

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6496392号
(P6496392)

(45) 発行日 平成31年4月3日(2019.4.3)

(24) 登録日 平成31年3月15日(2019.3.15)

(51) Int.Cl.	F 1
H 01 L 51/50	(2006.01)
C 07 D 495/04	(2006.01)
C 09 K 11/06	(2006.01)
C 07 D 491/048	(2006.01)
C 07 D 519/00	(2006.01)
	H 05 B 33/22
	C 07 D 495/04
	C 09 K 11/06
	H 05 B 33/14
	C 07 D 491/048

請求項の数 15 (全 87 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2017-240412 (P2017-240412)
(22) 出願日	平成29年12月15日(2017.12.15)
(62) 分割の表示	特願2016-124364 (P2016-124364) の分割
原出願日	平成24年1月20日(2012.1.20)
(65) 公開番号	特開2018-88526 (P2018-88526A)
(43) 公開日	平成30年6月7日(2018.6.7)
審査請求日	平成29年12月15日(2017.12.15)
(31) 優先権主張番号	13/012,425
(32) 優先日	平成23年1月24日(2011.1.24)
(33) 優先権主張国	米国(US)

(73) 特許権者	503055897 ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユーリング、フィリップス ブールバード 375
(74) 代理人	100107515 弁理士 廣田 浩一
(74) 代理人	100107733 弁理士 流 良広
(74) 代理人	100115347 弁理士 松田 奈緒子

最終頁に続く

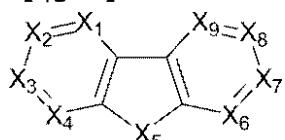
(54) 【発明の名称】電子輸送化合物

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 $A^r (L_i D_i)^n$ を有する化合物。(式中、 A^r は、少なくとも 3 個のベンゼン環を有する縮合芳香族環を含み、前記縮合芳香族環は、440 nm に相当するエネルギー未満の三重項エネルギーを有し； A^r は、更に置換されていてもよく； L は、単結合又は 2 倍の連結基であり； n は、1 又は 2 であり； i は、1 又は 2 個の構造を L_i 及び D_i について特定する指標変数であって、 L_i は L_1 又は L_2 であり、 D_i は D_1 又は D_2 であり、 n が 2 の場合に、 L_1 及び L_2 は同一であっても異なっていてもよく、また D_1 及び D_2 は同一であっても異なっていてもよく； L_1 又は L_2 は、独立して単結合又は 2 倍の連結基であり； D_1 又は D_2 は、独立して下記構造を有し；

【化 1】

 X_5 は、O、又は Se であり；

10

20

X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_6 、 X_7 、 X_8 及び X_9 は、それぞれ独立して C (R) 及び N から選択され；

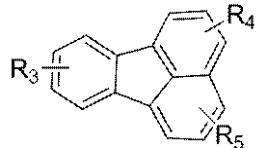
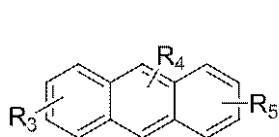
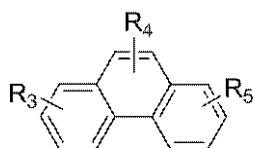
X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_6 、 X_7 、 X_8 及び X_9 の少なくとも 1 つは、N であり；

R は、それぞれ独立して水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択され；

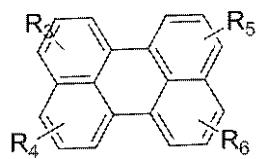
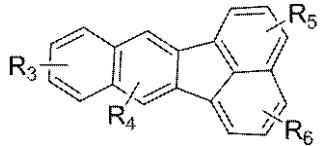
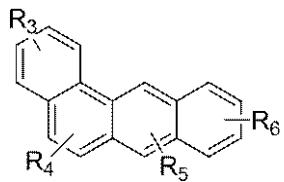
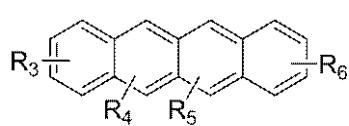
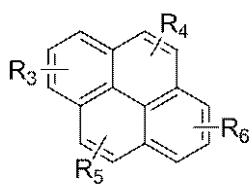
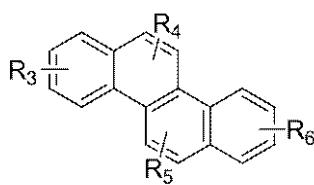
R は、L と結合していてもよい)；

ただし、前記 Ar は、下記式からなる群から選択されるものであり、

【化 2】



10



20

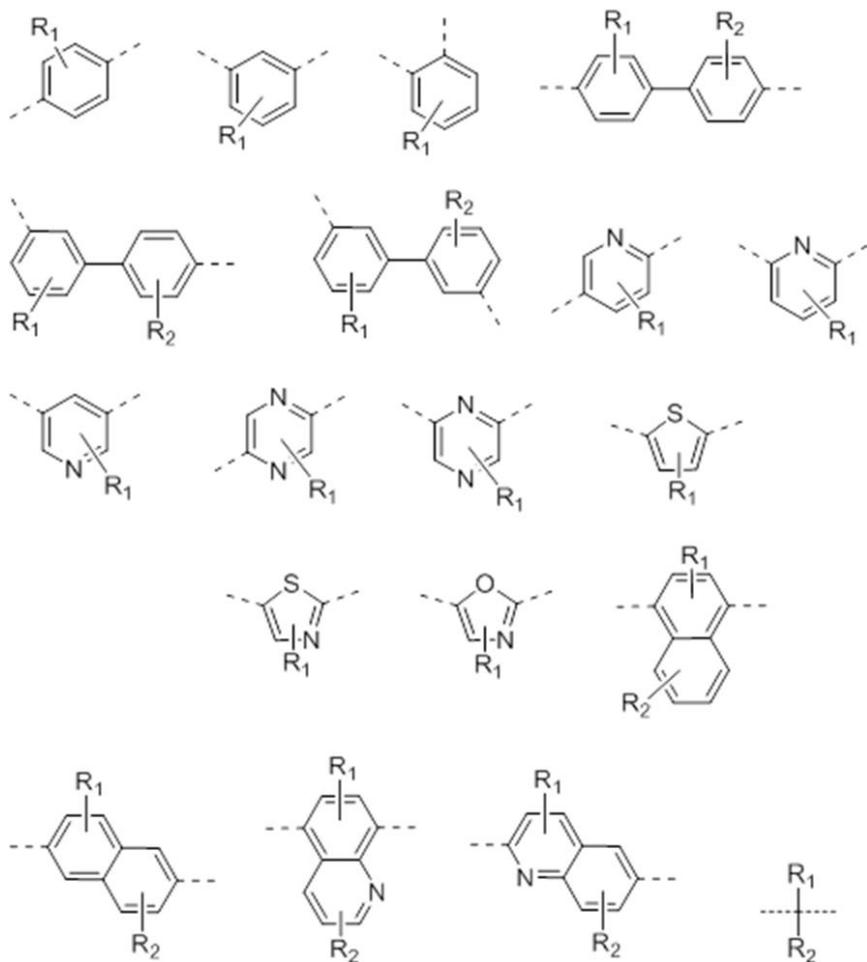
(式中、R₃、R₄、R₅ 及び R₆ は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表し；

R₃、R₄、R₅ 及び R₆ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される)

、

L₁ 又は L₂ の前記 2 値の連結基は、下記式からなる群から選択されるものである。

【化3】



10

20

30

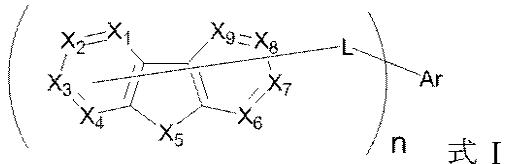
(式中、R₁ 及び R₂ は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表し；

R₁ 及び R₂ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される)。

【請求項2】

下記式を有する請求項1に記載の化合物。

【化4】

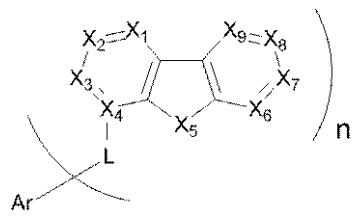


【請求項3】

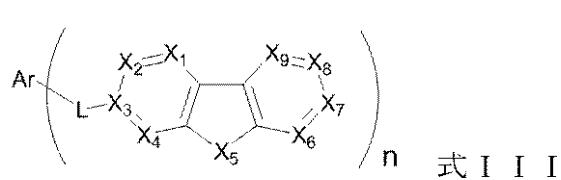
下記式からなる群から選択される式を有する請求項1に記載の化合物。

40

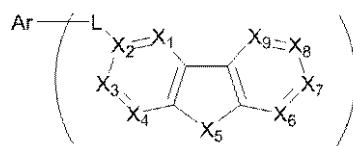
【化5】



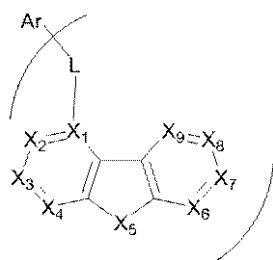
式 I I



式 I I I



式 I V

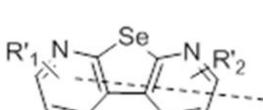
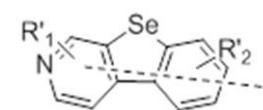
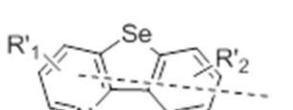
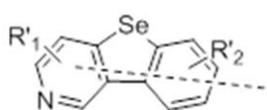
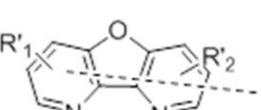
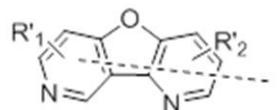
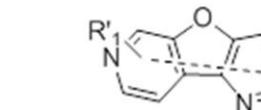
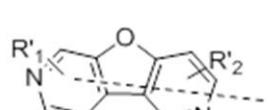
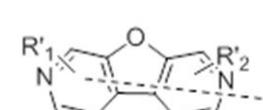
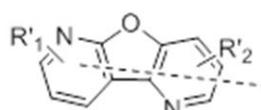
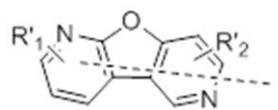
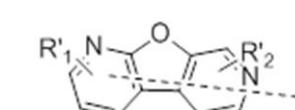
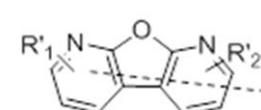
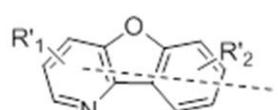
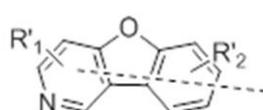
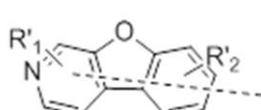
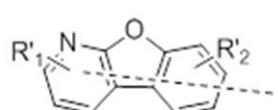


式 V

【請求項4】

D₁又はD₂が下記式からなる群から選択される請求項1に記載の化合物。

【化6】



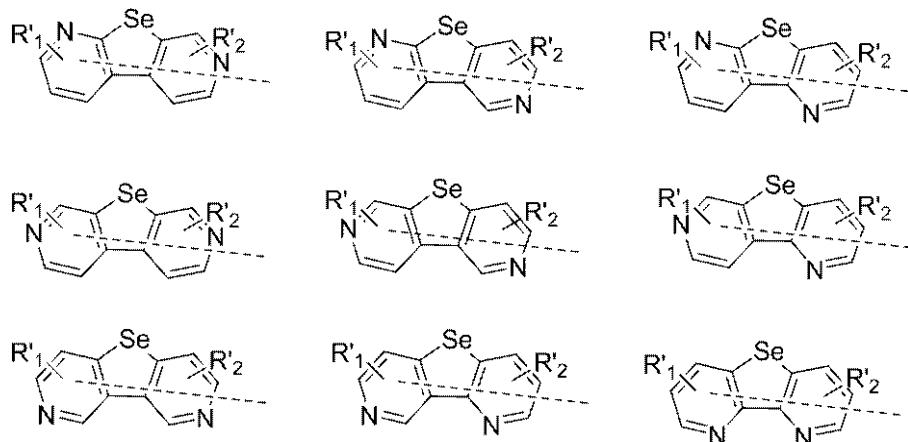
10

20

30

40

【化7】



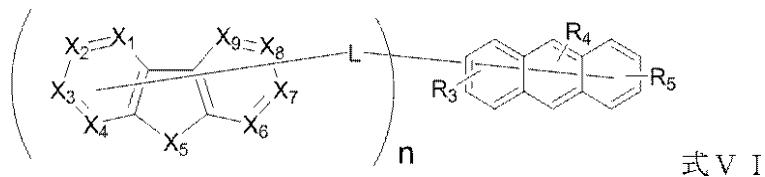
10

(式中、R'1及びR'2は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表し；
R'1及びR'2が水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、
ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される)

【請求項5】

下記式を有する請求項1に記載の化合物。

【化8】



20

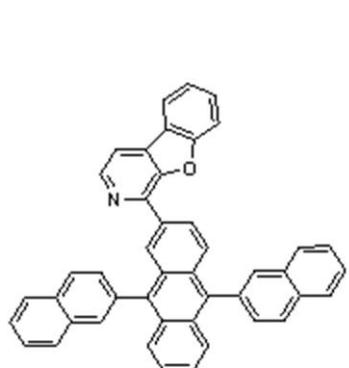
式V I

(式中、R3、R4及びR5は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表し；
R3、R4及びR5は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、
ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される)

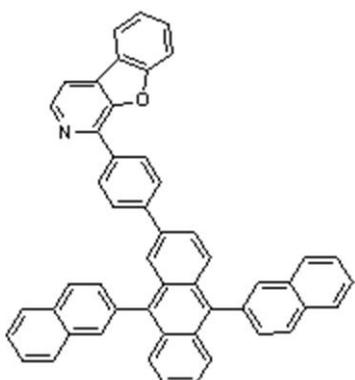
【請求項6】

下記式からなる群から選択される請求項1に記載の化合物。

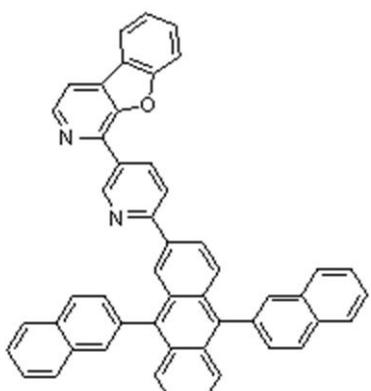
【化9】



化合物 19



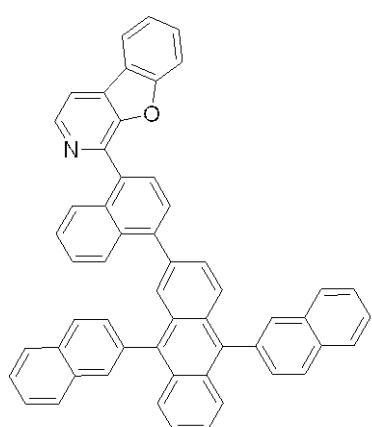
化合物 20



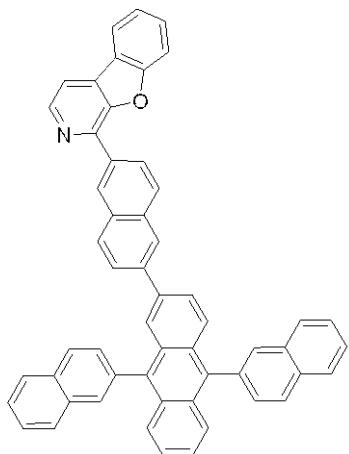
化合物 21

10

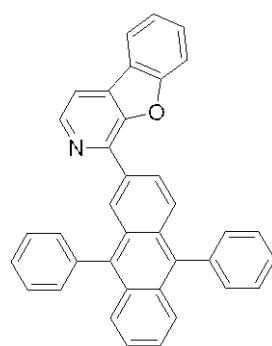
20



化合物 2-2

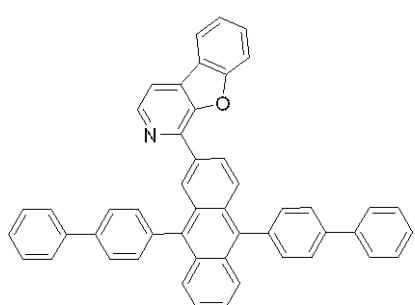


化合物 2-3

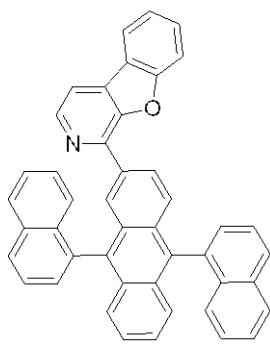


化合物 2-4

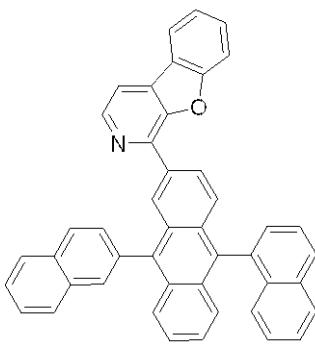
10



化合物 2-5

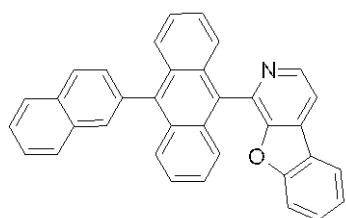


化合物 2-6

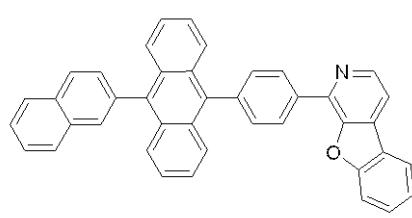


化合物 2-7

20

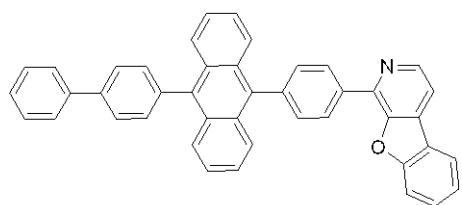


化合物 2-8

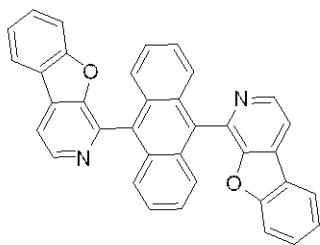


化合物 2-9

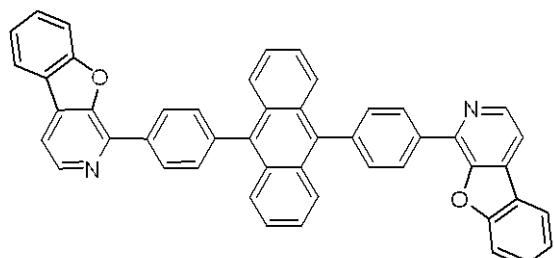
30



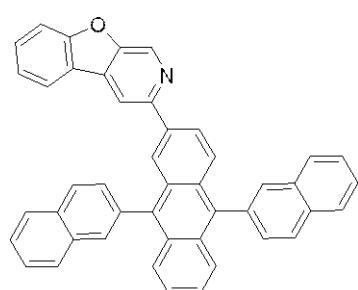
化合物 3 0



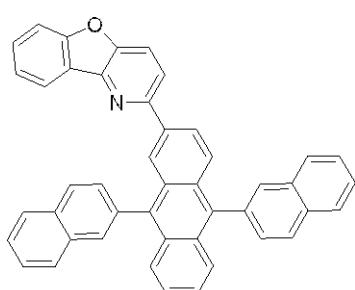
化合物 3 1



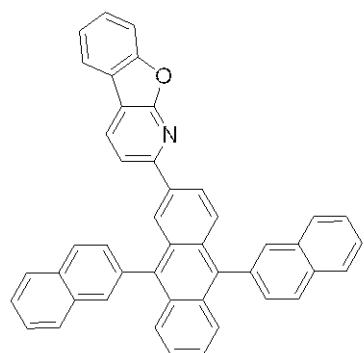
化合物 3 2



化合物 3 3



化合物 3 4



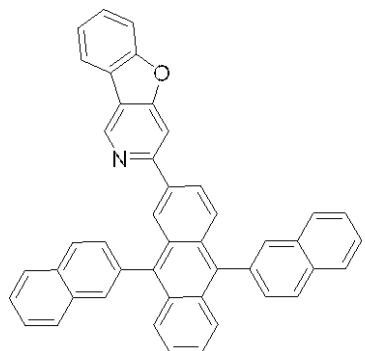
化合物 3 5

10

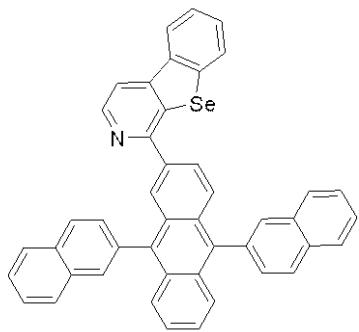
20

30

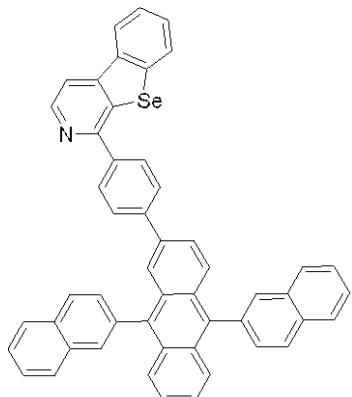
40



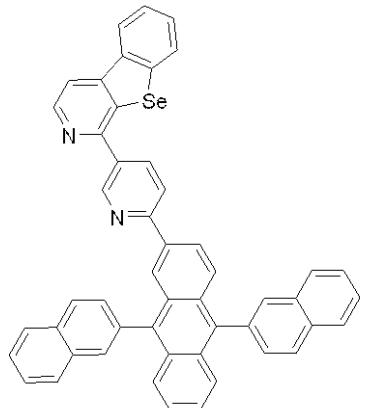
化合物 3 6



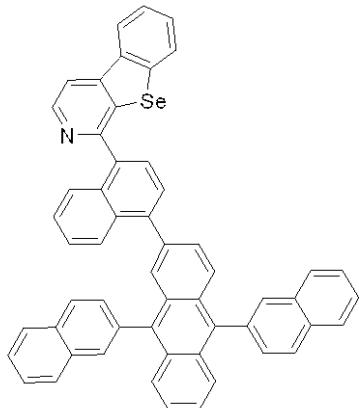
化合物 3 7



化合物 3 8



化合物 3 9

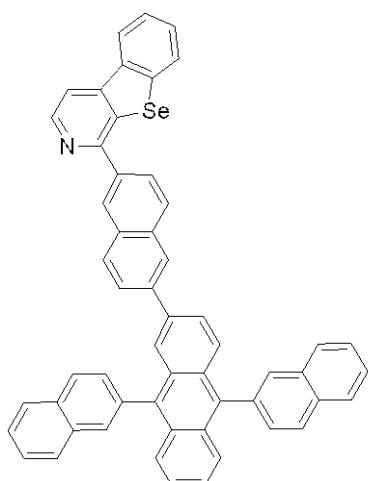


化合物 4 0

10

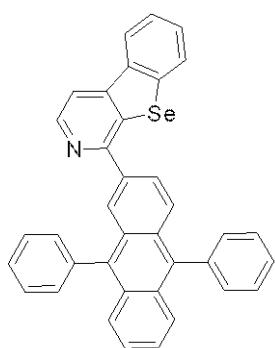
20

30

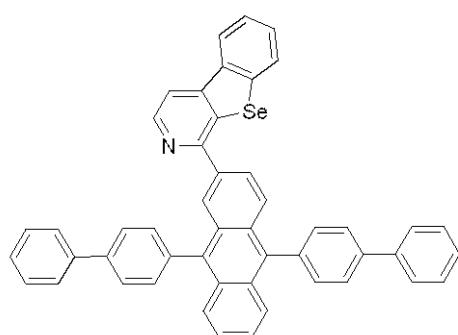


化合物 4 1

10

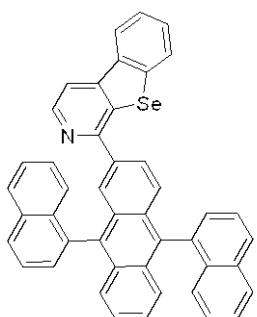


化合物 4 2



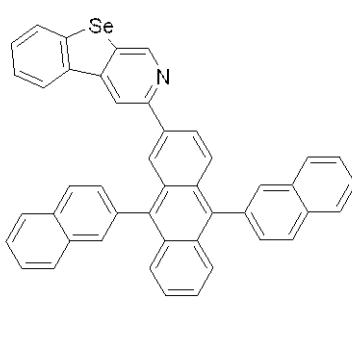
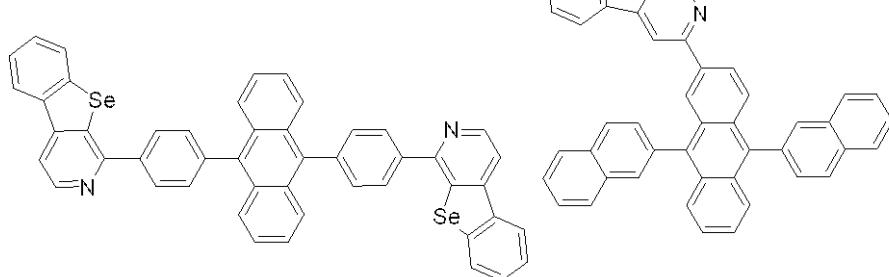
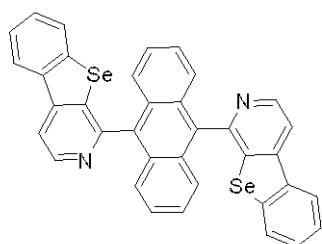
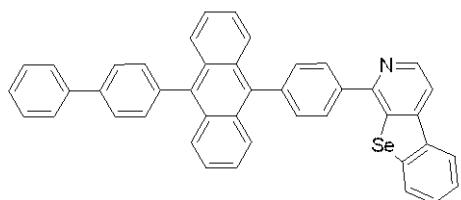
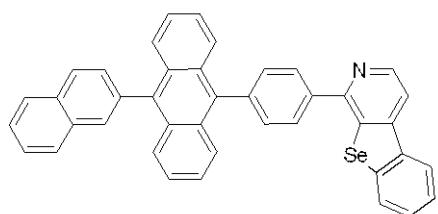
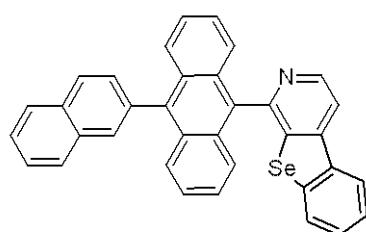
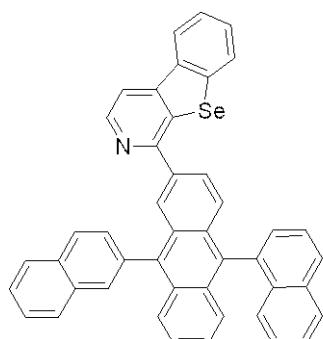
化合物 4 3

