

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2021-82801
(P2021-82801A)

(43) 公開日 令和3年5月27日(2021.5.27)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	3K107
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06 690	
	C09K 11/06 660	

審査請求 未請求 請求項の数 15 O L 外国語出願 (全 53 頁)

(21) 出願番号 特願2020-70929 (P2020-70929)	(71) 出願人 503055897 ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ ション アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユー イング、 フィリップス ブールバード 375
(22) 出願日 令和2年4月10日(2020.4.10)	
(31) 優先権主張番号 16/683, 507	
(32) 優先日 令和1年11月14日(2019.11.14)	
(33) 優先権主張国・地域又は機関 米国 (US)	
(31) 優先権主張番号 16/841, 182	(74) 代理人 100107515 弁理士 廣田 浩一
(32) 優先日 令和2年4月6日(2020.4.6)	(74) 代理人 100107733 弁理士 流 良広
(33) 優先権主張国・地域又は機関 米国 (US)	(74) 代理人 100115347 弁理士 松田 奈緒子

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネセンス材料及びデバイス

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 安定な O L E D、特に安定な青色リン光 O L E D を提供する。

【解決手段】 有機発光層が、第 1 のホスト材料と、発光体材料とを含み、有機発光層における全ての材料が互いに混合されており、発光体が、リン光金属錯体及び遅延蛍光発光体からなる群から選択され、 $a \text{ E T} - \text{ E } b$ であり；式中、E T は、発光体の三重項エネルギー T 1 であって、有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T 1 エネルギーであり、E は、有機発光層中の全ての材料の中で最も高い H O M O エネルギーと最も低い L U M O エネルギーとの間のエネルギーギャップであり、a は、0 . 0 0 ~ 最大 0 . 1 5 e V であり、b は、0 . 0 5 ~ 最大 0 . 4 5 e V であり；O L E D の発光スペクトルが、有機発光層が第 1 の発光体と不活性ホストとからなる O L E D の発光スペクトルと少なくとも 9 5 % 同一である有機発光デバイス。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

発光スペクトルを有する有機発光デバイス（O L E D）であって、
 アノードと、
 カソードと、
 前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機発光層とを含み、前記有機発光層が、

最高被占分子軌道（H O M O）エネルギー及び最低空分子軌道（L U M O）エネルギーを有する第 1 のホスト材料と、

H O M O エネルギー及び L U M O エネルギーを有する発光体材料とを含み、

前記有機発光層における全ての材料が互いに混合されており、

発光体が、リン光金属錯体及び遅延蛍光発光体からなる群から選択され、

高い H O M O エネルギーが、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も高い H O M O エネルギーであり、

低い L U M O エネルギーが、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い L U M O エネルギーであり、

a $E_T - E_b$ であり；式中、 E_T は、前記発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり、 E_b は、前記高い H O M O エネルギーと前記低い L U M O エネルギーとの間のエネルギーギャップであり、a は、0.00 ~ 最大 0.15 eV であり、b は、0.05 ~ 最大 0.45 eV であり；

前記 O L E D の前記発光スペクトルが、有機発光層が第 1 の発光体と不活性ホストとからなる O L E D の発光スペクトルと少なくとも 95% 同一であることを特徴とする有機発光デバイス（O L E D）。

【請求項 2】

前記発光体が、リン光金属錯体又は遅延蛍光発光体である請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 3】

E_T が、少なくとも 2.60 eV である請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 4】

前記高い H O M O エネルギーが発光体の H O M O エネルギーであり、前記低い L U M O エネルギーが第 1 のホストの L U M O エネルギーである請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 5】

前記高い H O M O エネルギーが第 1 のホストの H O M O エネルギーであり、前記低い L U M O エネルギーが前記発光体の L U M O エネルギーである請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 6】

前記 O L E D が第 2 のホストを更に含み、前記高い H O M O エネルギーが第 1 のホストの H O M O エネルギーであり、前記低い L U M O エネルギーが前記第 2 のホストの L U M O エネルギーである請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 7】

前記 O L E D が第 2 のホストを更に含み、前記高い H O M O エネルギーが前記第 2 のホストの H O M O エネルギーであり、前記低い L U M O エネルギーが第 1 のホストの L U M O エネルギーである請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 8】

第 1 のホストが、トリフェニレン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ボリル、5,9-ジオキサ-1,3-b-ボラナフト [3,2,1-d,e] アントラセン、及びそれらのアザ-バリエーションからなる群から選択される少なくとも 1 つの化学部分を含む請求項 1 に記載の O L E D。

【請求項 9】

前記発光体が、リン光青色発光体である請求項 1 に記載の O L E D。

10

20

30

40

50

【請求項 10】

前記発光体が、式 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ を有する請求項 1 に記載の OLED。

(式中

L^1 、 L^2 、及び L^3 は、同一であっても異なってもよく；

x は、1、2、又は 3 であり；

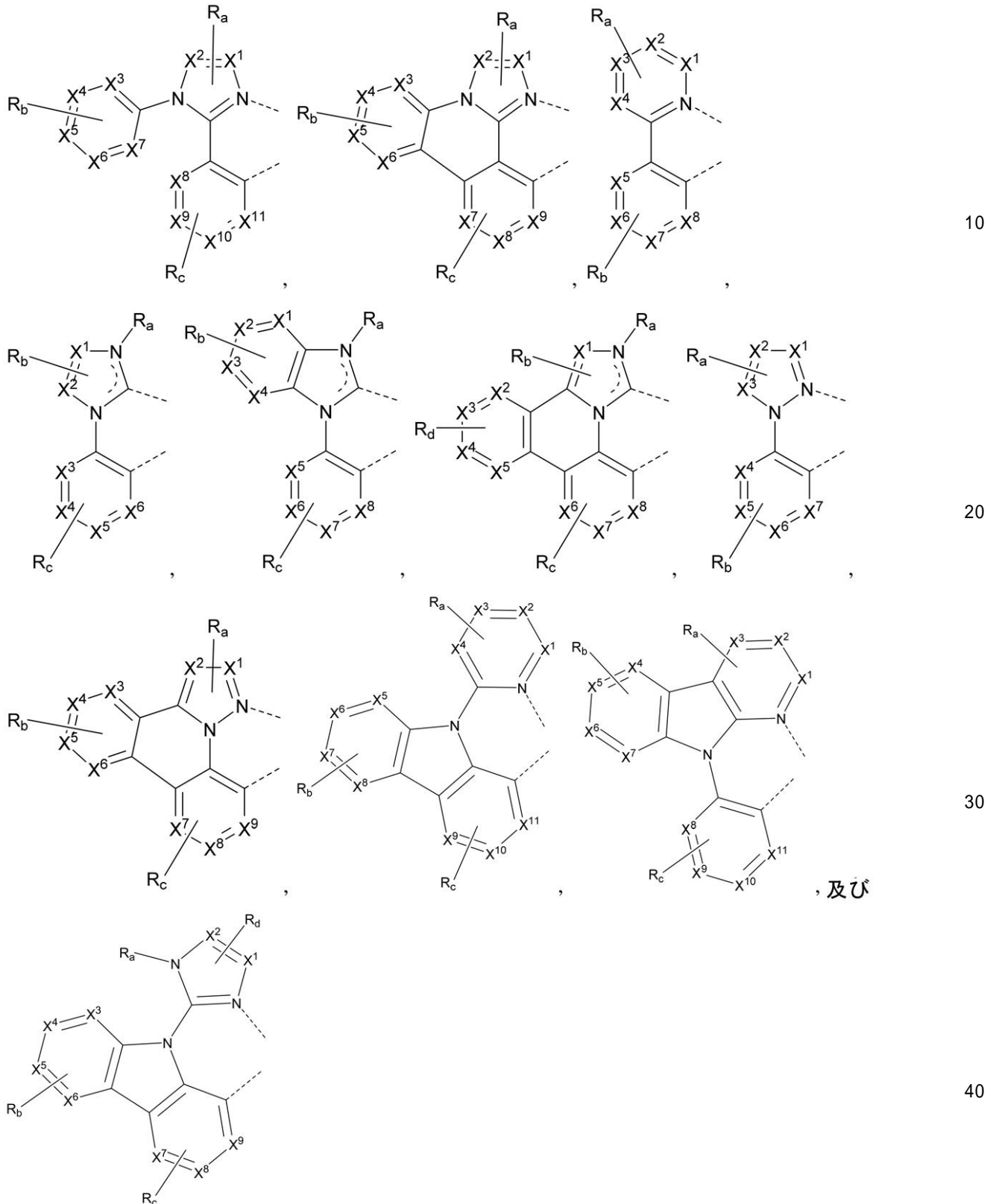
y は、0、1、又は 2 であり；

z は、0、1、又は 2 であり；

$x + y + z$ は、金属 M の酸化状態であり；

L^1 、 L^2 、及び L^3 は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される：

【化 1】



式中、各 $X^1 \sim X^{11}$ は、独立して、炭素及び窒素からなる群から選択され；
 X は、 BR' 、 NR' 、 PR' 、 O 、 S 、 Se 、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、及び $GeR'R''$ からなる群から選択され；
 R' 及び R'' は、縮合又は結合して環を形成してもよく；
 各 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、モノ置換から可能な最大の置換数を表すことができ、又は無置換を表すことができ；

R' 、 R'' 、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、それぞれ独立して、水素である、又は水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

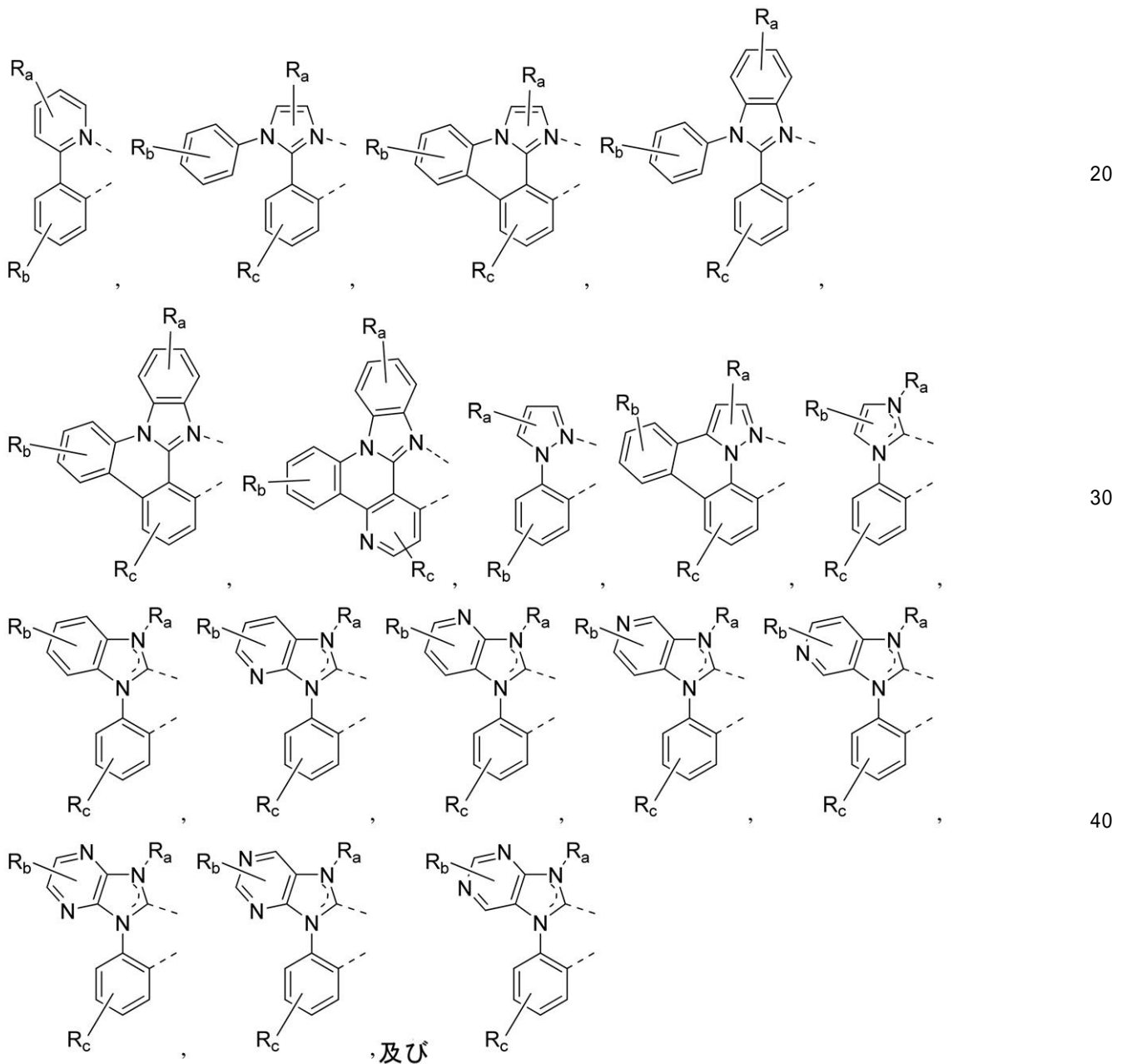
任意の2つの R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、縮合又は結合して環を形成する又は多座配位子を形成してもよい。）

【請求項11】

前記発光体が、 $Ir(L^1)(L^2)(L^3)$ 、 $Ir(L^1)_2(L^2)$ 、及び $Ir(L^1)_3$ からなる群から選択される式を有する請求項10に記載のOLED。

(式中、 L^1 、 L^2 、及び L^3 は、異なっており、それぞれ独立して下記からなる群から選択される。)

【化2】



【請求項12】

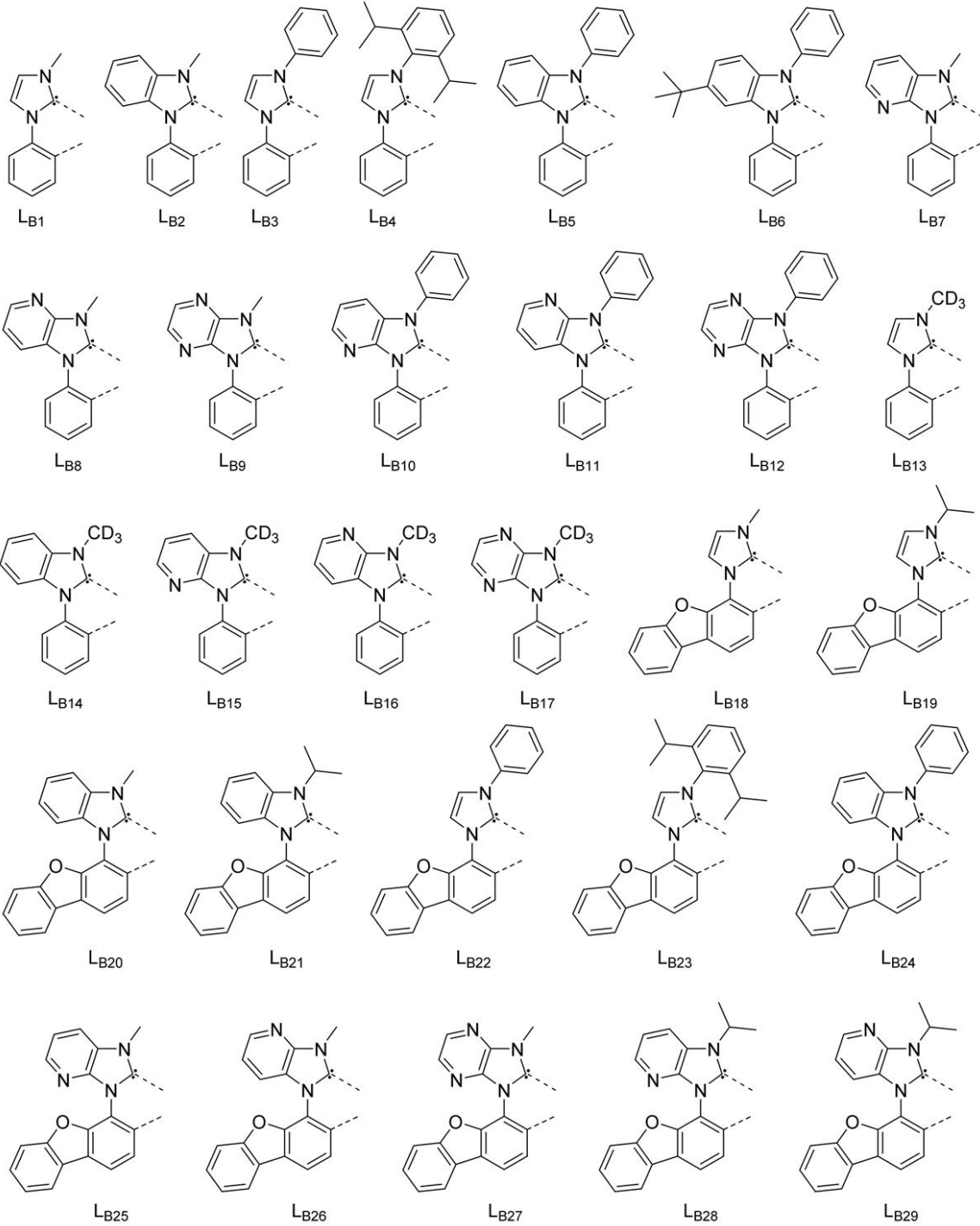
前記発光体が、式 $M(L^1)_2$ 又は $M(L^1)(L^2)$ を有し、

Mが、Ptであり、 L^1 及び L^2 が、それぞれ異なる二座配位子である；又は
Mが、Ir、Rh、Re、Ru、又はOsであり、 L^1 及び L^2 が、それぞれ異なる三
座配位子である請求項10に記載のOLED。

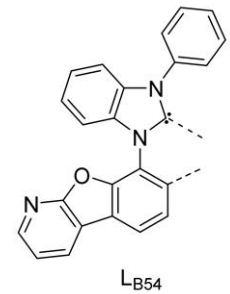
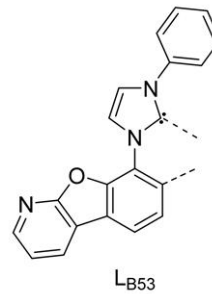
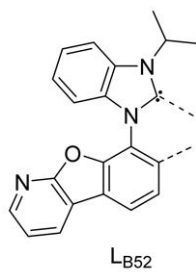
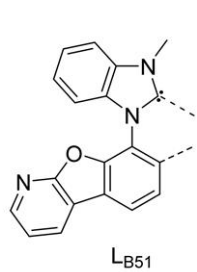
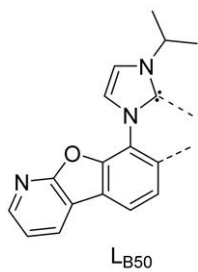
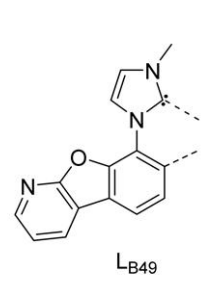
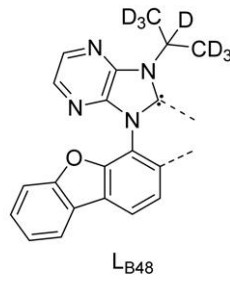
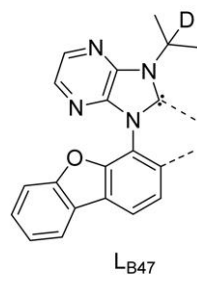
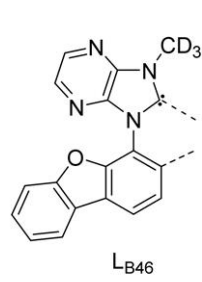
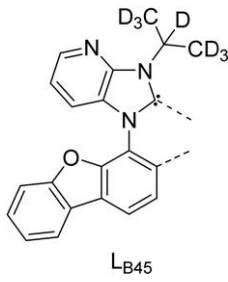
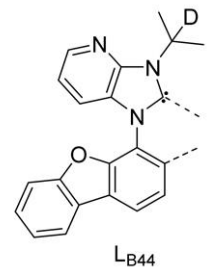
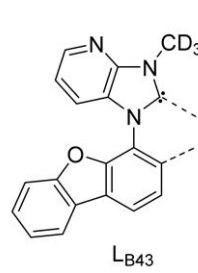
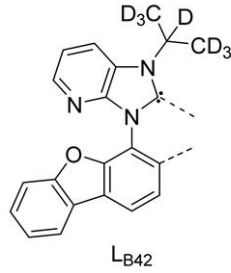
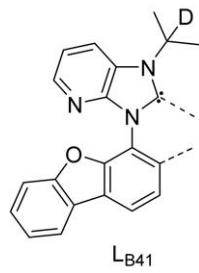
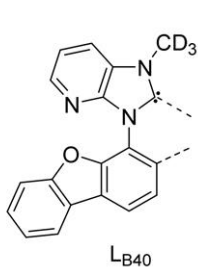
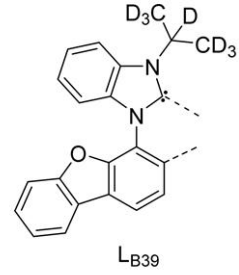
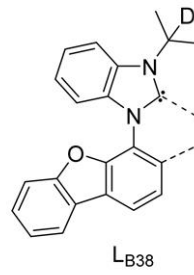
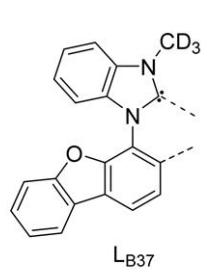
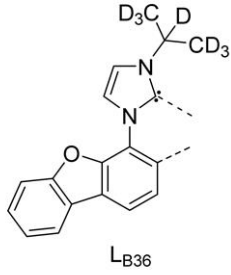
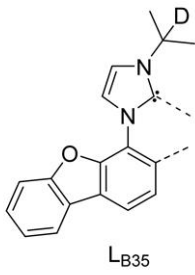
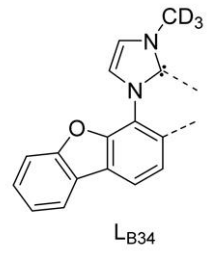
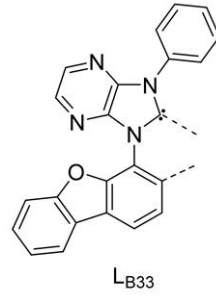
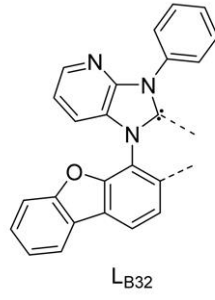
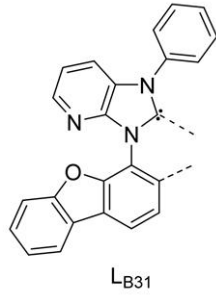
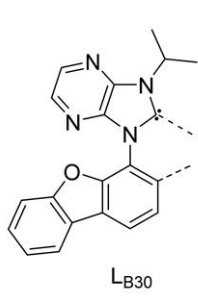
【請求項13】

