

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2013-527614

(P2013-527614A)

(43) 公表日 平成25年6月27日(2013.6.27)

(51) Int.Cl. F I テーマコード(参考)  
 HO 1 L 51/50 (2006.01) HO 5 B 33/14 B 3 K 1 O 7

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 35 頁)

(21) 出願番号 特願2013-510669 (P2013-510669)  
 (86) (22) 出願日 平成23年5月12日 (2011.5.12)  
 (85) 翻訳文提出日 平成24年12月27日 (2012.12.27)  
 (86) 国際出願番号 PCT/GB2011/000731  
 (87) 国際公開番号 WO2011/141709  
 (87) 国際公開日 平成23年11月17日 (2011.11.17)  
 (31) 優先権主張番号 1008091.9  
 (32) 優先日 平成22年5月14日 (2010.5.14)  
 (33) 優先権主張国 英国 (GB)

(71) 出願人 597063048  
 ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジ  
 ー リミテッド  
 イギリス・ケンブリッジシャー・CB2 3  
 ・6 DW・キャンボーン・キャンボーン・  
 ビジネス・パーク・(番地なし)・ビルデ  
 イング・2020  
 (71) 出願人 000002093  
 住友化学株式会社  
 東京都中央区新川二丁目27番1号  
 (74) 代理人 100146318  
 弁理士 岩瀬 吉和  
 (74) 代理人 100114188  
 弁理士 小野 誠

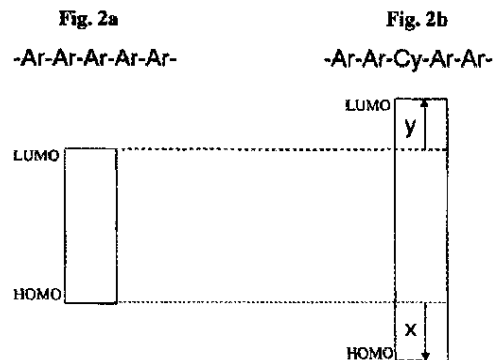
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 ポリマー、ポリマー組成物および有機発光装置

(57) 【要約】

ホストポリマーおよび発光ドーパントを含む発光組成物であって、前記ホストポリマーがポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含み、前記共役反復単位がそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、ならびに前記非共役反復単位が、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーの最高被占分子軌道レベルが真空準位から少なくとも0.1 eV離れ、ならびに/またはポリマーの最低空分子軌道レベルが真空準位に少なくとも0.1 eV近づくように、非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含む、発光組成物。

【選択図】 図2



## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

ホストポリマーおよび発光ドーパントを含む発光組成物であって、前記ホストポリマーがポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含み、前記共役反復単位がそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、ならびに前記非共役反復単位が、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーの最高被占分子軌道レベルが真空準位から少なくとも0.1 eV離れ、ならびに/またはポリマーの最低空分子軌道レベルが真空準位に少なくとも0.1 eV近づくように、非共役反復単位と結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含む組成物。

10

## 【請求項 2】

少なくとも1つの環原子が炭素原子である、請求項 1 に記載の発光組成物。

## 【請求項 3】

少なくとも部分的に飽和した環が炭素環であり、好ましくはシクロアルカンである、請求項 2 に記載の発光組成物。

## 【請求項 4】

少なくとも部分的に飽和した環がさらに少なくとも1つの環と縮合する、請求項 1 から 3 のいずれかに記載の発光組成物。

## 【請求項 5】

少なくとも1つの更なる環が芳香環である、請求項 4 に記載の発光組成物。

20

## 【請求項 6】

少なくとも1つの更なる環が非芳香環である、請求項 4 に記載の発光組成物。

## 【請求項 7】

非共役反復単位がアダマンタンを含む、請求項 6 に記載の発光組成物。

## 【請求項 8】

発光性ドーパントが蛍光ドーパントである、請求項 1 から 7 のいずれかに記載の発光組成物。

## 【請求項 9】

発光性ドーパントがリン光ドーパントである、請求項 1 から 7 のいずれかに記載の発光組成物。

30

## 【請求項 10】

発光ドーパントがホストポリマーと混合される、請求項 1 から 9 のいずれかに記載の発光組成物。

## 【請求項 11】

発光ドーパントがホストポリマーと結合する、請求項 1 から 9 のいずれかに記載の発光組成物。

## 【請求項 12】

発光ドーパントがポリマーの骨格またはポリマーの側鎖もしくは末端基に存在する、請求項 11 に記載の発光組成物。

## 【請求項 13】

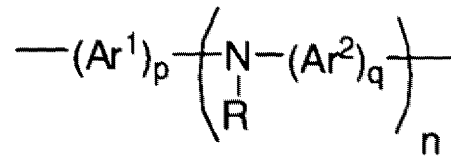
ポリマーが正孔輸送反復単位を含む、請求項 1 から 12 のいずれかに記載の発光組成物。

40

## 【請求項 14】

式 (V) の正孔輸送反復単位

## 【化 1】



(V)

(式中、Ar<sup>1</sup>およびAr<sup>2</sup>は各出現において置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基から独立して選択され、nは1以上であり、好ましくは1または2であり、RはHまたは置換基であり、好ましくは置換基であり、pおよびqはそれぞれ独立して1、2または3であり、式(V)のアリールまたはヘテロアリール基のいずれかは直接結合または2価結合基により結合してもよい)である、請求項13に記載の発光組成物。

10

## 【請求項15】

ポリマーが電子輸送反復単位を含む、請求項1から14のいずれかに記載の発光組成物。

## 【請求項16】

電子輸送反復単位が式(II)を含む



(式中、Ar<sup>1</sup>およびAr<sup>2</sup>は請求項14に定義される通りであり、rは少なくとも1であり、好ましくは1-3であり、Hetは置換されてもよく高い電子親和力をもつヘテロアリール基を表し、Ar<sup>1</sup>、Ar<sup>2</sup>およびHetは独立して各出現において置換されてもよい)、請求項15に記載の発光組成物。

20

## 【請求項17】

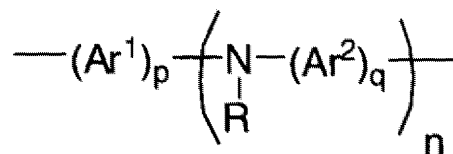
アノード、カソード、およびアノードとカソード間の発光層を含む有機発光装置であって、前記発光層が請求項1から16のいずれかに記載の発光組成物を含む装置。

## 【請求項18】

ポリマーの骨格に共役反復単位、非共役反復単位およびアミン反復単位を含むポリマーであって、前記共役反復単位はそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、前記非共役反復単位は、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーの最高被占分子軌道レベルが真空準位から少なくとも0.1eV離れ、ならびに/またはポリマーの最低空分子軌道レベルが真空準位に少なくとも0.1eV近づくように、非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を含む少なくとも部分的に飽和した環を含み、ならびに前記アミン反復単位は式(V)の反復単位を含む

30

## 【化 2】



(V)

(式中、Ar<sup>1</sup>およびAr<sup>2</sup>は各出現において置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基から独立して選択され、nは1以上であり、好ましくは1または2であり、RはHまたは置換基であり、好ましくは置換基であり、pおよびqはそれぞれ独立して1、2または3であり、式(V)のアリールまたはヘテロアリール基のいずれかは直接結合または2価結合基により結合してもよい)ポリマー。

40

## 【請求項19】

アノード、カソード、およびアノードとカソード間の発光層を含む少なくとも1つの有

50

機層を含む有機発光装置であって、前記有機層の少なくとも1つが請求項18に記載のポリマーを含む装置。

【請求項20】

ポリマーが装置の発光層における発光ポリマーである、請求項19に記載の有機発光装置。

【請求項21】

有機層の1つが正孔輸送層であり、ポリマーが正孔輸送層の正孔輸送ポリマーである、請求項19に記載の有機発光装置。

【請求項22】

ポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含むポリマーのHOMO-LUMOBANDギャップを調整するための非共役反復単位の使用であって、前記共役反復単位がそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、前記非共役反復単位が非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、前記使用により、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーのHOMOレベルを真空準位から少なくとも0.1 eV遠ざけ、ならびに/またはポリマーのLUMOレベルを真空準位に少なくとも0.1 eV近づける、非共役反復単位の使用。

10

【請求項23】

ポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含むポリマーのバンドギャップを調整する方法であって、前記共役反復単位がそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、前記非共役反復単位が非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、前記非共役反復単位が存在しないポリマーのバンドギャップより少なくとも0.1 eV大きいポリマーの最小標的バンドギャップを決定する工程、ならびに非共役単位を含む第1モノマーおよび共役単位を含む第2モノマーを含む重合混合物を重合する工程を含む方法であって、第1モノマーと第2モノマーの割合が最小標的バンドギャップを有するポリマーを形成するように選択される方法。

20

【請求項24】

ホストポリマーおよび発光ドーパントを含む発光組成物であって、前記ホストポリマーがポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含み、前記共役反復単位がそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、前記非共役反復単位が非共役反復単位と結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、前記環原子の少なくとも1つが炭素原子である発光組成物。

30

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、特に有機発光装置で用いる電荷移動ポリマーおよび発光ポリマーおよびポリマー組成物に関する。

【背景技術】

40

【0002】

活性有機材料を含む電子装置は、有機発光ダイオード、有機光応答装置（特に有機光起電装置および有機光センサー）、有機トランジスタおよびメモリアレイ装置などの装置で使用するためにますます注目を集めている。有機材料を含む装置は、低重量、低消費電力および柔軟性などの利点を与える。さらに、可溶性有機材料の使用により、装置製造において溶解処理、例えばインクジェットプリンティングおよびスピンコーティングを用いることができる。

【0003】

図1を参照すると、有機発光装置(OLED)は、アノード2、カソード4およびアノードとカソードとの間に発光材料を含む有機発光層3を担持する基板1を含んでもよい。

50

## 【0004】

装置の操作中、正孔はアノード2を通過して装置内に注入され、電子はカソード4を通過して注入される。発光材料の最高被占分子軌道(HOMO)の正孔および最低空分子軌道(LUMO)の電子は、発光層を組み合わせ、そのエネルギーを光として放出する励起子を形成する。

## 【0005】

適切な発光材料は、小分子、ポリマー材料および dendrimer 材料を含む。層3で用いる適切な発光ポリマーは、ポリ(アリーレンピニレン)、例えばポリ(p-フェニレンピニレン)、およびポリアリーレン、例えばポリフルオレンを含む。

## 【0006】

発光層は、半導体母材および発光ドーパントを含んでもよく、エネルギーは該母材から発光ドーパントに移動する。例えば、「J. Appl. Phys. 65, 3610, 1989」は、蛍光性発光ドーパント(即ち、一重項励起子の崩壊により光が放出される発光材料)でドーパされた母材を開示し、「Appl. Phys. Lett., 2000, 77, 904」は、リン光性発光ドーパント(即ち、三重項励起子の崩壊により光が放出される発光材料)でドーパされた母材を開示している。

10

## 【0007】

幅広い材料が母材としての用途に知られており、「小分子」材料、例えばトリス-(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム(「Alq3」)、および非共役ポリマー、例えばポリビニルカルバゾール(「PVK」)を含む。

20

## 【0008】

共役ポリマー(即ち、ポリマー骨格の少なくとも幾つかの隣接反復単位が互いに共役するポリマー)も母材として使用してよい。このような共役ポリマーは、多数の有利な性質、例えば溶解度(スピンコーティングまたはインクジェットプリンティングなどの方法を含む溶液コーティングまたはプリンティング技術により該材を堆積できる)、および高伝導度を有し得る。

## 【0009】

ホストとして有効に機能するために、母材の関連する励起状態エネルギーレベルが、母材と共に使用される発光ドーパントのレベル(例えば、蛍光性エミッタの一重項励起状態エネルギーレベル $S_1$ 、およびリン光性エミッタの三重項励起状態エネルギーレベル $T_1$ )より高いことが必要である。しかしながら、共役ポリマーの隣接反復単位間の共役は、これらの反復単位が由来するモノマーの励起状態エネルギーレベルと比較して、該ポリマーの励起状態エネルギーレベルを低下させる効果を有する。

30

## 【0010】

国際公開第2005/013386号は、ホストポリマー材料および発光金属錯体を含む有機発光装置を開示し、該ポリマー材料は非平面反復単位または部分的もしくは完全非共役反復単位を含み得る。

## 【0011】

「Li et al, Thin Solid Films 2006, Volume 515, Issue 4, pages 2686 - 2691」は、フルオレン反復単位およびアダマンタン反復単位を含む青色発光ポリマーを開示している。大きなアダマンタン単位は、フルオレン鎖間の相互作用を減らし且つポリマーを含む装置の青色安定性および電流効率を高めるために提供される。