20



化合物 4 4

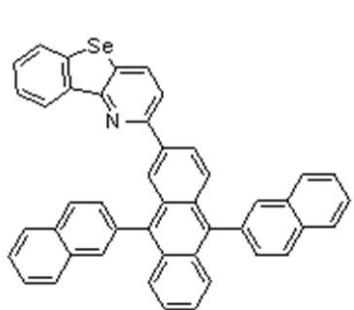
30



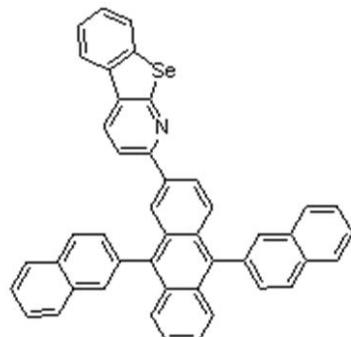
10

20

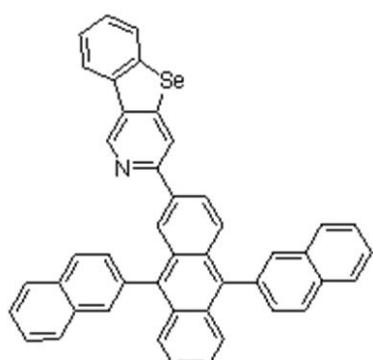
30



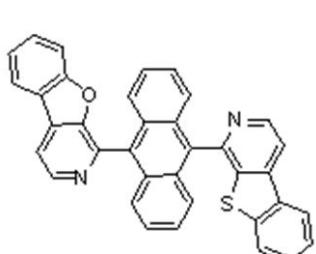
化合物 5-2



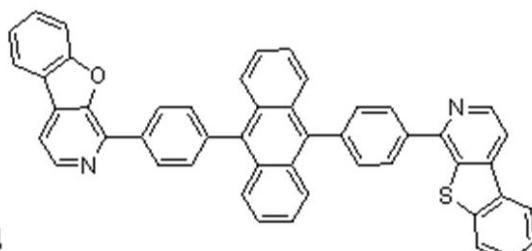
化合物 5-3



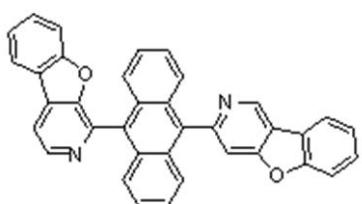
化合物 5-4



化合物 5-5



化合物 5-6



化合物 5-7

【請求項 7】

有機発光デバイスを含み、
アノードと、
カソードと、
前記アノード及び前記カソードの間に配置された、請求項 1 から 6 のいずれかに記載の化
合物を含む有機層を含む第一のデバイス。

10

20

30

40

50

【請求項 8】

有機層が非発光層であり、化合物が非発光化合物である請求項 7 に記載の第一のデバイス。

【請求項 9】

有機層が電子輸送層であり、化合物が電子輸送化合物である請求項 7 に記載の第一のデバイス。

【請求項 10】

電子輸送化合物が n 型伝導性ドーパントでドープされている請求項 7 から 9 のいずれかに記載の第一のデバイス。

【請求項 11】

n 型伝導性ドーパントが Li、Na、K、Rb 又は Cs を含む化合物である請求項 10 に記載の第一のデバイス。

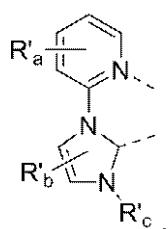
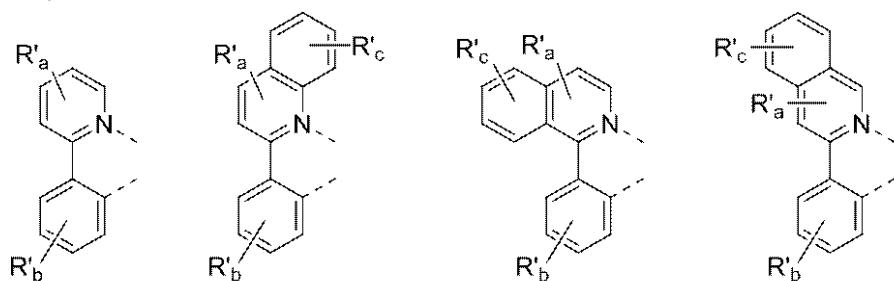
【請求項 12】

n 型伝導性ドーパントが LiF、CsF、NaCl、KBr 及び LiQ からなる群から選択される請求項 11 に記載の第一のデバイス。

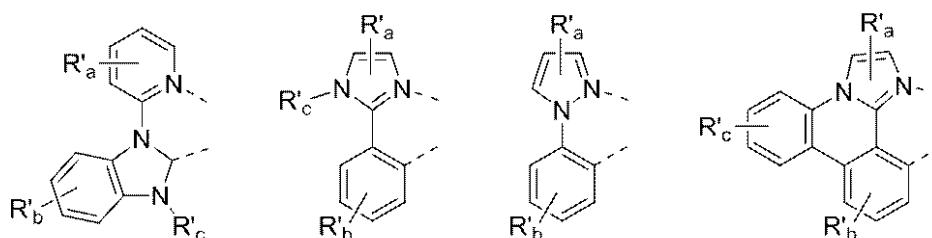
【請求項 13】

有機層が下記式からなる群から選択される少なくとも 1 つのリガンドを有する遷移金属錯体である発光性化合物を更に含む請求項 7 から 12 のいずれかに記載の第一のデバイス。

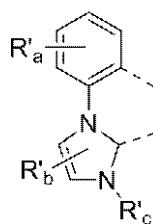
【化10】



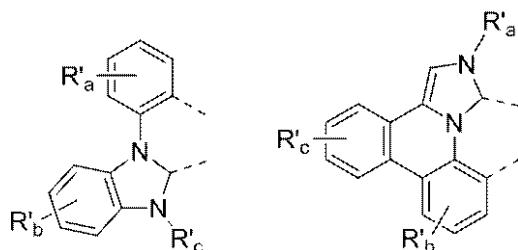
10



20



30



(式中、R'a、R'b及びR'cは、それぞれモノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表し；

R'a、R'b及びR'cは、それぞれ水素、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択され；

隣接する2つの置換基は、環を形成していてもよい)

【請求項14】

消費者製品である請求項7から13のいずれかに記載の第一のデバイス。

【請求項15】

有機発光デバイスである請求項7から13のいずれかに記載の第一のデバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

40

50

特許請求されている発明は、大学・企業の共同研究契約の下記の当事者：University of Michigan、Princeton University、University of Southern California、及びUniversal Display Corporationの理事らの1又は複数によって、その利益になるように、且つ／又は関連して為されたものである。該契約は、特許請求されている発明が為された日付以前に発効したものであり、特許請求されている発明は、該契約の範囲内で行われる活動の結果として為されたものである。

【0002】

本発明は、有機発光デバイス（OLED）に関する。より具体的には、本発明は、アザジベンゾ部分と、少なくとも3個のベンゼン環を有する縮合芳香族部分とを含む発光材料に関する。これらの材料をOLEDに用いることで改善された性能を有するデバイスを提供することができる。10

【背景技術】

【0003】

有機材料を利用する光電子デバイスは、いくつもの理由から、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、有機発光デバイス（OLED）、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。OLED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。例えば、有機放出層が光を放出する波長は、概して、適切なドーパントで容易に調整され得る。20

【0004】

OLED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。OLEDは、フラットパネルディスプレイ、照明及びバックライト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。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、特許文献1、特許文献2及び特許文献3において記述されている。

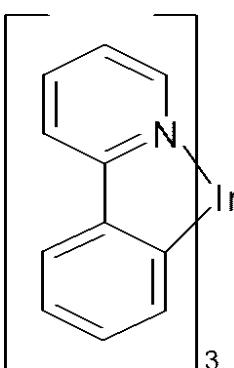
【0005】

リン光性放出分子の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」色と称される特定の色を放出するよう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。色は、当技術分野において周知のCIE座標を使用して測定することができる。30

【0006】

緑色放出分子の一例は、下記の構造：

【化1】



を有する、 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ と表示されるトリス（2-フェニルピリジン）イリジウムである。40

【0007】

この図面及び本明細書における後出の図面中で、本発明者らは、窒素から金属（ここで50

は I r) への配位結合を直線として描写する。

【 0 0 0 8 】

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小分子有機材料を含む。「小分子」は、ポリマーでない任意の有機材料を指し、且つ「小分子」は実際にはかなり大型であってよい。小分子は、いく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、「小分子」クラスから分子を除去しない。小分子は、例えばポリマー骨格上のペンドント基として、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。小分子は、コア部分上に構築された一連の化学的シェルからなるデンドリマーのコア部分として役立つことができる。デンドリマーのコア部分は、蛍光性又はリン光性小分子エミッターであってよい。デンドリマーは「小分子」であってよく、O L E D の分野において現在使用されているデンドリマーはすべて小分子であると考えられている。10

【 0 0 0 9 】

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。第一層が第二層「の上に配置されている」と記述される場合、第一層のほうが基板から遠くに配置されている。第一層が第二層「と接触している」ことが指定されているのでない限り、第一層と第二層との間に他の層があつてもよい。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。20

【 0 0 1 0 】

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、分散若しくは輸送することができ、且つ / 又は該媒質から堆積することができるという意味である。

【 0 0 1 1 】

配位子は、該配位子が放出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、該配位子が放出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。

【 0 0 1 2 】

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であろう通り、第一の「最高被占分子軌道」(H O M O) 又は「最低空分子軌道」(L U M O) エネルギー準位は、第一のエネルギー準位が真空エネルギー準位に近ければ、第二の H O M O 又は L U M O 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(I P)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 H O M O エネルギー準位は、より小さい絶対値を有する I P (あまり負でない I P) に相当する。同様に、より高い L U M O 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(E A) (あまり負でない E A) 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 L U M O エネルギー準位は、同じ材料の H O M O エネルギー準位よりも高い。「より高い」 H O M O 又は L U M O エネルギー準位は、「より低い」 H O M O 又は L U M O 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。3040

【 0 0 1 3 】

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であろう通り、第一の仕事関数がより高い絶対値を有するならば、第一の仕事関数は第二の仕事関数「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向に遠く離れているものとして例証される。故に、H O M O 及び L U M O 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。

【 0 0 1 4 】

O L E D についての更なる詳細及び上述した定義は、参照によりその全体が本明細書に50

組み込まれる特許文献4において見ることができる。

【発明の概要】

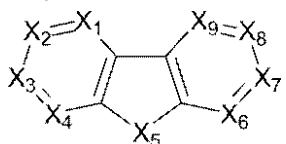
【0015】

アザ-ジベンゾ部分と、少なくとも3個のベンゼン環を有する縮合芳香族部分とを含む化合物が提供される。これら化合物は、次式 Ar (L_iD_i)_n を有する。

【0016】

Arは、少なくとも3個のベンゼン環を有する縮合芳香族環を含み、前記縮合芳香族環は、440 nm未満の三重項エネルギーを有する。Arは、更に置換されていてもよい。Lは、単結合又は2価の連結基である。nは、少なくとも1である。iは、n個の構造をL_i及びD_iについて特定する指標変数であり、L_i及びD_iは、iの値について同一であっても異なっていてもよい。各L_iは、独立して単結合又は2価の連結基である。各D_iは、独立して下記構造を有する。

【化2】



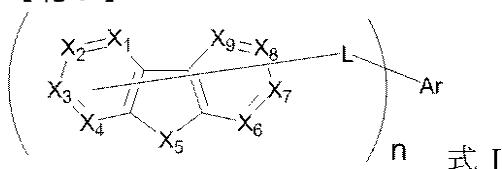
【0017】

X₅は、O、S又はSeである。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈及びX₉は、それぞれ独立してC(R)及びNから選択される。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈及びX₉の少なくとも1つは、Nである。Rは、それぞれ独立して水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される。Rは、Lと結合していてもよい。

【0018】

一態様において前記化合物は、下記式を有する。

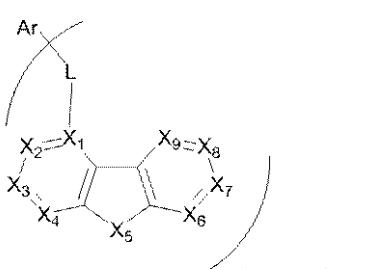
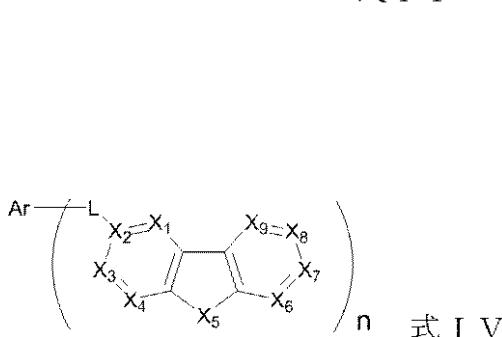
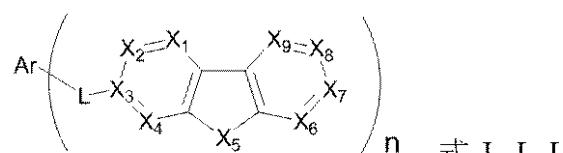
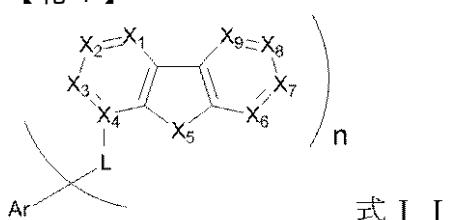
【化3】



【0019】

他の態様において前記化合物は、下記式からなる群から選択される式を有する。

【化4】



【0020】

10

20

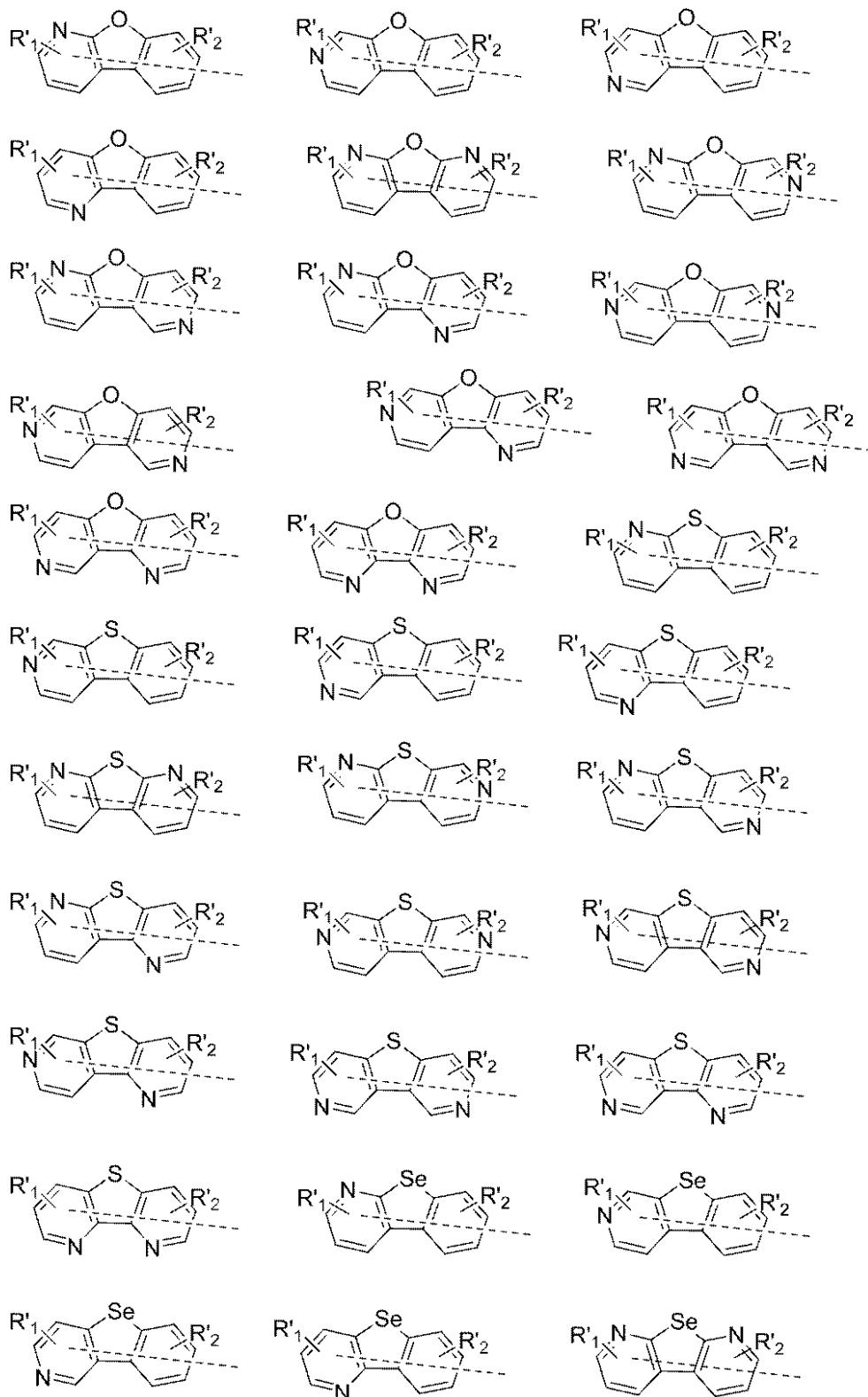
30

40

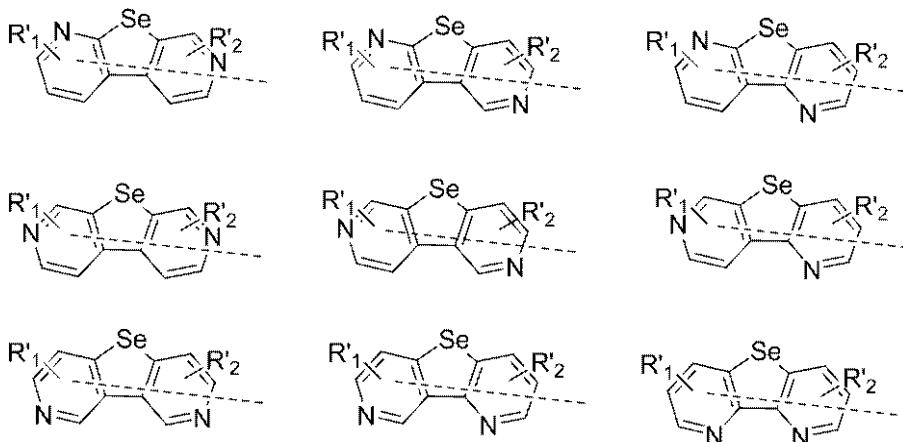
50

一態様において各 D_i は、下記式からなる群から選択される。

【化 5】



【化6】



10

【0021】

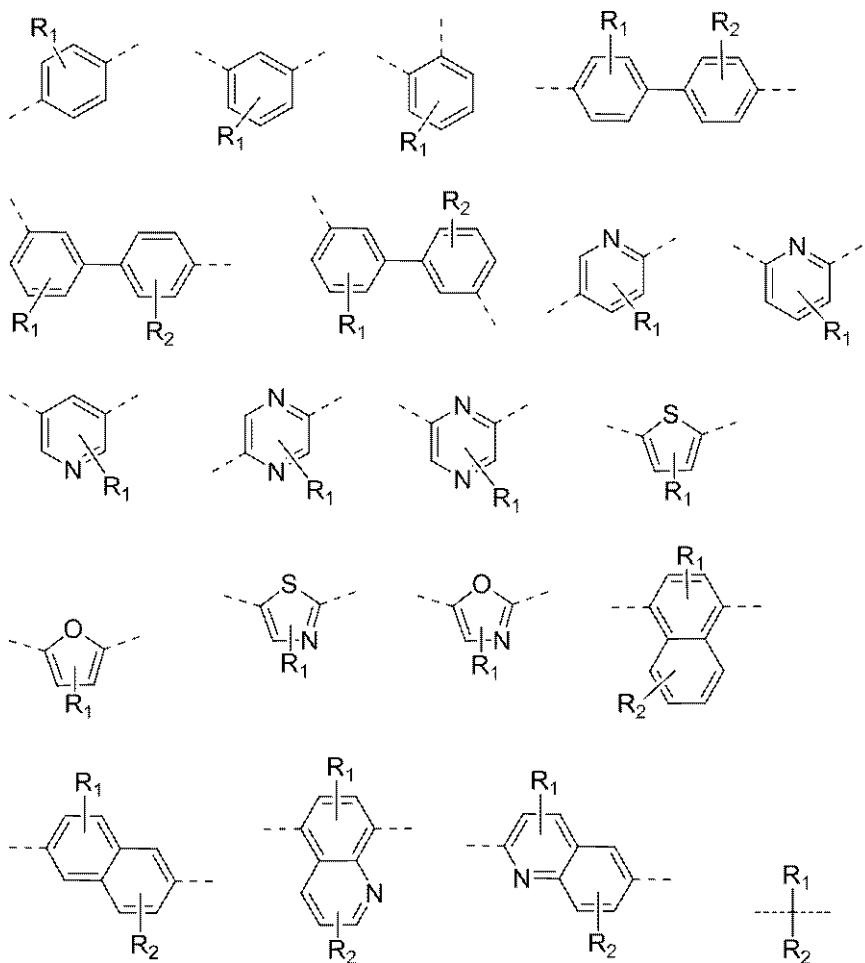
R' ₁ 及び R' ₂ は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R' ₁ 及び R' ₂ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0022】

一態様において L は、単結合である。他の態様において各 L_i は、下記式からなる群から独立して選択される。

20

【化7】



30

40

【0023】

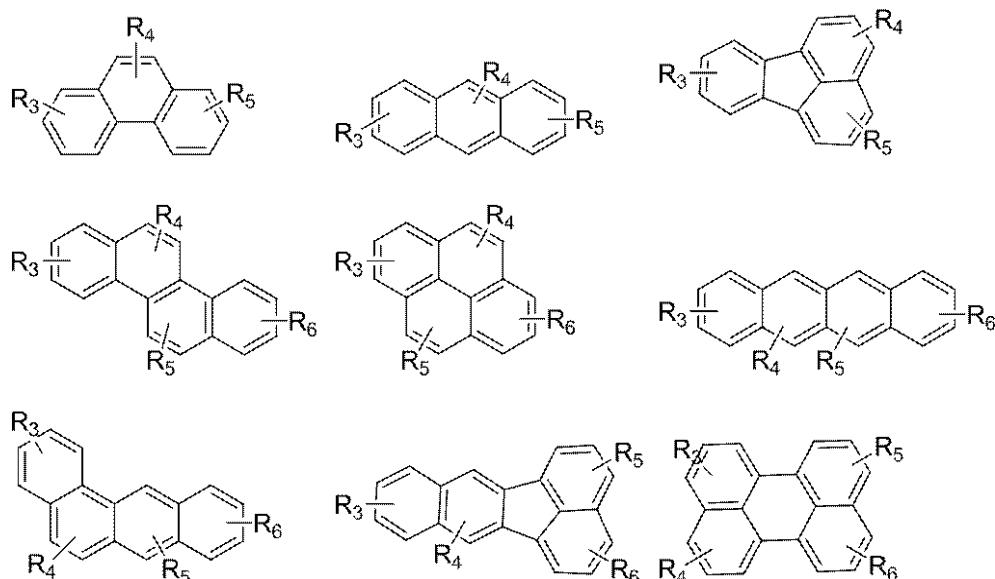
R_1 及び R_2 は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R_1 及び R_2 は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

50

【0024】

他の態様においてArは、下記式からなる群から選択される。

【化8】



【0025】

R₃、R₄、R₅及びR₆は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄、R₅及びR₆は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

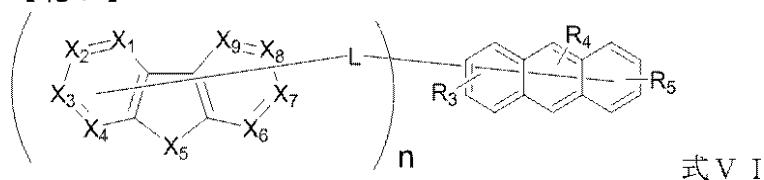
【0026】

一態様において、nは1である。他の態様において、nは1より大きく、且つ各D_iは、同一の構造を有する。更に他の態様において、nは1より大きく、且つ少なくとも2つのD_iが異なる構造を有する。更に他の態様において、nは2である。

【0027】

前記化合物は、下記式を有することが好ましい。

【化9】



【0028】

R₃、R₄及びR₅は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄及びR₅は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0029】

前記アザ-ジベンゾ部分と、拡張された共役を有する芳香族部分とを含む化合物の具体的且つ非限定的な例を示す。一態様において、前記化合物は、下記式からなる群から選択される。