L^1 が、下記からなる群から選択される請求項10に記載のOLED。

【化3】



【化 4】



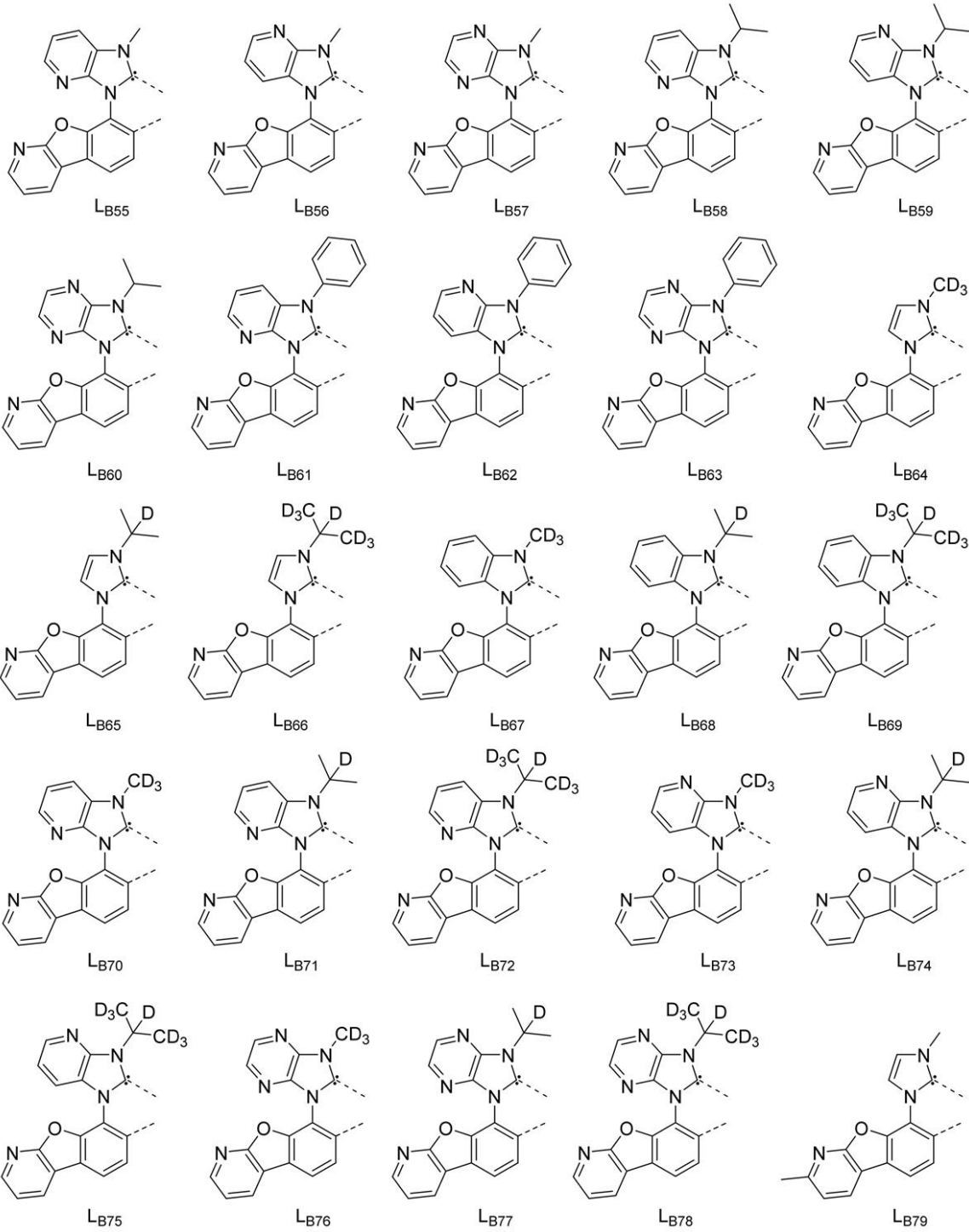
10

20

30

40

【化 5】

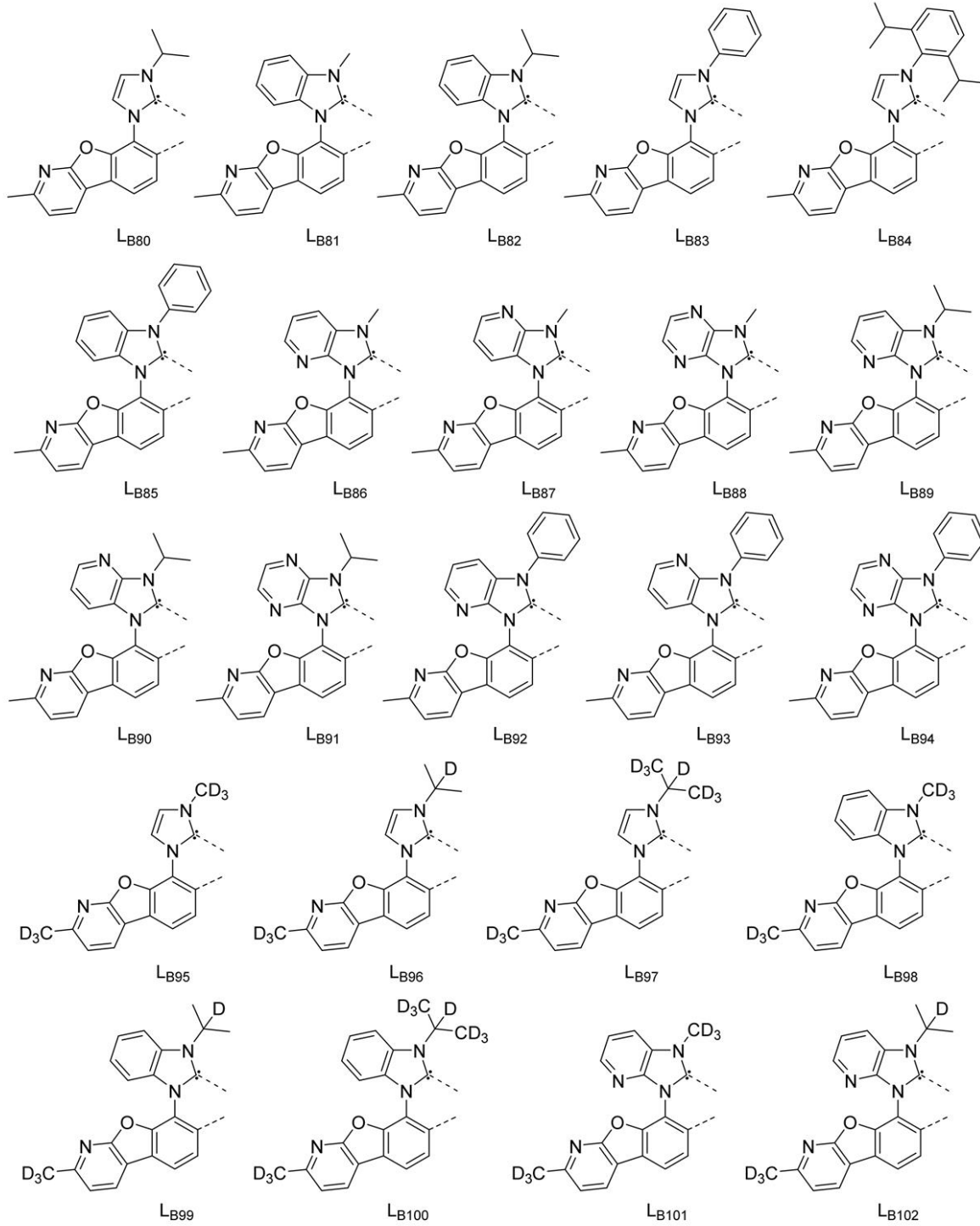


10

20

30

【化 6】

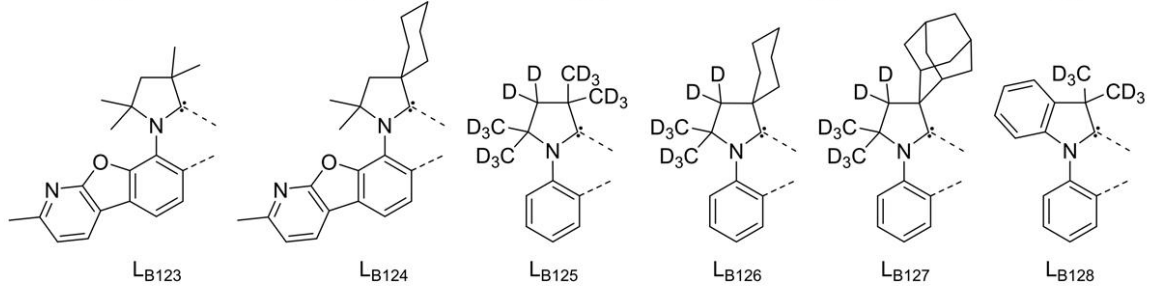
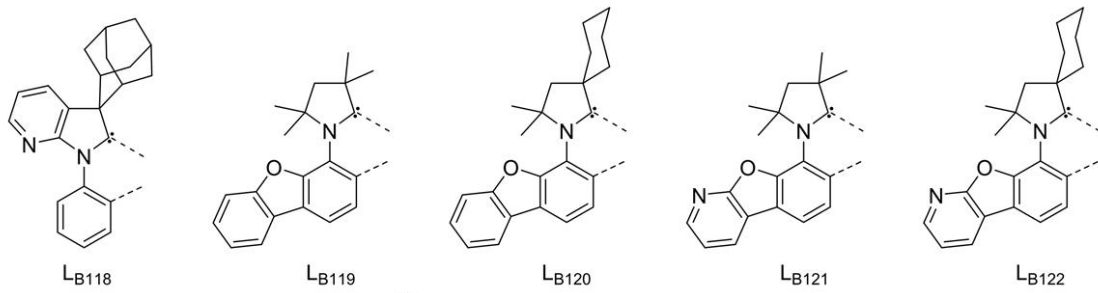
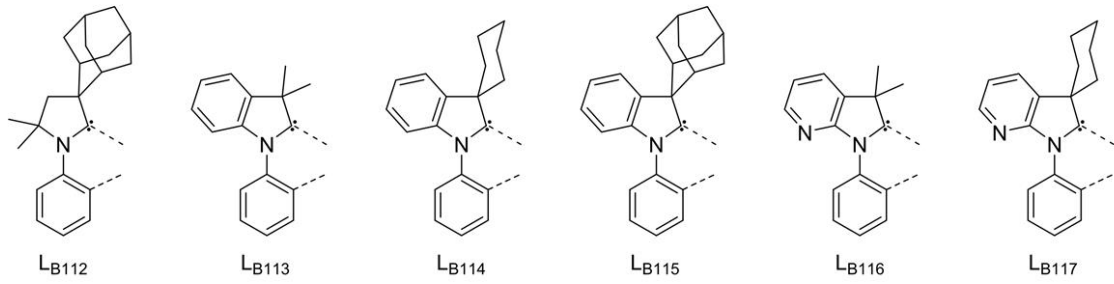
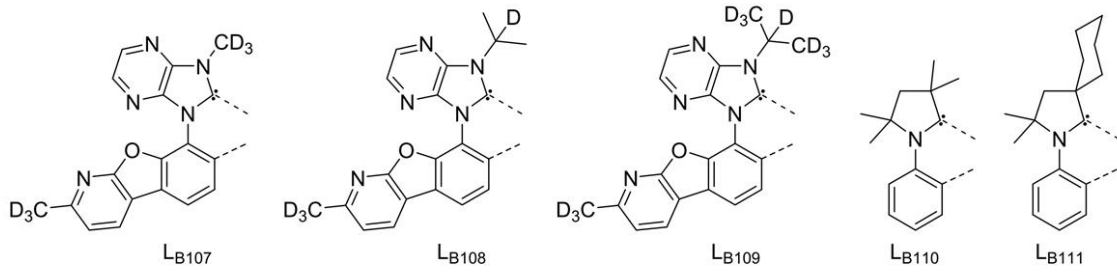
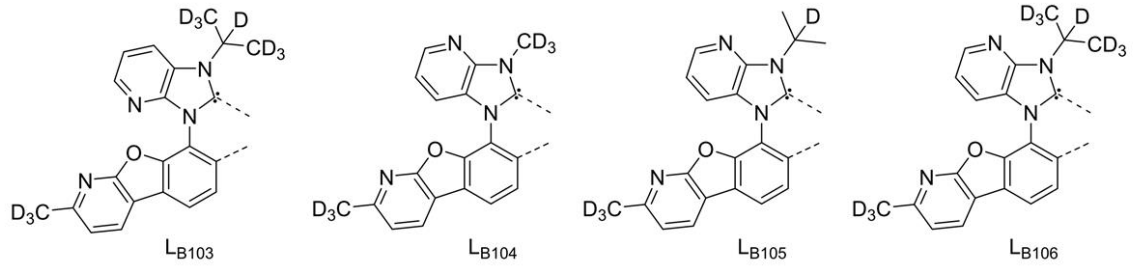


10

20

30

【化 7】



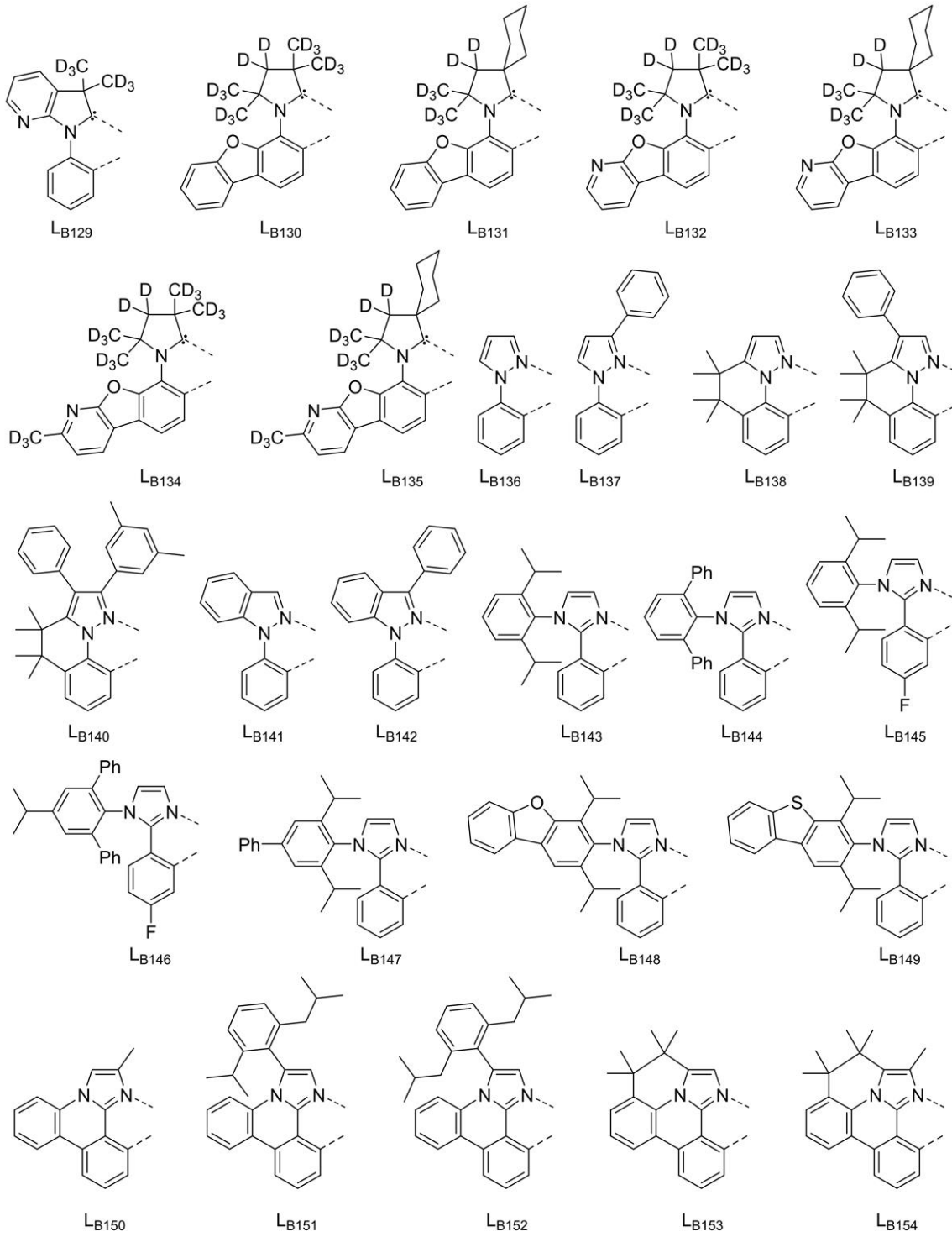
10

20

30

40

【化 8】



10

20

30

40

クロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ポリル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

任意の2つの $R^A \sim R^F$ は、縮合又は結合して環を形成する又は多座配位子を形成してもよい。）

【請求項15】

発光スペクトルを有する有機発光デバイス（OLED）を含む消費者製品であって、前記OLEDが、

アノードと、
カソードと、

前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機発光層とを含み、前記有機発光層が、

最高被占分子軌道（HOMO）エネルギー及び最低空分子軌道（LUMO）エネルギーを有する第1のホスト材料と、

HOMOエネルギー及びLUMOエネルギーを有する発光体材料とを含み、

前記有機発光層における全ての材料が互いに混合されており、

発光体が、リン光金属錯体及び遅延蛍光発光体からなる群から選択され、

高いHOMOエネルギーが、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も高いHOMOエネルギーであり、

低いLUMOエネルギーが、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低いLUMOエネルギーであり、

$a \ E_T - E_b$ であり；式中、 E_T は、前記発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり、 E は、前記高いHOMOエネルギーと前記低いLUMOエネルギーとの間のエネルギーギャップであり、 a は、 $0.00 \sim$ 最大 0.15 eV であり、 b は、 $0.05 \sim$ 最大 0.45 eV であり；

前記OLEDの前記発光スペクトルが、有機発光層が第1の発光体と不活性ホストとからなるOLEDの発光スペクトルと少なくとも95%同一であることを特徴とする消費者製品。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の相互参照

本願は、その開示内容の全体を参照により本明細書に援用する、2018年11月28日出願の米国仮出願第62/772,403号に対する優先権を米国特許法第119条(e)の定めにより主張する、2019年11月14日出願の同時係属中の米国特許出願第16/683,507号の一部継続出願である。

【0002】

本開示は、一般に、有機金属化合物及び組成物、並びに有機発光ダイオード及び関連する電子デバイスなどのデバイスにおける発光体を含むそれらの各種使用に関する。

【背景技術】

【0003】

有機材料を利用する光電子デバイスは、各種理由から、次第に望ましいものとなりつつある。そのようなデバイスを作製するために使用される材料の多くは比較的安価であるため、有機光電子デバイスは無機デバイスを上回るコスト優位性の可能性を有する。加えて、柔軟性等の有機材料の固有の特性により、該材料は、フレキシブル基板上での製作等の

特定用途によく適したものとなり得る。有機光電子デバイスの例は、有機発光ダイオード / デバイス (O L E D)、有機光トランジスタ、有機光電池及び有機光検出器を含む。O L E Dについて、有機材料は従来の材料を上回る性能の利点を有し得る。

【0004】

O L E Dはデバイス全体に電圧が印加されると光を放出する薄い有機膜を利用する。O L E Dは、フラットパネルディスプレイ、照明及びバックライティング等の用途において使用するためのますます興味深い技術となりつつある。

【0005】

リン光性発光分子の1つの用途は、フルカラーディスプレイである。そのようなディスプレイの業界標準は、「飽和 (s a t u r a t e d)」色と称される特定の色を放出するように適合された画素を必要とする。特に、これらの標準は、飽和した赤色、緑色及び青色画素を必要とする。若しくは、O L E Dは、白色光を照射するように設計することができる。従来の、白色バックライトからの液晶ディスプレイ発光は、吸収フィルターを用いてフィルタリングされ、赤色、緑色、及び青色発光を生成する。同様の技術は、O L E Dでも用いられることができる。白色O L E Dは、単一の発光層 (E M L) デバイス又は積層体構造のいずれかであることができる。色は、当技術分野において周知のC I E座標を使用して測定することができる。

10

【発明の概要】

【0006】

アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機発光層とを含む有機発光デバイス (O L E D) が開示され、前記有機発光層は、最高被占分子軌道 (H O M O) エネルギー及び最低空分子軌道 (L U M O) エネルギーを有する第1のホスト材料と、H O M Oエネルギー及びL U M Oエネルギーを有する発光体材料とを含む。発光体は、リン光金属錯体及び遅延蛍光発光体からなる群から選択される。前記有機発光層における発光体とホスト材料は、次の条件を満たす： $a E_T - E_b$ ；式中、 E_T は、前記発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり； E_b は、高いH O M Oエネルギーと低いL U M Oエネルギーとの間のエネルギーギャップであり； a は、 $0.00 \sim$ 最大 0.15 e Vであり、 b は、 $0.05 \sim$ 最大 0.45 e Vであり；前記O L E Dの発光スペクトルは、有機発光層が第1の発光体と不活性ホストとからなるO L E Dの発光スペクトルと少なくとも95% 同一 (l i k e) である。「高いH O M Oエネルギー」は、有機発光層中の全ての材料の中で最も高いH O M Oエネルギーとして定義され、「低いL U M Oエネルギー」は、有機発光層中の全ての材料の中で最も低いL U M Oエネルギーとして定義される。

20

30

【0007】

前記O L E Dを含む消費者製品も開示される。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1】図1は、有機発光デバイスを示す。

【0009】

【図2】図2は、別の電子輸送層を有さない、反転された有機発光デバイスを示す。

40

【0010】

【図3】図3は、ホスト化合物5と3にそれぞれドーブされた発光体1化合物と発光体2化合物の測定したフォトルミネッセンス強度 (P L) のプロットを示し、いずれのスペクトルも1に規格化されており、ピーク波長を468 nmにシフトさせている。

【0011】

【図4】図4は、2種類の膜、即ち、ホスト化合物3に12 vol. %でドーブされた発光体の膜と、及びホスト化合物5に12 vol. %でドーブされた同一発光体の第2の膜との間のP Lスペクトルにおける差の絶対値のプロットを示し、いずれのスペクトルも1に規格化されており、ピーク波長を468 nmにシフトさせている。これら2種類の膜間の差を、発光体1及び発光体2についてプロットしている。

50

【 0 0 1 2 】

【図 5】図 5 は、ホスト化合物 5 に（12 vol. %で）ドーブされた発光体 1 の規格化されシフトされた PL スペクトルと、化合物 5 と化合物 4 の混合物である（化合物 4 が 60 vol. %）ホストに（12 vol. %で）ドーブされた発光体 1 の規格化されシフトされた EL スペクトルのプロットを示す。

【 0 0 1 3 】

【図 6】図 6 は、化合物 5 と、化合物 1、2、3、及び 4 との 4 種類の混合物にドーブされた発光体 1 の規格化されシフトされた EL スペクトルを示す。