40

## 【0012】

「Macromolecules 1998, 31, 1099 - 1103」は、フルオレン環の2-および7-位を介して結合する9,9-ジヘキシルフルオレン反復単位ならびにフェニル基を介して結合する9,9-ジフェニルフルオレン反復単位を含む青色発光ポリマーを開示している。

## 【0013】

「Polymer 2007(48)p7087」は、多置換ペンタフェニレン部分を

50

含むポリ(アリーレンエーテル)を開示している。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0014】

【特許文献1】国際公開第2005/013386号

【非特許文献】

【0015】

【非特許文献1】J. Appl. Phys. 65, 3610, 1989

【非特許文献2】Appl. Phys. Lett., 2000, 77, 904

【非特許文献3】Li et al, Thin Solid Films 2006, Volume 515, Issue 4, pages 2686 - 2691 10

【非特許文献4】Macromolecules 1998, 31, 1099 - 1103

【非特許文献5】Polymer 2007(48) p7087

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0016】

第1実施態様において、本発明は、ホストポリマーおよび発光ドーパントを含む発光組成物であって、該ホストポリマーはポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含み、共役反復単位はそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、ならびに非共役反復単位は、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーの最高被占分子軌道レベルが真空準位から少なくとも0.1 eV離れ、ならびに/またはポリマーの最低空分子軌道レベルが真空準位に少なくとも0.1 eV近づくように、非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含む発光組成物を提供する。 20

【0017】

少なくとも1つの環原子は炭素原子でもよい。

【0018】

少なくとも部分的に飽和した環は炭素環式でもよく、好ましくはシクロアルカンである。

【0019】

少なくとも部分的に飽和した環はさらに少なくとも1つの環と縮合してもよい。 30

【0020】

少なくとも1つの更なる環は芳香環であってもよい。

【0021】

少なくとも1つの更なる環は非芳香環であってもよい。

【0022】

非共役反復単位はアダマンタンを含んでもよい。

【0023】

発光ドーパントは蛍光性ドーパントであってもよい。

【0024】

発光ドーパントはリン光性ドーパントであってもよい。 40

【0025】

発光ドーパントはホストポリマーと混合してもよい。

【0026】

発光ドーパントはホストポリマーと結合してもよい。

【0027】

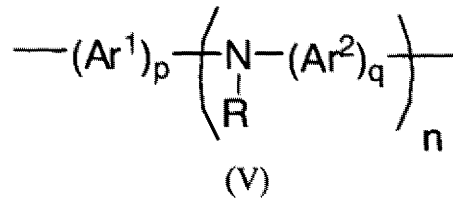
発光ドーパントはポリマーの骨格またはポリマーの側鎖もしくは末端基に存在してもよい。 50

【0028】

ポリマーは正孔輸送反復単位を含んでもよく、式(V)の反復単位を含んでもよく、

【0029】

【化1】



式中、各出現における  $\text{Ar}^1$  および  $\text{Ar}^2$  は置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基から独立して選択され、 $n$  は1以上であり、好ましくは1または2であり、 $R$  はHまたは置換基であり、好ましくは置換基であり、 $p$  および  $q$  はそれぞれ独立して1、2または3であり、式(V)のアリールまたはヘテロアリール基のいずれかは直接結合または2価結合基により結合してもよい。

10

【0030】

ポリマーは電子輸送反復単位を含んでもよく、式(II)の反復単位を含んでもよく、  
 $\text{---}(\text{Ar}^1)_r\text{---Het---}(\text{Ar}^2)_r\text{---}$  (II)

式中、 $\text{Ar}^1$  および  $\text{Ar}^2$  は上記の通りであり、 $r$  は少なくとも1であり、好ましくは1-3であり、 $\text{Het}$  は置換されてもよく高い電子親和力をもつヘテロアリール基を表し、 $\text{Ar}^1$ 、 $\text{Ar}^2$  および  $\text{Het}$  は各出現において独立して置換されてもよい。

【0031】

第2実施態様において、本発明は、アノード、カソード、およびアノードとカソード間の発光層を含む有機発光装置を提供し、該発光層は第1実施態様に従う発光組成物を含む。

20

【0032】

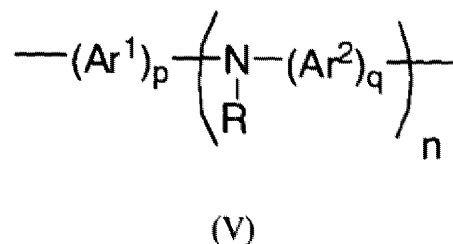
第3実施態様において、本発明は、ポリマーの骨格に共役反復単位、非共役反復単位およびアミン反復単位を含むポリマーであって、

共役反復単位はそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、非共役反復単位は、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーの最高被占分子軌道レベルが真空準位から少なくとも0.1 eV 離れ、ならびに/またはポリマーの最低空分子軌道レベルが真空準位に少なくとも0.1 eV 近づくように、非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を含む少なくとも部分的に飽和した環を含み、アミン反復単位は式(V)の反復単位を含み、

30

【0033】

【化2】



式中、各出現における  $\text{Ar}^1$  および  $\text{Ar}^2$  は、置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基から独立して選択され、 $n$  は1以上であり、好ましくは1または2であり、 $R$  はHまたは置換基であり、好ましくは置換基であり、 $p$  および  $q$  はそれぞれ独立して1、2または3であり、式(V)のアリールまたはヘテロアリール基のいずれかは直接結合または2価結合基により結合してもよいポリマーを提供する。

40

【0034】

第4実施態様において、本発明は、アノード、カソード、およびアノードとカソード間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を含む有機発光装置を提供し、有機層の少なくとも1つは第3実施態様に従うポリマーを含む。

50

## 【0035】

第4実施態様に従って、ポリマーは装置の発光層における発光ポリマーであってもよい。この場合、有機層の1つは正孔輸送層であり、ポリマーは正孔輸送層の正孔輸送ポリマーであってもよい。

## 【0036】

第5実施態様において、本発明は、ポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含むポリマーのHOMO-LUMOバンドギャップを調整するための非共役反復単位の使用であって、

共役反復単位はそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、非共役反復単位は非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、該使用により、非共役反復単位が存在しないポリマーと比較して、ポリマーのHOMOレベルを真空準位から少なくとも0.1 eV遠ざけ、ならびに/またはポリマーのLUMOレベルを真空準位に少なくとも0.1 eV近づける、非共役反復単位の使用を提供する。

10

## 【0037】

第6実施態様において、本発明は、ポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含むポリマーのバンドギャップを調整する方法であって、共役反復単位は、それに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、非共役反復単位は非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、非共役反復単位が存在しないポリマーのバンドギャップより少なくとも0.1 eV大きいポリマーの最小標的バンドギャップを決定する工程、ならびに非共役単位を含む第1モノマーおよび共役単位を含む第2モノマーを含む重合混合物を重合する工程を含む方法であって、第1モノマーと第2モノマーの割合が最小標的バンドギャップを有するポリマーを形成するように選択される方法を提供する。

20

## 【0038】

第7実施態様において、本発明は、ホストポリマーおよび発光ドーパントを含む発光組成物であって、該ホストポリマーはポリマーの骨格に共役反復単位および非共役反復単位を含み、共役反復単位はそれに結合する反復単位間に少なくとも1つの共役経路を提供し、非共役反復単位は非共役反復単位に結合する反復単位間の任意の共役経路を遮断する少なくとも1つの環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環を含み、少なくとも1つの環原子は炭素原子である発光組成物を提供する。

30

## 【0039】

第3、第5、第6および第7実施態様に記載したポリマーは、第1実施態様に関して記載したポリマーのいずれかの特性を有してもよい。

## 【0040】

本発明は図面を参照してより詳細に説明される。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0041】

【図1】有機発光装置を解説する。

【図2a】比較ポリマーのHOMO-LUMOギャップを解説する。

40

【図2b】本発明の実施形態に従うポリマーのHOMO-LUMOギャップを解説する。

【発明を実施するための形態】

## 【0042】

非共役環状スペーサー単位を含むポリマーは、発光材料として、または発光層の発光ドーパント用の母材、アノードと発光層との間の正孔輸送層で用いる正孔輸送材料、もしくはカソードと発光層との間の電子輸送層で用いる電子輸送材料として使用してもよい。

## 【0043】

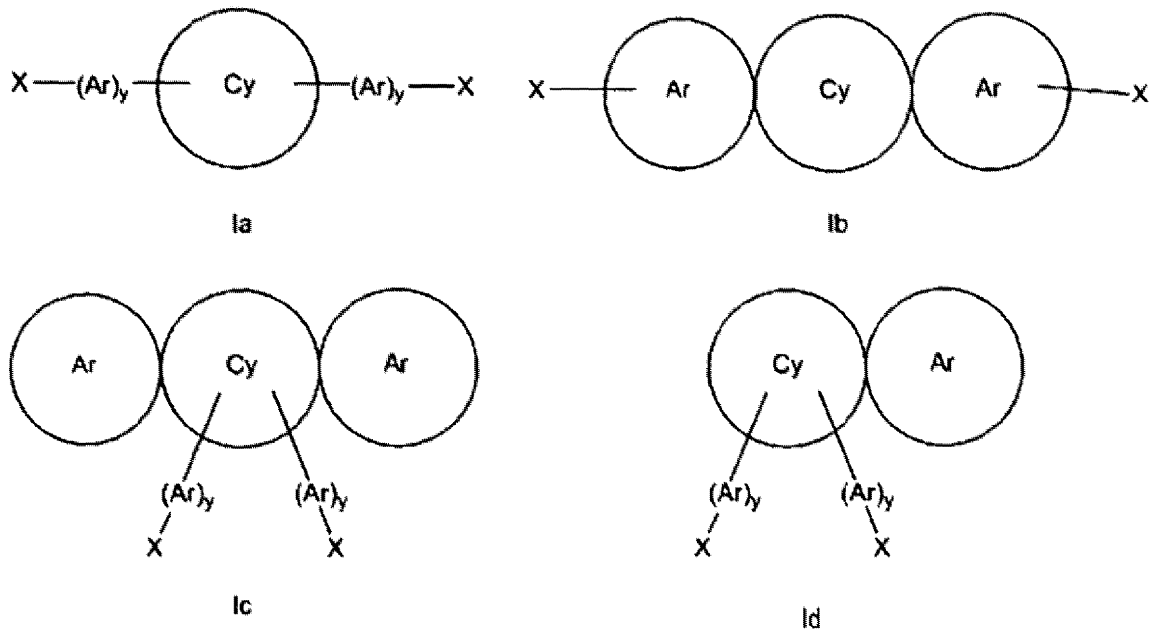
環状非共役単位

ポリマーの環状非共役反復単位を形成するのに適した例示モノマーは、Ia、Ib、IcおよびIdモノマーを含み、

50

【 0 0 4 4 】

【 化 3 】



10

式中、

Ar は置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基であり、好ましくは置換されてもよいフェニルであり、y は 0 または整数であり、好ましくは 0 または 1 であり、Cy は、芳香環を含まず且つ非共役反復単位に結合した反復単位間の任意の共役経路を遮断する環原子を有する少なくとも部分的に飽和した環系であり、該環原子の少なくとも 1 つは炭素原子であり、X は重合反応に関与できる脱離基であり、特に金属挿入重合用の脱離基であり、例えば臭素、ヨウ素、ボロン酸もしくはエステルまたはスルホン酸もしくはエステルである。