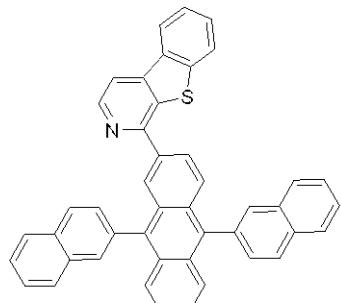
10

20

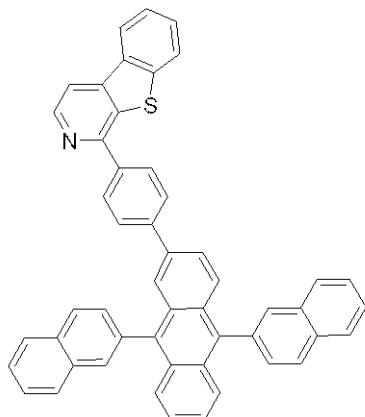
30

40

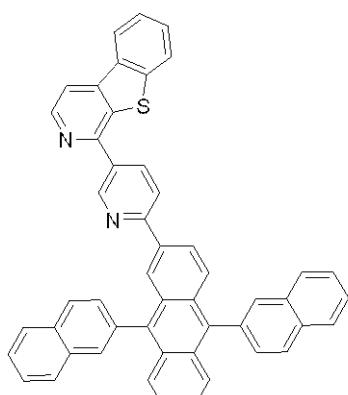
【化 10】



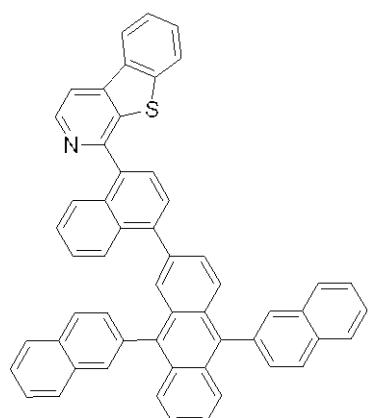
化合物 1



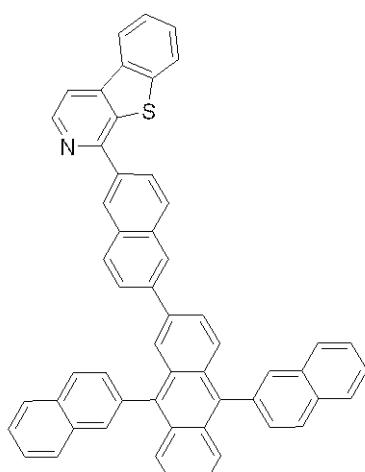
化合物 2



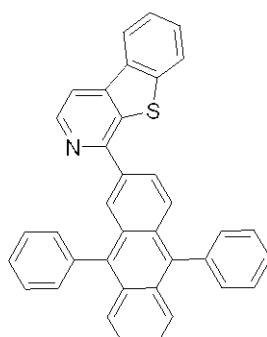
化合物 3



化合物 4



化合物 5



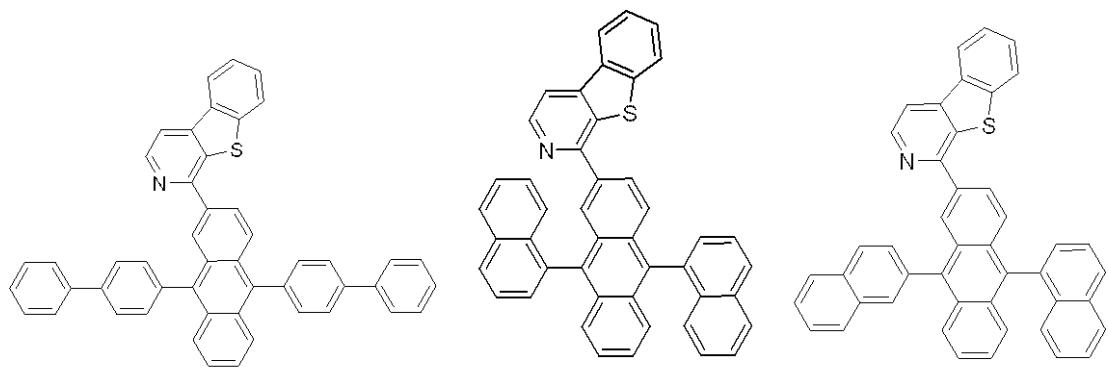
化合物 6

10

20

30

40

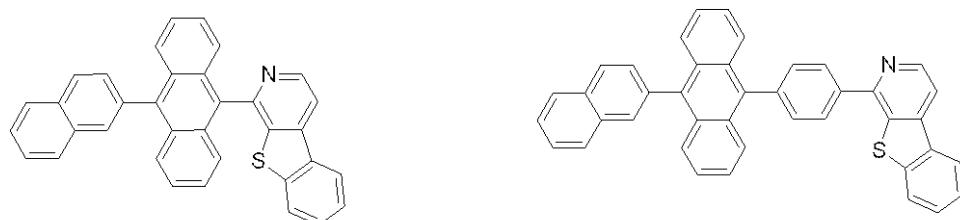


10

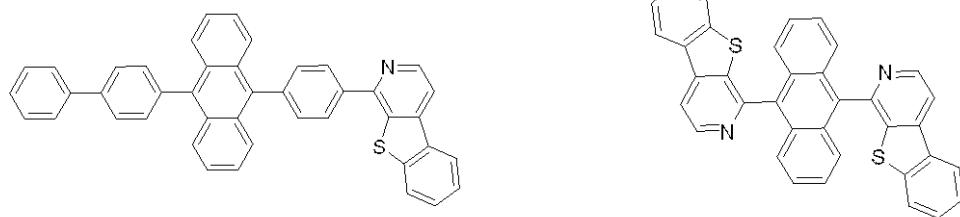
化合物 7

化合物 8

化合物 9

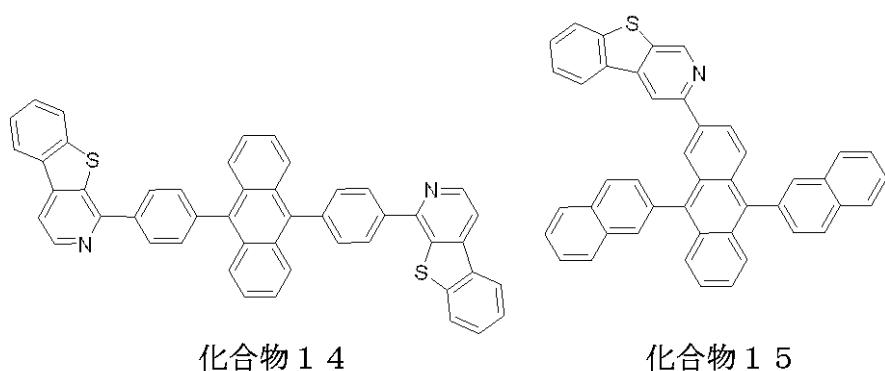


20



化合物 12

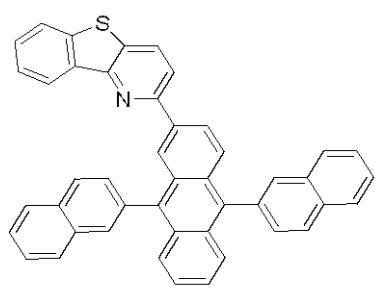
化合物 13



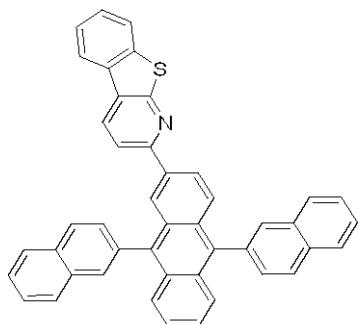
30

化合物 14

化合物 15

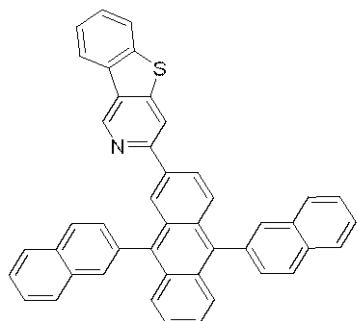


化合物 1 6



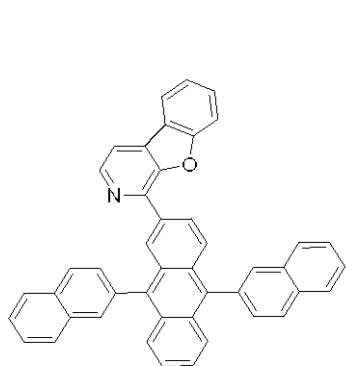
化合物 1 7

10

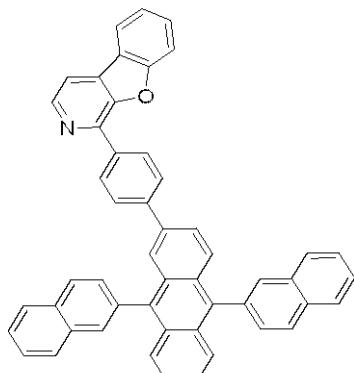


化合物 1 8

20

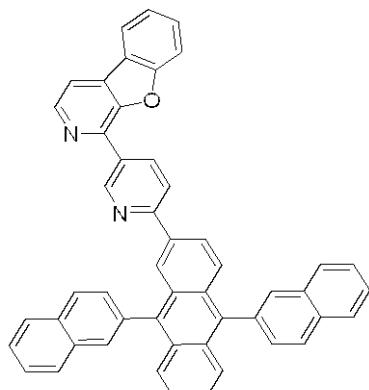


化合物 1 9



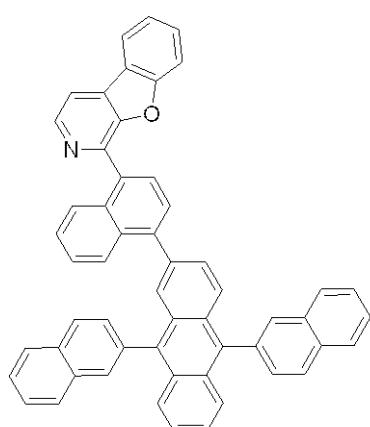
化合物 2 0

30

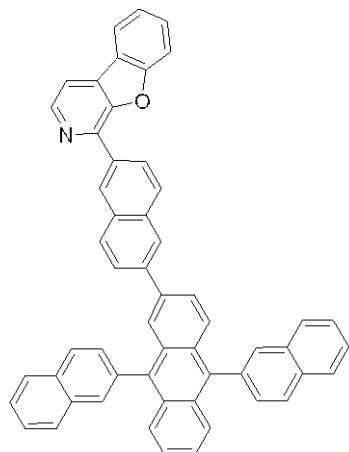


化合物 2 1

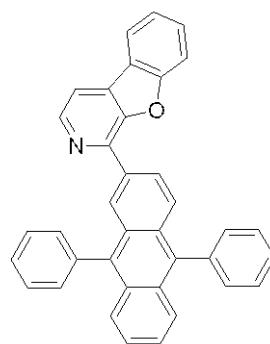
40



化合物 2-2

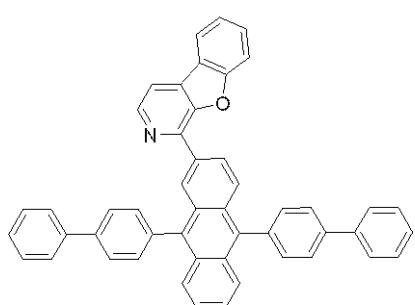


化合物 2-3

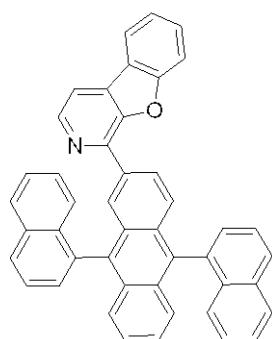


化合物 2-4

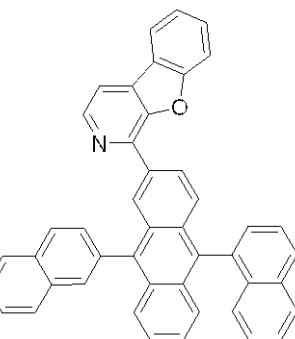
10



化合物 2-5

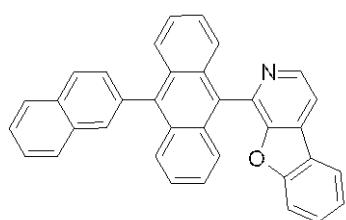


化合物 2-6

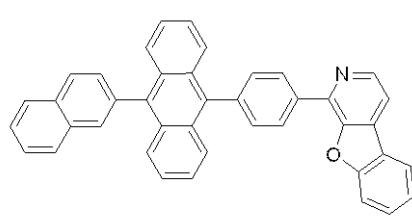


化合物 2-7

20

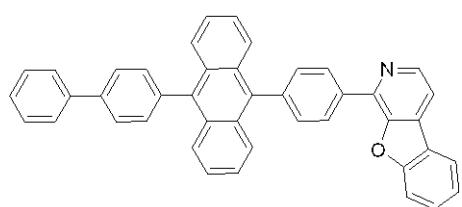


化合物 2-8

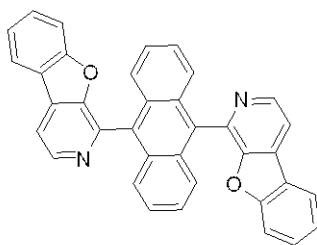


化合物 2-9

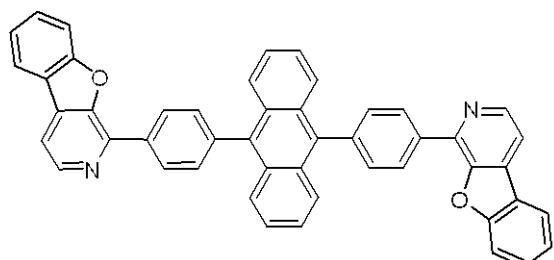
30



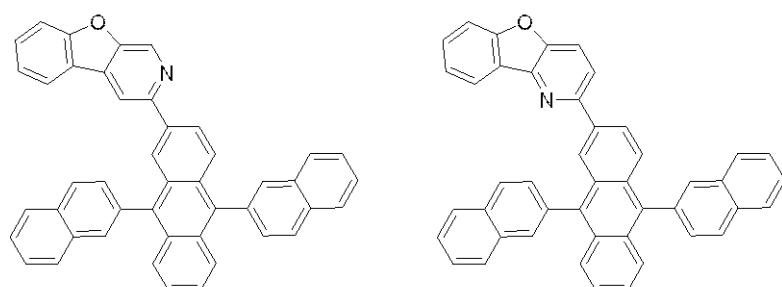
化合物 3 0



化合物 3 1

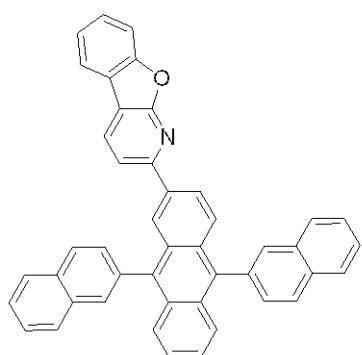


化合物 3 2



化合物 3 3

化合物 3 4



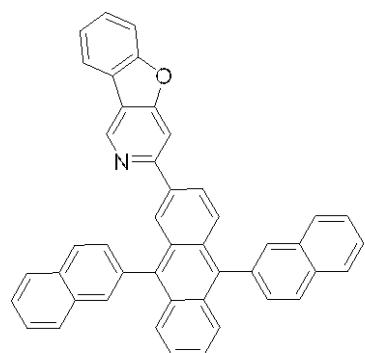
化合物 3 5

10

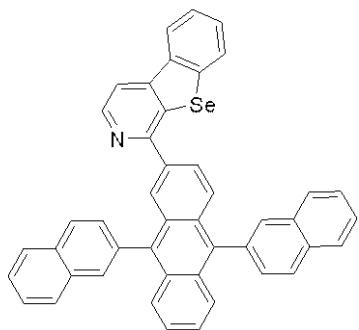
20

30

40

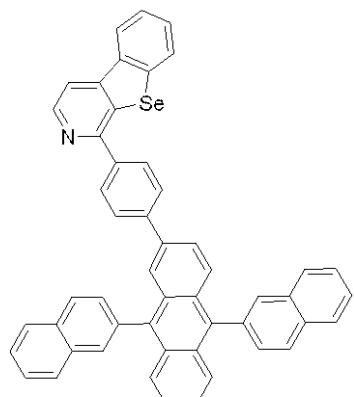


化合物 3 6



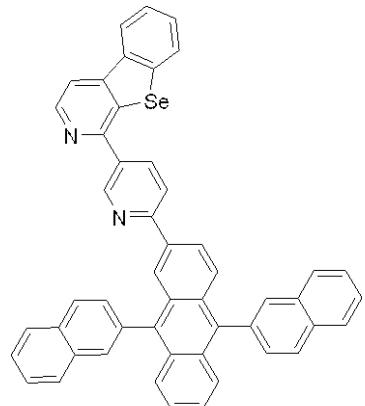
化合物 3 7

10

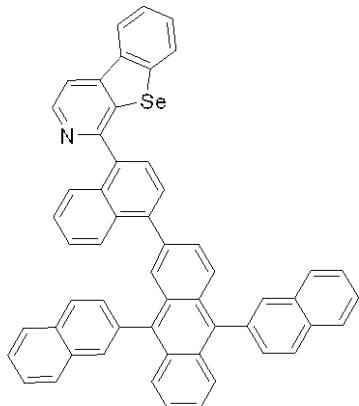


化合物 3 8

20

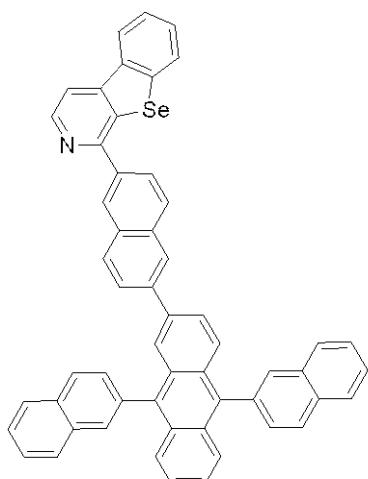


化合物 3 9



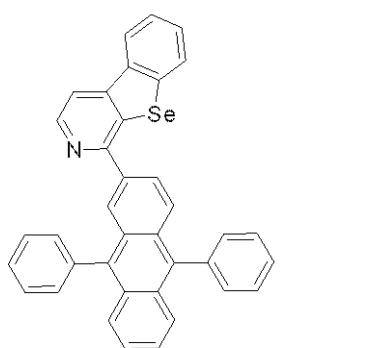
化合物 4 0

30



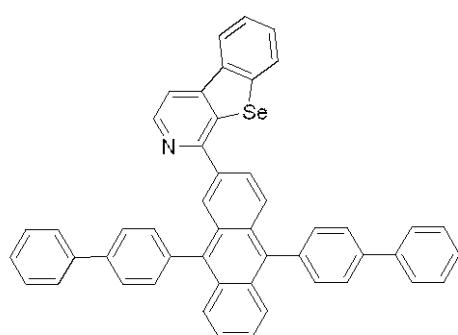
化合物 4-1

10



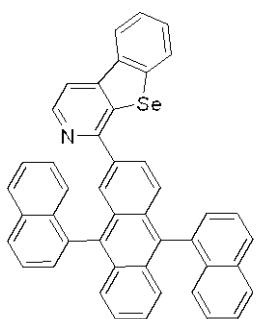
化合物 4-2

20

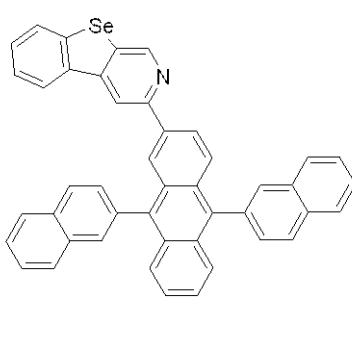
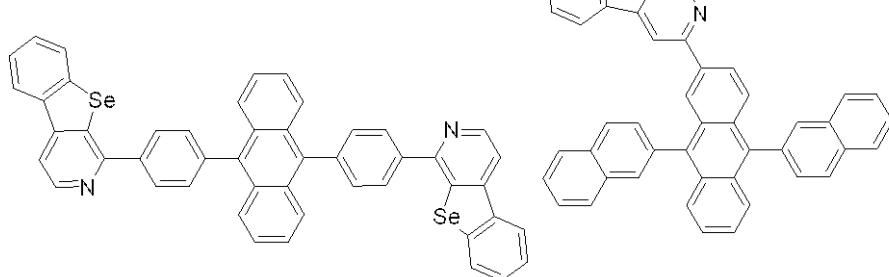
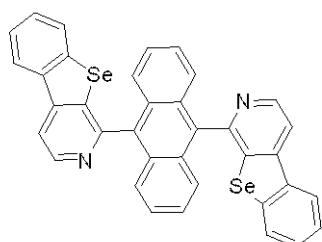
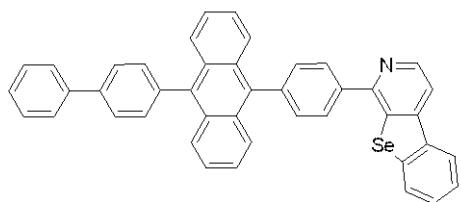
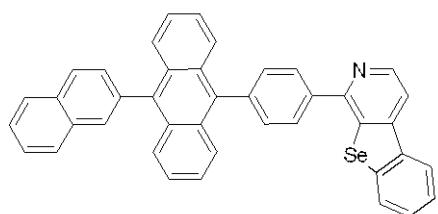
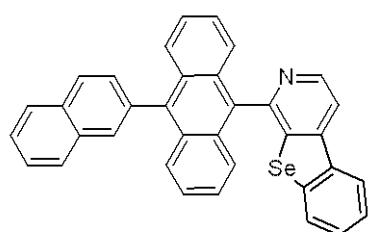
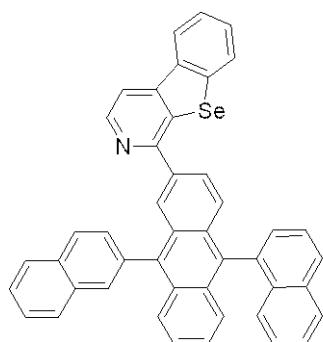


化合物 4-3

30



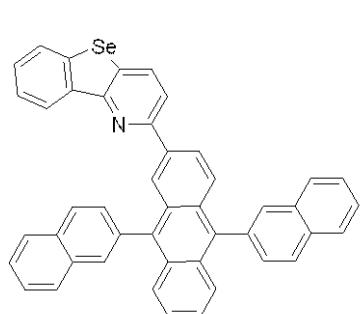
化合物 4-4



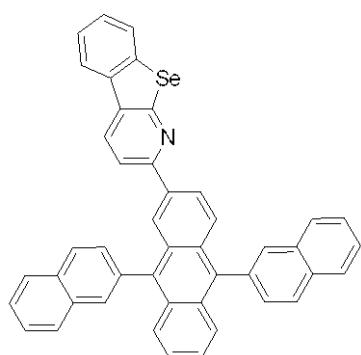
10

20

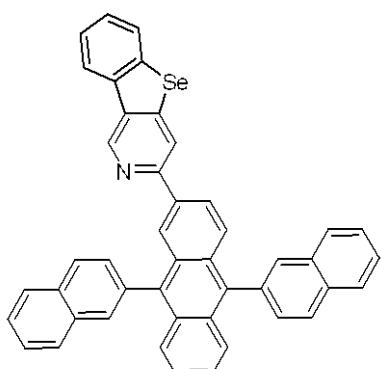
30



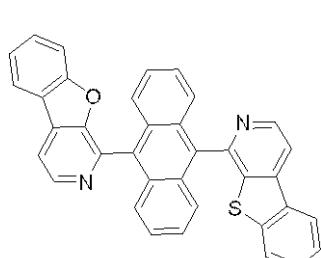
化合物 5-2



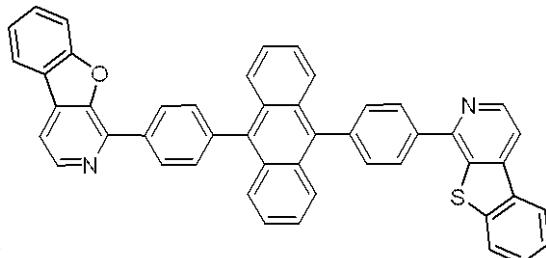
化合物 5-3



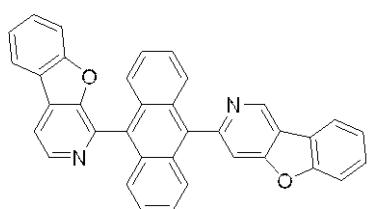
化合物 5-4



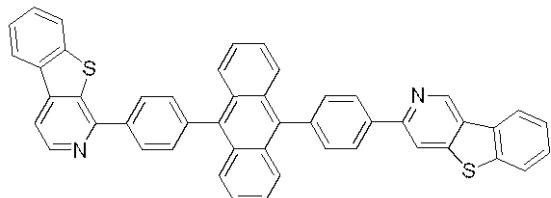
化合物 5-5



化合物 5-6



化合物 5-7



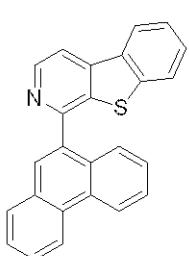
化合物 5-8

10

20

30

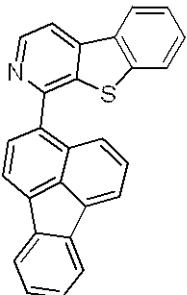
40



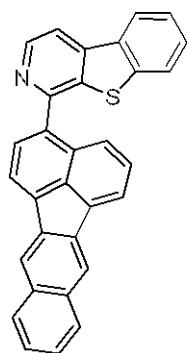
化合物 5 9



化合物 6 0

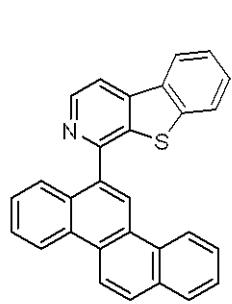


化合物 6 1

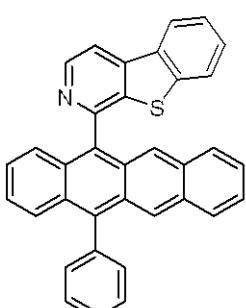


化合物 6 2

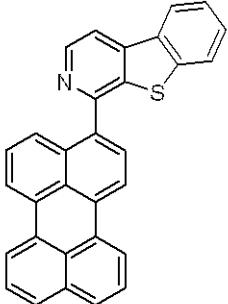
10



化合物 6 3



化合物 6 4



化合物 6 5

20

【0030】

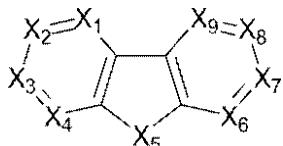
また、有機発光デバイスを含む第一のデバイスも提供される。前記有機発光デバイスは、アノードと、カソードと、アノード及びカソードの間に配置された有機層とを含む。該有機層は、式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物を含む。

【0031】

Ar は、少なくとも 3 個のベンゼン環を有する縮合芳香族環を含み、前記縮合芳香族環は、440 nm 未満の三重項エネルギーを有する。Ar は、更に置換されていてもよい。L は、単結合又は 2 倍の連結基である。n は、少なくとも 1 である。i は、n 個の構造を L_i 及び D_i について特定する指標変数であり、L_i 及び D_i は、i の値について同一であっても異なっていてもよい。各 L_i は、独立して単結合又は 2 倍の連結基である。各 D_i は、独立して下記構造を有する。

