

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第7部門第2区分

【発行日】令和3年1月28日(2021.1.28)

【公開番号】特開2020-167388(P2020-167388A)

【公開日】令和2年10月8日(2020.10.8)

【年通号数】公開・登録公報2020-041

【出願番号】特願2020-31722(P2020-31722)

【国際特許分類】

H 01 L 51/50 (2006.01)

C 09 K 11/06 (2006.01)

C 07 D 409/04 (2006.01)

【F I】

H 05 B 33/14 B

C 09 K 11/06 6 6 0

C 09 K 11/06 6 9 0

C 07 D 409/04

【手続補正書】

【提出日】令和2年12月8日(2020.12.8)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に設けられ、発光素子用組成物を含む有機層と、
を備え、

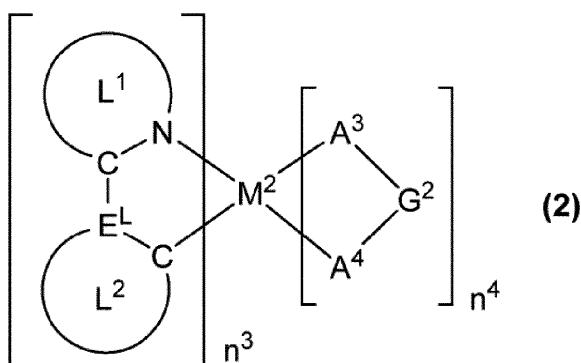
前記発光素子用組成物が、

式(2)で表される金属錯体と、

ホウ素原子と、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、s p³炭素原子及び窒素原子から
なる群より選ばれる少なくとも1種とを環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物
(B)と、

を含有する、発光素子。

【化1】



〔式中、

M^2 は、ロジウム原子、パラジウム原子、イリジウム原子又は白金原子を表す。

n^3 は 1 以上の整数を表し、 n^4 は 0 以上の整数を表す。但し、 M^2 がロジウム原子又はイリジウム原子の場合、 $n^3 + n^4$ は 3 であり、 M^2 がパラジウム原子又は白金原子の場合、 $n^3 + n^4$ は 2 である。

E^L は、炭素原子又は窒素原子を表す。 E^L が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なっていてもよい。

環 L^1 は、6 員環を含む芳香族複素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^1 が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

環 L^2 は、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^2 が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

環 L^1 が有していてもよい置換基と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

但し、環 L^1 及び環 L^2 のうちの少なくとも 1 つは、置換基として、式 (1 - T) で表される基を有する。式 (1 - T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

$A^3 - G^2 - A^4$ は、アニオン性の 2 座配位子を表す。 A^3 及び A^4 は、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表し、これらの原子は環を構成する原子であってもよい。 G^2 は、単結合、又は、 A^3 及び A^4 とともに 2 座配位子を構成する原子団を表す。 $A^3 - G^2 - A^4$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。]

【化 2】

$-R^{1T} (1-T)$

[式中、 R^{1T} は、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アリール基、1 値の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

【請求項 2】

前記 R^{1T} が、アリール基、1 値の複素環基又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項 1 に記載の発光素子。

【請求項 3】

前記環 L^1 が、置換基として式 (1 - T) で表される基を有していてもよい、6 員環を含む芳香族複素環であり、

前記環 L^1 がイソキノリン環である場合、前記環 L^1 及び前記環 L^2 が有する式 (1 - T) で表される基の少なくとも 1 つにおいて、前記 R^{1T} が、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよい 1 値の複素環基又は置換基を有していてもよい置換アミノ基である、請求項 1 に記載の発光素子。

【請求項 4】

前記環 L^1 が、ピリジン環、ジアザベンゼン環、アザナフタレン環又はジアザナフタレン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい、請求項 1 に記載の発光素子。

【請求項 5】

前記環 L^1 が、ピリジン環、ジアザベンゼン環、キノリン環又はジアザナフタレン環であり、これらの環は置換基を有していてもよく、且つ、

前記 R^{1T} が、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 値の複素環基又は置換

アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項1に記載の発光素子。

【請求項 6】

前記環 L¹ が、置換基を有していてもよいイソキノリン環であり、且つ、

前記 R¹ T が、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項1に記載の発光素子。

【請求項 7】

前記環 L² が、ベンゼン環、ピリジン環又はジアザベンゼン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい、請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の発光素子。