【 0 0 4 5 】

Ar は単環または縮合アリールもしくはヘテロアリール基でありうる。

【 0 0 4 6 】

Cy は単環、縮合またはスピロ環の環系でありうる。

【 0 0 4 7 】

具体的なモノマーは以下のモノマー 1 - 28 を含む。

【 0 0 4 8 】

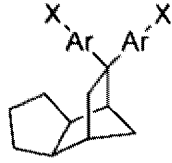
20

30

【化 4】



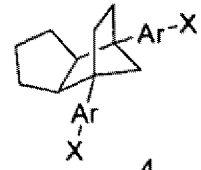
1



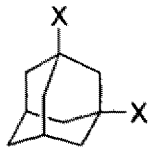
2



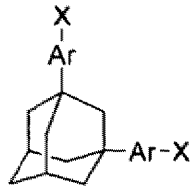
3



4



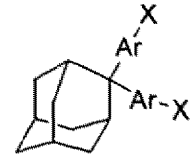
5



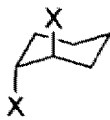
6



7



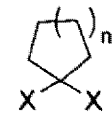
8



9

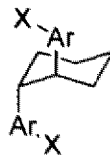


10

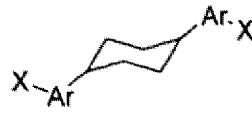


n = 1-10

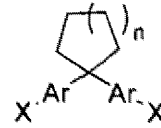
11



12



13



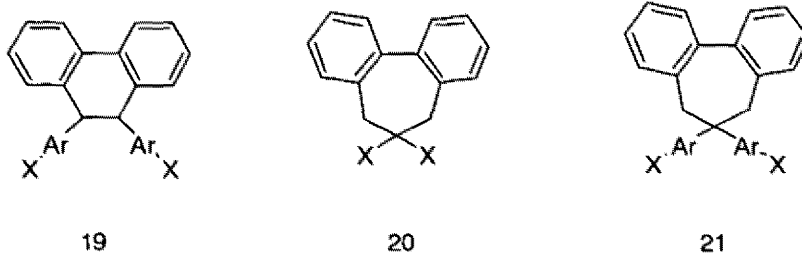
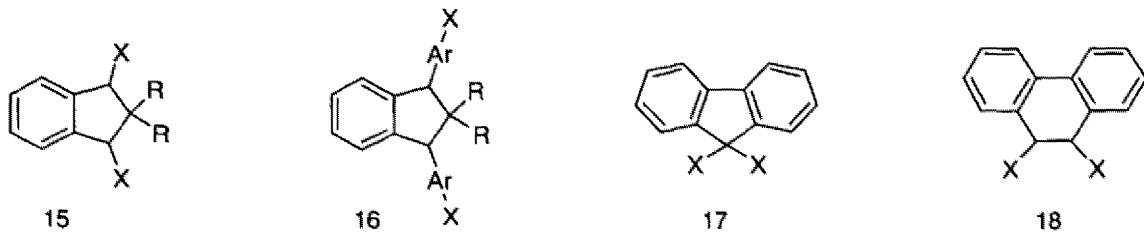
n = 1-10

14

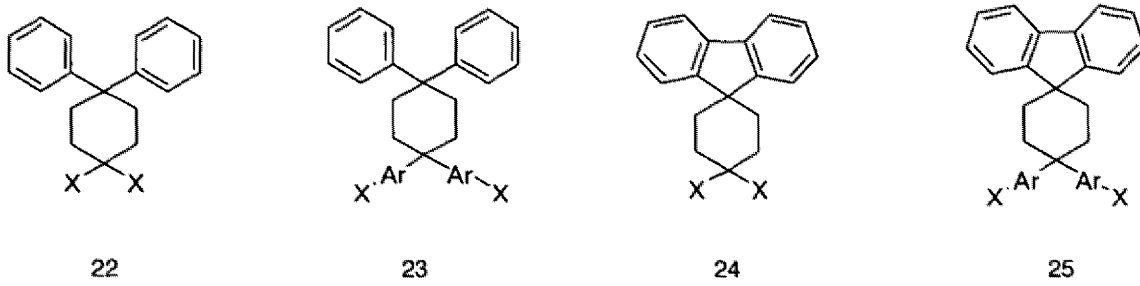
10

20

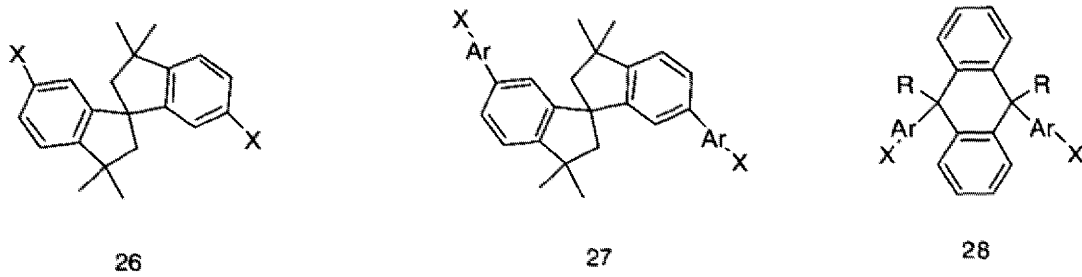
30



10



20

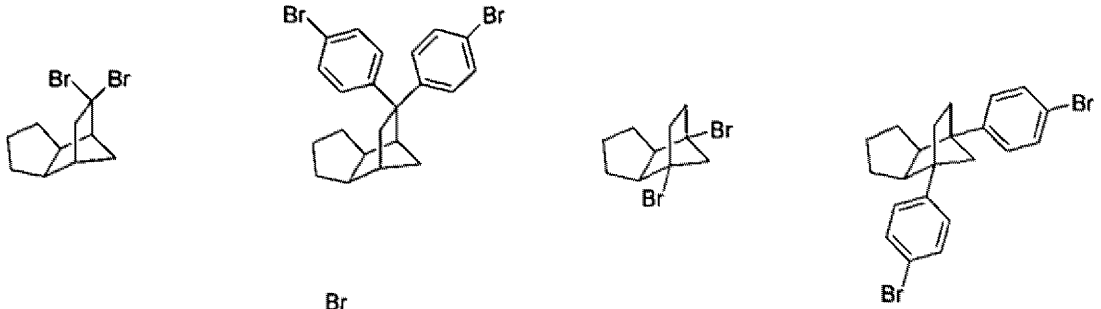


30

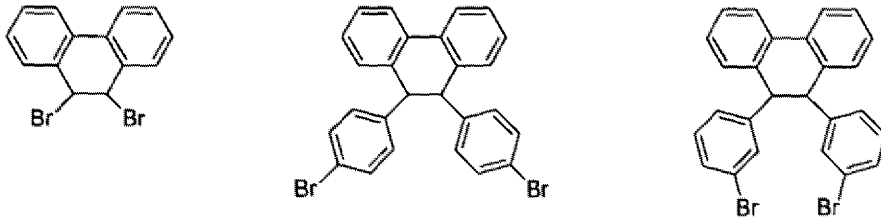
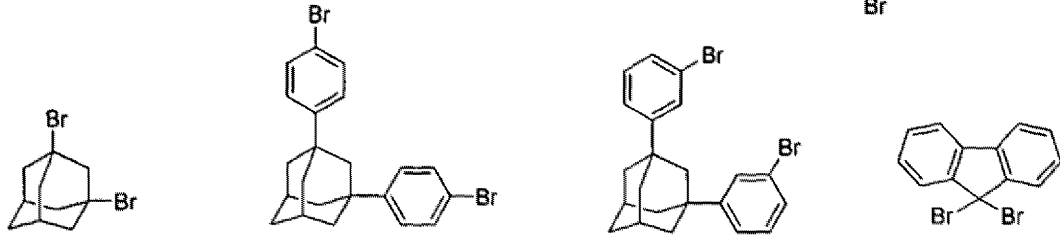
特定の置換基 X を有するモノマーの例は以下に解説する。

【 0 0 4 9 】

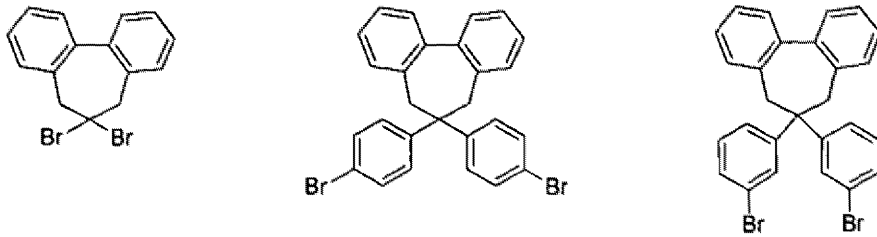
【化 5】



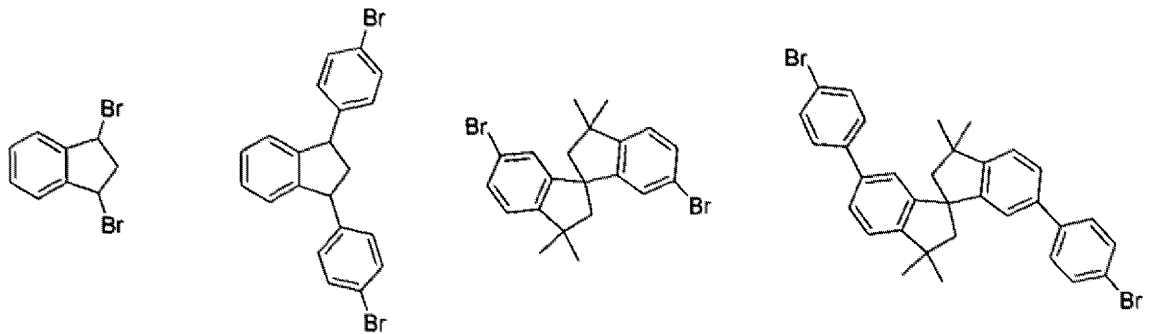
10



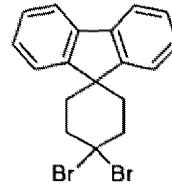
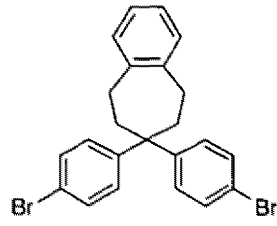
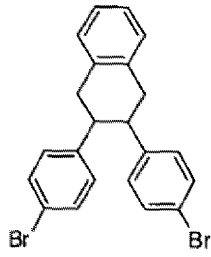
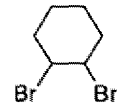
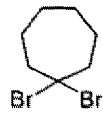
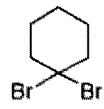
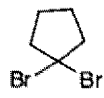
20



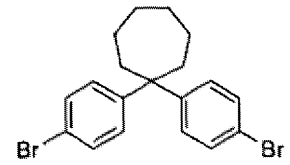
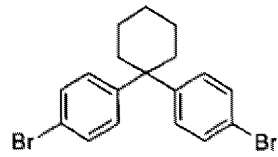
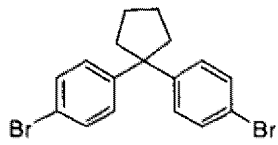
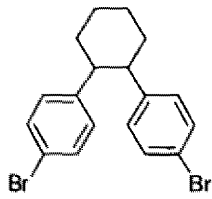
30



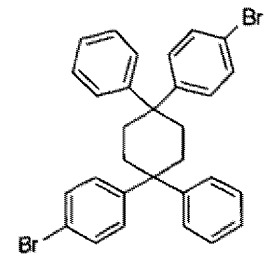
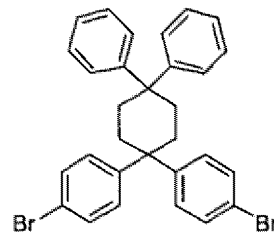
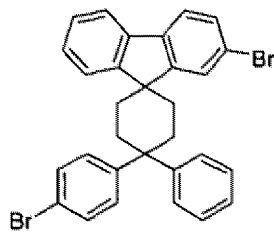
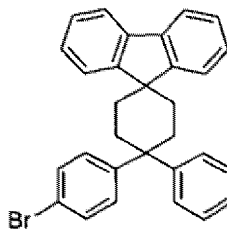
40



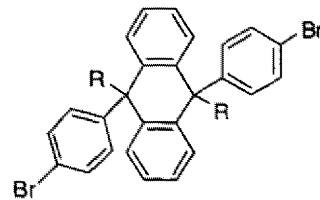
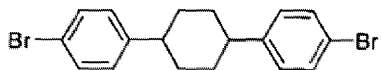
10

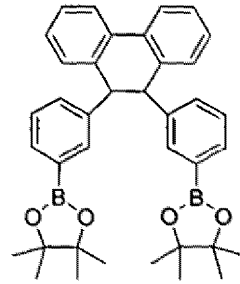
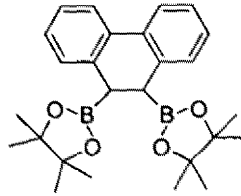
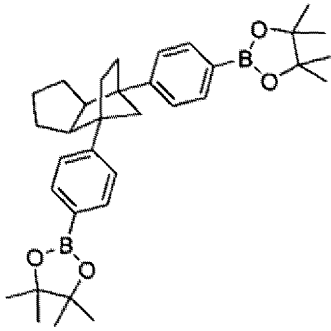
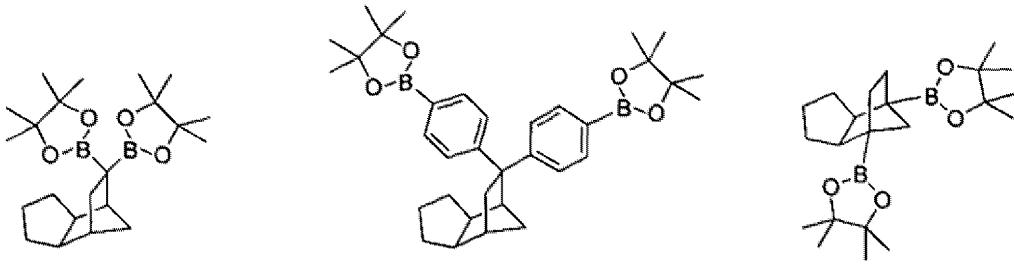