30

【化 11】



【0032】

40

X₅ は、O、S 又は Se である。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈ 及び X₉ は、それぞれ独立して C(R) 及び N から選択される。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈ 及び X₉ の少なくとも 1 つは、N である。R は、それぞれ独立して水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される。R は、L と結合していてもよい。

【0033】

前記式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物について上述した各種の具体的な態様を、第一のデバイスに用いる式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物にも適用することができる。特に、上述した式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物の Ar、L、n、i、L_i、D_i、X₁ ~ X₉、R、R'₁、R'₂、R₁ ~ R₆、式 I、式 II、式 III、式 IV、式 V

50

及び式V Iの具体的な態様が、前記第一のデバイスに用いられる式 $A_r(L_iD_i)_n$ を有する化合物にも適用することができる。

【0034】

本明細書に開示の前記化合物を含むデバイスの具体的且つ非限定的な例を示す。一態様において、前記第一のデバイスに用いられる前記化合物は、化合物1～化合物65からなる群から選択される。

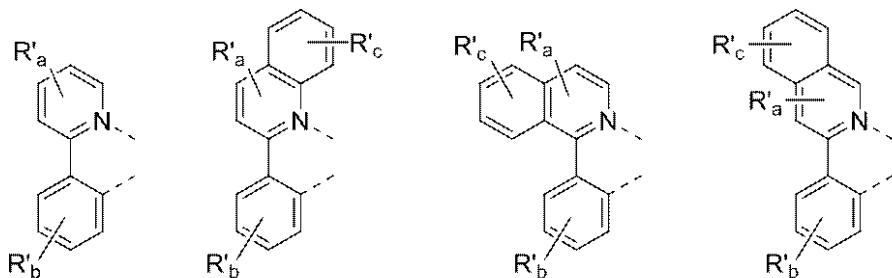
【0035】

一態様において、前記有機層は非発光層であり、前記化合物は非発光化合物である。他の態様において、前記有機層は電子輸送層であり、前記化合物は電子輸送化合物である。更に他の態様において、前記電子輸送層はn型伝導性ドーパントでドープされている。一態様において、前記n型伝導性ドーパントは、Li、Na、K、Rb又はCsを含む化合物である。好ましくは、前記n型伝導性ドーパントは、LiF、CsF、NaCl、KBr及びLiQからなる群から選択される。

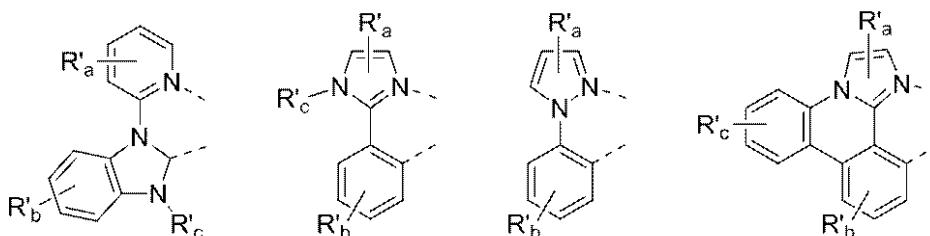
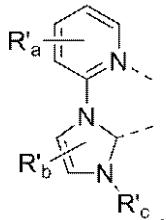
【0036】

他の態様において、前記有機層は、下記式からなる群から選択される少なくとも1つのリガンドを有する遷移金属錯体である発光性化合物を更に含む。

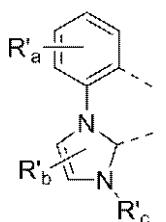
【化12】



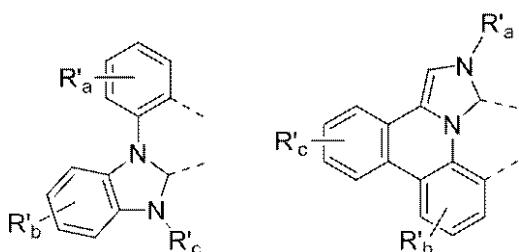
10



20



30



【0037】

R' _a、 R' _b 及び R' _c はそれぞれ、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R' _a、 R' _b 及び R' _c はそれぞれ、水素、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。隣接する 2 つの置換基は、環を形成していてもよい。

40

【0038】

一態様において、前記第一のデバイスは、消費者製品である。他の態様においては、前記第一のデバイスは、有機発光デバイスである。

【図面の簡単な説明】

【0039】

【図1】有機発光デバイスを示す図である。

【0040】

【図2】別個の電子輸送層を有さない反転させた有機発光デバイスを示す図である。

50

【0041】

【図3】アザ - ジベンゾ部分と、拡張された共役を有する芳香族部分とを含む化合物の一例を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0042】

概して、OLEDは、アノード及びカソードの間に配置され、それらと電気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。いくつかの事例において、励起子はエキシマー又はエキシプレックス上に局在し得る。熱緩和等の非放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。10

【0043】

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放出分子（「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。

【0044】

ごく最近では、三重項状態から光を放出する放出材料（「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」、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。20

【0045】

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、電子プロッキング層130、放出層135、正孔プロッキング層140、電子輸送層145、電子注入層150、保護層155及びカソード160を含み得る。カソード160は、第一の導電層162及び第二の導電層164を有する化合物カソードである。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。30

【0046】

これらの層のそれについて、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をF4-TCNQにドープしたものである。放出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層を持つMg : Ag等の金属の薄層を有する化合物カソードを含むカソード4050

の例を開示している。プ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。

【0047】

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、放出層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と称されることがある。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、いく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。

【0048】

図1及び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、本発明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、正孔を放出層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2に関して記述されている通りの異なる有機材料の多層を更に含んでいてよい。

【0049】

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もよい。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通りのメサ構造及び/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通りのくぼみ構造等、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。

【0050】

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発、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)

10

20

30

40

50

)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願第10/233、470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、スピンドル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発を含む。好ましいバーニング法は、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OVJD等の堆積法のいくつかに関連するバーニングを含む。他の方法を使用してもよい。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、且つ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、溶液プロセシングを受ける能力を増強するために、小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。非対称構造を持つ材料は、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。溶液プロセシングを受ける小分子の能力を増強するために、デンドリマー置換基が使用され得る。

【0051】

本発明の実施形態に従って製作されたデバイスは、フラットパネルディスプレイ、コンピュータモニター、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、パーソナルデジタルアシスタント(PDA)、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、ファインダー、マイクロディスプレイ、車、大面積壁、劇場又はスタジアムのスクリーン、或いは看板を含む多種多様な消費者製品に組み込まれ得る。パッシブマトリックス及びアクティブマトリックスを含む種々の制御機構を使用して、本発明に従って製作されたデバイスを制御することができる。デバイスの多くは、摂氏18度から摂氏30度、より好ましくは室温(摂氏20~25度)等、ヒトに快適な温度範囲内の使用が意図されている。

【0052】

本明細書において記述されている材料及び構造は、OLED以外のデバイスにおける用途を有し得る。例えば、有機太陽電池及び有機光検出器等の他の光電子デバイスが、該材料及び構造を用い得る。より一般的には、有機トランジスタ等の有機デバイスが、該材料及び構造を用い得る。

【0053】

用語ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリルキル、複素環式基、アリール、芳香族基及びヘテロアリールは当技術分野において公知であり、参照により本明細書に組み込まれるUS7,279,704、31~32段において定義されている。

【0054】

OLEDの電子輸送層(ETL)中に用いるための各種材料が報告されている。例えば、アントラセン-ベンズイミダゾール化合物、アザトリフェニレン誘導体、アントラセン-ベンゾチアゾール化合物、及び金属8-ヒドロキノレートのいずれも、電子輸送材料に通常用いられる。表1に、通常用いられる幾つかの電子輸送材料をまとめる。

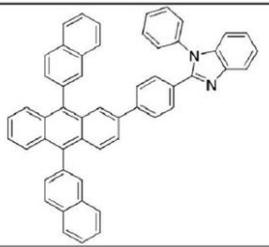
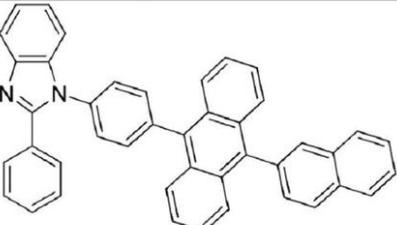
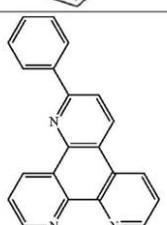
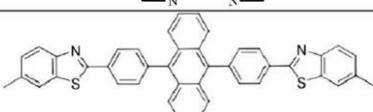
10

20

30

40

【表 1 - 1】

電子輸送材料		
アントラセンーベン ゾイミダゾール化合物		WO 2003060956
		U.S. 20090179554
アザトリフェニレン 誘導体		U.S. 20090115316
アントラセンーベン ゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)

10

20

【表 1 - 2】

金属8-ヒドロキシキノレート(例えば、Alq ₃ 、Zr _q ₄)		App l. Phys. Lett. 51, 913 (1987) U.S. 7,230,107	10
金属ヒドロキシベノキノレート(hydroxybenoquinolates)		Chem. Lett. 5, 905 (1993)	
BCP、BPhen等のバトクプロイン化合物		App l. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)	20
		App l. Phys. Lett. 79, 449 (2001)	
5員環電子欠損複素環(例えば、トリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール)		App l. Phys. Lett. 74, 865 (1999)	30
		App l. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)	
		Jpn. Appl. Phys. 32, L917 (1993)	
シロール化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)	40

【表 1 - 3】

アリールボラン化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)	
フッ素化芳香族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)	10
フラーレン（例えば、C ₆₀ ）		U.S. 20090 101870	
トリアジン錯体		U.S. 20040 036077	20
Zn (N ⁺ N) 錯体		U.S. 65281 87	30

【0055】

多くの材料がETL材料としての使用について報告されているものの、低作動電圧と良好な安定性を有するデバイスの開発は依然として問題点を残している。Alqは、一般的に用いられるETL材料であるが、Alqは、OLEDでの使用に制約がある。Alqは、良好な安定性を有するが、Alqを含むデバイスは、低電子移動度に起因して高作動電圧を有する。ベンズイミダゾール置換基を有するアントラセン化合物もまたETL材料として報告されている。例えば、U.S. 6,878,469及びU.S. 20090179554を参照。しかしながら、これらの化合物もまた、デバイスにおけるETL材料として使用されたときに制約を有する。ベンズイミダゾール、オキサジアゾール、トリアゾール、トリアジン、及びピリジンなどの電子欠乏ヘテロ環を導入することにより、電子親和性を上昇させることができ、これにより、電子輸送性が良好となり且つデバイス電圧が低下するが、多くの場合これらの化合物は、デバイスの寿命も短くしてしまう。

【0056】

電子欠乏基を加えることがデバイス性能を向上させるかどうかを予測することは非常に難しい。例えば、ベンズイミダゾール置換基を有するアントラセン化合物を含むデバイスは、AlqをETL材料として用いるデバイスに比べ、妥当なデバイス寿命と作動電圧を有する。しかしながら、ETLにこれらの電子欠乏ヘテロ環化合物を用いるデバイスの多

くは、寿命が非常に短い。例えば、1, 3, 5 - トリス(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダソール-2-イル)ベンゼン(TPBi)をETL材料として用いるデバイスは、良好な効率を有するが寿命は非常に短い。したがって、どの化合物が低作動電圧と長デバイス寿命をもたらし得るかを予測することは非常に難しい。

【0057】

アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン、及びアザジベンゾセレノフェンは、リン光OLEDにおけるホスト材料の構成単位として用いられている。JP2008074939を参照。これらの材料は、対応するジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、及びジベンゾセレノフェンよりも低いLUMO、即ちより良好な電子親和性を有する。これらのアザヘテロ環化合物の電子親和性はETL材料に有利に用いることができると考えられる。10

【0058】

本明細書中に提供される化合物は、低三重項エネルギーを有する縮合芳香環を含む芳香族部分と、アザ-ジベンゾ部分とを含む。前記アザ-ジベンゾ部分、例えば、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン、及びアザジベンゾセレノフェンと、前記芳香族部分、例えば、アントラセンとを、化合物中に組み合わせることにより、低電圧と良好なデバイス安定性をもたらすETL材料となる。特に、本明細書中に提供される化合物は、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン、又はアザジベンゾセレノフェンで置換されたアントラセン化合物を含む。これらの化合物は、OLEDにおけるETL材料として用いられて、良好なデバイス安定性を維持しつつ作動電圧が低下したデバイスを提供することができる。何ら理論に拘束されるものではないが、前記化合物のアザ-ジベンゾ部分が、LUMOを低下させることによってデバイス電圧を向上させ、低三重項エネルギー（即ち、より高い共役）を有する芳香族部分が、電子を非局在化且つ不安定化することによってデバイス安定性を向上させると考えられる。20

【0059】

更に、本明細書中に提供されるETL材料は、例えば、LiF、CsF、NaCl、KB_r、及びLiQなどのn型伝導性ドーパントでドープされていてもよい。

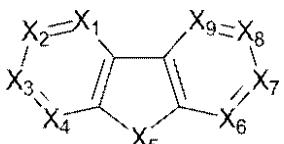
【0060】

アザ-ジベンゾ部分と、少なくとも3個のベンゼン環を有する縮合芳香族部分とを含む化合物が提供される。これら化合物は、次式Ar(L_iD_i)_nを有する。30

【0061】

Arは、少なくとも3個のベンゼン環を有する縮合芳香族環を含み、前記縮合芳香族環は、440nm未満の三重項エネルギーを有する。Arは、更に置換されていてもよい。Lは、単結合又は2価の連結基である。nは、少なくとも1である。iは、n個の構造をL_i及びD_iについて特定する指標変数であり、L_i及びD_iは、iの値について同一であっても異なっていてもよい。各L_iは、独立して単結合又は2価の連結基である。各D_iは、独立して下記構造を有する。

【化13】



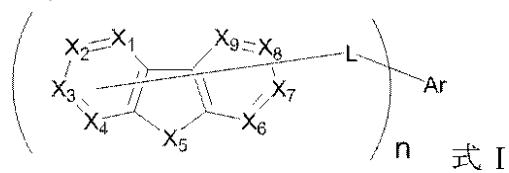
【0062】

X₅は、O、S又はSeである。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈及びX₉は、それぞれ独立してC(R)及びNから選択される。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈及びX₉の少なくとも1つは、Nである。Rは、それぞれ独立して水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される。Rは、Lと結合していてもよい。40

【0063】

一態様において前記化合物は、下記式を有する。

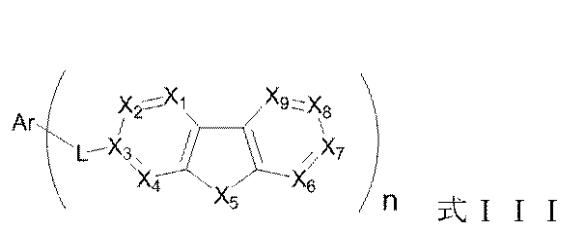
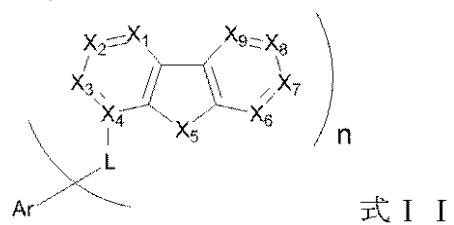
【化14】



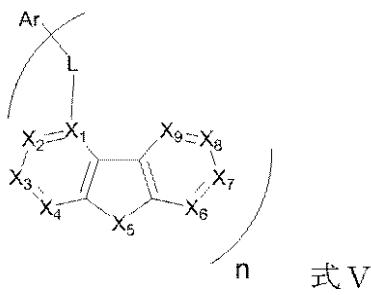
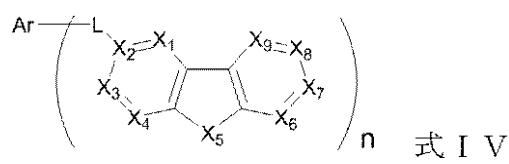
【0064】

他の態様において前記化合物は、下記式からなる群から選択される式を有する。

【化15】



10

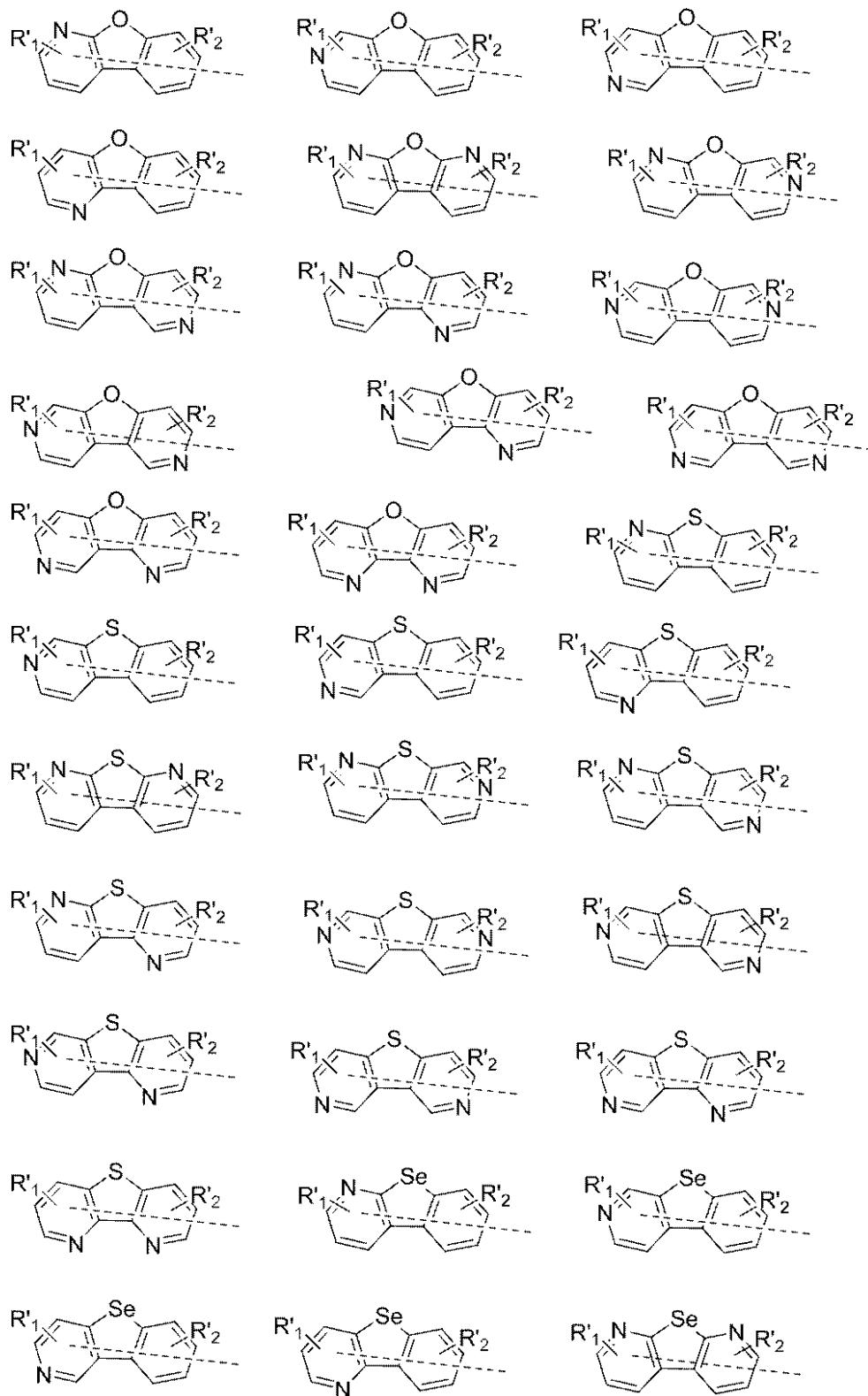


20

【0065】

一態様において各 D_i は、下記式からなる群から選択される。

【化 16】



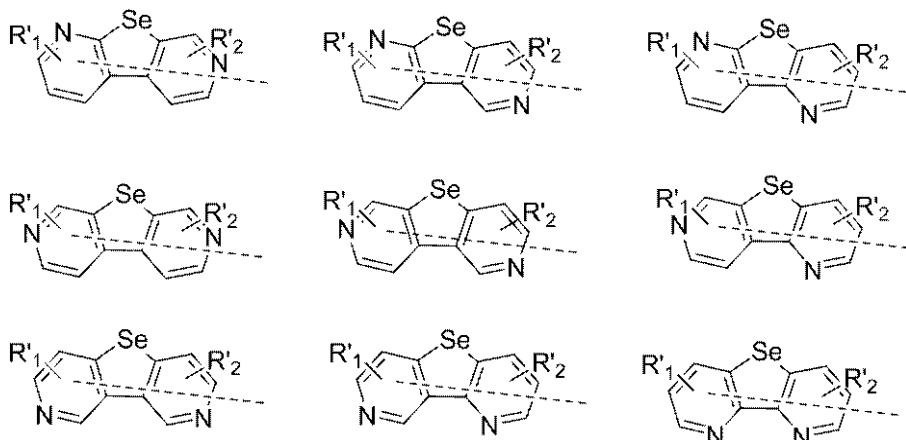
10

20

30

40

【化17】



10

【0066】

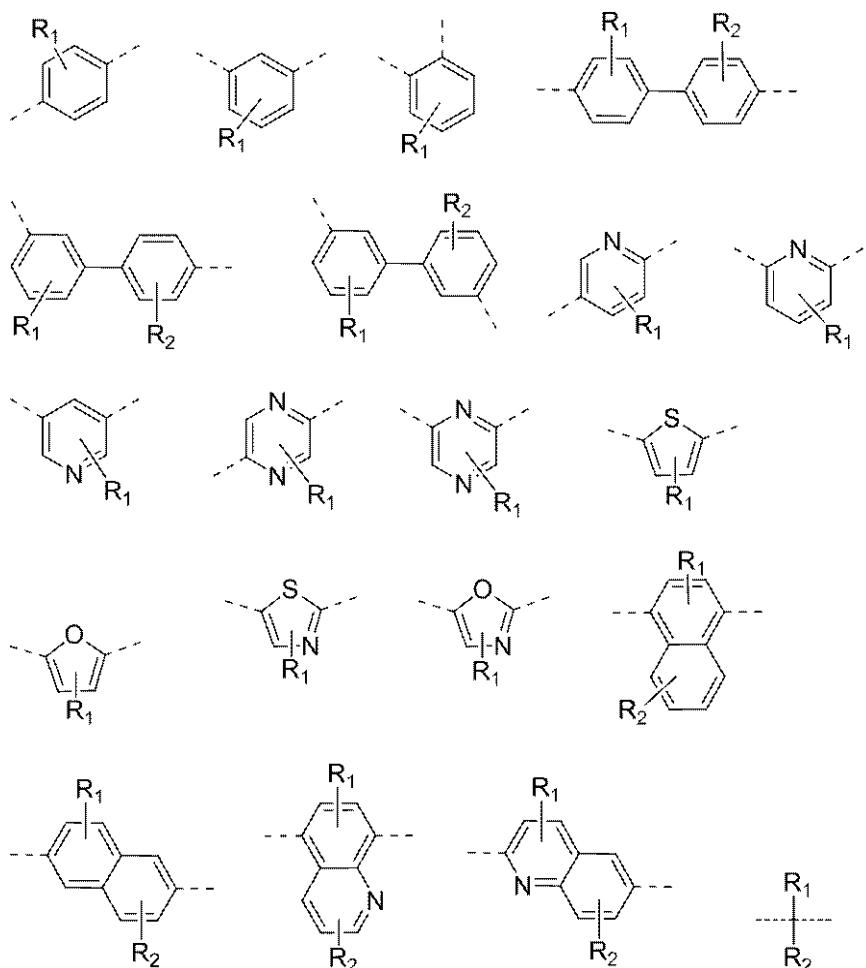
R' ₁ 及び R' ₂ は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R' ₁ 及び R' ₂ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0067】

一態様において L は、単結合である。他の態様において各 L_i は、下記式からなる群から独立して選択される。

20

【化18】



30

40

【0068】

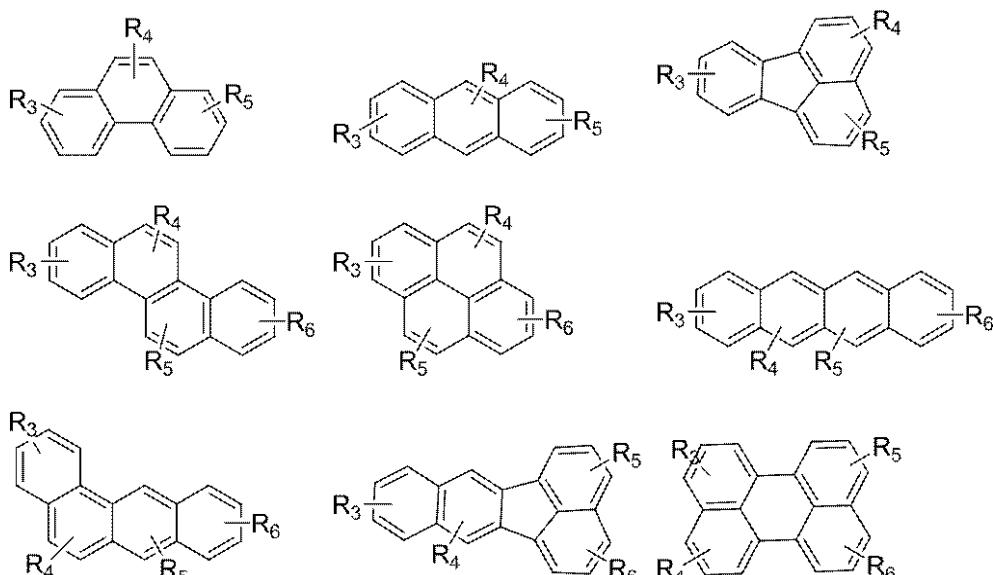
R_1 及び R_2 は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R_1 及び R_2 は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

50

【0069】

他の態様においてArは、下記式からなる群から選択される。

【化19】



10

【0070】

R₃、R₄、R₅及びR₆は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄、R₅及びR₆は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

20

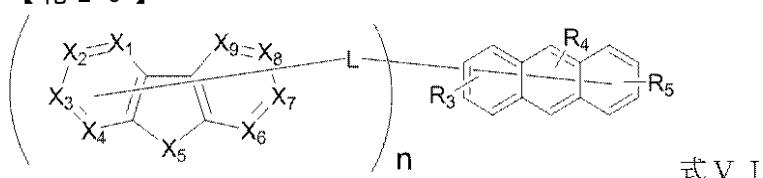
【0071】

一態様において、nは1である。他の態様において、nは1より大きく、且つ各D_iは、同一の構造を有する。更に他の態様において、nは1より大きく、且つ少なくとも2つのD_iが異なる構造を有する。更に他の態様において、nは2である。