【請求項 8】

前記 R¹ T が、置換基を有していてもよいアリール基又は置換基を有していてもよい1価の複素環基である、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の発光素子。

【請求項 9】

前記縮合複素環骨格 (b) が、ホウ素原子と、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも1種と、を環内に含む、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の発光素子。

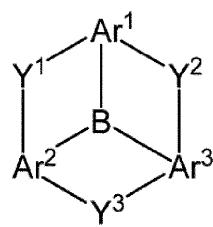
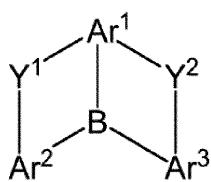
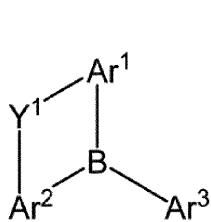
【請求項 10】

前記縮合複素環骨格 (b) が、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む、請求項9に記載の発光素子。

【請求項 11】

前記化合物 (B) が、式 (1 - 1) で表される化合物、式 (1 - 2) で表される化合物又は式 (1 - 3) で表される化合物である、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の発光素子。

【化 3】



[式中、

Ar¹、Ar² 及び Ar³ は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y¹ は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、-N(Ry)- で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y² 及び Y³ は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、-N(Ry)- で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。Ry は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。Ry が複数存在する場合、同一であっても異なっていてもよい。Ry は、直接結合して又は連結基を介して、Ar¹、Ar² 又は Ar³ と結合していてもよい。]

【請求項 1 2】

前記 Y^1 が $-N(R_y)$ で表される基である、請求項 1 1 に記載の発光素子。

【請求項 1 3】

前記 Y^1 、前記 Y^2 及び前記 Y^3 が、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_y)$ で表される基である、請求項 1 1 に記載の発光素子。

【請求項 1 4】

前記 Y^1 、前記 Y^2 及び前記 Y^3 が、 $-N(R_y)$ で表される基である、請求項 1 3 に記載の発光素子。

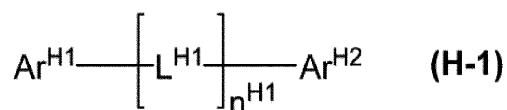
【請求項 1 5】

前記化合物 (B) の最低三重項励起状態のエネルギー準位と前記化合物 (B) の最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が 0.50 eV 以下である、請求項 1 ~ 1 4 のいずれか一項に記載の発光素子。

【請求項 1 6】

前記発光素子用組成物が、式 (H-1) で表される化合物を更に含有する、請求項 1 ~ 1 5 のいずれか一項に記載の発光素子。

【化 4】



[式中、

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} は、それぞれ独立に、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

n^{H1} は、0 以上の整数を表す。

L^{H1} は、アリーレン基、2価の複素環基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 L^{H1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。]

【請求項 1 7】

前記発光素子用組成物が、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも 1 種を更に含有する、請求項 1 ~ 1 6 のいずれか一項に記載の発光素子。

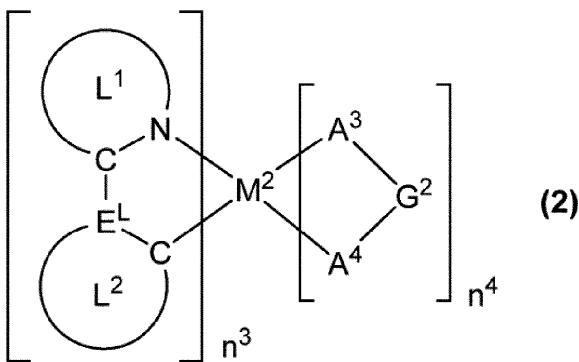
【請求項 1 8】

式 (2) で表される金属錯体と、

ホウ素原子と、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $s p^3$ 炭素原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも 1 種とを環内に含む縮合複素環骨格 (b) を有する化合物 (B) と、

を含有する、発光素子用組成物。

【化5】



[式中、

M^2 は、ロジウム原子、パラジウム原子、イリジウム原子又は白金原子を表す。

n^3 は 1 以上の整数を表し、 n^4 は 0 以上の整数を表す。但し、 M^2 がロジウム原子又はイリジウム原子の場合、 $n^3 + n^4$ は 3 であり、 M^2 がパラジウム原子又は白金原子の場合、 $n^3 + n^4$ は 2 である。