【 発明を実施するための形態 】

【 0 0 1 4 】

10

図 1 は、有機発光デバイス 100 を示す。図は必ずしも一定の縮尺ではない。デバイス 100 は、基板 110、アノード 115、正孔注入層 120、正孔輸送層 125、電子ブロッキング層 130、発光層 135、正孔ブロッキング層 140、電子輸送層 145、電子注入層 150、保護層 155、カソード 160、及びバリア層 170 を含み得る。カソード 160 は、第 1 の導電層 162 及び第 2 の導電層 164 を有する複合カソードである。デバイス 100 は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。これらの種々の層の特性及び機能並びに材料例は、参照により組み込まれる US 7, 279, 704、6 ~ 10 段において更に詳細に記述されている。

【 0 0 1 5 】

20

これらの層のそれぞれについて、更なる例が利用可能である。例えば、フレキシブル及び透明基板 - アノードの組合せは、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 5, 844, 363 号において開示されている。p - ドーブされた正孔輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2003 / 0230980 号において開示されている通りの、50 : 1 のモル比で m - M T D A T A に F₄ - T C N Q をドーブしたものである。発光材料及びホスト材料の例は、参照によりその全体が組み込まれる Thompson らの米国特許第 6, 303, 238 号において開示されている。n - ドーブされた電子輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2003 / 0230980 号において開示されている通りの、1 : 1 のモル比で B P h e n に L i をドーブしたものである。参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 5, 703, 436 号及び同第 5, 707, 745 号は、上を覆う透明の、導電性の、スパッタリング蒸着した I T O 層を有する M g : A g 等の金属の薄層を有する複合カソードを含むカソードの例を開示している。ブロッキング層の理論及び使用は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6, 097, 147 号及び米国特許出願公開第 2003 / 0230980 号において更に詳細に記述されている。注入層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2004 / 0174116 号において提供されている。保護層についての記述は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2004 / 0174116 号において見ることができる。

30

【 0 0 1 6 】

40

図 2 は、反転させた OLED 200 を示す。デバイスは、基板 210、カソード 215、発光層 220、正孔輸送層 225、及びアノード 230 を含む。デバイス 200 は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。最も一般的な OLED 構成はアノードの上に配置されたカソードを有し、デバイス 200 はアノード 230 の下に配置されたカソード 215 を有するため、デバイス 200 は「反転させた」OLED と称されることができる。デバイス 100 に関して記述されたものと同様の材料を、デバイス 200 の対応する層において使用してよい。図 2 は、幾つかの層が如何にしてデバイス 100 の構造から省略され得るかの一例を提供するものである。

【 0 0 1 7 】

図 1 及び図 2 において例証されている単純な層構造は、非限定的な例として提供されるものであり、本開示の実施形態は多種多様な他の構造に関連して使用されることが理解される。記述されている特定の材料及び構造は、事実上例示的なものであり、他の材料及

50

び構造を使用してよい。機能的なO L E Dは、記述されている種々の層を様々な手法で組み合わせることによって実現され得るか、又は層は、設計、性能及びコスト要因に基づき、全面的に省略され得る。具体的には記述されていない他の層も含まれ得る。具体的に記述されているもの以外の材料を使用してよい。本明細書において提供されている例の多くは、単一材料を含むものとして種々の層を記述しているが、ホスト及びドーパントの混合物等の材料の組合せ、又はより一般的には混合物を使用してよいことが理解される。また、層は種々の副層を有してもよい。本明細書における種々の層に与えられている名称は、厳しく限定することを意図するものではない。例えば、デバイス200において、正孔輸送層225は正孔を輸送し、正孔を発光層220に注入し、正孔輸送層又は正孔注入層として記述され得る。一実施形態において、O L E Dは、カソード及びアノードの間に配置された「有機層」を有するものとして記述され得る。有機層は単層を含んでいてよく、又は、例えば図1及び図2に関して記述されている異なる有機材料の多層を更に含んでいてよい。

10

20

30

40

50

【0018】

参照によりその全体が組み込まれるFriendらの米国特許第5,247,190号において開示されているもののようなポリマー材料で構成されるO L E D (P L E D) 等、具体的には記述されていない構造及び材料を使用してよい。更なる例として、単一の有機層を有するO L E Dが使用され得る。O L E Dは、例えば、参照によりその全体が組み込まれるForrestらの米国特許第5,707,745号において記述されている通り、積み重ねられてよい。O L E D構造は、図1及び図2において例証されている単純な層構造から逸脱してよい。例えば、基板は、参照によりその全体が組み込まれる、Forrestらの米国特許第6,091,195号において記述されているメサ構造及び/又はBulovicらの米国特許第5,834,893号において記述されているくぼみ構造等、アウトカップリングを改良するための角度のついた反射面を含み得る。

【0019】

別段の規定がない限り、種々の実施形態の層のいずれも、任意の適切な方法によって堆積され得る。有機層について、好ましい方法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,013,982号及び同第6,087,196号において記述されているもの等の熱蒸着、インクジェット、参照によりその全体が組み込まれるForrestらの米国特許第6,337,102号において記述されているもの等の有機気相堆積(O V P D)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許第7,431,968号において記述されているもの等の有機気相ジェットプリンティング(O V J P)による堆積を含む。他の適切な堆積法は、スピニング及び他の溶液ベースのプロセスを含む。溶液ベースのプロセスは、好ましくは、窒素又は不活性雰囲気中で行われる。他の層について、好ましい方法は熱蒸着を含む。好ましいパターンニング法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,294,398号及び同第6,468,819号において記述されているもの等のマスク、冷間圧接を経由する堆積、並びにインクジェット及び有機蒸気ジェット印刷(O V J P)等の堆積法の幾つかに関連するパターンニングを含む。他の方法を使用してよい。堆積する材料は、特定の堆積法と適合するように修正され得る。例えば、分枝鎖状又は非分枝鎖状であり、好ましくは少なくとも3個の炭素を含有するアルキル及びアリール基等の置換基は、溶液プロセスを受ける能力を増強するために、低分子において使用され得る。20個以上の炭素を有する置換基を使用してよく、3~20個の炭素が好ましい範囲である。非対称構造を有する材料は、対称構造を有するものよりも良好な溶液プロセス性を有し得、これは、非対称材料のほうが再結晶する傾向が低くなり得るからである。溶液プロセスを受ける低分子の能力を増強するために、 dendrimers 置換基が使用され得る。

【0020】

特段の断りがない限り、本明細書に使用される下記用語は、以下のように定義される。

【0021】

本明細書において使用される場合、用語「有機」は、有機光電子デバイスを製作するた

めに使用され得るポリマー材料及び低分子有機材料を含む。「低分子」は、ポリマーでない任意の有機材料を指し、且つ「低分子」は実際にはかなり大型であってよい。低分子は、幾つかの状況において繰り返し単位を含み得る。例えば、長鎖アルキル基を置換基として使用することは、「低分子」クラスから分子を排除しない。低分子は、例えばポリマー骨格上のペンダント基として、又は該骨格の一部として、ポリマーに組み込まれてもよい。低分子は、コア部分上に構築された一連の化学的シェルからなる dendrimer のコア部分として役立つこともできる。dendrimer のコア部分は、蛍光性又はリン光性低分子発光体であってよい。dendrimer は「低分子」であってよく、OLED の分野において現在使用されている dendrimer は全て低分子であると考えられている。

【0022】

本明細書において使用される場合、「頂部」は基板から最遠部を意味するのに対し、「底部」は基板の最近部を意味する。第1の層が第2の層「の上に配置されている」と記述される場合、第1の層のほうが基板から遠くに配置されている。第1の層が第2の層「と接触している」ことが指定されているのでない限り、第1の層と第2の層との間に他の層があってもよい。例えば、間に種々の有機層があるとしても、カソードはアノード「の上に配置されている」と記述され得る。

【0023】

本明細書において使用される場合、「溶液プロセス可能な」は、溶液又は懸濁液形態のいずれかの液体媒質に溶解、分散若しくは輸送されることができ、且つ/又は該媒質から堆積されることができるという意味である。

【0024】

配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に直接寄与していると考えられる場合、「光活性」と称され得る。配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に寄与していないと考えられる場合には「補助」と称され得るが、補助配位子は、光活性配位子の特性を変化させることができる。

【0025】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるように、第1の「最高被占分子軌道」(HOMO)又は「最低空分子軌道」(LUMO)エネルギー準位は、第1のエネルギー準位が真空エネルギー準位に近ければ、第2のHOMO又はLUMOエネルギー準位「よりも大きい」又は「よりも高い」。イオン化ポテンシャル(IP)は、真空準位と比べて負のエネルギーとして測定されるため、より高いHOMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有するIP(あまり負でないIP)に相当する。同様に、より高いLUMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有する電子親和力(EA)(あまり負でないEA)に相当する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、材料のLUMOエネルギー準位は、同じ材料のHOMOエネルギー準位よりも高い。「より高い」HOMO又はLUMOエネルギー準位は、「より低い」HOMO又はLUMOエネルギー準位よりもそのような図の頂部に近いように思われる。

【0026】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるように、第1の仕事関数がより高い絶対値を有するならば、第1の仕事関数は第2の仕事関数「よりも大きい」又は「よりも高い」。仕事関数は概して真空準位と比べて負数として測定されるため、これは「より高い」仕事関数が更に負であることを意味する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、「より高い」仕事関数は、真空準位から下向きの方に遠く離れているものとして例証される。故に、HOMO及びLUMOエネルギー準位の定義は、仕事関数とは異なる慣例に準ずる。

【0027】

「ハロ」、「ハロゲン」、及び「ハライド」という用語は、相互交換可能に使用され、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素を指す。

【0028】

「アシル」という用語は、置換されたカルボニル基($C(O)-R_s$)を指す。

10

20

30

40

50

【0029】

「エステル」という用語は、置換されたオキシカルボニル ($-O-C(O)-R_s$ 又は $-C(O)-O-R_s$) 基を指す。

【0030】

「エーテル」という用語は、 $-OR_s$ 基を指す。

【0031】

「スルファニル」又は「チオエーテル」という用語は、相互交換可能に使用され、 $-SR_s$ 基を指す。

【0032】

「スルフィニル」という用語は、 $-S(O)-R_s$ 基を指す。

10

【0033】

「スルホニル」という用語は、 $-SO_2-R_s$ 基を指す。

【0034】

「ホスフィノ」という用語は、 $-P(R_s)_3$ 基を指し、各 R_s は、同一であっても異なってもよい。

【0035】

「シリル」という用語は、 $-Si(R_s)_3$ 基を指し、各 R_s は、同一であっても異なってもよい。

【0036】

「ボリル」という用語は、 $-B(R_s)_2$ 基、又はそのルイス (Lewis) 付加物 $-B(R_s)_3$ 基を指し、 R_s は同一であっても異なってもよい。

20

【0037】

上記のそれぞれにおいて、 R_s は、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であることができる。好ましい R_s は、アルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【0038】

「アルキル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルキル基の両方を指し、含む。好ましいアルキル基としては、1個から15個までの炭素原子を含むものであり、メチル、エチル、プロピル、1-メチルエチル、ブチル、1-メチルプロピル、2-メチルプロピル、ペンチル、1-メチルブチル、2-メチルブチル、3-メチルブチル、1,1-ジメチルプロピル、1,2-ジメチルプロピル、及び2,2-ジメチルプロピル等が挙げられる。更に、前記アルキル基は、任意に置換されていてもよい。

30

【0039】

「シクロアルキル」という用語は、単環式、多環式、及びスピロアルキル基を指し、含む。好ましいシクロアルキル基は、3~12個の環炭素原子を含むものであり、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、ビスシクロ[3.1.1]ヘプチル、スピロ[4.5]デシル、スピロ[5.5]ウンデシル、アダマンチルなどが挙げられる。更に、前記シクロアルキル基は、任意に置換されていてもよい。

40

【0040】

「ヘテロアルキル」又は「ヘテロシクロアルキル」という用語は、それぞれ、ヘテロ原子によって置換された少なくとも1つの炭素原子を有するアルキル基又はシクロアルキル基を指す。任意に、少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。更に、前記ヘテロアルキル基又は前記ヘテロシクロアルキル基は、任意に置換されていてもよい。

【0041】

「アルケニル」という用語は、直鎖及び分岐鎖のアルケン基の両方を指し、含む。アルケニル基は、本質的に、アルキル鎖中に少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を含むアル

50

キル基である。シクロアルケニル基は、本質的に、シクロアルキル環中に少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を含むシクロアルキル基である。本明細書で使用される「ヘテロアルケニル」という用語は、ヘテロ原子によって置換された少なくとも1つの炭素原子を有するアルケニル基を指す。任意に、少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。好ましいアルケニル、シクロアルケニル、又はヘテロアルケニル基は、2~15個の炭素原子を含むものである。更に、前記アルケニル、前記シクロアルケニル、又は前記ヘテロアルケニル基は、任意に置換されていてもよい。

【0042】

「アルキニル」という用語は、直鎖及び分枝鎖アルキン基の両方を指し、含む。アルキニル基は、本質的に、アルキル鎖に少なくとも1つの炭素-炭素三重結合を含むアルキル基である。好ましいアルキニル基は、2~15個の炭素原子を含むものである。更に、前記アルキニル基は、任意に置換されていてもよい。

10

【0043】

「アラルキル」又は「アリールアルキル」という用語は、相互交換可能に使用され、アリール基で置換されたアルキル基を指す。更に、前記アラルキル基は、任意に置換されていてもよい。

【0044】

「複素環式基(ヘテロ環基; heterocyclic group)」という用語は、少なくとも1つのヘテロ原子を含む芳香族及び非芳香族の環式基を指し、含む。任意に、前記少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。ヘテロ芳香族環式基は、ヘテロアリールと相互交換可能に使用され得る。好ましいヘテロ非芳香族環式基は、3~7個の環原子を含むものであって、少なくとも1つのヘテロ原子を含み、モルホリノ、ピペリジノ、ピロリジノなどの環式アミン、及び例えばテトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオフェンなどの環式エーテル/チオエーテルを含む。更に、前記複素環式基は、任意に置換されていてもよい。

20

【0045】

「アリール」という用語は、単環式芳香族ヒドロカルビル基及び多環式芳香族環系の両方を指し、含む。多環とは、2つの隣接する環(前記環は、「縮合」している)に2つの炭素が共有されている2つ以上の環を有することができ、前記環の少なくとも1つは、芳香族ヒドロカルビル基であり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及び/又はヘテロアリールであることができる。好ましいアリール基は、6~30個の炭素原子を含むものであり、6~20個の炭素原子を含むものが好ましく、6~12個の炭素原子を含むものが更に好ましい。6個の炭素を有するアリール基、10個の炭素を有するアリール基、又は12個の炭素を有するアリール基が特に好ましい。好適なアリール基としては、フェニル、ピフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、テトラフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナンスレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、及びアズレン等が挙げられ、フェニル、ピフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、フルオレン、及びナフタレンが好ましい。更に、前記アリール基は、任意に置換されていてもよい。

30

40

【0046】

「ヘテロアリール」という用語は、少なくとも1つのヘテロ原子を含む単環式芳香族基及び多環式芳香族環系の両方を指し、含む。ヘテロ原子としては、O、S、N、P、B、Si、及びSeが挙げられるが、これらに限定されない。多くの例においては、O、S、又はNが好ましいヘテロ原子である。ヘテロ単環式芳香族系は、好ましくは5個又は6個の環原子を有する単環であり、前記環は1~6個のヘテロ原子を有することができる。ヘテロ多環式環系は、2つの原子が2つの隣接する環(前記環は「縮合している」)に共通している2つ以上の環を有することができ、前記環の少なくとも1つはヘテロアリールであり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及

50

びノ又はヘテロアリアルであることができる。複素多環式芳香族環系は、多環式芳香族環系の環当たり1～6個のヘテロ原子を有することができる。好ましいヘテロアリアル基は、3～30個の炭素原子を含むものであり、3～20個の炭素原子を含むものが好ましく、3～12個の炭素原子を含むものがより好ましい。好適なヘテロアリアル基としては、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフエン、ベンゾフラン、ベンゾチオフエン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサントエン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン、及びセレノフェノジピリジンが挙げられ、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、イミダゾール、ピリジン、トリアジン、ベンズイミダゾール、1,2-アザボリン、1,3-アザボリン、1,4-アザボリン、ボラジン、及びこれらのアザ類似体が好ましい。更に、前記ヘテロアリアル基は、任意に置換されていてもよい。

10

20

【0047】

上記にリストされる前記アリアル及び前記ヘテロアリアル基のうち、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、イミダゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、及びベンズイミダゾールの基、並びにそのそれぞれのアザ類似体が、特に興味深い。

【0048】

本明細書において使用される用語であるアルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アラルキル、複素環基、アリアル、及びヘテロアリアルは、独立して非置換である、又は独立して1つ以上の一般的な置換基で置換される。

30

【0049】

多くの例において、前記一般的な置換基は、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリアルアルキル、アルコキシ、アリアルオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリアル、ヘテロアリアル、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【0050】

幾つかの例において、好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシ、アリアルオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アリアル、ヘテロアリアル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

40

【0051】

幾つかの例においては、より好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリアルオキシ、アミノ、シリル、ボリル、アリアル、ヘテロアリアル、スルファニル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【0052】

更に他の例においては、最も好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、アリアル、ヘテロアリアル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

50

【0053】

「置換された」及び「置換」という用語は、関連する位置（例えば炭素又は窒素）に結合されているH以外の置換基を指す。例えば、 R^1 がモノ置換を表す場合、1つの R^1 はH以外でなければならない（即ち、置換）。同様に、 R^1 がジ置換を表す場合、 R^1 の2つはH以外でなければならない。同様に、 R^1 がゼロ又は無置換を表す場合、 R^1 は、例えば、ベンゼンにおける炭素原子及びピロール中の窒素原子の場合のように、環原子の利用可能な原子価における水素であることができる、又は完全に満たされた原子価を有する環原子（例えば、ピリジン中の窒素）の場合には単に何も表さない。環構造において可能な置換の最大数は、環原子における利用可能な原子価の総数に依存する。

【0054】

本明細書中で使用される場合、「これらの組合せ」は、適用されるリストから当業者が想到することができる、知られた又は化学的に安定な配置を形成するために、適用されるリストの1つ以上のメンバーが組み合わされることを示す。例えば、アルキル及び重水素は、組み合わされて、部分的又は完全に重水素化されたアルキル基を形成することができる；ハロゲン及びアルキルは、組み合わされて、ハロゲン化アルキル置換基を形成することができる；ハロゲン、アルキル、及びアリアルは、組み合わされて、ハロゲン化アリアルアルキルを形成することができる。1つの例においては、置換という用語は、リストされた基の2～4個の組合せを含む。別の例においては、置換という用語は、2～3個の基の組合せを含む。更に別の例では、置換という用語は、2個の基の組合せを含む。置換基の好ましい組合せは、水素又は重水素でない50個までの原子を含むもの、又は水素又は重水素ではない40個までの原子を含むもの、又は水素若しくは重水素ではない30個までの原子を含むものである。多くの例においては、置換基の好ましい組合せは、水素又は重水素ではない20個までの原子を含む。

【0055】

本明細書において記述されるフラグメント、例えば、アザ-ジベンゾフラン、アザ-ジベンゾチオフェン等の中の「アザ」という名称は、各芳香族環中のC-H基の1つ以上が窒素原子に置き換わることができることを意味し、例えば、何ら限定するものではないが、アザトリフェニレンは、ジベンゾ[f, h]キノキサリンとジベンゾ[f, h]キノリンのいずれをも包含する。当業者であれば、上述のアザ誘導体の他の窒素類似体を容易に想像することができ、このような類似体全てが本明細書に記載の前記用語によって包含されることが意図される。

【0056】

本明細書で使用される場合、「重水素」は、水素の同位体を指す。重水素化合物は、当該分野で公知の方法を用いて容易に調製されることができる。例えば、それらの内容の全体を参照によって援用する、米国特許第8,557,400号明細書、国際公開第WO 2006/095951号、及び米国特許出願公開第2011/0037057号には、重水素で置換された有機金属錯体の作製が記載されている。更なる参照は、それらの内容の全体を参照によって組み込まれる、Tetrahedron 2015, 71, 1425～30 (Ming Yanら)及びAngew. Chem. Int. Ed. (Reviews) 2007, 46, 7744～65 (Atzrodtrら)によって為され、ベンジルアミン中のメチレン水素の重水素化及び芳香族環水素を重水素で置換する効率的な経路が、それぞれ記載されている。

【0057】

分子フラグメントが置換基であるとして記述される、又は他の部分に結合されているものとして記述される場合、その名称は、フラグメント（例えば、フェニル、フェニレン、ナフチル、ジベンゾフリル）又は分子全体（例えば、ベンゼン、ナフタレン、ジベンゾフラン）であるように記載されることがあることを理解されたい。本明細書においては、置換基又は結合フラグメントの表示の仕方が異なっても、これらは、等価であると考えられる。

【0058】

10

20

30

40

50

ある例においては、対の隣接する置換基は、任意に結合又は縮合し、環を形成することができる。好ましい環は、5員環、6員環、又は7員環の炭素環又は複素環であり、対の置換基によって形成される環の部分が飽和されている例及び対の置換基によって形成される環の部分が不飽和である例の両方を含む。本明細書中で使用される「隣接する」は、安定した縮合環系を形成することができる限り、関連する2つの置換基が、互いに隣り合って同じ環上にあることができる、又はビフェニルにおける2位と2'位、及びナフタレンにおける1位と8位など、2つの最も近い利用可能な置換可能位置を有する2つの隣どうしの環上にあることができることを意味する。

【0059】

本開示のOLED

エキサイプレックス発光スペクトルは、ブロードなことが知られている。しかし、多くのOLED用途では、OLEDデバイスが、狭い発光スペクトルを有することが望ましい。例えば、青色マイクロキャピティのために最も高い効率を有する非常に飽和度の高い色にするためには、OLEDは、狭いスペクトルの発光体を必要とする。更に、OLEDデバイスの安定化（即ち、より長い寿命）は、より低いLUMO準位の材料をデバイスに用いることによって、達成することができる。したがって、OLED中でのエキサイプレックスの生成は、通常、避けるべきものである。しかし、多くの場合、エキサイプレックスは、OLED発光層中の最も浅い（即ち、最も高い）HOMO準位の材料と、最も深い（即ち、最も低い）LUMO準位の材料との間で生成され得る。そして、OLEDデバイスの全体的な発光は、エキサイプレックスからの発光によって品位の低下につながり得る。発光が、エキサイプレックスの発光と発光体の発光との混合である場合もあれば、発光が、全てエキサイプレックスによるものである場合もある。

【0060】

発光体の発光スペクトルよりも赤色側の発光スペクトルを有するエキサイプレックスを含むものの、エキサイプレックスからの発光が抑制され、発光体の発光が依然として全体的なOLED発光スペクトルの主となるOLED構成が開示される。これは、多くの種々の手段で達成される。1つの実施形態は、HOMO及びLUMO準位によって決定されるエキサイプレックスのエネルギーが発光体の三重項エネルギー T_1 のエネルギーよりも低くても、ホスト材料と発光体との間のエキサイプレックスの生成がOLEDの発光スペクトルの一部とならないように発光体を設計することである。

【0061】

本開示の前には、エキサイプレックスがOLED中の最も低いエネルギー状態である場合でも、OLEDの発光に対するエキサイプレックスの影響を抑制できることは知られていなかった。