20

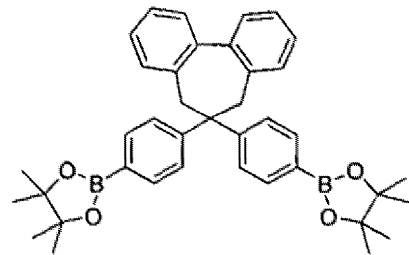
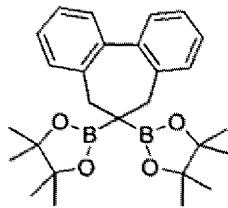
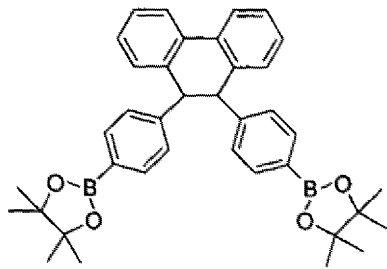


30

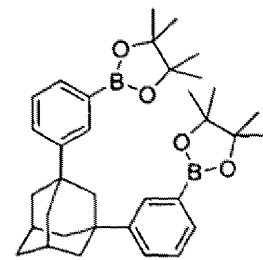
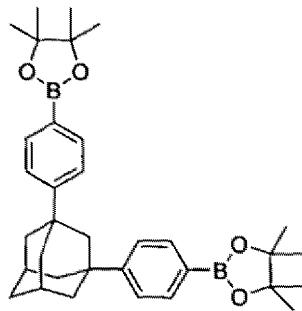
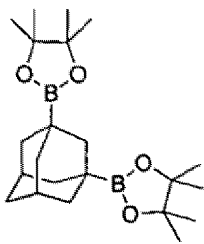




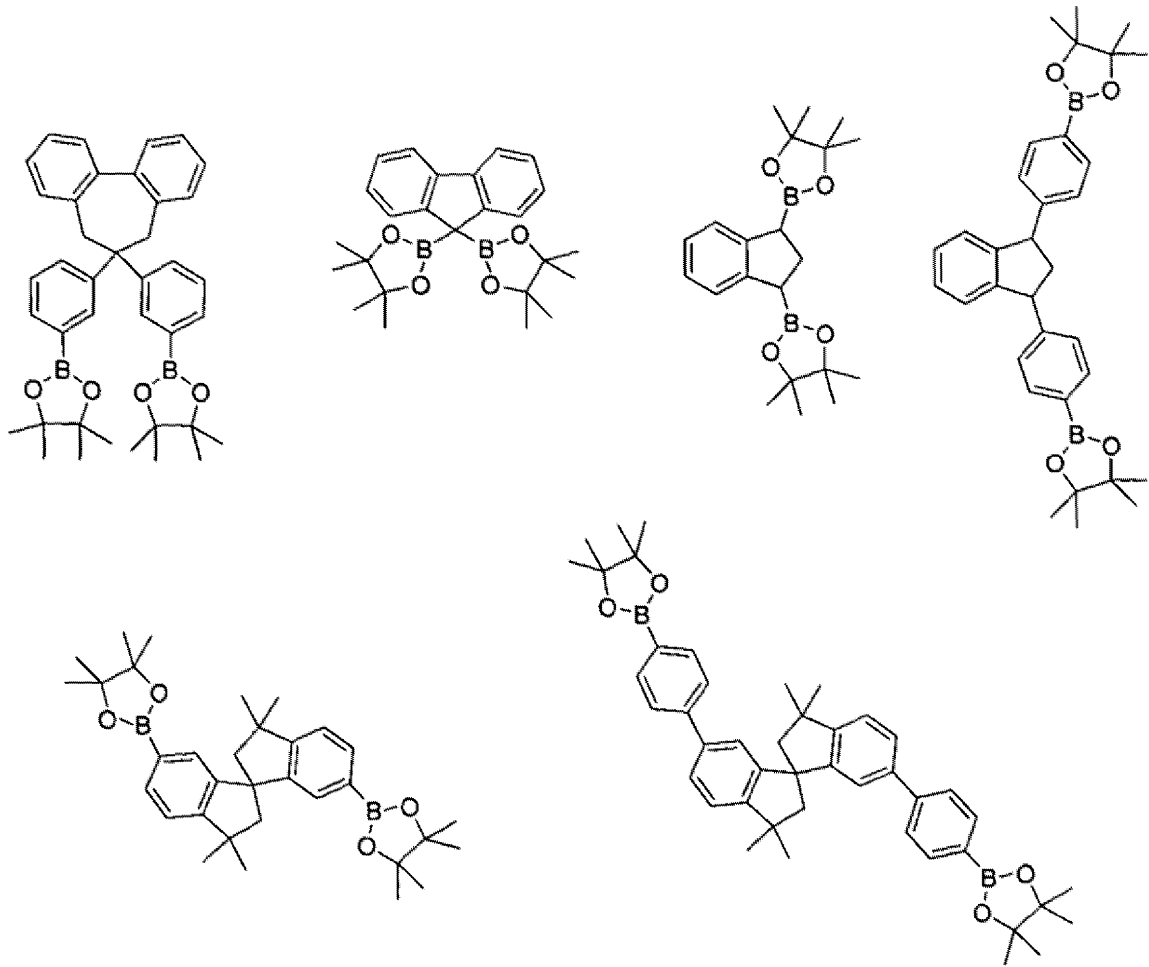
10



20

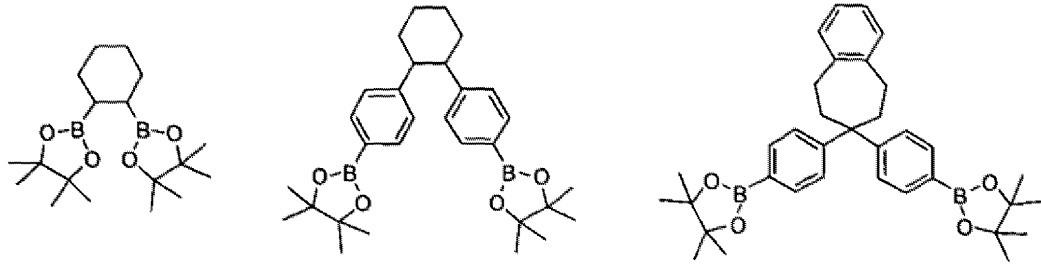


30

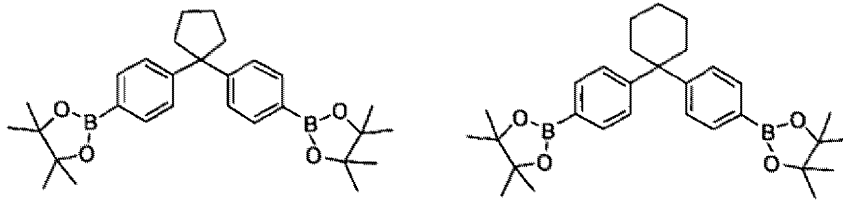


10

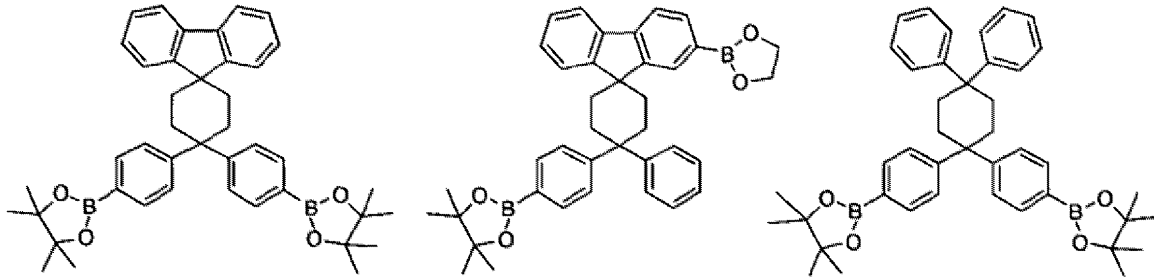
20



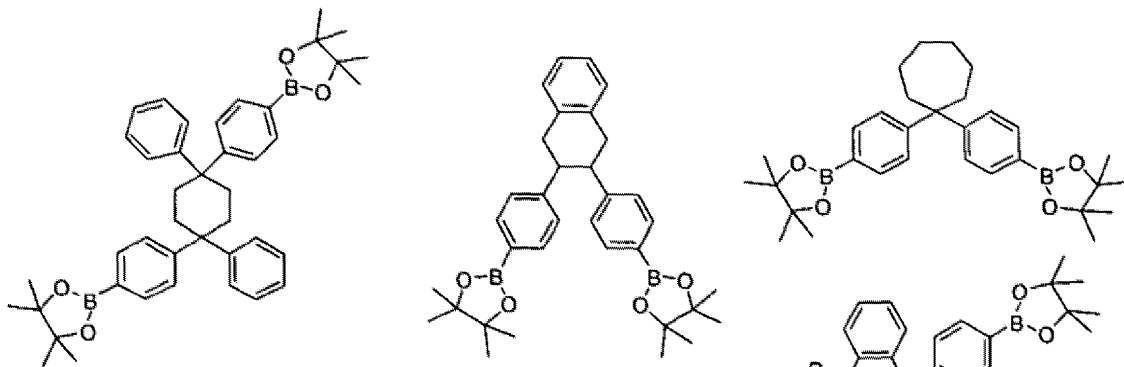
10



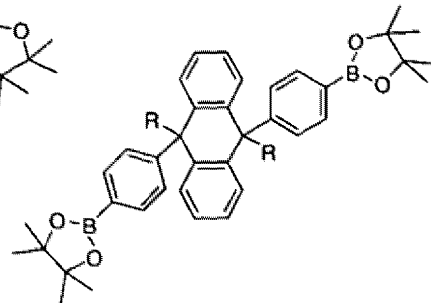
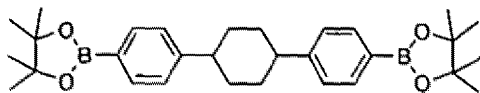
20



30



40



二臭化物およびジエステルは当技術分野で公知の標準的手法により合成してもよい。例えば、1,3-ジブromo-アダマンタンは4-トリメチルシリルブromoベンゼンとフリーデルクラフツ条件下で反応させ、ジアリールアダマンチルプロマイドを得た。

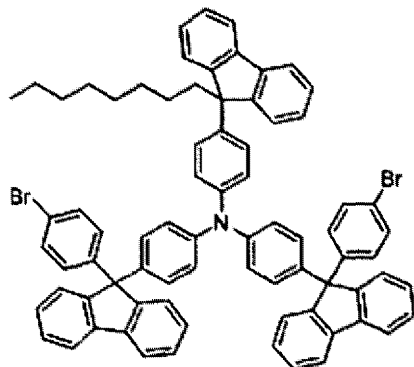
【0050】

該ポリマーは下記のモノマーに由来する非共役反復単位を含まなくてもよい。

【0051】

50

## 【化 6】



10

重合の際に、環状非共役反復単位の1またはそれ以上の環炭素原子は任意の隣接共役反復単位間でポリマーの骨格に沿って共役遮断 (conjugation break) を形成し; 換言すれば、環状非共役単位は、結合し得る共役反復単位間に共役経路を提供しない (特に、交互飽和および不飽和結合の経路、例えば交互一重および二重結合)。

## 【0052】

隣接反復単位間の全経路が同一の環原子を通過する場合、その環原子は共役の遮断を提供し得る。あるいは、隣接反復単位間に2以上の経路が存在し、異なる経路は全て同一の環原子を通過しない場合、隣接反復単位間に共役経路が存在しないように異なる環原子が提供されてもよい。

20

## 【0053】

環状非共役単位は飽和であってもよく、または該単位が上記のようにポリマーの骨格に沿って共役の遮断を提供するという条件で、1またはそれ以上の不飽和炭素-炭素結合を含んでもよい。例えば、環状非共役反復単位は、上記で解説したように15~28単位までの芳香環を含んでもよい。