【0072】

前記化合物は、下記式を有することが好ましい。

【化20】



30

【0073】

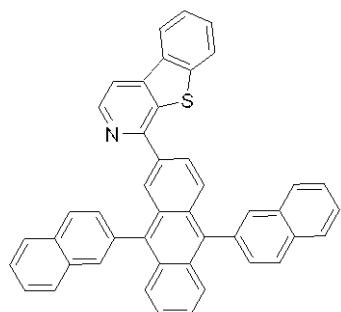
R₃、R₄及びR₅は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄及びR₅は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0074】

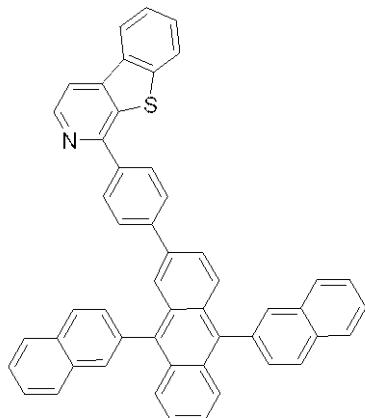
前記アザ-ジベンゾ部分と、拡張された共役を有する芳香族部分とを含む化合物の具体的且つ非限定的な例を示す。一態様において、前記化合物は、下記式からなる群から選択される。

40

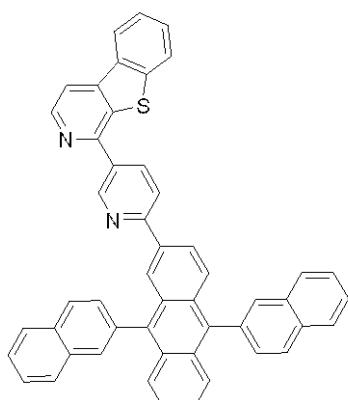
【化 21】



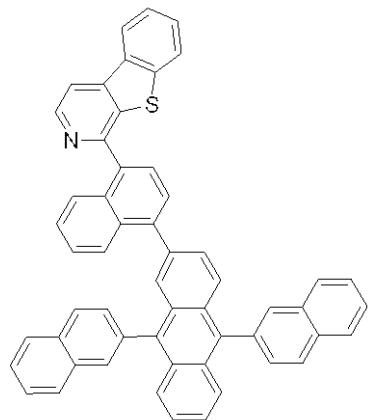
化合物 1



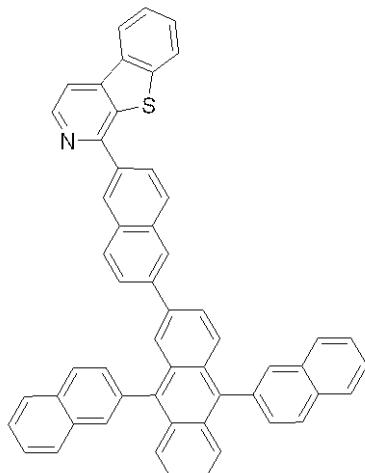
化合物 2



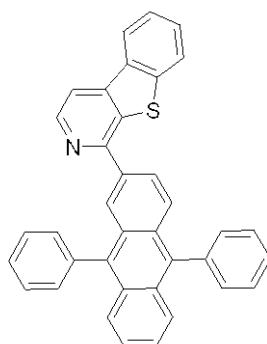
化合物 3



化合物 4



化合物 5



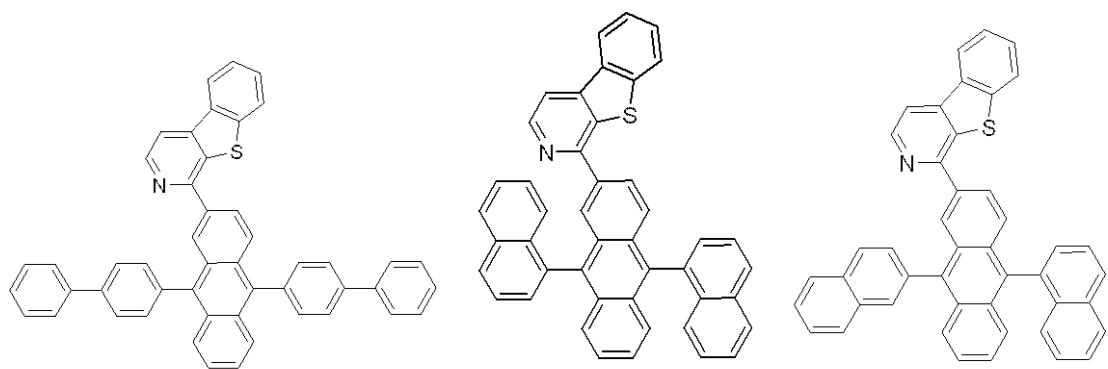
化合物 6

10

20

30

40

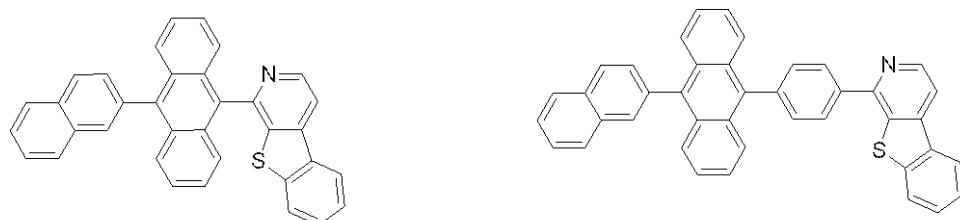


10

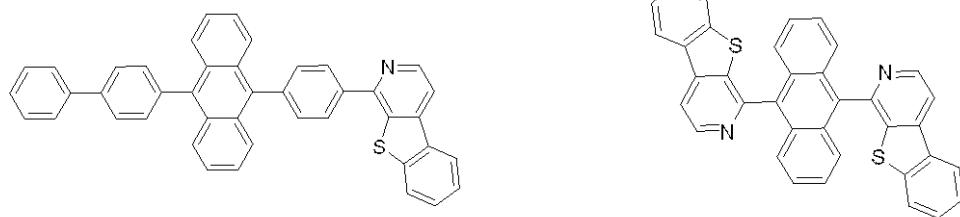
化合物 7

化合物 8

化合物 9

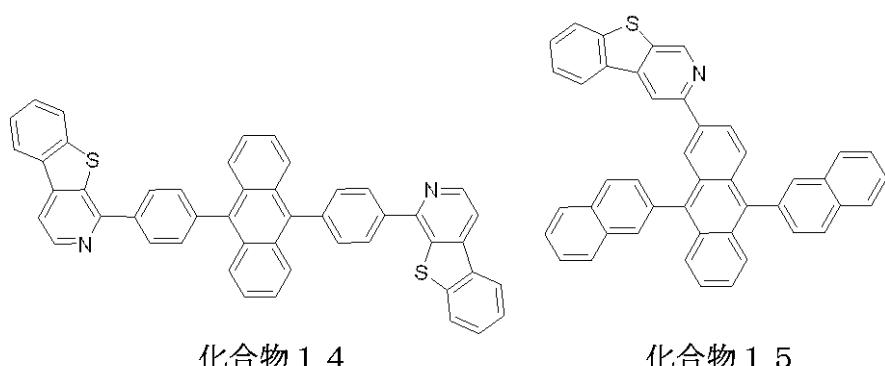


20



化合物 12

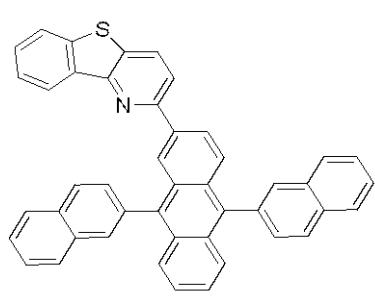
化合物 13



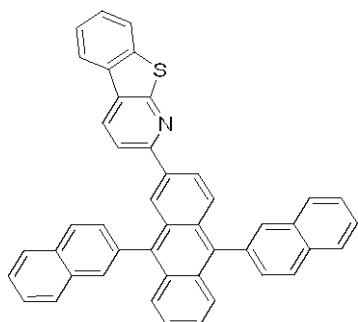
30

化合物 14

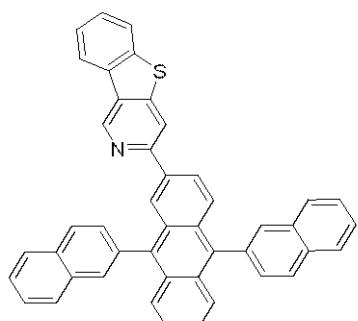
化合物 15



化合物 1 6

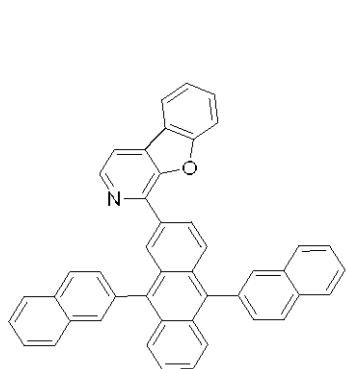


化合物 1 7

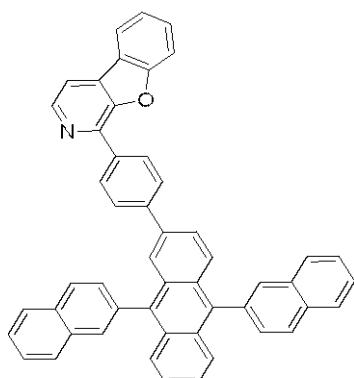


化合物 1 8

10

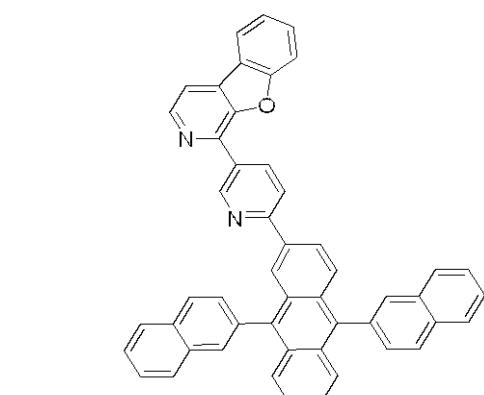


化合物 1 9



化合物 2 0

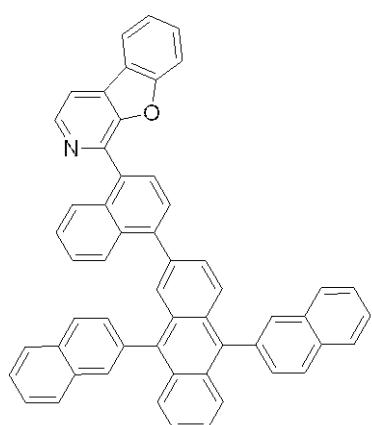
20



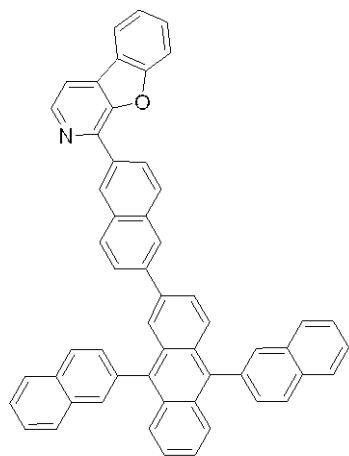
化合物 2 1

30

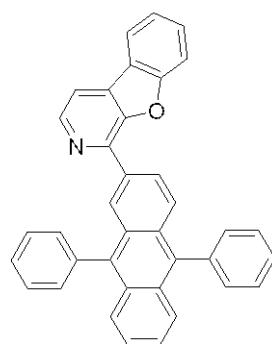
40



化合物 2 2

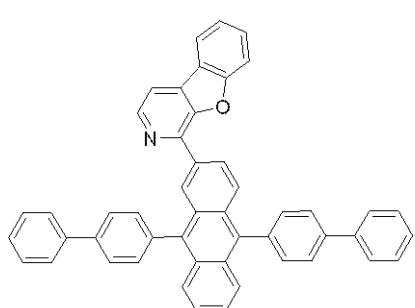


化合物 2 3

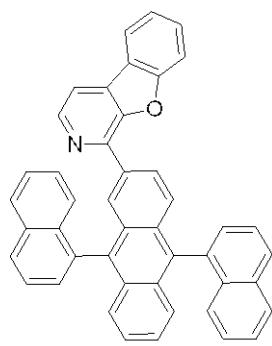


化合物 2 4

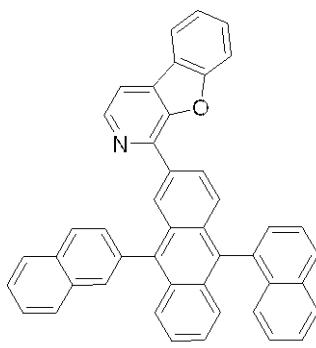
10



化合物 2 5

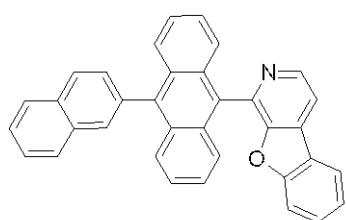


化合物 2 6

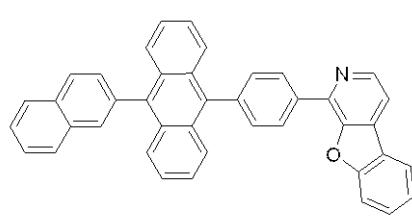


化合物 2 7

20

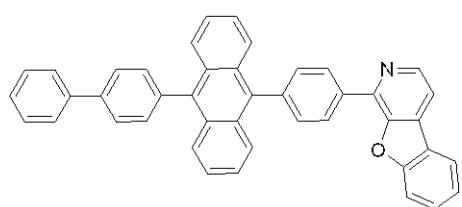


化合物 2 8

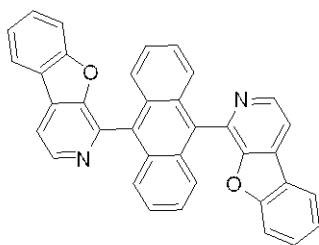


化合物 2 9

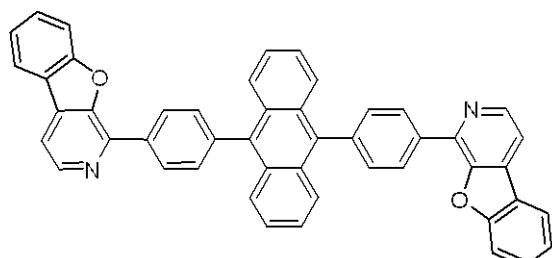
30



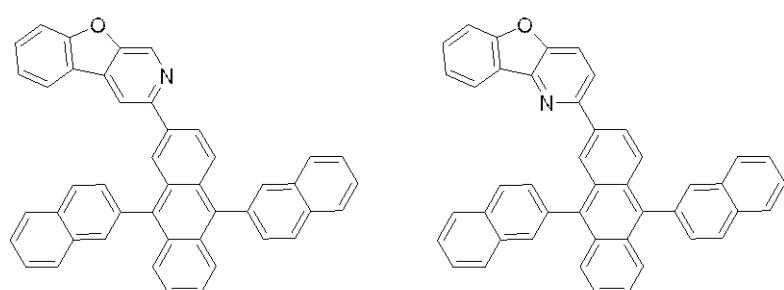
化合物 3 0



化合物 3 1

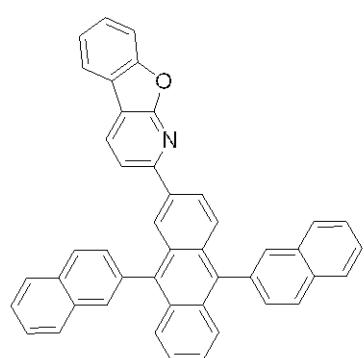


化合物 3 2



化合物 3 3

化合物 3 4



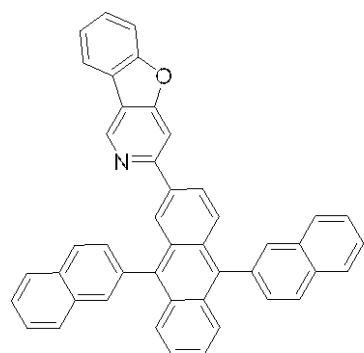
化合物 3 5

10

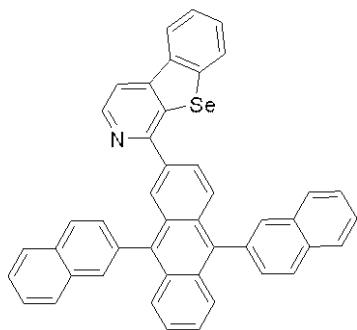
20

30

40

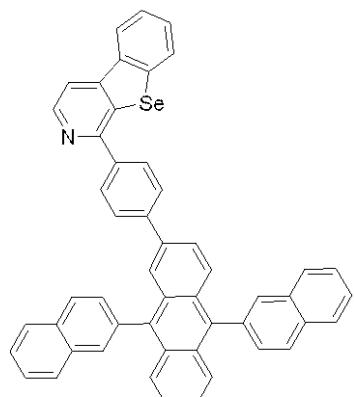


化合物 3 6



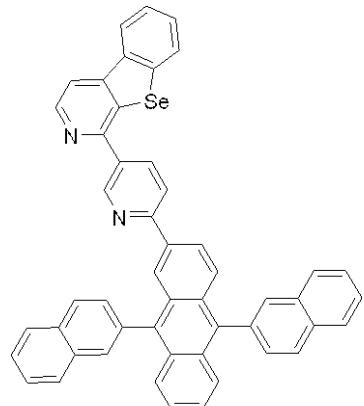
化合物 3 7

10

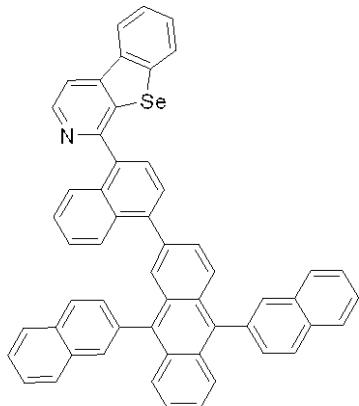


化合物 3 8

20

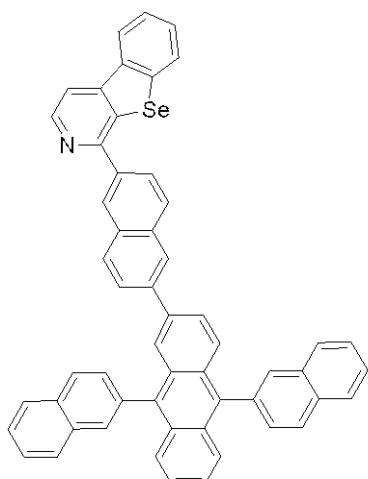


化合物 3 9



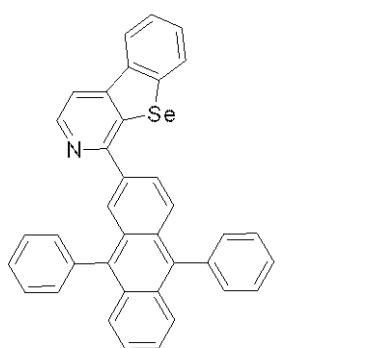
化合物 4 0

30



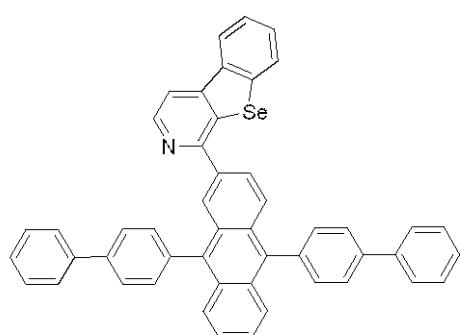
化合物 4-1

10



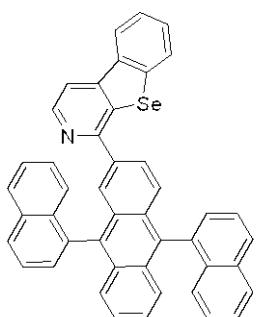
化合物 4-2

20

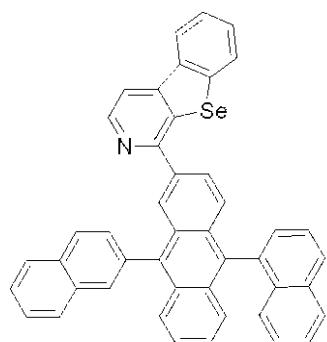


化合物 4-3

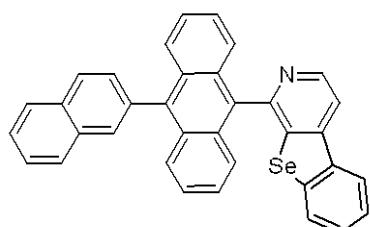
30



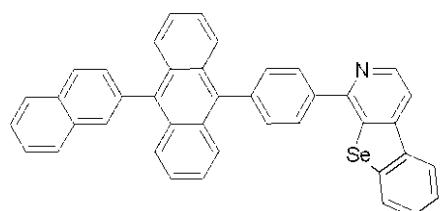
化合物 4-4



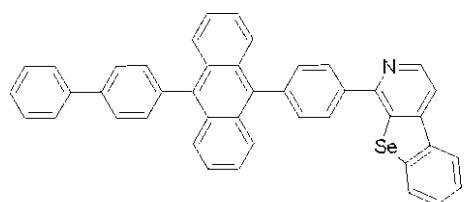
化合物 4-5



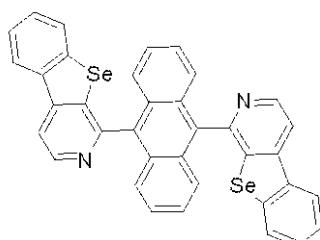
化合物 4-6



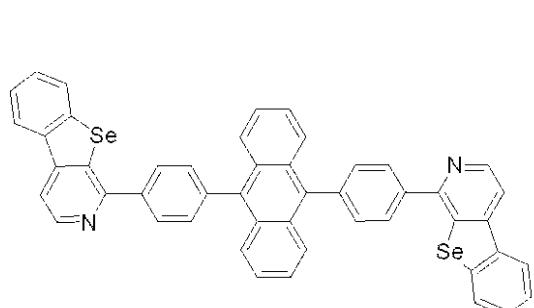
化合物 4-7



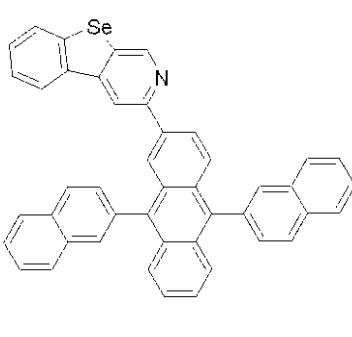
化合物 4-8



化合物 4-9



化合物 5-0

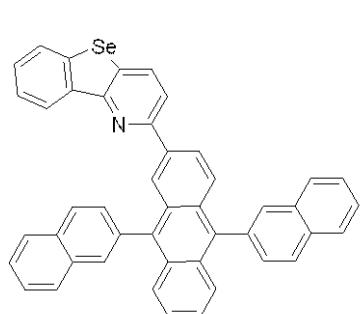


化合物 5-1

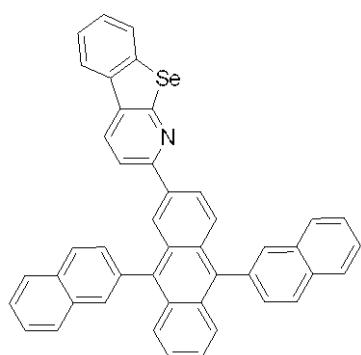
10

20

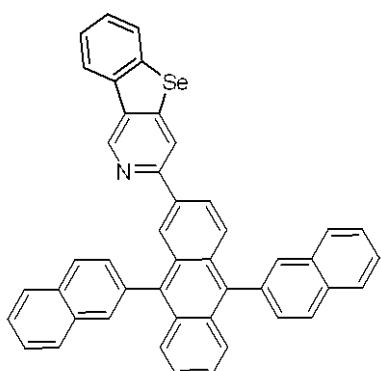
30



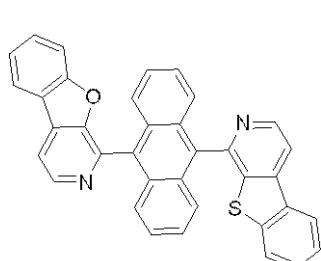
化合物 5 2



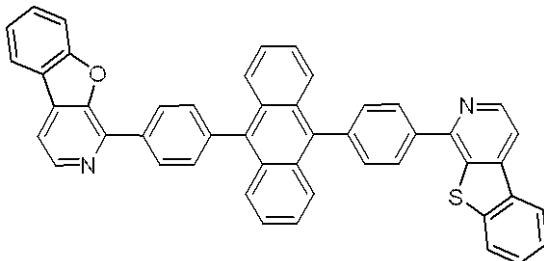
化合物 5 3



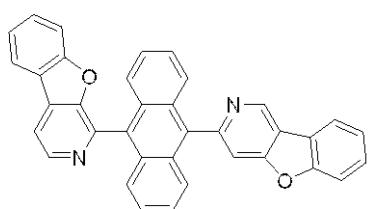
化合物 5 4



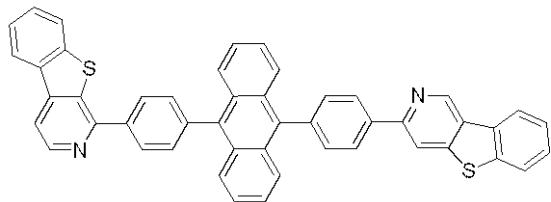
化合物 5 5



化合物 5 6



化合物 5 7



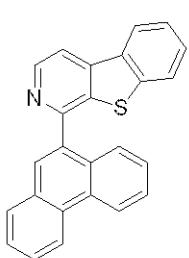
化合物 5 8

10

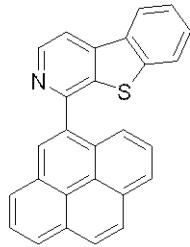
20

30

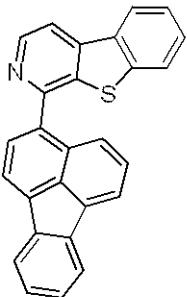
40



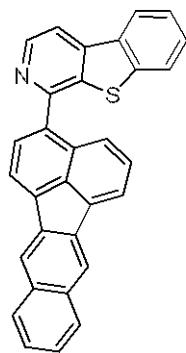
化合物 5 9



化合物 6 0

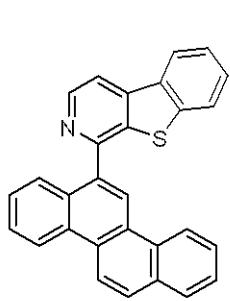


化合物 6 1

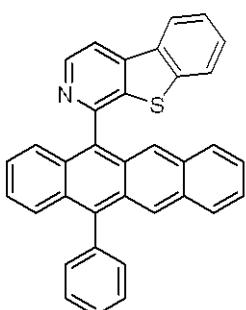


化合物 6 2

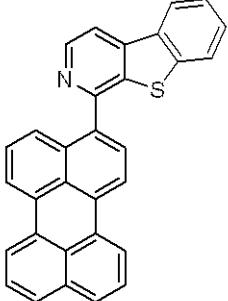
10



化合物 6 3



化合物 6 4



化合物 6 5

20

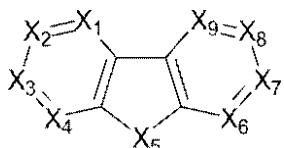
【0075】

また、有機発光デバイスを含む第一のデバイスも提供される。前記有機発光デバイスは、アノードと、カソードと、アノード及びカソードの間に配置された有機層とを含む。該有機層は、式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物を含む。