【0062】

エキサイプレックスの生成が生じる場合と生じない場合との間の差を数学的に決定するのを助けるために、本発明者らは、二乗平均平方根（RMSD）関数、即ち、下記に示す式（1）を用いる。この関数は、全波長での2つのスペクトル間の差の平均である1つの値を与える。

【数1】

$$RMSD = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_1^n (I_1(\lambda) - I_2(\lambda))^2} \quad (1)$$

【0063】

式（1）中、 n は、点の総数であり、 I_1 及び I_2 は、波長の関数としての規格化された強度スペクトル（エレクトロルミネッセンス（EL）又はフォトルミネッセンス（PL））である。重要なこととして、比較されるスペクトルが同一ピーク波長にシフトされ、規格化され、これにより、材料を、誘電率が異なる材料に入れることに起因し得るスペクトル差の一部が排除される。関数 I_1 及び I_2 は、一定数の波長に対して既存データを内挿することによって達成できる点の数が完全に同一である必要があり、且つ、ここでも

10

20

30

40

50

内挿によって達成可能な同一の波長範囲をカバーする必要がある。この関数の汎用性を実証するために、本発明者らは、まず、ホスト化合物 5 及び 3 に 12 体積%でドーブした発光体 1 及び発光体 2 の、測定したフォトルミネッセンス強度 (PL) をプロットし、いずれのスペクトルも 1 の値に規格化されており、ピーク波長を 468 nm にシフトさせている。このプロットを図 3 に示す。化合物 5 のエネルギー準位に基づくと、各発光体とのエキサイプレックス生成の可能性はゼロである。化合物 5 における各発光体の PL スペクトルは、いずれか一方が、分子のエネルギー論によりエキサイプレックス生成が予測される場合に例えることができることを表す。発光体 1 及び 2 を化合物 3 にドーブした場合、材料のエネルギー準位から、何が起こるか予測できる。化合物 3 における両発光体の場合、発光体 1 が最も高い HOMO を有し、化合物 3 が最も低い LUMO を有する。次いで、本発明者らは、化合物 3 にドーブされたこれらの発光体について、 $E_{\text{発光体 1}} = | - 5.33 - 2.78 | = 2.55 \text{ eV}$ と $E_{\text{発光体 2}} = | - 5.35 - 2.78 | = 2.57 \text{ eV}$ の各場合における、最も高いエネルギー HOMO と最も低いエネルギー LUMO に基づいて生じるエキサイプレックスのエネルギー差 (E) を計算することができる。発光体 1 及び発光体 2 のいずれの場合も、 E は、三重項エネルギー E_T の 2.73 及び 2.81 eV よりもそれぞれ小さく、このことは、エキサイプレックスが、発光体と化合物 3 との間で生成することを示す。実際に、図 3 から分かるように化合物 3 中の発光体 2 の場合、更にブロードで赤色シフトした発光が観測された。本発明者らは、化合物 3 中の発光体 2 の PL スペクトルの歪みは、2 つの材料間でのエキサイプレックス生成を示唆すると考える。反対に、発光体 2 のスペクトルは、フォトルミネッセンス発光体の三重項エネルギーが、 $E_T - E_{\text{発光体 2}} > 0$ として数学的に表現できるエキサイプレックスのエネルギー E よりも大きいという、エキサイプレックス生成のエネルギー基準を満たす場合であっても、化合物 5 にドーブされたときに殆ど変化がない。

10

20

【0064】

2 種類の膜間の PL スペクトルの差を表し、エキサイプレックス生成を決定するための定量的方法を提供する 1 つの数字を計算する手段として、本発明者らは、ホスト化合物 3 及び 5 における発光体 1 及び発光体 2 それぞれの PL スペクトルの差を、波長の関数としてプロットする。各発光体について、化合物 3 及び化合物 5 における発光体の規格化されたシフトされたスペクトル間の差の絶対値を、図 4 にプロットする。

30

【0065】

図 4 のプロットから、発光体 1 と発光体 2 は、ホスト化合物 3 及び 5 にドーブしたときに挙動が異なることが示される。発光体 1 は、2 種類のホスト化合物にドーブしたときに差を殆ど示さなかった。しかし、多くの波長で、発光体 2 は、化合物 5 を化合物 3 と比較したときに PL スペクトルの顕著な差を示した。重要なこととしては、最大の差の値が、 $\sim 500 \text{ nm} \sim > 650 \text{ nm}$ の波長範囲で生じたことであり、これは、化合物 5 における PL と比較して変化した化合物 3 中の発光体 2 の PL スペクトル (図 3) と同一領域である。両発光体における $\sim 430 \text{ nm}$ から $\sim 480 \text{ nm}$ のシャープな形状は、最大値の周りの PL 強度の形状が僅かに異なり大きな差をもたらしているという事実に起因する。この差は、各材料が、急傾斜領域の周りの測定した PL スペクトルにおける微差をもたらす誘電率を有することを理由とすると予想される、又はデータの元々のサンプリングに差があり、それが高傾斜領域の周りに内挿したことにより生じ得る。

40

【0066】

図 4 に示されるプロットに基づき、本発明者らは、各スペクトルの RMSD 値を計算することができる。本発明者らは、発光体 1 の RMSD (12 体積%でホスト化合物 3 及び 5 にドーブされた発光体 1 の PL スペクトルを比較することによる) は、0.021 であり、一方、発光体 2 の RMSD (12 体積%でホスト化合物 3 及び 5 にドーブされた発光体 2 の PL スペクトルを比較することによる) は、0.198 であることを見出した。RMSD 関数は、(図 3 に示される実験的に観測されるエキサイプレックス生成に基づく) エキサイプレックスを生成するホストと発光体の組合せの場合、約 $10 \times$ であり、これは、材料の組合せがエキサイプレックスを生成するかどうかを判定し、定量的な数を生成す

50

る上でのRMSD使用の有効性を示している。

【0067】

次に、種々のスペクトルを比較したときに生じるRMSDのベースラインレベルを決定した。まず、種々のタイプのスペクトル測定のRMSD値を計算した。図5は、ホスト化合物5にドーブされた発光体1(12vol.%)の規格化されシフトされたPLスペクトルと、化合物5と化合物4の混合物であるホストにドーブされた発光体1(化合物4が60vol.%及び12vol.%の発光体1)の規格化されシフトされたELスペクトルのプロットを示す。RMSDは、0.012と非常に低い。発光層(EML)組成物が、40vol.%の化合物3及び10又は15vol.%の発光体1でドーブされた化合物5であるELのRMSDも計算した。RMSDは、0.0073であった。EML組成物が、20vol.%の化合物3及び15vol.%の発光体1でドーブした化合物5から60vol.%の化合物3及び15vol.%の発光体1でドーブした化合物5であるELのRMSDも計算した。RMSDは、0.0147であった。スペクトルを生成する、発光体ドーピングのパーセンテージを変更する、及びEML中のホストの比を変更するという各種方法から生成される、スペクトル(EL対PL)を比較するためのRMSDが、いずれも低い値であることを考慮すると、RMSDが、スペクトルを比較するための堅固な(robust)方法であることが示される。本発明者らは、更に、予想されるエキサイプレックスが存在しない多くの種々のスペクトルについて調べ、0.05を超えるRMSDの差に意味があり、エキサイプレックス生成が顕著と考えられ得る良好な値であることを見出した。

10

20

【0068】

純粋に数学的な表現の言葉による記述への変換が有用である場合がある。RMSDは、類似の記述に言い換えることができる。例えば、比較される2つのスペクトルが同一である場合、RMSDは0である。そのような2つのスペクトルは、完全に同一又は100%同一である。したがって、次の関係： $(1 - RMSD) * 100$ を用いてパーセンテージとして、2つのスペクトル間の同一性を定義及び定量することができる。したがって、本文脈においては、95%同一である全てのスペクトルを、0.05未満のRMSDの値が有意な差ではないという事実により同一であるとみなす。

【0069】

以下の表1は、化合物1~5及び発光体1及び2のHOMO、LUMO、三重項エネルギー T_1 、及び予測されるエキシマーエネルギー準位を示す。発光体1及び2のいずれの場合も、化合物1、2、及び3は、エネルギー準位に基づいてエキサイプレックスを生成する一方、化合物4及び5は生成しない。HOMOエネルギーは、サイクリックボルタンメトリーから導出される第1の酸化ポテンシャルから推定される。LUMOエネルギーは、サイクリックボルタンメトリーから導出される第1の還元ポテンシャルから推定される。発光体化合物の三重項エネルギー T_1 は、77Kにおけるフォトルミネッセンスからのピーク波長を用いて測定される。発光体-ホストの組合せを選ぶときに、 $a E_T - E_b$ の条件が満たされれば、エキサイプレックスが生成する。 $a E_T - E_b$ において、 E_T は、前記発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり、 E_b は、前記有機発光層中で最も高いHOMOエネルギーを有する材料のHOMOエネルギーと、前記有機発光層中で最も低いLUMOエネルギーを有する材料のLUMOエネルギーとの間のエネルギーギャップであり、 a は、0.00~最大0.15eVの値を有し、 b は、0.05~最大0.45eVの値を有する。しかし、前記条件は、適切な発光体を設計することによって満たされ、前記OLEDは、有機発光層が第1の発光体と不活性ホストとからなるOLEDの発光スペクトルと少なくとも95%同一である発光スペクトルを有する。

30

40

【0070】

化合物5と、化合物1、2、3、及び4との4種類の混合物にドーブされた発光体1のELスペクトルを図6に示す。各ホスト化合物1~4について、次の式にしたがって調製した混合物：40vol.%の化合物1と12vol.%の発光体1でドーブした化合物

50

5 ; 40 vol. % の化合物 2 と 12 vol. % の発光体 1 でドーブした化合物 5 ; 40 vol. % の化合物 3 と 12 vol. % の発光体 1 でドーブした化合物 5 ; 40 vol. % の化合物 4 と 12 vol. % の発光体 1 でドーブした化合物 5。本発明者らは、化合物 5 と 1、2、又は 3 の混合物を、エキサイプレックス生成がエネルギー的に予測されない化合物 4 でドーブした化合物 5 と比較する RMSD が、それぞれ 0.0201、0.0306、及び 0.0239 であることを見出した。分かり易く言えば、ホストを化合物 4 から化合物 1、2、又は 3 に変更すること以外は同一組成の EML は、いずれも互いに対して 3% 以下で同一であり、したがって、有効に同一である。そのため、発光体の HOMO 準位とホストの LUMO 準位のエネルギー論からエキシマー生成が存在するであろうと予測されたとしても、発光体 1 とこれらのホストの間にはエキシマー生成がない。この結果は、全く予想外のものである。何ら理論に拘束されるものではないが、この予想外の結果は、発光体に由来する立体効果の可能性がある。励起子のエネルギーは、空間的コンポーネントを有し、波動関数のホール及び電子の各部分の間の距離が上昇するにつれて、上昇する。発光体の立体的コンポーネントが、発光体と E 型ホストとの間でエキサイプレックスが生成される距離を上昇させる場合、それは、より高いエキサイプレックスエネルギーにつながり、エキサイプレックスのエネルギーを、発光体の三重項エネルギー T_1 よりも大きくなるように押し上げる。したがって、より大きな立体的保護を有する発光体分子は、より低い LUMO 準位を有する E 型ホストの使用を可能とし、これが、デバイス全体の安定化につながる。デバイスに用いることができるエネルギー準位の範囲を広げることの利点は、特に、青色発光体にとって有益である。したがって、本明細書に開示される OLED 構成は、安定な OLED、特に安定な青色リン光 OLED を達成するために、発光体分子を設計し、適切なホスト系、特に e-ホストを選択するためのロードマップを提供する。

10

20

【0071】

【表1】

表1：エネルギー準位、及び発光体とホスト化合物のエネルギー準位に基づくエキシマー生成の予測

材料	三重項 エネルギー- T_1 [eV]	HOMO [eV]	LUMO [eV]	$\Delta E_{\text{発光体1}};$ $E_{T_{\text{発光体1}}} - \Delta E_{\text{発光体1}}$ (可能な エキサイプレックス);(現実)	$\Delta E_{\text{発光体2}};$ $E_{T_{\text{発光体2}}} - \Delta E_{\text{発光体2}}$ (可能な エキサイプレックス);(現実)
ホスト 化合物 1	3.00	-5.76	-2.65	2.68; 0.05 (有);(無)	2.70; 0.11 (有);(有)
ホスト 化合物 2	2.97	-5.74	-2.75	2.58; 0.15 (有);(無)	2.60; 0.21 (有);(有)
ホスト 化合物 3	2.98	<-5.8	-2.78	2.55; 0.18 (有);(無)	2.57; 0.24 (有);(有)
ホスト 化合物 4	2.95	-5.7	-2.46	2.87; -0.14 (無);(無)	2.89; -0.08 (無);(無)
ホスト 化合物 5	2.99	-5.46	-1.96	3.26; -0.53 (無);(無)	3.18; -0.37 (無);(無)
発光体 1	2.73	-5.33	-2.07	---	---
発光体 2	2.81	-5.35	-2.17	---	---

30

40

50

表 1 において、各 EML 混合物の E を、まず、混合物中のどの化合物が高い HOMO エネルギー（EML 混合物中の全ての材料の中で最も高い HOMO エネルギー）を有するかと、混合物中のどの化合物が低い LUMO エネルギー（EML 混合物中の全ての材料の中で最も低い LUMO エネルギー）を有するかを決定することによって計算する。次に、

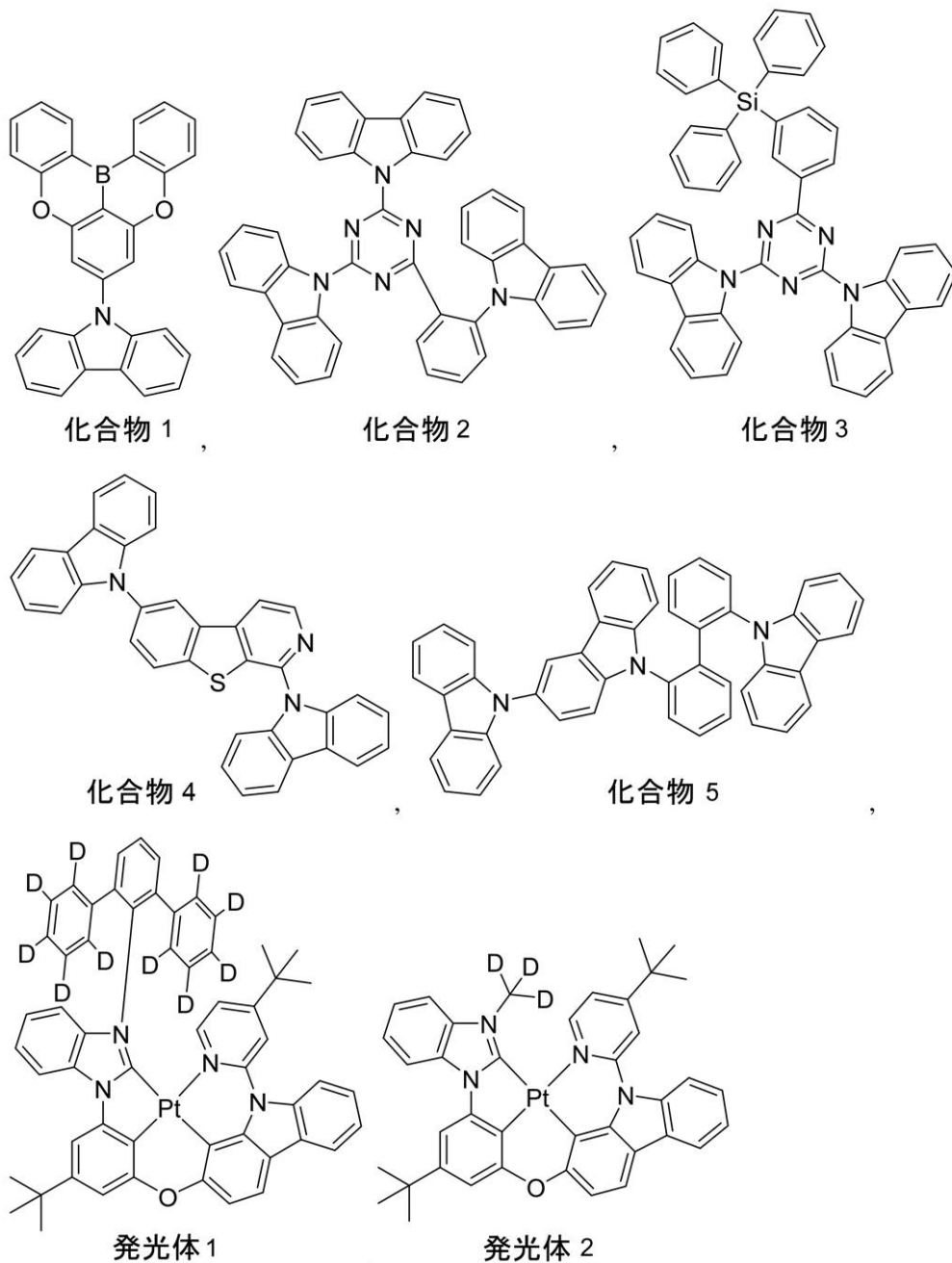
E は、高い HOMO エネルギーと低い LUMO エネルギーとの間のエネルギーギャップである。続いて、 $E_T - E$ と、次の条件 $a \leq E_T - E \leq b$ （式中、 E_T は、前記第 1 の発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり； a は、 $0.00 \sim$ 最大 0.15 eV であり、 b は、 $0.05 \sim$ 最大 0.45 eV である）が満たされるかどうかを決定する。

【0072】

10

表 1 に示されるデータで言及される化合物を以下に示す。

【化 1】



20

30

40

【0073】

溶液サイクリックボルタンメトリー及び微分パルスボルタンメトリーを、無水ジメチルホルムアミド溶媒と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を支持電解質

50

として用いるCHインスツルメンツモデル6201Bポテンシオスタットを用いて行った。ガラス状炭素、並びに白金及び銀ワイヤを、作動電極、対向電極、及び参照電極としてそれぞれ用いた。電子化学電位は、微分パルスボルタンメトリーからピーク電位差を測定することにより、内部フェロセン-フェロセニウムレドックス対(Fc^+/Fc)を参照とした。 $E_{HOMO} = -[(E_{ox1} \text{ 対 } Fc^+/Fc) + 4.8]$ 、 $E_{LUMO} = -[(E_{red1} \text{ 対 } Fc^+/Fc) + 4.8]$ であり、式中、 E_{ox1} は、第1の酸化電位であり、 E_{red1} は、第1の還元電位である。

【0074】

アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機発光層を含む有機発光デバイス(OLED)が、本明細書に開示される。前記有機発光層は、最高被占分子軌道(HOMO)エネルギー及び最低空分子軌道(LUMO)エネルギーを有する第1のホスト材料と、HOMOエネルギー及びLUMOエネルギーを有する発光体材料とを含む。発光体は、リン光金属錯体及び遅延蛍光発光体からなる群から選択される。前記有機発光層における発光体とホスト材料は、次の条件を満たす： $a = E_T - E_b$ ；式中、 E_T は、前記発光体の三重項エネルギー T_1 であって、前記有機発光層中の全ての材料の中で最も低い T_1 エネルギーであり； E_b は、高いHOMOエネルギーと低いLUMOエネルギーとの間のエネルギーギャップであり； a は、 $0.00 \sim$ 最大 0.15 eVであり、 b は、 $0.05 \sim$ 最大 0.45 eVであり；前記OLEDの発光スペクトルは、有機発光層が第1の発光体と不活性ホストとからなるOLEDの発光スペクトルと少なくとも95%同一である。「高いHOMOエネルギー」は、有機発光層中の全ての材料の中で最も高いHOMOエネルギーとして定義され、「低いLUMOエネルギー」は、有機発光層中の全ての材料の中で最も低いLUMOエネルギーとして定義される。

【0075】

幾つかの実施形態においては、有機発光層中の全ての材料が混合物であることができる。この混合物は、均一な混合物であることができる、又は有機発光層の各成分が発光層中の厚みに亘って勾配のある濃度であることができる。濃度勾配は、線形、非線形、正弦波形などであることができる。

【0076】

発光体は、リン光金属錯体又は遅延蛍光発光体であることができる。

【0077】

OLEDの幾つかの実施形態においては、 a は、 0.15 eVである。幾つかの実施形態においては、 a は、 0.10 eVである。幾つかの実施形態においては、 a は、好ましくは、 0.05 eVである。幾つかの実施形態においては、 b は、 0.05 eVである。幾つかの実施形態においては、 b は、 0.15 eVである。幾つかの実施形態においては、 b は、 0.25 eVである。幾つかの実施形態においては、 b は、好ましくは、 0.35 eVである。幾つかの実施形態においては、 E_T は、少なくとも 2.60 eVである。幾つかの実施形態においては、 E_T は、少なくとも 2.65 eVである。幾つかの実施形態においては、 E_T は、少なくとも 2.70 eVである。幾つかの実施形態においては、 E_T は、好ましくは、少なくとも 2.75 eVである。

【0078】

OLEDの幾つかの実施形態においては、高いHOMOエネルギーは、発光体のHOMOエネルギーであり、低いLUMOエネルギーは、第1のホストのLUMOエネルギーである。幾つかの実施形態においては、高いHOMOエネルギーは、第1のホストのHOMOエネルギーであり、低いLUMOエネルギーは、発光体のLUMOエネルギーである。

【0079】

幾つかの実施形態においては、OLEDは、第2のホストを更に含み、高いHOMOエネルギーが、第1のホストのHOMOエネルギーであり、低いLUMOエネルギーが、第2のホストのLUMOエネルギーである。幾つかの実施形態においては、高いHOMOエネルギーが、第2のホストのHOMOエネルギーであり、低いLUMOエネルギーが、第1のホストのLUMOエネルギーである。

10

20

30

40

50

【0080】

第2のホストを含むOLEDの幾つかの実施形態においては、第1のホスト、第2のホスト、及び発光体のみが、発光層の成分である。幾つかの実施形態においては、第1のホスト、第2のホスト、及び発光体のみが、発光層の成分である。

【0081】

幾つかの実施形態においては、OLEDは、 10 mA/cm^2 で6.0V未満の動作電圧を有する。幾つかの実施形態においては、OLEDは、 10 mA/cm^2 で5.0V未満の動作電圧を有する。幾つかの実施形態においては、OLEDは、 10 mA/cm^2 で4.0V未満の動作電圧を有する。

【0082】

OLEDの幾つかの実施形態においては、第1のホストが、トリフェニレン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ボリル、5,9-ジオキサ-13b-ボラナフト[3,2,1-de]アントラセン、及びそれらのアザ-バリエーションからなる群から選択される少なくとも1つの化学基を含む。

