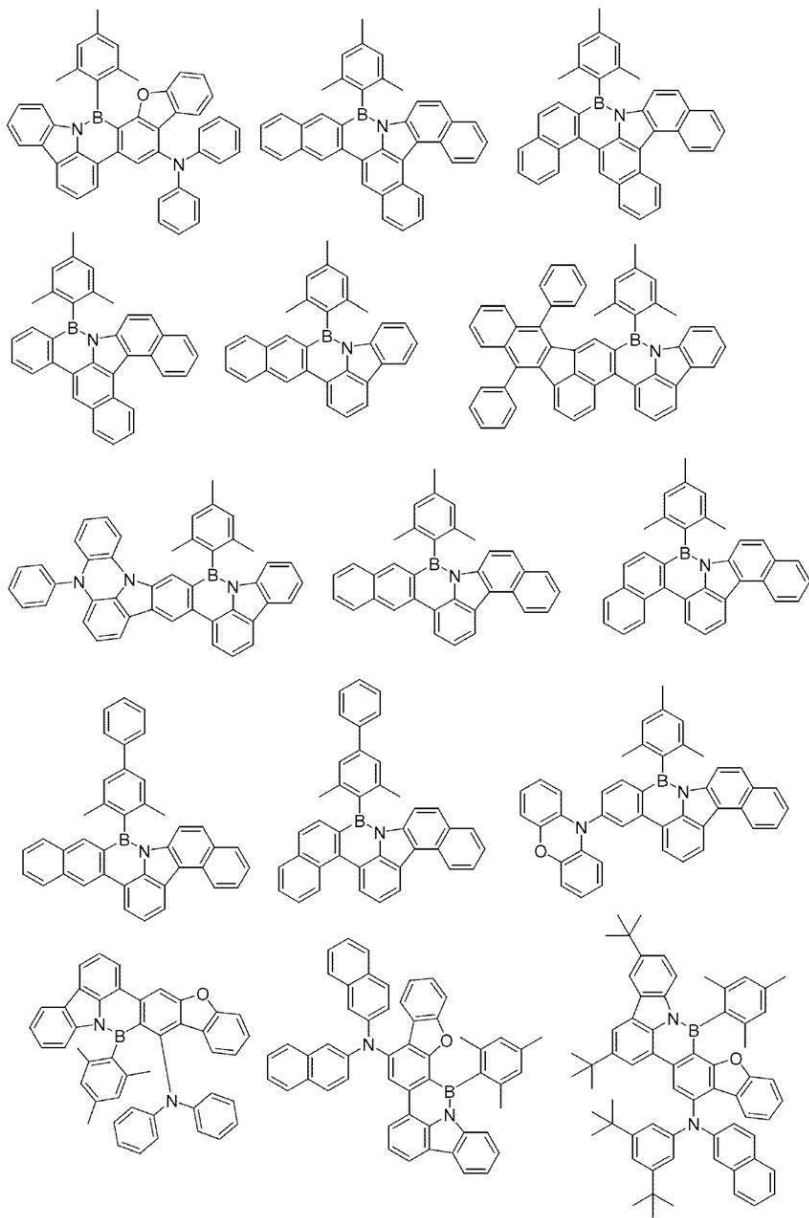
本発明の有機分子の追加例

30

40

50

## 【化 7 4】



10

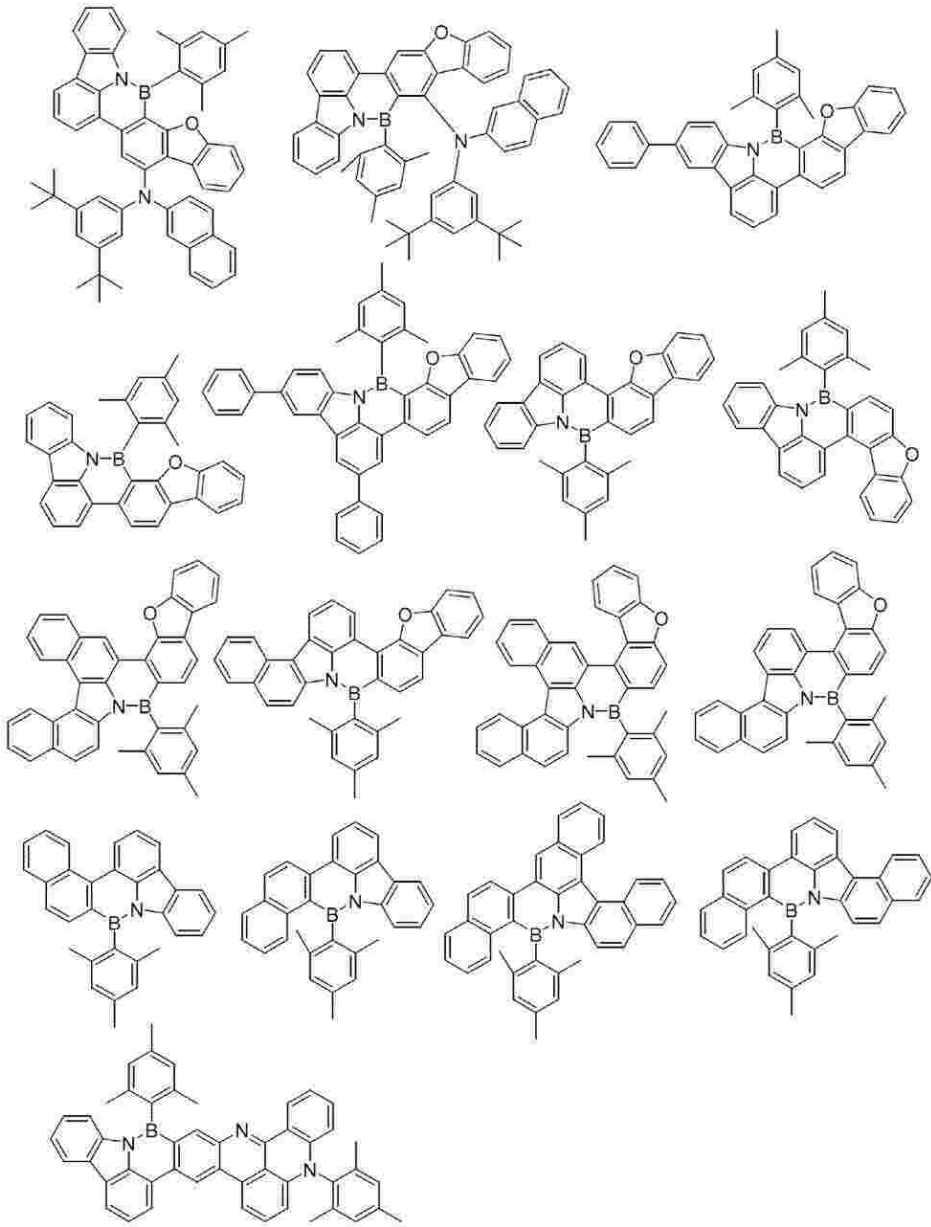
20

30

40

50

【化 7 5】



10

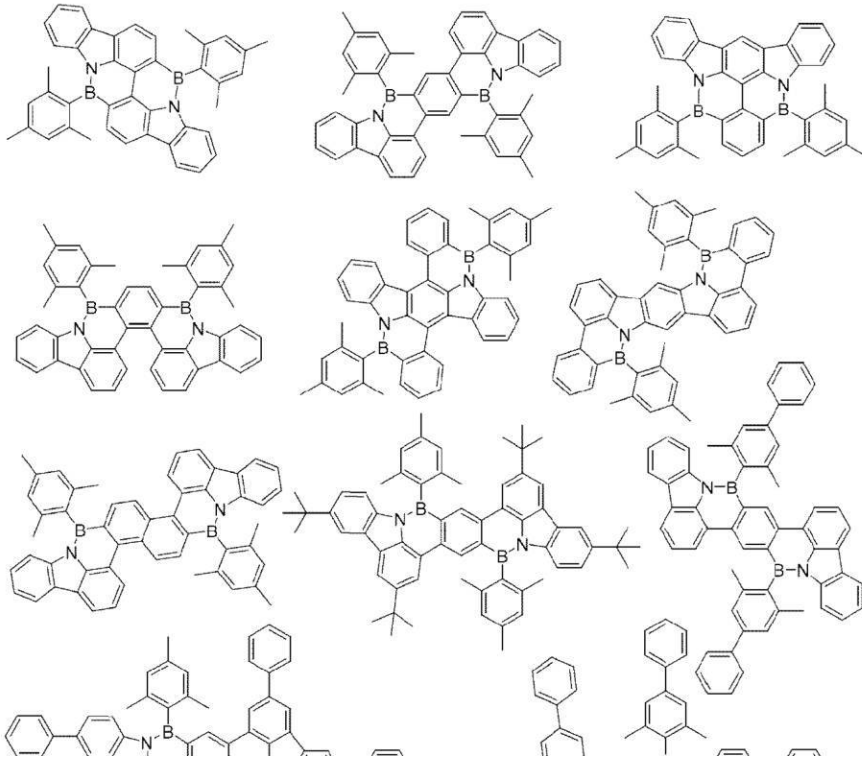
20

30

40

50

【化 7 6】



10

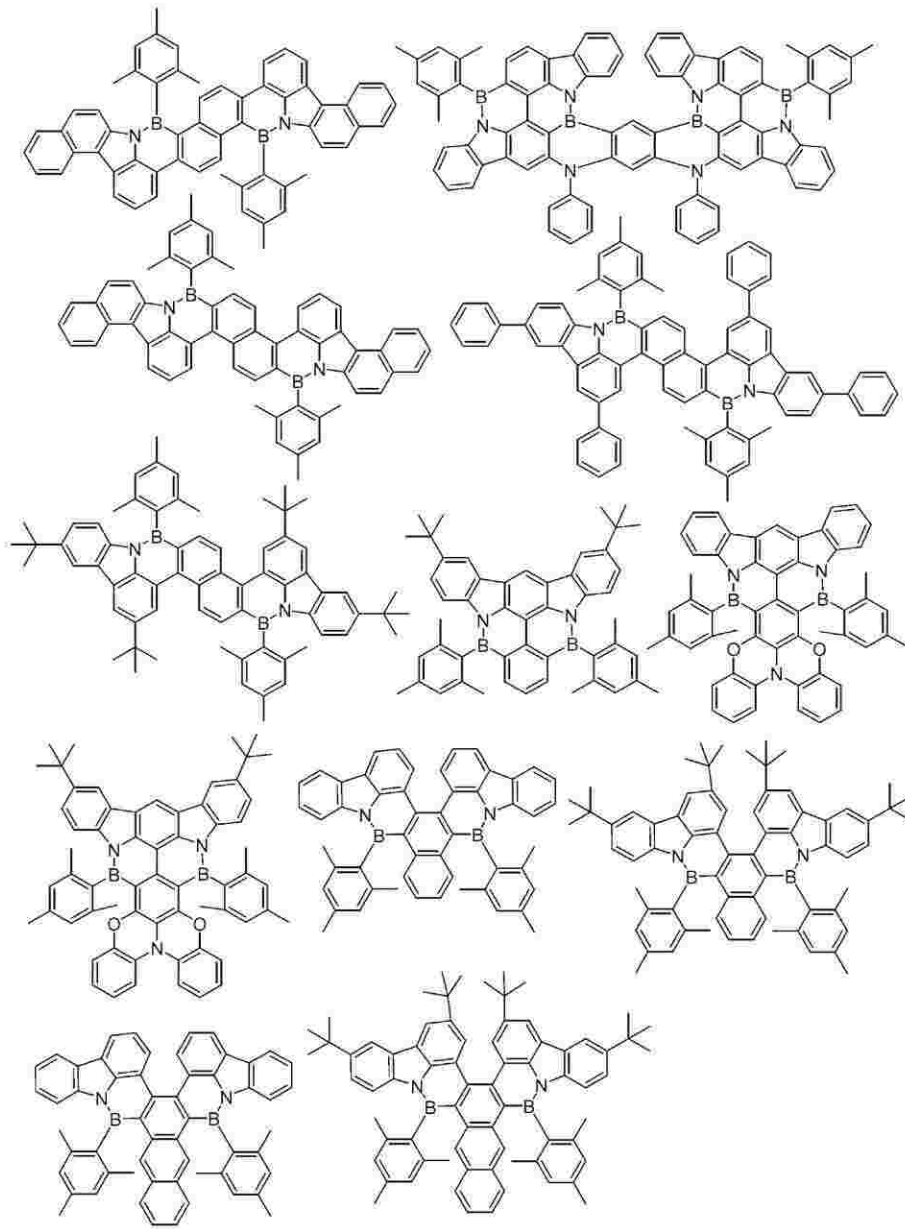
20

30

40

50

【化 7 7】



10

20

30

40

50

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2022/010916

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b> C07F 5/02(2006.01)i; H01L 51/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F 5/02(2006.01); C09K 11/06(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01)		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models Japanese utility models and applications for utility models		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS(KIPO internal), STN(Registry, Caplus) & Keywords: optoelectronic devices, boron, organic molecules		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	SAKAMAKI, T. et al., "B2N2-doped dibenzo [a,m] rubicene: modular synthesis, properties, and coordination-induced color tunability", Chemistry of materials, [Epub.] 16 June 2021, Vol. 33, No. 13, pp. 5337-5344 abstract; scheme 1	1-3
X	CN 111471061 A (JIANGSU MARCH TECHNOLOGY CO., LTD) 31 July 2020 (2020-07-31) claims 1, 7(compound 218)	1-3