## 【0054】

しかしながら、環状非共役単位それ自体は拡張共役を含まないのが好ましいと理解され、2以上の芳香環を含む場合、2またはそれ以上の芳香環間で共役の遮断が存在することが好ましい。

30

## 【0055】

該ポリマーは異なる環状非共役反復単位を含んでもよい。

## 【0056】

特定のX置換位置は上記で解説したが、得られる環状非共役単位が結合し得る共役反復単位間に共役経路を提供しないという条件で、X基はモノマーのどこにでも位置してよいと理解される。

## 【0057】

環状非共役反復単位のArおよびCy基は、1またはそれ以上の置換基で置換されてもよい。任意の置換基には、置換されてもよいアルキル基を含み、該アルキル基の1またはそれ以上の非隣接C原子は、O、S、置換N、C=Oおよび-COO-、ならびに置換されてもよいアリールまたはヘテロアリールで置換されてもよい。環状基がアルキルで置換される場合、アルキル基の任意の置換基はアリール、ヘテロアリールおよびFを含む。好ましい置換基はアルキルである。

40

## 【0058】

共役反復単位

例示共役反復単位は、置換されてもよいポリアリーレンまたはポリヘテロアリーレン、例えば置換されてもよいポリフルオレン、特に2,7-結合したフルオレン反復単位を含むポリマー、ポリインデノフルオレン、特に2,7-結合したポリインデノフルオレン、およびポリフェニレン、特にポリ-1,4-フェニレンを含む。このようなポリマーは、例えば「Adv. Mater. 2000 12(23)1737-1750」およびその

50

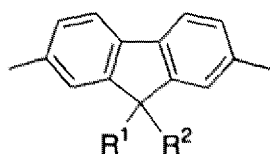
中の参照文献に開示されている。これらの反復単位の例示置換基は、アルキル、アルコキシ、アルキルチオ、ジアルキルアミノ、ならびに置換されてもよいアリールおよびヘテロアリール基を含む。

【0059】

特に好ましい共反復 (co-repeat) 単位は置換されてもよいフルオレン、例えば式IVの反復単位を含み、

【0060】

【化7】



(IV)

式中、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は独立してHまたは置換基であり、式中、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は結合して環を形成してもよい。

【0061】

R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、水素、置換されてもよいアルキルから成る群から選択されてもよく、アルキル基の1またはそれ以上の非隣接C原子はO、S、置換N、C=Oおよび-COO-、ならびに置換されてもよい(Ar<sup>3</sup>)<sub>r</sub>で置換されてもよく、式中、Ar<sup>3</sup>は各出現においてアリールまたはヘテロアリールから独立して選択され、rは各出現において独立して少なくとも1であり、1、2または3であってもよい。

【0062】

R<sup>1</sup>またはR<sup>2</sup>がアルキルを含む場合、アルキル基の任意置換基は、F、CN、ニトロ、および1またはそれ以上のR<sup>4</sup>基で置換されてもよいアリールまたはヘテロアリールを含み、個々のR<sup>4</sup>は、独立して、1またはそれ以上の非隣接C原子がO、S、置換N、C=Oおよび-COO-で置換されてもよいアルキルであり、アルキル基の1またはそれ以上のH原子はFで置換されてもよい。

【0063】

R<sup>1</sup>またはR<sup>2</sup>がアリールまたはヘテロアリールを含む場合、個々のアリールまたはヘテロアリール基は独立して置換されてもよい。アリールまたはヘテロアリール基の好ましい任意の置換基は、下記から成る1またはそれ以上の置換基R<sup>3</sup>を含み、アルキル(1またはそれ以上の非隣接C原子はO、S、置換N、C=Oおよび-COO-で置換されてもよく、アルキル基の1またはそれ以上のH原子は、F、または1もしくはそれ以上のR<sup>4</sup>基で置換されてもよいアリールもしくはヘテロアリールで置換されてもよい)、1またはそれ以上のR<sup>4</sup>基で置換されてもよいアリールもしくはヘテロアリール、NR<sup>5</sup><sub>2</sub>、OR<sup>5</sup>、SR<sup>5</sup>、ならびにフッ素、ニトロおよびシアノ(式中、個々のR<sup>5</sup>はアルキルおよび1またはそれ以上のアルキル基で置換されてもよいアリールまたはヘテロアリールから成る群から独立して選択される)。

【0064】

式(IV)の反復単位における置換Nは、存在する場合、各出現において独立してNR<sup>5</sup>またはNR<sup>6</sup>であってもよく、式中、R<sup>6</sup>はアルキルまたは置換されてもよいアリールもしくはヘテロアリールである。アリールまたはヘテロアリール基R<sup>6</sup>の任意置換基はR<sup>4</sup>またはR<sup>5</sup>から選択されてもよい。

【0065】

フルオレン単位の任意置換基は、置換基R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>以外で、1またはそれ以上の非隣接C原子が、O、S、置換N、C=Oおよび-COO-、置換されてもよいアリール、置換されてもよいヘテロアリール、フッ素、シアノおよびニトロで置換されてもよいアルキルから成る群から選択されるのが好ましい。

10

20

30

40

50

## 【0066】

1つの好ましい配置において、 $R^1$ および $R^2$ の少なくとも1つは置換されてもよい $C_{1-20}$ アルキルまたは置換されてもよいアリール基、特に1またはそれ以上の $C_{1-20}$ アルキル基で置換されるフェニルを含む。

## 【0067】

共役反復単位は電子輸送官能基を提供してもよい。典型的な電子輸送材料は、強い電子親和力(3 eV以上、好ましくは3.2 eV以上)および高いイオン化ポテンシャル(5.8 eV以上)をもつポリマーを提供する。適切な電子輸送基は、例えば「Shirota and Kagayama, Chem. Rev. 2007, 107, 953-1010」に開示されている基を含む。

10

## 【0068】

共役電子輸送基は、式(II)を含む基を含み、



式中、 $Ar^1$ および $Ar^2$ は上記で定義した通りであり、 $r$ は少なくとも1であり、好ましくは1~3であり、 $Het$ は強い電子親和力をもつ置換されてもよいヘテロアリール基を表す。 $Het$ の任意置換基は、上記の $R$ について記載した通りである。 $Het$ がアリールまたはヘテロアリール基で置換される場合、これは上記の $-(Ar^3)_r$ 基であってもよい。

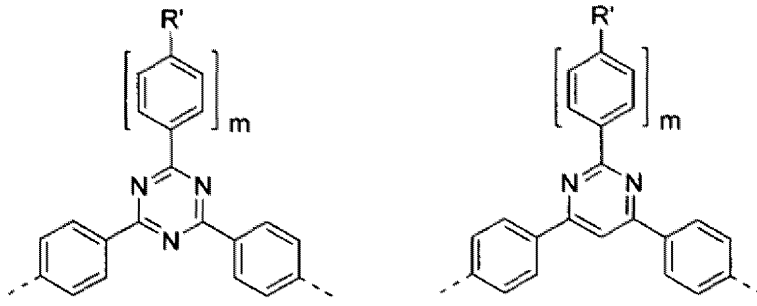
## 【0069】

強い電子親和力をもつ適切なヘテロアリールは、トリアジン、ピリミジン、オキサジアゾール、ピリジン、トリアゾール、トリアリールボラン、スルホキシドおよびシロールを含む。例示の電子輸送基は下記を含み、

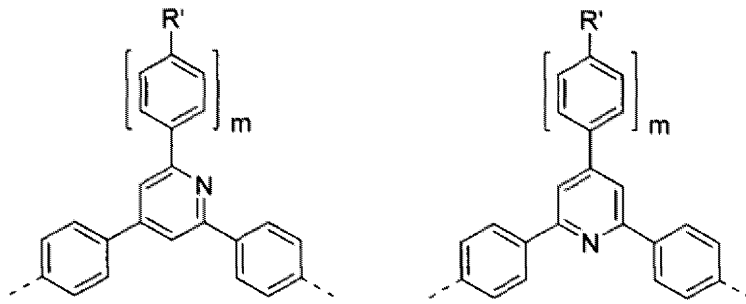
20

## 【0070】

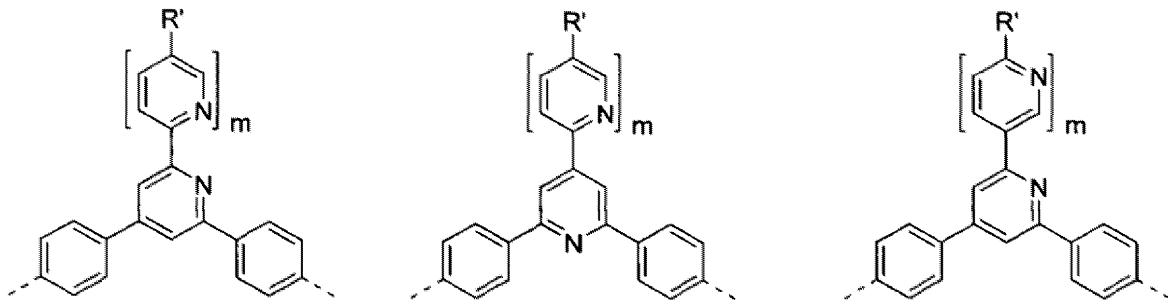
【化 8】



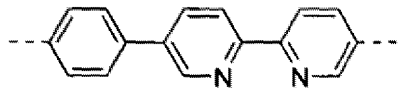
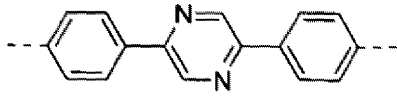
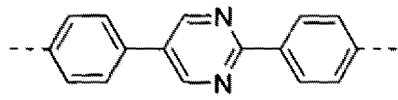
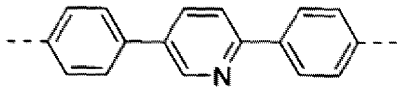
10



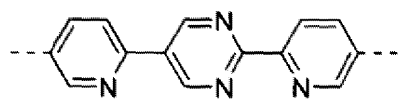
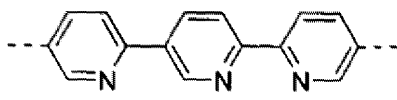
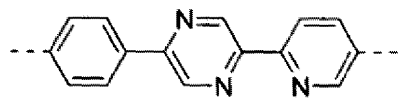
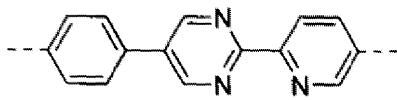
20



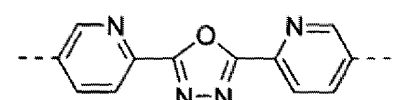
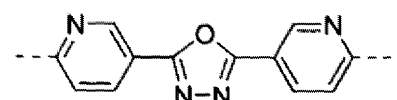
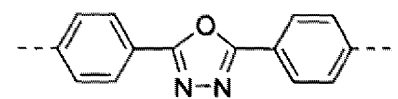
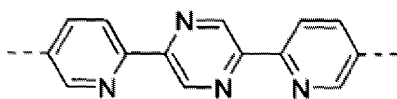
30



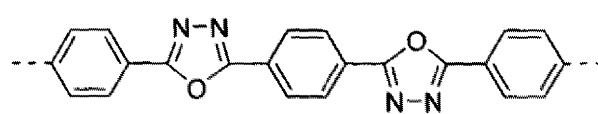
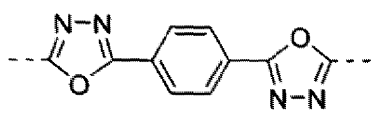
10