E^L は、炭素原子又は窒素原子を表す。 E^L が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なっていてもよい。

環 L^1 は、6員環を含む芳香族複素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^1 が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

環 L^2 は、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^2 が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

環 L^1 が有していてもよい置換基と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

但し、環 L^1 及び環 L^2 のうちの少なくとも 1 つは、置換基として、式 (1-T) で表される基を有する。式 (1-T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。

$A^3 - G^2 - A^4$ は、アニオン性の 2 座配位子を表す。 A^3 及び A^4 は、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表し、これらの原子は環を構成する原子であってもよい。 G^2 は、単結合、又は、 A^3 及び A^4 とともに 2 座配位子を構成する原子団を表す。 $A^3 - G^2 - A^4$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。]

【化6】

$-R^{1T} (1-T)$

[式中、 R^{1T} は、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

【請求項 19】

前記 R^{1T} が、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項 18 に記載の発光素子用組成物。

【請求項 20】

前記環 L¹ が、置換基として式(1-T)で表される基を有していてもよい、6員環を含む芳香族複素環であり、

前記環 L¹ がイソキノリン環である場合、前記環 L¹ 及び前記環 L² が有する式(1-T)で表される基の少なくとも1つにおいて、前記 R^{1-T} が、置換基を有していてもよいアリール基、置換基を有していてもよい1価の複素環基又は置換基を有していてもよい置換アミノ基である、請求項18に記載の発光素子用組成物。

【請求項21】

前記環 L¹ が、ピリジン環、ジアザベンゼン環、キノリン環又はジアザナフタレン環であり、これらの環は置換基を有していてもよく、且つ、

前記 R^{1-T} が、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項18に記載の発光素子用組成物。

【請求項22】

前記環 L¹ が、置換基を有していてもよいイソキノリン環であり、且つ、前記 R^{1-T} が、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい、請求項18に記載の発光素子用組成物。

【請求項23】

前記環 L² が、ベンゼン環、ピリジン環又はジアザベンゼン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい、請求項18~22のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

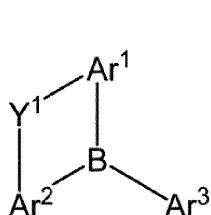
【請求項24】

前記縮合複素環骨格(b)が、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む、請求項18~23のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

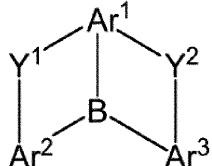
【請求項25】

前記化合物(B)が、式(1-1)で表される化合物、式(1-2)で表される化合物又は式(1-3)で表される化合物である、請求項18~23のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

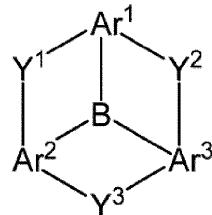
【化7】



(1-1)



(1-2)



(1-3)

〔式中、

Ar¹、Ar² 及び Ar³ は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y¹ は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、-N(Ry)-で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

Y² 及び Y³ は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、-N(Ry)-で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。Ry は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、

これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。Ryが複数存在する場合、同一であっても異なっていてもよい。Ryは、直接結合して又は連結基を介して、Ar¹、Ar²又はAr³と結合していてもよい。】

【請求項26】

前記Y¹が-N(Ry)-で表される基である、請求項25に記載の発光素子用組成物。

【請求項27】

前記Y¹、前記Y²及び前記Y³が、-N(Ry)-で表される基である、請求項25に記載の発光素子用組成物。

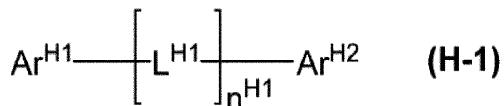
【請求項28】

前記化合物(B)の最低三重項励起状態のエネルギー準位と前記化合物(B)の最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50eV以下である、請求項18~27のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

【請求項29】

式(H-1)で表される化合物を更に含有する、請求項18~28のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

【化8】



[式中、

Ar^{H1}及びAr^{H2}は、それぞれ独立に、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

n^{H1}は、0以上の整数を表す。

L^{H1}は、アリーレン基、2価の複素環基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。L^{H1}が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよい。】

【請求項30】

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種を更に含有する、請求項18~29のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。