A	JP 2020-026426 A (KWANSEI GAKUIN UNIV. et al.) 20 February 2020 (2020-02-20) claims 1-14	1-3
A	KR 10-2021-0084601 A (CYNORA GMBH) 07 July 2021 (2021-07-07) the whole document	1-3
A	KR 10-2021-0043054 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 21 April 2021 (2021-04-21) the whole document	1-3
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> 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 <b>31 October 2022</b>		Date of mailing of the international search report <b>01 November 2022</b>
Name and mailing address of the ISA/KR <b>Korean Intellectual Property Office 189 Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon 35208, Republic of Korea</b> Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer <b>HEO, Joo Hyung</b> Telephone No. +82-42-481-5373

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

10

20

30

40

50

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No.

**PCT/KR2022/010916**

**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:

10

2.  Claims Nos.: **8, 12**  
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 8, 12 are regarded to be unclear because they refer to claims which do not comply with PCT Rule 6.4(a).

3.  Claims Nos.: **4-7, 9-11, 13-15**  
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

20

30

40

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.  
**PCT/KR2022/010916**

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
CN	111471061	A	31 July 2020	None			
JP	2020-026426	A	20 February 2020	None			
KR	10-2021-0084601	A	07 July 2021	CN	113227106	A	06 August 2021
				EP	3902811	A1	03 November 2021
				JP	2022-514625	A	14 February 2022
				US	2022-0052265	A1	17 February 2022
				WO	2020-135953	A1	02 July 2020
KR	10-2021-0043054	A	21 April 2021	CN	112652724	A	13 April 2021
				EP	3806175	A1	14 April 2021
				US	2021-0111344	A1	15 April 2021

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)

H 1 0 K 85/60 (2023.01)	H 1 0 K 85/60
H 1 0 K 30/50 (2023.01)	H 1 0 K 30/50
H 1 0 K 101/20 (2023.01)	H 1 0 K 101:20
H 1 0 K 101/10 (2023.01)	H 1 0 K 101:10

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,N  
E,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,  
CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,J  
M,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,ME,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,T  
H,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW

ドイツ連邦共和国 7 6 6 7 6 グラーベン - ノイドルフ, ラインシュトラッセ 4 1 / 1

Fターム (参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB05 CC04 CC07 CC21 DD53 DD59 DD66  
DD67 DD68 DD69 DD70 FF13 FF14  
4H048 AA01 AA03 AB92 VA22 VA32 VA77 VB10  
5F251 AA11 XA32

## 【要約の続き】

art> 1 - C<sub>6</sub>アルキル置換基で置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>12</sub>アリールからなる群から選択され、

Zは、それぞれの場合に、独立して、単結合、C R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、C = C R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、C = O、C = N R<sup>3</sup>、N R<sup>3</sup>、O  
、S i R<sup>3</sup> R<sup>4</sup>、S、S (O) 及びS (O)<sub>2</sub>からなる群から選択され、

R<sup>a</sup>、R<sup>3</sup>及びR<sup>4</sup>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<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、OR<sup>5</sup>、S i (R<sup>5</sup>)<sub>3</sub>、B (OR<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、B (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>、OSO<sub>2</sub>R<sup>5</sup>、CF<sub>3</sub>、CN、F、Br、I、  
C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>チオアルコキシ、C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>-  
C<sub>40</sub>アルキニル、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール及びC<sub>2</sub>-C<sub>57</sub>ヘテロアリール。