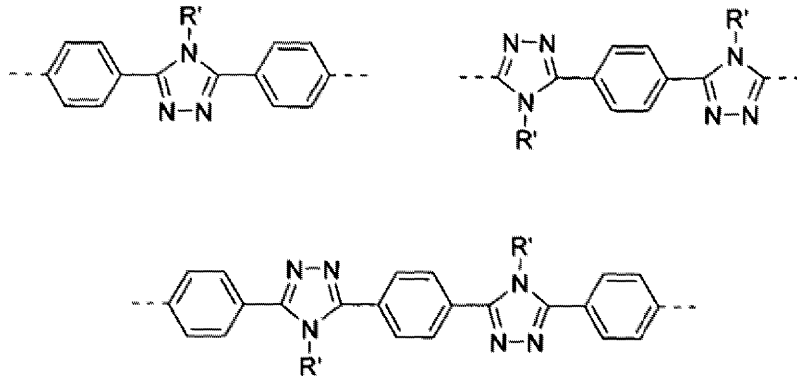


20

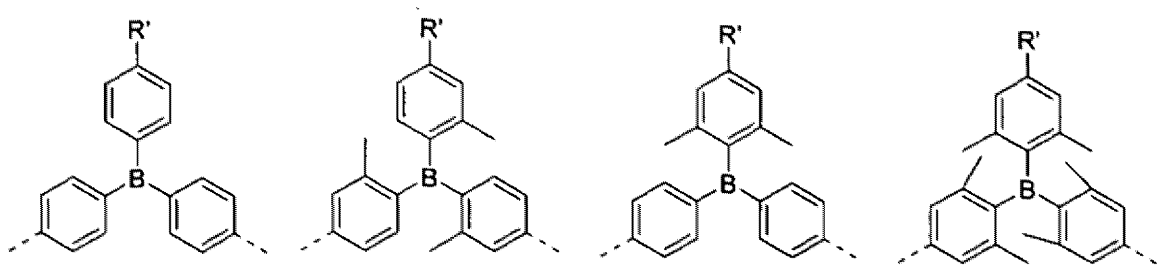


30

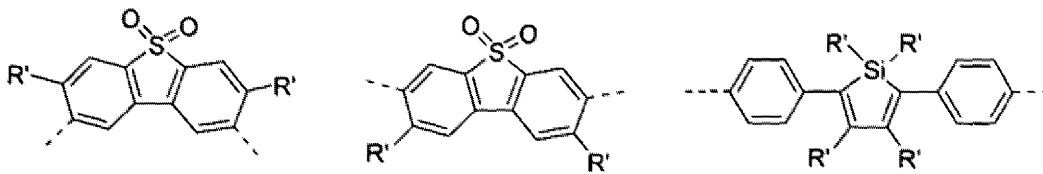




10



20



式中、R' は上記の通りである。

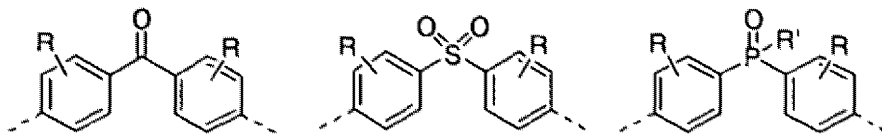
【0071】

他の適切な電子輸送材料は、置換されてもよいケトン、ジアリールスルホキシド、およびホスフィンオキシドを含み、

30

【0072】

【化9】



式中、個々のRはHまたは置換基であり、好ましくはHまたはアルキルまたはアリールである。

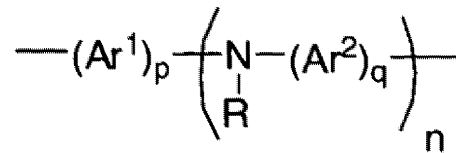
【0073】

40

さらに母材としてまたは発光材料として用いるポリマーの包接に適した反復単位は、アリールアミン反復単位、例えば式(V)の反復単位を含み、

【0074】

【化10】



(V)

式中、 $\text{Ar}^1$  および  $\text{Ar}^2$  は、各出現において、置換されてもよいアリールまたはヘテロアリール基から独立して選択され、 $n$  は1以上であり、好ましくは1または2であり、 $\text{R}$  はHまたは置換基であり、好ましくは置換基であり、 $p$  および  $q$  はそれぞれ独立して1、2または3である。

10

【0075】

$\text{R}$  は、好ましくはアルキルまたは  $\text{---}(\text{Ar}^3)_r\text{---}$  であり、式中  $\text{Ar}^3$  および  $r$  は上記の通りである。

【0076】

$\text{Ar}^1$ 、 $\text{Ar}^2$  および  $\text{Ar}^3$  のいずれかは独立して1またはそれ以上の置換基で置換されてもよい。好ましい置換基は上記の  $\text{R}^3$  から選択される。

【0077】

式(V)の反復単位におけるアリールまたはヘテロアリール基のいずれかは直接結合または2価結合の原子または基により結合してもよい。好ましい2価結合の原子および基は、O、Sおよび置換Nを含む。

20

【0078】

置換Nまたは2価結合基は、存在する場合、独立して各出現において  $\text{NR}^6$  であってもよい。

【0079】

1つの好ましい配置において、 $\text{R}$  は  $\text{Ar}^3$  であり、 $\text{Ar}^1$ 、 $\text{Ar}^2$  および  $\text{Ar}^3$  はそれぞれ独立して1またはそれ以上の  $\text{C}_{1-20}$  アルキル基で置換してもよい。

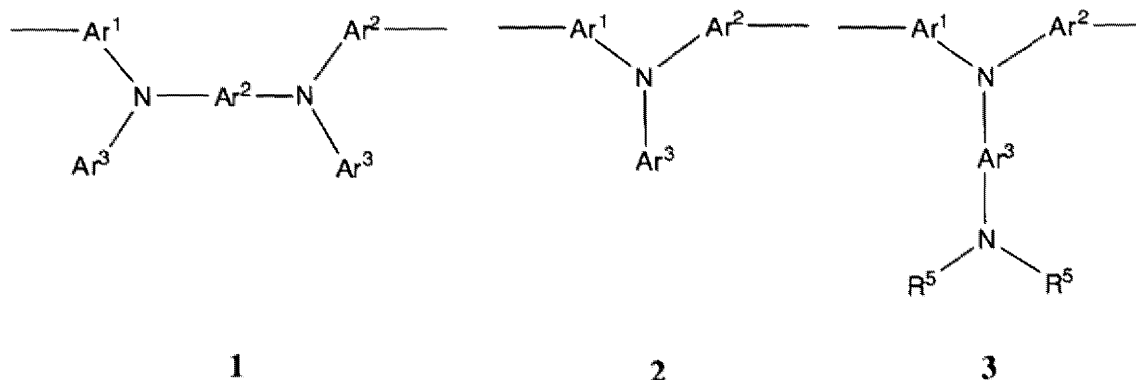
【0080】

式1を満たす好ましい単位は式1~3の単位を含み、

30

【0081】

【化11】



40

式中、 $\text{Ar}^1$  および  $\text{Ar}^2$  が上記の通りであり、 $\text{Ar}^3$  は置換されてもよいアリールまたはヘテロアリールである。 $\text{Ar}^3$  の任意置換基は、存在する場合、式(V)について上述した通りであってもよい。

【0082】

他の好ましい配置において、式(V)のアリールまたはヘテロアリール基はフェニルであり、個々のフェニル基は1またはそれ以上のアルキル基で置換されてもよい。

50

## 【0083】

他の好ましい配置において、 $Ar^1$ 、 $Ar^2$  および  $Ar^3$  はフェニルであり、それぞれ1またはそれ以上の  $C_{1-20}$  アルキル基で置換してもよく、 $r = 1$  である。

## 【0084】

さらに他の好ましい配置において、 $Ar^1$ 、 $Ar^2$  および  $Ar^3$  はフェニルであり、それぞれ1またはそれ以上の  $C_{1-20}$  アルキル基で置換してもよく、 $r = 1$  であり、 $Ar^1$  および  $Ar^2$  はOまたはS原子により結合する。

## 【0085】

アリールアミン反復単位は正孔輸送および/または発光機能を提供し、アリールアミン反復単位の量は、アリールアミン反復単位が使用される層によって選択され得る。例えば、発光層で使用される場合、アリールアミン反復単位の割合はポリマー反復単位の総数の約30モル%まででもよく、一方、該割合はポリマーが正孔輸送層で使用する場合にはより高くてもよい。

10

## 【0086】

ポリマーの1またはそれ以上の反復単位は架橋性基で置換されてもよく、特に、装置製造中である場合、装置層は溶液から該ポリマーを含む層上に堆積する(例えば、ポリマーが正孔輸送層で提供される場合および発光層が溶媒溶液(solution in a solvent)から正孔輸送層上に堆積する場合)。

## 【0087】

例示の架橋性基は、二重結合を含む基、例えばビニルもしくはアクリレート部分を含む基、またはシクロブタン部分を含む基、例えばベンゾシクロブタンを含む。ポリマーは、堆積後、架橋性基の架橋により架橋してもよい。

20

## 【0088】

非共役反復単位、共役反復単位およびさらに上記で解説した反復単位全ては、互いに重合する場合、直鎖ポリマーを形成する唯2つの結合位置を有する。しかしながら、これらの反復単位のいずれかは、例えばスターバーストポリマーを形成するために、3以上の結合配置を備えて提供してもよいと理解される。モノマーの結合配置の最大可能数は、それが置換される重合性脱離基の数に対応する。

## 【0089】

## ポリマー合成

ポリマーの好ましい調製方法は、「金属挿入」を含み、金属錯体触媒の金属原子はアリールまたはヘテロアリール基とモノマーの脱離基との間に挿入される。例示の金属挿入法は、例えば国際公開第00/53656号に記載されるスズキ重合、および、例えば「T. Yamamoto, 「Electrically Conducting And Thermally Stable - Conjugated Poly(arylene)s Prepared by Organometallic Processes」, Progress in Polymer Science 1993, 17, 1153-1205」に記載されるヤマモト重合である。ヤマモト重合の場合、ニッケル錯体触媒が使用され、スズキ重合の場合、パラジウム錯体触媒が使用される。

30

## 【0090】

例えば、ヤマモト重合による直鎖ポリマーの合成において、2つの反応性ハロゲン基を有するモノマーが使用される。同様に、スズキ重合の方法に従って、少なくとも1つの反応基は、ホウ素誘導体基、例えばボロン酸またはボロン酸エステルであり、他の反応基はハロゲンである。好ましいハロゲンは、塩素、臭素およびヨウ素であり、最も好ましくは臭素である。

40

## 【0091】

従って、本出願にわたって解説される反復単位は適切な脱離基を担うモノマーに由来してもよいと理解されよう。同様に、末端基または側基は、適切な脱離基の反応により、ポリマーと結合してもよい。

## 【0092】

50

スズキ重合は、レジオレギュラー、ブロック、およびランダムコポリマーを調製するために用いてもよい。特に、ホモポリマーまたはランダムコポリマーは、一方の反応基がハロゲンであり、他方の反応基が臭素誘導基である場合に調製してもよい。あるいは、ブロックまたはレジオレギュラーコポリマーは、第1モノマーの両反応基が臭素であり、第2モノマーの両反応基がハロゲンである場合に調製してもよい。

【0093】

ハロゲン化物の代替として、金属挿入に關与できる他の脱離基は、スルホン酸およびスルホン酸エステル、例えばトシラート、メシラートおよびトリフラートを含む。

【0094】

ポリマーチューニング (polymer tuning)

非共役反復単位、共役反復単位および更なる反復単位の割合は、ポリマーの1またはそれ以上の特性 (例えば発光色または一重項もしくは三重項励起状態エネルギーレベルを含む) を調整するために選択してもよい。特に、ポリマーの非共役反復単位の割合が増すと、共役反復単位鎖の平均長が縮小し、ひいてはポリマーの励起状態エネルギーレベルが増大する。これは図2aおよび2bで解説し、共役芳香またはヘテロ芳香基Arを含むポリマー鎖への環状非共役基Cyの導入は、ポリマー鎖に沿った共役の遮断効果を有し、これによりHOMOレベルを少なくとも0.1eVまで深める (即ち、HOMOレベルを真空準位から遠ざける) ことにより (図2bの変化xにより解説される)、ならびに/またはLUMOレベルを少なくとも0.1eVまでの真空準位に近づけることにより (図2bの変化yにより解説される)、ポリマーのHOMO-LUMOバンドギャップを増大させる。HOMOおよびLUMOのレベルはサイクリックボルタンメトリーにより測定してもよい。

10

20

【0095】

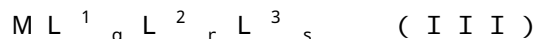
他方で、ポリマーの伝導率をできる限り高く保つことが望ましい。従って、ポリマーの非共役反復単位の適切な量は、ポリマーの反復単位総数の百分率として、5~30モル%、最も好ましくは5~20%の範囲でありうる。

【0096】

発光ドーパント

蛍光性またはリン光性発光ドーパントとして使用され得る材料は、ポリマーが母材として使用される場合、置換されてもよい式 (III) の錯体を含む金属錯体を含み、

30



式中、Mは金属であり、 $L^1$ 、 $L^2$ および $L^3$ はそれぞれ配位基であり、qは整数であり、rおよびsはそれぞれ独立して0または整数であり、 $(a \cdot q) + (b \cdot r) + (c \cdot s)$ の合計はMで使用できる配位部位の数に等しく、aは $L^1$ の配位部位の数であり、bは $L^2$ の配位部位の数であり、cは $L^3$ の配位部位の数である。

【0097】

重金属Mはスピン軌道結合を誘導し、急速な項間交差および三重項以上の状態 (リン光) からの発光を可能にする。適切な重金属Mは、下記を含む:

- ランタニド金属、例えばセリウム、サマリウム、ユーロピウム、テルビウム、ジスプロシウム、ツリウム、エルビウムおよびネオジウム; ならびに

40

- d-ブロック金属、特に第2および第3周期の金属、即ち39から48および72から80の元素、特に、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金および金。イリジウムが特に好ましい。

【0098】

f-ブロック金属に適切な配位基は、酸素または窒素供与系、例えばカルボン酸、1,3-ジケトナート、ヒドロキシカルボン酸、アシルフェノールを含むシッフ塩基およびイミノアシル基を含む。公知であるように、発光ランタニド金属錯体は、金属イオンの第1励起状態より高い三重項励起エネルギーレベルを有する感作基 (sensitizing group) を必要とする。金属のf-f遷移から発光し、従って発光色は金属の選択により決まる。くっきりした発光は一般に狭く、ディスプレイの応用に有用な純色発光を

50

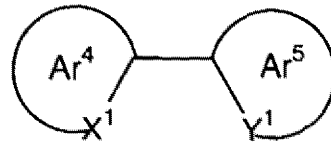
もたらす。

【0099】

d - ブロック金属は三重項励起状態からの発光に特に適している。これらの金属は、炭素または窒素供与体との有機金属錯体、例えばポルフィリンまたは式 (IV) の二座配位子を形成し、

【0100】

【化12】



(IV)

10

式中、 $Ar^4$  および  $Ar^5$  は同一または相違してもよく、置換されてもよいアリールまたはヘテロアリールから独立して選択され、 $X^1$  および  $Y^1$  は同一または相違してもよく、炭素または窒素から独立して選択され、ならびに  $Ar^4$  および  $Ar^5$  はともに縮合してもよい。 $X^1$  が炭素であり且つ  $Y^1$  が窒素である配位子が特に好ましい。

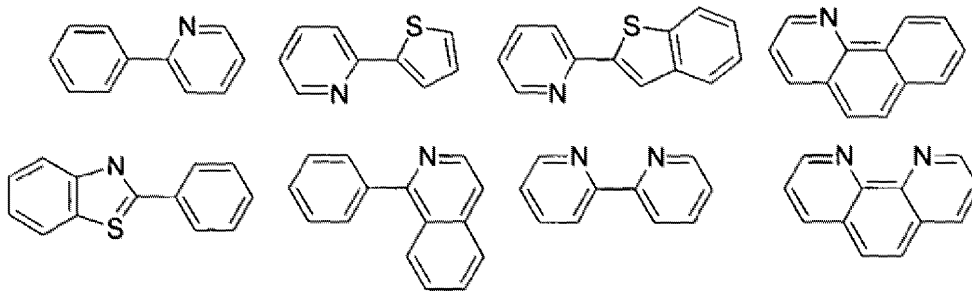
【0101】

二座配位子の例は下記に解説する。

20

【0102】

【化13】



30

$Ar^4$  および  $Ar^5$  はそれぞれ1またはそれ以上の置換基を担持してもよい。これらの置換基の2またはそれ以上は結合して環、例えば芳香環を形成してもよい。特に好ましい置換基は、国際公開第02/45466号、同第02/44189号、米国特許出願公開第2002-117662号明細書および同第2002-182441号明細書に開示されるように錯体の発光を青方偏移するために使用され得るフッ素またはトリフルオロメチル、JP2002-324679に開示されるアルキルまたはアルコキシ基、国際公開第02/81448号で開示されるように発光材料として使用する場合に錯体への正孔輸送を補助するために使用され得るカルバゾール、国際公開第02/68435号および欧州特許第1245659号明細書に開示されるように更なる基を結合するために配位子を官能基化するのに役立つ臭素、塩素またはヨウ素、ならびに国際公開第02/66552号に開示されるように金属錯体の溶解処理性を得るためまたは強化するために使用され得る dendron を含む。

40

【0103】

発光 dendron は典型的には1またはそれ以上の dendron に結合した発光核を含み、各 dendron は分岐点および2またはそれ以上の樹状枝を含む。好ましくは、 dendron は少なくとも部分的に共役し、核および樹状枝の少なくとも1つはアリールまたはヘテロアリール基を含む。

【0104】

d - ブロック元素との使用に適した他の配位子は、ジケトナート、特にアセチルアセト

50

ナート ( a c a c )、トリアリールホスフィンおよびピリジンを含み、これらはそれぞれ置換されてもよい。

【 0 1 0 5 】

主族金属錯体は配位子に基づく、または電荷移動発光を示す。これらの錯体について、発光色は配位子および金属の選択により決まる。

【 0 1 0 6 】

幅広い蛍光低分子量金属錯体が公知であり、有機発光装置「例えば、Macromol . Sym . 1 2 5 ( 1 9 9 7 ) 1 - 4 8 , 米国特許第 5 , 1 5 0 , 0 0 6 号明細書 , 同第 6 , 0 8 3 , 6 3 4 号明細書および同第 5 , 4 3 2 , 0 1 4 号明細書を参照」で証明されている。2価または3価の金属に適切な配位子は、例えば酸素 - 窒素または酸素 - 酸素供与原子とのオキシノイド、一般に置換酸素原子をもつ環状窒素原子、または置換窒素原子または置換酸素原子をもつ酸素原子、例えば 8 - ヒドロキシキノレートおよびヒドロキシキノキサリノール - 1 0 - ヒドロキシベンゾ ( h ) キノリナート ( I I )、ベンザゾール ( I I I )、シッフ塩基、アゾインドール、クロモン誘導体、3 - ヒドロキシフラボン、ならびにカルボン酸、例えばサリチラトアミノカルボキシレートおよびエステルカルボキシレートを含む。任意の置換基は、発光色を改変し得る (ヘテロ) 芳香環にハロゲン、アルキル、アルコキシ、ハロアルキル、シアノ、アミノ、アミド、スルホニル、カルボニル、アリールまたはヘテロアリールを含む。

10

【 0 1 0 7 】

ホストポリマーおよび発光ドーパントは物理的に混合してもよい。あるいは、発光ドーパントはポリマーと化学的に結合してもよい。発光ドーパントは、例えば欧州特許第 1 2 4 5 6 5 9 号明細書、国際公開第 0 2 / 3 1 8 9 6 号、同第 0 3 / 1 8 6 5 3 号および同第 0 3 / 2 2 9 0 8 号に開示されるように、ポリマー骨格に結合する置換基として化学的に結合し得る、ポリマー骨格の反復単位として組み込まれ得る、またはポリマーの末端基として提供され得る。

20

【 0 1 0 8 】

この結合は、対応する混合システムに利用できない分子内励起子移動経路を提供し得るため、ホストポリマーから発光ドーパントへのより効率的な励起子の移動をもたらし得る。

【 0 1 0 9 】

さらに、結合は処理理由にとって有益でありうる。例えば、発光ドーパントの溶解度が低い場合、可溶性ポリマーに結合することにより、発光ドーパントは溶液中で電荷輸送材料により担持され、溶解処理技術を用いた装置製造を可能にする。さらに、発光ドーパントをポリマーに結合することにより、装置性能に有害でありうる溶解処理した装置の相分離効果を防止し得る。

30

【 0 1 1 0 】

2 以上の発光ドーパントを使用してもよい。例えば、赤、緑および青色発光ドーパントを白色発光を得るために使用してもよい。本発明のポリマーは、光、特に青色光を放出してもよく、これは 1 またはそれ以上の更なるドーパントからの発光と組み合わせて白色光を得てもよい。

40

【 0 1 1 1 】

正孔注入層

導電性正孔注入層は、導電性の有機または無機材料から形成されてもよく、アノードから半導体ポリマーの層または複数層への正孔注入を補助するためにアノード 2 と発光層 3 との間に提供されてもよい。ドーブした有機正孔注入材料の例には、置換されてもよいドーブしたポリ (エチレンジオキシチオフエン) ( P E D T )、特に電荷平衡ポリ酸、例えば欧州特許第 0 9 0 1 1 7 6 号明細書および同第 0 9 4 7 1 2 3 号明細書に開示されるポリスチレンスルホネート ( P S S )、ポリアクリル酸またはフッ化スルホン酸、例えば N a f i o n (登録商標)、米国特許第 5 7 2 3 8 7 3 号明細書および同第 5 7 9 8 1 7 0 号明細書に開示されるポリアニリン、ならびに置換されてもよいポリチオフエンまたはポ

50

リ(チエノチオフェン)でドーブしたPEDTを含む。導電性無機材料の例には、遷移金属酸化物、例えば「Journal of Physics D: Applied Physics (1996), 29(11), 2750-2753」に開示されるVOx MoOxおよびRuOxを含む。

【0112】

電荷輸送層

正孔輸送層はアノードと発光層との間に提供されてもよい。同様に、電子輸送層はカソードと発光層との間に提供されてもよい。

【0113】

同様に、電子ブロッキング層がアノードと発光層との間に提供されてもよく、正孔ブロッキング層がカソードと発光層との間に提供されてもよい。輸送層およびブロッキング層は組み合わせて使用してもよい。そのHOMOおよびLUMOレベルに応じて、単層は正孔および電子の一方を輸送し且つ正孔および電子の他方を遮断し得る。

10

【0114】

アノード2と発光層3との間に位置する正孔輸送層は、存在する場合、好ましくは5.5 eV以下、より好ましくは約4.8 - 5.5 eVのHOMOレベルを有する。HOMOレベルは、例えばサイクリックボルタンメトリーにより測定してもよい。

【0115】

発光層3とカソード4との間に位置する電子輸送層は、存在する場合、約3 - 3.5 eVのLUMOレベルを有するのが好ましい。例えば、一酸化ケイ素もしくは二酸化ケイ素の層または0.2 - 2 nmの範囲の厚さを有する他の誘電体薄層が発光層3と層4との間に提供される。

20

【0116】

正孔輸送層は式(I)の正孔輸送反復単位を含むポリマーを含み、同様に、電子輸送層は式(I)の電子輸送反復単位を含むポリマーを含んでもよい。

【0117】

カソード

カソード4は、電子を発光層に注入できる仕事関数を有する材料から選択される。他の因子は、カソードの選択、例えばカソードと発光材料との逆相互作用の可能性に影響を及ぼす。カソードは、単一材料、例えばアルミニウムの1層から構成され得る。あるいは、複数の金属、例えば低仕事関数材料と高仕事関数材料の2層、例えば国際公開第98/10621号に開示されるカルシウムおよびアルミニウム、国際公開第98/57381号、「Appl. Phys. Lett. 2002, 81(4), 634」および国際公開第02/84759号に開示されるバリウム元素、または電子注入を補助するために金属化合物の薄層、特にアルカリ金属もしくはアルカリ土類金属の酸化物もしくはフッ化物、例えば国際公開第00/48258号に開示されるフッ化リチウム、「Appl. Phys. Lett. 2001, 79(5), 2001」に開示されるフッ化バリウム、および酸化バリウムを含む。電子を効率的に装置へ注入するために、カソードは、好ましくは3.5 eV未満、より好ましくは3.2 eV未満、最も好ましくは3 eV未満の仕事関数を有する。金属の仕事関数は、例えば「Michaelson, J. Appl. Phys. 48(11), 4729, 1977」で見出すことができる。

30

40

【0118】

カソードは不透明または透明であってもよい。アクティブマトリクス装置での透明アノードによる発光は放出ピクセル下に位置する駆動回路により少なくとも部分的に遮断されるため、透明カソードは特に該装置に有利である。透明カソードは、透明であるのに十分なほど薄い電子注入材料の層を含む。典型的には、この層の側部伝導率(lateral conductivity)は、その薄さの結果として、低い。この場合、電子注入材料の層は、インジウムスズ酸化物などの透明導電材料のより厚い層と組み合わせて使用する。

【0119】

50

透明カソード装置は透明アノードを有する必要はない（無論、完全透明装置を所望しない限り）と理解され、従って、底部発光装置に用いる透明アノードは、反射材料の層、例えばアルミニウムの層と交換または補完してもよい。透明カソード装置の例は、例えば独  
 国特許第 2 3 4 8 3 1 6 号明細書に開示されている。

【 0 1 2 0 】

封止

有機光電子装置は湿気および酸素に敏感な傾向がある。従って、基板は、装置への湿気  
 および酸素の侵入を防止するために優れたバリア特性を有することが好ましい。基板は通  
 常ガラスであるが、特に装置の柔軟性が望ましい場合、代替の基板を使用してもよい。例  
 えば、基板は、代替のプラスチックとバリア層の基板を開示する米国特許第 6 2 6 8 6  
 9 5 号明細書にあるようなプラスチックまたは欧州特許第 0 9 4 9 8 5 0 号明細書で開示  
 されるような薄ガラスとプラスチックの積層体を含んでもよい。