10

【0083】

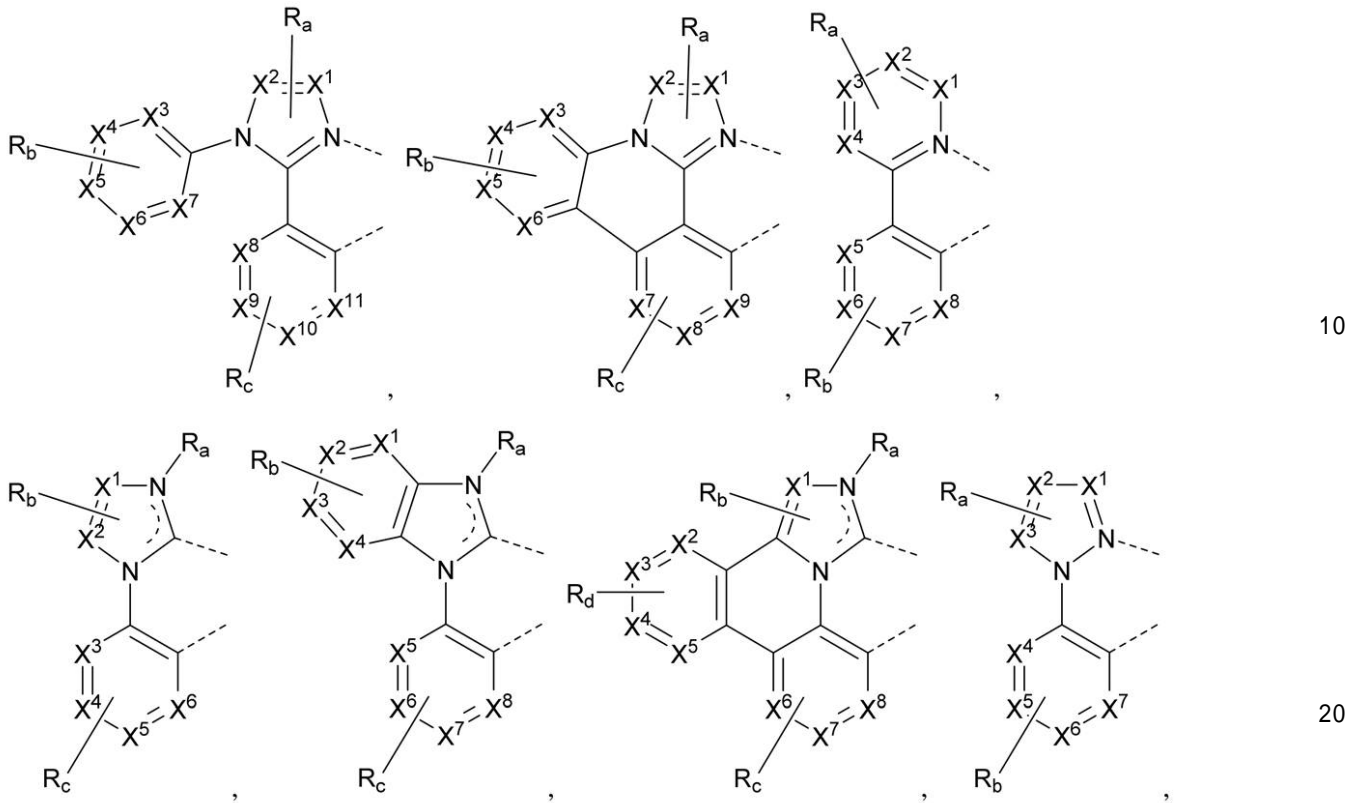
OLEDの幾つかの実施形態においては、発光体は、リン光青色発光体である。ここで、青色発光体は、その発光maxが490nm未満、480nm未満、470nm未満、又は好ましくは460nm未満である、又はCIE座標における発光が、 $X < 0.3$ 、 < 0.25 、 < 0.2 、又は好ましくは < 0.18 、且つ $Y < 0.5$ 、 < 0.4 、 < 0.3 、又は好ましくは < 0.2 であるリン光発光体を意味する。

20

【0084】

OLEDの幾つかの実施形態においては、発光体は、式 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ を有し； L^1 、 L^2 、及び L^3 は、同一であっても異なってもよく； x は、1、2、又は3であり； y は、0、1、又は2であり； z は、0、1、又は2であり； $x+y+z$ は、金属Mの酸化状態であり； L^1 、 L^2 、及び L^3 は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される：

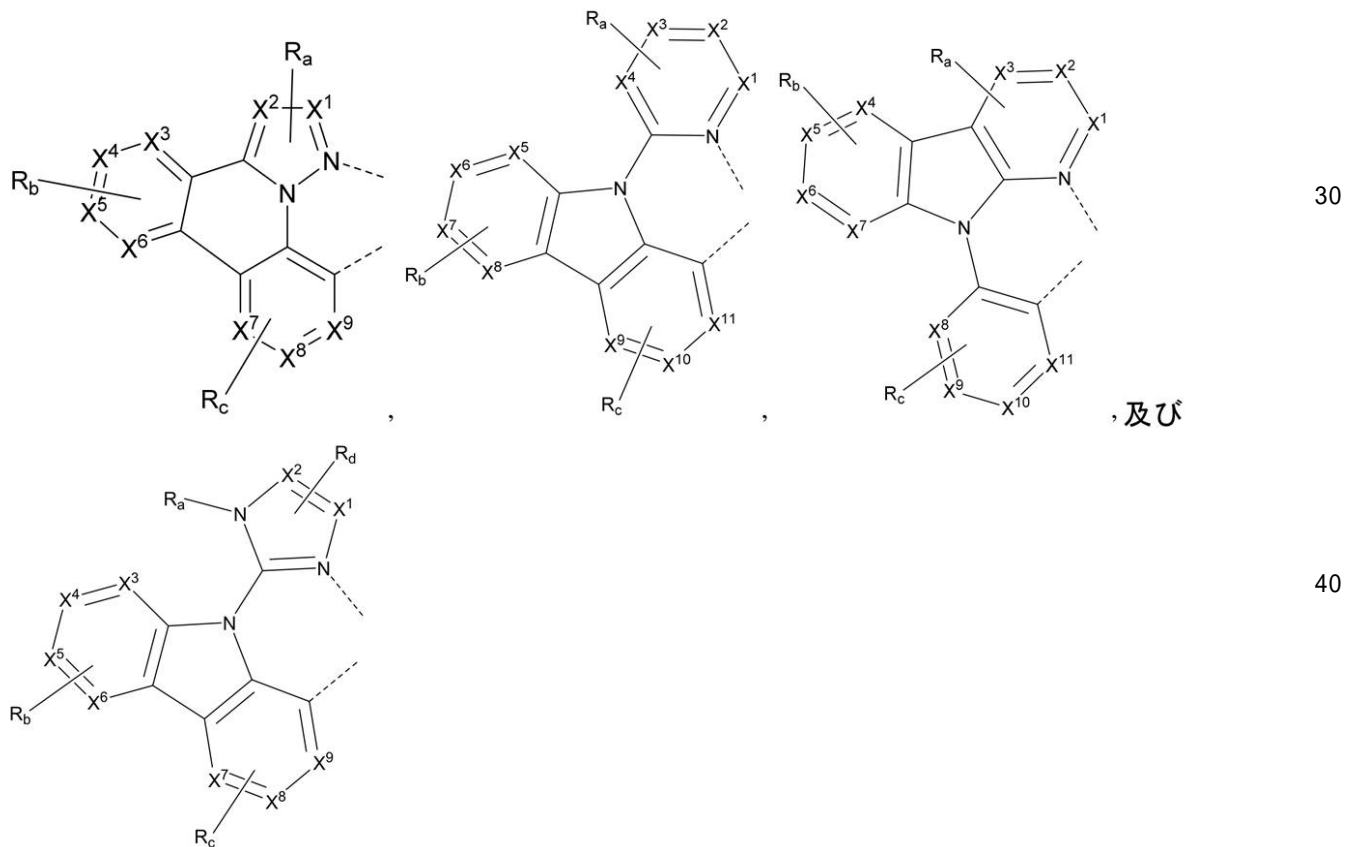
【化2】



10

20

【化3】



30

40

式中、各 $X^1 \sim X^{11}$ は、独立して、炭素及び窒素からなる群から選択され； X は、 BR' 、 NR' 、 PR' 、 O 、 S 、 Se 、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 $GeR'R''$ からなる群から選択され； R' 及び R'' は、縮合又は結合

50

して環を形成してもよく；各 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、モノ置換から可能な最大の置換数を表すことができる、又は無置換を表すことができ； R' 、 R'' 、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の2つの R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、縮合又は結合して環を形成する又は多座配位子を形成してもよい。

【0085】

幾つかの実施形態においては、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、互いに隣接して縮合しない少なくとも4つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、互いに隣接して縮合しない少なくとも5つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、互いに隣接して縮合しない少なくとも6つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R_a は、本明細書に記載される化学基を含む。嵩高い基を、発光体錯体の配位子周辺に付加するより詳細な記述は、別の場所、例えば、参照によりその全体を本明細書に援用する米国出願第16/807,877に詳述されている。

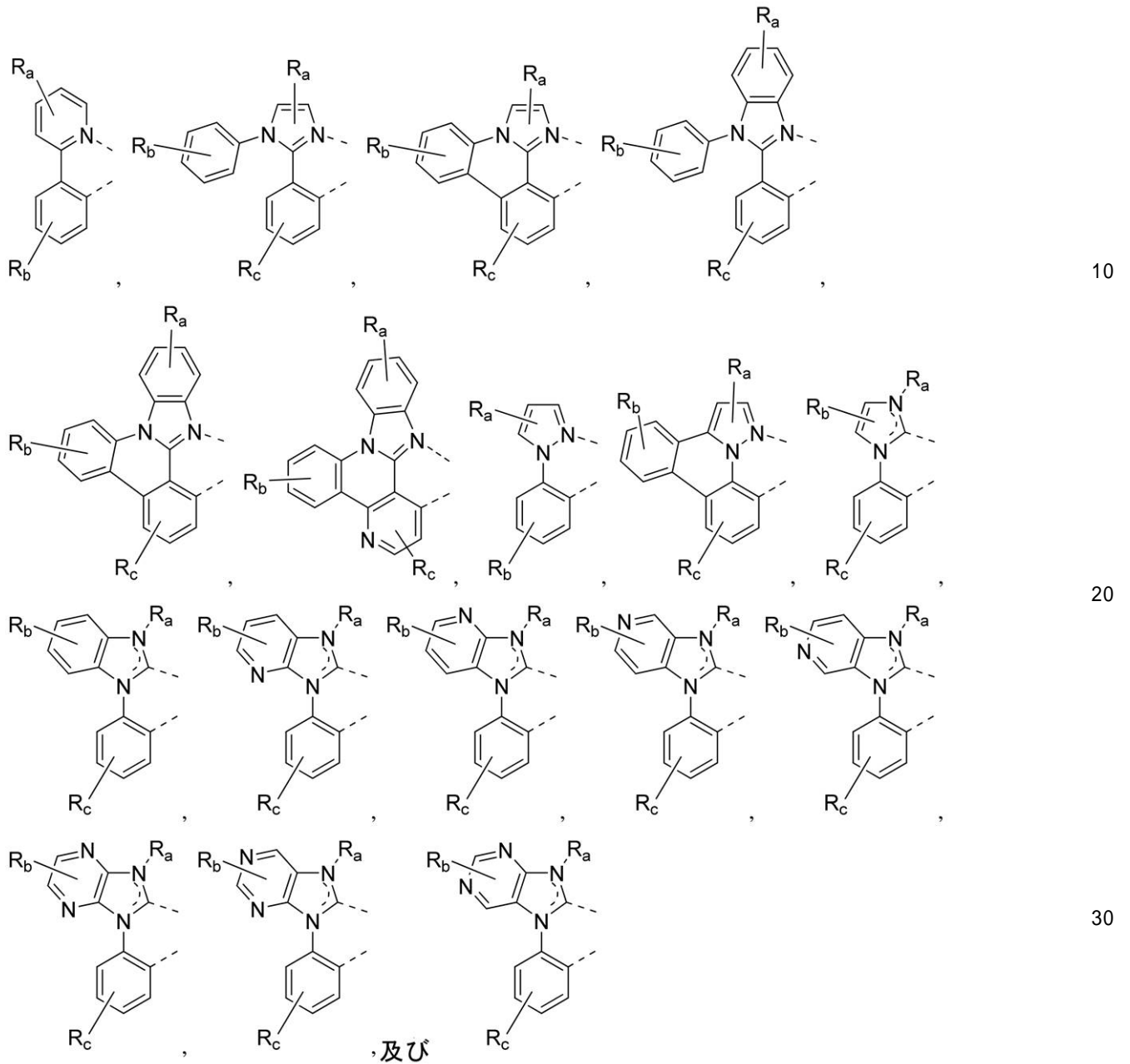
10

【0086】

発光体が式 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ を有するOLEDの幾つかの実施形態においては、発光体は、 $Ir(L^1)(L^2)(L^3)$ 、 $Ir(L^1)_2(L^2)$ 、及び $Ir(L^1)_3$ からなる群から選択される式を有することができ、式中、 L^1 、 L^2 、及び L^3 は、異なっており、それぞれ独立して下記からなる群から選択される。

20

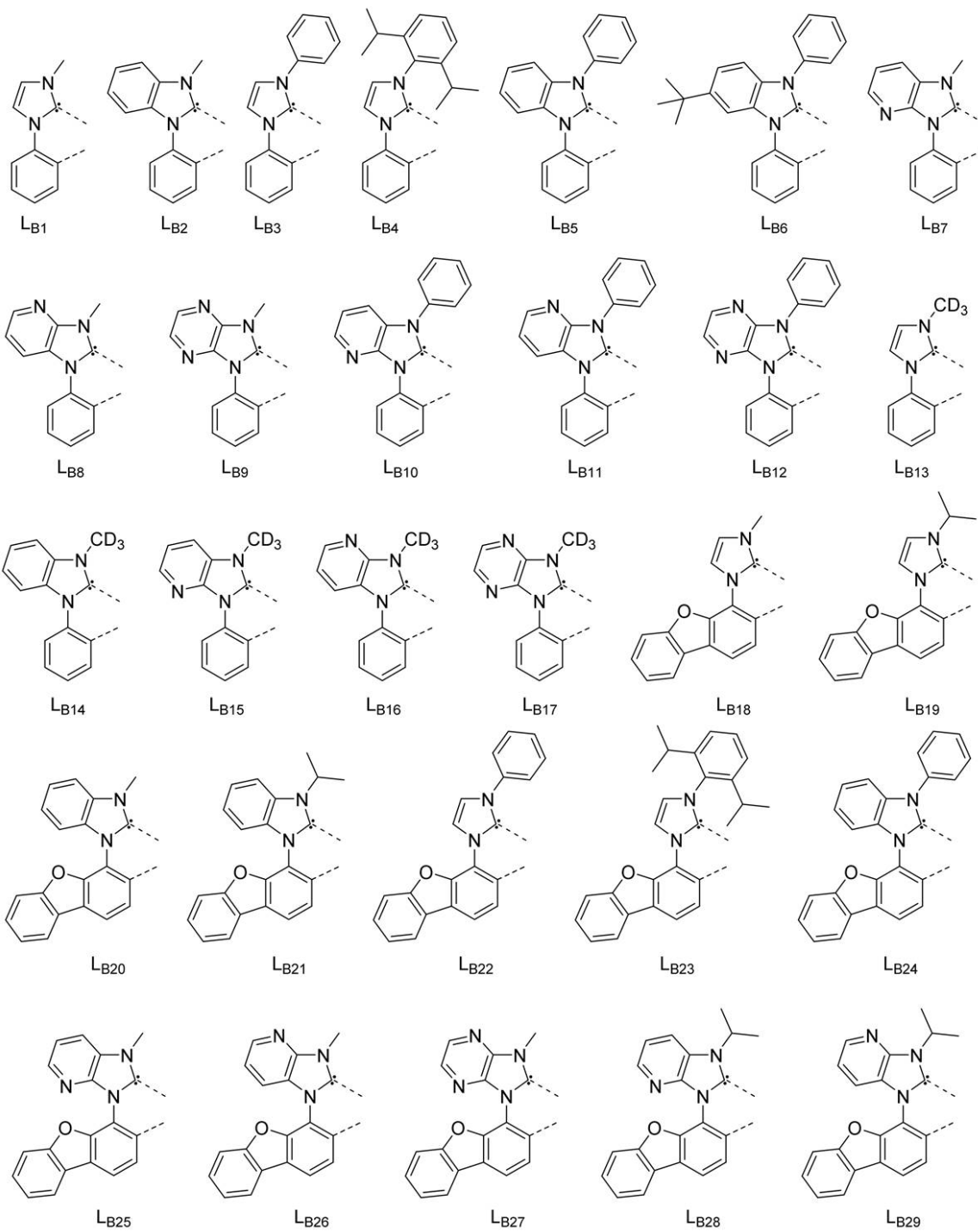
【化4】



【0087】

発光体が式 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ を有する化合物の幾つかの実施形態においては、発光体は、式 $Pt(L^1)_2$ 又は $Pt(L^1)(L^2)$ を有することができ、 L^1 及び L^2 は、それぞれ異なる二座配位子である。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、他方の L^1 又は L^2 に結合し、四座配位子を形成する。幾つかの実施形態においては、発光体は、式 $M(L^1)_2$ 又は $M(L^1)(L^2)$ を有し、 M は、 Ir 、 Rh 、 Re 、 Ru 、又は Os であり、 L^1 及び L^2 は、それぞれ異なる三座配位子である。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、下記からなる群から選択される。

【化 5】

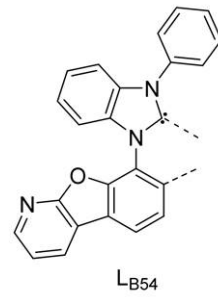
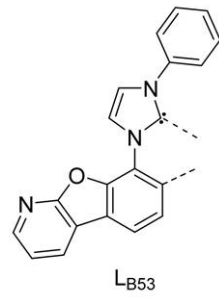
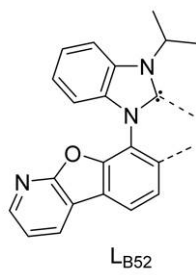
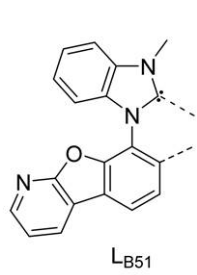
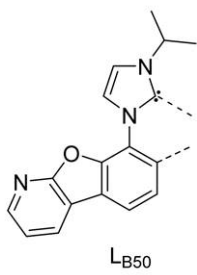
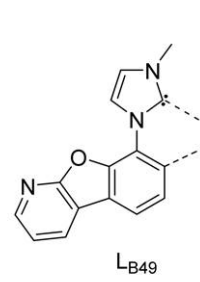
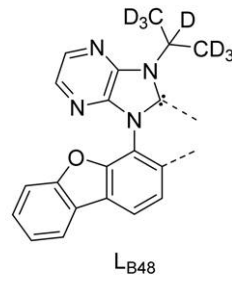
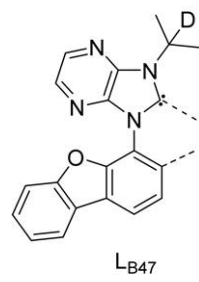
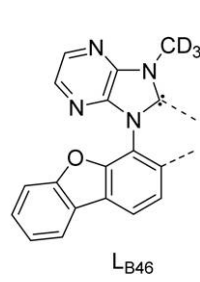
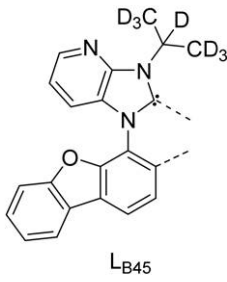
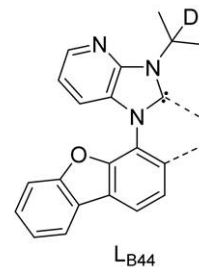
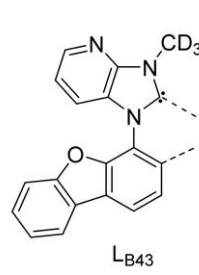
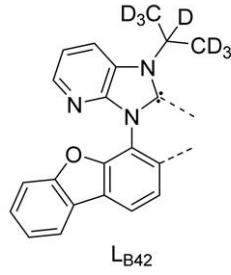
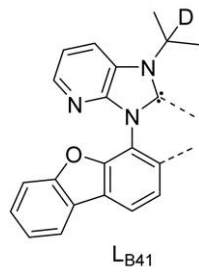
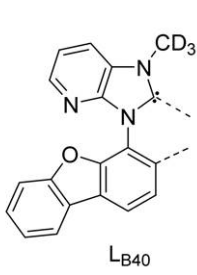
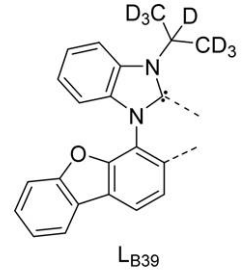
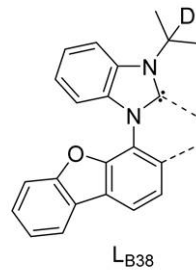
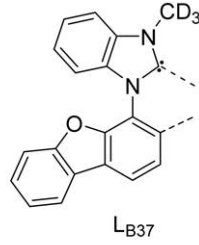
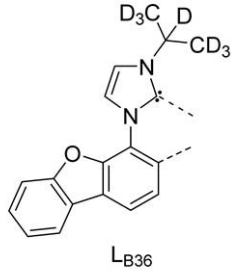
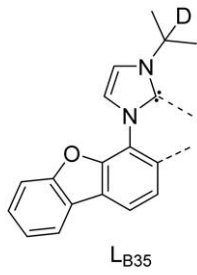
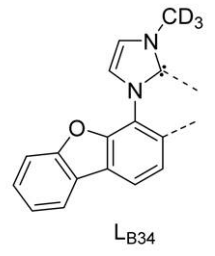
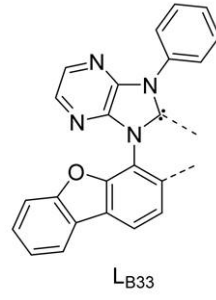
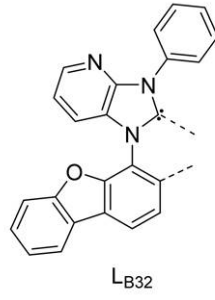
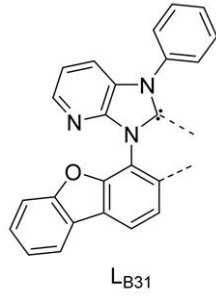
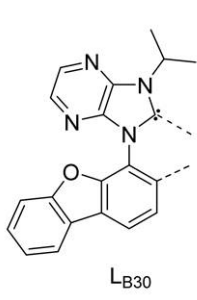