【0076】

Ar は、少なくとも 3 個のベンゼン環を有する縮合芳香族環を含み、前記縮合芳香族環は、440 nm 未満の三重項エネルギーを有する。Ar は、更に置換されていてもよい。L は、単結合又は 2 倍の連結基である。n は、少なくとも 1 である。i は、n 個の構造を L_i 及び D_i について特定する指標変数であり、L_i 及び D_i は、i の値について同一であっても異なっていてもよい。各 L_i は、独立して単結合又は 2 倍の連結基である。各 D_i は、独立して下記構造を有する。

30

【化22】**【0077】**

40

X₅ は、O、S 又は Se である。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈ 及び X₉ は、それぞれ独立して C(R) 及び N から選択される。X₁、X₂、X₃、X₄、X₆、X₇、X₈ 及び X₉ の少なくとも 1 つは、N である。R は、それぞれ独立して水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される。R は、L と結合していてもよい。

【0078】

前記式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物について上述した各種の具体的な態様を、第一のデバイスに用いる式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物にも適用することができる。特に、上述した式 Ar (L_iD_i)_n を有する化合物の Ar、L、n、i、L_i、D_i、X₁ ~ X₉、R、R'1、R'2、R₁ ~ R₆、式 I、式 II、式 III、式 IV、式 V

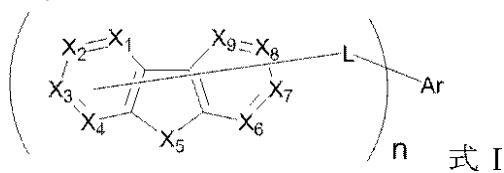
50

及び式V Iの具体的な態様が、前記第一のデバイスに用いられる式 $A r - (L_i D_i)_n$ を有する化合物にも適用することができる。

【0079】

一態様において前記化合物は、下記式を有する。

【化23】

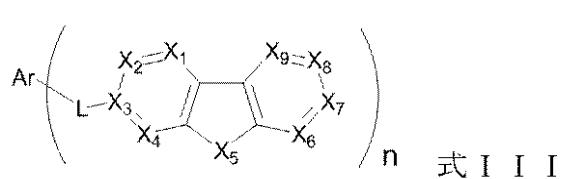
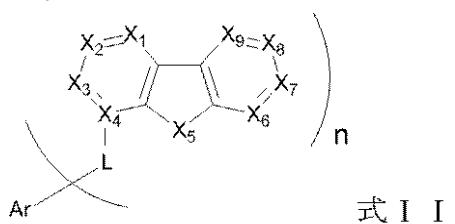


10

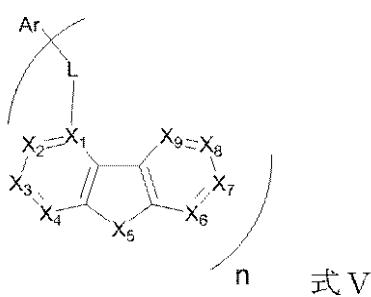
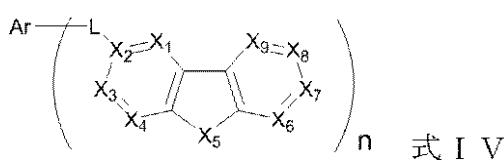
【0080】

他の態様において前記化合物は、下記式からなる群から選択される式を有する。

【化24】



20

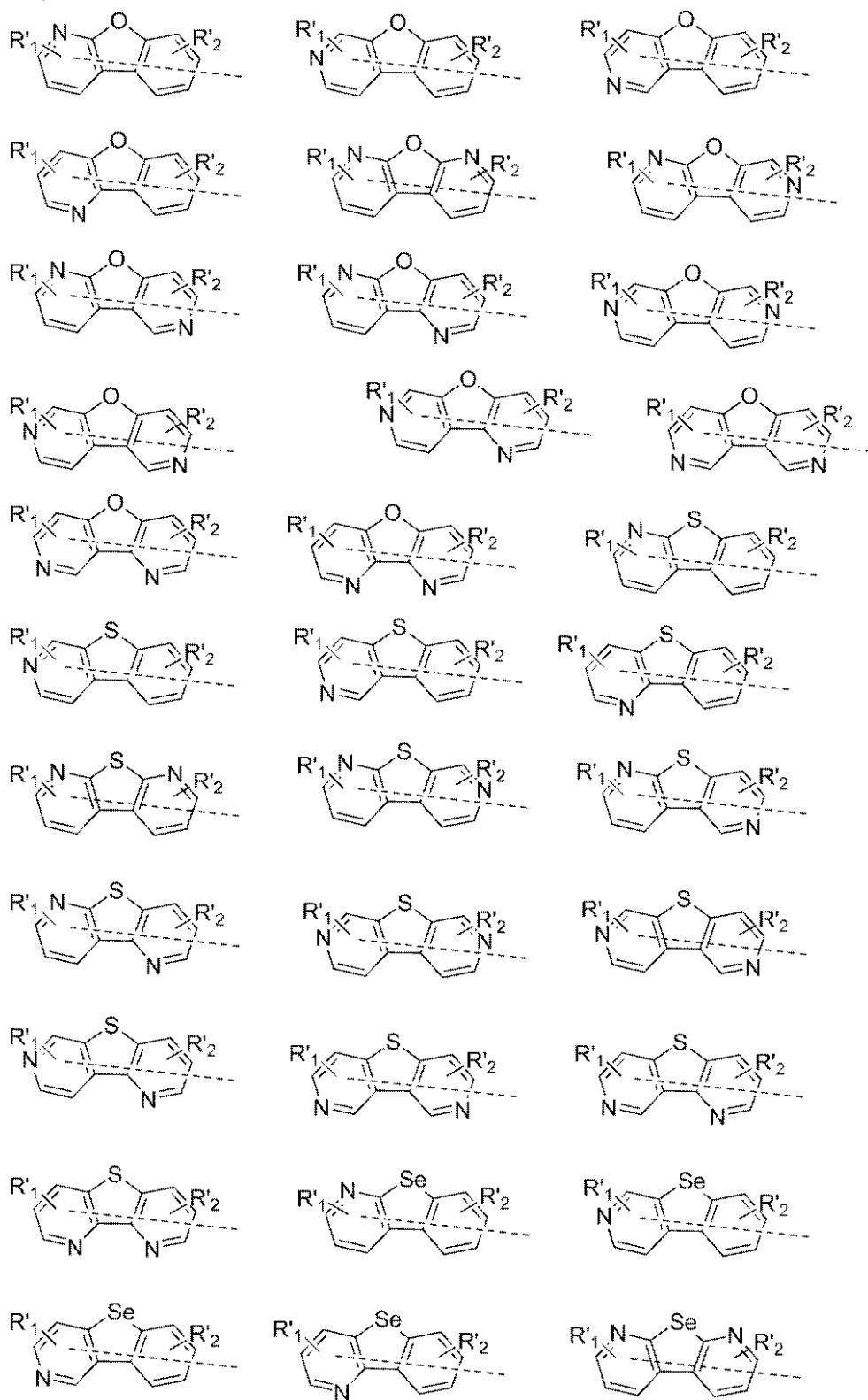


【0081】

一態様において各 D_i は、下記式からなる群から選択される。

30

【化 25】



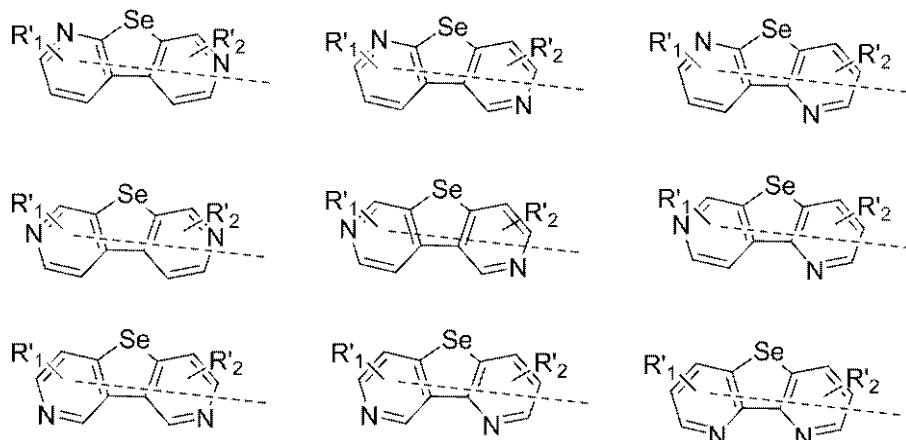
10

20

30

40

【化26】



10

【0082】

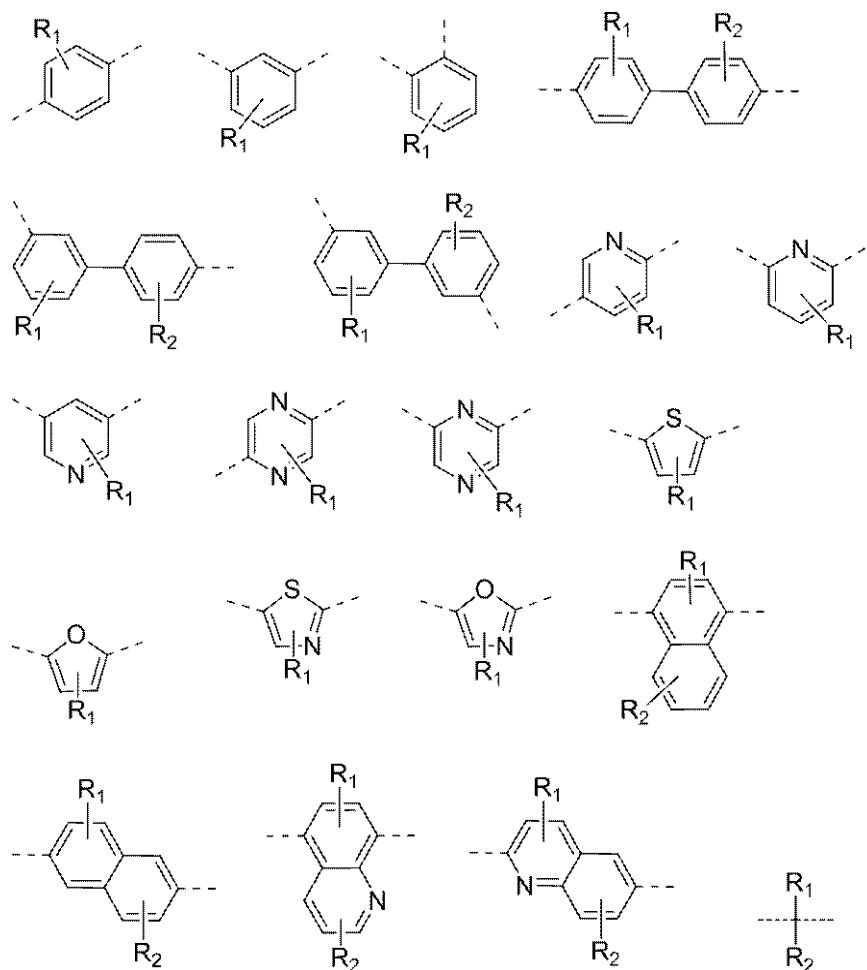
R' ₁ 及び R' ₂ は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R' ₁ 及び R' ₂ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0083】

一態様において L は、単結合である。他の態様において各 L_i は、下記式からなる群から独立して選択される。

20

【化27】



30

40

【0084】

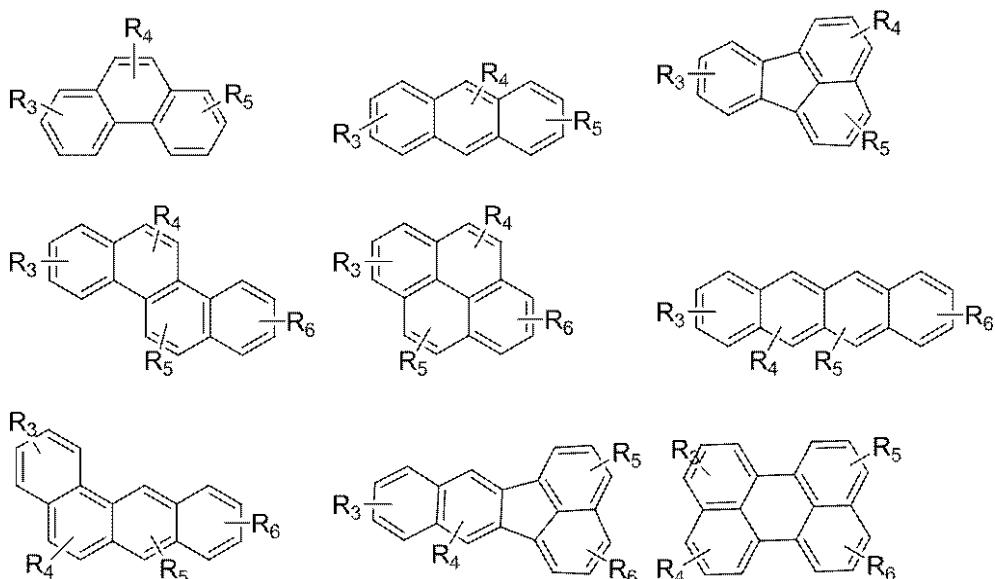
R_1 及び R_2 は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R_1 及び R_2 は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

50

【0085】

他の態様においてArは、下記式からなる群から選択される。

【化28】



【0086】

R₃、R₄、R₅及びR₆は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄、R₅及びR₆は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

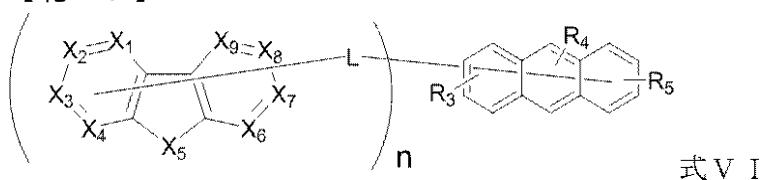
【0087】

一態様において、nは1である。他の態様において、nは1より大きく、且つ各D_iは同一の構造を有する。更に他の態様において、nは1より大きく、且つ少なくとも2つのD_iが異なる構造を有する。更に他の態様において、nは2である。

【0088】

前記化合物は、下記式を有することが好ましい。

【化29】



式V I

【0089】

R₃、R₄及びR₅は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。R₃、R₄及びR₅は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、シリル、シアノ、ハロゲン、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。

【0090】

本明細書に開示の前記化合物を含むデバイスの具体的な例を示す。一態様において、前記第一のデバイスに用いられる前記化合物は、化合物1～化合物65からなる群から選択される。

【0091】

一態様において、前記有機層は非発光層であり、前記化合物は非発光化合物である。他の態様において、前記有機層は電子輸送層であり、前記化合物は電子輸送化合物である。更に他の態様において、前記電子輸送層はn型伝導性ドーパントでドープされている。一態様において、前記n型伝導性ドーパントは、Li、Na、K、Rb又はCsを含む化合物である。好ましくは、前記n型伝導性ドーパントは、LiF、CsF、NaCl、KB_r及びLiQからなる群から選択される。

【0092】

10

20

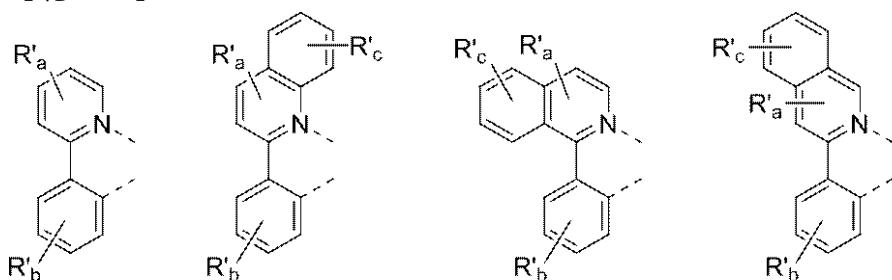
30

40

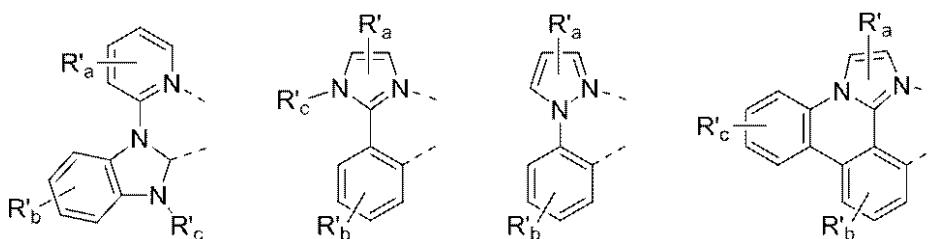
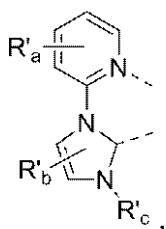
50

他の態様において、前記有機層は、下記式からなる群から選択される少なくとも1つのリガンドを有する遷移金属錯体である発光性化合物を更に含む。

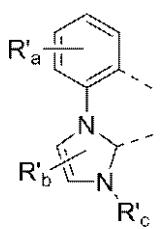
【化30】



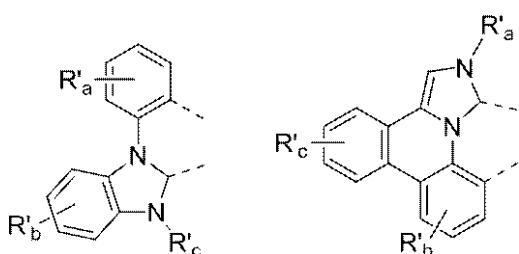
10



20



30



【0093】

R' _a、 R' _b及び R' _cはそれぞれ、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す。 R' _a、 R' _b及び R' _cはそれぞれ、水素、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択される。隣接する2つの置換基は、環を形成していてもよい。

【0094】

一態様において、前記第一のデバイスは、消費者製品である。他の態様においては、前記第一のデバイスは、有機発光デバイスである。

【0095】

他の材料との組合せ

有機発光デバイス中の特定の層に有用として本明細書において記述されている材料は、

40

50

デバイス中に存在する多種多様な他の材料と組み合わせて使用され得る。例えば、本明細書において開示されている発光性ドーパントは、多種多様なホスト、輸送層、ブロッキング層、注入層、電極、及び存在し得る他の層と併せて使用され得る。以下で記述又は参照される材料は、本明細書において開示されている化合物と組み合わせて有用となり得る材料の非限定的な例であり、当業者であれば、組み合わせて有用となり得る他の材料を特定するための文献を容易に閲覧することができる。

H I L / H T L :

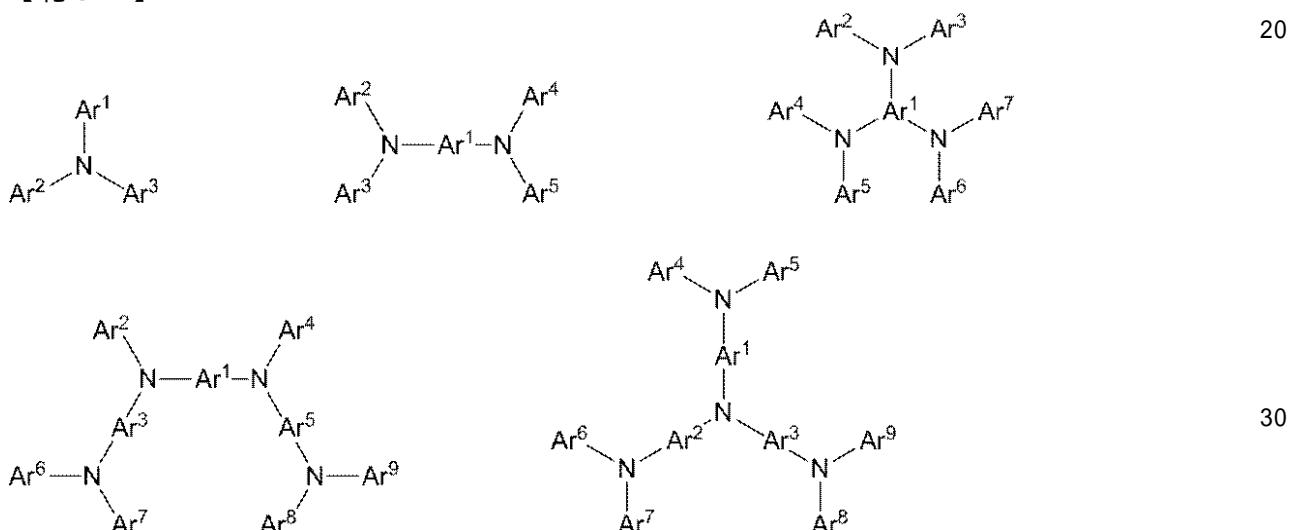
【0096】

本発明の実施形態において使用される正孔注入／輸送材料は特に限定されず、その化合物が正孔注入／輸送材料として典型的に使用されるものである限り、任意の化合物を使用してよい。材料の例は、フタロシアニン又はポルフィリン誘導体；芳香族アミン誘導体；インドロカルバゾール誘導体；フッ化炭化水素を含有するポリマー；伝導性ドーパントを持つポリマー；P E D O T / P S S 等の導電性ポリマー；ホスホン酸及びシラン誘導体等の化合物に由来する自己集合モノマー；M o O_x 等の金属酸化物誘導体；1，4，5，8，9，12-ヘキサアザトリフェニレンヘキサカルボニトリル等のp型半導体有機化合物；金属錯体、並びに架橋性化合物を含むがこれらに限定されない。

【0097】

H I L 又はH T L 中に使用される芳香族アミン誘導体の例は、下記の一般構造：

【化31】



を含むがこれらに限定されない。

【0098】

A r¹ から A r⁹ のそれぞれは、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン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、オキサトリニアゾール、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、ブテリジン、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

10

20

30

40

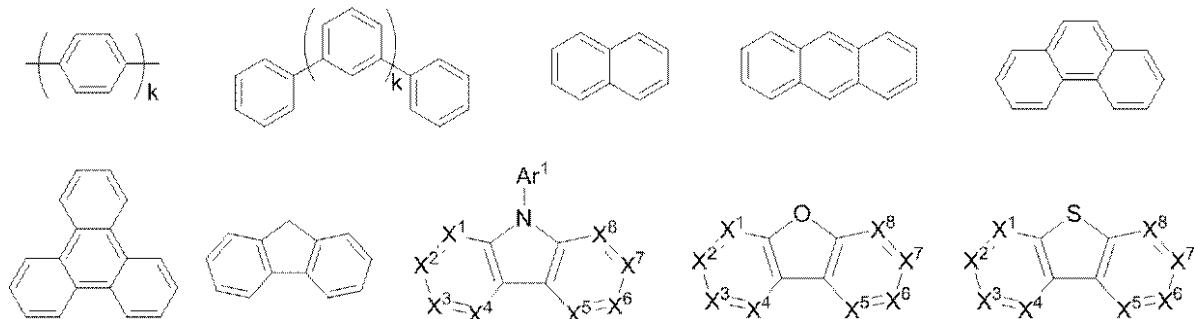
50

種類の基である 2 から 10 個の環式構造単位からなる群から選択され、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。ここで、各 Ar¹ は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される置換基によって更に置換されている。

【0099】

一態様において、Ar¹ から Ar⁹ は、

【化32】



からなる群から独立に選択される。

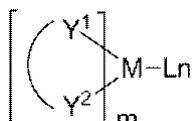
【0100】

k は 1 から 20 までの整数であり；X¹ から X⁸ は C H 又は N であり；Ar¹ は、上記で定義したものと同じ基を有する。

【0101】

HIL 又はHTL 中に使用される金属錯体の例は、下記の一般式：

【化33】



を含むがこれに限定されない。

【0102】

M は、40 より大きい原子量を有する金属であり；(Y¹ - Y²) は二座配位子であり、Y¹ 及び Y² は、C、N、O、P 及び S から独立に選択され；L は補助配位子であり；m は、1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、m + n は、金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0103】

一態様において、(Y¹ - Y²) は 2 - フェニルピリジン誘導体である。

【0104】

別の態様において、(Y¹ - Y²) はカルベン配位子である。

【0105】

別の態様において、M は、Ir、Pt、Os 及び Zn から選択される。

【0106】

更なる態様において、金属錯体は、約 0.6 V 未満のFc⁺ / Fc カップルに対して、溶液中で最小酸化電位を有する。

ホスト：

【0107】

本発明の幾つかの実施形態における有機ELデバイスの発光層は、発光材料として少なくとも金属錯体を含むことが好ましく、前記金属錯体をドーパント材料として用いるホスト材料を含んでいてもよい。前記ホスト材料の例は、特に限定されず、ホストの三重項エネルギーがドーパントのものより大きい限り、任意の金属錯体又は有機化合物を使用して

