

【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 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 D 409/04 (2006.01)

【 F I 】

H 0 5 B 33/14 B

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 7 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、

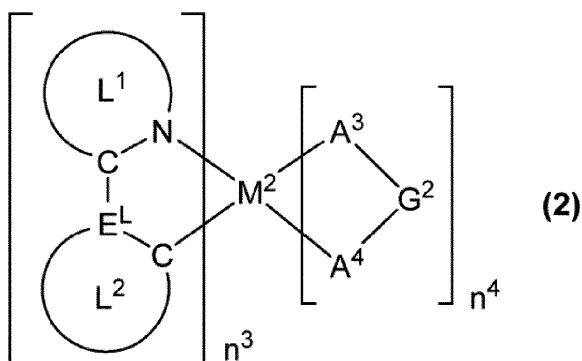
前記発光素子用組成物が、

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、 $sp^3$  炭素原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも 1 種とを環内に含む縮合複素環骨格 (b) を有する化合物 (B) 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るもよい。

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るもよい。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るもよく、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るもよい。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るもよい。

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るもよい。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るもよく、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るもよい。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るもよい。

環  $L^1$  が有しているもよい置換基と環  $L^2$  が有しているもよい置換基とは、同一でも異なっているもよく、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るもよい。

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るもよい。

$A^3 - G^2 - A^4$  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るもよい。]

【化 2】



[ 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、アリーロキシ基、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るもよい。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るもよく、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るもよい。]

【請求項 2】

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るもよい、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るもよい、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、置換基を有しているもよいアリール基、置換基を有しているもよい 1 価の複素環基又は置換基を有している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るもよい、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るもよく、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 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 6】

前記環  $L^1$  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  $R^{1T}$  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1に記載の発光素子。

【請求項 7】

前記環  $L^2$  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  $R^{1T}$  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。

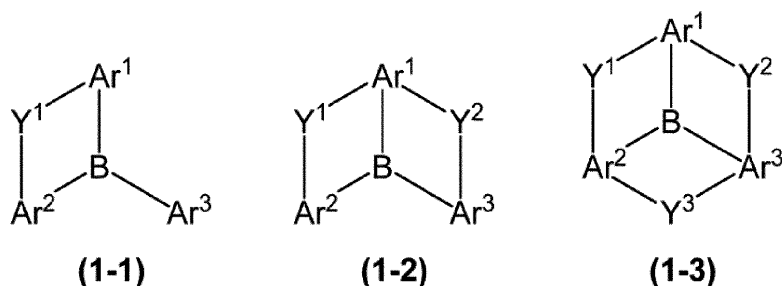
【請求項 10】

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、

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

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

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

## 【請求項 1 2】

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

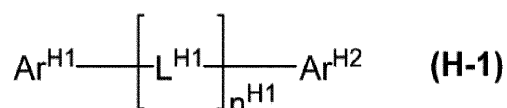
## 【請求項 1 5】

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  $0.50\text{ eV}$  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、

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

$n^{\text{H}1}$  は、0 以上の整数を表す。

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

## 【請求項 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。

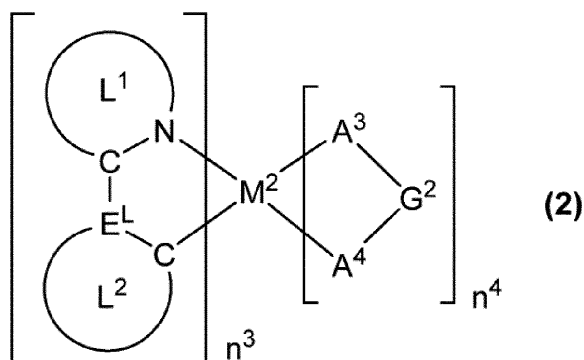
## 【請求項 1 8】

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、 $sp^3$  炭素原子及び窒素原子からなる群より選ばれる少なくとも 1 種とを環内に含む縮合複素環骨格 (b) を有する化合物 (B) 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もよい。]

## 【化 6】



[ 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もよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

## 【請求項 19】

前記  $R^{1T}$  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  $L^1$  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 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  $L^1$  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 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  $L^1$  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  $R^{1T}$  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 23】

前記環  $L^2$  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。

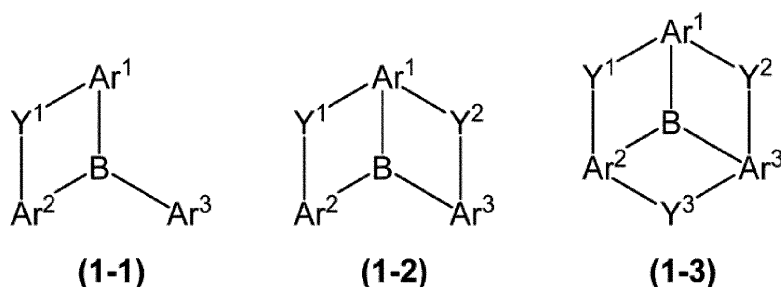
【請求項 24】

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】



[ 式中、

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

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

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

これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。R<sub>y</sub>が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R<sub>y</sub>は、直接結合して又は連結基を介して、Ar<sup>1</sup>、Ar<sup>2</sup>又はAr<sup>3</sup>と結合していてもよい。]

【請求項 26】

前記 Y<sup>1</sup> が - N ( R<sub>y</sub> ) - 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 Y<sup>1</sup>、前記 Y<sup>2</sup> 及び前記 Y<sup>3</sup> が、- N ( R<sub>y</sub> ) - 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。

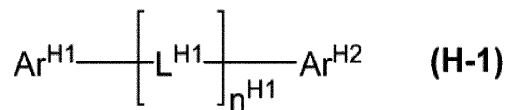
【請求項 28】

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 . 5 0 e V 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<sup>H1</sup> 及び Ar<sup>H2</sup> は、それぞれ独立に、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

n<sup>H1</sup> は、0 以上の整数を表す。

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

【請求項 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。