10

20

30

【化 6】



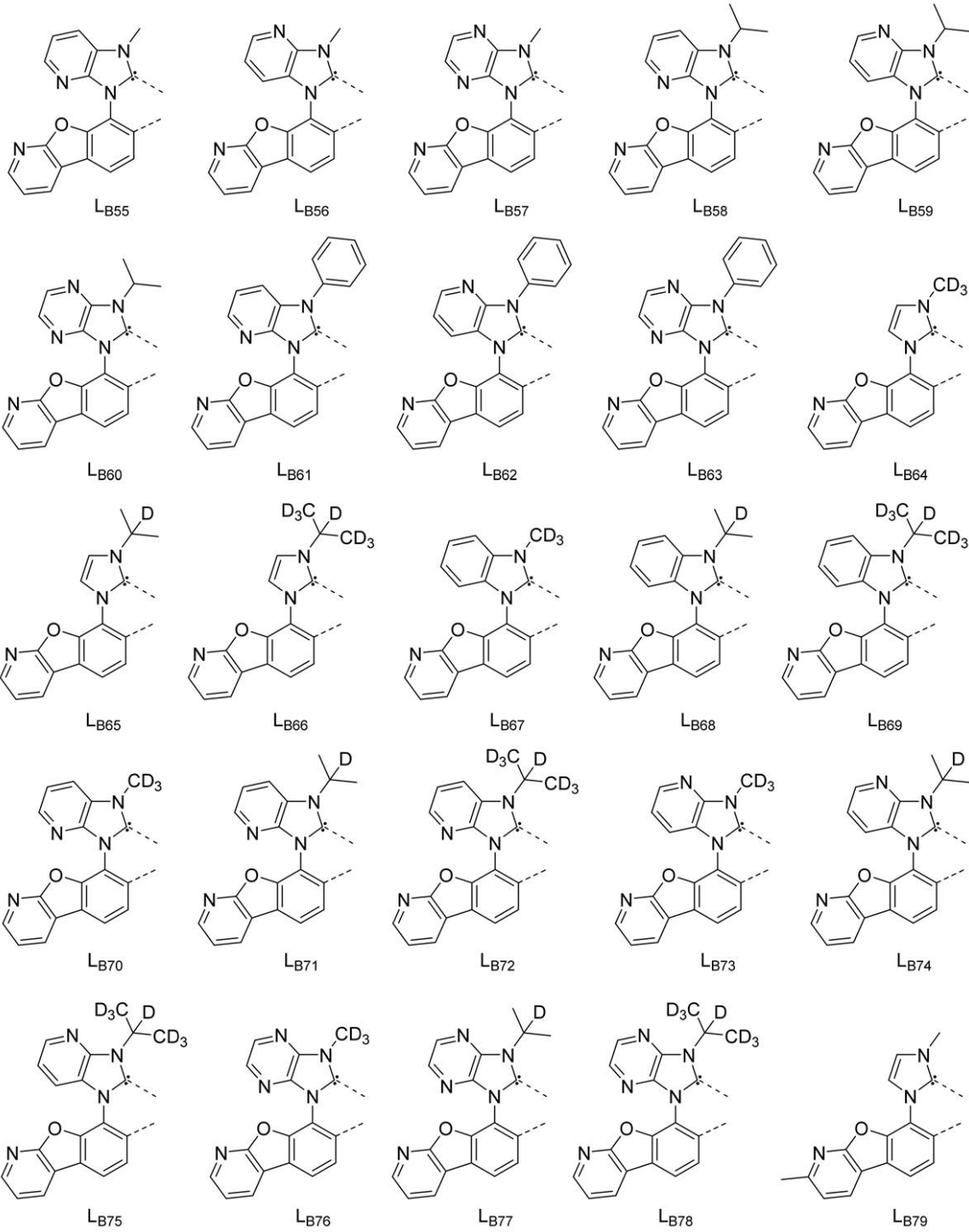
10

20

30

40

【化 7】

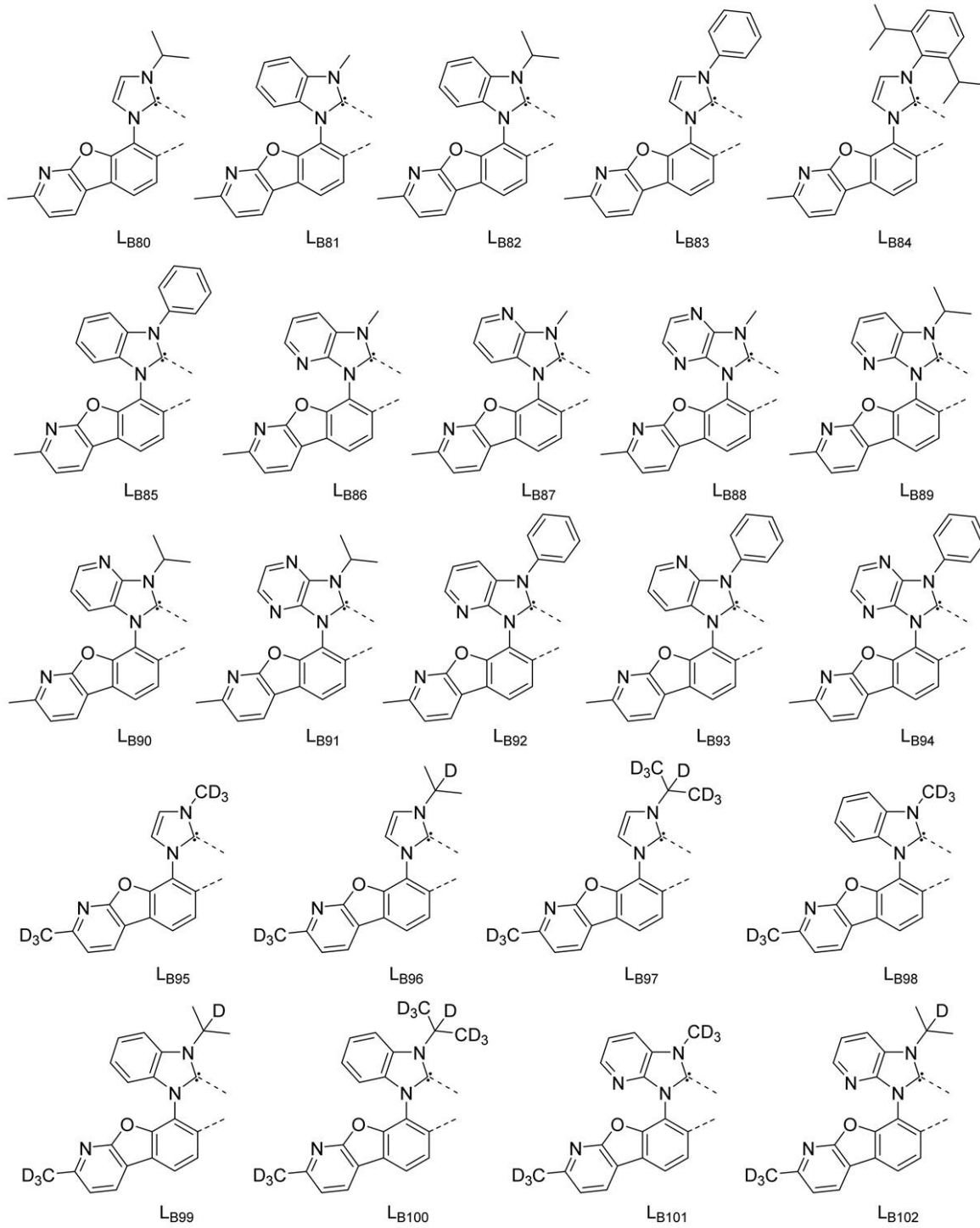


10

20

30

【化 8】

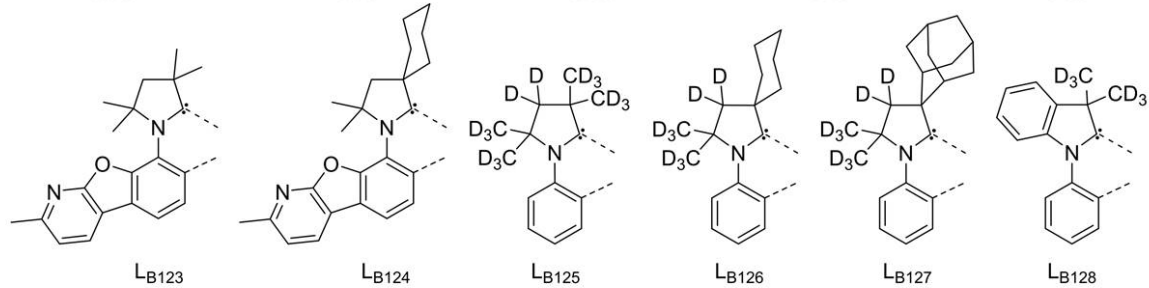
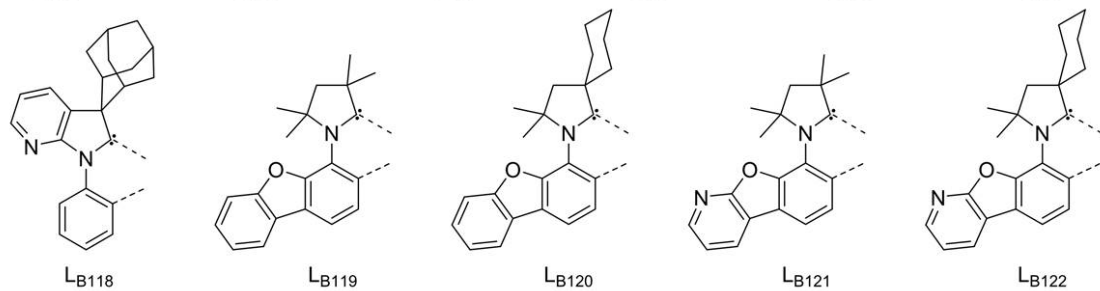
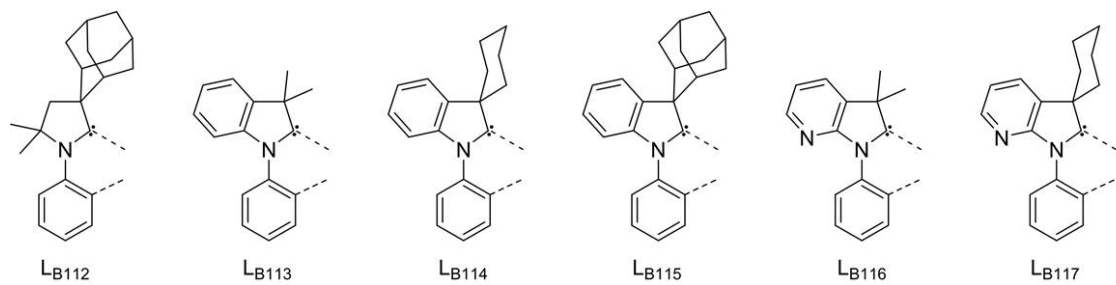
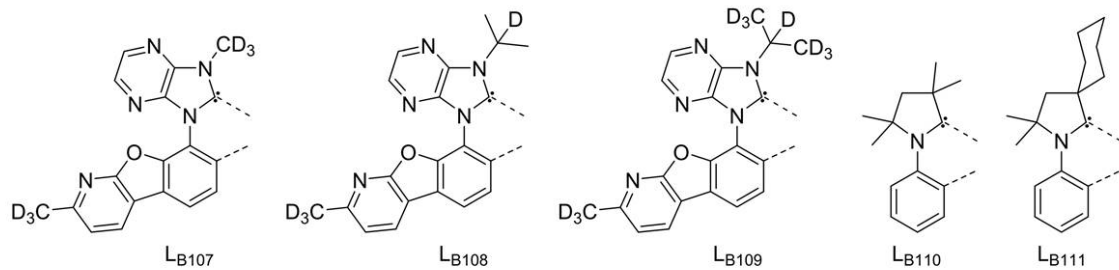
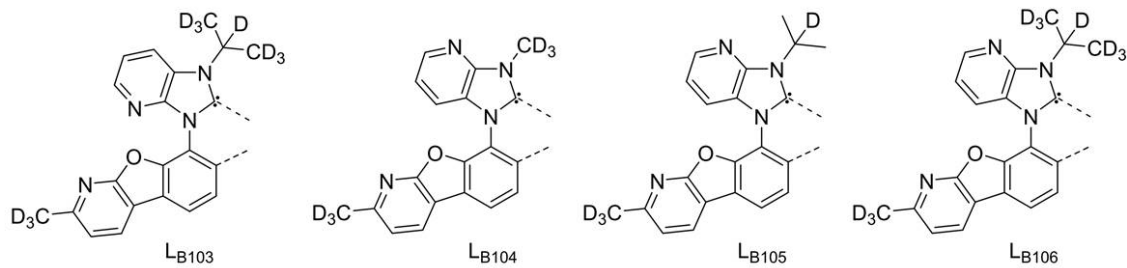


10

20

30

【化 9】



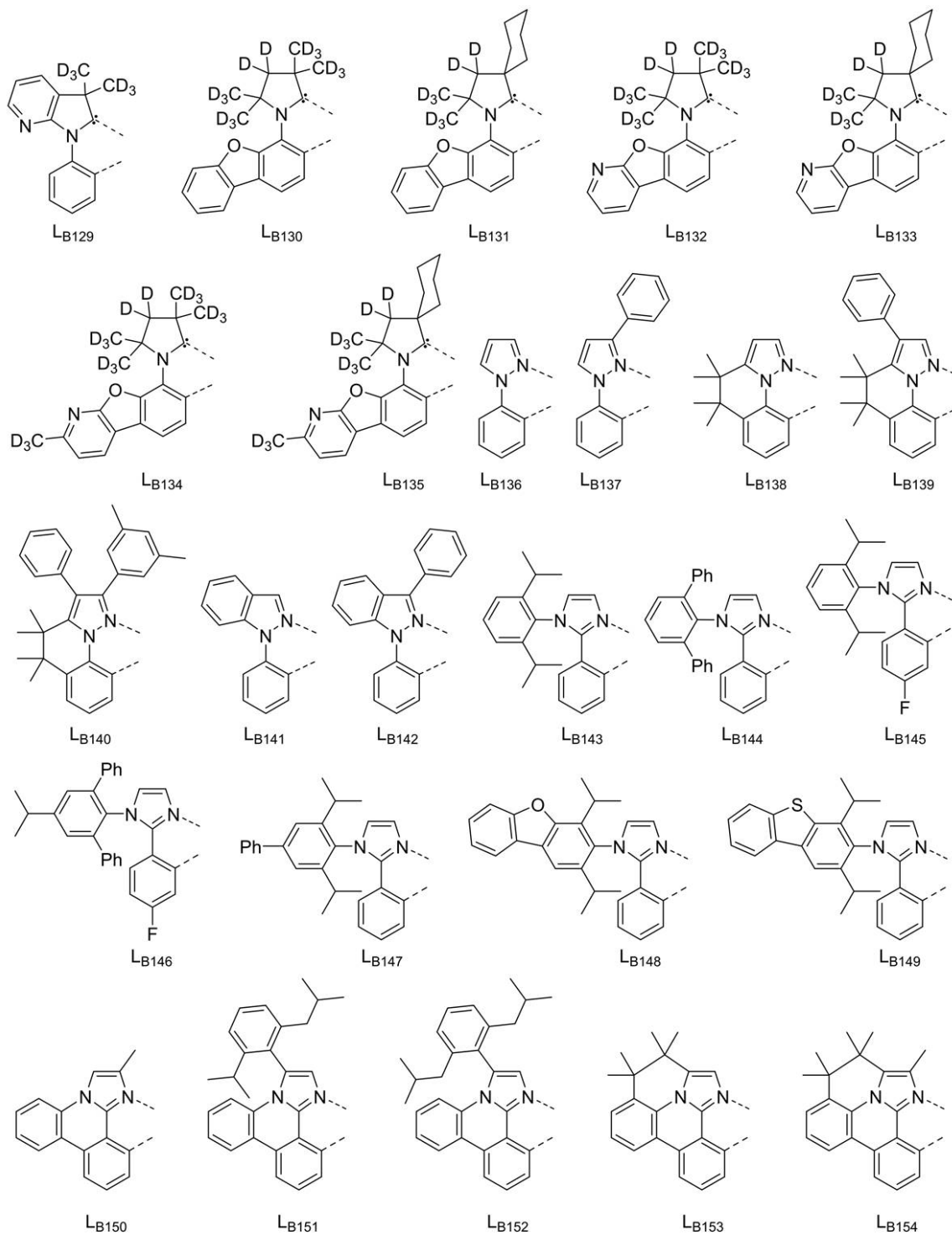
10

20

30

40

【化 1 0】



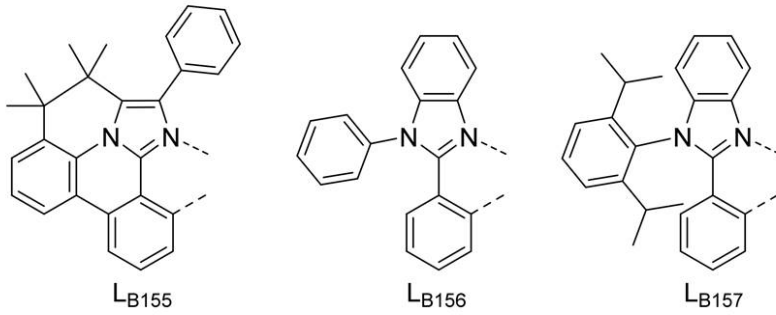
10

20

30

40

【化 1 1】

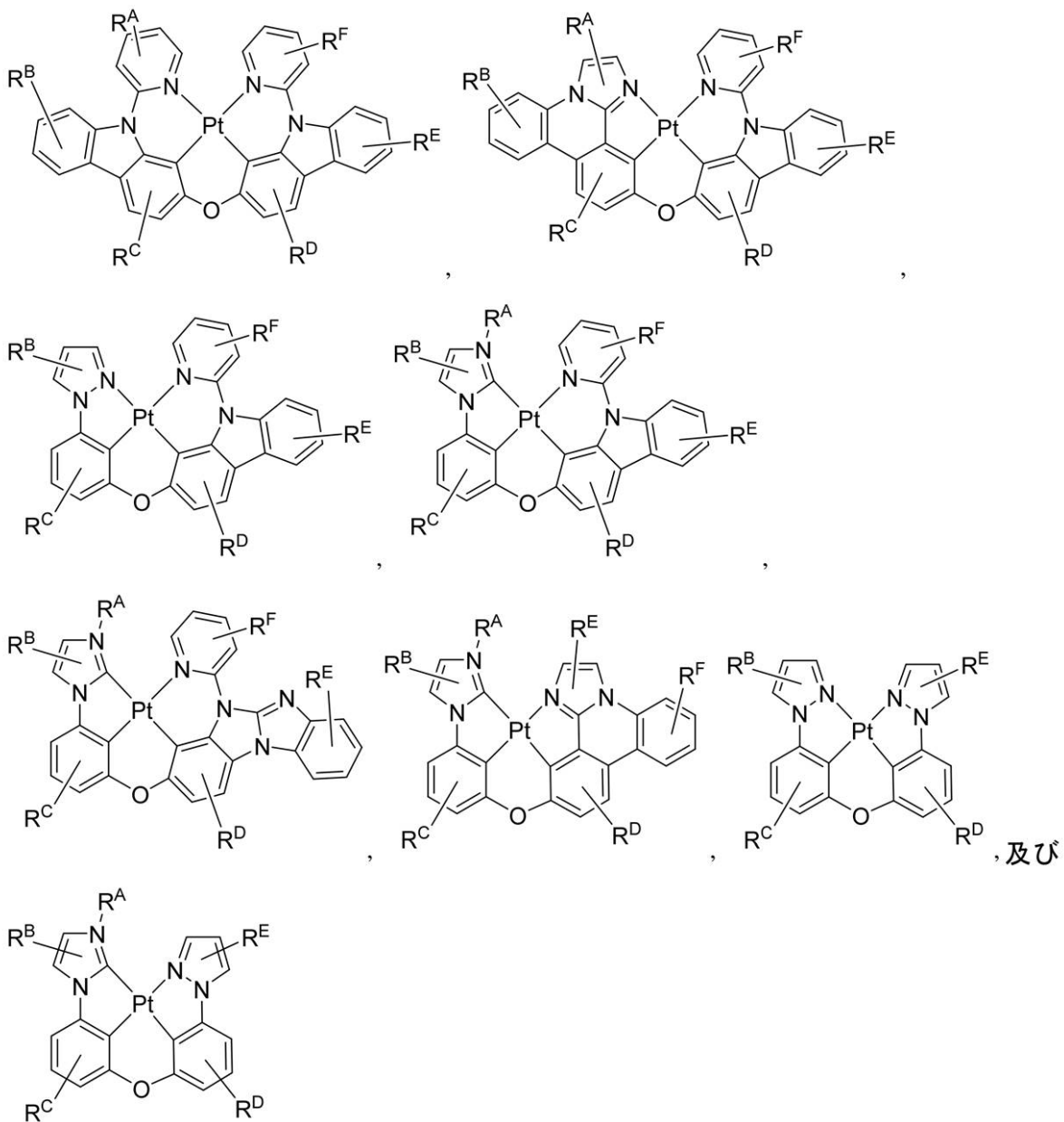


10

【 0 0 8 8】

発光体が式 $Pt(L^1)_2$ 又は $Pt(L^1)(L^2)$ を有する OLED の幾つかの実施形態においては、発光体は、下記からなる以下の群 1 から選択される。

【化 1 2】



20

30

40

式中、各 $R^A \sim R^F$ は、モノ置換から可能な最大の置換数を表すことができる、又は無置換を表すことができ； $R^A \sim R^F$ は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定

50

義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の2つの $R^A \sim R^F$ は、縮合又は結合して環を形成する又は多座配位子を形成してもよい。幾つかの実施形態においては、 $R^A \sim R^F$ の少なくとも1つは、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。

【0089】

発光体が式 $Pt(L^1)_2$ 又は $Pt(L^1)(L^2)$ を有し且つ発光体が前記群1から選択されるOLEDの幾つかの実施形態においては、 R^A は、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。

【0090】

OLEDの幾つかの実施形態においては、発光体は、E型遅延蛍光発光体である。

10

【0091】

幾つかの実施形態においては、発光体は、式D-L-Aを有し；Dは、電子供与体基であり、Aは、電子受容体基であり、Lは、直接結合又はリンカーである。幾つかの実施形態においては、電子供与体基は、アミノ、インドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、及びこれらの組合せからなる群から選択される少なくとも1つの化学部分を含む。幾つかの実施形態においては、電子受容体基は、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、ニトリル、イソニトリル、及びボリルからなる群から選択される少なくとも1つの化学部分を含む。

【0092】

20

別の態様によれば、本明細書に開示される本発明OLEDを含む消費者製品も開示される。消費者製品は、フラットパネルディスプレイ、コンピュータモニター、メディカルモニター、テレビ、掲示板、屋内若しくは屋外照明及び/又は信号送信用のライト、ヘッドアップディスプレイ、完全又は部分透明ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンター、電話、携帯電話、タブレット、ファブレット、パーソナルデジタルアシスタント(PDA)、ウェアラブルデバイス、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダー、ビューファインダー、対角で2インチ未満のマイクロディスプレイ、3-Dディスプレイ、バーチャルリアリティ又は拡張現実ディスプレイ、車両、共に並べた多重ディスプレイを含むビデオウォール、劇場又はスタジアムのスクリーン、光療法デバイス、及び看板のうちの1つであることができる。