10

20

30

40

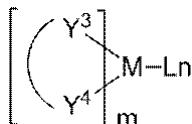
50

よい。

【0108】

ホストとして使用される金属錯体の例は、下記の一般式：

【化34】



を有することが好ましい。

【0109】

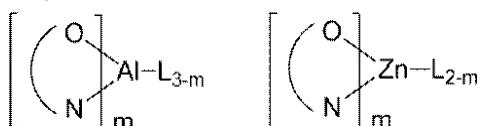
10

M は金属であり； ($Y^3 - Y^4$) は二座配位子であり、 Y^3 及び Y^4 は、 C、N、O、P 及び S から独立に選択され； L は補助配位子であり； m は、 1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値であり； 且つ、 $m + n$ は、 金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0110】

一態様において、金属錯体は、

【化35】



20

である。

【0111】

(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。

【0112】

別の態様において、 M は、 Ir 及び Pt から選択される。

【0113】

更なる態様において、 ($Y^3 - Y^4$) はカルベン配位子である。

【0114】

ホストとして使用される有機化合物の例は、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリアリフェニル、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン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、ブテリジン、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る 2 から 10 個の環式構造単位からなる群から選択され、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。ここで、各基は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から選択される置換基によって更に置換されている。

30

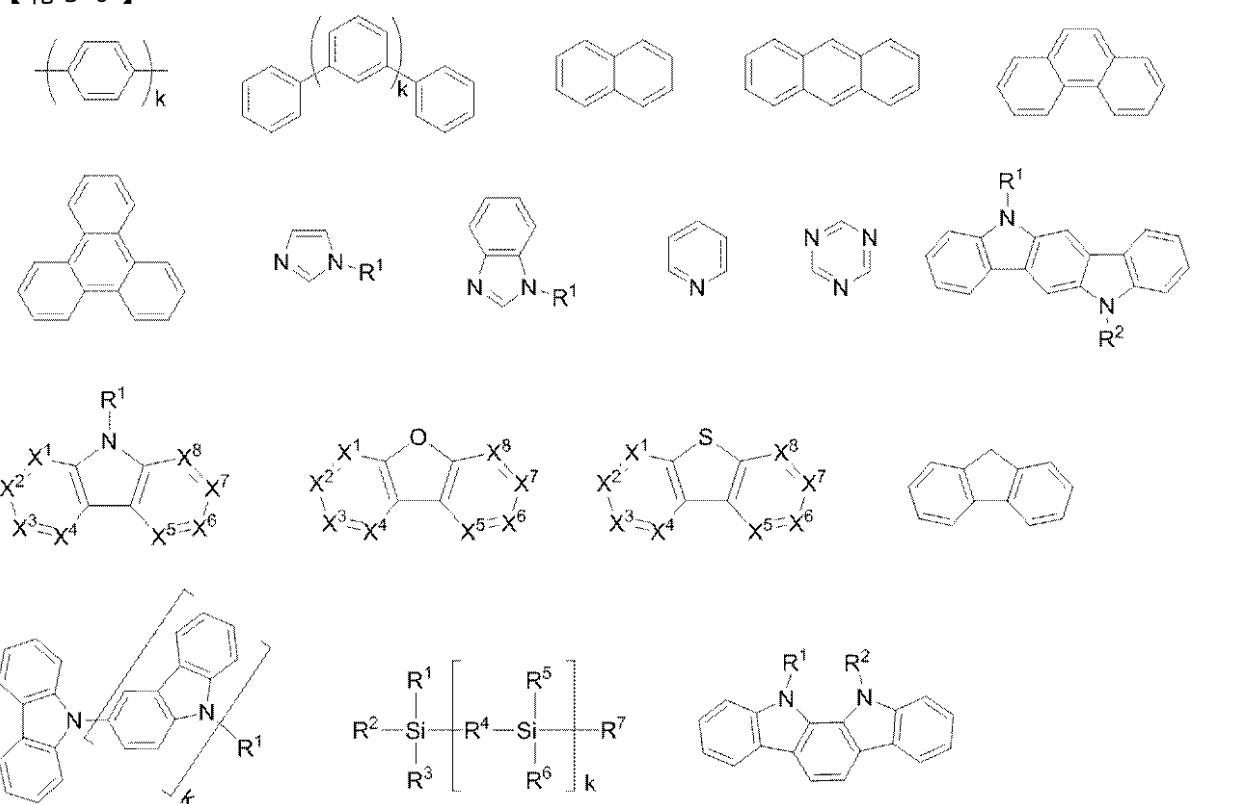
40

50

【0115】

一態様において、ホスト化合物は、分子中に下記の群：

【化36】



の少なくとも1つを含有する。

【0116】

R^1 から R^7 は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立に選択され、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。

【0117】

k は0から20までの整数である。

【0118】

X^1 から X^8 はC H又はNから選択される。

H B L :

【0119】

正孔プロッキング層(H B L)を使用して、放出層から出る正孔及び/又は励起子の数を低減させることができる。デバイスにおけるそのようなプロッキング層の存在は、プロッキング層を欠く同様のデバイスと比較して大幅に高い効率をもたらし得る。また、プロッキング層を使用して、放出をOLEDの所望の領域に制限することもできる。

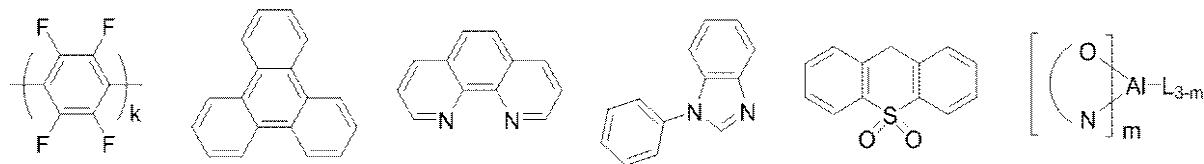
【0120】

一態様において、前記H B L中に使用される前記化合物は、上述したホストとして使用されるものと同じ分子を含有する。

【0121】

別の態様において、前記H B L中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群：

【化37】



の少なくとも1つを含有する。

【0122】

k は0から20までの整数であり； L は補助配位子であり、 m は1から3までの整数である。

10

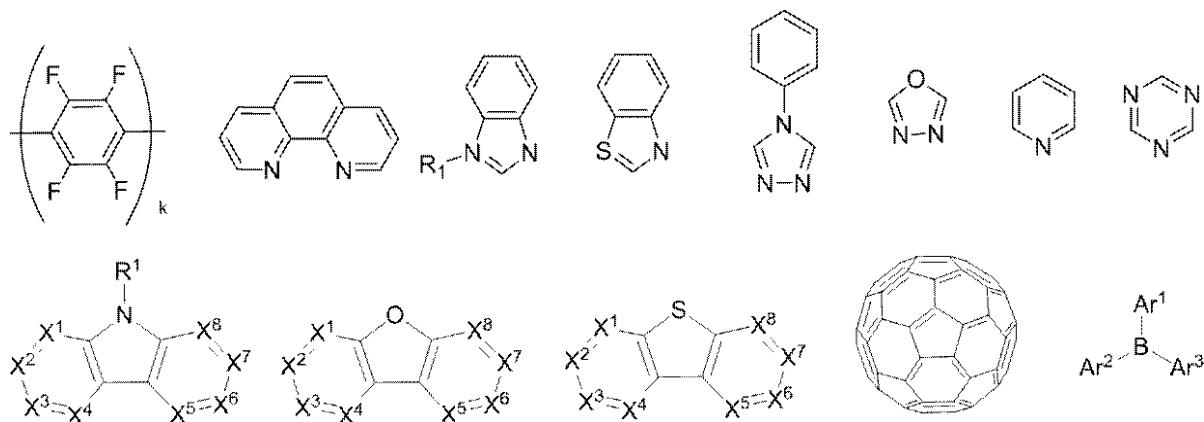
【0123】

電子輸送層（ETL）は、電子を輸送することができる材料を含み得る。電子輸送層は、真性である（ドープされていない）か、又はドープされていてよい。ドーピングを使用して、伝導性を増強することができる。ETL材料の例は特に限定されず、電子を輸送するために典型的に使用されるものである限り、任意の金属錯体又は有機化合物を使用してよい。

【0124】

一態様において、前記ETL中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群：

【化38】



の少なくとも1つを含有する。

【0125】

R^1 は、水素、重水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、ヘテロアルキル、アリール及びヘテロアリール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。

【0126】

Ar¹からAr³は、上記で言及したArのものと同様の定義を有しする。

【0127】

k は0から20までの整数である。

40

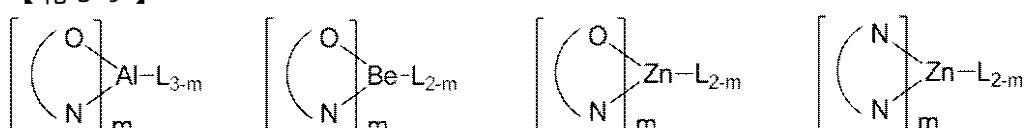
【0128】

X¹からX⁸はCH又はNから選択される。

【0129】

別の態様において、前記ETL中に使用される金属錯体は、下記の一般式：

【化39】



を含有するがこれらに限定されない。

50

【 0 1 3 0 】

(O - N) 又は (N - N) は、原子 O、N 又は N、N に配位された金属を有する二座配位子であり；L は補助配位子であり；m は、1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値である。

【 0 1 3 1 】

OLED デバイスの各層中に使用される任意の上記で言及した化合物において、水素原子は、部分的に又は完全に重水素化されていてよい。

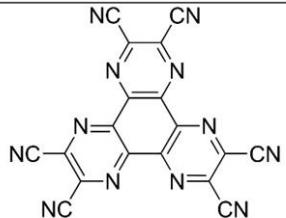
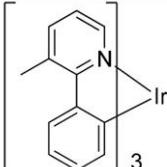
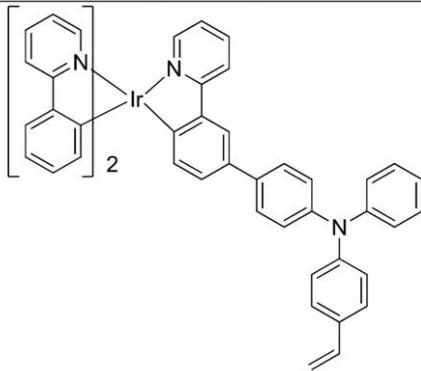
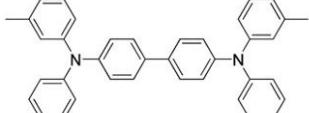
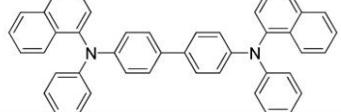
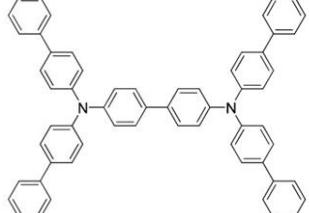
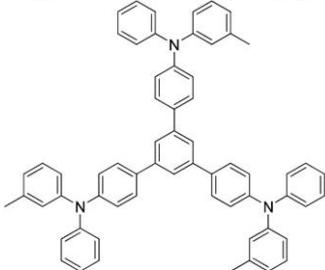
【 0 1 3 2 】

本明細書において開示されている材料に加えて且つ / 又はそれらと組み合わせて、多くの正孔注入材料、正孔輸送材料、ホスト材料、ドーパント材料、励起子 / 正孔ブロッキング層材料、電子輸送及び電子注入材料が OLED において使用され得る。OLED 中で本明細書において開示されている材料と組み合わせて使用され得る材料の非限定的な例を、以下の表 2 に収載する。表 2 は、材料の非限定的なクラス、各クラスについての化合物の非限定的な例、及び該材料を開示している参考文献を収載する。

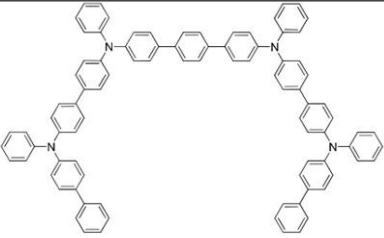
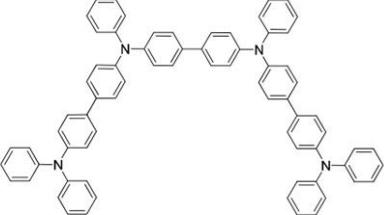
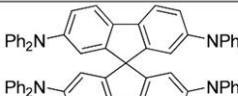
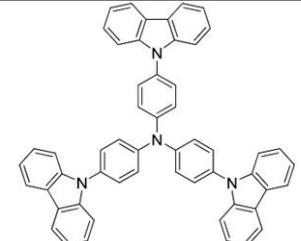
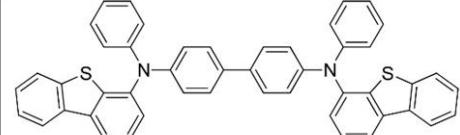
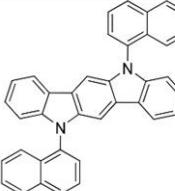
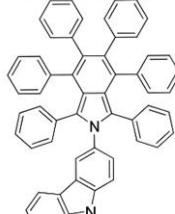
【表 2 - 1】

材料	材料の例	刊行物
正孔注入材料		
フタロシアニン及びポルフィリン化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
スターべースト型トリアリールアミン		J. Lumin. 72-74, 985 (1997) 10
C F _x フッ化炭化水素ポリマー		Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電性ポリマー（例えば、P E D O T : P S S、ポリアニリン、ポリチオフェン）		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683 20
ホスホン酸及びシランSAM		US20030162053
トリアリールアミン又はポリチオフェンポリマーと伝導性ドーパント		EA01725079A1 30
モリブデン及び酸化タンクステンなどの金属酸化物と錯形成したアリールアミン		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009 40

【表 2 - 2】

半導体有機錯体		US20020158242
金属有機金属錯体		US20060240279 10
架橋性化合物		US20080220265 20
正孔輸送材料		
トリアリールアミン (例えば、TPD、 α -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US5061569 30
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993) 40

【表 2 - 3】

		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
スピロフルオレンコア上のトリアリールアミン		Synth. Met. 91, 209 (1997)
アリールアミンカルバゾール化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
トリアリールアミンと(ジ)ベンゾチオフェン/(ジ)ベンゾフラン		US20070278938, US20080106190
インドロカルバゾール		Synth. Met. 111, 421 (2000)
イソインドール化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)

10

20

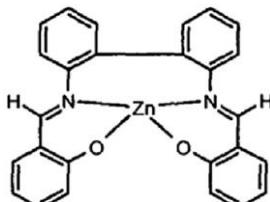
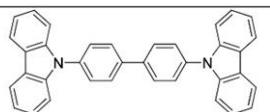
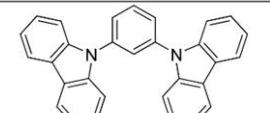
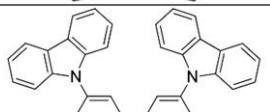
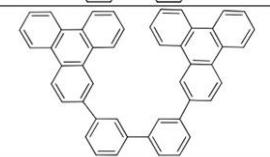
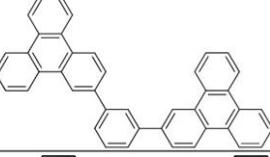
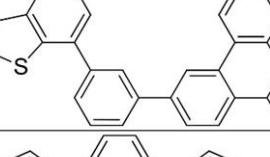
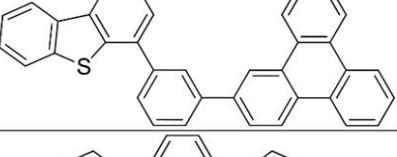
30

40

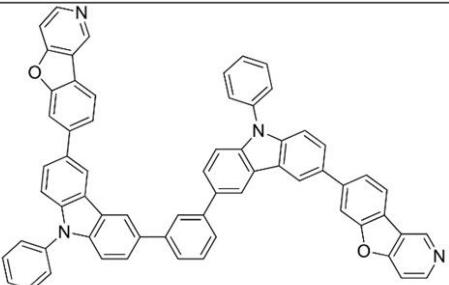
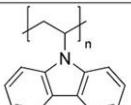
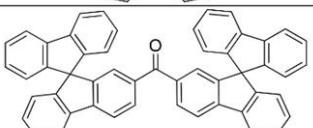
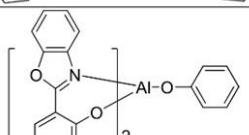
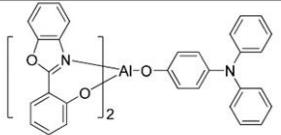
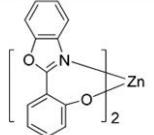
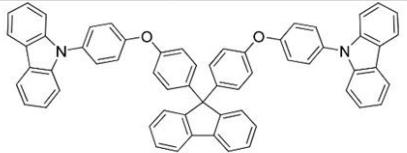
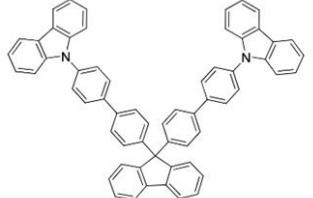
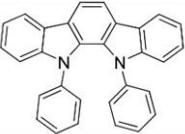
【表 2 - 4】

金属カルベン錯体		US20080018221
リン光性OLEDホスト材料		
赤色ホスト		
アリールカルバゾール		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
金属8-ヒドロキシキノレート (例えば、A ₁ q ₃ 、BA ₁ q)		Nature 395, 151 (1998) US20060202194 WO2005014551
		WO2006072002
金属フェノキシベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共役オリゴマー及びポリマー (例えば、ポリフルオレン)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
芳香族縮合環		WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US20090008605, US20090009065

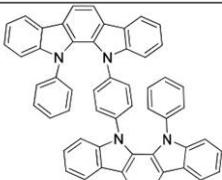
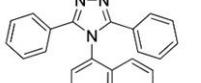
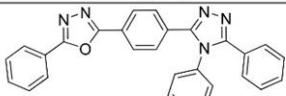
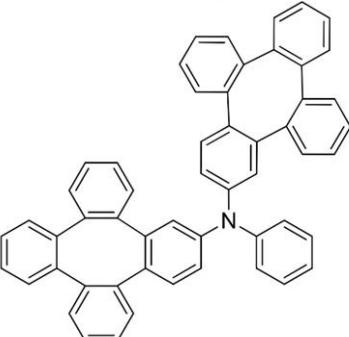
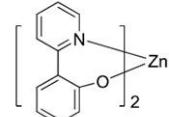
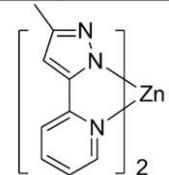
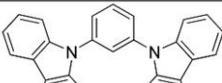
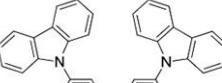
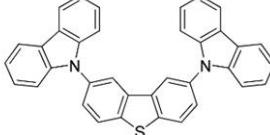
【表 2 - 5】

亜鉛錯体		WO2009062578	
緑色ホスト			
アリールカルバゾール		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)	10
		US20030175553	
		WO2001039234	
アリールトリフェニレン化合物		US20060280965	20
		US20060280965	
		WO2009021126	
ドナーアクセプター型分子		WO2008056746	30

【表 2 - 6】

アザーカルバゾール／ D B T／D B F		JP2008074939
ポリマー（例えば、P VK）		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000) 10
スピロフルオレン化合物		WO2004093207
金属フェノキシベンゾ オキサゾール化合物		WO2005089025
		WO2006132173 20
		JP200511610
スピロフルオレシーカ ルバゾール化合物		JP2007254297 30
		JP2007254297
インドロカルバゾール		WO2007063796 40

【表 2 - 7】

		WO2007063754
5員環電子欠損複素環 (例えば、トリアゾール、オキサジアゾール)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822
テトラフェニレン錯体		US20050112407
金属フェノキシピリジン化合物		WO2005030900
金属配位錯体 (例えば、Zn ⁿ⁺ 、Al ³⁺ とN ⁻ 配位子)		US20040137268, US20040137267
青色ホスト		
アリールカルバゾール		Appl. Phys. Lett., 82, 2422 (2003)
		US20070190359
ジベンゾチオフェン/ジベンゾフランーカルバゾール化合物		WO2006114966, US20090167162

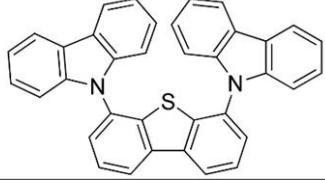
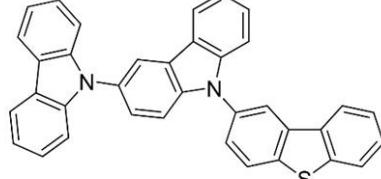
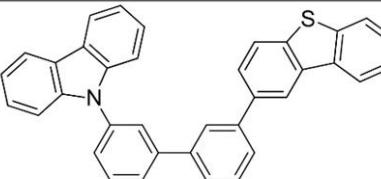
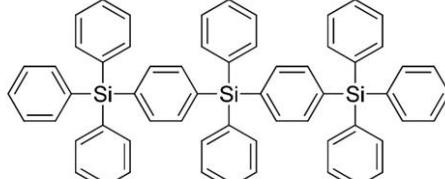
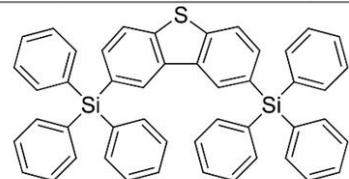
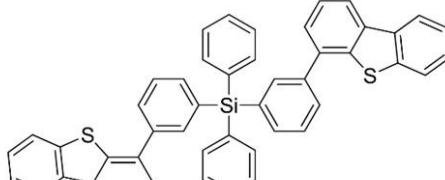
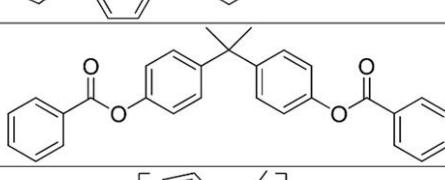
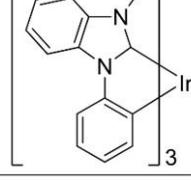
10

20

30

40

【表 2 - 8】

		US20090167162
		WO2009086028
		US20090030202, US20090017330
ケイ素アリール化合物		US20050238919
		WO2009003898
ケイ素／ゲルマニウムアリール化合物		EP2034538A
アリールベンゾイルエステル		WO2006100298
高三重項金属有機金属錯体		US7154114
リン光性ドーパント 赤色ドーパント		

【表 2 - 9】

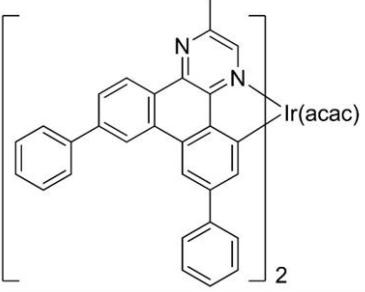
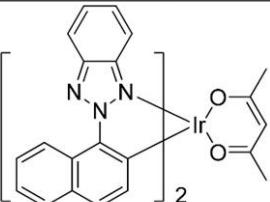
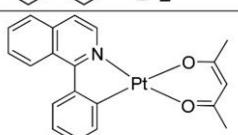
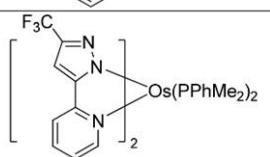
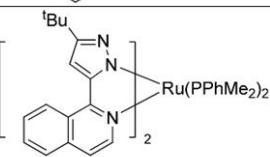
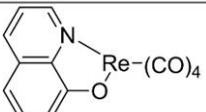
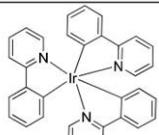
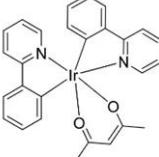
重金属ポルフィリン (例えば、PtOEP) P)		Nature 395, 151 (1998)
イリジウム (III) 有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US2006835469
		US2006835469
		US20060202194
		US20060202194
		US20070087321
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)

10

20

30

【表 2 - 10】

		WO2009100991
		WO2008101842
白金（II）有機金属錯体		WO2003040257
オスミウム（III）錯体		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
ルテニウム（II）錯体		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
レニウム（I）、（I I）及び（I I I）錯体		US20050244673
緑色ドーパント		
イリジウム（III）有機金属錯体	 及びその誘導体	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US20020034656

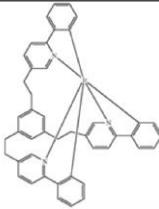
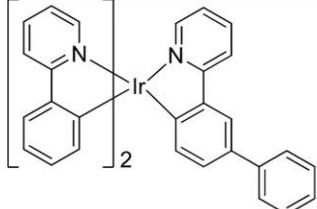
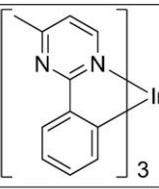
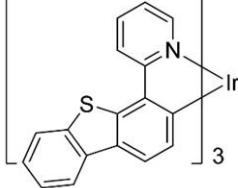
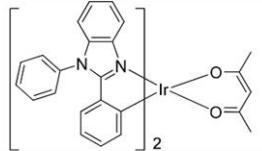
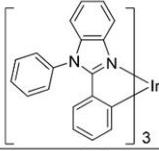
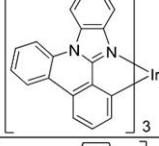
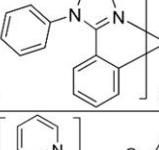
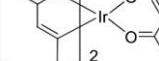
10

20

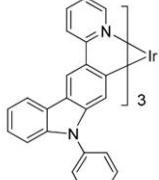
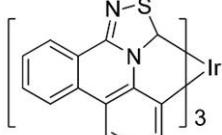
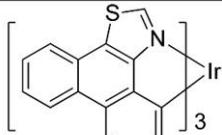
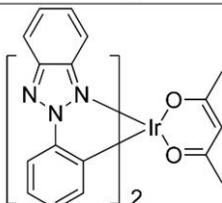
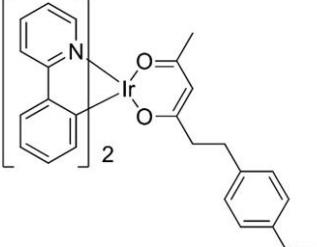
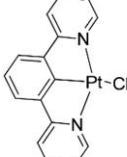
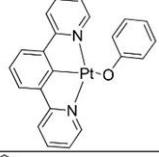
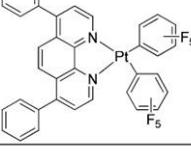
30