10

【 0 1 2 1 】

装置は湿気および酸素の侵入を防ぐために封止材（示していない）で封止されてもよい  
 。適切な封止材は、ガラス板、適切なバリア特性を有するフィルム、例えば二酸化ケイ素  
 、一酸化ケイ素、窒化ケイ素、または、例えば国際公開第 0 1 / 8 1 6 4 9 号に開示され  
 るようなポリマーと誘電材料の交互積層、または例えば国際公開第 0 1 / 1 9 1 4 2 号に  
 開示されるような密閉容器を含む。透明カソード装置の場合、例えば一酸化ケイ素または  
 二酸化ケイ素などの透明封止層をミクロンレベルの厚さに重ねてもよいが、1つの好まし  
 い実施形態において、係る層の厚さは 2 0 - 3 0 0 n m の範囲である。基板に浸透し得る  
 大気水分および / または酸素を吸収するためのゲッタ材料または封止材は、基板と封止材  
 との間に配置してもよい。

20

【 0 1 2 2 】

溶解処理

溶解処理用のポリマー組成物を形成するのに適切な溶媒は、多数の一般有機溶媒、例  
 えばモノ - またはポリ - アルキルベンゼン、例えばトルエンおよびキシレンを含む。

【 0 1 2 3 】

特に好ましい溶液堆積技術は、プリンティングおよびコーティング技術、例えばスピン  
 コーティングおよびインクジェットプリンティングを含む。

【 0 1 2 4 】

スピンコーティングは、エレクトロルミネセンス材料のパターニングが不必要な装置、  
 例えば照明の応用または単モノクロ・セグメント・ディスプレイに特に適している。

30

【 0 1 2 5 】

インクジェットプリンティングは、高情報量ディスプレイ、特にフルカラーディスプレ  
 イに特に適している。装置は、第 1 電極上にパターン層を与え、1色（モノクロ装置の場  
 合）または多色（多色、特にフルカラー装置の場合）のプリンティング用のウェルを規  
 定することにより、インクジェットプリントしてもよい。パターン層は、典型的には例  
 えば、欧州特許第 0 8 8 0 3 0 3 号明細書に記載されるように、ウェルを規定するためにパ  
 ターン化されるフォトレジストの層である。

【 0 1 2 6 】

ウェルの代替として、インクはパターン層内に規定されるチャンネル内にプリントされ  
 てもよい。特に、フォトレジストはパターン化され、ウェルとは違って、複数のピクセルに  
 広がり且つチャンネル末端で開閉し得るチャンネルを形成し得る。

40

【 0 1 2 7 】

他の溶液堆積技術は、浸漬被覆、ロールプリンティングおよびスクリーンプリンティ  
 ングを含む。

【実施例】

【 0 1 2 8 】

式 ( I V ) の共役フルオレン反復単位を含むポリマー、式 ( V ) の正孔輸送アミン反復  
 単位および非共役反復単位は、国際公開第 0 0 / 5 3 6 5 6 号に記載されるように、スズ

50

キ重合により調製した。

#### 実施例 1

79%の共役反復単位、6%の正孔輸送単位、15%の共役ブレーカー単位

#### 実施例 2

89%の共役反復単位、6%の正孔輸送単位、5%の共役ブレーカー単位

#### 応用

ポリマーは、一重項励起状態エネルギーレベル（蛍光ドーパント用）または三重項励起状態エネルギーレベル（リン光ドーパント用）がポリマーのそれよりも低いという条件で、蛍光性またはリン光性発光ドーパント用の母材として使用してもよい。ホストとドーパントの励起状態エネルギーレベル間の差は、ドーパントから母材への励起子の逆移動を回避するために、少なくとも  $kT$  であることが好ましい。

10

#### 【0129】

非共役反復単位は、共役ポリマーと比較して、ポリマーの HOMO - LUMO バンドギャップを増加するのに役立ち、従って、ポリマーに油性またはろう質を与えポリマーの精製を厄介にし得るアルキル鎖などのスペーサー基の使用を必要とすることなく、ポリマーがホストとして使用できるドーパントの範囲を広げる。さらに、本発明の環状非共役単位はポリマーに剛性を与え、ポリマーのガラス転移温度を上昇させ得る。環状非共役単位の大部分はポリマー鎖の凝集も妨げる。

#### 【0130】

さらに、該ポリマーは、非共役反復単位を含まない対応ポリマーと比較して、青色偏移する発光色を有する発光ポリマーとして使用してもよい。

20

#### 【0131】

ポリマーは、電荷輸送材料、特に正孔輸送材料としても使用してよい。

#### 【0132】

本発明は具体的な例示実施形態に関して記載したが、本明細書に開示する特性の様々な改変、交替および/または組み合わせは、下記の特許請求の範囲に記載する発明の範囲から逸脱することなく、当業者に明白であることが理解されよう。

【 図 1 】

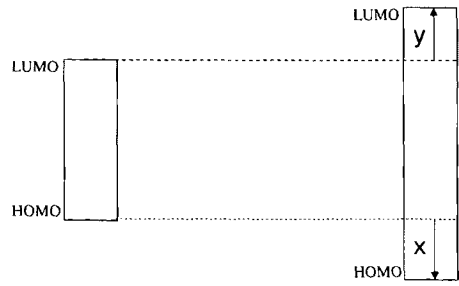
Fig. 1



【 図 2 a 】

Fig. 2a

-Ar-Ar-Ar-Ar-Ar-



【 図 2 b 】

Fig. 2a

-Ar-Ar-Ar-Ar-Ar-

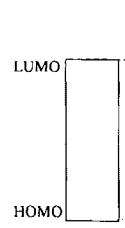
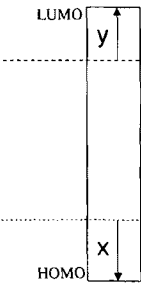


Fig. 2b

-Ar-Ar-Cy-Ar-Ar-



## 【 国際調査報告 】

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No PCT/GB2011/000731
---

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b> INV. H01L51/00 H01L51/50 ADD.		
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) H01L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal		
<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 Y	US 6 268 072 B1 (ZHENG SHIYING [US] ET AL) 31 July 2001 (2001-07-31) abstract figures 1-3 column 1, line 5 - column 2, line 53 column 3, line 11 - column 45, line 10 column 50, line 32 - column 52, line 67 -----	1-4,6-8, 10-24 9
X	KREYENSCHMIDT M ET AL: "THERMALLY STABLE BLUE-LIGHT-EMITTING COPOLYMERS OF POLY(ALKYLFLUORENE)", MACROMOLECULES, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, WASHINGTON, DC; US, vol. 31, no. 4, 24 February 1998 (1998-02-24), pages 1099-1103, XP000732910, ISSN: 0024-9297, DOI: 10.1021/MA970914E	1-5,8, 11-13, 15,17, 22-24
A	the whole document ----- -/--	18-21
<input checked="" 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 "E" earlier document 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 2 September 2011		Date of mailing of the international search report 13/09/2011
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel: (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer De Kroon, Arnoud

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/GB2011/000731

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2005/013386 A2 (CDT OXFORD LTD [GB]; GILANI A [GB]; STEUDEL ANNETTE REGINE [GB]; PILLO) 10 February 2005 (2005-02-10) cited in the application	9
A	abstract figure 1 page 1, line 3 - page 20, line 10 -----	1,8, 10-15, 17-24
A	WO 99/48160 A1 (CAMBRIDGE DISPLAY TECH [GB]; BURROUGHS JEREMY HENLEY [GB]; FRIEND RIC) 23 September 1999 (1999-09-23) abstract figures 1-4,6,9,12,15,18,20,21 page 1, line 4 - page 16, line 5 page 26, line 27 - page 28, line 7 tables 1-4 -----	1,8, 10-15, 17-24
A	BERNIUS M T ET AL: "PROGRESS WITH LIGHT-EMITTING POLYMERS", ADVANCED MATERIALS, WILEY VCH VERLAG, DE, vol. 12, no. 23, 1 December 2000 (2000-12-01), pages 1737-1750, XP000977264, ISSN: 0935-9648, DOI: 10.1002/1521-4095(200012)12:23<LT,1737::AI D-ADMA1737&GT,3.0.CO,2-N cited in the application the whole document -----	1-24

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

Information on patent family members

International application No

PCT/GB2011/000731

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 6268072	B1	31-07-2001	DE 60006768 D1 08-01-2004
			EP 1088875 A2 04-04-2001
			JP 2001160491 A 12-06-2001
			KR 20010050735 A 15-06-2001
-----			
WO 2005013386	A2	10-02-2005	EP 1649525 A2 26-04-2006
			JP 2007501507 A 25-01-2007
			KR 20060061812 A 08-06-2006
			US 2008176104 A1 24-07-2008
-----			
WO 9948160	A1	23-09-1999	AU 2740299 A 11-10-1999
			CN 1293826 A 02-05-2001
			CN 1855575 A 01-11-2006
			CN 101106182 A 16-01-2008
			CN 101123301 A 13-02-2008
			CN 101136455 A 05-03-2008
			EP 1993155 A2 19-11-2008
			EP 2228847 A1 15-09-2010
			EP 2267819 A2 29-12-2010
			EP 1062703 A1 27-12-2000
			HK 1098577 A1 27-08-2010
			JP 2002507825 A 12-03-2002
			JP 2004247313 A 02-09-2004
			JP 4292162 B2 08-07-2009
			JP 2005174947 A 30-06-2005
			JP 4732236 B2 27-07-2011
			JP 2006295203 A 26-10-2006
			JP 2010045383 A 25-02-2010
			KR 20060090844 A 16-08-2006
			KR 20070044034 A 26-04-2007
			KR 20070098910 A 05-10-2007
			KR 20080103110 A 26-11-2008
			KR 20090033409 A 02-04-2009
TW 525409 B 21-03-2003			
US 2009096363 A1 16-04-2009			
US 6897473 B1 24-05-2005			
-----			

## フロントページの続き

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

(74)代理人 100119253

弁理士 金山 賢教

(74)代理人 100124855

弁理士 坪倉 道明

(74)代理人 100129713

弁理士 重森 一輝

(74)代理人 100137213

弁理士 安藤 健司

(74)代理人 230105223

弁護士 城山 康文

(72)発明者 ズーベリー、シエーナ

イギリス・ケンブリッジシャー・CB23 6DW・キャンボーン・ビジネス・パーク・ビルディング・2020、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド

(72)発明者 ズーベリー、タニア

イギリス・ケンブリッジシャー・CB23 6DW・キャンボーン・ビジネス・パーク・ビルディング・2020、ケンブリッジ ディスプレイ テクノロジー リミテッド

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC03 CC45 DD53 DD61 DD62 DD66 DD67 DD68

DD69 DD70 FF19 GG06

专利名称(译)	聚合物，聚合物组合物和有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">JP2013527614A</a>	公开(公告)日	2013-06-27
申请号	JP2013510669	申请日	2011-05-12
[标]申请(专利权)人(译)	剑桥显示技术有限公司 住友化学有限公司		
申请(专利权)人(译)	剑桥显示技术有限公司 住友化学有限公司		
[标]发明人	ズーベリーシエーナ ズーベリータニア		
发明人	ズーベリー、シエーナ ズーベリー、タニア		
IPC分类号	H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0035 H01L51/0036 H01L51/0038 H01L51/0039 H01L51/0043 H01L51/0085 H01L51/5004 H01L51/5012 H01L51/5016 H01L51/5048 H01L2251/552		
FI分类号	H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC03 3K107/CC45 3K107/DD53 3K107/DD61 3K107/DD62 3K107/ /DD66 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD70 3K107/FF19 3K107/GG06		
代理人(译)	小野 诚 金山 贤教 安藤健二		
优先权	2010008091 2010-05-14 GB		
其他公开文献	JP5890829B2		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

一种包含主体聚合物和发光掺杂剂的发光组合物，其中所述主体聚合物在聚合物的主链中包含共轭重复单元和非共轭重复单元，所述共轭重复单元在与之连接的重复单元之间具有至少一个共轭路径。并且与不存在非共轭重复单元的聚合物相比，非共轭重复单元的聚合物的最高占据分子轨道能级与真空度至少相距0.1eV和/或聚合物的最低空白空间。包括具有至少一个环原子的至少部分饱和的环，该环原子阻断与非共轭重复单元结合的重复单元之间的任何共轭路径，使得分子轨道能级接近至少0.1 eV的真空能级。发光成分。 [选择图]图2