30

【0093】

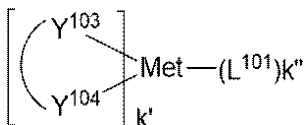
一般に、前記したエネルギー要件がEMLで満たされる限り、任意の金属錯体又は有機化合物を本開示のOLEDにおけるホスト材料として用いることができる。例えば、ホール輸送発光体を有する電子輸送ホスト(e-ホスト)又はその逆であることができる。そのようなe-ホストのファミリーは、参照により本明細書にその内容を援用する、2019年11月14日出願の米国特許出願第16/683,507号に開示されている。

【0094】

本開示のOLEDのためのホスト化合物は、金属錯体であることができる。ホストとして用いられる金属錯体の例としては、下記一般式を有することが好ましい。

【化13】

40



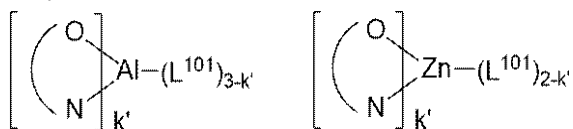
式中、Metは金属であり； $(Y^{103} - Y^{104})$ は二座配位子であり、 Y^{103} 及び Y^{104} は、C、N、O、P及びSから独立に選択され； L^{101} は他の配位子であり； k' は、1から金属に結合し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、 $k' + k''$ は、金属に結合し得る配位子の最大数である。

【0095】

一態様において、金属錯体は、下記である。

50

【化 1 4】



式中、(O - N)は、原子O及びNに配位された金属を有する二座配位子である。

【0096】

別の態様において、Metは、Ir及びPtから選択される。更なる態様において、(Y¹⁰³ - Y¹⁰⁴)はカルベン配位子である。

【0097】

一態様において、前記ホスト化合物は、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、テトラフェニレン、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、及びアズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基であり、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも1つを介して互いに結合している2から10個の環式構造単位からなる群から選択される群の少なくとも1つを含む。各基内の各オプシオンは、非置換であることができる、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基によって置換されることができる。

【0098】

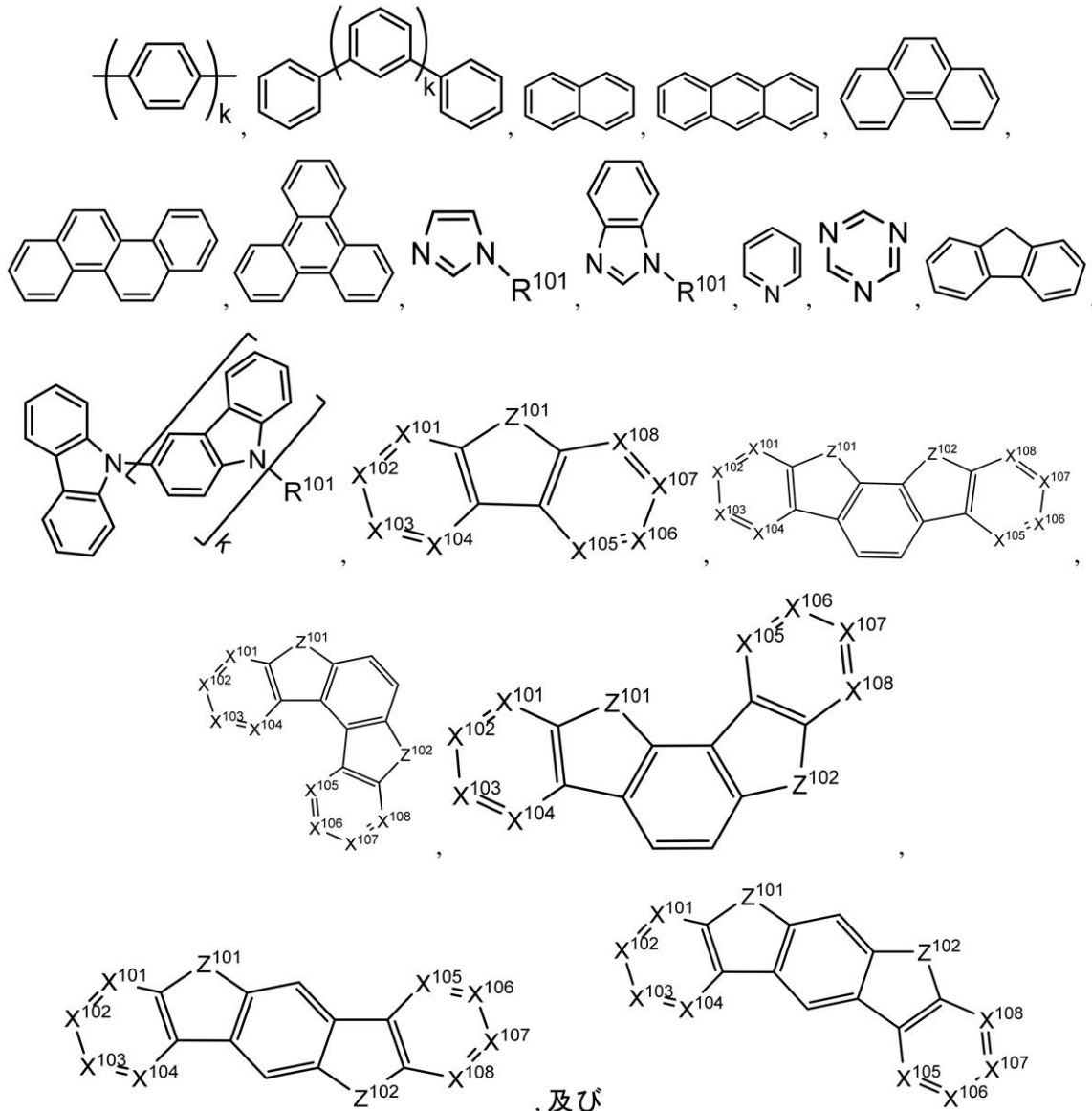
一態様において、前記ホスト化合物は、分子中に、下記基の少なくとも1つを含む。

10

20

30

【化 1 5】



10

20

30

40

50

式中、 R^{101} は、水素、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリーラルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、及びこれらの組合せからなる群から選択され、それがアリール又はヘテロアリールである場合、上記で言及したArのものと同様の定義を有する。 k は0から20又は1から20までの整数である。 $X^{101} \sim X^{108}$ は、独立して、C(CHを含む)又はNから選択される。 Z^{101} 及び Z^{102} は、独立して、 NR^{101} 、O、又はSから選択される。

【0099】

本明細書において開示される材料と組み合わせて、OLED中に用いられることができるホスト材料の非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。

EP2034538、EP2034538A、EP2757608、JP2007254297、KR20100079458、KR20120088644、KR20120129733、KR20130115564、TW201329200、US20030175553、US20050238919、US20060280965、US20090017330、US20090030202、US20090167162、US20090302743、US20090309488、US20100012931、U

S 2 0 1 0 0 0 8 4 9 6 6、 U S 2 0 1 0 0 1 8 7 9 8 4、 U S 2 0 1 0 1 8 7 9 8 4、
 U S 2 0 1 2 0 7 5 2 7 3、 U S 2 0 1 2 1 2 6 2 2 1、 U S 2 0 1 3 0 0 9 5 4 3、 U
 S 2 0 1 3 1 0 5 7 8 7、 U S 2 0 1 3 1 7 5 5 1 9、 U S 2 0 1 4 0 0 1 4 4 6、 U S
 2 0 1 4 0 1 8 3 5 0 3、 U S 2 0 1 4 0 2 2 5 0 8 8、 U S 2 0 1 4 0 3 4 9 1 4、 U
 S 7 1 5 4 1 1 4、 W O 2 0 0 1 0 3 9 2 3 4、 W O 2 0 0 4 0 9 3 2 0 7、 W O 2 0 0
 5 0 1 4 5 5 1、 W O 2 0 0 5 0 8 9 0 2 5、 W O 2 0 0 6 0 7 2 0 0 2、 W O 2 0 0 6
 1 1 4 9 6 6、 W O 2 0 0 7 0 6 3 7 5 4、 W O 2 0 0 8 0 5 6 7 4 6、 W O 2 0 0 9 0
 0 3 8 9 8、 W O 2 0 0 9 0 2 1 1 2 6、 W O 2 0 0 9 0 6 3 8 3 3、 W O 2 0 0 9 0 6
 6 7 7 8、 W O 2 0 0 9 0 6 6 7 7 9、 W O 2 0 0 9 0 8 6 0 2 8、 W O 2 0 1 0 0 5 6
 0 6 6、 W O 2 0 1 0 1 0 7 2 4 4、 W O 2 0 1 1 0 8 1 4 2 3、 W O 2 0 1 1 0 8 1 4
 3 1、 W O 2 0 1 1 0 8 6 8 6 3、 W O 2 0 1 2 1 2 8 2 9 8、 W O 2 0 1 2 1 3 3 6 4
 4、 W O 2 0 1 2 1 3 3 6 4 9、 W O 2 0 1 3 0 2 4 8 7 2、 W O 2 0 1 3 0 3 5 2 7 5
 、 W O 2 0 1 3 0 8 1 3 1 5、 W O 2 0 1 3 1 9 1 4 0 4、 W O 2 0 1 4 1 4 2 4 7 2、
 U S 2 0 1 7 0 2 6 3 8 6 9、 U S 2 0 1 6 0 1 6 3 9 9 5、 U S 9 4 6 6 8 0 3

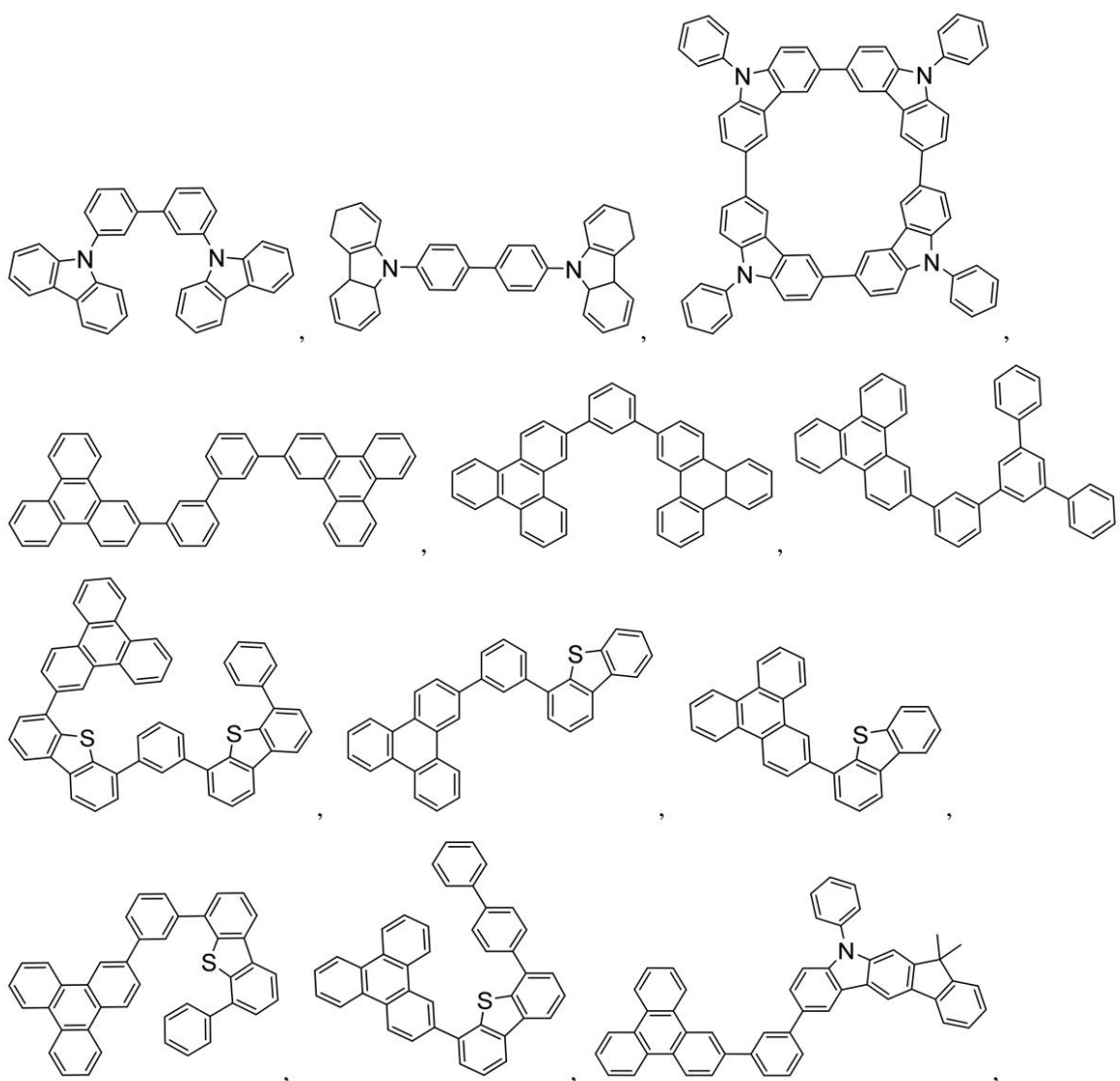
10

20

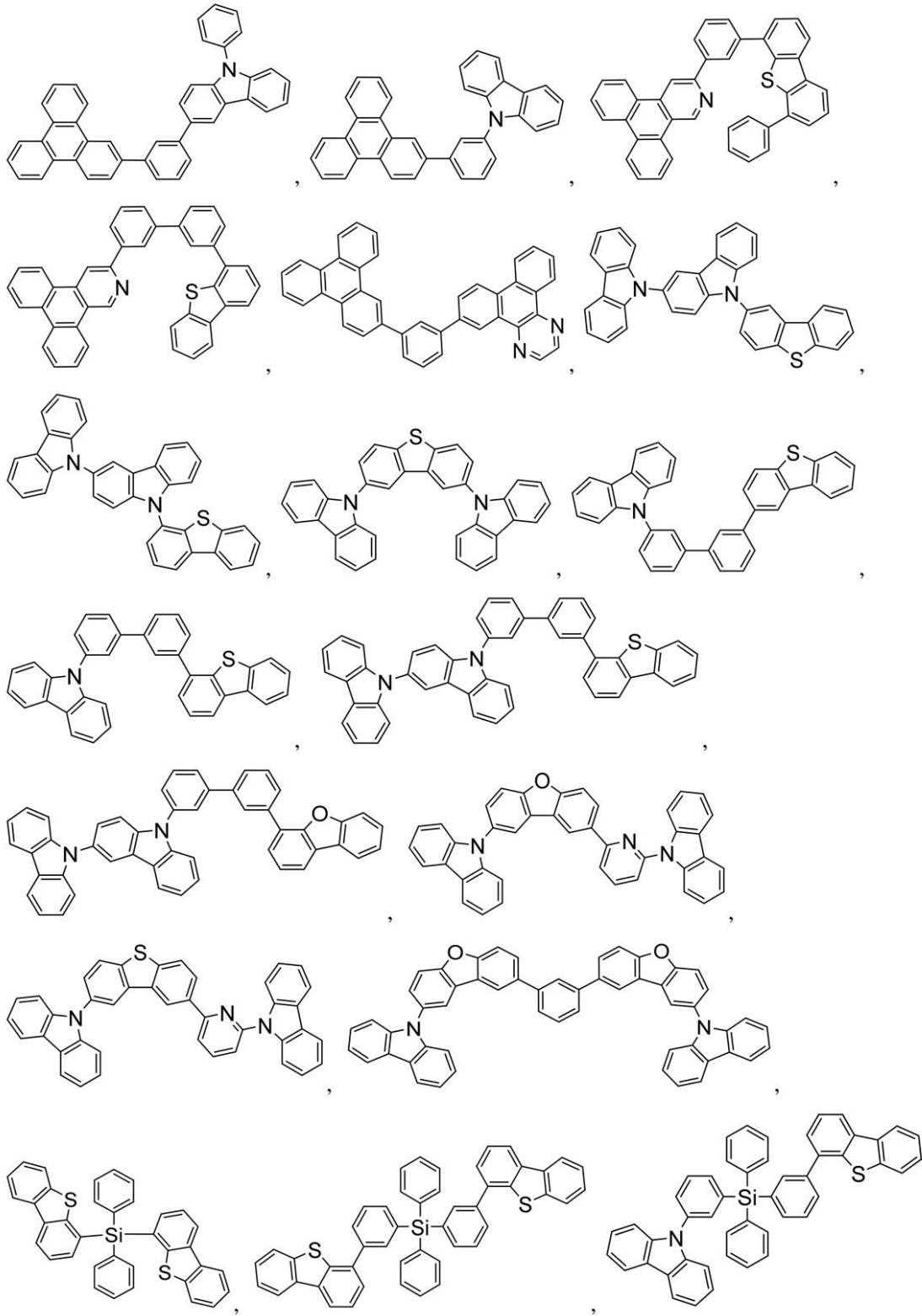
30

40

【化 1 6】



【化 17】



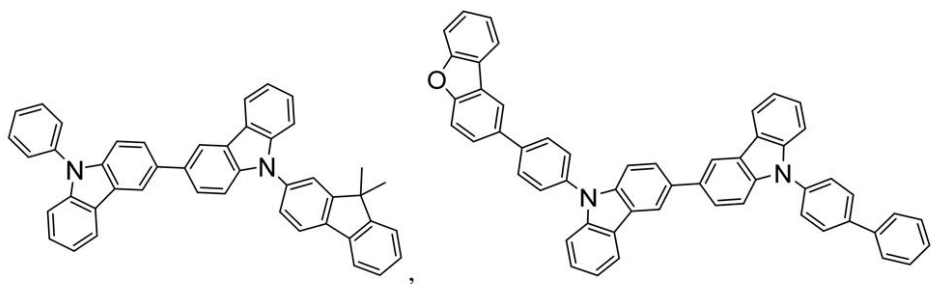
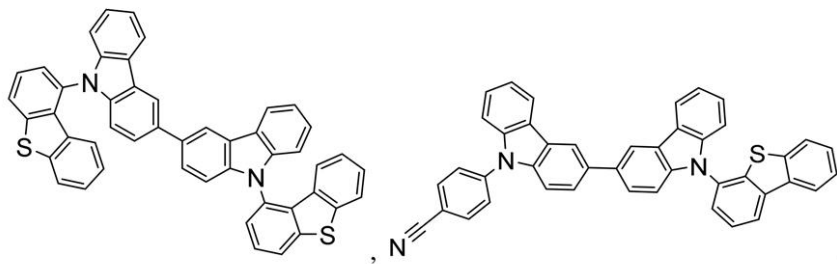
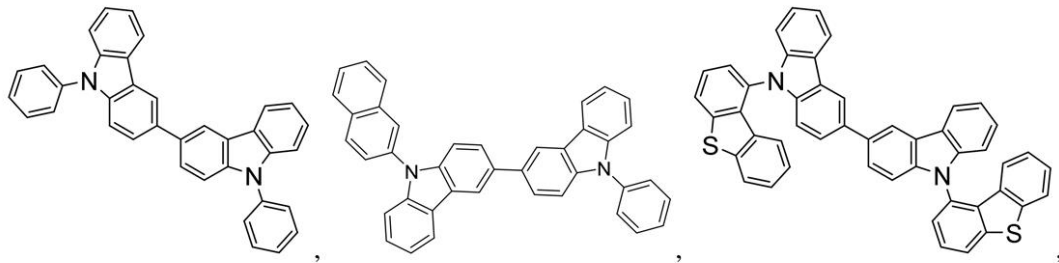
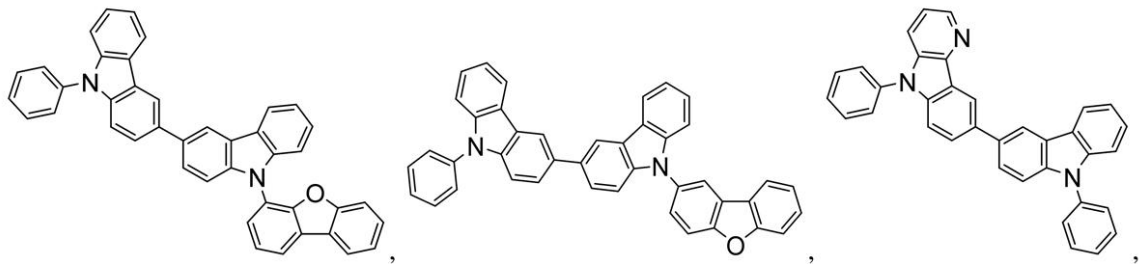
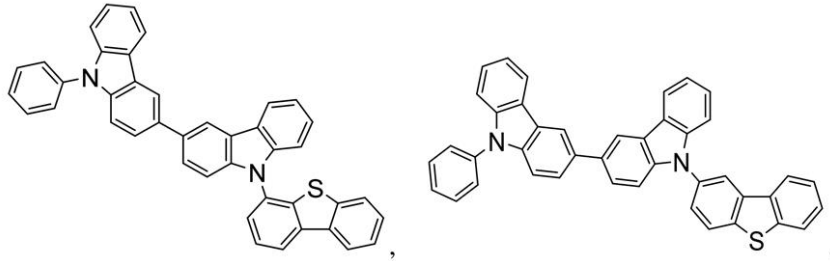
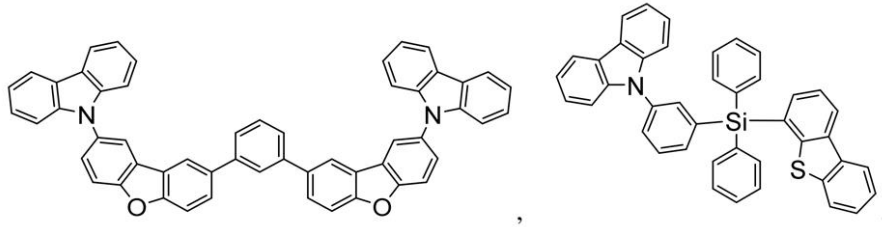
10

20

30

40

【化 18】



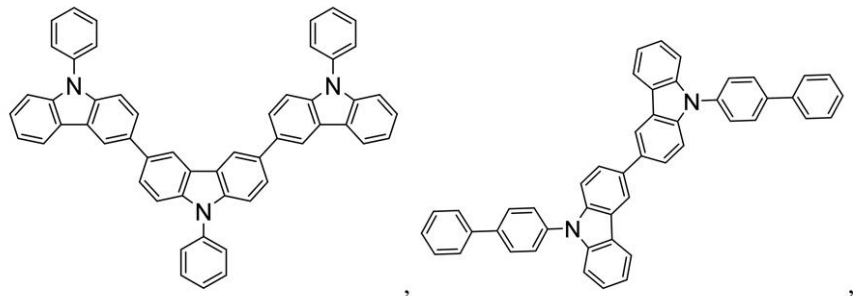
10

20

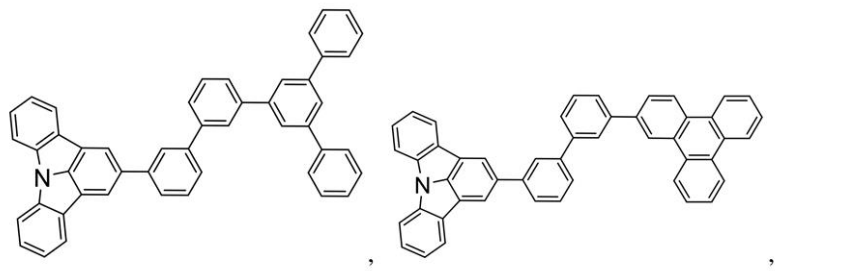
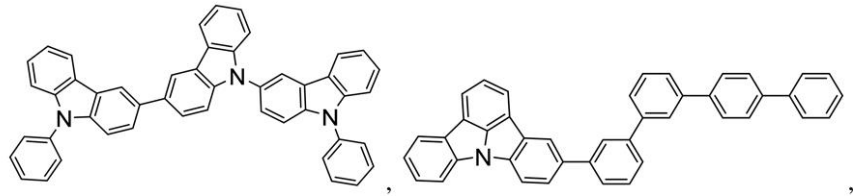
30