40

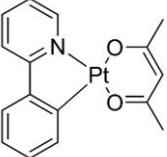
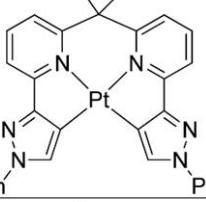
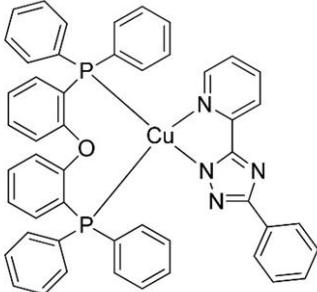
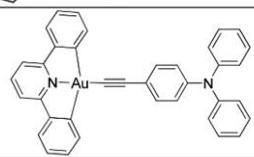
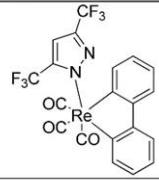
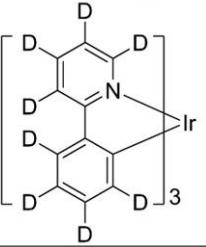
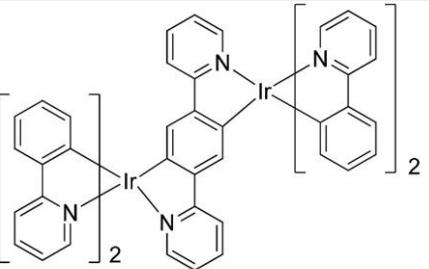
【表 2 - 11】

		US7332232
10		US20090108737
		US20090039776
20		US6921915
		US6687266
30		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
40		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)

【表 2 - 1 2】

		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355
10		
		US7250226, US7396598
20		
ポリマー金属有機金属化合物の単量体		
多座配位子を含む Pt (I I) 有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
30		
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
40		

【表 2 - 13】

		WO2002015645
		US20060263635
Cu錯体		WO2009000673
金錯体		Chem. Commun. 2906 (2005)
レニウム(III)錯体		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
重水素化有機金属錯体		US20030138657
2つ以上の金属中心を持つ有機金属錯体		US20030152802

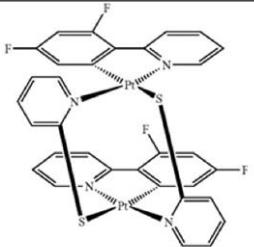
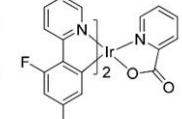
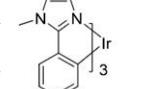
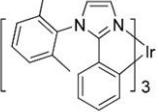
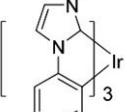
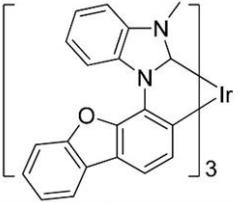
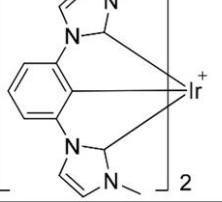
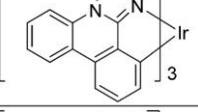
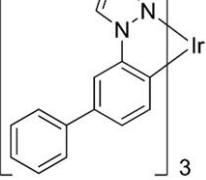
10

20

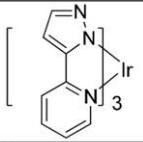
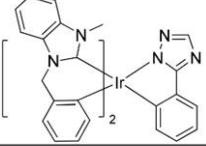
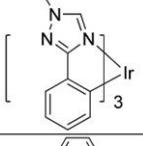
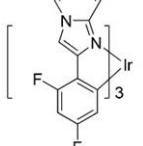
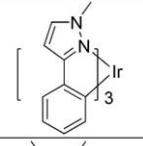
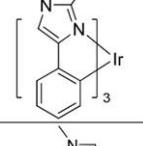
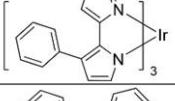
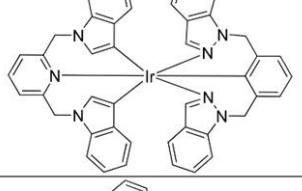
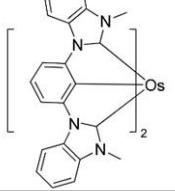
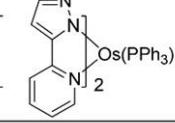
30

40

【表 2 - 14】

		US7090928
青色ドーパント		
イリジウム (III) 有機金属錯体		WO2002002714 10
		WO2006009024
		US20060251923
		US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373 20
		US7534505
		US7445855 30
		US20070190359, US20080297033
		US7338722 40

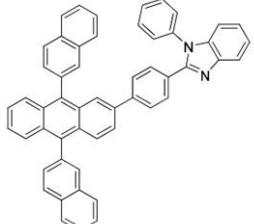
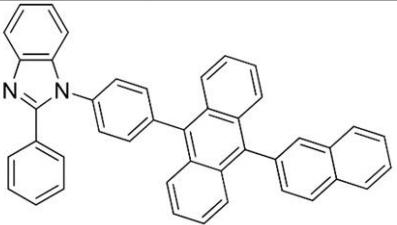
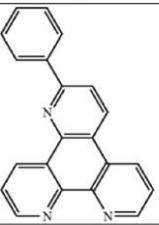
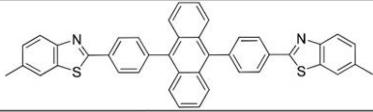
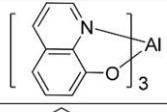
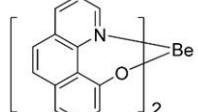
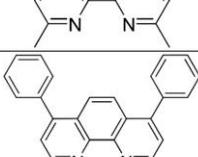
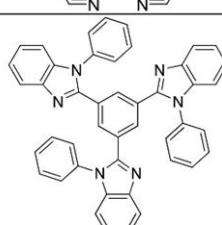
【表 2 - 15】

		US20020134984	
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)	
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)	10
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)	
		WO2005123873	20
		WO2005123873	
		WO2007004380	
		WO2006082742	30
オスミウム (II) 錯体		US7279704	
		Organometallics 23, 3745 (2004)	40

【表 2 - 1 6】

金錯体		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
白金 (I I) 錯体		WO2006098120, WO2006103874
励起子／正孔ブロッキング層材料		
バトクプロイン化合物 (例えば、B C P、B Ph en)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金属8-ヒドロキシキノレート (例えば、B A l q)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
トリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール等の5員環電子欠損複素環		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
トリフェニレン化合物		US20050025993
フッ素化芳香族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
フェノチアジン-S-オキシド		WO2008132085

【表 2 - 17】

電子輸送材料		
アントラセンーベンゾイミダゾール化合物		WO2003060956
		US20090179554
アザトリフェニレン誘導体		US20090115316
アントラセンーベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金属8-ヒドロキシキノレート(例えば、Al ₁ q ₃ 、Zr ₁ q ₄)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
金属ヒドロキシベノキノレート		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
B C P、B Ph en等のバトクプロイン化合物		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環電子欠損複素環(例えば、トリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)

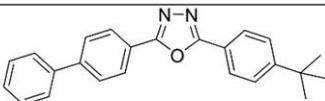
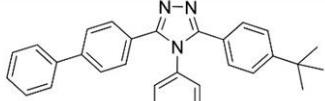
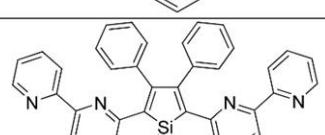
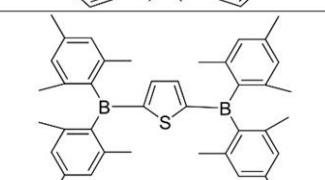
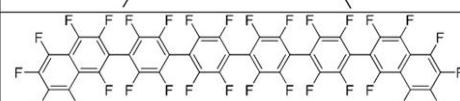
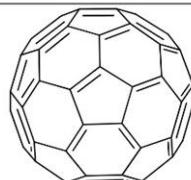
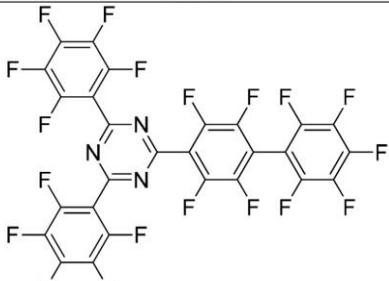
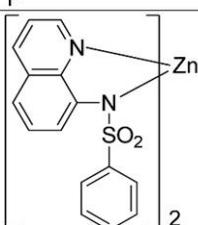
10

20

30

40

【表 2 - 18】

		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Appl. Phys. 32, L917 (1993)
シロール化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
アリールボラン化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
フッ素化芳香族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
フラーレン (例えば、C ₆₀)		US20090101870
トリアジン錯体		US20040036077
Zn (N ⁺ N) 錯体		US6528187

【実施例】

【0133】

化合物例

実施例 1 化合物 1 の合成

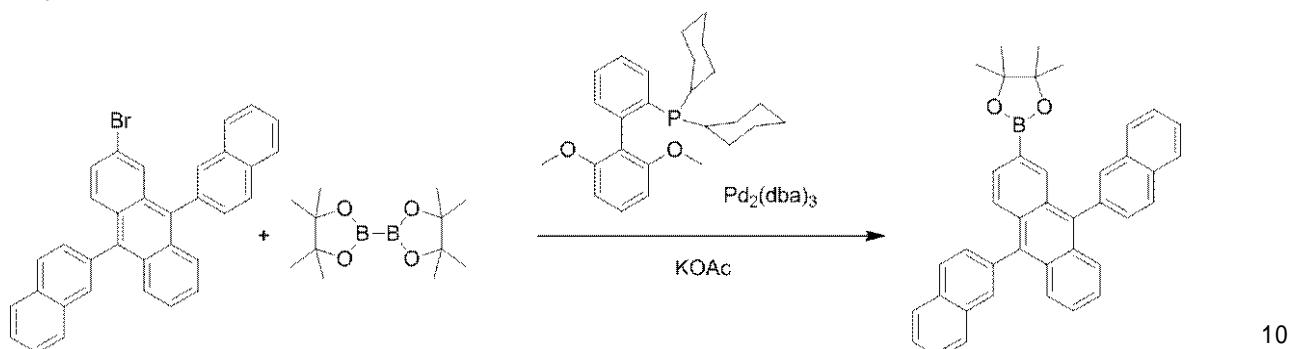
10

20

30

40

【化40】

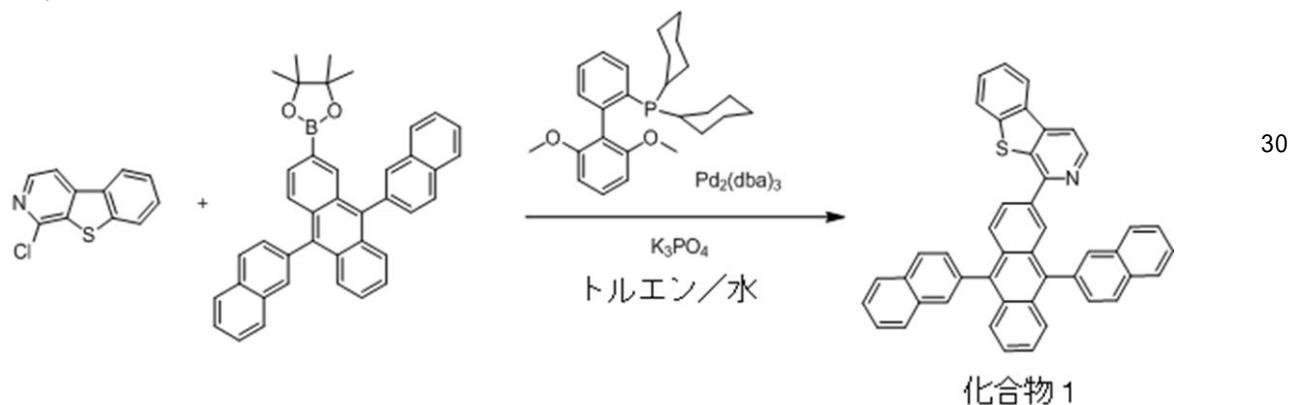


【0134】

2-(9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン-2-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロランの合成

2-ブロモ-9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン(4.75g, 9.32mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-オクタメチル-2,2'-ビ(1,3,2-ジオキサボロラン)(3.08g, 12.12mmol)、酢酸カリウム(1.830g, 18.65mmol)及びジシクロヘキシリル(2',6'-ジメトキシ-[1,1'-ビフェニル]-2-イル)ホスфин(0.153g, 0.373mmol)を、ジオキサン400mLで混合した。混合物を20分間窒素バブルした。Pd₂(dba)₃(0.085g, 0.093mmol)を添加した。反応物を一晩90℃に加熱した。反応を停止させ、セライトろ過した。溶媒を蒸発させ、セライトに塗布し、カラムに10%酢酸エチルとヘキサンを流した。次いで、固体を100mLのエタノールで再結晶した。黄色固体である2-(9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン-2-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン(3.8g, 6.83mmol, 73.2%収率)をろ過により回収した。

【化41】



【0135】

化合物1の合成

トルエン200mLとH₂O20mL中の、1-クロロベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]ピリジン(2.4g, 10.93mmol)、2-(9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン-2-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン(3.8g, 6.83mmol)及びリン酸カリウム(3.62g, 17.07mmol)の混合物を20分間N₂バブルした。次いで、Pd₂(dba)₃(0.125g, 0.137mmol)とジシクロヘキシリル(2',6'-ジメトキシ-[1,1'-ビフェニル]-2-イル)ホスфин(0.224g, 0.546mmol)を添加し、混合物をN₂雰囲気下で6時間加熱還流した。混合物を冷却し、固体をろ過により回収した。固体を水、メタノール、及びアセトンで洗浄した後、乾燥させた。3gの固体が得られた。固体をトルエン300mLで窒素雰囲気下にて一晩還流した。室温に冷却後、固体をろ過により回収した。この手順を、新たにトルエン300mLを用いて繰り

40

50

返した。固体を回収し真空中で乾燥した。1-(9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン-2-イル)ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]ピリジン(3g, 4.89mmol, 71.6%収率)を得た。

デバイス実施例

【0136】

デバイス実施例はいずれも、高真空($<10^{-7}$ トール)熱蒸発によって製作した。アノード電極は800のインジウムスズ酸化物(ITO)である。カソードは、10のLiF、続いて1,000のAlからなるものであった。デバイスはいずれも、製作直後に、窒素グローブボックス($<1\text{ ppm}$ のH₂O及びO₂)中、エポキシ樹脂で密閉したガラスの蓋でカプセル化されており、水分ゲッターをパッケージの内側に組み込んだ。

10

【0137】

デバイス実施例の有機積層は、下記の構造を順次有する：ITO表面から、正孔注入層(HIL)としての100の化合物A、正孔輸送層(HTL)としての300の4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(-NPD)、放出層(EML)としての300の化合物Aをドープしたホスト1、ブロックング層(BL)としての50のホスト1、及び電子輸送層(ETL)としての450の化合物1又はLiQをドープした化合物1。

【0138】

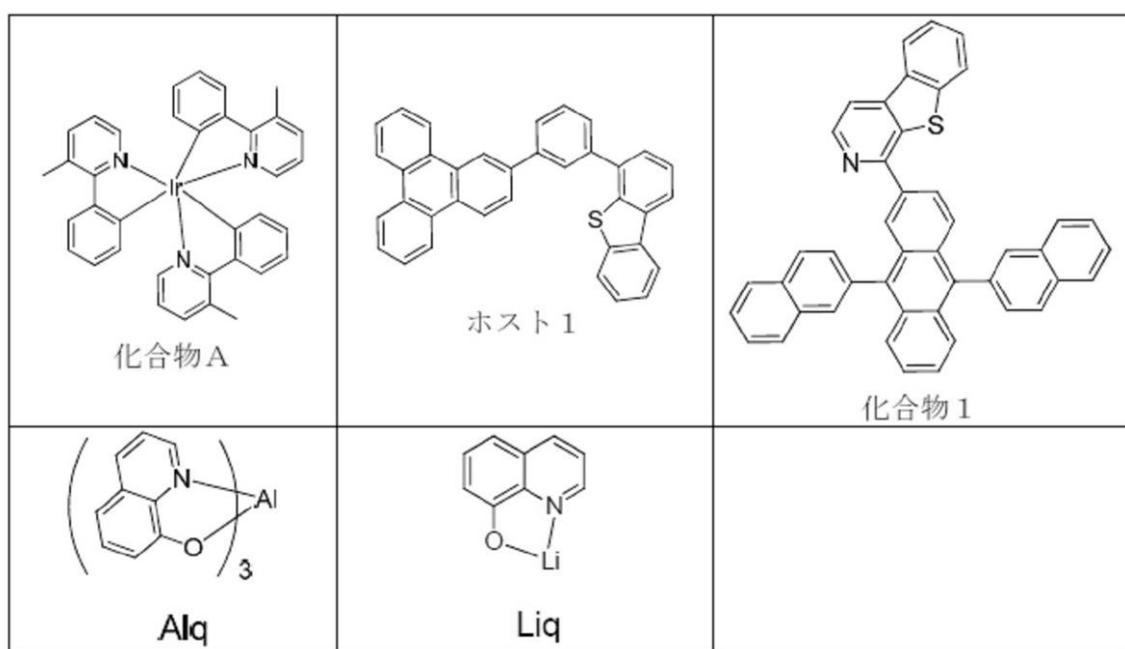
AlqをETLとして用いたこと以外は前記デバイス実施例と同様にして、比較デバイス例を製作した。

20

【0139】

本明細書に使用される下記化合物は、下記の構造を有する。

【化42】



30

【0140】

OLEDのETLのための特定の化合物が提供される。これらの化合物は、特に良好な性能を有するデバイスとすることができます。デバイスの構造を表3に示し、対応するデバイスデータを表4に示す。

40

【表3】

VTE PHOLED

実施例	H I L	H T L	E M L (ドーピング%)	B L	E T L
実施例 1	化合物A	N P D	ホスト1	化合物A 10%	ホスト1
実施例 2	化合物A	N P D	ホスト1	化合物A 10%	ホスト1 化合物1 : L i Q (1 : 1)
比較例 1	化合物A	N P D	ホスト1	化合物A 10%	ホスト1 A l q

10

【表4】

VTEデバイスデータ

実施例	1931 CIE			1000 ニト (nits)				40 mA/cm ²	
	x	y	λ_{\max}	V (V)	LE (Cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	L_0 (ニト)	LT _{50%} (h)
実施例 1	0.35	0.60	528	7.8	41.5	11.4	16.6	13,566	217
実施例 2	0.34	0.61	528	6.2	45.2	12.4	22.8	15,853	224
比較例 1	0.35	0.60	528	8.1	45.6	12.5	17.7	15,780	221

【0141】

デバイス実施例1及び2は、化合物1又はL i Qをドープした化合物1をE T Lとする緑色P H O L E Dである。比較例1は、A l qをE T Lとして用いた。これらの表から分かるように、それぞれ化合物1又はL i Qをドープした化合物1をE T Lとするデバイス実施例1及び2は、A l qをE T Lとする比較デバイス例1に比べて同様の効率とデバイス寿命を示した。しかしながら、デバイス実施例1のデバイス作動電圧は、比較例1の作動電圧よりも低かった（即ち、8.1Vに対して7.8V）。デバイス実施例2の作動電圧は更により低く6.2Vであった。そのため、本発明化合物をE T Lとして含むデバイスは、良好な寿命と効率を維持し且つ低デバイス電圧を有することができる。

20

【0142】

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

【先行技術文献】

【特許文献】

【0143】

【特許文献1】米国特許第5,844,363号明細書

【特許文献2】米国特許第6,303,238号明細書

【特許文献3】米国特許第5,707,745号明細書

【特許文献4】米国特許第7,279,704号明細書

40

【符号の説明】

【0144】

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

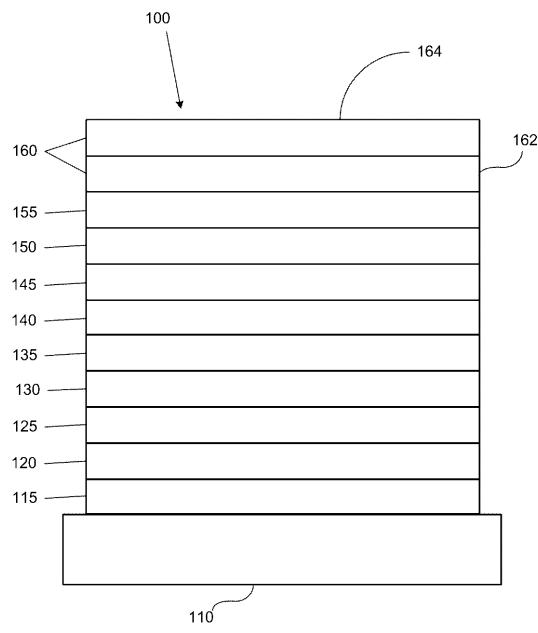
130 電子ブロッキング層

50

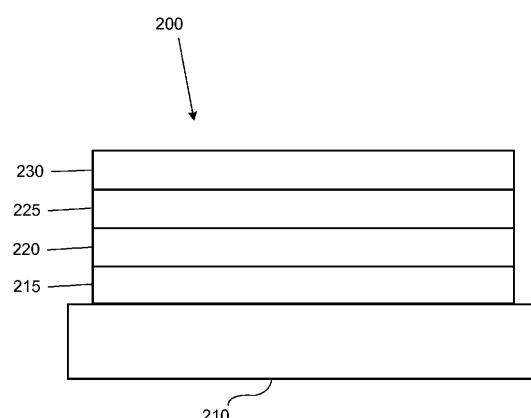
- 1 3 5 放出層
 1 4 0 正孔ブロッキング層
 1 4 5 電子輸送層
 1 5 0 電子注入層
 1 5 5 保護層
 1 6 0 カソード
 1 7 0 障壁層
 1 6 2 第一の導電層
 1 6 4 第二の導電層
 2 0 0 反転させたOLED、デバイス
 2 1 0 基板
 2 1 5 カソード
 2 2 0 放出層
 2 2 5 正孔輸送層
 2 3 0 アノード

10

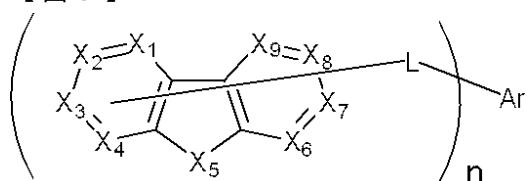
【図1】



【図2】



【図3】



フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
C 0 7 D 517/04 (2006.01) C 0 7 D 519/00
C 0 7 D 517/04

(72)発明者 チュアンジュン・シャ
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 シッダールタ・ハリクリシュナ - モハン
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 ヴァディム・アダモヴィチ
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

審査官 うし 田 真悟

(56)参考文献 国際公開第2009/086028 (WO, A2)
国際公開第2010/083359 (WO, A1)
特開2008-074939 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0
H 0 5 B 3 3 / 0 0 - 3 3 / 2 8
C 0 7 D 4 9 1 / 0 4 8
C 0 7 D 4 9 5 / 0 4
C 0 7 D 5 1 7 / 0 4
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)

专利名称(译)	电子输送化合物		
公开(公告)号	JP6496392B2	公开(公告)日	2019-04-03
申请号	JP2017240412	申请日	2017-12-15
[标]申请(专利权)人(译)	环球展览公司		
申请(专利权)人(译)	通用显示器公司		
当前申请(专利权)人(译)	通用显示器公司		
[标]发明人	チュアンジュンシャ シッダールタハリクリシュナモハン ヴァディムアダモヴィチ		
发明人	チュアンジュン・シャ シッダールタ・ハリクリシュナ・モハン ヴァディム・アダモヴィチ		
IPC分类号	H01L51/50 C07D495/04 C09K11/06 C07D491/048 C07D519/00 C07D517/04		
CPC分类号	C07D495/04 C07D491/04 C07D517/04 H01L51/0058 H01L51/5072		
F1分类号	H05B33/22.B C07D495/04.105.A C09K11/06.690 H05B33/14.B C07D491/048 C07D519/00 C07D517/04		
F-Term分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB03 3K107/BB06 3K107/BB08 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD74 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/DD80 3K107/DD84 3K107/FF20 4C050/AA01 4C050/AA07 4C050/BB07 4C050/CC16 4C050/EE01 4C050/FF05 4C050/GG01 4C050/HH01 4C050/HH04 4C071/AA01 4C071/AA07 4C071/BB01 4C071/BB05 4C071/CC01 4C071/CC21 4C071/DD13 4C071/EE13 4C071/FF06 4C071/GG01 4C071/JJ01 4C071/KK11 4C071/LL05 4C072/MM06 4C072/UU05		
代理人(译)	广田幸一		
优先权	13/012425 2011-01-24 US		
其他公开文献	JP2018088526A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供一种电子传输材料，其可以保持良好的寿命和效率并且具有低的器件电压。一种具有式Ar (LiDi) n的电子传输材料。(其中，Ar具有至少3个苯环，并且包括具有小于440nm的三重态能量的稠合芳环，L是连接基团，并且D1或D2具有以下结构。但是，X5是O或Se。【选择图表】无

(19)日本国特許庁(JP)	(12)特許公報(B2)	(11)特許番号 特許第6496392号 (P6496392)
(45)発行日 平成31年4月3日(2019.4.3)	F I	(24)登録日 平成31年3月15日(2019.3.15)
(51)Int.Cl.		
<i>H01L 51/50 (2006.01)</i>	<i>H05B 33/22</i>	<i>B</i>
<i>C07D 495/04 (2006.01)</i>	<i>C07D 495/04</i>	<i>105A</i>
<i>C09K 11/06 (2006.01)</i>	<i>C09K 11/06</i>	<i>690</i>
<i>C07D 491/048 (2006.01)</i>	<i>H05B 33/14</i>	
<i>C07D 519/00 (2006.01)</i>	<i>C07D 491/048</i>	
		請求項の数 15 (全 87 頁) 最終頁に続く
(21)出願番号 特願2017-240412 (P2017-240412)	(73)特許権者 503055897	
(22)出願日 平成29年12月15日 (2017.12.15)	ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション	
(23)分割の表示 特願2016-124364 (P2016-124364)	アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユーリング、フィリップス ブルバード	
の分割	375	
(24)出願日 平成24年1月20日 (2012.1.20)	(74)代理人 100107515	
(25)公開番号 特開2018-88526 (P2018-88526A)	弁理士 廣田 浩一	
(26)公開日 平成30年6月7日 (2018.6.7)	(74)代理人 100107733	
(27)審査請求日 平成29年12月15日 (2017.12.15)	弁理士 流 良広	
(31)優先権主張番号 13/012,425	(74)代理人 100115347	
(32)優先日 平成23年1月24日 (2011.1.24)	弁理士 松田 京緒子	
(33)優先権主張国 米国 (US)		
		最終頁に続く
(54)【発明の名称】電子輸送化合物		