40

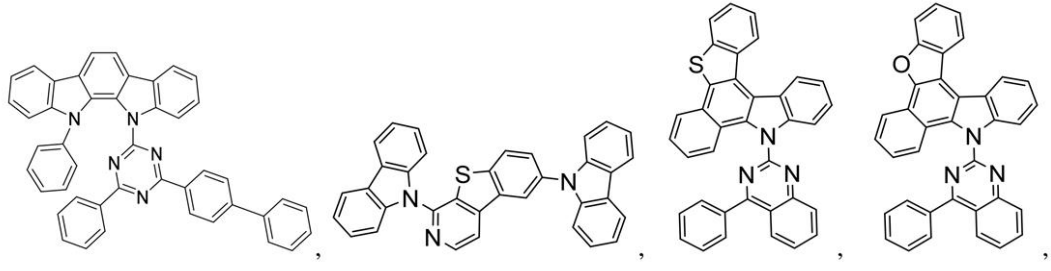
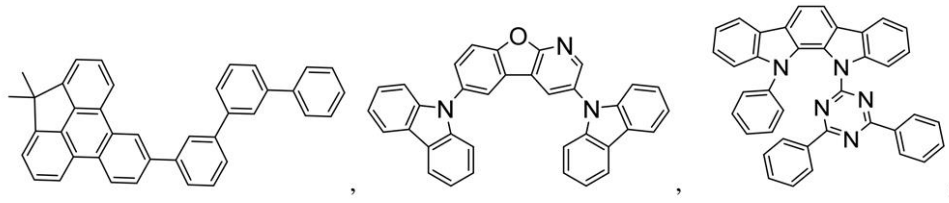
【化 19】



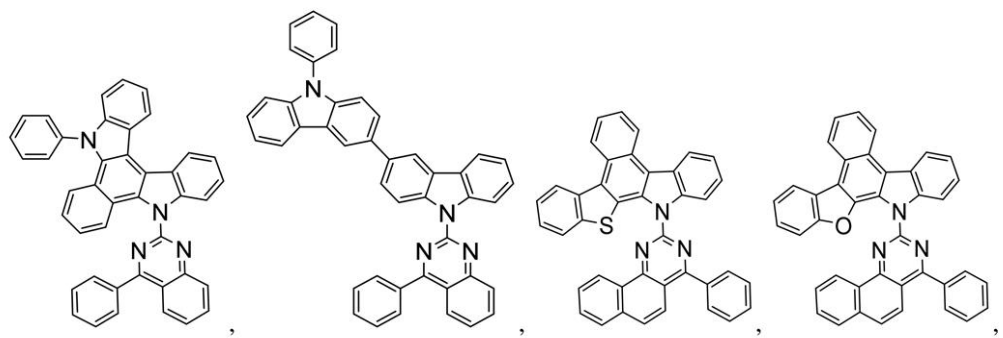
10



20

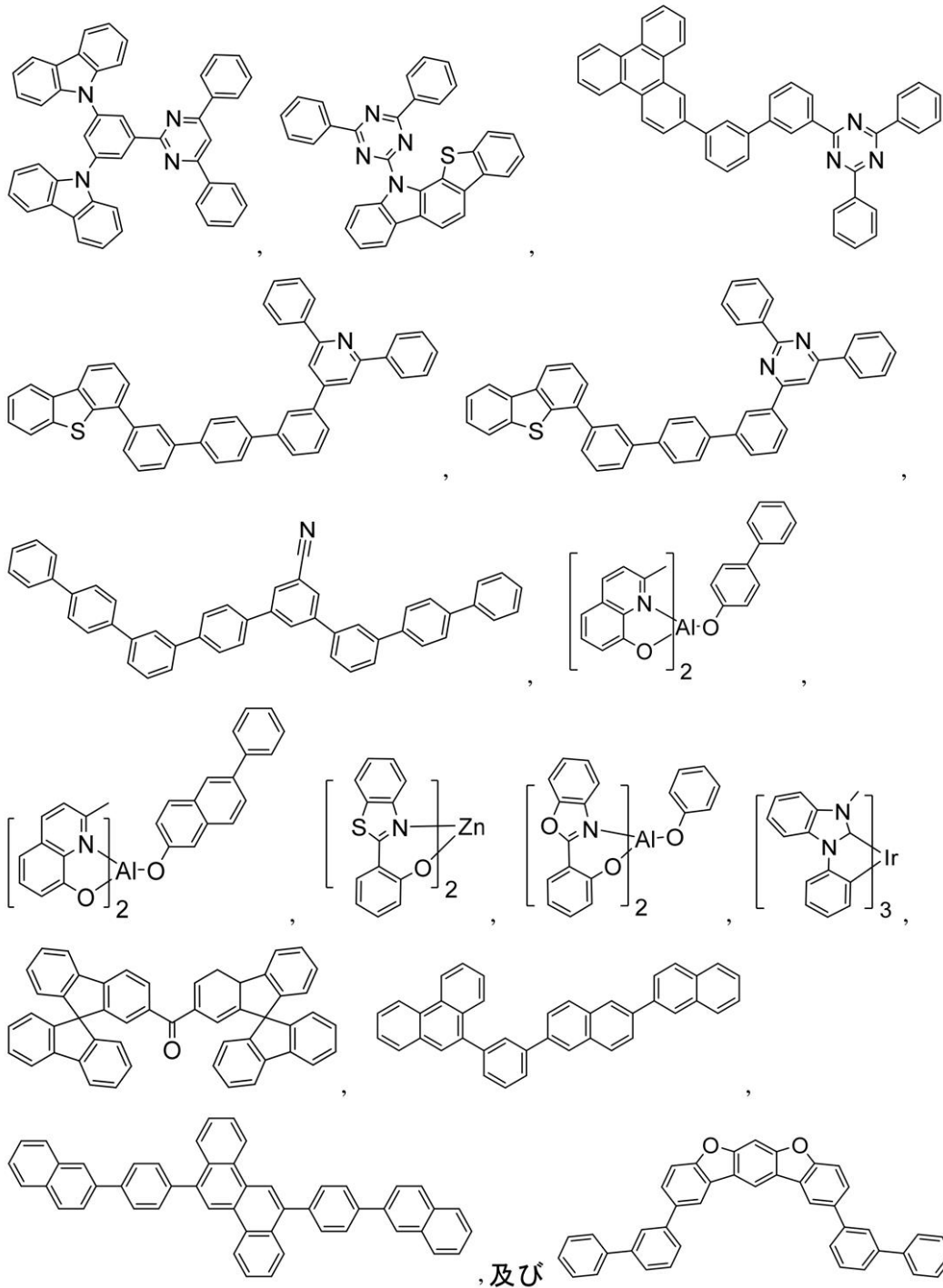


30



40

【化 2 0】



10

20

30

, 及び

【0100】

40

概して、OLEDは、アノード及びカソードの間に配置され、それらと電氣的に接続された少なくとも1つの有機層を含む。電流が印加されると、アノードが正孔を注入し、カソードが電子を有機層（複数可）に注入する。注入された正孔及び電子は、逆帯電した電極にそれぞれ移動する。電子及び正孔が同じ分子上に局在する場合、励起エネルギー状態を有する局在電子正孔対である「励起子」が形成される。光は、励起子が緩和した際に、光電子放出機構を介して放出される。幾つかの事例において、励起子はエキシマー又はエキサイプレックス上に局在し得る。熱緩和等の無輻射機構が発生する場合もあるが、概して望ましくないとみなされている。

【0101】

数種のOLED材料及び構成は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、米国

50

特許第5,844,363号明細書、米国特許第6,303,238号明細書、及び米国特許第5,707,745号明細書において記述されている。

【0102】

初期のOLEDは、例えば、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第4,769,292号において開示されている通り、その一重項状態から光を放出する発光分子(「蛍光」)を使用していた。蛍光発光は、概して、10ナノ秒未満の時間枠で発生する。

【0103】

ごく最近では、三重項状態から光を放出する発光材料(「リン光」)を有するOLEDが実証されている。参照によりその全体が組み込まれる、Baldoら、「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」、Nature、395巻、151~154、1998; (「Baldo-I」)及びBaldoら、「Very high-efficiency green organic light emitting devices based on electrophosphorescence」、Appl. Phys. Lett.、75巻、3号、4~6(1999)(「Baldo-II」)。リン光については、参照により組み込まれる米国特許第7,279,704号5~6段において更に詳細に記述されている。

10

【0104】

図1は、有機発光デバイス100を示す。図は必ずしも一定の縮尺ではない。デバイス100は、基板110、アノード115、正孔注入層120、正孔輸送層125、電子ブロッキング層130、発光層135、正孔ブロッキング層140、電子輸送層145、電子注入層150、保護層155、カソード160、及びバリア層170を含み得る。カソード160は、第1の導電層162及び第2の導電層164を有する複合カソードである。デバイス100は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。これらの種々の層の特性及び機能並びに材料例は、参照により組み込まれるUS7,279,704、6~10段において更に詳細に記述されている。

20

【0105】

これらの層のそれぞれについて、更なる例が利用可能である。例えば、フレキシブル及び透明基板-アノードの組合せは、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5,844,363号において開示されている。p-ドープされた正孔輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、50:1のモル比でm-MTDATAにF₄-TCNQをドープしたものである。発光材料及びホスト材料の例は、参照によりその全体が組み込まれるThompsonらの米国特許第6,303,238号において開示されている。n-ドープされた電子輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、1:1のモル比でBPhenにLiをドープしたものである。参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5,703,436号及び同第5,707,745号は、上を覆う透明の、導電性の、スパッタリング蒸着したITO層を有するMg:Ag等の金属の薄層を有する複合カソードを含むカソードの例を開示している。ブロッキング層の理論及び使用は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,097,147号及び米国特許出願公開第2003/0230980号において更に詳細に記述されている。注入層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2004/0174116号において提供されている。保護層についての記述は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2004/0174116号において見ることができる。

30

40

【0106】

図2は、反転させたOLED200を示す。デバイスは、基板210、カソード215、発光層220、正孔輸送層225、及びアノード230を含む。デバイス200は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。最も一般的なOLED構成はアノードの上に配置されたカソードを有し、デバイス200はアノード230の下に配

50

置されたカソード 215 を有するため、デバイス 200 は「反転させた」OLED と称されることができる。デバイス 100 に関して記述されたものと同様の材料を、デバイス 200 の対応する層において使用してよい。図 2 は、幾つかの層が如何にしてデバイス 100 の構造から省略され得るかの一例を提供するものである。

【0107】

図 1 及び図 2 において例証されている単純な層構造は、非限定的な例として提供されるものであり、本開示の実施形態は多種多様な他の構造に関連して使用され得ることが理解される。記述されている特定の材料及び構造は、事実上例示的なものであり、他の材料及び構造を使用してよい。機能的な OLED は、記述されている種々の層を様々な手法で組み合わせることによって実現され得るか、又は層は、設計、性能及びコスト要因に基づき、全面的に省略され得る。具体的には記述されていない他の層も含まれ得る。具体的に記述されているもの以外の材料を使用してよい。本明細書において提供されている例の多くは、単一材料を含むものとして種々の層を記述しているが、ホスト及びドーパントの混合物等の材料の組合せ、又はより一般的には混合物を使用してよいことが理解される。また、層は種々の副層を有してもよい。本明細書における種々の層に与えられている名称は、厳しく限定することを意図するものではない。例えば、デバイス 200 において、正孔輸送層 225 は正孔を輸送し、正孔を発光層 220 に注入し、正孔輸送層又は正孔注入層として記述され得る。一実施形態において、OLED は、カソード及びアノードの間に配置された「有機層」を有するものとして記述され得る。有機層は単層を含んでいてよく、又は、例えば図 1 及び図 2 に関して記述されている異なる有機材料の多層を更に含んでいてよい。

10

20

【0108】

参照によりその全体が組み込まれる Friendらの米国特許第 5,247,190 号において開示されているもののようなポリマー材料で構成される OLED (PLED) 等、具体的には記述されていない構造及び材料を使用してよい。更なる例として、単一の有機層を有する OLED が使用され得る。OLED は、例えば、参照によりその全体が組み込まれる Forrestらの米国特許第 5,707,745 号において記述されている通り、積み重ねられてよい。OLED 構造は、図 1 及び図 2 において例証されている単純な層構造から逸脱してよい。例えば、基板は、参照によりその全体が組み込まれる、Forrestらの米国特許第 6,091,195 号において記述されているメサ構造及び/又は Bulovicらの米国特許第 5,834,893 号において記述されているくぼみ構造等、アウトカップリングを改良するための角度のついた反射面を含み得る。

30

【0109】

別段の規定がない限り、種々の実施形態の層のいずれも、任意の適切な方法によって堆積され得る。有機層について、好ましい方法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6,013,982 号及び同第 6,087,196 号において記述されているもの等の熱蒸着、インクジェット、参照によりその全体が組み込まれる Forrestらの米国特許第 6,337,102 号において記述されているもの等の有機気相堆積 (OVPD)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 7,431,968 号において記述されているもの等の有機気相ジェットプリンティング (OVJP) による堆積を含む。他の適切な堆積法は、スピンコーティング及び他の溶液ベースのプロセスを含む。溶液ベースのプロセスは、好ましくは、窒素又は不活性雰囲気中で行われる。他の層について、好ましい方法は熱蒸着を含む。好ましいパターンニング法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6,294,398 号及び同第 6,468,819 号において記述されているもの等のマスク、冷間圧接を経由する堆積、並びにインクジェット及び有機蒸気ジェット印刷 (OVJP) 等の堆積法の幾つかに関連するパターンニングを含む。他の方法を使用してよい。堆積する材料は、特定の堆積法と適合するように修正され得る。例えば、分枝鎖状又は非分枝鎖状であり、好ましくは少なくとも 3 個の炭素を含有するアルキル及びアリール基等の置換基は、溶液プロセッシングを受ける能力を増強するために、低分子において使用され得る。20 個以上の炭素を有する置換基を使用してよく、3 ~ 20 個

40

50

の炭素が好ましい範囲である。非対称構造を有する材料は、対称構造を有するものよりも良好な溶液プロセス性を有し得、これは、非対称材料のほうが再結晶する傾向が低くなり得るからである。溶液プロセスングを受ける低分子の能力を増強するために、 dendrimer-置換基が使用され得る。

【0110】

本開示の実施形態に従って製作されたデバイスは、バリア層を更に含んでいてよい。バリア層の1つの目的は、電極及び有機層を、水分、蒸気及び/又はガス等を含む環境における有害な種への損傷性暴露から保護することである。バリア層は、基板、電極の上、下若しくは隣に、又はエッジを含むデバイスの任意の他の部分の上に堆積し得る。バリア層は、単層又は多層を含んでいてよい。バリア層は、種々の公知の化学気相堆積技術によって形成され得、単相を有する組成物及び多相を有する組成物を含み得る。任意の適切な材料又は材料の組合せをバリア層に使用してよい。バリア層は、無機若しくは有機化合物又は両方を組み込み得る。好ましいバリア層は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、米国特許第7,968,146号、PCT特許出願第PCT/US2007/023098号及び同第PCT/US2009/042829号において記述されている、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物を含む。「混合物」とみなされるためには、バリア層を含む前記のポリマー及び非ポリマー材料は、同じ反応条件下で及び/又は同時に堆積されるべきである。非ポリマー材料に対するポリマー材料の重量比は、95:5から5:95の範囲内となり得る。ポリマー材料及び非ポリマー材料は、同じ前駆体材料から作製され得る。一例において、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物は、ポリマーケイ素及び無機ケイ素から本質的になる。

10

20

【0111】

本明細書において記述されている種々の実施形態は、単なる一例としてのものであり、本発明の範囲を限定することを意図するものではないことが理解される。例えば、本明細書において記述されている材料及び構造の多くは、本発明の趣旨から逸脱することなく他の材料及び構造に置き換えることができる。したがって、特許請求されている通りの本発明は、当業者には明らかとなるように、本明細書において記述されている特定の例及び好ましい実施形態からの変形形態を含み得る。なぜ本発明が作用するのかについての種々の理論は限定を意図するものではないことが理解される。

30

【符号の説明】

【0112】

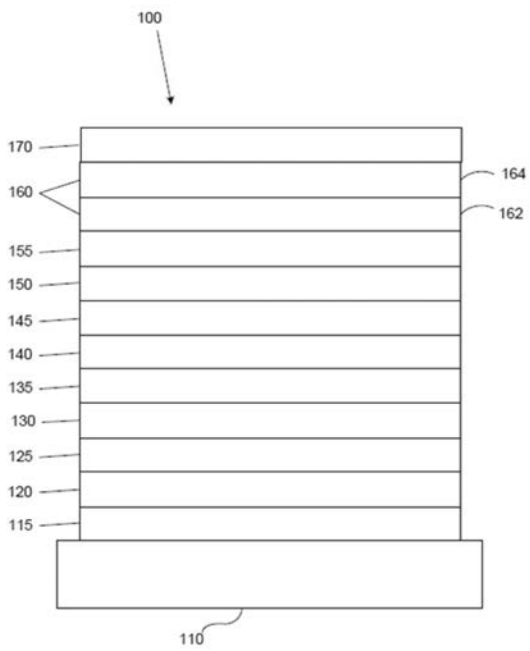
- 100 有機発光デバイス
- 110 基板
- 115 アノード
- 120 正孔注入層
- 125 正孔輸送層
- 130 電子ブロッキング層
- 135 発光層
- 140 正孔ブロッキング層
- 145 電子輸送層
- 150 電子注入層
- 155 保護層
- 160 カソード
- 162 第1の導電層
- 164 第2の導電層
- 170 バリア層
- 200 反転させたOLED、デバイス
- 210 基板
- 215 カソード
- 220 発光層

40

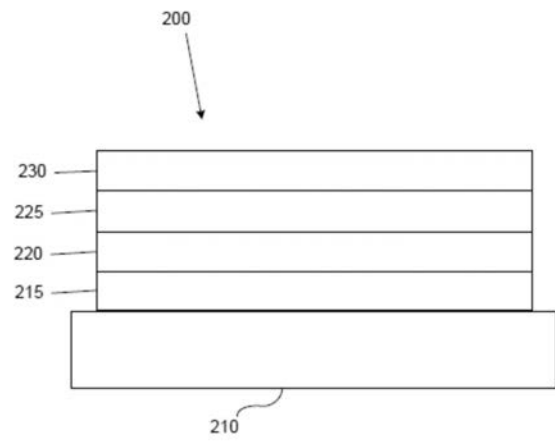
50

- 2 2 5 正孔輸送層
- 2 3 0 アノード

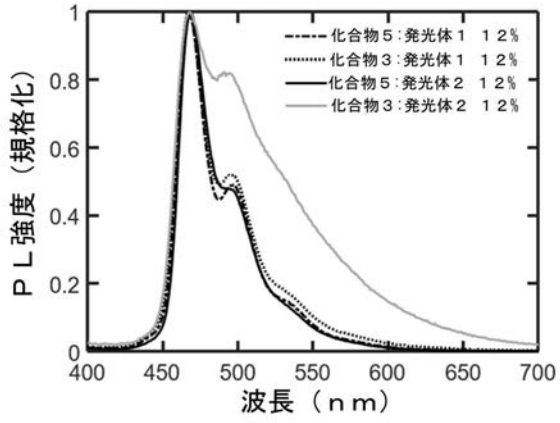
【 図 1 】



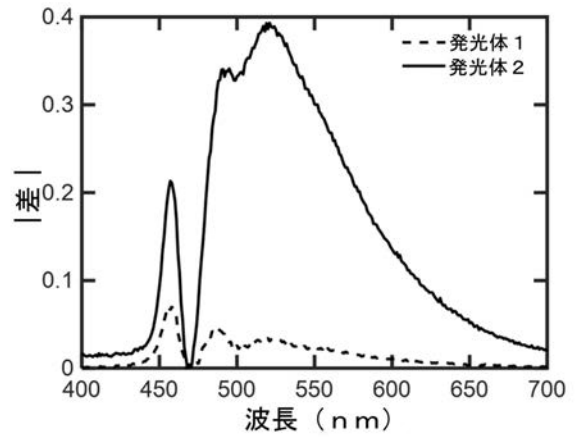
【 図 2 】



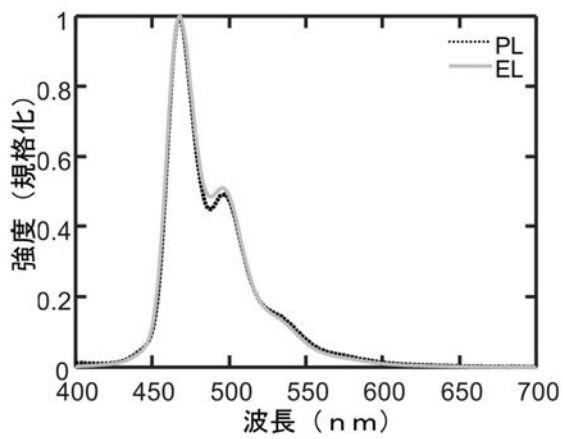
【 図 3 】



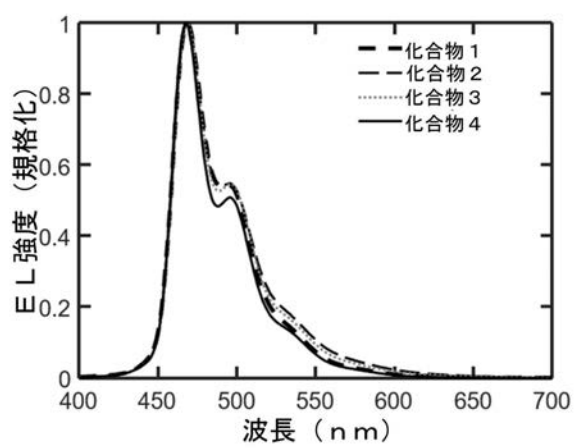
【 図 4 】



【 図 5 】



【 図 6 】



フロントページの続き

(72)発明者 ニコラス・ジェイ・トンブソン

アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
7 5

(72)発明者 チュン・リン

アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
7 5

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB03 CC04 CC06 CC22 DD53 DD59 DD64
DD66 DD67 DD68 DD69 FF19 FF20

【外国語明細書】

2021082801000001.pdf

2021082801000002.pdf

2021082801000003.pdf

2021082801000004.pdf